6. Ideale Fermi-Systeme

6.1 Ideales Fermi-Gas

N Teilchen in einem Volumen $V = L^3$, periodische Randbedingungen

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_i$$

- Einteilchen-Hamilton-Operator $\hat{H}_i = \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}_i^2, \; i = 1, \cdots, N$
- Einteilchen Eigenfunktionen (in der Ortsdarstellung)

$$\Psi_{\mathbf{i}}(\mathbf{r}) = \Psi_{\mathbf{k},m_s}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \mathrm{e}^{i\mathbf{kr}}$$

  mit $m_s = -s, \cdots, s$
  Sei $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z)$ mit $n_\alpha \in \mathbb{Z}$ und $\alpha = x, y, z$
  dann beschreibt $\mathbf{i} \hat{=} [\mathbf{k}, m_s] \hat{=} [(n_x, n_y, n_z), m_s]$ Einteilchenzustand
- Einteilcheneigenwerte

$$\epsilon_{\mathbf{i}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$$

Thermodynamik (Version 1)

$$J = -k_{\rm B} T \sum_{\mathbf{i}} \ln\left(1 + \exp[-\beta(\epsilon_{\mathbf{i}} - \mu)]\right)$$

$$\langle N \rangle_g = \sum_{\mathbf{i}} \frac{1}{\exp[\beta(\epsilon_{\mathbf{i}} - \mu)] + 1} \qquad n_{\mathbf{i}} = \left(\exp[\beta(\epsilon_{\mathbf{i}} - \mu)] + 1\right)^{-1}$$

$$\langle E \rangle_g = \sum_{\mathbf{i}} \epsilon_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i}} = \sum_{\mathbf{i}} \frac{\epsilon_{\mathbf{i}}}{\exp[\beta(\epsilon_{\mathbf{i}} - \mu)] + 1}$$

Kontinuumslimit:

$$\sum_{m_s} \cdots \Rightarrow g = 2s + 1$$

$$\sum_{\mathbf{k} \hat{=} \{n_x, n_y, n_z\}} \cdots \Rightarrow \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int_{\mathbb{R}} d\mathbf{k} \cdots = \frac{V}{8\pi^3} 4\pi \frac{1}{2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon \sqrt{\epsilon} \cdots$$

Thermodynamik (Version 2)

- $$J = -PV = -\frac{2}{3}\frac{Vm^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} g \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{3/2}}{\exp[\beta(\epsilon-\mu)]+1}$$
  $$= -gV\frac{k_\mathrm{B}T}{\Lambda^3} f_{5/2}(z) = -g\int_0^\infty d\epsilon \hat{\mathcal{D}}(\epsilon) f_\mathrm{FD}(\epsilon)$$

- $$\langle N\rangle_g = \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} g\int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{\exp[\beta(\epsilon-\mu)]+1}$$
  $$= g\frac{V}{\Lambda^3} f_{3/2}(z) = g\int_0^\infty d\epsilon \mathcal{D}(\epsilon) f_\mathrm{FD}(\epsilon)$$

- $$\langle E\rangle_g = \frac{Vm^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} g\int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{3/2}}{\exp[\beta(\epsilon-\mu)]+1}$$
  $$= \frac{3}{2}gV\frac{k_\mathrm{B}T}{\Lambda^3} f_{5/2}(z) = g\int_0^\infty d\epsilon\, \epsilon \mathcal{D}(\epsilon) f_\mathrm{FD}(\epsilon)$$

mit (vergleiche Formelsammlung)

