

### 6.3.1 Pauliprinzip

Wenn wir in Gleichung (6.4) jetzt den Spezialfall  $j_l = j_k$  betrachten, ist der Zustand  $|\Psi'_j\rangle$  physikalisch identisch zu  $|\Psi_j\rangle$ , gleichzeitig gilt aber  $|\Psi'_j\rangle = -|\Psi_j\rangle \equiv |\Psi_j\rangle$ . Dies ist nur möglich für  $|\Psi_j\rangle \equiv 0$ . Das heißt, der Vielteilchenzustand mit  $j_l = j_k$  existiert nicht. Übersetzt in Besetzungszahlen bedeutet das:  $n_l = 2$  ist nicht möglich. Wegen der Allgemeingültigkeit unserer Betrachtungen (sie gelten für beliebige Orbitale und beliebig viele Teilchen im System) schlussfolgern wir: Für Fermionen kann ein beliebiges 1-Teilchenorbital  $|\phi_i\rangle$  nur einfach besetzt (oder unbesetzt) sein. Das heißt, die zulässigen Werte der Besetzungszahlen für Fermionen sind gegeben durch

$$n_p = \{0, 1\}, \quad \forall p, \quad \text{Pauliprinzip}$$

Dies ist das allgemeine Prinzip für Fermionen, das Wolfgang Pauli bereits 1925 gefunden hatte.

### 6.3.2 Großkanonisches Potential für Fermionen. Fermiverteilung

Das Großkanonische Potential des Fermigas folgt sofort aus der allgemeinen Formel in Besetzungszahldarstellung, Glg. (6.10), durch Beschränkung der Besetzungszahlen auf 0 und 1:

$$\begin{aligned} \zeta_p(T, V, \mu) &= \sum_{n_p=0}^1 e^{\beta n_p(\mu - \epsilon_p)} = 1 + e^{\beta(\mu - \epsilon_p)}, \\ \Omega(T, V, \mu) &= -k_B T \sum_p \ln(1 + e^{\beta(\mu - \epsilon_p)}). \end{aligned} \quad (6.13)$$

Aus Glg. (6.13) und (6.12) folgt die mittlere Besetzungszahl für Fermionen:

$$\langle n_p \rangle_G(T, V, \mu) = k_B T \left. \frac{\partial}{\partial \mu} \right|_{T, V} \ln[1 + e^{\beta(\mu - \epsilon_p)}] = k_B T \beta \frac{e^{\beta(\mu - \epsilon_p)}}{1 + e^{\beta(\mu - \epsilon_p)}}.$$

Für das Resultat, das sich durch Kürzen ergibt, führen wir eine neue Bezeichnung ein, die die Abhängigkeit von der Energie des Orbitals  $p$  explizit macht:

$$\langle n_p \rangle_G(T, V, \mu) \equiv n(\epsilon_p; T, V, \mu) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_p - \mu)} + 1}. \quad (6.14)$$

Damit haben wir die *Fermi-Dirac-Verteilung* gefunden, die angibt, wie groß im Mittel die Besetzung des Orbitals mit der Energie  $\epsilon_p$  ist und wie diese von Temperatur, Volumen und chemischem Potential abhängt.

#### Bemerkungen:

- Beachte, dass die Verteilung (6.14) nur auf diskreten Energiewerten  $\epsilon_p$  definiert ist.
- Bei der Ableitung der Fermiverteilung (6.14) haben wir nicht explizit Annahmen über ein ideales System verwendet. Tatsächlich gilt die gefundene *Energieabhängigkeit* auch für wechselwirkende Systeme. In diesem Fall sind allerdings die Energieeigenwerte  $\epsilon_i$  nicht diejenigen eines Einteilchensystems.<sup>5</sup>

<sup>5</sup>Sie ergeben sich aus der Diagonalisierung der Einteilchen-Dichtematrix und entsprechen den sogenannten natürlichen Orbitalen. Das Umschreiben von Glg. 6.3.2 in eine Fermiverteilung bezüglich der Impulse mittels  $\epsilon_p = p^2/2m$  gilt allerdings nur für ein ideales Gas.

