

34. Fermi-Dirac vs Maxwell-Boltzmann

Zeigen Sie, dass für das freie Elektronengas aus der Fermi-Verteilungsfunktion

$$f(\vec{k}) = \frac{1}{e^{\frac{E(\vec{k}) - \mu}{k_B T}} + 1},$$

im Grenzfall $E - \mu \gg k_B T$, die Maxwell-Boltzmann Verteilung

$$f_M(\vec{v}) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}}$$

hervorgeht.

Hinweis: Das chemische Potential μ kann durch die Teilchendichte $n = \int f(\vec{v}) d^3v$ ausgedrückt werden und $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\pi/a}$.

Die Maxwell-Boltzmann Verteilung gibt für ein Einheitsvolumen im Ortsraum die Teilchendichte in einem Volumen d^3v um \vec{v} an. Die Fermi-Verteilung dagegen gibt die Wahrscheinlichkeit der Belegung eines einzigen Zustands mit Wellenvektor \vec{k} an. Um die Verteilungen ineinander überzuführen, muss zunächst für den Impulsraum ein Ausdruck für die Teilchendichte $\tilde{f}(\vec{k})$ pro Einheitsvolumen im Ortsraum gefunden werden. Dies ist die Fermi-Verteilungsfunktion multipliziert mit der Zustandsdichte pro Einheitsvolumen im Ortsraum:

$$\tilde{f}(\vec{k}) = f(\vec{k}) \frac{1}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} \frac{1}{V} = f(\vec{k}) \frac{1}{8\pi^3}.$$

Der Ausdruck $\tilde{f}(\vec{k}) d^3k$ ist dann eine Teilchenzahl pro Einheitsvolumen V und wird mithilfe von $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{mv^2}{2}$ in eine geschwindigkeitsabhängige Form umgeformt:

$$\tilde{f}(\vec{k}) d^3k = \frac{1}{8\pi^3} \frac{1}{\exp\left[\frac{mv^2/2 - \mu}{k_B T}\right] + 1} \left(\frac{m}{\hbar}\right)^3 d^3v = f(\vec{v}) d^3v$$

In der Näherung $E - \mu \gg k_B T$ wird aus $f(\vec{v})$ die Maxwell-Boltzmann Verteilung:

$$\begin{aligned} f(\vec{v}) &\approx \left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^3 \exp\left[\frac{\mu}{k_B T}\right] \exp\left[-\frac{mv^2}{2k_B T}\right] \\ n &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^3 \exp\left[\frac{\mu}{k_B T}\right] \int_{-\infty}^{+\infty} dv_x \int_{-\infty}^{+\infty} dv_y \int_{-\infty}^{+\infty} dv_z \exp\left[-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2k_B T}\right] \\ &= \underbrace{\left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^3 \exp\left[\frac{\mu}{k_B T}\right]}_{f(\vec{v}) \exp\left[\frac{mv^2}{2k_B T}\right]} \left(\frac{2\pi k_B T}{m}\right)^{3/2} \\ \Leftrightarrow f(\vec{v}) &= n \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{mv^2}{2k_B T}\right] = f_M(\vec{v}) \end{aligned}$$

35. Zustandsdichte eines 1D-Elektronengases

Es ist technologisch möglich "Quantendrähte" herzustellen, in denen sich Elektronen nur in einer Dimension bewegen können. Dadurch reduziert sich auch die Dispersionsrelation der Elektronen auf eine Dimension. Berechnen Sie die energetische Zustandsdichte $g(E)$ von eindimensionalem Elektronengas und skizzieren Sie das Ergebnis.

Hinweis: Nehmen Sie hierfür an, dass sich die Elektronen frei entlang der z-Richtung im konstanten Potential $V(z) = 0$ bewegen und berücksichtigen Sie dabei periodische Randbedingungen. Der z-Anteil der Schrödinger-Gleichung und dessen Lösungsansatz für einen Quantendraht der Länge L_z lauten entsprechend:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(z) = E \Psi(z)$$

mit dem Lösungsansatz

$$\Psi(z) = \frac{1}{\sqrt{L_z}} e^{ik_z z}$$

z-Achse: makroskopisch quasikontinuierlich

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad k_{x,y,z} = \frac{2\pi}{L_{x,y,z}} m_{x,y,z}$$

$$E^{1D} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \pi^2 \left(\frac{m_x^2}{L_x^2} + \frac{m_y^2}{L_y^2} \right)$$

