

VI Das freie Elektronengas

Um ein einfaches Modell zu erhalten, macht man folgende Annahmen

- (1) Näherung freies Elektron : Keine WW Elektron – Ionenrümpfe
- (2) unabhängige Elektronen

-trotz dieser groben Annahmen, erzielt man gute Resultate

(Ohm'sches Gesetz, Wärmeleitfähigkeit)

-allerdings ist Elektronengas quantenmechanisch zu behandeln

(a) Pauli-Prinzip

(b) Statistik beschrieben durch die Fermi-Verteilung

Historie : (1) Drude-Modell == klassische Behandlung des freien Elektronengas
(~1900)

(2) Sommerfeld-Erweiterung : Übertrag des Pauli-Prinzips auf
Elektronengas

(1)+(2) Drude-Sommerfeld-Theorie

VI.1 Grundzustand

Volumen L^3 mit freien Elektronen : löse das Ein-Elektron-Problem (1+2) und fülle entsprechend dem Pauli Prinzip auf

Grundzustand == Auffüllen entsprechend dem Pauli-Prinzip
(das Ein-Elektronen-Bild bleibt in vielen modernen Theorien erhalten)

Wechselwirkungen der Elektronen → Korrelationen; aktueller Gegenstand der FKP
Hochtemperatursupraleiter
Magnetismus
Schwere Fermionen
kolossaler Magnetwiderstand

VI.1.1 Eigenzustände

wir beschreiben das Elektron im Kasten durch die Wellenfunktion :
 $\Psi(\mathbf{r})$ und den Spin τ

Schrödingergleichung für ein freies Elektron : $U=0$

$$H \cdot \Psi(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right] \cdot \Psi(\vec{r}) = E \cdot \Psi(\vec{r})$$

Lösungen sind die ebenen Wellen

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (6.2)$$

Mit der Normierung :

$$\int_V d^3r \cdot |\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})|^2 = 1 \quad (6.3)$$

Einsetzen von (6.2) in Schrödingergleichung (6.2)

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (6.4)$$

Dispersion

Ebene Wellen sind auch Eigenzustände des Impuls

$$\wp = \frac{\hbar}{i} \nabla$$

$$\wp(\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})) = \frac{\hbar}{i} \nabla \cdot \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \hbar \vec{k} \cdot \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (6.5)$$

Heisenberg'sche Unschärfe-Relation

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$$

Freies Elektronengas \Leftrightarrow delokalisierte Elektronen

Merke : Eigenzustände $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ sind klassifiziert durch \mathbf{k} und den Spin τ

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r},\tau) = |\mathbf{k}, \tau\rangle \quad (6.6)$$

\mathbf{k} und τ Quantenzahlen mit $\tau = +1/2$ und $-1/2$

VI.1.2 Randbedingungen

-wie bei den Gitterschwingungen fordern wir Randbedingungen
entweder $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r},\tau) = 0$ auf dem Rand oder periodische Randbedingungen
(letztere sind vorteilhafter)