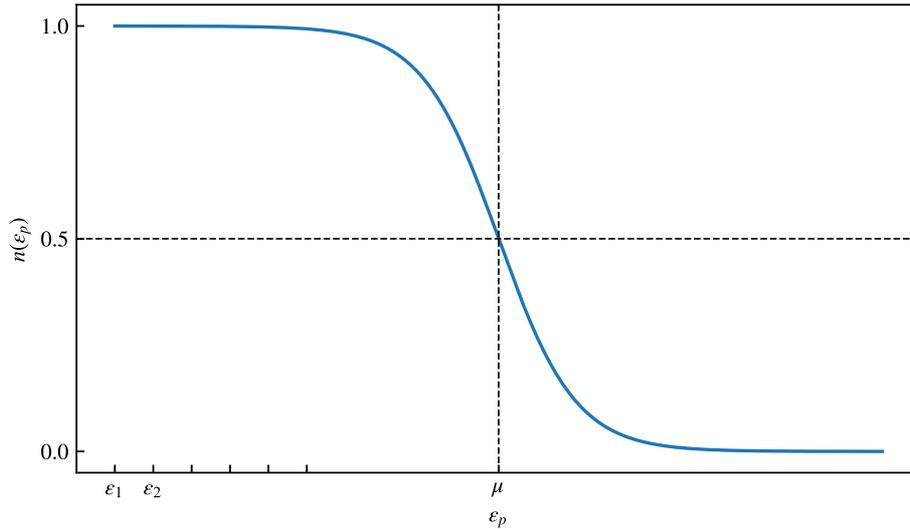


Abbildung 6.1: Fermi-Dirac-Verteilung (6.14) für eine endliche Temperatur. Für  $\epsilon_p \ll \mu$  sind die Besetzungen gleich 1. An der Stelle  $\epsilon_p = \mu$  fällt die Besetzung (für beliebige  $\mu$  und  $T$ ) auf  $1/2$  ab.

**Normierung der Fermi-Verteilung. Erwartungswerte.** Da die Summe der Besetzungszahlen immer  $N$  ergibt, gilt dies auch für deren Ensemble-Mittelwerte:

$$\langle \hat{N} \rangle_G = \sum_p n(\epsilon_p; T, V, \mu) = N(T, V, \mu). \quad (6.15)$$

Für eine vorgegebene Teilchenzahl, Temperatur und Volumen liefert Glg. (6.15) eine (implizite) Bedingung für das chemische Potential,  $\mu = \mu(T, V, N)$ .

Die Fermiverteilung ist eine gut definierte Wahrscheinlichkeits-Verteilung (das gilt streng genommen für  $n(\epsilon_p; T, V, \mu)/N$ , da diese Größe auf 1 normiert ist). Wir können sie daher für die Berechnung von Erwartungswerten im großkanonischen Ensemble verwenden. Zum Beispiel erhalten wir für den Erwartungswert der Energie<sup>6</sup>

$$\langle \hat{H} \rangle_G(T, V, \mu) = \sum_p \langle n_p \epsilon_p \rangle = \sum_p \epsilon_p n(\epsilon_p; T, V, \mu),$$

und analog für Erwartungswerte anderer Operatoren.

Explizite Resultate für thermodynamische Größen von Fermionen hängen von den mikroskopischen Details des Systems ab. Diese gehen ein in das chemische Potential, das durch eine separate Rechnung gefunden werden muss und auch von der Wechselwirkung zwischen den Teilchen abhängt. Im nächsten Abschnitt betrachten wir den einfachsten Fall eines Fermisystems: das ideale Fermigas. Wir betrachten dieses zunächst für  $T = 0$  und erweitern das Resultat anschließend in Abschnitt 6.3.4 auf endliche Temperaturen.

### 6.3.3 Das ideale Fermigas bei $T = 0$ . Fermienergie und thermodynamische Größen

Wir betrachten ein nicht-wechselwirkendes Quantengas identischer Fermionen mit der Energie-Dispersion  $E(p) = p^2/2m$  und Spin  $s$ . Ohne das chemische Potential zu kennen (dies ergibt

<sup>6</sup>Dies ist der Erwartungswert der Gesamtenergie des  $N$ -Teilchensystems. Würde man die Wahrscheinlichkeitsdichte  $n(\epsilon_p)/N$  verwenden, ergäbe sich die Energie pro Teilchen.

sich erst aus der Rechnung), können wir den Grenzwert der Fermiverteilung (6.14) für  $T \rightarrow 0$  bestimmen: es ergibt sich eine Stufenfunktion,

$$\lim_{T \rightarrow 0} n(\epsilon_p; T, V, \mu) = n_0(\epsilon_p; V, \mu_0) = \begin{cases} 1, & \epsilon_p < \mu_0(V, N), \\ 0, & \epsilon_p > \mu_0(V, N), \end{cases} \quad (6.16)$$

mit einer scharfen “Kante” bei der Energie  $\mu_0(V, N) \equiv \lim_{T \rightarrow 0} \mu(T, V, N)$ . Dieser Grenzwert des chemischen Potentials wird als *Fermienergie*,  $E_F$ , bezeichnet und hängt mit dem Fermi-Impuls,  $p_F$  und der Fermi-Wellenzahl,  $k_F$ , zusammen,

$$\mu_0(V, N) \equiv E_F(V, N) = \frac{p_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}.$$

