XI.3 Ideales Fermi-Gas

Dieser Abschnitt befasst sich mit der Thermodynamik eines dreidimensionalen idealen *Fermi-Gases*, d.h. eines Gases aus nicht-wechselwirkenden identischen Fermionen, insbesondere bei tiefer Temperatur, wobei die quantenmechanischen Effekte, verknüpft mit dem Pauli-Prinzip, eine wichtige Rolle spielen.

Der Einfachheit halber werden nur Teilchen mit der Masse m und dem Spin $s = \frac{1}{2}$ betrachtet, so dass der Spin-Entartungsfaktor $2s+1=2$ ist. Dann lautet die Zustandsdichte (XI.53)

$$\mathscr{D}(\varepsilon) = 2\mathcal{V}\,\frac{(2m)^{3/2}}{4\pi^2\hbar^3}\sqrt{\varepsilon}\,\Theta(\varepsilon). \tag{XI.64}$$

Die Verallgemeinerung der folgenden Ergebnisse zum Fall eines beliebigen halbzahligen Spins ist einfach.

XI.3.1 Ideales Fermi-Gas bei Temperatur Null

Einige wichtigen Begriffe für Fermi-Gase lassen sich am einfachsten im Grenzfall einer verschwindenden Temperatur definieren.

XI.3.1 a Kanonische Beschreibung. Fermi-Energie und Fermi-Temperatur

Das Verhältnis der Wahrscheinlichkeit für einen angeregten Zustand ε_a zu der Wahrscheinlichkeit für den Grundzustand ε_1 ist $p_a/p_1 = \mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_a-\varepsilon_1)}$. Im mathematischen Grenzfall einer Temperatur Null bzw. $\beta\to\infty$ gilt $p_a/p_1 \to 0$ für $\varepsilon_a > \varepsilon_1$. Somit wird nur der Zustand niedrigster Energie besetzt.

Im kanonischen Gleichgewicht bei Temperatur Null befindet sich also ein System aus N identischen Fermionen im Grundzustand des N-Teilchen-Hamilton-Operators. Dabei besetzen die Fermionen die sukzessiven Eigenzustände des Ein-Teilchen-Hamilton-Operators, beginnend mit den Zuständen niedrigster Energien, mit $2s+1=2$ Teilchen pro Energieniveau ε_a.

Die Energie des letzten besetzten Ein-Teilchen-Zustands heißt *Fermi-Energie* und wird als ε_{F} bezeichnet. Definitionsgemäß wird jeder Zustand mit einer Energie $\varepsilon_a \leq \varepsilon_{\mathrm{F}}$ besetzt, so dass die Teilchenzahl durch

$$N = \sum_{a;\,\varepsilon_a\leq\varepsilon_{\mathrm{F}}} 1 \tag{XI.65}$$

gegeben ist. Mithilfe der Zustandsdichte kann man auch

$$N = \int_{-\infty}^{\varepsilon_{\mathrm{F}}} \mathscr{D}(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon. \tag{XI.66}$$

schreiben. Daraus leitet man unter Nutzung des Ausdrucks (XI.64) die Fermi-Energie her:

$$\boxed{\varepsilon_{\mathrm{F}} = (3\pi^2)^{2/3}\,\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{N}{\mathcal{V}}\right)^{2/3}.} \tag{XI.67}$$

Dieses wichtige Ergebnis kann anders wiedergefunden werden, mithilfe einer Berechnung im Impuls-Raum. Im Letzteren werden alle Ein-Teilchen-Zustände besetzt, deren Impulsbetrag kleiner ist als der *Fermi-Impuls*

$$p_{\mathrm{F}} = \sqrt{2m\,\varepsilon_{\mathrm{F}}}, \tag{XI.68}$$

wobei jeder Zustand das Volumen $(2\pi\hbar)^3/\mathcal{V}$ besetzt. Unter Verwendung der Zustandsdichte im Impulsraum (XI.55) lautet das Integral über die *Fermi-Kugel* $|\vec{p}| \leq p_{\mathrm{F}}$

$$N = 2\int_{|\vec{p}|\leq p_{\mathrm{F}}} \mathscr{D}_{\vec{p}}(\vec{p})\,\mathrm{d}^3\vec{p} = 2\,\frac{\mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^3}\,\frac{4\pi}{3}\,p_{\mathrm{F}}^3, \tag{XI.69}$$

wobei der Faktor 2 den Spin-Entartungsfaktor darstellt. Zusammen führen Gl. (XI.68) und (XI.69) sofort zur Fermi-Energie (XI.67).

Schließlich kann man ausgehend aus der Fermi-Energie die zugehörige *Fermi-Temperatur* $T_{\rm F}$ definieren:

$$\varepsilon_{\rm F} = k_B T_{\rm F}. \tag{XI.70}$$

Bemerkung: $T_{\rm F}$ hat zwar die Dimension einer Temperatur, wird aber nur durch die Teilchendichte $\langle N\rangle/\mathcal{V}$ bestimmt.

Als Anwendungsbeispiel kann man das *Elektronengas* der Leitungselektronen eines Metalls betrachten. Im Fall von Natrium (Ordnungszahl $Z = 11$, Massenzahl $A = 23$) trägt nur eines der Elektronen jedes Atoms zur elektrischen Leitfähigkeit bei, das ohne weitere Begründung als „frei" angenommen wird. Somit können die Leitungselektronen eines Natriumstücks modelliert werden als ein Fermi-Gas aus nicht-wechselwirkenden Teilchen, die in einem Kasten entsprechend dem Volumen des Stücks eingeschlossen sind.

