Temperaturabhängigkeit

23.05.12

Besetzungswahrscheinlichkeit: $\boxed{f(E) = \frac{1}{\exp[(E-\mu)/kT]+1}}$

μ: chemisches Potential der e^- im FK

$\mu = U - TS + pV$

bei norm. Temperatur zeigt μ nur schwache T-Abhängigkeit

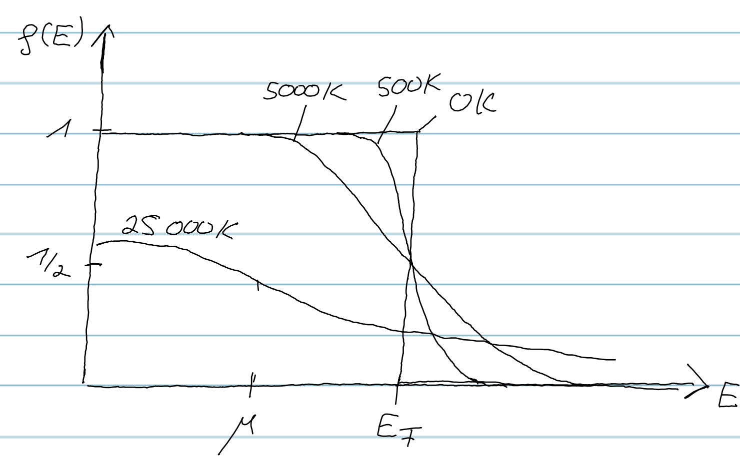
$\mu \simeq E_F$

$$\boxed{f(E) = \frac{1}{\exp[(E-E_F)/kT]+1}}$$

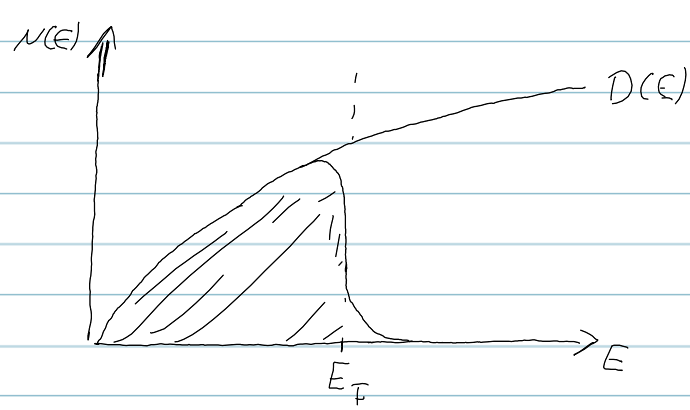
bei $T = 0K$ $f(E) = 0$ für $E > E_F$

$f(E) = 1$ für $E < E_F$

bei $T > 0K$ $f(E) = 1/2$ für $E = E_F$



Zustandsdichte besetzter Zustände bei $T > 0K$

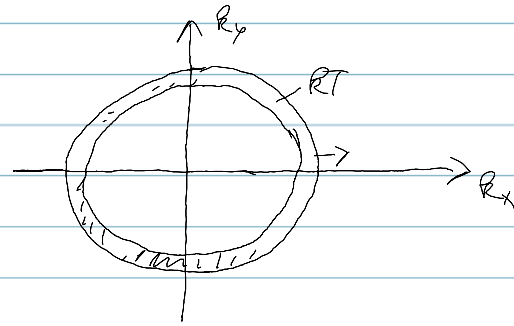


$N(E) = D(E) \cdot f(E)$

Wärmekapazität

monovalentes Metall: $C'_{el} = \frac{3}{2} R$ (klassisch)

aber: $C'_{exp} \simeq 10^{-2} C'_{el}$



Anteil e^- angeregt: $\sim \frac{kT}{E_F}$

$N e^-$ mit kT $\quad \Delta E \sim N \cdot \frac{kT}{E_F} \cdot kT$

Wärmekapazität $C_{el} = \left(\frac{\partial \Delta E}{\partial T}\right) \simeq 2N \frac{k^2}{E_F} T$