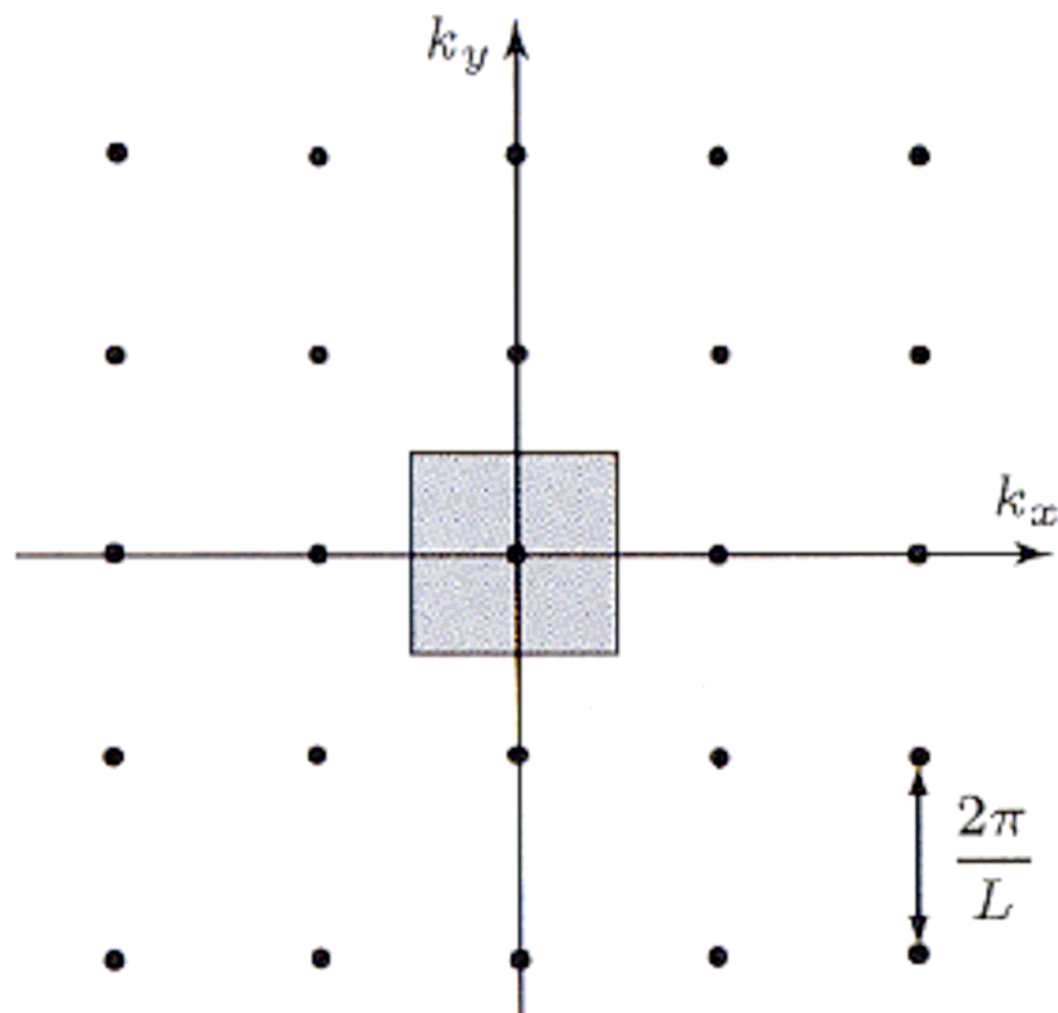
$$\Psi_{\mathbf{k}}(x,y,z,\tau) = \Psi_{\mathbf{k}}(x+L_x,y+L_y,z+L_z,\tau) \quad (6.7)$$

Damit sind wieder nur bestimmte \mathbf{k} -Vektoren erlaubt

$$k_i = 2\pi/L_i n \quad \text{mit } n \text{ ganzzahlig und } i=x,y,z \quad (6.8)$$

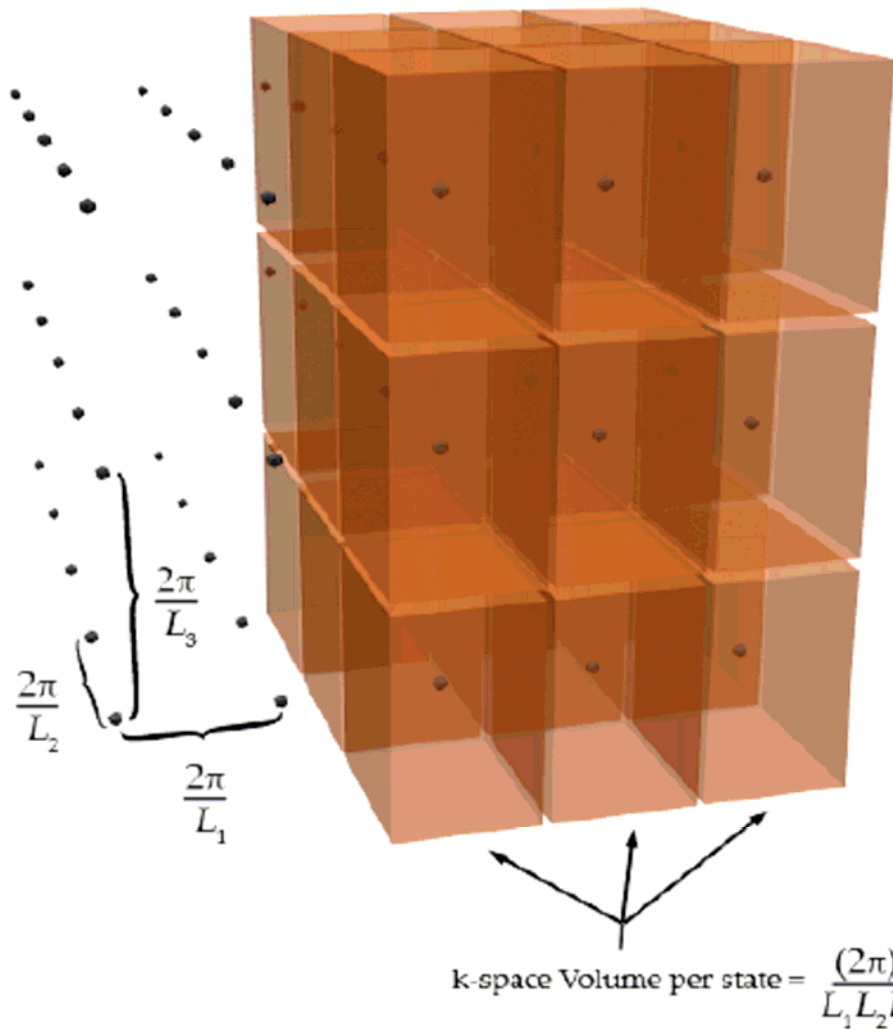
ACHTUNG : Im Gegensatz zu den Gitterschwingungen ist \mathbf{k} nicht auf
die erste Brillouin-Zone beschränkt!

