UNIVERSITÄT KONSTANZ
Fachbereich Physik
Prof. Dr. Matthias Fuchs
Raum P 907, Tel. (07531)88-4678
E-mail: matthias.fuchs@uni-konstanz.de

Übungen zur Statistischen Mechanik
Wintersemester 2007/08

Übungsblatt 10, Ausgabe 08.01.2008, abzugeben bis 14.01.2008

Präsenzaufgaben

53. **Paramagnetismus freier Elektronen**
Betrachten Sie ein System nicht-wechselwirkender Elektronen in einem äußeren Magnetfeld $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$. Die Energie eines Elektrons hänge vom kontinuierlichen Wellenvektor $\mathbf{k}$ und dem diskreten Spinparameter $\sigma = \pm 1$ ab:

$$\varepsilon_{\mathbf{k},\sigma} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + \sigma \mu_B B$$

wobei m die Masse ist und $\sigma\mu_B$ das magnetische Moment eines Elektrons.

(a) Die Energie des Gesamtzustandes ν ist gegeben durch $E_\nu = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k},\sigma} n_{\mathbf{k},\sigma}^{(\nu)}$, wobei die Gesamtteilchenzahl $N_\nu = \sum_{\mathbf{k},\sigma} n_{\mathbf{k},\sigma}^{(\nu)}$.
Dabei gilt $n_{\mathbf{k},\sigma}^{(\nu)} \in \{0, 1\}$, warum?
Bestimmen Sie die Großkanonische Zustandssumme Z_G des Systems und zeigen sie:

$$\ln Z_G = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \ln\left(1 + \exp[-\beta(\varepsilon_{\mathbf{k},\sigma} - \mu)]\right)$$

wobei $\beta = \frac{1}{k_B T}$ die inverse Temperatur und μ das chemische Potential ist.

(b) Summationen über den Wellenvektor sollen im Folgenden als Integrationen mit der Zustandsdichte $D(\varepsilon)$ ausgeführt werden. Zeigen Sie, dass die Zustandsdichte beider Spinzustände bei verschwindendes Magnetfeld $\mathbf{B} = 0$ die Form

$$D(\varepsilon) = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon}$$

hat. Überlegen Sie sich hierzu beim übergang von $\sum_{\mathbf{k}} \to \int dk$ wieviel 'Platz' ein einzelner Zustand im k-Raum benötigt aufgrund der Periodischen Randbedingungen. Dies kann man sich anhand der möglichen Wellenvektoren einer Welle in einem Würfel der Kantenlänge L klar machen.

(c) Zeigen Sie, dass die mittlere Magnetisierung $\mathbf{M} = M\hat{\mathbf{z}}$ gegeben ist durch $M = -\mu_B(N_+ - N_-)$, wobei $N_\pm$ die Teilchenzahl zum Spiin parallel bzw. antiparallel zum äußeren Feld ist.

(d) Zeigen Sie nun mit beiden Ergebnissen von oben, dass bei $T \approx 0$ gilt:

$$M = \mu_B \int_{\varepsilon_F - \mu B}^{\varepsilon_F + \mu B} d\varepsilon D(\varepsilon)$$

Interpretieren Sie obigen Zusammenhang.

schriftlich

54. **Kompressibilität von Quantengasen** (6 Punkte)
Die Kompressibilitäten von Gasen wechselwirkungsfreier Bosonen (B), klassischer Teilchen (kl) und Fermionen (F) unterscheiden sich und dies eröffnet eine Möglichkeit, die Quantenstatistik direkt zu beobachten.

(a) Die isotherme Kompressibilität ist definiert über die Volumensänderung unter Druck. Zeigen Sie, dass allgemein gilt

$$\kappa =: -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T = \frac{1}{n\,N}\left(\frac{\partial N}{\partial \mu}\right)_T = \frac{1}{nk_BT}\,\frac{\langle(\Delta N)^2\rangle}{N},$$

d.h. dass κ mit der Variation der Teilchenzahl zusammenhängt.

(b) Zeigen Sie, dass für ihre jeweiligen isothermen Kompressibilitäten im thermodynamischen Limes bei $T \neq 0$ gilt

$$|\kappa_\mathrm{B}| > |\kappa_\mathrm{kl}| > |\kappa_\mathrm{F}|$$

(c) Bestimmen und diskutieren Sie die führende Korrektur für Bosonen und Fermionen in der Zustandsgleichung Druck als Funktion von Teilchendichte und Temperatur ($P(T,n)$).