Damit lässt sich die Grundzustandsfunktion (6.16) auch schreiben als

$$n_0(\epsilon_p; V, N) = \Theta[E_F(V, N) - \epsilon_p].$$

In einem dreidimensionalen isotropen Fermigas bedeutet das, dass nur Zustände innerhalb der “Fermikugel” besetzt sind, d.h. mit  $p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \leq p_F^2$ .

**Erwartungswerte von Observablen. Zustandsdichte.** Damit können wir Erwartungswerte einer beliebigen Observable  $f$ , die von den Besetzungszahlen und damit von  $\epsilon_p$  abhängt, berechnen durch Integration über die Fermikugel und Summation über alle  $2s + 1$  Spinprojektionen<sup>7</sup>,

$$\langle f \rangle_G = \sum_p f(\epsilon_p) n(\epsilon_p) = \sum_{\sigma=-s}^s \sum_{\vec{p}} f(\epsilon_p) n(\epsilon_p). \quad (6.17)$$

Da keine Spinabhängigkeit der Summanden vorliegt, ergibt die Spinsumme den Spinentartungsfaktor,  $g_s = 2s + 1$ . Von der Impulssumme gehen wir über zum Volumenintegral in Kugelkoordinaten<sup>8</sup> und nutzen die sphärische Symmetrie,

$$\sum_{\vec{p}} \dots \longrightarrow \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} 4\pi \int_0^\infty dp p^2 \dots,$$

und wechseln schließlich zu einer Integration über die Energie, gemäß  $p^2 dp = (2m^3 \epsilon)^{1/2} d\epsilon$ . Damit finden wir folgendes Resultat für den Ausdruck (6.17)

$$\langle f \rangle_G(T, V, \mu) = \int_0^\infty d\epsilon \mathcal{D}(\epsilon; V) f(\epsilon) n(\epsilon; T, V, \mu), \quad (6.18)$$

$$\mathcal{D}(\epsilon; V) = \mathcal{D}_0(V) \epsilon^{1/2}, \quad \mathcal{D}_0(V) = \frac{g_s V (2m)^{3/2}}{4\pi^2 \hbar^3},$$

wobei wir die *Zustandsdichte* eingeführt haben, d.h. die Anzahl von Einteilchenzuständen im Intervall  $[\epsilon, \epsilon + d\epsilon]$ . Man beachte die wurzelförmige Abhängigkeit von der Energie, die eine Konsequenz der Dimensionalität ( $d = 3$ ) des Systems ist<sup>9</sup>. Das bedeutet, dass der Erwartungswert

<sup>7</sup>Wir verwenden zunächst die allgemeine Fermiverteilung, damit wir das Resultat später weiter verwenden können. Den Übergang zum Grundzustand führen wir erst am Ende aus.

<sup>8</sup>Das setzt voraus, dass die Impulseigenwerte quasikontinuierlich sind, was für hinreichend große Teilchenzahl erfüllt ist.

<sup>9</sup>In einem zweidimensionalen Elektronengas ist die Zustandsdichte energieunabhängig, während sie in 1D mit der Energie abnimmt, s. Aufgaben.

einer Funktion von  $\epsilon^m$  auf ein Energieintegral über die Fermiverteilung multipliziert mit  $\epsilon^{m+1/2}$  führt. Das sind die Fermi-Integrale, die wir in Abschnitt 6.3.4 einführen werden. Zunächst widmen wir uns jetzt den Erwartungswerten im Grenzfall  $T \rightarrow 0$ .

**Erwartungswerte im Grundzustand.** Wir gehen jetzt in den Ausdrücken (6.18) zum Limes  $T \rightarrow 0$  über, wofür wir den Index "0" verwenden werden,

$$\langle f \rangle_G^0(V, \mu_0) = \mathcal{D}_0(V) \int_0^{\mu_0} d\epsilon \epsilon^{1/2} f(\epsilon). \quad (6.19)$$

Im Folgenden betrachten wir Spezialfälle der allgemeinen Formel (6.19).

