

Dies ist das allgemeine Prinzip für Fermionen, das Wolfgang Pauli bereits 1925 gefunden hatte⁵.

6.2.2 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 statistischen

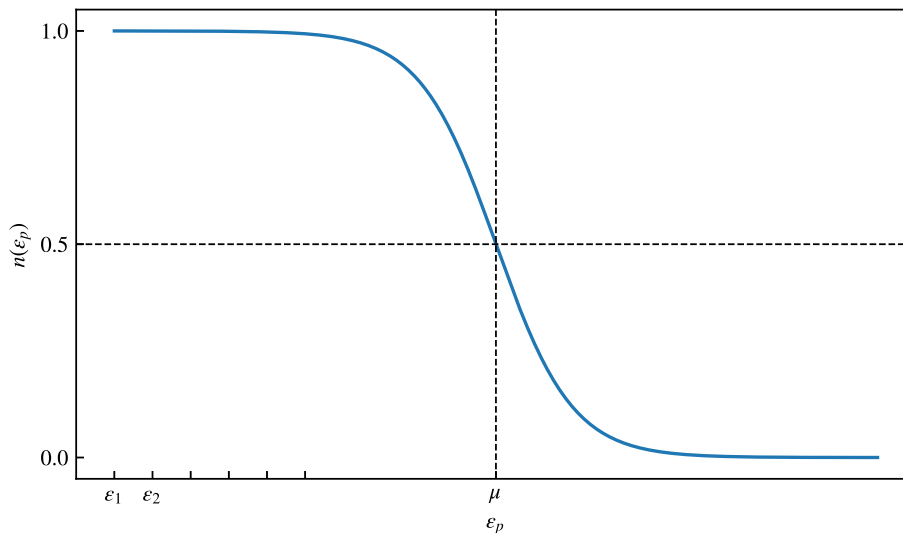


Abbildung 6.1: Fermi-Dirac-Verteilung (6.14) für eine endliche Temperatur. Für $\epsilon_p \ll \mu$ sind die Besetzungen gleich 1. An der Stelle $\epsilon_p = \mu$ fällt die Besetzung (für beliebige μ und T) auf $1/2$ ab.

Mittel (großkanonischer Erwartungswert) die Besetzung des Orbitals mit der Energie ϵ_p ist und wie diese von Temperatur, Volumen und chemischem Potential abhängt.

Bemerkungen:

⁵Für diese und andere Beiträge zur Quantentheorie erhielt Pauli den Nobelpreis 1945.

- Beachte, dass die Verteilung (6.14) nur auf diskreten⁶ Energiewerten ϵ_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 ϵ_i nicht diejenigen eines Einteilchensystems.⁷

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 Energie⁸

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

Im letzten Schritt haben wir ausgenutzt, dass der Energie-Eigenwert keine stochastische Größe ist, d.h. $\langle \epsilon_p \rangle_G = \epsilon_p$. Analog kann der Erwartungswerte anderer Operatoren mit Hilfe von n_p berechnet werden.

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 6.2.4 auf endliche Temperaturen.

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

Wir betrachten ein nicht-wechselwirkendes makroskopisches Quantengas identischer Fermionen mit der Energie-Dispersion $E(p) = p^2/2m$ und Spin s . Ohne das chemische Potential zu kennen (dies ergibt sich erst aus der Rechnung), können wir den Grenzwert der Fermiverteilung (6.14) für $T \rightarrow 0$ bestimmen: es ergibt sich eine Stufenfunktion,

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

⁶genauer: nur auf den Energie-Eigenwerten des Einteilchenproblems. Diese können natürlich - z.B. für freie Teilchen - auch kontinuierlich sein.

⁷Sie ergeben sich aus der Diagonalisierung der Einteilchen-Dichtematrix und entsprechen den sogenannten natürlichen Orbitalen. Das Umschreiben von Glg. (6.14) in eine Fermiverteilung bezüglich der Impulse mittels $\epsilon_p = p^2/2m$ gilt allerdings nur für ein ideales Gas.

⁸Dies ist der Erwartungswert der Gesamtenergie des N-Teilchensystems. Würde man die Wahrscheinlichkeitsdichte $n(\epsilon_p)/N$ verwenden, ergäbe sich die Energie pro Teilchen.

mit einer scharfen “Fermi-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,

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

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 Impulsen $p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \leq p_F^2$. In einem “realen” Festkörper ohne diese Symmetrie spricht man allgemeiner von Fermi-Oberfläche (Fermi surface).