55. **Sommerfeld Entwicklung (6 Punkte)**
In dieser Aufgabe betrachten wir eine Entwicklungsmethode, die auf Sommerfeld zurückgeht und oft bei bei der Untersuchung Fermionischer Systeme Anwendung findet. Wir betrachten ein Integral der Form

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon H(\epsilon) f(\epsilon) \quad , \quad f(\epsilon) = \frac{1}{1 + e^{(\epsilon-\mu)/k_BT}}$$

wobei $H(\epsilon)$ gegen Null strebt, wenn $\epsilon \to -\infty$.

(a) Indem Sie annehmen, dass $f(\epsilon) \to 0$ sich gegenüber der Divergenz von $K(\epsilon)$ durchsetzt, wenn $\epsilon \to \infty$, zeigen Sie, dass

$$I = -\int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon K(\epsilon)\left(\frac{\partial f}{\partial \epsilon}\right) \quad , \quad K(\epsilon) = \int_{-\infty}^{\epsilon} H(\epsilon')d\epsilon'$$

(b) Skizzieren Sie die Funktion $f(\epsilon)$ und deren erste Ableitung für niedrige T. Weshalb ist der hergeleitete Ausdruck in (a) nützlicher um die ursprüngliche Form zu nähern?

(c) Entwicklen Sie $K(\epsilon)$ in einer Taylorreihe um $\epsilon = \mu$, um das folgende Ergebnis zu beweisen:

$$I = \int_{-\infty}^{\mu} H(\epsilon)d\epsilon - \sum_{n=1}^{\infty}\left(\int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \frac{(\epsilon-\mu)^{2n}}{(2n)!}\frac{\partial f}{\partial \epsilon}\right)\left(\frac{d^{2n-1}}{d\epsilon^{2n-1}}H(\epsilon)\right)_{\epsilon=\mu}.$$

Warum erscheinen nur Glieder mit geraden Potenzen von $(\epsilon-\mu)$?

(d) Setzten Sie $(\epsilon - \mu)/k_B T = x$ und zeigen Sie damit

$$I = \int_{-\infty}^{\mu} H(\epsilon) d\epsilon + \sum_{n=1}^{\infty} (k_B T)^{2n} a_n \left(\frac{d^{2n-1}}{d\epsilon^{2n-1}} H(\epsilon) \right)_{\epsilon=\mu},$$

wenn a_n folgendermaßen definiert ist:

$$a_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x^{2n}}{(2n)!} \left(-\frac{d}{dx} \frac{1}{1+e^x} \right).$$

Dieses Ergebnis wird Sommerfeld Entwicklung genannt.

56. **Pauli Paramagnetismus II (6 Punkte)**
Als Anwendung der Sommerfeldentwicklung bestimmen wir die Suszeptibilität im Pauli Modell des Paramagnetismus. Im Pauli Modell werden freie Elektronen betrachtet, die in einem angelegten Magnetfeld eine Energieverschiebung von $\epsilon_\pm = \epsilon \pm \mu_B B$ erfahren.

(a) Die Teilchenzahldichte n ist durch das Integral

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon D(\epsilon) f(\epsilon),$$

gegeben, wobei $D(\epsilon)$ die Zustandsdichte ist. Benutzen Sie die Sommerfeldentwicklung mit $a_1 = \pi^2/6$ um Folgendes zu zeigen:

$$n = \int_0^{\mu} d\epsilon D(\epsilon) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D'(\mu).$$

D' ist dabei die Ableitung bezüglich ϵ.

