Aufgabenblatt 8
Donnerstag $15^{15} - 16^{45}$

Sascha Reinhardt

18. Dezember 1999

1 Aufgabe 8.1

Berechnung der freien Elektronendichte für Kalium (Ka) und Aluminium (Al):

$$
\begin{aligned}
n_x &= \frac{N_x w_x}{a_x^3} \\
N_x &= \text{Anzahl der Atome pro Zelle} \\
w_x &= \text{Wertigkeit} \\
a_x &= \text{Gitterkonstante}
\end{aligned}
$$

Für Ka ist angegeben $bcc, a = 5,23\mathring{A}$ und für Aluminium $fcc, a = 4,05\mathring{A}$, daraus erhält man ($w_{Ka} = 1, w_{Al} = 3$):

$$
\begin{aligned}
n_{Ka} &= 1,398 \cdot 10^{28} \frac{1}{m^3} \\
n_{Al} &= 1,806 \cdot 10^{29} \frac{1}{m^3}
\end{aligned}
$$

Die Fermi- Wellenzahl k ist gegeben durch

$$k_x = (3\pi^2 n_x)^{\frac{1}{3}}. \tag{1}$$

Die Fermi- Energie ist damit

$$E_x = \frac{\hbar^2}{2m_e} k_x^2 \tag{2}$$

Nach ausrechnen von 1 und einsetzen in 2 erhält man für die beiden Metalle:

$$
\begin{aligned}
E_{Ka} &= 2,12eV \\
E_{Al} &= 11,17eV
\end{aligned}
$$

2 Aufgabe 8.2

Entwicklung von $U(r)$ um r_0:

$$\begin{aligned} U(r) &= U(r_0) + U'(r_0)r + \frac{U''(r_0)}{2}r^2 + \frac{U'''(r_0)}{6}r^3 && (3) \\ U'(r_0) &= 0, \text{ da Gleichgewicht} && (4) \end{aligned}$$

Aus der ersten Ableitung folgt auch:

$$\begin{aligned} U'(r_0) &= 0 && (5) \\ \Rightarrow \frac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0^2} &= 12\frac{\beta}{r_0^{13}} && (6) \\ \frac{U''(r_0)}{2} &= -\frac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0^3} + 78\frac{\beta}{r_0^{14}} && (7) \\ &= \frac{66\beta}{r_0^{14}} = c && (8) \\ \frac{U'''(r_0)}{6} &= \frac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0^4} - 364\frac{\beta}{r_0^{15}} && (9) \\ &= -\frac{352\beta}{r_0^{15}} = -d && (10) \end{aligned}$$

Daraus folgt dann für $\phi(x)$ sofort:

$$\phi(x) = cx^2 - dx^3 \qquad (11)$$

Der Term dritter Ordnung soll klein sein, so gilt ($\gamma = 1/k_B T$)

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\phi(x)\gamma)dx &\approx \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\gamma c x^2)dx && (12) \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{c\gamma}} && (13) \\ & && (14) \end{aligned}$$

Entwicklung von $\exp(d\gamma x^3)$:

$$\exp(d\gamma x^3) \approx 1 + \gamma d x^3 \qquad (15)$$

Somit ist dann

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\phi(x)\gamma)x dx &\approx \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\gamma c x^2)(1 + \gamma d x^3)x dx && (16) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\gamma c x^2)(x + \gamma d x^4)dx && (17) \\ &= 0 + \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\gamma c x^2)\gamma d x^4 dx && (18) \\ &= \frac{3}{4}\sqrt{\pi}\frac{d}{c^{5/2}\gamma^{3/2}} && (19) \end{aligned}$$

So erhält man also für $< x >$:

$$< x > = \frac{\frac{3}{4}\sqrt{\pi}\frac{d}{c^{5/2}\gamma^{3/2}}}{\sqrt{\frac{\pi}{c\gamma}}} \quad (20)$$

$$= \frac{3}{4}\frac{d}{c^2}\frac{1}{\gamma} = \frac{3}{4}\frac{d}{c^2}k_B T \quad (21)$$

Der lineare thermische Expansionskoeffizient ist also:

$$K = \frac{3}{4}\frac{d}{c^2}k_B$$

Einsetzen von c und d:

$$K = \frac{3}{4}\frac{8}{99}\frac{r_0^{13}}{\beta}k_B$$
$$= \frac{2}{33}\frac{r_0^{13}}{\beta}k_B$$

Die Energie im Gleichgewichtsabstand ist $-6,85eV$. Der Gleichgewichtsabstand ist nicht angegeben, weshalb man kein numerisches Ergebnis erhält.

3 Aufgabe 8.3

Die mittlere kinetische Energie in einem freien Elektronengas pro Elektron ist

$$\bar{E} = \frac{3}{5}E_F. \tag{22}$$

Die Fermi- Energie läßt sich berechnen durch

$$\begin{aligned} E_F &= \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(3\pi^2\frac{N}{V}\right)^{2/3} && (23)\\ N &= \frac{M}{m_{He}}2, \text{ zwei Elektronen pro Helium} && (24)\\ V &= \frac{4}{3}\pi R^3 && (25)\\ c &= \frac{\hbar^2}{2m_e} && (26) \end{aligned}$$

Die Gesamtenergie hat im Gleichgewicht ein Minimum:

$$\begin{aligned} E_{gesamt} &= \frac{3N}{5}c\left(3\pi^2\frac{N}{V}\right)^{2/3} - \frac{3}{5}G\frac{M^2}{R} && (27)\\ E'_{gesamt} &= \frac{3}{5}G\frac{M^2}{R^2} - \frac{9}{5m_e}\hbar^2\frac{(6\pi^2)^{1/3}}{R^3}\left(\frac{M}{m_{He}}\right)^{5/3} && (28)\\ &= 0 && (29) \end{aligned}$$

Dies kann man auflösen nach

$$M^{1/3}R = \frac{\hbar^2}{m_e m_{He}^{5/3}}(162\pi^2)^{1/3}\frac{1}{G} \tag{30}$$

Nach einsetzen der Werte erhält man

$$M^{1/3}R = 1,14M_S^{1/3}R_E \approx M_S^{1/3}R_E$$

Die Fermi- Energie läßt sich jetzt umschreiben zu:

$$\begin{aligned} M_S^{1/3}R_E &= X && (31)\\ \Rightarrow R^3 &= \frac{X^3}{M} && (32)\\ \Rightarrow E_F &= \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(3\pi\frac{3M^2}{2X^3}\right)^{2/3} && (33) \end{aligned}$$

Die kinetische Energie der Helium können vernachlässigt werden, da $E_F \gg k_BT$.