Theoretische Physik IV: Statistische Physik und Thermodynamik
Übungsblatt 10

Prof. Dr. Frank Wilhelm-Mauch
Michael Kaicher, M.Sc.
Andrii Sokolov, M.Sc.

WS 2018/2019 **Abgabe 9.1.2019**

Info: *Bitte schreiben Sie Name und Ihre Übungsgruppe auf das Übungsblatt und tackern Sie dieses. Sie dürfen in Gruppen von bis zu drei Personen abgeben.*

Aufgabe 1: Energiefluktuationen von Festkörpern (*12 Punkte*)

a) Gegeben sei die Zustandssumme

$$Z(\tau) = \sum_s \exp\left(-\tfrac{\varepsilon_s}{\tau}\right),$$

wobei die Summe über alle Zustände s des Systems genommen wird, $\tau = k_B T = 1/\beta$ und $\varepsilon = \sum_s \varepsilon_s$. Die mittlere Energie des Systems ist gegeben durch

$$U = \langle \varepsilon \rangle = \sum_s \varepsilon_s \frac{\exp\left(\frac{\varepsilon_s}{\tau}\right)}{Z} = \tau^2 \frac{\partial}{\partial \tau} \ln(Z).$$

Das System soll ein konstantes Volumen besitzen und an ein Wärmebad gekoppelt sein. Zeigen Sie, dass für das quadratische Mittel der Energiefluktuation $\langle(\varepsilon - \langle\varepsilon\rangle)^2\rangle$ folgende Relation gilt:

$$\langle(\varepsilon - \langle\varepsilon\rangle)^2\rangle = \tau^2 \left(\frac{\partial U}{\partial \tau}\right)_V.$$

Hinweis: Führen Sie die Multiplikation $(\cdots)^2$ im obigen Mittelwert explizit aus.

(*8 Punkte*)

b) Betrachten Sie nun einen Festkörper mit N Atomen, dessen Temperatur innerhalb des Gültigkeitsbereichs des Debye-T^3 Verhaltens liegt (Sie dürfen also die Formel aus Übungsblatt 9 verwenden), welcher sich in Kontakt mit einem Wärmereservoir befindet. Zeigen Sie, dass

$$\frac{\langle(\varepsilon - \langle\varepsilon\rangle)^2\rangle}{\langle\varepsilon\rangle^2} \approx \frac{0.07}{N}\left(\frac{\theta_{\text{Debye}}}{T}\right)^3$$

gilt. (*4 Punkte*)

Aufgabe 2: Graphen (*18 Punkte*)

Eine ein-atomare Schicht von Kohlenstoff in der Graphit-Modifikation bezeichnet man als Graphene[1] (siehe Abbildung 1, obere linke Abbildung).
Dieses erst vor kurzem isolierte Material ist ein perfekt zweidimensionales Halb-Metall dessen Dispersionsrelation in der Nähe des chemischen Potentials (also an der Grenze zwischen Valenz- und Leitungsband) gegeben ist durch[2]

$$\varepsilon(k) = \varepsilon_0 \pm atk, \tag{1}$$

[1] Im Einklang mit den Abbildungen werden wir englische Bezeichnungen benutzen.
[2] Andere Halbmetalle wie z.B. Gallium Arsenide weisen meist eine quadratische Dispersionsrelation in der Nähe des chemischen Potentials auf.

wobei a und t Konstanten sind, welche jeweils die Kohlenstoff-Kohlenstoff Bindungslänge und die Kopplung zwischen den zwei Atomen einer Einheitszelle beschreiben und $k = |\mathbf{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ gilt.
Wir nehmen im Folgenden an, dass $\varepsilon_0 = 0$ gilt und betrachten ein Rechteck der Länge L und Breite W welches aus lauter hexagonalen Graphenzellen aufgebaut ist. Zur Herleitung von (1) wurden zudem *periodische Randbedingungen* vorausgesetzt.

a) Die Zustandsdichte berechnet sich aus

$$D(E) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - \varepsilon(\mathbf{k})). \tag{2}$$

Finden Sie einen Ausdruck für die Zustandsdichte von *Graphene* im Kontinuumslimes (d.h. es erstrecken sich Millionen von Einheitszellen in Richtung L und W) und skizzieren Sie diese.

