

5.2. Das ideale Fermigas

1-Teilchen-Zustände = Eigenzustände zur 1-Teilchen Energie E_i

großkanonischer statistischer Operator

$$\hat{\rho} = \Xi^{-1} \exp -\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})$$

Wahrscheinlichkeit, das System in Vielteilchenzustand $|\alpha\rangle$

$$E_\alpha^{\text{tot}} = \sum_{j=1}^L E_j N_j \quad \begin{array}{l} E_j: \text{1-Teilchenenergien} \\ N_j: \text{Besetzungszahl} \end{array}$$

zu finden.

$$p_\alpha = \langle \alpha | \hat{\rho} | \alpha \rangle = \Xi^{-1} \exp \left\{ -\beta \sum_{j=1}^L (E_j - \mu) N_j \right\}$$

großkanonische Zustandssumme

$$\Xi = \sum_{N_1, \dots, N_L} \exp \left\{ -\beta \sum_{j=1}^L (E_j - \mu) N_j \right\}$$

$$= \prod_{j=1}^L \left[\sum_{N_j} \exp(-\beta(E_j - \mu)N_j) \right]$$

$$\stackrel{\text{Fermionen}}{=} \prod_{j=1}^L \left[\sum_{N_j=0}^1 t_j^{N_j} \right] \quad \text{mit } t_j := \exp \beta(\mu - E_j)$$

$$= \prod_{j=1}^L [1 + t_j] = \prod_{j=1}^L \Xi_j$$

$$\Rightarrow P(N_1, \dots, N_L) = \prod_{j=1}^L \frac{t_j^{N_j}}{1 + t_j} = \prod_{j=1}^L p(N_j) \quad \text{separat!}$$

Wahrscheinlichkeit, das System mit der Besetzung N_1, N_2, \dots zu finden.

Mittlere Besetzungszahl im 1-Teilchen-Zustand ϵ_j :

Aus $p(N_j) = \exp(\gamma_j - \beta \epsilon_j - \alpha N_j)$ $\gamma_j = -\ln \bar{z}_j = \ln(1 + z_j)$
 folgt:

$$\langle N_j \rangle = \frac{\partial \gamma_j}{\partial \alpha} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \bar{z}_j = \frac{z_j}{1 + z_j} = \frac{1}{z_j^{-1} + 1}$$

$\alpha = -\beta \mu$

$$\langle N_j \rangle = \frac{1}{\exp\left[\frac{\epsilon_j - \mu}{kT}\right] + 1}$$

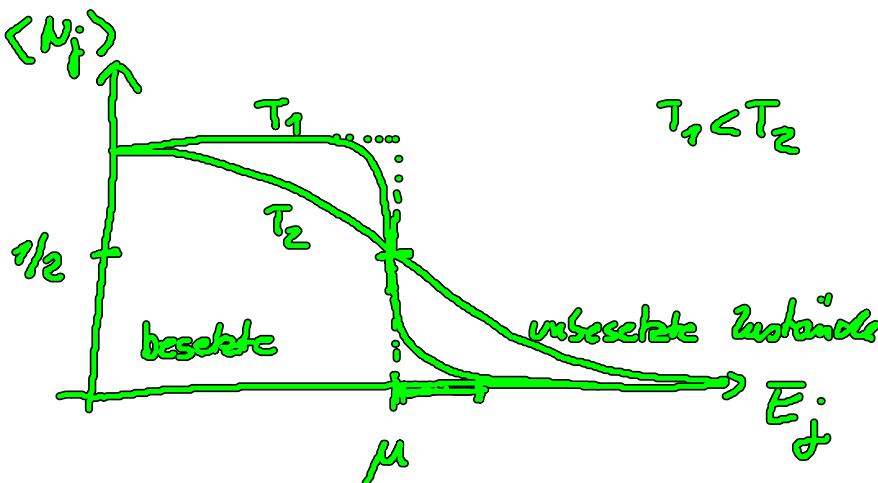
Fermi-Verteilung

(folgt auch explizit aus $\langle N_j \rangle = \sum_{N_j=0}^1 \sum_{N_2=0}^1 \dots \left\{ N_j \frac{z_1^{N_1}}{1+z_1} \dots \frac{z_j^{N_j}}{1+z_j} \dots \right\}$)

$$= \sum_{N_j=0}^1 N_j \frac{z_j^{N_j}}{1+z_j} = \frac{0+z_j^0 + 1 \cdot z_j^1}{1+z_j}$$

oder speziell wegen $N_j = 0, 1$ aus $\langle N_j \rangle = p(N_j=1) = \frac{z_j}{1+z_j}$

gilt nicht für Bosonen!