1. Für den einfachsten Fall,  $f \rightarrow 1$ , ergibt der Erwartungswert genau die Normierung der Fermi-Verteilung, vgl. (6.17). Nach Berechnung des bestimmten Integrals erhalten wir

$$N = \mathcal{D}_0 \frac{2}{3} \mu_0^{3/2}, \quad (6.20)$$

woraus wir sofort das *chemische Potential im Grundzustand (die Fermienergie)* finden, das nur von der Kombination  $V/N = n$  abhängt:

$$\begin{aligned} \mu_0(n) = E_F(n) &= \left[ \frac{3N}{2\mathcal{D}_0} \right]^{2/3} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2, \quad k_F = \left( \frac{6\pi^2 n}{g_s} \right)^{1/3} \end{aligned}$$

2.  $f(\epsilon) = \epsilon$ : dies ergibt die mittlere Energie im Grundzustand,

$$U_0(N, V) = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_G^0(N, V) = \langle \epsilon \rangle_G^0(N, V) = \mathcal{D}_0 \cdot \frac{2}{5} \mu_0^{5/2},$$

wobei der letzte Faktor aus der Integration von  $\epsilon^{3/2}$  resultiert. Nun verwenden wir Glg. (6.20) und ersetzen  $2\mathcal{D}_0\mu_0^{3/2} \rightarrow 3N$ , so dass das Endergebnis lautet

$$U_0(N, V) = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_G^0(N, V) = N \frac{3}{5} E_F(n) \propto N n^{2/3}. \quad (6.21)$$

Das bedeutet, im Grundzustand ist die innere Energie pro Teilchen von der Größenordnung der Fermienergie. Da alle Energiezustände mit  $\epsilon \leq E_F$  genau einfach besetzt sind, ergibt sich ein Koeffizient kleiner 1. Die Mittelung über die Zustandsdichte führt auf den Faktor  $3/5$ .

3. Zustandsgleichung. Den Druck des idealen Fermigas im Grundzustand erhalten wir direkt aus der inneren Energie über den Umweg über die Freie Energie:

$$p_0 = - \lim_{T \rightarrow 0} \frac{\partial F}{\partial V} \Big|_N = - \frac{\partial}{\partial V} \Big|_N \lim_{T \rightarrow 0} (U - TS) = - \frac{\partial U_0}{\partial V} \Big|_N$$

Unter Verwendung von Glg. (6.21) finden wir schließlich

$$p_0(n) = - \frac{3}{5} N \frac{\partial E_F}{\partial V} \Big|_N = \frac{2}{5} N \frac{E_F}{V} \propto n^{5/3}. \quad (6.22)$$

4. Weitere Erwartungswerte, wie Teilchenzahl-Fluktuationen und Entropie betrachten wir später, im Abschnitt 6.4.2.

### Diskussion der Zustandsgleichung.

- Aus Glg. (6.21) und (6.22) folgt ein Zusammenhang zwischen Druck und Energiedichte

$$p_0 = \frac{2}{3} \frac{U_0}{V}.$$

Das selbe Resultat hatten wir für das klassische ideale Gas gefunden, s. Glg. 4.1.

- Das Fermigas hat selbst bei  $T = 0$  einen endlichen Druck<sup>10</sup>  $p_0$ , der positiv ist, also Repulsion der Teilchen zur Folge hat. Daraus resultiert auch eine signifikante Geschwindigkeit der Teilchen (die Fermigeschwindigkeit  $v_F$ , mit  $E_F = mv_F^2/2$ ), selbst bei  $T = 0$  (s. Aufgaben, Abschn. 6.7).
- **Stabilität der Materie gegen Gravitations-Kollaps:** wir betrachten die Änderung der Energie des Fermigases (die Elektronen haben hier den dominanten Beitrag) bei Berücksichtigung der Gravitationsenergie,  $W_G^a = -G \frac{m_a^2}{r_a}$ , wobei "a" die Teilchensorte (z.B. Elektronen und Protonen) bezeichnet, und  $r_a$  ist der mittlere Teilchenabstand bei einer gegebenen Dichte  $n_a = N_a/V$ . Durch Übergang zum Quanten-Kopplungsparameter (Brueckner-Parameter),

$$r_s = \frac{r_a}{a_B} \sim n_a^{-1/3}, \quad (6.23)$$

$$r_a = \left( \frac{3}{4\pi n_a} \right)^{1/3},$$

wobei  $r_a$  der mittlere Teilchenabstand ist und  $a_B$  den Bohr-Radius bezeichnet, ergibt sich für die Energie pro Elektron

