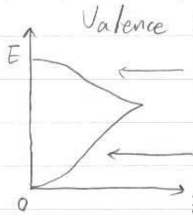
Home Problem Set #4 Due : October 1, 2014

1. Are there more electrons on the bottom or in the middle of the valence band of a metal? Explain.

1. Valence band of metal



← high energy : near the Brillounin zone edge

← low energy : parabola (like free electrons)

electron 은 2개의 spin state 를 가지고, fermi-dirac distribution 을 따르므로,

population density : $N(E) = 2 \cdot Z(E) \cdot F(E)$

band 의 bottom 은 그림에서와 같이 density of state 가 작다. band 의 middle 은 bottom에 비해 많은 density of state 를 가지고 있는데, 실제로 전자의 수 ($N(E)$)를 고려해주기 위해서는 전자가 차 있을 확률 $F(E)$를 고려해야 한다. bivalent metal 의 경우 fermi energy가 valence band 의 아래부분에 존재하게 되는데, (Fig 7.6 참고) 이 때에도 $T>0K$ 일 때는 fermi distribution 의 Boltzmann tail 부분으로 인해 band 의 중간부분에도 전자가 존재할 확률이 존재하게 된다. 즉 우리가 실제로 다루는 영역 ($T>0K$) 에서는 band 의 middle 부분에 더 많은 전자가 존재한다.

2. At what temperature can we expect a 10% probability that electrons in silver have an energy which is 1% above the Fermi energy? (E_F = 5.5 eV)

2. $$F(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)+1}$$

silver : $E_F = 5.5\,eV$, 1% above : $5.5 \times 1.01 = 5.555\,(eV)$, $F(E)=0.1$

$$\frac{1}{F(E)} - 1 = \exp\left(\frac{E-E_F}{k_B T}\right)$$

$$\frac{E-E_F}{k_B T} = \ln\left(\frac{1}{F(E)}-1\right) \quad \therefore T = \frac{E-E_F}{k_B \ln\left(\frac{1}{F(E)}-1\right)} = \frac{5.555-5.5}{8.62\times10^{-5}\times \ln 9} = 290.4\,(K)$$

3. Calculate the density of states of 1 m^3 of copper at the Fermi level ($m^* = m_0$, E_F = 7 eV). *Note* : Take 1eV as energy interval. (Why?)

3. $$Z(E) = \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m_0}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot E^{1/2} = \frac{1}{4\pi^2}\left(\frac{2\times9.11\times10^{-31}}{(1.054\times10^{-34})^2}\right)^{3/2} \cdot (7\times1.6\times10^{-19})^{1/2} = 5.63\times10^{46}$$

$= 5.63\times10^{46}$ (energy states / J) ← 1J은 너무 큰 단위이다.

$= 9.01\times10^{27}$ (energy states / eV) ← 실질적으로 의미 있는 정보

4. The density of states at the Fermi level (7 eV) was calculated for 1cm^3 of a certain metal to be about 10^{21} energy states per electron volt. Someone is asked to calculate the number of electrons for this metal using the Fermi energy as the maximum kinetic energy which the

electrons have. He argues that because of the Pauli principle, each energy state is occupied by two electrons. Consequently, there are 2 x 10^{21} electrons in that band.

(a) What is wrong with that argument?

(b) Why is the answer, after all, not too far from the correct numerical value?

4. $E_F = 7\,eV$, at the E_F : 10^{21} energy states/eV (금속내의 electron 은 free e' 만 고려)

(a) the number of electrons for this metal : 2×10^{21} electrons → wrong!

이것은 Fermi energy level 근방에 있는 전자의 수만 고려한 것이다. 실제 자유전자의 수는 band 내의 모든 energy state를 고려해야 한다.

(b) $N^* = \int_0^{E_F} N(E)dE = \frac{V}{3\pi^2}\left(\frac{2m_0}{\hbar^2}\right)^{3/2} E_F^{3/2} = \frac{1\times10^{-6}}{3\pi^2}\cdot\left(\frac{2\times9.11\times10^{-31}}{(1.054\times10^{-34})^2}\right)^{3/2}(7\times1.6\times10^{-19})^{3/2} = 8.41\times10^{22}$ electrons.