$T \rightarrow 0$: $\langle N_j \rangle \rightarrow \Theta(\mu - E_j)$ Stufenfunktion
(Quantenlimit)

$T > 0$: „Aufweichungszone“ bei $E_j \approx \mu$ der Breite $\approx kT$

$E_j \gg \mu \gg kT$ (hohe Energien) : $\langle N_j \rangle \approx \exp\left[-\frac{E_j - \mu}{kT}\right]$

klass. Grenzfall
(Maxwell-Boltzmann-Verteilung)

gesamte mittlere Teilchenzahl $\bar{N} = \sum_{j=1}^L \langle N_j \rangle$

thermische Zustandsgl.

$$pV = kT \ln \Xi = kT \sum_{j=1}^L \ln \Xi_j$$

$$= kT \sum_{j=1}^L \ln(1 + \exp \beta(\mu - E_j))$$

Energie und Zustandsdichte freier Teilchen

Energie - Eigenwerte $E_j = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, \underline{k} Wellenvektor

System sei in Würfel $V = L^3$ eingeschlossen.

Zyklische Randbedingungen (Born-v. Karman):

$$\psi_j(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}} \quad k_\alpha L = 2\pi n_\alpha \quad n_\alpha = \pm 1, \pm 2, \dots$$

($\alpha = 1, 2, 3$)

1 Zustand im k -Raum beansprucht das „Volumen“

$$(\Delta k)^3 = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 \Delta n_1 \Delta n_2 \Delta n_3 = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \frac{(2\pi)^3}{V} \text{ (ohne Spin!)}$$

In thermodynamischen Limit (großes V):

Übergang zum Quasikontinuum $\sum_j \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k$

bzw. $\boxed{\sum_j \rightarrow \frac{V}{h^3} \int d^3p}$

mit $\underline{p} = \hbar \underline{k}$

(in Übereinstimmung mit § 4.1)

Spinentartung (Spin $2S$): $(2S+1)$ -fach

Kugelsymm. Integral: $\sum_j \rightarrow (2S+1) \frac{V}{h^3} \int_0^\infty 4\pi p^2 dp$

großkan. Zustandssumme:

$$\ln \Xi = \sum_j \ln [1 + \zeta e^{-\beta E_j}] \quad (\zeta = e^{\beta \mu} \text{ Fugazität})$$

$$\approx (2S+1) \frac{4\pi V}{h^3} \int_0^\infty dp p^2 \ln [1 + \zeta e^{-\beta \frac{p^2}{2m}}]$$

$$\text{part. log} = (2S+1) \frac{4\pi V}{h^3} \left\{ \underbrace{\frac{p^3}{3} \ln [1 + \zeta e^{-\beta \frac{p^2}{2m}}]}_0^\infty - \int_0^\infty dp \frac{p^3}{3} \frac{-\beta \zeta e^{-\beta \frac{p^2}{2m}}}{1 + \zeta e^{-\beta \frac{p^2}{2m}}} \right\}$$

$$= \frac{2}{3} (2S+1) \frac{4\pi V}{h^3} \int_0^\infty dp p^2 \frac{\beta p^2}{\zeta \exp\left[\beta \frac{p^2}{2m}\right] + 1}$$

$$= \frac{2}{3} \beta (2S+1) \frac{4\pi V}{h^3} \int_0^\infty dp p^2 \langle N(p) \rangle \cdot E(p)$$

$$d \ln \Xi = \frac{2}{3} \beta \sum_j \langle N_j \rangle E_j$$

$$\ln \Xi = \frac{2}{3} \beta U \quad (\text{innere Energie } U = \langle E^{\text{ges}} \rangle)$$

$$\Rightarrow \boxed{pV = kT \ln \Xi = \frac{2}{3} U}$$

Bem: (i) gilt auch für klassisches ideales Gas!

$$\text{klass} \left\{ \begin{array}{l} pV = \bar{N} kT \\ U = \frac{3}{2} \bar{N} kT \end{array} \right. \Rightarrow pV = \frac{2}{3} U$$

(ii) gilt auch für Bose-Gas (s. später)

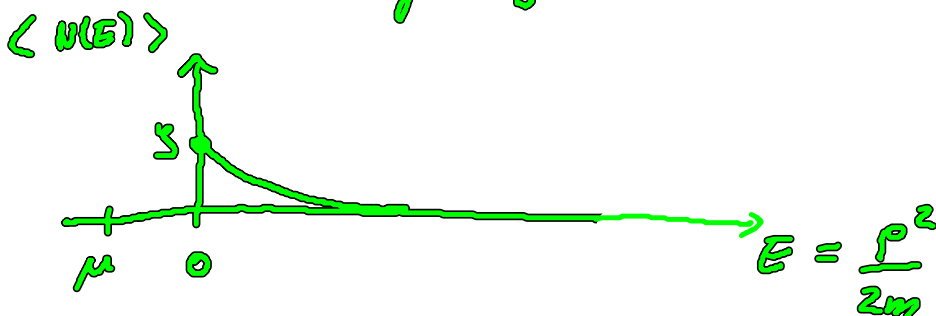
also unabhängig von der speziellen Statistik!

