Serie 3: Nicht-interagierende Elektronen

Abgabe: 9. November, 2004

Aufgabe 3.1 Eigenschaften des freien Elektronengases

Wir betrachten das nicht-interagierende Elektronengas in einem Volumen, L^d . Nehme periodische Randbedingungen an, sodass die Wellenfunktionen als ebene Wellen mit Wellenvektor, \vec{k} , betrachtet werden können.

- [a] Wie hängt die ein-Elektronen Zustandsdichte von k und wie von Energie in 1, 2 und 3 Dimensionen ab?
- [b] Wir wollen nun den Grundzustand der N entkoppelten Elektronen untersuchen. Da die Elektronen das Pauliprinzip erfüllen, sind im Grundzustand die N tiefstliegenden ein-Teilchen Niveaus besetzt. Die Fermi Energie, ϵ_f , ist als die Energie des höchsten besetzten Niveaus definiert. Finde die Relation zwischen die Elektronendichte und der Fermi Energie. Wie hängt die Energiedichte von der Elektronendichte, ab?
- [c] Berechne die Kompressibilität, κ und die Magnetische Suszeptibilität, χ , des freien Elektronengases die durch

$$\kappa = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \right)_N, \qquad \chi = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial H^2} \right)_{V,N}, \tag{1}$$

gegeben sind.

Aufgabe 3.2 Sommerfeld'sche entwicklung

Man versteht die tiefliegenden Anregungen des freien Elektronengases als die Anregungen einzelner Elektronen. Einige Elektronen können nämlich aus den Zustände mit $\epsilon < \epsilon_f$ in Zustände mit $\epsilon > \epsilon_f$ angehoben werden. Bei Temperatur T > 0 ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein Zustand mit Energie ϵ besetzt wird, durch die Fermi Funktion,

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon - \mu)/T} + 1},\tag{2}$$

gegeben, wobei μ das chemische Potential ist.

Bei tiefen Temperaturen ($T \ll E_f$), ist die Fermi-Funktion einer Stufen-Funktion änlich und ihre Ableitung, entsprechend, einer δ -Funktion. Die Erwartungswerte viele physikalischer Grössen können deshalb als eine Potenzreihe in der Temperatur ausgedruckt werden. Sei zum Beispiel, G eine solche Grösse die von der Elektron Energie ϵ abhängt. Dann ist,

$$\langle G \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} G(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon = \int_{-\infty}^{\mu} G(\epsilon) d\epsilon + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \left. \frac{d^{2n-1} G(\epsilon)}{d\epsilon^{2n-1}} \right|_{\mu} T^{2n}, \tag{3}$$

wobei a_n universelle Konstanten sind. Dieser Ausdruck ist als Sommerfeld'sche Entwicklung bekannt.

- [a] Bei T=0 ist $\mu=\epsilon_f$. Wie ändert sich das chemische Potential mit der Temperatur bei $T\ll\epsilon_f$ (berechne nur den ersten Term in der T/ϵ_f Entwicklung)?
- [b] Berechne die spezifische Wärme des freien Elektronengases.

Aufgabe 3.3 Effektive Masse

Betrachte nun die Elektronen in der Nähe eines Bandminimums. Nehme an, dass sich die Dispersion als

$$E(k) = E_0 + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{ij} \left[M^{-1} \right]_{ij} \left(k_i - k_i^0 \right) \left(k_j - k_j^0 \right), \tag{4}$$

schreiben lässt, wobei M eine k unabhängige Massenmatrice ist und $\vec{k}=\vec{k}_0$ dem Bandminimum entspricht.

Finde den Beitrag dieser Elektronen zur spezifischen Wärme. Vergleiche mit den Resultaten der Aufgabe 3.2 und zeige, dass die effektive Masse durch,

$$m^* = (\det M)^{1/3} \tag{5}$$

gegeben ist.