(a)에서 계산한 값과 한 order 정도 차이가 난다. 크게 다르지 않은 까닭은 Fermi energy 근방의 density of state 가 크기 때문이다.

5. (a) Calculate the number of free electrons per cubic centimeter in copper, assuming that the maximum energy of these electrons equals the Fermi energy ($m^* = m_0$).

(b) How does this result compare with that determined directly from the density and the atomic mass of copper? Hint : Consider equation (7.5)

(c) How can we correct for the discrepancy?

(d) Does using the effective mass decrease the discrepancy?

5. (a) $N' = \frac{N^*}{V} = \frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E_F^{3/2} = \frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2\times9.11\times10^{-31}}{(1.054\times10^{-34})^2}\right)^{3/2}\cdot(7\times1.6\times10^{-19})^{3/2}$

$= 8.41\times10^{28}$ electrons/m^3 $= 8.41\times10^{22}$ electrons/cm^3

(b) eq. 7.5 $N_a = \frac{N_0\delta}{M}$ $\left(\begin{array}{l}\delta_{Cu} : 8.94\ g/cm^3 \\ M_{Cu} : 63.546\ g/mol\end{array}\right)$ Copper atom 하나당 한개의 free e' 고려.

$\therefore N = \frac{6.023\times10^{23}\times8.94}{63.546} = 8.47\times10^{22}$ electrons/cm^3

(a) 에서 구한 electron 의 수보다 약간 큰 값을 가진다

(c) (a)에서 구한 방법은 free electron model 을 기반으로 한다. density of states 가 $E^{1/2}$에 비례 (E vs Z(E) : parabola) 한다고 생각하지만, 실제 정확히 그렇지는 않다. (b)의 경우도 실제 계산상으로 구한 원자 하나당 자유전자가 하나씩 존재한다는 것도 일부 오차를 포함하고 있을 것이다.

(d) effective mass 를 사용하는 것은 실제의 E vs. k 의 정보를 이용하는 것이다. $m^* = m_0$ 라는 것은 E vs. k 가 ideal parabolic 을 의미한다. 따라서 effective mass 를 이용할 경우 discrepancy 를 줄일 수 있다 ((b)에서 구한 값이 실험적으로 더 ~~높은~~ 값이라고 볼 때)

6. We stated in the text that the Fermi distribution function can be approximated by classical

Boltzmann statistics if the exponential factor in the Fermi distribution function is significantly larger than one.

(a) Calculate $E - E_F = nk_BT$ for various values of n and state at which value for n,

$$\exp\left(\frac{E - E_F}{k_BT}\right)$$

can be considered to be "significantly larger" than 1 (assume T = 300 K).

(b) For what *energy* can we use Boltzmann statistics? (Assume E_F = 5 eV and $E - E_F = 4k_BT$)

6. (a) $E - E_F = nkT$, $T = 300\,K$

$$F(E) = \frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-E_F}{k_0T}\right)} \approx \exp\left(-\frac{E-E_F}{k_0T}\right)$$

$n=1$ $\quad E-E_F = 8.62\times10^{-5}\times300 = 2.59\times10^{-3}$ (eV)

$n=2$ $\quad E-E_F = 2\times k_0\times300 = 5.17\times10^{-3}$ (eV)

$n=4$ $\quad E-E_F = 4\times k_0\times300 = 1.03\times10^{-2}$ (eV)

$\frac{E-E_F}{k_0T} = n$ $\quad$ exp(n) 이 "significantly larger" than 1 하기 위한 기준으로, Fermi distribution 과 Boltzmann distribution 의 오차가 1% 미만이 되는 n 값을 구하자.

$\dfrac{\frac{1}{\exp(n)+1}}{\exp(-n)} = 0.99 \quad \therefore n = 4.60$ $\quad$ $n \geq 4.60$ 에서는 $\exp(n) = 99.48\ldots$ 1 보다 충분히 크다고 생각할 수 있다

(b) Boltzmann statistics 를 적용할 수 있는 범위는 $n \geq 4$ 로 두었다

$E = E_F + 4k_0T$

$= 5 + 4\times8.62\times10^{-5}\times300 = 5.10$ (eV)