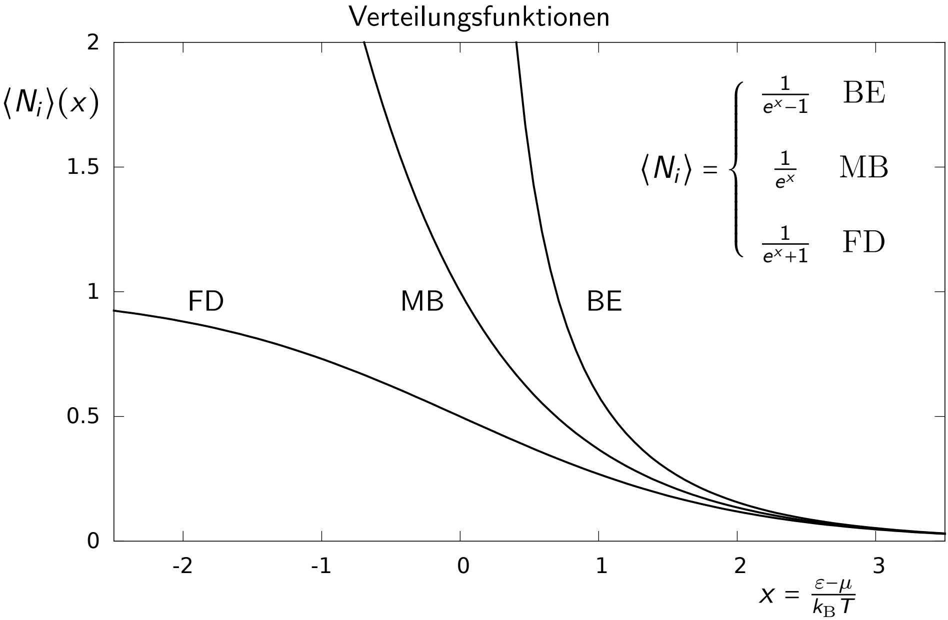
$$f_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty dx \frac{x^{\nu-1}}{\mathrm{e}^x z^{-1} + 1}$$

und mit der Zustandsdichte $\mathcal{D}(\epsilon)$

$$\mathcal{D}(\epsilon) = \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\epsilon}$$

Bemerkungen

- $\mathcal{D}(\epsilon)$ wie bei Bose-Teilchen
-
  - thermische Zustandsgleichung $P = P(T, \langle N \rangle_g)$
  - kalorische Zustandsgleichung $\langle E \rangle_g = \langle E \rangle_g(T, \langle N \rangle_g)$ durch Eliminieren von z aus der Gleichung für $\langle N \rangle_g$ und Einsetzen in die Gleichung für $\langle E \rangle_g$


Verteilungsfunktionen
2
1.5
1
0.5
0
$\langle N_i \rangle(x)$
-2
-1
0
1
2
3
$x = \frac{\varepsilon - \mu}{k_\mathrm{B} T}$
FD
MB
BE
$\langle N_i \rangle = \begin{cases} \frac{1}{e^x - 1} & \mathrm{BE} \\ \frac{1}{e^x} & \mathrm{MB} \\ \frac{1}{e^x + 1} & \mathrm{FD} \end{cases}$

(a) Grenzwert hoher Temperaturen
Ist T groß, dann gilt (ohne Beweis) $\mu \to -\infty$;
somit ist $z = \exp[\beta\mu] \ll 1$ und es gilt (Rechnungen analog zu den Bose-Teilchen)

$$PV \sim \langle N \rangle_g k_{\mathrm{B}} T \left(1 + \frac{\Lambda^3}{2^{5/2}} \frac{1}{g} \frac{\langle N \rangle_g}{V} \right)$$

daher durch Antisymmetrisieren erfolgt eine Erhöhung des Drucks im Vergleich zum idealen Gas, die wiederum einer Abstoßung der Teilchen entspricht

(b) absoluter Nullpunkt
Grundzustand: niedrigste Einteilchenzustände sind einfach besetzt
$\Rightarrow$ jeder $\mathbf{k}$-Wert tritt g-fach auf

$$\lim_{T \to 0} f_{\mathrm{FD}}(\epsilon) = \Theta(\mu - \epsilon) \qquad \text{Stufenfunktion}$$

$\mu(T = 0) = \epsilon_{\mathrm{F}}$ heißt Fermi-Energie, $T_{\mathrm{F}} = \frac{1}{k_{\mathrm{F}}} \epsilon_{\mathrm{F}}$ Fermi-Temperatur

Bestimmung von ϵ_{F}

$$N = g \int_0^{\epsilon_{\mathrm{F}}} d\epsilon \mathcal{D}(\epsilon) \quad \Rightarrow \quad \epsilon_{\mathrm{F}} = \left(\frac{6\pi^2}{g} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} \rho^{2/3} \quad \text{mit} \quad \rho = \frac{\langle N \rangle_g}{V}$$

weiters:

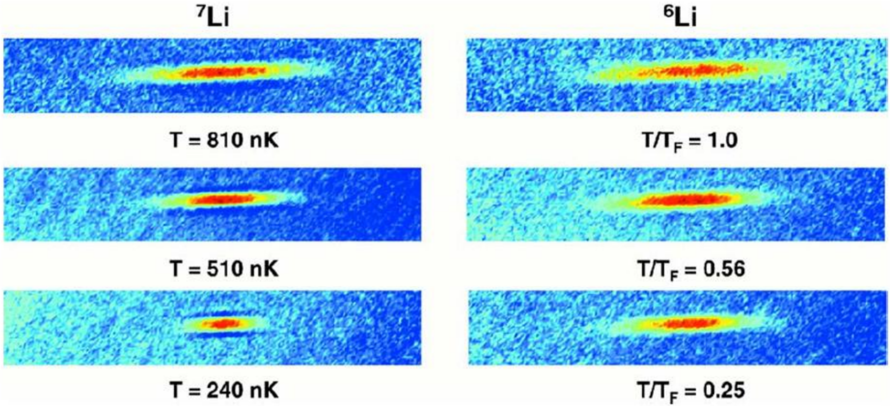
$$P(T = 0) = \frac{2}{5} \left(\frac{6\pi^2}{g} \right)^{3/2} \frac{\hbar^2}{2m} \rho^{5/3} \qquad \text{Nullpunktsdruck}$$

$$\langle E \rangle_g (T = 0) = \frac{3}{5} \epsilon_{\mathrm{F}} \langle N \rangle_g$$

somit

$$PV = \frac{2}{3} E$$

Entartungsdruck des Fermigases bei $T \to 0$



Bose- (^{7}Li; T_C = 540 nK) und Fermi- (^{6}Li) Gas: Bose-Gas kontrahiert, Fermi-Gas verändert auf Grund des Entartungsdrucks Form bei $T < T_\mathrm{F}$ nicht. Elliptische Form des Gemisches auf Grund des Fallenpotentials. (Quelle: Science 2001)

(c) $0 < T \ll T_{\mathrm{F}}$ (starke Entartung)

$$\mathcal{D}(\epsilon) = \frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{\epsilon} = A\sqrt{\epsilon}$$

$$\langle N\rangle_g = gA\int_0^\infty \sqrt{\varepsilon}\cdot f_{\mathrm{FD}}\, d\varepsilon$$

$$\langle E\rangle_g = gA\int_0^\infty \varepsilon^{3/2}\cdot f_{\mathrm{FD}}\, d\varepsilon$$

Betrachte allgemein

$$I[g] = \int_{-\infty}^{\infty} g(\varepsilon) f_{\mathrm{FD}} \mathrm{d}\varepsilon = G(\varepsilon) f_{\mathrm{FD}}\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} G(\varepsilon) f'_{\mathrm{FD}} \mathrm{d}\varepsilon$$

mit

$$G(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\varepsilon} g(x)dx$$

Erster Term verschwindet weil $G(-\infty) = 0$, $f_{\mathrm{FD}}(\infty) = 0$.

$f'_{\mathrm{FD}}(\varepsilon) \neq 0$ nur in einem kleinen Bereich von $\sim k_{\mathrm{B}}T$ um μ. Daher kann man $G(\varepsilon)$ um $\varepsilon = \mu$ entwickeln!

$$G(\varepsilon) \approx G(\mu) + (\varepsilon - \mu)g(\mu) + \frac{1}{2}(\varepsilon - \mu)^2 g'(\mu) + \ldots$$

somit

$$\begin{aligned} I[g] &= -\int_{-\infty}^{\infty} \left[G(\mu) + (\varepsilon - \mu)g(\mu) + \frac{1}{2}(\varepsilon - \mu)^2 g'(\mu) + \ldots \right] f'_{\mathrm{FD}} \mathrm{d}\varepsilon \\ &= G(\mu)I_0 + (k_B T)g(\mu)I_1 + \frac{1}{2}(k_B T)^2 g'(\mu)I_2 + \ldots \end{aligned}$$