(b) Benutzen Sie die Definition der Fermi Energie

$$n = \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon D(\epsilon)$$

und die Näherung

$$\int_{\epsilon_F}^{\mu} D(\epsilon) \approx (\mu - \epsilon_F) D(\epsilon_F)$$

um zu zeigen, dass die Temperaturabhängigkeit des chemischen Potentials in führender Ordnung gegeben ist durch

$$\mu = \epsilon_F - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{1}{D(\epsilon_F)} \left(\frac{dD}{d\epsilon} \right)_{\epsilon=\epsilon_F}$$

(c) Die Magnetisierungsdichte ist gegeben durch $M = -\mu_B(n_+ - n_-)$, wobei $n_\pm$ die Teilchenzahldichte mit Spin parallel bzw. antiparallel zum äußeren Feld ist. Machen Sie sich graphisch folgende Beziehungen für die Zustandsdichten der $\pm$ Elektronen klar:

$$D_+(\epsilon) = \frac{1}{2} D(\epsilon - \mu_B B) \quad , \quad D_-(\epsilon) = \frac{1}{2} D(\epsilon + \mu_B B),$$

$\mu_B B$ ist im Allgemeinen sehr klein im Vergleich zu ϵ_F. Machen Sie eine Taylorentwicklung von $D_\pm$ um ϵ um das in erster Ordnung in B korrekte Ergebnis zu zeigen

$$M = \mu_B^2 B \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon D(\epsilon) \left(\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right).$$

(d) Benutzen Sie schließlich die Sommerfeldentwicklung und das Ergebnis für das chemische Potential um zu zeigen, dass die Suszeptibilität $\chi = \frac{\partial M}{\partial H}$ gegeben ist durch

$$\chi = \mu_B^2 \left(D(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \left(D''(\epsilon) - \frac{D'(\epsilon)^2}{D(\epsilon)} \right)_{\epsilon=\epsilon_F} \right).$$

57. **Halbleitermodell (4 Punkte)**
In dieser Aufgabe soll ein einfaches Halbleitermodell betrachtet werden, in dem die Elektronen als ideales Fermi-Gas behandelt werden. Abb.1 zeigt das Schema des Systems. Sowohl die Fermi-Energie ϵ_F als auch $\epsilon - \epsilon_F$ seien groß gegenüber der thermischen Energie $k_B T$.

(a) Zeigen Sie, dass die mittleren Elektronendichten gegeben sind durch

$$n_s = \frac{2\rho_s}{e^{-\beta(\epsilon-\epsilon_F)} + 1}; \quad n_c = \frac{2}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}}+\epsilon_F)} + 1},$$

wobei $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2/2m$. Der erste Ausdruck gibt die Elektronen der Gitterplätze wider, der Zweite die aus dem Leitungsband.

(b) Benutzen Sie die Ungleichungen $\beta\epsilon_F \gg 1$ und $\beta(\epsilon - \epsilon_F) \gg 1$ um folgende Beziehung zu zeigen

$$pn_c = \frac{4\rho_s}{\lambda^3} e^{-\beta\epsilon},$$

mit λ der thermischen Wellenlänge, p der mittleren Dichte der unbesetzten Gitterplätze und n_c der Elektronendichte im Leitungsband. *Hinweis:* Diese Beziehung ist das Massenwirkungsgesetz für Halbleiter, wobei die rechte Seite eine Art Gleichgewichtskonstante ist.

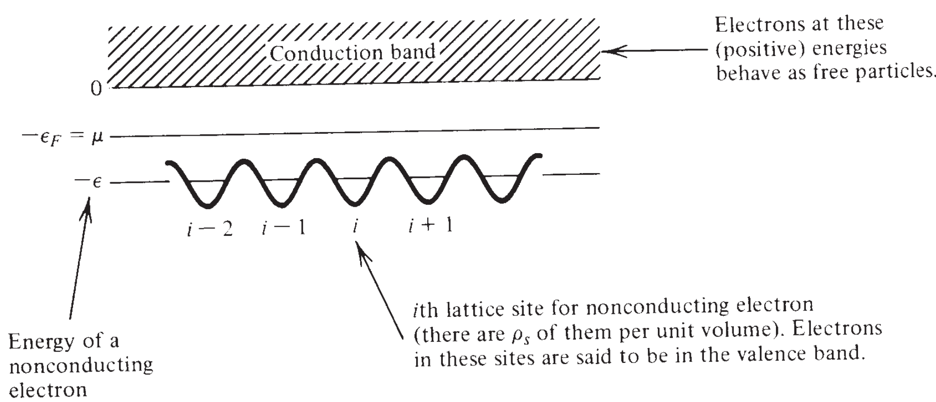

Fig. 4.5. Model for semiconductors.