zu jedem \mathbf{k} -Vektor gibt es 2 Zustände (Spin)



In 2D ist die
Fläche pro Punkt
im k - Raum:

$$\frac{F_k}{N} = \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2$$



In 3D ist die Fläche pro Punkt im k - Raum:

$$\frac{F_k}{N} = \left(\frac{2\pi}{L} \right)^3$$

In d -Dimensionen wäre die Fläche pro Punkt im k - Raum:

$$\frac{F_k}{N} = \left(\frac{2\pi}{L} \right)^d$$

VI.1.3 Zustandsdichte

Zustandsdichte = $Z(k)$ = Zahl der Zustände pro Volumen in rez. Raum

$$Z(k) = \frac{2}{\frac{2\pi}{L_x} \cdot \frac{2\pi}{L_y} \cdot \frac{2\pi}{L_z}} = 2 \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} = \frac{V}{4\pi^3} \quad (6.9)$$

Fläche konstanter Energie ist eine Kugel

Zustandsdichte $D(E)$ mit der Dispersion

$$Z(k)d^3k = D(E)dE$$

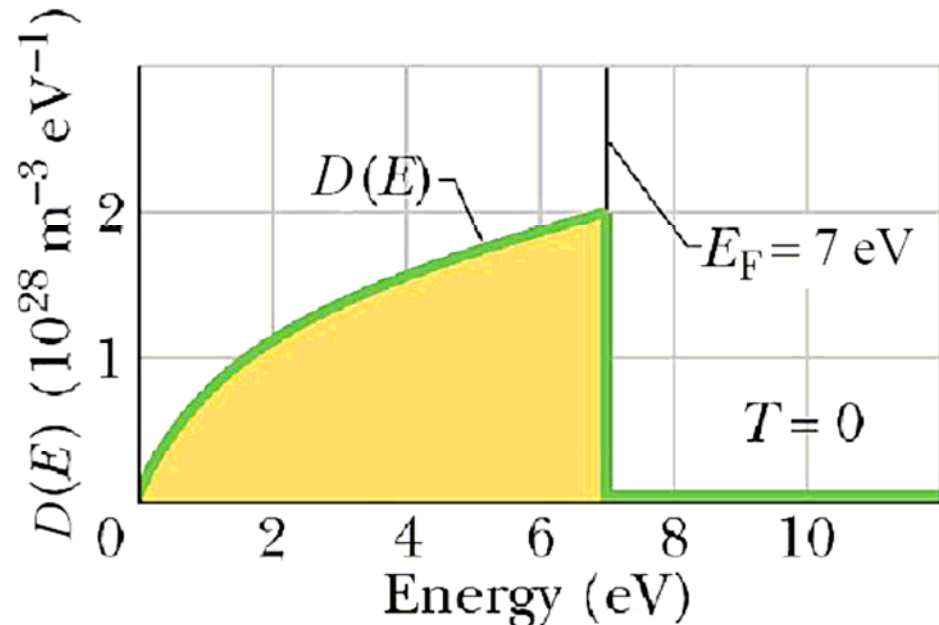
$$\Rightarrow D(E)dE = \frac{V}{4\pi^3} \cdot 4\pi k^2 dk$$

$$\Rightarrow D(E) = \frac{V}{4\pi^3} \cdot 4\pi k^2 \cdot \frac{dk}{dE}$$

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

$$\Rightarrow D(E) = \frac{V}{\pi^2} \cdot \frac{mk}{\hbar^2} = \frac{V}{\pi^2} \cdot \frac{m}{\hbar^2} \sqrt{E \cdot 2m} \cdot \frac{1}{\hbar}$$

$$\Rightarrow D(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E} \quad (6.10)$$



