

2.2.5 Merkpunkte Kapitel 2.2

➤ Näherung (= Modell) des **freien Elektronengases**

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

➤ Ergebnis: Welle mit Amplitude $(1/L)^{3/2}$

$$\psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{1}{L}\right)^{3/2} \cdot \exp(i \cdot \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$$

➤ Aufenthaltswahrscheinlichkeit überall gleich!
Das Elektron ist "ausgeschmiert".

$$\psi \cdot \psi^* = 1/L^3$$

➤ Entscheidende Größe ist der Wellenvektor $\mathbf{k}$. Er bestimmt direkt:

- Die "Nummer" (= Quantenzahlsatz) der Lösung.
- Den Impuls $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$.
- Die Gesamtenergie $E \propto k^2$.
- Die Wellenlänge $\lambda = 2\pi/k$.

$$k_x = \pm \frac{n_x \cdot 2\pi}{L} \quad k_y = \pm \frac{n_y \cdot 2\pi}{L} \quad k_z = \pm \frac{n_z \cdot 2\pi}{L}$$

➤ Die Energie ist bezüglich der Quantenzahlen entartet. Die Zustandsdichte $D(E)$ misst, wieviel Zustände ΔN_e sich in einem Energieintervall ΔE und im Volumen V befinden.

$$\Delta N_e = D(E) \cdot \Delta E \cdot V$$

- Die Zustandsdichte ist über Abzählen im Phasenraum (= Raum der Wellenvektoren) leicht zu berechnen.

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

➤ Beim Auffüllen der Zustände mit Elektronen (bei $T = 0 \text{ K}$), wird bei einer definierten Energie - der Fermienergie E_F - das letzte Elektron untergebracht sein.

- Für eine bekannte Elektronendichte n_e ist die Fermienergie leicht berechenbar.

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

➤ Zustandsdichte und Fermienergie sind für die elektronischen Eigenschaften **realer** Kristalle die wichtigsten Kenngrößen überhaupt! Sie sind immer noch wohl definiert, auch wenn die einfachen Modellformeln des freien Elektronengases für reale Kristalle modifiziert werden müssen!