

### week7: Das ideale Fermi-Gas

Wir betrachten jetzt das ideale Fermi-Gas definiert durch den Hamilton-Operator

$$H_N = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_{x_i} : L_a^2([\Gamma_x \times \{\uparrow, \downarrow\}]^N) \rightarrow L_a^2([\Gamma_x \times \{\uparrow, \downarrow\}]^N) \quad (1)$$

Eine Basis aus Eigenfunktionen für den Ein-Teilchen Hamilton-Operator ohne Spin

$$h := H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x : L^2(\Gamma_x) \rightarrow L^2(\Gamma_x) \quad (2)$$

hatten wir in dem Theorem 2.2 im week3 angegeben, es war

$$h e_k = \varepsilon_k e_k \quad (3)$$

mit

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m} \mu_k = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^d \left( \frac{\sin(k_i \Delta x)}{\Delta x} \right)^2 \xrightarrow{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^d k_i^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (4)$$

und den Eigenfunktionen

$$e_k(x) := \frac{1}{(2ML+1)^{\frac{d}{2}}} e^{i k \cdot x} = \frac{1}{\sqrt{|\Gamma|}} e^{i k x} \quad (5)$$

mit dem Normierungsfaktor

$$\frac{1}{|\Gamma|} = \frac{1}{|\Gamma_x|} = \frac{1}{|\Gamma_k|} = \frac{(\Delta x \Delta k)^d}{(2\pi)^d} \quad (6)$$

Wir wollen jetzt noch die Spin-Freiheitsgrade mit berücksichtigen. Das ist in diesem week7 nicht wirklich nötig, der einzige Effekt sind ein paar Faktoren von 2 hier und da, aber vielleicht ist das hier schonmal eine ganz gute Gelegenheit, sich an den etwas erweiterten Formalismus zu gewöhnen, im nächsten Kapitel 2 brauchen wir den dann.

### Ein-Teilchen Raum mit Spin

Der Ein-Teilchen Raum mit Spin ist

$$L^2(\Gamma_x \times \{\uparrow, \downarrow\}) = \left\{ \psi = \psi(x, \sigma) : \Gamma_x \times \{\uparrow, \downarrow\} \rightarrow \mathbb{C} \right\} \quad (7)$$

mit dem Standardskalarprodukt

$$(\psi, \varphi) = \sum_{(x, \sigma) \in \Gamma_x \times \{\uparrow, \downarrow\}} \bar{\psi}(x, \sigma) \varphi(x, \sigma) \quad (8)$$

Der Ein-Teilchen Hamilton-Operator ist Spin-unabhängig und derselbe wie in (2), also wenn wir ein  $\psi \in L^2(\Gamma_x \times \{\uparrow, \downarrow\})$  etwa als zweikomponentige Grösse schreiben,

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(x) \\ \psi_\downarrow(x) \end{pmatrix}$$

mit  $\psi_\sigma \in L^2(\Gamma_x)$ , dann hätten wir

$$h\psi = \begin{pmatrix} [h\psi_\uparrow](x) \\ [h\psi_\downarrow](x) \end{pmatrix}$$

Eine Basis aus Eigenfunktionen ist dann gegeben durch

$$\left\{ e_{k\tau} = e_{k\tau}(x, \sigma) := e_k(x) \delta_\tau(\sigma) \mid (k, \tau) \in \Gamma_k \times \{\uparrow, \downarrow\} \right\} \quad (9)$$

mit den Spin-Funktionen

$$\delta_\tau : \{\uparrow, \downarrow\} \rightarrow \mathbb{C}, \quad \delta_\tau(\sigma) := \delta_{\tau, \sigma} = \begin{cases} 1 & \text{für } \sigma = \tau \\ 0 & \text{für } \sigma \neq \tau, \end{cases} \quad (10)$$

das sind also einfach nur Kroenecker-Deltas. Da der Hamilton-Operator Spin-unabhängig ist, gilt dann

$$h e_{k\tau} = h(e_k \delta_\tau) = (h e_k) \delta_\tau = \varepsilon_k e_k \delta_\tau = \varepsilon_k e_{k\tau} \quad (11)$$

und wir haben die Skalarprodukte

$$\begin{aligned} (e_{k\tau}, e_{k'\tau'}) &= \sum_{x, \sigma} \bar{e}_{k\tau}(x, \sigma) e_{k'\tau'}(x, \sigma) \\ &= \sum_x \bar{e}_k(x) e_{k'}(x) \sum_\sigma \bar{\delta}_\tau(\sigma) \delta_{\tau'}(\sigma) = \delta_{k, k'} \delta_{\tau, \tau'} =: \delta_{k\tau, k'\tau'} \end{aligned} \quad (12)$$