$$\frac{U_e + U_i}{N} \approx \frac{A_{\text{Fermi}}^e}{r_s^2} - \frac{B_{\text{Grav}}^i}{r_s} - \frac{C_{\text{Coul}}^{ei}}{r_s} + \dots, \quad (6.24)$$

wobei wir weitere Beiträge, wie die repulsive Coulombwechselwirkung von Elektronen bzw. Ionen, die kinetische Energie der Ionen, sowie die Gravitation der Elektronen weggelassen haben. Dabei ist der Koeffizient der inneren Energie des Fermigases,  $A$ , positiv. Sowohl Gravitation als auch Coulomb-Anziehung zwischen Elektronen und Ionen sind attraktiv, daher sind auch die Koeffizienten  $B$  und  $C$  positiv.

Beide attraktiven Terme führen zu einer Erniedrigung der Energie bei Verringerung von  $r_s$ , also Erhöhung der Dichte (Kompression) und begünstigen somit einen Kollaps des Systems. Wären die Elektronen klassische Teilchen, hätten sie eine kinetische Energie von  $3k_B T/2$ , die sich mit zunehmender Dichte nicht ändert und den Kollaps nicht verhindern kann.

Tatsächlich sind die Elektronen aber Fermionen, und ihre kinetische Energie ist durch den ersten Term in Glg. 6.24 gegeben. Dieser wirkt dem Kollaps entgegen: die kinetische Energie des Fermigases nimmt bei Kompression zu, und zwar schneller ( $\sim n^{2/3}$ ) als die anderen Beiträge ( $\sim n^{1/3}$ ). Das führt dazu, dass eine kritische Dichte nicht überschritten

<sup>10</sup>im Gegensatz zum klassischen idealen Gas, wo  $p_0 = nk_B T$ , und der Druck bei  $T \rightarrow 0$  verschwindet

wird. Damit sorgt die kinetische Energie des Fermigas (das Pauliprinzip) für die Stabilität der Materie. Die Zahlenwerte lassen sich leicht abschätzen, s. Aufgaben.

**Relativistische Effekte. Chandrasekhar-Grenze.** Da mit wachsender Dichte die Fermi-Energie immer weiter anwächst, erreicht sie schließlich Werte die vergleichbar mit der Ruhe-Energie der Elektronen,  $m_e c^2$  ist. Tatsächlich werden solche Dichten in kompakten Sternen erreicht. Das bedeutet, dass die Energiedispersion,  $E(p)$  nicht mehr  $p^2/2m$  ist, sondern durch den relativistischen Ausdruck ersetzt werden muss (s. Aufgaben). Im ultrarelativistischen Grenzfall ergibt sich  $E(p) \approx cp$ , und die Rechnung für die Fermienergie muss modifiziert werden,  $\int dp p^2 \rightarrow \int d\epsilon \epsilon^2$ . Man überzeugt sich leicht, dass dann  $E_F \sim n^{1/3}$  an die Stelle der nichtrelativistischen Skalierung tritt. Dies ist aber die selbe Dichteabhängigkeit wie die der attraktiven Gravitation, so dass die Stabilisierung gegen den Kollaps nur noch begrenzt möglich ist. Tatsächlich konnte S. Chandrasekhar<sup>11</sup> bereits 1929 berechnen, dass es eine kritische Masse gibt, oberhalb derer die Gravitation überwiegt und ein Stern nach Erlöschen der Fusionsprozesse (Weißer Zwerg) kollabiert – zu einem Neutronenstern oder Schwarzen Loch:

$$M_{\text{cr}} = 1.45727 \left( \frac{2Z}{A} \right)^2 M_{\text{SONNE}},$$

wobei  $Z$  die Zahl der Protonen und  $A$  die Zahl der Nukleonen pro Elektron ist. Das Verhältnis  $Z/A$  variiert stark, in Abhängigkeit vom Charakter der Materie im Sterninneren und somit auch der Zahlenwert für  $M_{\text{cr}}$ .

