Číselné odhady

V první části úkolu máme číselně odhadnout velikosti některých veličin.

- Fermiho mez k_F

  Pro počet elektronů ve Fermiho kouli platí vztah

$$N = 2\frac{\frac{4}{3}\pi k_F^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3},$$

  kde L je rozměr Born-Karmanovy oblasti. Zaveďmě V jako objem oblasti. Pak po úpravách dostaneme

$$k_F = \left(3\pi^2 n\right)^{\frac{1}{3}},$$

  kde $n = \frac{N}{V}$ je hustota elektronů. Číselně vyjde $k_F \approx 1,2 \cdot 10^{10} m^{-1}$

- Fermiho energie ε_F

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \approx 5,5eV$$

- Fermiho rychlost v_F

  Tu získáme ze vztahu pro Fermiho hybnost

$$p_F = \hbar k_F \Rightarrow v_F = \frac{\hbar k_F}{m} \approx 1,4 \cdot 10^6 ms^{-1}.$$

- Fermiho teplota T_F

  Tu získáme ze vztahu

$$T_F = \frac{\varepsilon_F}{k_B} \approx 6,4 \cdot 10^3 K.$$

- Střední energie elektronu $\langle E \rangle$

  Střední energii elektronu určíme z energie elektronů v celé Fermiho kouli a podělíme počtem elektronů.

$$E = 2\frac{V}{8\pi^3}\sum_{k<k_F}\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{V}{\pi}\int_0^{k_F}\frac{\hbar^2 k_F^4}{2m} = \frac{V\hbar^2 k_F^5}{10\pi^2 m}$$

  Po vydělení počtem elektronů a dosazením za hustotu elektronů dostaneme

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{5}\varepsilon_F \approx 3,3eV.$$

- Hustota energie u

  Hustotu energie můžeme získat z energie Fermiho koule dělené objemem BK oblasti. Pak máme

$$u = \frac{E}{V} = \frac{\hbar^2 k_F^5}{10\pi^2 m} = 1,9eVm^{-3}.$$

- Chemický potenciál při teplotě $T = 300K$

  Při nenulových teplotách můžou některé elektrony přejít do vyšších stavů, takže Fermiho distribuce už nemá ostrý přechod v místě chemického potenciálu při nulové teplotě.

  Při počítání vyjdeme z elektronové hustoty a hustoty stavů.

$$n = \int_0^\infty g(E) f(E)\,\mathrm{d}E$$

$$g(E) = \frac{\sqrt{2m^3}}{\pi^2\hbar^2}\sqrt{E} = g_0\sqrt{E}$$

  Dosadíme hustotu vztahů do vzorce pro elektronovou hustotu a integrál spočítáme pomocí Betheho-Sommerfeldova rozvoje. Odtud získáme

$$n = \frac{2}{3}g_0\mu^{\frac{3}{2}}\left[1 + \frac{\pi^2}{8}(k_B T)^2\frac{1}{\varepsilon_F^2}\right]$$

Při nulové teplotě je chemický potenciál roven Fermiho energii, takže se můžeme zbavit elektronové hustoty a v rovnici zbyde jen Fermiho energie, chemický potenciál, teplota a nějaké konstanty, tedy vše potřebné pro výpočet. Po dalších úpravách získáme celkový vztah

$$\mu(T) \approx \varepsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2\right] = 5,5eV.$$

- Střední hustota energie při teplotě $300K$

  Střední hustotu energie můžeme získat z BS rozvoje pro hustotu energie a pro hustotu elektronů. Příslušný vztah byl odvozen v příkladu 2.3, takže odvození zde již nebudu uvádět.

$$u(T) = \frac{3}{5} n\varepsilon_F \left(1 + \frac{5\pi^2}{12}\frac{T^2}{T_F^2}\right) \approx \langle E \rangle n = 1,9eVm^{-3}.$$

  Fermiho teplota je mnohem vyšší než pokojová, proto se příslušný člen může zanedbat.

- Tepelná kapacita elektronového plynu

  Opět z výsledků příkladu 2.3 máme

$$c_V = \frac{\pi^2}{2} n k_B \frac{T}{T_F}\frac{N_A}{n} = 0,19Jmol^{-1}K^{-1}$$

  Tabulková hodnota pro stříbro je $25,33Jmol^{-1}K^{-1}$.

  Vysvětlení může být takové, že při zvýšení teploty málo elektronů přechází ze základního stavu do vyššího.

Chemický potenciál 2D plynu

Vyjdeme ze vztahu pro hustotu energie.

$$u = \int_0^\infty \mathrm{d}k \frac{\varepsilon(k) f(\varepsilon(k))}{2\pi^2} = \int_0^\infty \mathrm{d}k \frac{k\varepsilon(k) f(\varepsilon(k))}{\pi} = \int_0^\infty \mathrm{d}\varepsilon \frac{m}{\pi\hbar^2} f(\varepsilon)$$

Musíme tedy spočítat integrál z FD distribuce.

$$\int_0^\infty \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1}\mathrm{d}\varepsilon = \int \frac{\mathrm{d}E}{Ke^E + 1}$$

Tento integrál jde spočítat pomocí limity pro $\varepsilon \to \infty$, takže celkově pak vyjde

$$u = \frac{mk_B T}{\pi\hbar^2} \ln\left(1 + e^\mu k_B T\right) \Rightarrow \mu = \ln\left(e^{\frac{u\pi\hbar^2}{mk_B T}} - 1\right).$$