Hochschule RheinMain SS 2023
Prof. Dr. D. Lehmann

Lösungen zum 7. Übungsblatt
Mathematische Methoden in der Quantenmechanik

Aufgabe 1: Die Elektronenkonzentration n ist gegeben durch

$$n = \frac{N}{V}$$

wobei N die Anzahl der für den elektrischen Ladungstransport zur Verfügung stehenden Elektronen ist und V das Volumen. Nach den Angaben im Aufgabentext steht genau ein Elektron pro Atom für den elektrischen Ladungstransport zur Verfügung, also ist das N identisch mit der Anzahl der Atome im Volumen V. 1 Mol = $6.023 \cdot 10^{23}$ Kupfer-Atome haben eine Masse von 63.55 Gramm, diese nehmen dann das Volumen

$$V = \frac{\text{Masse}}{\text{Dichte}} = \frac{63.55\,\text{g}}{8.92\,\frac{\text{g}}{\text{cm}^3}} \approx 7.124\,\text{cm}^3$$

ein. Also ist die Elektronenkonzentration

$$n = \frac{6.023 \cdot 10^{23}}{7.124\,\text{cm}^3} \approx 8.454 \cdot 10^{22}\,\text{cm}^{-3}$$

Für die Fermi-Energie in d Dimensionen hatten wir im week7 die folgende Formel hergeleitet:

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m}\,(c_d\, n)^{2/d}$$

mit n die Elektronenkonzentration und der numerischen Konstanten

$$c_d := (2\pi)^d/(2\tau_d)$$

Wir haben jetzt $d = 3$ und bekommen dann mit der Lichtgeschwindigkeit c und der Ruhemasse des Elektrons von

$$mc^2 \approx 511\,\text{keV}$$

den Wert

$$\begin{aligned}
\varepsilon_F &= \frac{\hbar^2 c^2}{2mc^2}\,\frac{(2\pi)^2}{(\frac{8\pi}{3})^{\frac{2}{3}}}\,\big(8.454 \cdot 10^{22}\,\text{cm}^{-3}\big)^{2/3} \\
&\approx \frac{h^2 c^2}{10^6\,\text{eV}}\,\frac{1}{(\frac{8\pi}{3})^{\frac{2}{3}}}\,(84.54)^{2/3}\,10^{14}\,\text{cm}^{-2} \\
&\approx h^2 c^2\,\Big(\frac{3 \cdot 84.54}{8\pi}\Big)^{2/3}\,10^{8}\,\text{cm}^{-2}\text{eV}^{-1} \\
&\approx h^2 c^2 \cdot 4.67 \cdot 10^{8}\,\text{cm}^{-2}\,\text{eV}^{-1}
\end{aligned}$$

Weiterhin ist

$$
\begin{aligned}
hc &\approx 6.626 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{Js} \;\times\; 3 \cdot 10^{8}\,\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}} \\
&\approx 3 \cdot 6.626 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{J} \;\times\; 10^{10}\,\mathrm{cm} \\
&\approx 2 \cdot 10^{-23}\,\mathrm{J\,cm}
\end{aligned}
$$

Also,

$$
\begin{aligned}
\varepsilon_F &\approx h^2 c^2 \;\cdot\; 4.67 \;\cdot\; 10^{8}\,\mathrm{cm}^{-2}\mathrm{eV}^{-1} \\
&\approx 4 \cdot 10^{-46}\,\mathrm{J}^2\,\mathrm{cm}^2\, 4.67 \;\cdot\; 10^{8}\,\mathrm{cm}^{-2}\mathrm{eV}^{-1} \\
&\approx 18.45 \cdot 10^{-38}\,\frac{\mathrm{J}^2}{\mathrm{eV}} \\
&\approx 18.45 \cdot 10^{-38}\,\frac{10^{38}}{(1.602)^{\,2}}\,\mathrm{eV} \\
&\approx 7.19\,\mathrm{eV}
\end{aligned}
$$

Ok, in der Tabelle ist eine 7.00 eV angegeben.. Die Fermi-Temperatur ist dann, wenn wir den Tabellenwert für ε_F von 7.00 Elektronenvolt nehmen,

$$
T_F \;=\; \frac{\varepsilon_F}{k_B} \;\approx\; \frac{7\,\mathrm{eV}}{8.62 \cdot 10^{-5}\,\frac{\mathrm{eV}}{\mathrm{K}}} \;\approx\; 8.12 \cdot 10^{4}\,\mathrm{K}
$$