- **Quantenkopplungs-Parameter im Elektronengas.** Der oben eingeführte dimensionslose Parameter (6.23) ist ein Maß dafür, wie nah die Eigenschaften eines Fermigas mit denen des idealen Fermigas übereinstimmen. Der Parameter  $r_s$  übernimmt somit die Rolle des Quanten-Kopplungsparameters  $\Gamma_q$  in einem Fermigas bei  $T = 0$ , anstelle des klassischen Nichtidealitätsparameters  $\Gamma$ . Man zeigt leicht, dass tatsächlich<sup>12</sup>

$$\Gamma_q = \frac{|\langle U_{\text{int}} \rangle|}{\langle E_{\text{kin}} \rangle} \sim r_s,$$

wobei für die kinetische Energie die innere Energie (6.21) und für die Wechselwirkungsenergie die mittlere Coulombenergie, zweier Elektronen,  $U_{\text{int}} \approx \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_e}$ , mit dem mittleren Teilchenabstand  $r_e$  einzusetzen ist.

Im Limes  $r_s \rightarrow 0$  ergibt sich das ideale Fermigas. Für die Leitungselektronen der meisten Metalle ist dagegen  $r_s \sim 2 \dots 5$ , d.h. diese Elektronen sind nichtideal und signifikant durch ihre Coulomb-Wechselwirkung beeinflusst. Diese Effekte untersuchen wir etwas genauer im Abschnitt 6.3.6.

### 6.3.4 Das Fermigas bei endlichen Temperaturen. Sommerfeld-Entwicklung

Wir wollen jetzt die Resultate für das ideale Fermigas auf den Fall endlicher Temperaturen ausdehnen. Dafür messen wir die Temperatur durch den dimensionslosen Entartungsparameter

$$\Theta \equiv \frac{k_B T}{E_F}.$$

<sup>11</sup>Dafür und für weitere Arbeiten erhielt er 1983 den Physik-Nobelpreis.

<sup>12</sup>Aufgabe: Man finde den Proportionalitätsfaktor.

Für  $\Theta \lesssim 0.1$  sind analytische Resultate möglich, die zuerst von Arnold Sommerfeld gefunden wurden, während für höhere Temperaturen i.d.R. Computersimulationen Verwendung finden. Wir kehren zurück zum Resultat für Erwartungswerte bei endlichen Temperaturen, Glg. (6.18), in das Integrale über die Fermiverteilung multipliziert mit der Potenz  $\epsilon^k$  eingehen, was auf die *Fermi-Integrale* führt<sup>13</sup>

$$F_{\nu-1}(\beta, \mu) \equiv \int_0^{\infty} d\epsilon \epsilon^{\nu-1} \cdot n(\epsilon; \mu, \beta). \quad (6.25)$$

In der Regel tauchen halbzahlige Potenzen auf (in 3D), insbesondere für die Teilchenzahl ( $f \equiv \epsilon^0$ :  $\nu - 1 = \frac{1}{2}$ ), sowie für die Energie ( $f \equiv \epsilon^1$ :  $\nu - 1 = \frac{3}{2}$ ).

Wir integrieren (6.25) partiell und finden (der Term ohne Integral verschwindet)

$$F_{\nu-1}(\beta, \mu) = \frac{1}{\nu} \int_0^{\infty} d\epsilon \epsilon^{\nu} \left( -\frac{\partial n}{\partial \epsilon} \right). \quad (6.26)$$

Mit der Substitution  $x \equiv \beta(\epsilon - \mu)$  folgt

$$\begin{aligned} -\frac{\partial n}{\partial \epsilon} d\epsilon &= -\frac{\partial n}{\partial x} dx \equiv g(x) dx, \\ g(x) &= \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} = g(-x), \end{aligned}$$

folgt für das Integral (6.26)

$$\begin{aligned} F_{\nu-1} &= \frac{1}{\nu} \int_{-\beta\mu}^{\infty} dx g(x) [\mu + k_B T x]^{\nu} = \\ &= \frac{\mu^{\nu}}{\nu} \int_{-\beta\mu}^{\infty} dx g(x) \left[ 1 + \nu \frac{k_B T}{\mu} x + \frac{\nu(\nu-1)}{2} \left( \frac{k_B T}{\mu} \right)^2 x^2 + \mathcal{O} \left[ \frac{k_B T}{\mu} \right]^3 \right], \end{aligned} \quad (6.27)$$

wobei wir in der zweiten Zeile die binomische Formel verwendet haben.