Aus der Massendichte $0,97\cdot 10^3$ kg m^{-3} und der atomaren Masse $23\times 1,66\cdot 10^{-27}$ kg von Natrium folgt die Teilchendichte, die gleich der Anzahl $N/\mathcal{V}$ der Leitungselektronen pro Volumeneinheit ist. Damit kann man den Zahlenwert $\varepsilon_{\rm F} \approx 3$ eV der Fermi-Energie (XI.67) berechnen, sowie die entsprechende Fermi-Temperatur (XI.70) $T_{\rm F} \approx 35\cdot 10^3$ K.

XI.3.1 b Großkanonische Beschreibung

Bei Temperatur Null können die Eigenschaften des idealen Fermi-Gases im Rahmen des kanonischen Ensembles, entsprechend einer festen Teilchenzahl, hergeleitet werden. Wenn die Temperatur endlich ist, soll man aber die großkanonische Beschreibung benutzen.

Fermi-Energie und chemisches Potential

Damit die mittlere Teilchenzahl konstant bleibt, wenn die Temperatur verändert wird, soll gleichzeitig das chemische Potential geändert werden. Sei angenommen, dass das chemische Potential im Limes $T \to 0$ nach einem endlichen Wert $\mu(T=0)$ konvergiert. Dementsprechend konvergiert die Fermi–Dirac-Verteilung $f^{(\rm F)}(\varepsilon)$ nach einer Stufen-Funktion $\Theta\big(\mu(T=0)-\varepsilon\big)$, so dass die mittlere Teilchenzahl (XI.47) durch

$$\langle N\rangle = \int_{-\infty}^{\mu(T=0)} \mathscr{D}(\varepsilon)\,{\rm d}\varepsilon \tag{XI.71}$$

gegeben wird. Der Vergleich dieser Beziehung mit Gl. (XI.66) zeigt, dass die Fermi-Energie den Grenzwert des chemischen Potentials für $T\to 0$ ist:

$$\lim_{\substack{T\to 0\\ \langle N\rangle/\mathcal{V}\ \text{fest}}} \mu(T) = \varepsilon_{\rm F}. \tag{XI.72}$$

Dann gilt für die Fermi–Dirac-Verteilung im Limes verschwindender Temperatur

$$\lim_{T\to 0} f^{(\rm F)}(\varepsilon) = \Theta(\varepsilon_{\rm F}-\varepsilon). \tag{XI.73}$$

Innere Energie und Druck

Mithilfe des vereinfachten Ausdrucks (XI.73) der Fermi–Dirac-Verteilung wird die innere Energie (XI.46) des idealen Fermi-Gases zu

$$U(T\!=\!0) = \int_{-\infty}^{\varepsilon_{\rm F}} \varepsilon\,\mathscr{D}(\varepsilon)\,{\rm d}\varepsilon. \tag{XI.74}$$

Aus $\mathscr{D}(\varepsilon) = C\mathcal{V}\sqrt{\varepsilon}\,\Theta(\varepsilon)$ — wobei der bekannte Ausdruck des Vorfaktors C keine Rolle spielt — folgen die innere Energie $U(T=0) = \frac{2}{5}C\mathcal{V}\varepsilon_{\rm F}^{5/2}$ und die durch Gl. (XI.47) gegebene Teilchenzahl $\langle N\rangle = \frac{2}{3}C\mathcal{V}\varepsilon_{\rm F}^{3/2}$. Somit gilt

$$\boxed{U(T\!=\!0) = \frac{3}{5}\,\langle N\rangle\,\varepsilon_{\rm F},} \tag{XI.75}$$

d.h. die mittlere kinetische Energie pro Teilchen beträgt $\frac{3}{5}\varepsilon_{\rm F}$.

Im Gegensatz zur inneren Energie des klassischen idealen Gases verschwindet die innere Energie eines Fermi-Gases also nicht im Limes einer verschwindenden Temperatur. Dies folgt aus dem Pauli-Prinzip, gemäß dem alle Fermionen nicht im Ein-Teilchen-Grundzustand sein können und deshalb die angeregten Energieniveaus ausfüllen sollen.

Beispielsweise ist für Natrium die mittlere kinetische Energie eines Leitungselektrons $\frac{3}{5}\varepsilon_{\rm F} \approx 2$ eV, entsprechend einer typischen Geschwindigkeit von ca. 800 km s^{-1}.

Die Definition $\Omega = U - TS - \mu N$ des großkanonischen Potentials und die Beziehung [Gl. (III.27)] $\Omega = -\mathcal{P}\mathcal{V}$ führen zu

$$\mathcal{P} = -\frac{U - TS - \mu N}{\mathcal{V}},$$

d.h. für ein Fermi-Gas bei Temperatur $T = 0$ mit dem chemischen Potentials (XI.72) und der inneren Energie (XI.75)

$$\mathcal{P}(T=0) = \frac{2}{5}\frac{\langle N\rangle}{\mathcal{V}}\,\varepsilon_{\rm F} = \frac{2}{5}(3\pi^2)^{2/3}\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{N}{\mathcal{V}}\right)^{5/3}. \tag{XI.76}$$

Hier auch verschwindet dieser *Fermi-Druck* nicht für $T \to 0$, im Gegensatz zum Druck eines klassischen idealen Gases.