Entartetes Fermigas

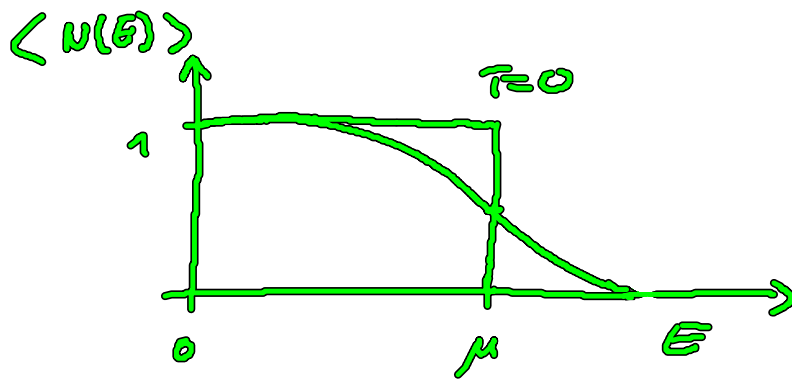
klassischer Grenzfall der Fermi-Verteilung:

$$\langle N(p) \rangle = \frac{1}{\int \exp\left(\frac{p^2}{2mkT}\right) + 1} \approx \int \exp\left(-\frac{p^2}{2mkT}\right) \quad \text{Maxwell-Boltzmann}$$

für $\beta = e^{\mu/kT} \ll 1$ d.h. $\mu < 0$ stark
 niedrig



Nichtklassischer Grenzfall („Fermi-Entartung“):



$\beta \gg 1$ (hohe Ordnung)

Gesamte Teilchenzahl:

$$\bar{N} = \frac{4\pi V}{h^3} (2s+1) \int_0^{\infty} dp p^2 \frac{1}{\exp\left\{\frac{(\epsilon^2/2m - \mu)/kT}{1}\right\} + 1}$$

Innere Energie

$$U = \frac{4\pi V}{h^3} (2s+1) \int_0^{\infty} dp p^2 \frac{\frac{p^2}{2m}}{\exp\left\{\frac{(p^2/2m - \mu)/kT}{1}\right\} + 1}$$

Substitution:

$$\frac{p^2}{2mkT} = y, \quad p dp = mkT dy, \quad \frac{\mu}{kT} = \eta = (-\alpha)$$

$$\bar{N} = \frac{4\pi V}{h^3} \frac{(2s+1)}{2} (2mkT)^{3/2} \int_0^{\infty} dy \frac{y^{1/2}}{e^{y-\eta} + 1}$$

$$U = \frac{4\pi V}{h^3} \frac{2s+1}{2} (2mkT)^{3/2} \int_0^{\infty} dy \frac{y^{3/2}}{e^{y-\eta} + 1}$$

Def.: Fermi-Dirac-Integral der Ordnung s

$$F_s(\eta) := \frac{1}{\Gamma(s+1)} \int_0^\infty dy \frac{y^s}{e^{y-\eta} + 1} \quad (s > 0)$$

Entwicklung für $\eta \gg 1$ ($\hat{=} \gamma \gg 1$ d.h. Entartung).

$$\begin{aligned} \Gamma(s+1) F_s(\eta) &\stackrel{\text{part. Int.}}{=} \frac{1}{s+1} \int_0^\infty \frac{d}{dy} (y^{s+1}) \frac{1}{e^{y-\eta} + 1} \\ &= \frac{1}{s+1} \left[\frac{y^{s+1}}{e^{y-\eta} + 1} \right]_0^\infty + \frac{1}{s+1} \int_0^\infty dy y^{s+1} \frac{e^{y-\eta}}{(e^{y-\eta} + 1)^2} \end{aligned}$$

$$x = y - \eta \quad = \frac{1}{s+1} \int_{-\infty}^\infty dx (x + \eta)^{s+1} \frac{e^x}{(e^x + 1)^2}$$

$$(\eta \gg 1) \quad \approx \frac{1}{s+1} \int_{-\infty}^\infty dx (x + \eta)^{s+1} \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} + o(e^{-\eta})$$

Entwicklung $(x + \eta)^{s+1} \approx \eta^{s+1} + (s+1)\eta^s x + \frac{s(s+1)}{2} \eta^{s-1} x^2 + \dots$

$$\begin{aligned} \Gamma(s+1) F_s(\eta) &\approx \frac{\eta^{s+1}}{s+1} \int_{-\infty}^\infty dx \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} + \eta^s \int_{-\infty}^\infty dx \frac{x e^x}{(e^x + 1)^2} + \frac{s}{2} \eta^{s-1} \int_{-\infty}^\infty dx \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2} \\ &\quad \underbrace{\left[-\frac{1}{e^x + 1} \right]_{-\infty}^\infty = 1}_{\text{so, da Integrand ungerade}} \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^\infty dx \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2}}_{\text{I}} \end{aligned}$$

$$I = 2 \int_0^{\infty} dx \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2} \stackrel{\text{part.}}{=} \underbrace{-2 \left[\frac{x^2}{e^x + 1} \right]_0^{\infty}}_0 + \underbrace{4 \int_0^{\infty} dx \frac{x}{e^x + 1}}_{\frac{\pi^2}{3}} = \frac{\pi^2}{3}$$

$$\Rightarrow F_s(2) = \frac{1}{\Gamma(s+1)} \left[\frac{2^{s+1}}{s+1} + s \frac{\pi^2}{6} 2^{s-1} + O(2^{s-3}) \right]$$