



Московский государственный ТЕХнический
университет
им. Н.Э.Баумана

Кафедра "Технологии Приборостроения"

Отчет по «Домашнему заданию №2»

Студент: Е. Ю. Власов
Преподаватель: Н. А. Ветрова

Москва, 2017

Содержание

1. Условие	2
2. Решение	3
3. Расчет в MATLAB	7

1. Условие

Рассчитайте химический потенциал, если известна концентрация электронов $n = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и температура $T = 300 \text{ К}$. Эффективная масса $m_{eff} = 0.067m_0$. Сравните результаты с приближением второго и четвертого порядка.

2. Решение

По определению, число состояний G заданного значения энергии E , определяется как:

$$G = J_z \frac{V_{phase}}{(2\pi\hbar)^3}$$

где J_z – определяет число возможных проекций спина, тогда для любого электрона $J_z = 2$. Плотность состояний же находится как отношение числа состояний на интервал энергии, или, переходя к дифференциалам

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

Откуда следует, что $dE = \frac{dG}{g(E)}$.

С другой стороны известно, что фермионы подчиняются статистике Ферми-Дирака и среднее число электронов n с энергией E и определяется как

$$\langle n \rangle = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{kT}}}$$

Очевидно, что $n = \frac{N}{V}$, тогда, определив N как

$$N = \int_0^{+\infty} g(E) dE$$

для случая $T = 0$ получаем, что

$$E_F(0) = \frac{(3\pi^2\hbar^3 n)^{\frac{2}{3}}}{2m}$$

Для описания случая ненулевых температур прибегают к использованию специальной термодинамической функции $\mu = \mu(T)$, применяемой для описания состояний систем с непостоянным числом частиц. Физически данная функция отражает количество энергии, необходимое для добавления одной частицы в систему за вычетом совершенной работы, затрачиваемой на добавление этой частицы. Для случая $T = 0$ имеем, что $\mu(T) = \mu(0) = E_F$, что представляет из себя максимальную возможную энергию ферми-частиц в основном состоянии при нулевых температурах.

Как было показано выше, концентрацию частиц системы можно найти в явном виде из уравнения

$$N = \int_0^{+\infty} g(E) dE = \int_0^{+\infty} \frac{m\sqrt{2mE}}{\pi^2\hbar^3} \cdot \frac{1}{1 + e^{\frac{E-\mu}{kT}}} dE$$

Для того, чтобы в явной форме выразить μ воспользуемся следующим преобразованием. Произведем замену переменной $z = \frac{E-\mu}{kT}$. Тогда пределы интегрирования $E = 0 \rightarrow z = -\frac{\mu}{kT}$, $E \rightarrow +\infty \longleftrightarrow z \rightarrow +\infty$. А дифференциал представим в виде

$$dE = d(kTz + \mu) = kTdz$$

Подставляя в предыдущую формулу получим выражение

$$n = kT \int_{-\frac{\mu}{kT}}^{+\infty} g(\mu + kTz) \frac{1}{1 + e^z} dz$$

Пользуясь свойством аддитивности интеграла разобьем интегральную сумму на два слагаемых

$$n = kT \int_{-\frac{\mu}{kT}}^0 \frac{g(\mu + kTz)}{1 + e^z} dz + kT \int_0^{+\infty} \frac{g(\mu + kTz)}{1 + e^z} dz$$

Затем в первом слагаемом выполним эквивалентное преобразование, которое заключается в изменении пределов интегрирования, а так же замене знака переменной $z \rightarrow -z$

$$n = kT \int_0^{\frac{\mu}{kT}} \frac{g(\mu - kTz)}{1 + e^{-z}} dz + kT \int_0^{+\infty} \frac{g(\mu + kTz)}{1 + e^z} dz$$

Очевидна справедливость тождественного преобразования выражения

$$\frac{1}{1 + e^{-z}} = 1 - \frac{1}{1 + e^z}$$

и подставляя в исходное выражение имеем

$$n = kT \int_0^{\frac{\mu}{kT}} g(\mu - kTz) dz - kT \int_0^{\frac{\mu}{kT}} \frac{g(\mu - kTz)}{1 + e^z} dz + kT \int_0^{+\infty} \frac{g(\mu + kTz)}{1 + e^z} dz$$

В первом слагаемом выполним замену $\varepsilon = \mu - kTz$, $d\varepsilon = -kTdz \rightarrow dz = -\frac{1}{kT}d\varepsilon$. Тогда пределы

$$\begin{aligned} z = 0 &\rightarrow \varepsilon = \mu \\ z = \frac{\mu}{kT} &\rightarrow \varepsilon = 0 \end{aligned}$$

Тогда

$$n = \int_0^{\mu} g(\varepsilon) d\varepsilon - kT \int_0^{\frac{\mu}{kT}} \frac{g(\mu - kTz)}{1 + e^z} dz + kT \int_0^{+\infty} \frac{g(\mu + kTz)}{1 + e^z} dz$$

