Zustandsdichte

Die Zustandsdichte ist definiert

$$\boxed{D(\epsilon) = \sum_{\vec{k}} \delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k}))} \tag{1}$$

Sie gibt die Anzahl der Systemzustäde pro Energieeinheit an. Als praktisch erweist sich eine Zustandsdichte pro Volumen

$$\mathcal{N}(\epsilon) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k})) \tag{2}$$

Im folgenden wollen wir die Zustandsdichte für spinlose Teilchen in 1, 2 und 3 Dimensionen berechnen. Die Polar- bzw. Kugelkoordianten für dk lauten in verschiedenen Dimensionen

$$d = 1: \quad dk = dk \tag{3}$$

$$d = 2: \quad d^2k = kdkd\phi \tag{4}$$

$$d = 3: \quad d^3k = k^2 dk \sin(\theta) d\theta d\phi \tag{5}$$

1D Zustandsdichte

Für 1 Dimension gilt für die Zustandsdichte

$$\mathcal{N}(\epsilon) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k})) \tag{6}$$

Wir nehmen an dass die Energiezustände dicht bei einander liegen, deswegen können wir die Summe als ein Integral ausdrücken. Im thermodynamischen Limes gilt

$$\boxed{\frac{1}{L^d} \sum_{\vec{k}} \xrightarrow{L \to \infty} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d}} \tag{7}$$

Für 1-Dimension können wir die Formel (6) schreiben (mit Hilfe (5))

$$\mathcal{N}(\epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{(2\pi)} \delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k})) \tag{8}$$

Wir möchten das Integral nach ϵ ausdrücken. Die Dispersion eines freien Teilchens lautet

$$\epsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \tag{9}$$

Nach $\vec{k}$ umgestellt

$$k = \sqrt{\frac{2m\epsilon}{\hbar^2}} \tag{10}$$

Differenziert nach $d\epsilon$

$$\frac{dk}{d\epsilon} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2 \epsilon}} \qquad \Leftrightarrow \qquad dk = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2 \epsilon}} d\epsilon \tag{11}$$

Eingesetzt in Gleichung (8) unter Beachtung dass das die Energie $d\epsilon$ nicht negativ werden kann, folgt die Integration $2 \cdot \int_0^\infty$

$$\begin{aligned}
\mathcal{N}(\epsilon) &= \int_0^\infty d\epsilon \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2\epsilon}} \frac{1}{(2\pi)} \delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k})) && (12)\\
&= \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \int_{-\infty}^\infty d\epsilon \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k})) && (13)\\
&= \frac{\sqrt{2m}}{2\pi\hbar} \epsilon^{-\frac{1}{2}}(\vec{k}) && (14)\\
&\sim \epsilon^{-\frac{1}{2}} && (15)
\end{aligned}$$

2D Zustandsdichte

Im 2 Dimensionalen Fall lauten die Gleichung (2) folgendermaßen

$$\mathcal{N}(\epsilon) = \frac{1}{L^2} \sum_{\vec{k}} \delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k})) \tag{16}$$

wir ersetzen die Summe durch das Integral laut (7) lautet die Gleichung nun

$$\mathcal{N}(\epsilon) = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k})) \tag{17}$$

Mit der Relation (4) für dk in 2D

$$\begin{aligned}
\mathcal{N}(\epsilon) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty dk\ k\delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k}))\\
&= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk\ k\delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k})) \qquad \text{mit } dk = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2\epsilon}} d\epsilon \text{ und } k = \sqrt{\frac{2m\epsilon}{\hbar^2}}\\
&= \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty d\epsilon\ \delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k}))\\
&= \frac{m}{2\pi\hbar^2} = \text{const} && (18)
\end{aligned}$$

3D Zustandsdichte

Im 3 Dimensionalen Fall lauten die Gleichung (2) folgendermaßen

$$\mathcal{N}(\epsilon) = \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{k}} \delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k})) \tag{19}$$

wir ersetzen die Summe durch das Integral laut (7) lautet die Gleichung nun

$$\mathcal{N}(\epsilon) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k})) \tag{20}$$

Mit der Relation (5) für dk in 3D

$$\begin{aligned}
\mathcal{N}(\epsilon) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta}_{4\pi} \int_0^\infty dk\ k^2\delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k}))\\
&= \frac{2}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk\ k^2\delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k})) \qquad \text{mit } dk = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2\epsilon}} d\epsilon \text{ und } k^2 = \frac{2m\epsilon}{\hbar^2}\\
&= \frac{2}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2\epsilon}} d\epsilon\ \frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k}))\\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty d\epsilon\ \sqrt{\epsilon}\ \delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k}))\\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\epsilon(\vec{k})}\\
&\sim \sqrt{\epsilon} && (21)
\end{aligned}$$

Die Zustandsdichte in 1,2 und 3 Dimensionen zusammengefasst

$$\boxed{\begin{aligned} d=1: &\quad \mathcal{N}(\epsilon) = \frac{\sqrt{2m}}{2\pi\hbar}\epsilon^{-\frac{1}{2}}(\vec{k}) \sim \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \\ d=2: &\quad \mathcal{N}(\epsilon) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} = \text{const} \\ d=3: &\quad \mathcal{N}(\epsilon) = \frac{1}{(2\pi)^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{\epsilon(\vec{k})} \sim \sqrt{\epsilon} \end{aligned}} \tag{22}$$

Betrachtet man noch den Spin des Teilchens, so lautet die Gleichung (2)

$$\mathcal{N}(\epsilon) = (2s+1)\frac{1}{V}\sum_{\vec{k}}\delta(\epsilon - \epsilon(\vec{k})) \tag{23}$$

Damit ändert sich die Zustandsdichte jeweils um den Faktor $2s+1$. D.h. für Teilchein mit Spin $\frac{1}{2}$ folgt

$$\boxed{\begin{aligned} d=1: &\quad \mathcal{N}(\epsilon) = 2\frac{\sqrt{2m}}{2\pi\hbar}\epsilon^{-\frac{1}{2}}(\vec{k}) \sim \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \\ d=2: &\quad \mathcal{N}(\epsilon) = \frac{m}{\pi\hbar^2} = \text{const} \\ d=3: &\quad \mathcal{N}(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{\epsilon(\vec{k})} \sim \sqrt{\epsilon} \end{aligned}} \tag{24}$$

Referenzen

- Claude Cohen-Tannoudji Quantenmechanik Band 2
- Zettili Quanten Mehanics
- Rollnik Quantentheorie 2