- Bei der phononischen Zustandsdichte hatten wir gezeigt, dass

$$D(E) = \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot 2 \cdot \int \frac{dS_E}{|\nabla_k E|}$$

$$|\nabla_k E| = \frac{\hbar^2 k}{m}$$

$$\Rightarrow D(E) = \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot 2 \cdot 4\pi k^2 \cdot \frac{m}{\hbar^2 k} = \frac{V}{(\pi)^2} \frac{k \cdot m}{\hbar^2}$$

Wie oben !

Bemerkung : Phononen $E \sim k$ \rightarrow $g(E)$ steiler

Elektronen $E \sim k^2$ \rightarrow $D(E)$ flacher

VI.1.4 Fermi-Kugel

-Lösung des Problems für ein Elektron nun bekannt

-Auffüllen entsprechend des Pauli-Prinzips, so dass Gesamtenergie minimal bleibt
d.h. bis alle N Elektronen verteilt sind :

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

$$= \frac{h^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

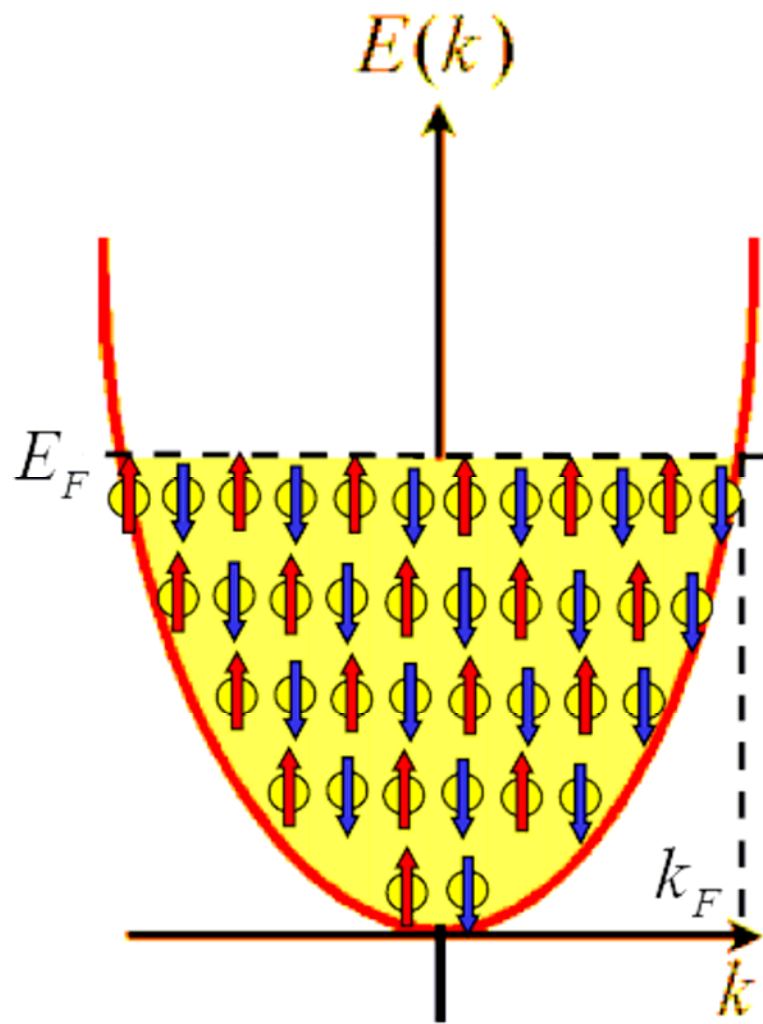
Jetzt sollen N Elektronen auf die Zustände verteilt werden.

