

3. Thermodynamik nicht wechselwirkender Fermionen

Wir wollen nun ein Ensemble fermionischer Atome im thermodynamischen Gleichgewicht in der großkanonischen Gesamtheit betrachten. Im wechselwirkungsfreien Fall können wir alle Spin-Komponenten (mindestens sind das ja zwei) getrennt betrachten. Wir werden also im Folgenden spinpolarisierte Fermionen betrachten. Nach dem Pauliprinzip kann es hier natürlich keine makroskopische Besetzung eines Zustandes geben. Jeder Zustand $\{j, s\}$ (j - Energiezustand, s - Spinfreiheitsgrad) kann nur maximal einmal besetzt werden, d.h.

$$(48) \quad \hat{\Psi}(\vec{r}) = \sum_{j,s} \varphi_j(\vec{r}) \hat{C}_{j,s} \quad \hat{C}_{j,s}^\dagger |1_{j,s}\rangle = 0$$

Im großkanonischen Ensemble hat man

$$(49) \quad \hat{\mathcal{G}} = \frac{1}{Z_F} \exp(-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N}))$$

$$(50) \quad Z_F = \text{Tr} \{ \exp(-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})) \}$$

mit

$$(51) \quad \hat{H} = \sum_{\nu} \epsilon_{\nu} \hat{n}_{\nu} \quad \hat{N} = \sum_{\nu} \hat{n}_{\nu}$$

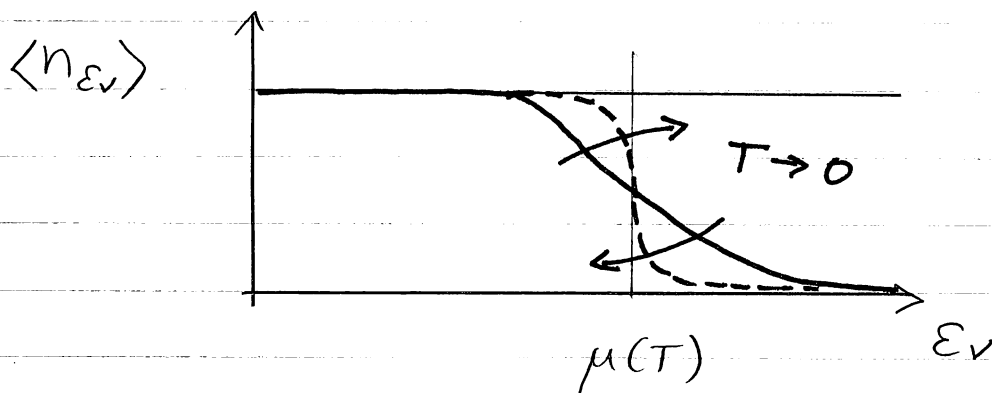
Da nur $n_{\nu} \in \{0, 1\}$ zulässig ist, findet man

$$(52) \quad Z_F = \prod_v \sum_{n=0}^1 e^{-\beta(\epsilon_v - \mu)n} = \prod_v (1 + z e^{-\beta \epsilon_v})$$

$z = e^{\beta \mu}$ Fugazität. Im Gegensatz zu Bosonen, bei denen $0 \leq z \leq 1$ gilt, ist hier z unbeschränkt. Aus Z_F können wieder relevante phys. Größen ermittelt werden, z.B.

$$(53) \quad \begin{aligned} \langle \hat{N} \rangle &= \sum_v \langle \hat{n}_v \rangle = \sum_v \frac{z e^{-\beta \epsilon_v}}{1 + z e^{-\beta \epsilon_v}} \\ &= \sum_v \frac{1}{\frac{1}{z} e^{\beta \epsilon_v} + 1} = \sum_v \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_v - \mu)} + 1} \end{aligned}$$

Im Unterschied zu Bosonen (Gl.(8)) ist z unbeschränkt und man findet "+1" statt "-1" im Nenner von $\langle \hat{n}_v \rangle$. Für $T \rightarrow 0$ findet man, daß alle Zustände mit $\epsilon_v \leq \mu$ mit genau einem Teilchen besetzt sind, während die Zustände $\epsilon_v > \mu$ unbesetzt bleiben.



$$(54) \quad \boxed{\epsilon_F = \mu(T=0)}$$

wird Fermienergie genannt. Bezeichnet $a(\epsilon)$ die Zustandsdichte, gegeben z.B. durch die Form eines externen Potentials, muß gelten

$$(55) \quad \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \, a(\epsilon) = N$$

mit N der vorgegebenen Teilchenzahl.