Erwartungswerte von Observablen. Zustandsdichte. Damit können wir Erwartungswerte einer beliebigen Observable f , die von den Besetzungszahlen und damit von ϵ_p abhängt, berechnen durch Integration über die Fermikugel und Summation über alle $2s + 1$ Spinprojektionen⁹,

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

Da keine Spinabhängigkeit der Summanden vorliegt, ergibt die Spinsumme den Spinentartungsfaktor, $g_s = 2s + 1$. Von der Impulssumme gehen wir über zum Volumenintegral in Kugelkoordinaten¹⁰ 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):

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

$$\mathcal{D}(\epsilon; V) = \mathcal{D}_0(V) \epsilon^{1/2}, \quad \mathcal{D}_0(V) = \frac{g_s V (2m)^{3/2}}{4\pi^2 \hbar^3}, \quad (6.19)$$

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 ist¹¹. Das bedeutet, dass z.B. der Erwartungswert einer Funktion von ϵ^m auf ein Energieintegral über die Fermiverteilung, multipliziert mit $\epsilon^{m+1/2}$, führt. Das sind die Fermi-Integrale, die wir in Abschnitt 6.2.4 einführen werden. Zunächst widmen wir uns jetzt den Erwartungswerten im Grenzfall $T \rightarrow 0$.

⁹Wir verwenden zunächst die allgemeine Fermiverteilung, damit wir das Resultat später weiter verwenden können. Den Übergang zum Grundzustand führen wir erst am Ende aus.

¹⁰Das setzt voraus, dass die Impulseigenwerte quasikontinuierlich sind, was für hinreichend große Teilchenzahl erfüllt ist.

¹¹In einem zweidimensionalen Elektronengas ist die Zustandsdichte energieunabhängig, während sie in 1D mit der Energie abnimmt, s. Aufgaben.

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

$$\langle f \rangle_G^0(V, \mu_0) = \mathcal{D}_0(V) \int_0^{\mu_0} d\epsilon \epsilon^{1/2} f(\epsilon). \quad (6.20)$$

Im Folgenden betrachten wir Spezialfälle der allgemeinen Formel (6.20).

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

$$N = \mathcal{D}_0 \frac{2}{3} \mu_0^{3/2}, \quad (6.21)$$

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

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

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

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

wobei der letzte Faktor aus der Integration von $\epsilon^{3/2}$ resultiert. Nun verwenden wir Glg. (6.21) und ersetzen $2\mathcal{D}_0\mu_0^{3/2} \rightarrow 3N$, so dass das Endergebnis lautet

$$U_0(N, V) = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_G^0(N, V) = N \frac{3}{5} E_F(n) \propto N n^{2/3}. \quad (6.22)$$

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 Fermigases 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. (6.22) finden wir schließlich

$$p_0(n) = - \frac{3}{5} N \frac{\partial E_F}{\partial V} \Big|_N = \frac{2}{5} N \frac{E_F}{V} \propto n^{5/3}. \quad (6.23)$$

4. Weitere Erwartungswerte, wie Teilchenzahl-Fluktuationen und Entropie betrachten wir später, im Abschnitt 6.3.2.

Diskussion der Zustandsgleichung.

- Aus Glg. (6.22) und (6.23) 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. (4.3).

- Das Fermigas hat selbst bei $T = 0$ einen endlichen Druck¹² p_0 , der positiv ist und aus einer effektiven “Repulsion” der Teilchen resultiert. Die ist eine Repulsion die auch im idealen System (ohne Paar-Wechselwirkung) aufgrund des Pauliprinzips auftritt. Daraus resultiert auch eine signifikante charakteristische Geschwindigkeit der Teilchen, selbst bei $T = 0$. Insbesondere besitzen Teilchen an der Fermikante die Fermigeschwindigkeit v_F , mit $E_F = mv_F^2/2$ (s. Aufgaben, Abschn. 6.5).
- **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),

$$r_s = \frac{r_a}{a_B} \sim n_a^{-1/3}, \quad (6.24)$$

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

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

$$\frac{U_e + U_i}{N} \approx \frac{A_{\text{Fermi}}^e}{r_s^2} - \frac{B_{\text{Grav}}^i}{r_s} - \frac{C_{\text{Coul}}^{ei}}{r_s} + \dots, \quad (6.25)$$

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

¹²im Gegensatz zum klassischen idealen Gas, wo $p_0 = nk_B T$, und der Druck bei $T \rightarrow 0$ verschwindet