TEMPERATURNA ODVISNOST KEMIJSKEGA POTENCIALA

9. december 2007

Naloga 1

Izračunaj temperaturno odvisnost kemijskega potenciala μ za plin elektronov v 1D, 2D in 3D s pomočjo Sommerfeldovega razvoja!

Rešitev 1

S Sommerfeldovim razvojem smo na predavanjih izpeljali splošno enačbo za kemijski potencial v odvisnosti od temperature. Torej vemo:

$$\mu = \varepsilon_F - \frac{\pi^2}{6}(kT)^2 \frac{g'(\varepsilon_F)}{g(\varepsilon_F)}, \tag{1}$$

kjer je ε_F Fermijeva energija, $g(\varepsilon_F)$ gostota stanj pri Fermijevi energiji in $g'(\varepsilon_F)$odvod gostote stanj pri Fermijevi energiji.

V primeru treh dimenzij vstavimo v enačbo (1) gostoto stanj

$$g(\varepsilon) = \frac{V}{\pi^2}\sqrt{2}\frac{m^{3/2}}{\hbar^3}\sqrt{\varepsilon} = A\sqrt{\varepsilon} \tag{2}$$

in njen odvod

$$g'(\varepsilon) = \frac{1}{2}A\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \tag{3}$$

pri Fermijevi energiji. Dobimo:

$$\mu(T) = \varepsilon_F - \frac{\pi^2}{12}\frac{(kT)^2}{\varepsilon_F} = \varepsilon_F - \xi T^2. \tag{4}$$

Podobno naredimo za eno dimenzijo. V enačbo (1) vstavimo gostoto stanj

$$g(\varepsilon) = \frac{L}{\pi\hbar}\frac{\sqrt{2m}}{\sqrt{\varepsilon}} = \frac{B}{\sqrt{\varepsilon}} \tag{5}$$

in njen odvod

$$g'(\varepsilon) = -\frac{1}{2}\frac{B}{\varepsilon^{3/2}} \tag{6}$$

pri Fermijevi energiji. Dobimo:

$$\mu(T) = \varepsilon_F + \frac{\pi^2}{12}\frac{(kT)^2}{\varepsilon_F} = \varepsilon_F + \xi T^2. \tag{7}$$

V primeru dveh dimenzij je gostota stanj konstantna in posledično njen odvod enak 0:

$$g(\varepsilon) = \frac{Sm}{\pi\hbar^2} \Rightarrow g'(\varepsilon) = 0. \tag{8}$$

Dobimo, da je kemijski potencial enak Fermijevi energiji in neodvisen od temperature $\mu = \varepsilon_F$. To ni res, saj nam členi v Sommerfeldovem razvoju, ki so pravzaprav členi Taylorjeve vrste in za konstantno funkcijo vsi enaki nič, ne dajo dovolj natančnega rezultata. Postopati moramo drugače. Začnimo z integralom:

$$N = \int_0^\infty g(\varepsilon)f(\varepsilon)d\varepsilon, \tag{9}$$

kjer je N število elektronov v sistemu in $f(\varepsilon)$ Fermijeva funkcija. Ker je $g(\varepsilon)$ v dveh dimenzijah konstanta, je število elektronov sorazmerno integralu Fermijeve funkcije.

$$N = \frac{Sm}{\pi\hbar^2}\int_0^\infty \frac{d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} \tag{10}$$

Uvedemo novo spremenljivko $u = e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1$in dobimo:

$$N = \frac{Sm}{\pi\hbar^2}\frac{1}{\beta}\int_0^\infty \frac{du}{u(u-1)}. \tag{11}$$

Ločimo na parcialne ulomke in integriramo:

$$N = \frac{Sm}{\pi\hbar^2\beta}\int_0^\infty \left[\frac{1}{(u-1)} - \frac{1}{u}\right] du = \frac{Sm}{\pi\hbar^2\beta}\left[ln(u-1) - ln(u)\right]_{e^{-\beta\mu}+1}^{\infty} = \frac{Sm}{\pi\hbar^2\beta}\left[ln(\frac{u-1}{u})\right]_{e^{-\beta\mu}+1}^{\infty} \tag{12}$$

$$N = -\frac{Sm}{\pi\hbar^2\beta}ln\left[\frac{e^{-\beta\mu}}{e^{-\beta\mu}+1}\right]. \tag{13}$$