$$g(E) dE = g(k) dk$$

$$\Rightarrow g(E) = g(k) \left(\frac{dE}{dk} \right)^{-1}$$

$$= \frac{dN(k)}{dk} \left(\frac{dE}{dk} \right)^{-1}$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \Leftrightarrow \frac{dk}{dE} = \sqrt{\frac{2m}{E}} \frac{1}{\hbar}$$

$$dN(k) = 2 \cdot \frac{1}{\frac{2\pi}{L_z}} dk$$

$$g(E) = \frac{L_z}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}}$$

$$\Rightarrow g(E) \propto \frac{1}{\sqrt{E}}$$

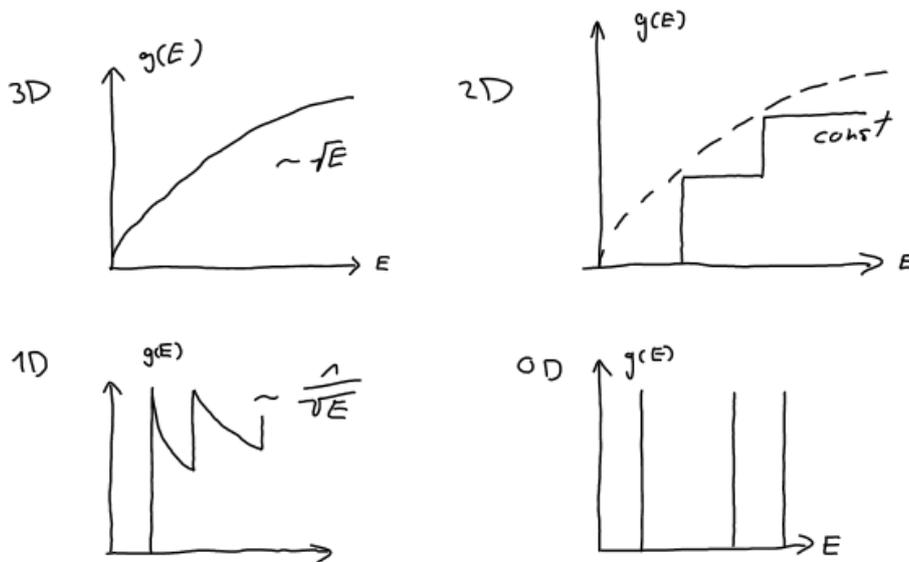


Abbildung 1: Zustandsdichte in verschiedenen Dimensionen

36. Fermi-Energie und Fermi-Radius

- (a) Berechnen Sie für Aluminium die Elektronenkonzentration n_e [1/cm³] in der Näherung freier Elektronen sowie die Fermi-Energie E_F [eV] und den Radius k_F [1/Å] der Fermi-Kugel aus folgenden Angaben: Das metallische Aluminium kristallisiert in der kubisch flächenzentrierten Struktur. Die Gitterkonstante der kubischen Elementarzellen beträgt $a = 4,05 \text{ \AA}$. Jedes Al-Atom im Metall soll 3 freie Elektronen an das Elektronengas abgeben.

$$Z_A \cdot Z_E^{\text{Fcc}} = 4 \cdot 3 = 12 \quad V_{\text{EZ}} = (4,05 \text{ \AA})^3$$

$$n_e = \frac{Z_A \cdot Z_E}{V_{\text{EZ}}} = 1,80 \cdot 10^{29} \frac{1}{\text{m}^3}$$

$$k_F = (3\pi^2 n_e)^{1/3} = 1,749 \cdot 10^{10} \frac{1}{\text{m}}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = 11,7 \text{ eV}$$

(b) Vergleichen Sie die Zahlenwerte mit denen für K und Ca (Kalium bcc mit $a = 5,225 \text{ \AA}$, Abgabe von 1 Elektron, Calcium fcc mit $a = 5,58 \text{ \AA}$, Abgabe von 2 Elektronen).

- Kalium

$$n_e = \frac{2}{(5,225 \text{ \AA})^3} = 1,4 \cdot 10^{28} \frac{1}{\text{m}^3} \quad k_F = 1,1 \cdot 10^{11} \frac{1}{\text{m}} \quad E_F = 4,68 \text{ eV}$$

- Calcium

$$n_e = \frac{8}{(5,58 \text{ \AA})^3} = 4,6 \cdot 10^{28} \frac{1}{\text{m}^3} \quad k_F = 1,1 \cdot 10^{11} \frac{1}{\text{m}} \quad E_F = 4,68 \text{ eV}$$

Hinweis: Die Elektronenkonzentration ergibt sich aus $\frac{Z_A \cdot Z_E}{V_{EZ}}$ (Z_A = Anzahl der Atome pro Elementarzelle und Z_E = Anzahl der abgegebenen Elektronen pro Atom).