11 1D Elektronengas

Besprechung als Präsenzübung : Mo, 22.1.2018

Aufgabe 22 : Zustandsdichte eines 1D Elektronengas

Es ist technologisch möglich "Quantendrähte" herzustellen, in denen sich Elektronen nur in einer Dimension bewegen können. Dadurch reduziert sich auch die Dispersionsrelation der Elektronen auf eine Dimension. Berechnen Sie die energetische Zustandsdichte $g(E)$ von eindimensionalem Elektronengas und skizzieren Sie das Ergebnis.

Hinweis: Nehmen Sie hierfür an, dass sich die Elektronen frei entlang der z-Richtung im konstanten Potenzial *V(z)*=0 bewegen und berücksichtigen Sie dabei periodische Randbedingungen. Der z-Anteil der Schrödinger-Gleichung und dessen Lösungsansatz für einen Quantendraht der Länge L_z lauten entsprechend:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(z) = E\Psi(z)$$

mit dem Lösungsansatz

$$\Psi(z) = \frac{1}{\sqrt{L_z}}e^{ik_z z}$$

Lösung:
Daraus ergeben sich für den z-Anteil der Energieeigenwerte:

$$E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

Mit der periodischen Randbedingung $\Psi(z+L_z) = \Psi(z)$ ergibt sich:

$$k_z = \frac{2\pi}{L_z}m_z,$$

wobei m_z eine ganzzahlige Quantenzahl ist.
Aufgrund der makroskopischen Dimension von L_z, kann die Quantisierung entlang der z-Achse vernachlässigt werden. E_z ist quasikontinuierlich.
Für den x und y-Anteil gelten analoge Gleichungen:

$$E_{x/y} = \frac{\hbar^2 k_{x/y}^2}{2m}$$

Die Quantisierung kann dabei jedoch nicht mehr vernachlässigt werden. Mit der Randbedingung $\Psi(0) = \Psi(x/y = L_{x/y}) = 0$ ergeben sich die diskreten k-Werte:

$$k_{x/y} = \frac{\pi}{L_{x/y}}m_{x/y}$$

Die Energie eines Elektrons in einem solchen Quantendraht ergibt sich damit zu:

$$E^{(1D)} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = E_{kont} + E_{diskr} = \frac{\hbar^2}{2m}k_z^2 + \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{m_x^2}{L_x^2} + \frac{m_y^2}{L_y^2}\right)$$

Allgemein gilt:

$$g(k)dk = g(E)dE \Rightarrow g(E) = g(k)\left(\frac{dE}{dk}\right)^{-1} = \frac{dN(k)}{dk}\left(\frac{dE}{dk}\right)^{-1}$$

Dabei wird die Änderung der erlaubten Zustände N im k-Raum in Abhängigkeit von k durch die differenzielle Zustandsdichte $g(k) = \frac{dN(k)}{dk}$ beschrieben.
Die Zustände $dN(k)$ im Intervall $[k, k+dk]$ können abgezählt werden. In einer Dimension gilt[1][2][3]:

$$dN(k) = \frac{2\cdot 2\cdot dk}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)} = \frac{2L}{\pi}dk$$

Aus der Dispersionsrelation für das freie Elektron ergibt sich:

$$\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m}$$

[1] Für das Volumen eines Zustands im k-Raum gilt: $d^n k = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^n$, mit n=1,2,3 Dimension des Systems.
[2] Jeder Zustand im k-Raum kann nach dem Pauli-Prinzip mit zwei Elektronen besetzt werden.
[3] Anderer Faktor 2: Berücksichtigung gleicher k-Vektor Beträge $\Rightarrow$ In 1D Summe über k und $-k$-Beiträge.

und

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$$

Daraus folgt für den z-Beitrag zur energetischen Zustandsdichte:

$$g(E) = \frac{L_z\sqrt{2m}}{\pi\hbar}\frac{1}{\sqrt{E}}\left(\propto \frac{1}{\sqrt{E}}\right)$$

Energetische Zustandsdichte für die verschiedenen Dimensionen:

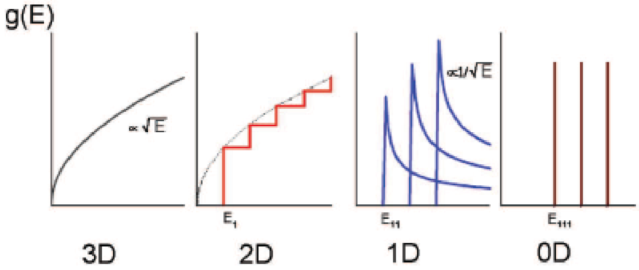

Abbildung 6: Die Stufen in ein- bzw. zweidimensionalen Systemen kommen durch die Quantisierung in den beschränkten Raumrichtungen zustande. Im nulldimensionalen Elektronengas sind nur noch diskrete Energien erlaubt.