Predpostavimo, da se število delcev v našem sistemu ne spreminja s temperaturo. Izračunamo število delcev pri T=0, kjer je Fermijeva funkcija stopničasta:

$$N = \int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{Sm}{\pi\hbar^2}\varepsilon_F. \tag{14}$$

Vstavimo v enačbo (13) in izrazimo μ :

$$\frac{Sm}{\pi\hbar^2}\varepsilon_F = -\frac{Sm}{\pi\hbar^2\beta}ln\left[\frac{e^{-\beta\mu}}{e^{-\beta\mu}+1}\right], \tag{15}$$

$$\frac{e^{-\beta\mu}}{e^{-\beta\mu}+1} = e^{-\beta\varepsilon_F}, \tag{16}$$

$$e^{-\beta\mu} = \frac{e^{-\beta\varepsilon_F}}{1-e^{-\beta\varepsilon_F}}, \tag{17}$$

logaritmiramo in upoštevamo $kT \ll \varepsilon_F$. Dobimo pravo temperaturno odvisnost kemijskega potenciala za dve dimenziji:

$$\mu(T) = \varepsilon_F - kTe^{-\frac{\varepsilon_F}{kT}}. \tag{18}$$

Naloga 2

Pri kateri temperaturi je kemijski potencial enak 0?

Rešitev 2

Nalogo lahko rešimo hkrati za 1D, 2D in 3D tako, da gostoto stanj zapišemo:

$$g(\varepsilon) = g(\varepsilon_F)\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F}\right)^{\frac{d}{2}-1}, \tag{19}$$

kjer d pomeni število dimenzij sistema. To gostoto stanj vstavimo v integral za število delcev, hkrati pa v Fermijevi funkciji postavimo $\mu = 0$:

$$N = \int_0^\infty g(\varepsilon)f(\varepsilon)d\varepsilon = \int_0^\infty g(\varepsilon_F)\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F}\right)^{\frac{d}{2}-1}\frac{d\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon}+1}. \tag{20}$$

Uvedemo novo spremenljivko $x = \beta\varepsilon$ in dobimo:

$$N = \frac{g(\varepsilon_F)}{\varepsilon_F^{\frac{d}{2}-1}\varepsilon^{\frac{d}{2}}}\int_0^\infty \frac{x^{\frac{d}{2}-1}dx}{e^x+1} = \frac{g(\varepsilon_F)}{\varepsilon_F^{\frac{d}{2}-1}\varepsilon^{\frac{d}{2}}}C_d, \tag{21}$$

kjer je C_d vrednost integrala za d dimenzij. Ker se število elektronov ne spreminja in je pri absolutni ničli enako:

$$N = \int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{g(\varepsilon_F)}{\varepsilon_F^{\frac{d}{2}-1}}\int_0^\infty \varepsilon^{\frac{d}{2}-1}d\varepsilon = g(\varepsilon_F)\frac{2}{d}\varepsilon_F. \tag{22}$$

Izenačimo enačbi (21) in (22) in izrazimo temperaturo:

$$g(\varepsilon_F)\frac{2}{d}\varepsilon_F = \frac{g(\varepsilon_F)}{\varepsilon_F^{\frac{d}{2}-1}\varepsilon^{\frac{d}{2}}}C_d, \tag{23}$$

$$T_d = \frac{\varepsilon_F}{k}\left(\frac{2}{C_d d}\right)^{\frac{2}{d}}, \tag{24}$$

kjer d predstavlja število dimenzij.Vrednosti konstant C_d so:

$$C_1 = (1-\sqrt{2})\sqrt{\pi}\zeta(\frac{1}{2}) \approx (1-\sqrt{2})\sqrt{\pi}(-1,46035), \tag{25}$$

$$C_2 = ln(2), \tag{26}$$

$$C_3 = \frac{1}{4}(2-\sqrt{2})\sqrt{\pi}\zeta(\frac{3}{2}) \approx \frac{1}{4}(2-\sqrt{2})\sqrt{\pi}2,612, \tag{27}$$

kjer je $\zeta(x)$ Zeta funkcija.