⇒ Auffüllen bis zur Fermi-Energie:

$$E_F = \frac{\hbar^2 \vec{k}_F^2}{2m}$$



Enrico Fermi
(1901 - 1954)
Nobelpreis 1938



**Elektronenparabel aufgefüllt
bis zur Fermi-Energie**

Fermi-Energie: $E_F = \frac{\hbar^2 \vec{k}_F^2}{2m}$

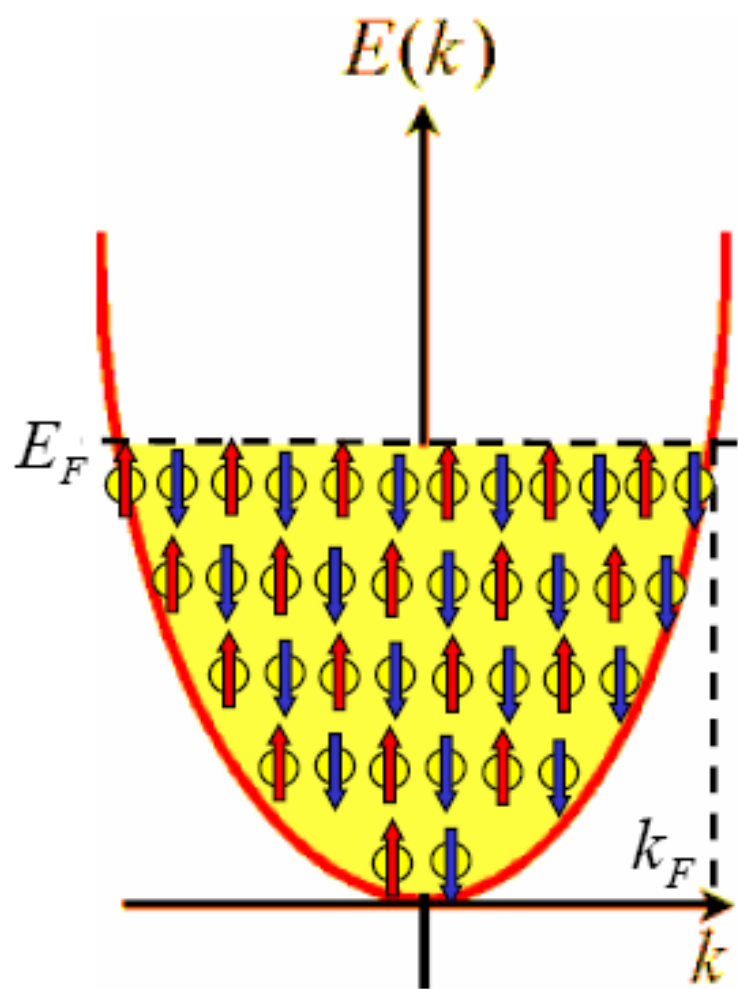
$$N = \underbrace{2}_{\text{Spin-Zustände}} \cdot \underbrace{\frac{4\pi k_F^3/3}{(2\pi/L)^3}}_{\text{Zahl der Zustände im } k\text{-Raum}} = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3$$

Elektronendichte: $n = N/V$

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}, \quad E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$$