Wir werten dieses Integral jetzt im Grenzfall niedriger Temperaturen – die Referenz-Energie ist die Fermienergie – aus, also für  $\Theta \lesssim 0.1$ . Dann können wir folgende Vereinfachungen vornehmen:

1.  $\frac{k_B T}{\mu} \approx \frac{k_B T}{\mu_0} = \Theta$ , damit können wir den Ausdruck in den eckigen Klammern in (6.27) vereinfachen.
2.  $-\beta\mu \rightarrow -\frac{1}{\Theta} \rightarrow -\infty$ . Das verwenden wir für die untere Integrationsgrenze in Glg. (6.27).
3. Bei der Auswertung der Integralbeiträge in Glg. (6.27) fällt der Term  $\sim xg(x)$  weg, da der Integrand ungerade ist, und es verbleiben die Integrale mit geraden Potenzen,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx g(x) &= 1, \\ \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 g(x) &= \frac{\pi^2}{3}. \end{aligned}$$

<sup>13</sup>Wir verwenden einen verschobenen Index, da dies die Ableitung der Sommerfeld-Entwicklung erleichtert. Man beachte, dass unterschiedliche Definitionen der Integrale im Umlauf sind. Eine alternative Definition enthält noch eine Gamma-Funktion im Nenner:  $\tilde{F}_{\nu} \equiv F_{\nu}/\Gamma(\nu+1)$ .

Mit diesen Ergebnissen finden wir die *Sommerfeld-Entwicklung* für die Fermi-Integrale und für Erwartungswerte

$$\begin{aligned} F_{\nu-1}(\beta, \mu) &= \frac{\mu^\nu}{\nu} \left\{ 1 + \frac{\nu(\nu-1)}{6} \pi^2 \Theta^2 \right\} + \mathcal{O}(\Theta^4), \\ F_\nu(\beta, \mu) &= \frac{\mu^{\nu+1}}{\nu+1} \left\{ 1 + \frac{\nu(\nu+1)}{6} \pi^2 \Theta^2 \right\} + \mathcal{O}(\Theta^4), \\ \langle \epsilon^\nu \rangle_G(\beta, \mu) &= \mathcal{D}_0 F_{\nu+\frac{1}{2}}(\beta, \mu). \end{aligned}$$

Für die wichtigen Fälle der mittleren Teilchenzahl und der inneren Energie folgt daraus (mit Termen bis zur 2. Ordnung)

$$N(\beta, \mu) = \langle \epsilon^0 \rangle_G = \mathcal{D}_0 F_{\frac{1}{2}} = \mathcal{D}_0 \frac{2}{3} \mu^{3/2} \left[ 1 + \frac{\pi^2}{8} \Theta^2 \right], \quad (6.28)$$

$$U(\beta, \mu) = \langle \epsilon^1 \rangle_G = \mathcal{D}_0 F_{\frac{3}{2}} = \mathcal{D}_0 \frac{2}{5} \mu^{5/2} \left[ 1 + \frac{5\pi^2}{8} \Theta^2 \right], \quad (6.29)$$

wobei allerdings der Vorfaktor  $\mu$  noch eine Funktion der Temperatur ist. Diesen müssen wir noch durch  $\mu_0 = E_F$  und eine Korrektur der Ordnung  $\Theta^2$  ausdrücken:

- Aus Gleichung (6.28) finden wir das *chemische Potential* bei endlichen Temperaturen. Dazu eliminieren wir zunächst in (6.28) die Teilchenzahl unter der Annahme, dass  $N(T) \approx N(0) = \frac{2}{3} \mathcal{D}_0 E_F^{3/2}$  und lösen nach  $\mu(T)$  auf:

$$\mu(n, \Theta) = E_F(n) \left[ 1 + \frac{\pi^2}{8} \Theta^2 \right]^{-2/3} \approx E_F(n) \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \Theta^2 \right]. \quad (6.30)$$

- Analog finden wir aus Glg. (6.29) die *innere Energie*, wobei wir im zweiten Schritt das chemische Potential durch (6.30) ausdrücken:

$$\begin{aligned} \frac{U(T, E_F)}{N} &= \frac{3}{5} \mu(T) \frac{1 + \frac{5\pi^2}{8} \Theta^2}{1 + \frac{\pi^2}{8} \Theta^2} \approx \\ &\approx \frac{3}{5} E_F(n) \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \Theta^2 \right] \left[ 1 + \frac{5\pi^2}{8} \Theta^2 \right] \left[ 1 - \frac{\pi^2}{8} \Theta^2 \right] \approx \\ &\approx \frac{3}{5} E_F(n) \left[ 1 + \frac{\pi^2}{4} \Theta^2 \right]. \end{aligned} \quad (6.31)$$

Damit haben wir die innere Energie des idealen Fermigas pro Teilchen bei endlichen Temperaturen ( $\Theta \lesssim 0.1$ ) gefunden. Sie wächst mit der Dichte,  $\sim n^{2/3}$ , wie im Grundzustand, und darüber hinaus  $\sim T^2$ , mit der Temperatur. Diese Dichte-Abhängigkeit ist ein wesentlicher Unterschied zum klassischen Gas, wo die Energie pro Teilchen nicht von der Dichte abhängt. Beim Fermigas ist dies eine Konsequenz des Pauliprinzipts, da jedes zusätzlich hinzugefügte Teilchen einen energetisch höheren Zustand einnehmen muss als die bereits vorhandenen.