Из графического анализа становится ясно разложение первого слагаемого выражения как сумма площадей анализируемой части плоскости

$$\int_0^{\mu} g(\varepsilon) d\varepsilon = n - (E_F - \mu)g(E_F)$$

И подставляя в исходное выражение имеем

$$n = n - (E_F - \mu)g(E_F) - kT \int_0^{\frac{\mu}{kT}} \frac{g(\mu - kTz)}{1 + e^z} dz + kT \int_0^{+\infty} \frac{g(\mu + kTz)}{1 + e^z} dz$$

Полагая $\mu \gg kT$ и собирая интеграл получим выражение вида

$$-(\mu - E_F)g(E_F) = kT \int_0^{+\infty} \frac{g(\mu - kTz) + g(\mu + kTz)}{1 + e^z} dz$$

Выражая μ из последнего имеем выражение в явном виде

$$\mu = E_F - \frac{kT}{g(E_F)} \int_0^{+\infty} \frac{g(\mu + kTz) - g(\mu - kTz)}{1 + e^z} dz$$

Выполним разложение в ряд Тейлора в точке подинтегральных выражений

$$\begin{aligned} g(\mu + kTz) &= g(\mu) + zkT\dot{g}(\mu) + \frac{z^2}{2}(kT)^2\ddot{g}(\mu) + \frac{z^3}{6}(kT)^3\ddot{\ddot{g}}(\mu) \\ g(\mu - kTz) &= g(\mu) - zkT\dot{g}(\mu) + \frac{z^2}{2}(kT)^2\ddot{g}(\mu) - \frac{z^3}{6}(kT)^3\ddot{\ddot{g}}(\mu) \end{aligned}$$

Подставляя и упрощая выражения, а также воспользовавшись табличными интегралами приходим к конечному виду уравнения

$$\mu = E_F - \frac{\pi^2}{12} \frac{(kT)^2}{E_F} - \frac{7}{8} \frac{\pi^4}{120} \frac{(kT)^4}{(E_F)^3}.$$

Теперь осталось расписать реализацию численного метода нахождения значений функций $\mu = \mu(T)$ для сравнений показаний аналитического и численного решения.

Исходя из конечности интервалов разбиения E заменим интеграл интегральной суммой, тогда точность расчета будет зависеть от числа отрезков разбиения. Тогда полагая размерность векторов E и μ равной числу точек разбиения (1000). Тогда запишем $\mu_{min} = \mu[0] = kT \log \left(\frac{n}{2} \left[\frac{2\pi\hbar^2}{m_{eff}k_B T} \right]^{\frac{3}{2}} \right)$, $\mu_{max} = E_F$, $E[0] = E_{min} = 0$, $E_{max} = E_F + 15kT$. Тогда μ и E будут представлены 3-мерными матрицами.

$$\mu_{max} = E_F;$$

$$\bar{\mu}_{min} = \left[k_B T_1 \log \left(\frac{n}{2} \left[\frac{2\pi\hbar^2}{m_{eff}k_B T_1} \right]^{\frac{3}{2}} \right), \quad \dots, \quad k_B T_{countT} \log \left(\frac{n}{2} \left[\frac{2\pi\hbar^2}{m_{eff}k_B T_{maxT}} \right]^{\frac{3}{2}} \right) \right];$$

$$E_{min} = 0;$$

$$\bar{E}_{max} = [E_F + 15k_B T_1, \quad E_F + 15k_B T_2, \quad \dots, \quad E_F + 15k_B T_{maxT}].$$

$$\mu = \begin{bmatrix} \mu_{min,1} & \dots & \mu_{max} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \mu_{min,maxT} & \dots & \mu_{max} \end{bmatrix}$$

$$E = \begin{bmatrix} E_{min} & \dots & E_{max,1} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \dots & \vdots \\ E_{min} & \dots & E_{max,maxT} \end{bmatrix}$$

В этом случае число частиц будет определяться выражением

$$N = \sum_{i=1}^{n_{points}} F(E);$$

$$F(E) = g(E)f(E);$$

$$N_{i=1}^{n_{points}} = \frac{E_{max,i}}{n_{points}} \sum_{j=1}^{n_{points}} \frac{m\sqrt{2m}}{\pi^2 \hbar^3} \frac{\sqrt{E_j}}{e^{\frac{E_j - \mu_j}{k_B T_i}} + 1}.$$

Минимизируя найдем необходимое количество

$$\left| \frac{N_j^{countT} - n}{n} \right|.$$

3. Расчет в MATLAB

Приведенная постоянная Планка	$\hbar = 1.0546 \cdot 10^{-34}$	hbar = 1.0546e-34	$J \cdot s$
Масса свободного электрона	$m_0 = 9.11 \cdot 10^{-31}$	m0 = 9.11e-31	kg
Переход от Дж в эВ	$J2eV = eV2J^{-1}$	J2eV=eV2J^(-1);	1/Кл
Константа Больцмана	$k = 1.38 \cdot 10^{-23}$	k = 1.380e-23	$J \cdot K^{-1}$