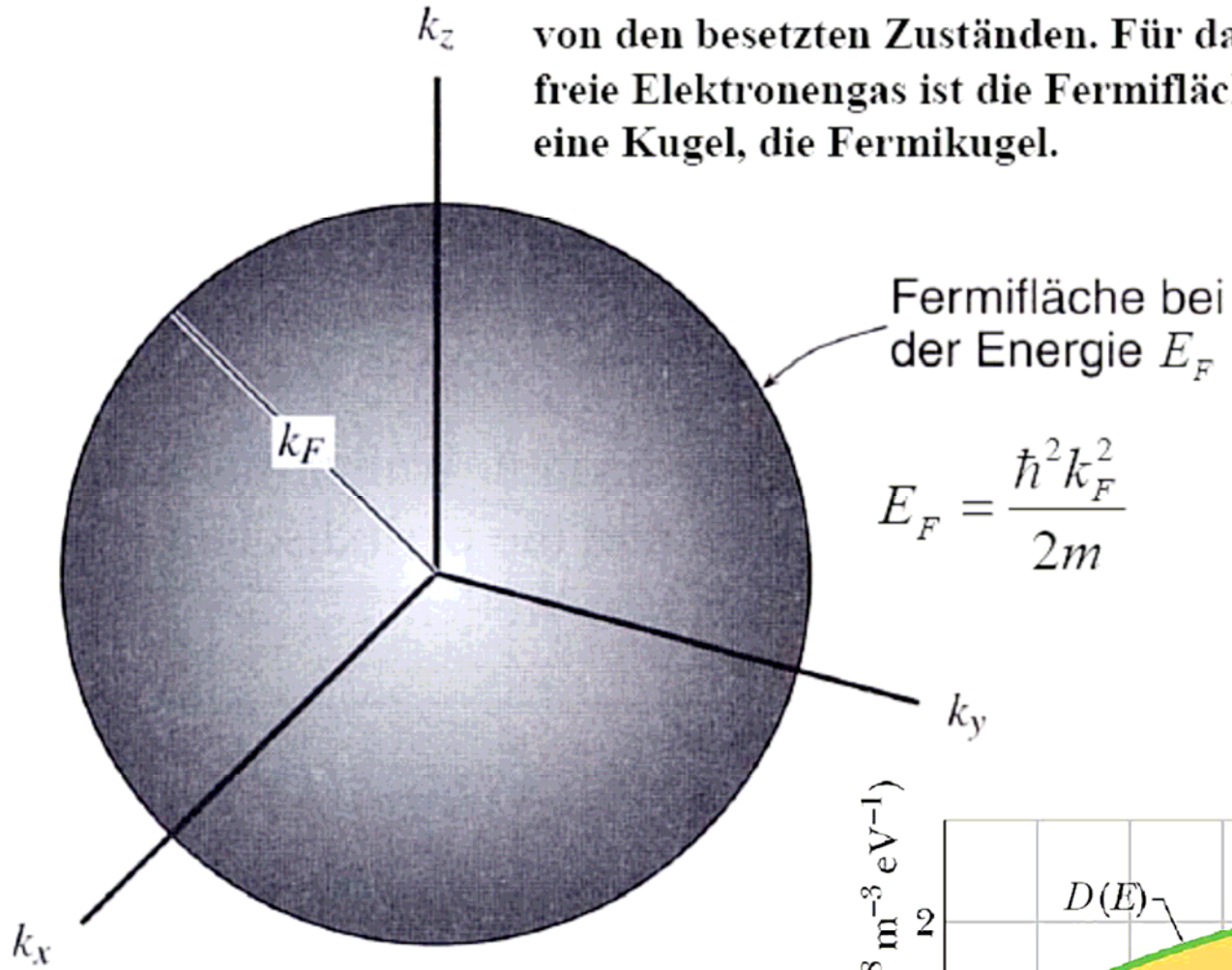
Geschwindigkeit der Elektronen auf der Fermi-Fläche:

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m} = \frac{\hbar}{m} (3\pi^2 n)^{1/3}$$

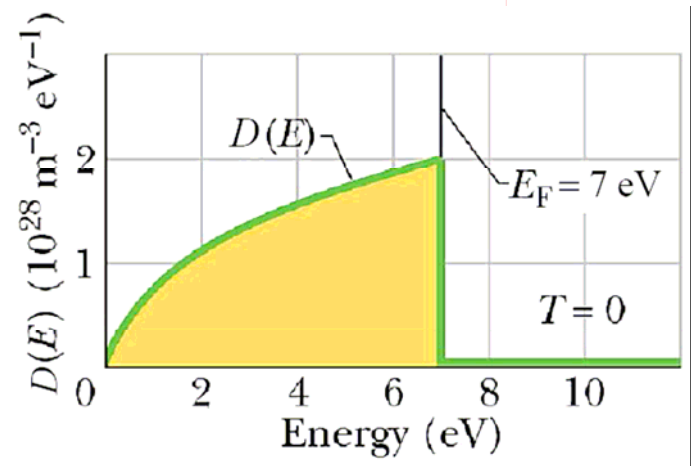


Elektronenparabel aufgefüllt bis zur Fermi-Energie

Die Fermifläche trennt die unbesetzten von den besetzten Zuständen. Für das freie Elektronengas ist die Fermifläche eine Kugel, die Fermikugel.



$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$



Fermi-Energie : höchste besetzte Energie

Fermi-Fläche : Oberfläche im k-Raum mit $E(\mathbf{k})=E_{\text{fermi}}=E_F$

Fermi-Vektor : k_f mit $E(k_F)=E_F$ Radius der Fermi-Kugel

$$N = \int_0^{k_F} Z(K) d^3k = \int_0^{k_F} 2 \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi k^2 \cdot dk = \frac{V}{(3\pi^2)} \cdot k_F^3$$

\Rightarrow

$$k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3} = (3\pi^2 n)^{1/3} \quad (6.11)$$

