

2.2.4 Zusammenfassung Kapitel 2.2

Vorbemerkungen: Hier sind absichtlich keine Links gesetzt. Wer hier etwas nicht sofort versteht, tut gut daran selbst aktiv zu suchen!

Aus dem Potentialtopfmodell des Einzelatoms ergibt sich das **periodische Potential** des Kristalls.

Mit diesem Potential wäre eigentlich die Schrödingergleichung für die (sehr vielen) Elektronen des Systems zu lösen - in der Praxis ist das aber nicht möglich.

Wir machen die brutalstmögliche Näherung, die Näherung (= das Modell) des **freien Elektronengases**.

Nur **ein** Elektron; Potential $V = \text{const} = 0$ im Kristall der Länge L .

Periodische Randbedingungen: $\psi(x + L, y + L, z + L) = \psi(x, y, z)$.

Damit haben wir nur noch eine rein mathematische Aufgabe. Die Differentialgleichung für ψ ist vollständig lösbar, insgesamt haben wir

Schrödingergleichung	Lösung
$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$ $V = \begin{matrix} 0 & \text{innerhalb} \\ \infty & \text{sonst} \end{matrix}$	$\psi(\underline{r}) = \left(\frac{1}{L}\right)^{3/2} \cdot \exp(i \cdot \underline{k} \cdot \underline{r})$ $k_x = \pm \frac{n_x \cdot 2\pi}{L} \quad k_y = \pm \frac{n_y \cdot 2\pi}{L} \quad k_z = \pm \frac{n_z \cdot 2\pi}{L}$ $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ $E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \cdot \underline{k}^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \cdot \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \cdot (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$
Randbedingungen	
$\psi(x) = \psi(x + L)$ $\psi(y) = \psi(y + L)$ $\psi(z) = \psi(z + L)$	
L = Länge des Potentialtopfes (= Kristall), k = Wellenvektor, n_i = Quantenzahlen, E = Gesamtenergie = kin. Energie für $V = 0$	

Was bedeuten diese Formeln? Eine erste ziemlich befremdliche Erkenntnis ist:

Die **Aufenthaltswahrscheinlichkeit** der Elektrons, gegeben durch $\psi \cdot \psi^*$ ist konstant - das Elektron ist "**ausgeschmiert**", es ist überall im Modellkristall mit derselben Wahrscheinlichkeit zu finden.

Die zweite Erkenntnis ist: Die entscheidende Größe ist der **Wellenvektor** $\underline{k}$. Er enthält die wesentliche Information über das System in etwas codierter, aber durch Vergleich mit klassischen oder mathematischen Strukturen leicht faßlichen Form. Im einzelnen gilt:

Der Wellenvektor ist eine Art vektorielle **Quantenzahl** des Systems, d.h. er "numeriert" die ∞ vielen Lösungen. Ein spezifischer Wellenvektor sondert **eine** spezifische Lösung aus, er beschreibt damit einen der möglichen **Zustände** des System.

Der Wellenvektor bestimmt den **Impuls** $\underline{p}$ des Elektrons; es gilt $\underline{p} = \hbar \cdot \underline{k}$. Der Impuls ist gequantelt - es gibt zwar ∞ viel mögliche Impulse, aber halt nicht **alle** denkbaren (wie bei den ∞ vielen möglichen Lösungen desselben Problems in klassischer Behandlung).

Der Wellenvektor bestimmt die **Gesamtenergie** des System; es gilt $E \propto k^2$.

Der Wellenvektor hat die Funktion einer reziproken **Wellenlänge** λ ; es gilt $k = 2\pi/\lambda$

Die letzte Beziehung folgt direkt aus der Struktur der Lösung. $\psi \propto \exp(i \cdot \underline{k} \cdot \underline{r})$ beschreibt eine Welle (über $\exp(i \cdot \underline{k} \cdot \underline{r}) = \cos(\underline{k} \cdot \underline{r}) + i \cdot \sin(\underline{k} \cdot \underline{r})$). Führt man eine Wellenlänge ein, muß gelten $\sin(k_x \cdot x) = \sin(2\pi \cdot x/\lambda)$. Damit ist auch die de Broglie Formel in der Lösung direkt enthalten.

Zur Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung kommt man immer durch Multiplikation der Lösung der zeit~~un~~abhängigen Schrödingergleichung mit dem Phasenfaktor $\exp(-i\omega \cdot t)$ (mit ω gegeben aus $E = \hbar\omega$); man erhält damit die allgemeine Struktur einer *laufenden ebenen Welle*:

$$\psi(\underline{r}, t) \propto \exp(i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t))$$

Die Energie ist bezüglich mancher Quantenzahlen *entartet*. Alle Kombinationen mit identischen $\underline{k}^2$ haben dieselbe Energie.

- Eine Zustandsdichte $D(E)$ = Dichte der Zustände pro Energieintervall und Volumen ist definierbar und kann ausgerechnet werden - durch Abzählen, oder eleganter durch Volumenbetrachtungen im *Zustandsraum*, auch *Phasenraum* genannt. Der Zustandsraum ist der Raum der von den Wellenvektoren aufgespannt wird; die möglichen Zustände bilden ein (kub. primitives) Gitter.
- Es ergibt sich eine "Wurzel"beziehung:

$$D(E) = \frac{(2 \cdot m)^{3/2}}{2 \cdot \hbar^3 \cdot \pi^2} \cdot E^{1/2}$$

Hat man die verfügbaren Zustände für Elektronen, kann man die vorhandenen Elektronen auf diese Zustände verteilen - wie beim Atommodell.

- Bei $T = 0 \text{ K}$ spielt die Entropie keine Rolle, es wird nur die Energie minimiert. d.h. die Zustände werden "von unten kommend" sukzessive gefüllt, bis bei einer definierten Energie E_F das letzte Elektron untergebracht ist.
- Diese Energie wird sich als ein zentraler Materialparameter entpuppen; sie heißt *Fermienergie*.

Für eine gegebene (Volumen)dichte der Elektronen n_e kann man die Fermienergie ausrechnen und erhält

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(3\pi^2 \cdot n_e \right)^{2/3}$$

- Zur Fermienergie kann man weiterhin eine Fermitemperatur T_F und einen Fermiimpuls $p_F = \hbar \cdot \underline{k}_F$ bzw. Fermiwellenvektor $\underline{k}_F$ definieren über die Beziehungen:

$$E_F = k_B \cdot T_F$$

$$E_F = \frac{\hbar \cdot \underline{k}_F^2}{2m_e}$$