Входные данные:

Концентрация электронов	10^{18}	10e18	cm^{-3}
Температура	[1:1000]	1:1000	K

```

clear;
clc;
load ('const_here.mat');

n = 1e24;
m_eff = 0.067*m0;

E_f = FermiEnergy(n,m_eff);
T_f = E_f/k;
steps = 100;
count = 1000;
%count = 10000;
T = linspace(0.1, 1.2*T_f, steps);

%AnalyticalPart
%mu_2 = mu_analytical_2nd(T,m_eff,n);
%mu_4 = mu_analytical_4thbar(T,m_eff,n);

%NumericaPart
i = 1;
for t = linspace(0.1,1.2*T_f,steps)
mu_2(i) = E_f-pi^2/12.*(k*t).^2./(E_f);
mu_4(i)= E_f-pi^2/12.*(k*t).^2./(E_f)-(7*pi^4)/(960)*(k.*t).^4./
(E_f).^3;

mu_min=k*t*log(n/2*((2*pi*hbar^2)/(m_eff.*k.*t))^(3/2));
mu=linspace(mu_min,E_f,count);

E_max=15*k*t+E_f;
E=linspace(0,E_max,count)';
MU=repmat(mu,count,1);
EB=repmat(E,1,count);
delta=E(2)-E(1); %no matter which E(i) - E(i-1) was taken for this

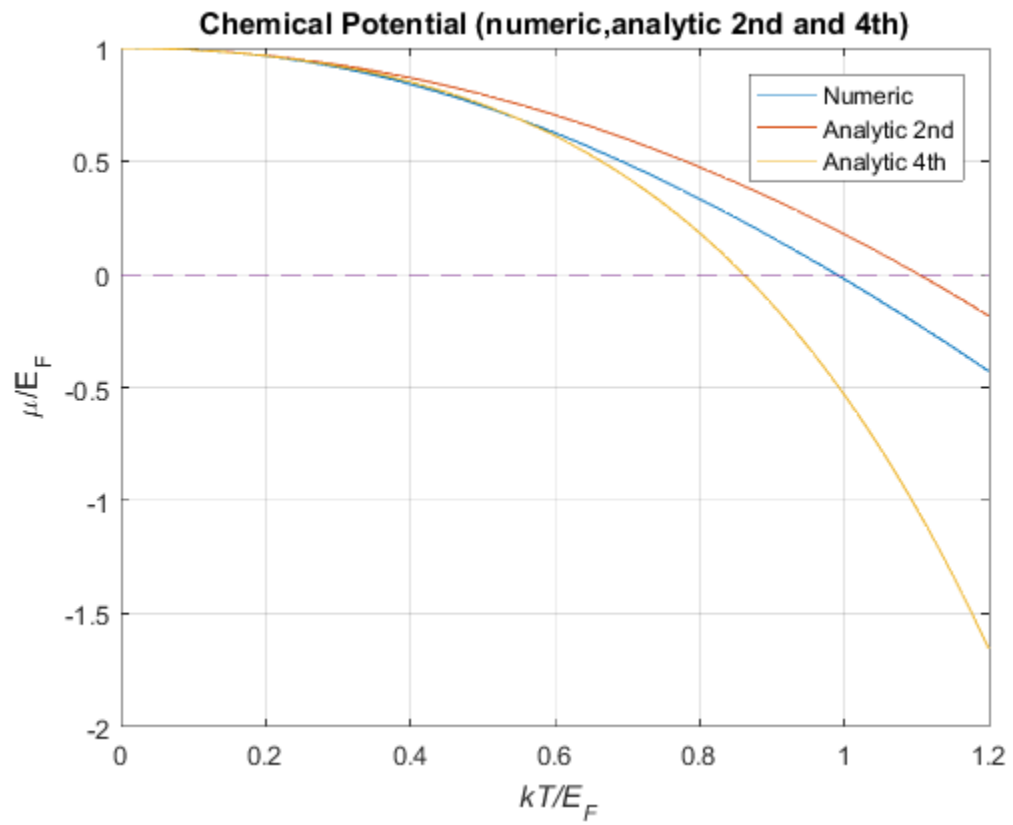
g_part=(sqrt(2*m_eff)*m_eff)/(pi^2*hbar^3);
F=g_part*(sqrt(EB)./(1+exp((EB-MU)/(k*t))));
N=sum(F)*delta;

[demp,indicator]=min(abs((N-n)/n));
mu_numeric(i)=mu(indicator);
i=i+1;
end
%Plotting part
plot_mu(T,mu_numeric,mu_2,mu_4,E_f,steps);

T= 300;
n = 1e24;
solving300K(T,n,m_eff,count);

```

Analytical Solving for μ 2nd = 0.04438496 eV
Analytical Solving for μ 4th = 0.04241452 eV
Numerical Solving μ = 0.05410197 eV



Published with MATLAB® R2016a