Fermi-Vektor

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

Fermi-Energie

$$T_F = \frac{E_F}{k_B}$$

Fermi-Temperatur

$$\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F}$$

Fermi-Wellenlänge

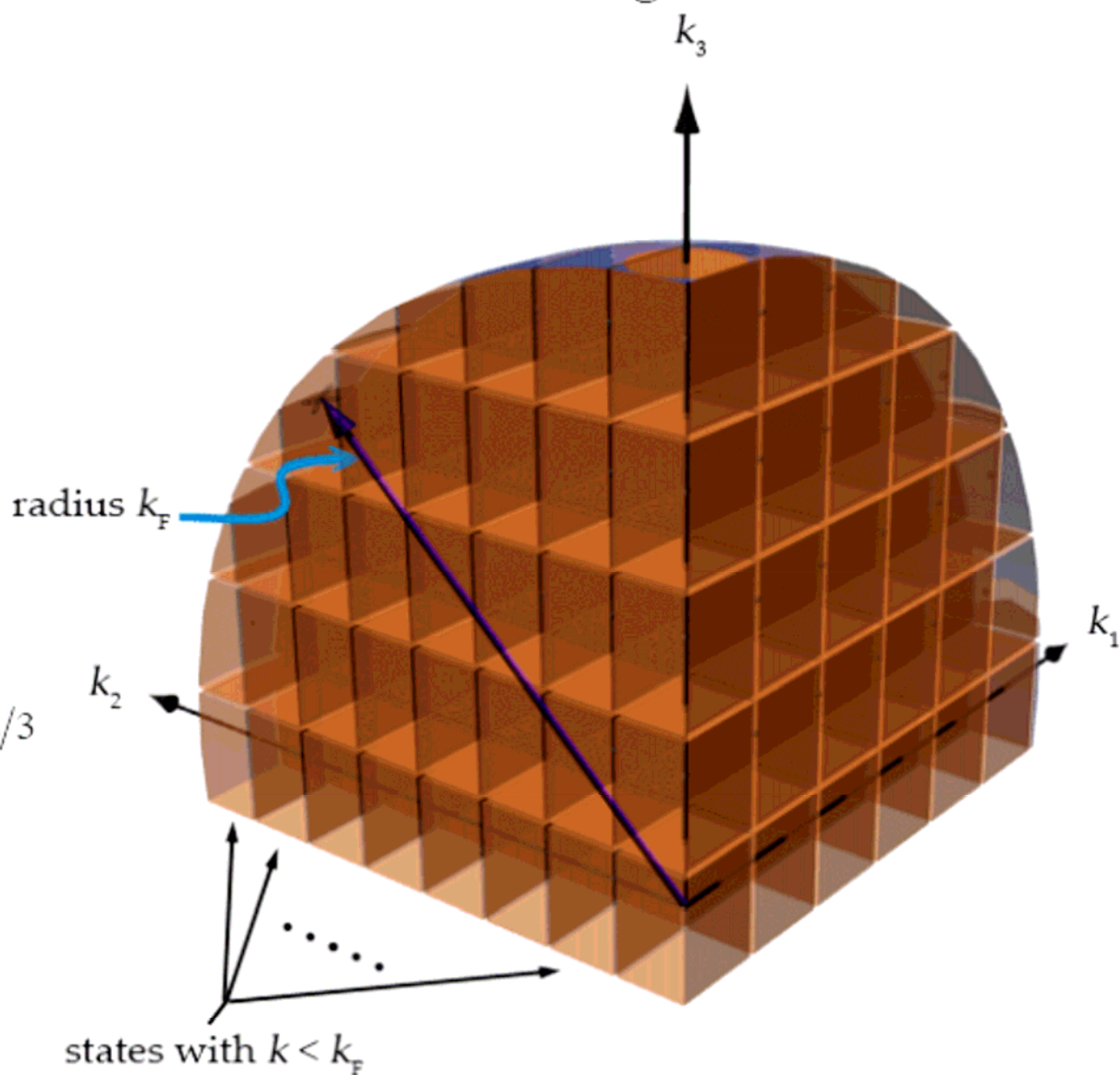
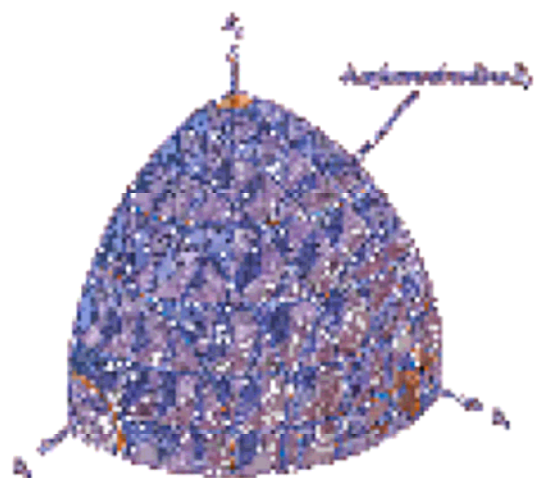
$$v_F = \frac{\hbar}{m} \cdot k_F$$