(*5 Punkte*)

b) Finden Sie einen Ausdruck für die Zustandsdichte von einer *Carbon nanotube* (siehe Abbildung 1, untere linke Abbildung) im Kontinuumslimes (d.h. in Richtung W erstrecken sich nur relativ wenige hexagonale Einheitszellen) und überlegen Sie sich (ohne die Zustandsdichte aufzutragen), worin der grösste Unterschied zu der Zustandsdichte in a) liegt.

(*7 Punkte*)

Wir betrachten nun im folgenden Fermionen mit einer Zustandsdichte der Form

$$D(E) = \begin{cases} D_0|E| : & -E_c \leq E \leq E_c \\ 0 : & \text{sonst} \end{cases} \tag{3}$$

wobei E_c einen positiven cutoff ist. Dies beschreibt grob die Zustandsdichte von Graphene. Wie oben nehmen wir an, dass sich das chemische Potential μ bei $\varepsilon_0 = \mu = 0$ befindet.

c) Zeigen Sie, dass die mittlere Teilchendichte bei der gegebenen Zustandsdichte (3) unabhängig von der Temperatur ist.

(*4 Punkte*)

d) Skizzieren Sie die Besetzung $n(E) = f_{\text{FD}}(E)D(E)$ für $\mu = 0$ für die beiden Grenzfälle $k_BT \ll E_c$ und $k_BT \gg E_c$. Dabei ist $f_{\text{FD}}(E)$ die Fermi-Dirac Verteilung

$$f_{\text{FD}}(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E}{k_BT}\right) z^{-1} + 1},$$

mit Fugazität $z = \exp\left(\frac{\mu}{k_BT}\right)$. Interpretieren Sie das Ergebnis.

(*2 Punkte*)

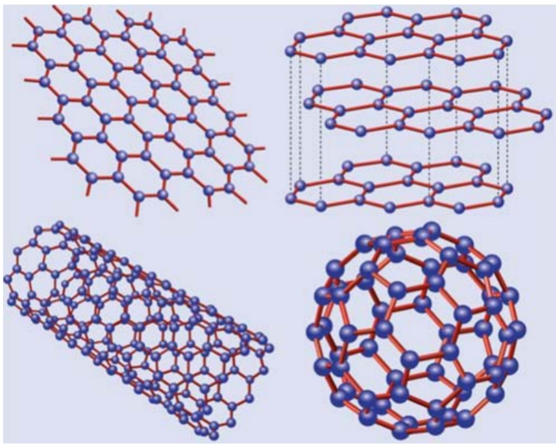

Abbildung 1: Oben links: *Graphene*, Wabenförmiges Gitter von Kohlenstoff Atomen. Oben rechts: *Graphite*, meherere Schichten von Graphen. Unten links: *Carbon nanotube*. Unten rechts: *Fullerenes* (Englische Bezeichnungen). *Bild-Quelle: A. H. Neto et al., The electronic properties of graphene, Rev. Mod. Phys. 81 109*

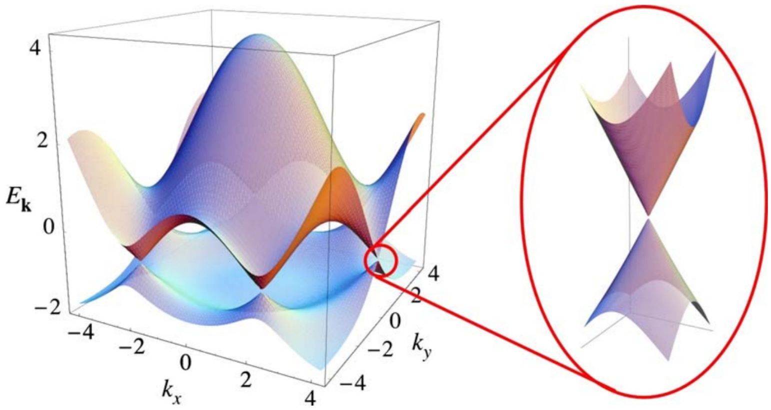

Abbildung 2: Elektronische Dispersionsrelation von Graphen (beachten Sie das Wabenmuster nahe der Fermienergie $E = 0$). Die Stellen, an denen Valenz- und Leitungsband sich berühren sind sogenannte Dirac-Punkte. *Bild-Quelle: A. H. Neto et al., The electronic properties of graphene, Rev. Mod. Phys. 81 109*