

## 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  $E \propto \mathbf{k}^2$ .
- 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  $\Delta N_e$  sich in einem Energieintervall  $\Delta E$  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!