Fermi-Geschwindigkeit

$$P_F = m \cdot v_F = \hbar k_F \quad (6.11')$$

Fermi-Impuls

Die Fermikugel im k-Raum



$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$$

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

$$v_F = \frac{\hbar}{m} (3\pi^2 n)^{1/3}$$

states with $k < k_F$

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}, \quad E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}, \quad v_F = \frac{\hbar}{m} (3\pi^2 n)^{1/3}$$

⇒ Alle Größen hängen nur von der Elektronendichte n ab!

Es gilt: $n = N_A \cdot \frac{Z \cdot \rho_m}{A}$ in der Einheit Elektronen pro cm^3

$N_A = 6.022 \cdot 10^{23}$ – Avogadro-Konstante

ρ_m – Massendichte in g/cm^3

Z – Zahl der (freien) Elektronen pro Atom

A – Atommasse des Elements

Volumen pro (freiem) Elektron: $\frac{V}{N} = \frac{1}{n} = \frac{4\pi r_s^3 / 3}{1}$

$$\Rightarrow r_s = \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3} = \left(\frac{3A}{4\pi N_A Z \rho_m} \right)^{1/3}$$

Fermienergien, Fermitemperaturen, Fermi-Wellenvektoren und Fermigeschwindigkeiten für typische Metalle*

Element	r_s/a_0	E_F (eV)	T_F (10^4 K)	k_F (10^8 cm $^{-1}$)	v_F (10^8 cm/s)
Li	3,25	4,74	5,51	1,12	1,29
Na	3,93	3,24	3,77	0,92	1,07
K	4,86	2,12	2,46	0,75	0,86
Rb	5,20	1,85	2,15	0,70	0,81
Cs	5,62	1,59	1,84	0,65	0,75
Cu	2,67	7,00	8,16	1,36	1,57
Ag	3,02	5,49	6,38	1,20	1,39
Au	3,01	5,53	6,42	1,21	1,40
Be	1,87	14,3	16,6	1,94	2,25
Mg	2,66	7,08	8,23	1,36	1,58
Ca	3,27	4,69	5,44	1,11	1,28
Sr	3,57	3,93	4,57	1,02	1,18
Ba	3,71	3,64	4,23	0,98	1,13
Nb	3,07	5,32	6,18	1,18	1,37
Fe	2,12	11,1	13,0	1,71	1,98
Mn	2,14	10,9	12,7	1,70	1,96
Zn	2,30	9,47	11,0	1,58	1,83
Cd	2,59	7,47	8,68	1,40	1,62
Hg	2,65	7,13	8,29	1,37	1,58
Al	2,07	11,7	13,6	1,75	2,03
Ga	2,19	10,4	12,1	1,66	1,92
In	2,41	8,63	10,0	1,51	1,74
Tl	2,48	8,15	9,46	1,46	1,69
Sn	2,22	10,2	11,8	1,64	1,90
Pb	2,30	9,47	11,0	1,58	1,83
Bi	2,25	9,90	11,5	1,61	1,87
Sb	2,14	10,9	12,7	1,70	1,96

* Die Einträge der Tabelle wurden mit den Werten von r_s/a_0 aus Tab. 1.1 und $m = 9,11 \cdot 10^{-28}$ g berechnet.

$$r_s = \left(\frac{3A}{4\pi N_A Z \rho_m} \right)^{1/3}$$

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$$

$$k_F = \frac{1.92}{r_s} = \frac{3.63}{r_s/a_0} \text{ \AA}^{-1}$$

$$v_F = \frac{\hbar}{m} k_F$$

$$v_F = \frac{1.92}{r_s} = \frac{4.20}{r_s/a_0} \cdot 10^8 \text{ cm/s}$$

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}, \quad E_0 = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = E_0 \cdot (k_F a_0)^2$$

$$T_F = \frac{E_F}{k_B} = \frac{58.2}{(r_s/a_0)^2} \cdot 10^4 \text{ K}$$