(A) homogenes Fermigas

$$(56) \quad a(\epsilon) d\epsilon = g \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} 4\pi p^2 dp$$

g ist numerischer Vorfaktor der die Anzahl der Spinfreiheitsgrade beschreibt. $\Rightarrow$

$$(57) \quad N = \frac{gV}{6\pi^2\hbar^3} p_F^3$$

mit dem Fermiimpuls p_F bzw. k_F .

$$(58) \quad p_F = p(\epsilon_F) = \left(\frac{6\pi^2 N}{gV} \right)^{1/3} \hbar = \hbar k_F$$

Das liefert für die Fermienergie

$$(59) \quad \epsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{6\pi^2 n}{g} \right)^{2/3} \sim n^{2/3}$$

Die Gesamtenergie des Fermigas bei $T=0$ ist somit

$$\begin{aligned}
 E_{T=0} &= \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \, a(\epsilon) \epsilon \\
 &= \frac{g}{(2\pi\hbar)^3} 4\pi \int_0^{p_F} dp \, p^2 \frac{p^2}{2m} \\
 &= \frac{gV}{4\pi^2 \hbar^3 m} \frac{p_F^5}{5} = \frac{gV}{4\pi^2 \hbar^3 m} \frac{6\pi^2 N \hbar^3}{8\pi} \frac{p_F^2}{5}
 \end{aligned}$$

$$(60) \quad E_{T=0} = \frac{3}{5} N \frac{p_F^2}{2m} = \frac{3}{5} N \epsilon_F$$

(B) Fermigas in einer harmonischen Falle

In einer isotropen harmonischen Falle der Frequenz ω hat man für die Zustandsdichte in 3D

$$(61) \quad a(\epsilon) d\epsilon = \frac{1}{2(\hbar\omega)^3} \epsilon^2 d\epsilon$$

Dies liefert nach (55)

$$(62) \quad \epsilon_F = (6N)^{1/3} \hbar\omega \sim N^{1/3}$$

Dieses Resultat kann man natürlich auch dadurch erhalten, daß man sukzessive alle Niveaus mit $\epsilon_v = \hbar\omega$ mit Entartung $(v+1)(v+2)/2$ mit je einem Teilchen besetzt.

Die Gesamtenergie bei $T=0$ findet man zu

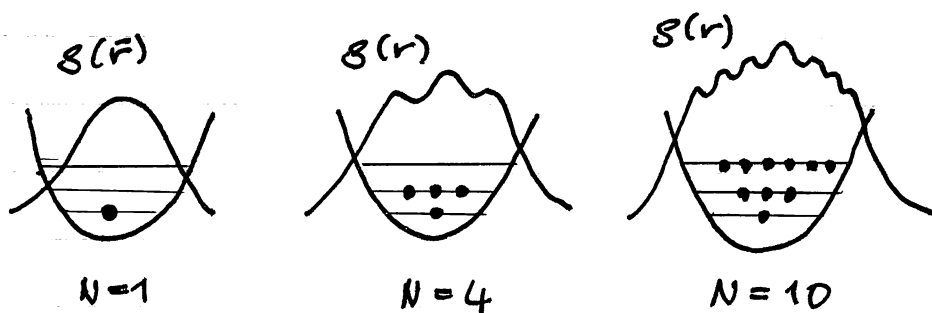
$$E_{T=0} = \frac{1}{2(\hbar\omega)^3} \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon^3 = \frac{\epsilon_F^4}{8(\hbar\omega)^3}$$

$$(63) \quad E_{T=0} = \frac{3}{4} N \epsilon_F$$

Für die Dichteverteilung bei $T=0$ findet man

$$(64) \quad g(\vec{r}) = \sum_{\nu=0}^{\epsilon_F} |\varphi_{\nu}(\vec{r})|^2$$

Die Summe kann numerisch ausgewertet werden. Qualitativ findet man



Für große N kann man die lokale-Dichte Näherung verwenden, bei der die Dichte am Ort $\vec{r}$ wie im homogenen Gas aber mit dem chemischen Potential $\mu(\vec{r})$

$$(65) \quad \mu(\vec{r}) = \mu - V_{\text{ext}}(\vec{r})$$

berechnet wird. Dies liefert

$$(66) \quad \boxed{g(\vec{r})|_{LDA} \approx \frac{8}{\pi^2} \frac{N}{R^3} \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)^{3/2}}$$

wobei R die radiale Ausdehnung des Fermigas charakterisiert. Es gilt

$$(67) \quad \varepsilon_F = \frac{1}{2} m \omega^2 R^2 \Rightarrow \boxed{R = a_0 (48N)^{1/6}}$$

wobei $a_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ der Radius des Grundzustandes ist. Man erkennt, daß aufgrund des Pauliprinzips ein Fermigas bei $T=0$ ein wesentlich größeres Volumen einnimmt als ein Bosegas.