Bsp.: 1 Mol e^-: $\frac{E_F}{k} = T_F \simeq 10^4 K$ $\quad ; T = 10^2 K$

$C_{el} \simeq 10^{-2} C'_{el}$

Gesamte Wärmekapazität

$C_V = C_{el} + C_{Gitter} = \gamma T + \delta T^3$

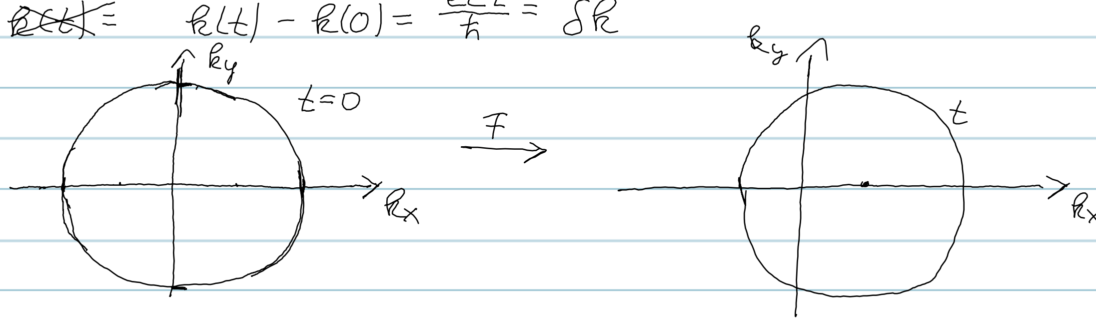
Bsp: k $\quad \gamma_{exp} = 2{,}1 \frac{kJ}{mol K^2}$; $\gamma_{ber} = 1{,}7 \frac{kJ}{mol K^2}$

Elektrische Leitfähigkeit

alle Valenz e^- können beitragen

$F = -eE = \frac{dp}{dt} = \frac{\hbar dk}{dt}$

$\cancel{k(t)} = \quad k(t) - k(0) = \frac{eEt}{\hbar} = \delta k$



Stromdichte: $\boxed{j = \sigma E}$ $\quad\quad$ σ: spezifische Leitfähigkeit ($\sigma = \frac{1}{\rho}$)

Driftgeschwindigkeit: $v_d = v_2 - v_1 = \frac{eE\tau}{m}$

τ = mittlere Zeit zwischen Stößen $\tau = \frac{\lambda}{v}$

e^- am Fermi-Niveau: $v_d = \frac{eE\lambda}{mv_F}$

↳ Stromdichte: $j = \sigma E = \frac{1}{\rho} E = \frac{N}{V} e v_d$

$$\frac{1}{\rho} E = \frac{N}{V} e \frac{eE\lambda}{mv_F} = \frac{N}{V} \frac{e^2 E\lambda}{mv_F} \rightarrow \boxed{\rho = \frac{V}{N} \frac{mv_F}{e^2\lambda}}$$

4.2. e^- im periodischen Potential

Periodizität des Kristalls kann nicht vernachlässigt werden!

Bsp.: 1-dim. Kristall

Beugungsbedingung: $2d \sin\theta = n\lambda$

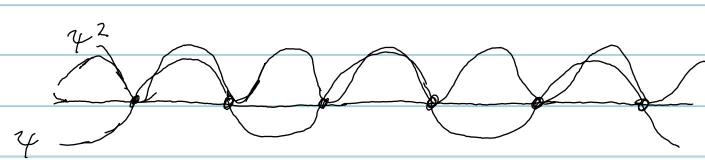
Rückreflexion : $\theta = \frac{\pi}{2}$

$$2a \cdot 1 = n\lambda$$
$$2a \cdot 1 = n\frac{2\pi}{k}$$
$$k = n\frac{\pi}{a}$$

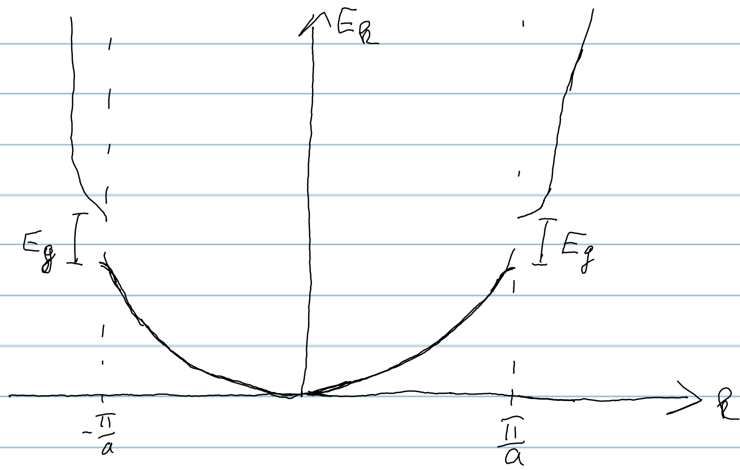
Wellenfunktion: $\psi_k = \exp(ikx) \leftrightarrow \psi_{-k} = \exp(-ikx)$