Die Fermi-Geschwindigkeit ist gegeben durch

$$
\varepsilon_F \;=\; \frac{(\hbar k_F)^2}{2m} \;=\; \frac{m}{2}\left(\frac{\hbar k_F}{m}\right)^2 \;=\; \frac{m}{2}\,v_F^2
$$

oder

$$
\begin{aligned}
v_F &= \sqrt{\frac{2\varepsilon_F}{m}} \;=\; \sqrt{\frac{2\varepsilon_F}{mc^2}} \;\times\; c \\
&\approx \sqrt{\frac{14\,\mathrm{eV}}{511\,\mathrm{keV}}} \;\times\; c \;\approx\; \sqrt{\frac{28\,\mathrm{eV}}{10^6\,\mathrm{eV}}} \;\times\; c \\
&\approx \frac{5.29}{10^3} \;\times\; 3 \cdot 10^{10}\,\frac{\mathrm{cm}}{\mathrm{s}} \\
&\approx 1.59 \cdot 10^{8}\,\frac{\mathrm{cm}}{\mathrm{s}} \;.
\end{aligned}
$$

Aufgabe 2: Mit

$$Z_{k\tau}(z) \;:=\; \sum_{N=1}^{\infty} z^N \sum_{\{n_{k\tau}\}\in I_N} n_{k\tau}\; e^{-\beta\sum_{k\tau} n_{k\tau}\,\varepsilon_k}$$

$$Z(z) \;:=\; \sum_{N=0}^{\infty} z^N \sum_{\{n_{k\tau}\}\in I_N} e^{-\beta\sum_{k\tau} n_{k\tau}\,\varepsilon_k}$$

bekommen wir $\big[$ es gibt insgesamt $2|\Gamma|$ (Impuls,Spin)-Paare $(k,\sigma)\in\Gamma_{k,s}$ $\big]$

$$\begin{aligned}
Z_{k\tau}(z) &= \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{\{n_{k\tau}\}\in I_N} n_{k\tau}\; z^N\; e^{-\beta\sum_{k\tau} n_{k\tau}\,\varepsilon_k} \\
&= \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{\{n_{k\tau}\}\in I_N} n_{k\tau}\; z^{\sum_{k\tau} n_{k\tau}}\; e^{-\beta\sum_{k\tau} n_{k\tau}\,\varepsilon_k} \\
&= \sum_{n_{k_1\tau_1}=0}^{1} \cdots \sum_{n_{k\tau}=1}^{1} \cdots \sum_{n_{k_{2|\Gamma|}\tau_{2|\Gamma|}}=0}^{1} n_{k\tau} \prod_{q\eta\in\Gamma_{k,s}} \left(z\,e^{-\beta\,\varepsilon_q}\right)^{n_{q\eta}} \\
&= \sum_{n_{k\tau}=1}^{1} n_{k\tau}\left(z\,e^{-\beta\,\varepsilon_k}\right)^{n_{k\tau}} \;\times\; \prod_{q\eta\neq k\tau} \sum_{n_{q\eta}=0}^{1} \left(z\,e^{-\beta\,\varepsilon_q}\right)^{n_{q\eta}} \\
&= z\,e^{-\beta\,\varepsilon_k} \;\times\; \prod_{q\eta\neq k\tau} \left(1 + z\,e^{-\beta\,\varepsilon_q}\right)
\end{aligned}$$

und analog

$$\begin{aligned}
Z(z) &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_{k\tau}\}\in I_N} z^N\; e^{-\beta\sum_{k\tau} n_{k\tau}\,\varepsilon_k} \\
&= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_{k\tau}\}\in I_N} z^{\sum_{k\tau} n_{k\tau}}\; e^{-\beta\sum_{k\tau} n_{k\tau}\,\varepsilon_k} \\
&= \sum_{n_{k_1\tau_1}=0}^{1} \cdots \sum_{n_{k_{2|\Gamma|}\tau_{2|\Gamma|}}=0}^{1} \prod_{q\eta\,\in\,\Gamma_{k,s}} \left(z\,e^{-\beta\,\varepsilon_q}\right)^{n_{q\eta}} \\
&= \prod_{q\eta\,\in\,\Gamma_{k,s}} \sum_{n_{q\eta}=0}^{1} \left(z\,e^{-\beta\,\varepsilon_q}\right)^{n_{q\eta}} \;=\; \prod_{q\eta\,\in\,\Gamma_{k,s}} \left(1 + z\,e^{-\beta\,\varepsilon_q}\right)
\end{aligned}$$

oder

$$Z(z) \;=\; \prod_{q\eta}\left(1 + z\,e^{-\beta\,\varepsilon_q}\right) \;=\; \left(1 + z\,e^{-\beta\,\varepsilon_k}\right) \;\times\; \prod_{q\eta\neq k\tau}\left(1 + z\,e^{-\beta\,\varepsilon_q}\right)$$

Für den Quotienten erhalten wir dann

$$\frac{Z_{k\tau}(z)}{Z(z)} \;=\; \frac{z\,e^{-\beta\,\varepsilon_k}}{1 + z\,e^{-\beta\,\varepsilon_k}} \;=\; \frac{1}{\frac{e^{+\beta\,\varepsilon_k}}{z} + 1} \;\overset{z\,=\,e^{\beta\mu}}{=}\; \frac{1}{e^{\beta\,(\varepsilon_k-\mu)} + 1}\;.$$