

Übungsblatt 11

11.1 Zustandsdichte (30 Punkte)

Wir betrachten eine lineare Kette mit periodischen Randbedingungen für N identische Atome als Modellsystem für einen eindimensionalen Kristall.
Als Dispersionsrelation bekommt man in diesem Fall

$$\omega(k) = \tilde{\omega} \cdot \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \quad \text{mit} \quad 0 \leq k \leq \frac{\pi}{a} \quad \text{und} \quad \tilde{\omega} = 2\sqrt{C/M}$$
$$\Rightarrow \left(\frac{\omega}{\tilde{\omega}}\right)^2 = 1 - \cos^2\left(\frac{ka}{2}\right) \quad \Rightarrow \quad \cos\left(\frac{ka}{2}\right) = \sqrt{1 - \left(\frac{\omega}{\tilde{\omega}}\right)^2}$$

D.h. als Gruppengeschwindigkeit v_g erhält man

$$\Rightarrow v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{a}{2} \tilde{\omega} \cos\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{a}{2} \tilde{\omega} \sqrt{1 - \left(\frac{\omega}{\tilde{\omega}}\right)^2}$$

- Berechnen Sie die Phononenzustandsdichte $D(\omega)$ der longitudinalen Phononen, wobei Sie nur Nächste-Nachbar-Wechselwirkung zu berücksichtigen haben.
- Berechnen Sie $D(\omega)$ der linearen Kette (siehe oben) in der Debyeschen Näherung und berechnen Sie die Debye-Frequenz ω_D .
- Berechnen Sie (in der Debyeschen Näherung) die innere Energie $U(T)$ und die molare Wärmekapazität $C(T)$ für den Grenzfall $T \rightarrow \infty$.

11.2 Spezifische Wärme (20 Punkte)

Wir möchten für Kalium den phononischen und den elektronischen Beitrag zur spezifischen Wärme vergleichen.

Der elektronische Beitrag zur spezifischen Wärme lässt sich ausdrücken durch

$$c_V^{\text{el}} = \frac{\pi^2}{3} \frac{T}{T_F} \frac{3nk_B}{2}$$

Dabei steht n für die Elektronendichte (N/V), T für die Temperatur und T_F für die *Fermi-Temperatur*, die über $k_B T_F = E_F$ mit der *Fermi-Energie* verknüpft ist.

Wie gross ist das Verhältnis der beiden Beiträge bei Raumtemperatur?

Unterhalb welcher Temperatur überwiegt der elektronische Beitrag zur spezifischen Wärme?

Kalium: bcc-Gitter mit $a = 5,23 \text{ \AA}$, Debye-Temperatur $\Theta_D = 100 \text{ K}$

Hinweis:

Bei den Elektronen handelt es sich um ein Fermigas, wie es bereits in der Kernphysik behandelt wurde. Es gilt $E_F = p_F^2/(2m)$.

Der Fermi-Impuls p_F folgt aus der Zahl N der Fermionen: $N = V p_F^3 / (3\pi^2 \hbar^3)$

und man erhält: $E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 N)^{2/3}$

11.3 Fermi-Energie von Metallen (20 Punkte)

In Datensammlungen findet man Werte für die Fermi-Energie von Metallen, z.B. 11,15 eV für Eisen (bcc, $a = 2,87 \text{ \AA}$) und 3,64 eV für Barium (bcc, $a = 5,02 \text{ \AA}$).

- Wievielen freien Elektronen pro Atom entsprechen die angegebenen Energien?
- Wie groß sind die Fermi-Geschwindigkeiten in den zwei Metallen?

11.4 Bänder stark gebundener Elektronen (30 Punkte)

Wir betrachten einen Kristall aus zweiwertigen Atomen mit einfach kubischem Gitter ($a = 0,4 \text{ nm}$). Die Bänder der Leitungs(L)- und Valenz(V)-Elektronen seien durch

$$E_i = E_i^0 - \beta_i [\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)]$$

mit den Parametern $E_V^0 = 0 \text{ eV}$, $E_L^0 = 12 \text{ eV}$, $\beta_V = -0,8 \text{ eV}$, $\beta_L = 1,5 \text{ eV}$ beschrieben.

- Skizzieren Sie die Dispersionsrelation der Leitungs- und Valenzelektronen in x -Richtung ($k_y = k_z = 0$) und zeichnen Sie ein, welche Zustände bei $T = 0 \text{ K}$ besetzt sind.

Durch Absorption eines Photons wird ein Elektron mit $k = 10^8 \text{ m}^{-1}$ vom gefüllten V-Band ins leere L-Band gehoben. Die Änderung des Wellenvektors des Elektrons kann dabei vernachlässigt werden. (Warum?)

- Wie groß sind nach dieser Absorption die effektiven Massen m_h/m_0 und m_e/m_0 von erzeugtem Loch (h) und angeregtem Elektron (e)? (m_0 : Masse des freien Elektrons)
- Wie groß sind die Geschwindigkeiten v_h und v_e ?
- Welche Beschleunigung a_h und a_e erfahren die Ladungsträger in einem elektrischen Feld der Stärke 10 V/m in x -Richtung?