- Aus Glg. (6.31) finden wir die *spezifische Wärme* bei konstantem Volumen:

$$\frac{1}{N} C_{VN} = \frac{1}{N} \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_{V, N} = \frac{3}{5} \frac{\pi^2}{2} k_B \Theta,$$

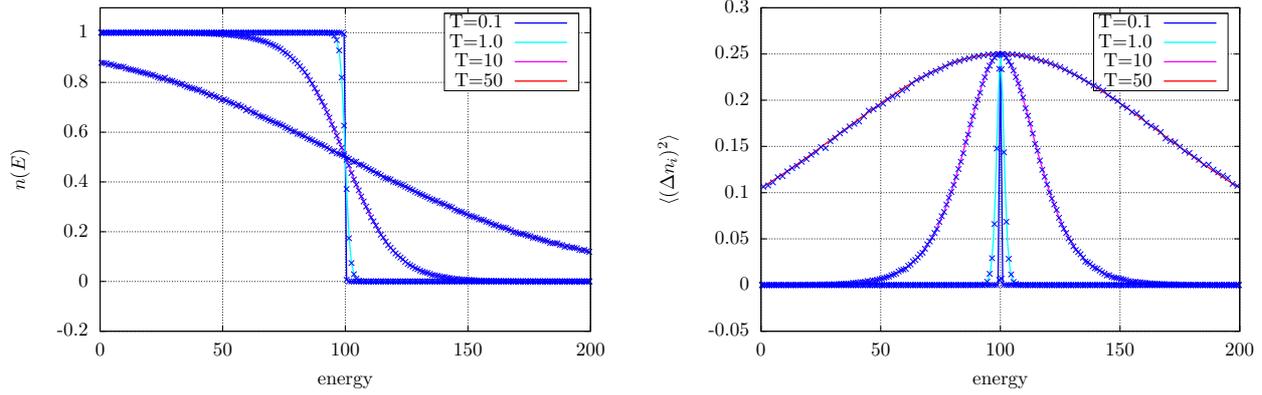


Abbildung 6.2: Mittlere Besetzungszahlen (links) und quadratische Fluktuationen der Besetzungszahlen (rechts) für vier Temperaturen. Die Linien sind analytische Ergebnisse, die Symbole Monte Carlo-Simulationen in der Besetzungszahl-Darstellung. Nichtwechselwirkende Fermionen in einem Oszillatorpotential. Temperatur und Energie in Einheiten von  $\hbar\omega$ .

die bei niedrigen Temperaturen sehr klein ist. Im Festkörper ist ihr Beitrag damit i.d.R. viel kleiner als der des Kristallgitters<sup>14</sup>. Im Limes  $T \rightarrow 0$  verschwindet die Wärmekapazität, in Übereinstimmung mit dem 3. Hauptsatz.

Der kleine Werte der elektronischen Wärmekapazität ist leicht zu verstehen.  $C$  ist ja verknüpft mit Fluktuationen der Energie<sup>15</sup>. Diese treten nur auf, wenn Elektronen zwischen verschiedenen Energien der Fermiverteilung Übergänge ausführen. Zustände, die voll besetzt sind ( $n_p = 1$ ), können nicht zu den Fluktuationen beitragen<sup>16</sup> Fluktuationen sind daher auf ein Energieintervall der Breite  $k_B T$  um die Fermienergie herum beschränkt.

- *Fluktuationen der Besetzungszahl* lassen sich analog zu  $\langle n_p \rangle$  berechnen (Aufgabe). Das Resultat ist im rechten Teil von Abb. 6.2 für vier Temperaturen geplottet. Im linken Teil sind die zugehörigen Besetzungszahlen gezeigt.

<sup>14</sup>Allerdings müssen für Anwendungen auf reale Festkörper Wechselwirkungs-Beiträge bei der Beschreibung der Elektronen berücksichtigt werden, s. Abschnitt 6.3.6.

<sup>15</sup>Aufgabe: man berechne diese.

<sup>16</sup>Diese Zustände sind als Endzustand für Übergänge blockiert, man spricht daher auch von “Pauli blocking”.