stehende Welle

$\psi^+ \propto e^{ikx} + e^{-ikx}$
$\propto 2\cos(kx)$



$\psi^- \propto e^{ikx} - e^{ikx}$
$\propto 2i \sin(kx)$



Bloch-Theorem

1 dim, Schrödinger-Gl: $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi = 0$

$V(x) = V(x+a)$

Lsg: $\boxed{\psi_k(x) = e^{ikx} U_k(x)}$

$U_k(x)$: besitzt Periodizität des Gitters: $U_k(x) = U_k(x+a)$

3 dim $\boxed{\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} U_k(\vec{r})}$

Modell des nahezu freien e^- (NFE)

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_n e^{-2\pi i n x/a}$$

$$U(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n e^{-2\pi i n x/a}$$

Fourier-Reihen, Periodizität a

Bloch-Fkt: $\psi(x) = e^{ikx} \sum_n A_n e^{-2\pi i n x/a}$

SG: $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi = 0$ | ψ einsetzen: e^{ikx}

$$\sum_n \left(-k_n^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\right) A_n e^{-2\pi n i x/a} = 0$$

$$k_n = k - \frac{2\pi n}{a}$$

wenn $V \ll E$:

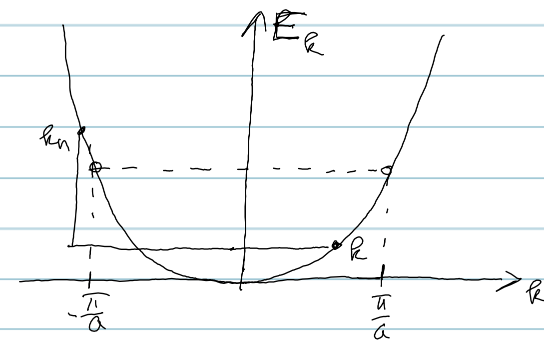
$$\sum_n{}' \left(-k_n^2 + \frac{2mE}{\hbar^2}\right) A_n e^{-2\pi n i x/a} = \frac{2m}{\hbar^2} A_0 V(x) \qquad \Big| \cdot e^{2\pi n i x/a}, \int_0^a$$

$$\left(-k_n^2 + \frac{2mE}{\hbar^2}\right) A_n = \frac{2m}{\hbar^2} A_0 \underbrace{\frac{1}{a}\int_0^a V(x)\, e^{2\pi n i x/a}\, dx}_{V_n}$$

Verhältnis A_n zu A_0?

$$A_n = \frac{2m}{\hbar^2} - V_n \frac{A_0}{k^2 - (\underbrace{k - \frac{2\pi n}{a}}_{k_n})^2}$$

↳ A_n wird groß für $k = n\frac{\pi}{a}$



angenäherte WF

$$\psi = e^{ikx}\left(A_0 + A_n e^{-2\pi n i x/a}\right)$$
$$= e^{ikx}\left(A_0 + A_n e^{i(k_n - k)x}\right) \qquad k_n - k = -\frac{2\pi n}{a}$$
$$= A_0 e^{ikx} + A_n e^{ik_n x}$$

in SG: $A_0 e^{ikx}\left(-k^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\right) + A_n e^{ik_n x}\left(-k_n^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\right) = 0 \qquad \cancel{\Big| e^{-ikx}, \int_0^a}$

$$A_0(E-E_0) - A_n V_n^* = 0 \qquad \Big| e^{-ikx}, \int_0^a$$
$$-A_0 V_n + A_n(E-E_n) = 0 \qquad \Big| e^{ik_n x}, \int_0^a$$

$$\boxed{(E-E_0)(E-E_n) - V_n V_n^* = 0}$$

Lsg.: $$\boxed{E = \frac{1}{2}\left[E_0 + E_n \pm \left((E_0 - E_n)^2 + 4V_nV_n^*\right)^{1/2}\right]}$$