

4.4 Gleichgewichtstatistik: Das ideale Fermigas

bisher: Nichtgleichgewichtszustände,
zeitentwicklung des statist. Op. $\hat{\rho}$ durch
Liouville-von Neumann-Gl.

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]$$

jetzt: thermodyn. Gleichgewicht (zeitunabh.)
geg. durch Jaynes'sches Prinzip der
vorurteilsfreien Schätzung:

Minimum der Shannon-Information

$$I(\hat{\rho}) = -\text{tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) \text{ unter Nebenbed.}$$

$$\text{tr} \hat{\rho} = 1 \quad (\text{Normierung}) \Rightarrow \gamma$$

$$\text{tr}(\hat{\rho} \hat{M}^\nu) = \langle M^\nu \rangle \quad (\text{Makroobs.}) \Rightarrow \lambda_\nu$$

} Lagrange-
Parameter

$$\Rightarrow \hat{\rho} = e^{\gamma - \lambda_\nu \hat{M}^\nu} = Z^{-1} e^{-\lambda_\nu \hat{M}^\nu}$$

$$(\text{Zustandssumme } Z = e^{-\gamma} \doteq \text{tr} e^{-\lambda_\nu \hat{M}^\nu})$$

$$\text{z.B. kanon. statist. Op. } \hat{\rho} = Z^{-1} e^{-\beta \hat{H}}$$

$$\text{großkanon. statist. Op. } \hat{\rho} = \Xi^{-1} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}$$

Ideales Gas (WW-frei, identische Fermionen):

$$\hat{H} = \sum_k E_k a_k^\dagger a_k = \sum_k E_k \hat{N}_k \quad N_k = 0, 1 \text{ Besetz. zahl}$$

↳ Einteilchenenergie

Wahrscheinl., das System im Vielteilchenzustand $|\alpha\rangle$ zu finden:

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

großkanon. Zustandssumme

$$\begin{aligned} \Xi &= \sum_{N_1, \dots, N_l} \exp\left\{-\beta \sum_{j=1}^l (E_j - \mu) N_j\right\} \\ &= \prod_{j=1}^l \left[\sum_{N_j} \exp -\beta (E_j - \mu) N_j \right] \end{aligned}$$

Fermionen l

$$\begin{aligned} &= \prod_{j=1}^l \left[\sum_{N_j=0}^1 t_j^{N_j} \right] \text{ mit } t_j := \exp\{\beta(\mu - E_j)\} \\ &= \prod_{j=1}^l [1 + t_j] = \prod_{j=1}^l \Xi_j \end{aligned}$$

$$\Rightarrow P(N_1, \dots, N_l) = \prod_{j=1}^l \frac{t_j^{N_j}}{1 + t_j} = \prod_{j=1}^l p(N_j) \text{ separiert!}$$

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

Mittlere Besetzungszahl im 1-Teilchen-Zustand E_j :

Aus $p(N_j) = \exp(\gamma_j - \beta E_j - \alpha N_j)$, $\gamma_j = -\ln \Xi_j = -\ln(1+t_j)$
 folgt:

$$\langle N_j \rangle = \frac{\gamma_j}{\partial \alpha} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \Xi_j = \frac{t_j}{1+t_j} = \frac{1}{t_j^{-1} + 1}$$

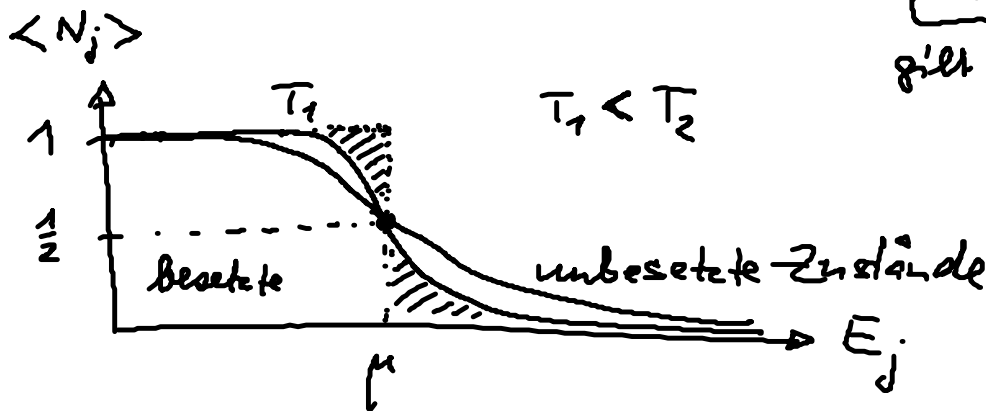
$$\langle N_j \rangle = \frac{1}{\exp\left[\frac{E_j - \mu}{kT}\right] + 1}$$

Fermi-Verteilung

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

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

oder speziell wegen $N_j = 0, 1$ aus $\langle N_j \rangle = p(N_j=1) = \frac{t_j}{1+t_j}$.
 gilt nicht für Bose!



$T \rightarrow 0$: $\langle N_j \rangle \rightarrow \Theta(\mu - E_j)$ Stufenfkt.
 (Quantenlines)

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

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

klass. Grenzfall
 (Maxwell-Boltzmann-Verteil.)

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

Anwendung auf Halbleiter : $\mu = E_F$ Fermi-Niveau

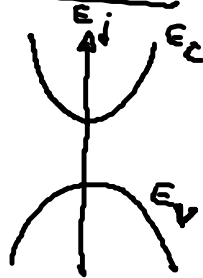
Bestimmung des Fermi-Niveaus aus der Ladungsneutralität, z.B. $n = p$ (intrinsisch) $\Rightarrow E_F$
El.dichte Lochdichte

Verallgemeinerung auf Quasi-Gleichgewicht

(d.h. Elektronen im Leitungsband untereinander im thermodyn. Gleichgewicht, aber nicht mit den Löchern im Valenzband u. ggf. weiteren Lad.träger-Ensembles)

\Rightarrow quasi-Fermi-Niveau der Elektronen F_n
quasi-Fermi-Niveau der Löcher F_p $F_n \neq F_p$

F_n bestimmt durch n : $n = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^l \frac{1}{\exp \frac{E_j - F_n}{kT} + 1}$
 F_p bestimmt durch p : $p = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^l \frac{1}{\exp \frac{F_p - E_j}{kT} + 1}$



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 u. Zustandsdichte freier Teilchen

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

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

Zähl. Randbedingungen (Born-v. Karman) :

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

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

1 Zustand im \mathbf{k} -Raum beansprucht das "Volumen"

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

Im thermodyn. Limites (großes V):

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

$$\boxed{\sum_j \rightarrow \frac{V}{h^3} \int d^3p} \quad \text{mit } \underline{p} = \hbar \underline{k}$$

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

Kugelsymm. Integral:

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

großkanon. Zustandssumme:

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

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

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

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

$$= \frac{2}{3} \beta (2s+1) \frac{4\pi V}{h^3} \int_0^{\infty} dp p^2 \underbrace{\langle N(p) \rangle}_{\text{Fermi-Vert.}} E(p)$$

diskret

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

$$= \frac{2}{3} \beta U \quad \text{innere Energie } U$$

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

(i) gilt auch für klass. ideales Gas!

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

(ii) gilt auch für Bose-Gas (s. später)
also unabh. von der speziellen Statistik!