mit der Definition

$$I_k = -\int_{-\infty}^{\infty} dx x^k f'_{\mathrm{FD}}(x) = \begin{cases} 0 & \text{k ungerade} \\ 1 & k = 0 \\ \frac{\pi^2}{3} & k = 2 \end{cases}$$

wir erhalten die Sommerfeld-Entwicklung

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(\varepsilon)\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}\mathrm{d}\varepsilon \approx \int_{-\infty}^{\mu} g(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 g'(\mu) + \mathcal{O}\left((k_B T)^4\right)$$

$$\begin{aligned} \langle N\rangle_g &= \frac{2}{3} g A \mu^{3/2}\left[1+\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{1}{\beta\mu}\right)^2+\cdots\right] \\ \langle E\rangle_g &= \frac{2}{5} g A \mu^{5/2}\left[1+\frac{5\pi^2}{8}\left(\frac{1}{\beta\mu}\right)^2+\cdots\right] \end{aligned}$$

wegen

$$\langle N\rangle_g = g\int_0^{\epsilon_\mathrm{F}} d\epsilon \mathcal{D}(\epsilon) = g\frac{2}{3}A\epsilon_\mathrm{F}^{3/2}$$

folgt aus der Reihendarstellung für $\langle N\rangle_g$

$$\epsilon_\mathrm{F}^{3/2} = \mu^{3/2}\left[1+\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{1}{\beta\mu}\right)^2+\cdots\right] \sim \mu^{3/2}\left[1+\frac{\pi^2}{8}\left(\underbrace{\frac{1}{\beta\epsilon_\mathrm{F}}}_{=T/T_F}\right)^2\right]$$

also
$$\mu \sim \epsilon_{\mathrm{F}} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{1}{\beta \epsilon_{\mathrm{F}}} \right)^2 \right]^{-2/3} \sim \epsilon_{\mathrm{F}} \left[1 + \underbrace{\left(-\frac{2}{3} \right) \frac{\pi^2}{8}}_{-\frac{\pi^2}{12}} \left(\frac{1}{\beta \epsilon_{\mathrm{F}}} \right)^2 \right]$$

aus der Reihendarstellung für $\langle E \rangle_g$ folgt

$$\begin{aligned}
\langle E \rangle_g &= g \frac{2}{5} A \mu^{5/2} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} \left(\frac{1}{\beta \mu} \right)^2 + \cdots \right] \\
&\sim g \frac{2}{5} \left(\langle N \rangle_g \frac{3}{2} \frac{1}{g} \epsilon_{\mathrm{F}}^{-3/2} \right) \mu^{5/2} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} \left(\frac{1}{\beta \mu} \right)^2 \right] \\
&= \frac{3}{5} \langle N \rangle_g \frac{\mu^{5/2}}{\epsilon_{\mathrm{F}}^{3/2}} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} \left(\frac{1}{\beta \mu} \right)^2 \right] \\
&\sim \frac{3}{5} \langle N \rangle_g \epsilon_{\mathrm{F}} \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{1}{\beta \epsilon_{\mathrm{F}}} \right)^2 \right] \quad \text{mit} \quad \frac{1}{\beta \epsilon_{\mathrm{F}}} = \frac{T}{T_{\mathrm{F}}}
\end{aligned}$$

analog

$$
\begin{aligned}
P &\sim \frac{2}{5}\left(\frac{6\pi^2}{g}\right)^{3/2}\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\langle N\rangle_g}{V}\right)^{5/3}\left[1+\frac{5\pi^2}{12}\left(\frac{1}{\beta\epsilon_{\mathrm{F}}}\right)^2\right] \\
&= P(T=0)\left[1+\frac{5\pi^2}{12}\left(\frac{1}{\beta\epsilon_{\mathrm{F}}}\right)^2\right]
\end{aligned}
$$

d.h., es erfolgt eine Druckerhöhung
somit

$$
C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = \underbrace{\langle N\rangle_g k_{\mathrm{B}}\frac{\pi^2}{2}\frac{k_{\mathrm{B}}}{\epsilon_{\mathrm{F}}}}_{\gamma} T \propto T
$$

in kristallinen Metallen gilt somit

$$
C_V^{\mathrm{ges}} = C_V^{\mathrm{e}^-} + C_V^{\mathrm{Phononen}} \sim \gamma T + C T^3
$$

γ .... Sommerfeldkonstante