

## 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  $\omega_D$ .
- 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  $10 \text{ V/m}$  in  $x$ -Richtung?