## ***N*-Teilchen Basis mit Spin**

Wir kürzen ab (der Index  $s$  für *spin*)

$$\Gamma_{x,s} := \Gamma_x \times \{\uparrow, \downarrow\} \quad (13)$$

$$\Gamma_{k,s} := \Gamma_k \times \{\uparrow, \downarrow\} \quad (14)$$

Nach dem Theorem 5.1 aus dem week5 ist dann

$$\left\{ \sqrt{N!} e_{k_1\tau_1} \otimes_a \cdots \otimes_a e_{k_N\tau_N} \mid 1 \preceq (k_1, \tau_1) \prec \cdots \prec (k_N, \tau_N) \preceq |\Gamma_{k,s}| \right\} \quad (15)$$

eine ONB von  $L_a^2(\Gamma_{x,s}^N)$ . Dabei ist  $\prec$  irgendeine Ordnungsrelation auf  $\Gamma_{k,s}$ , die dann also eine eindeutige Reihenfolge der  $|\Gamma_{k,s}| = 2|\Gamma_k|$  (Impuls, Spin)-Paare festlegt. Es gilt dann

$$H_N e_{k_1\tau_1} \otimes_a \cdots \otimes_a e_{k_N\tau_N} = E_{k_1, \dots, k_N} e_{k_1\tau_1} \otimes_a \cdots \otimes_a e_{k_N\tau_N} \quad (16)$$

mit den Energie-Eigenwerten

$$E_{k_1, \dots, k_N} = \sum_{i=1}^N \varepsilon_{k_i}, \quad (17)$$

das ist dann, genauso wie beim idealen Bose-Gas, einfach die Summe der kinetischen Energien aller  $N$  Teilchen.

## Besetzungszahl-Darstellung mit Spin

Wir führen wieder die Besetzungszahlen

$$\begin{aligned} n_{k\tau} &:= \text{Anzahl von } e_{k_i\tau_i} \text{ in } e_{k_1\tau_1} \otimes_a \cdots \otimes_a e_{k_N\tau_N} \text{ mit } (k_i, \tau_i) = (k, \tau) \\ &= \text{Anzahl von } (k_i, \tau_i) \text{ in } \{k_1\tau_1, \dots, k_N\tau_N\} \text{ mit } (k_i, \tau_i) = (k, \tau) \end{aligned} \quad (18)$$

mit

$$\sum_{(k,\tau) \in \Gamma_{k,s}} n_{k\tau} = N \quad (19)$$

ein. Wegen

$$e_{k\tau} \otimes_a e_{k\tau} = 0 \quad (20)$$

kann ein  $e_{k\tau}$  nur ein einziges Mal vorkommen, das ist jetzt der wesentliche Unterschied zum idealen Bose-Gas:

$$n_{k\tau} \in \{0, 1\} \quad (21)$$

Mit Hilfe der Besetzungszahlen  $\{n_{k\tau}\}$  können wir die Basisvektoren dann wieder folgendermassen schreiben:

$$e_{k_1\tau_1} \otimes_a \cdots \otimes_a e_{k_N\tau_N} = \bigotimes_{k\tau \in \Gamma_{k,s}} e_{k\tau}^{\otimes_a n_{k\tau}} =: |\{n_{k\tau}\}\rangle_a \quad (22)$$

und wir definieren für die komplex konjugierten Basisvektoren

$$\bar{e}_{k_1\tau_1} \otimes_a \cdots \otimes_a \bar{e}_{k_N\tau_N} = \bigotimes_{k\tau \in \Gamma_{k,s}} \bar{e}_{k\tau}^{\otimes_a n_{k\tau}} =: {}_a\langle \{n_{k\tau}\} | \quad (23)$$

Das Skalarprodukt in  $L_a^2(\Gamma_{x,s}^N)$  liest sich dann folgendermassen, wir wenden den Teil (b) vom Lemma 4.2 an:

$$\begin{aligned} \langle \{n_{k\tau}\} | \{ \tilde{n}_{k\tau} \} \rangle_a &:= \left( e_{k_1\tau_1} \otimes_a \cdots \otimes_a e_{k_N\tau_N}, e_{\tilde{k}_1\tilde{\tau}_1} \otimes_a \cdots \otimes_a e_{\tilde{k}_N\tilde{\tau}_N} \right) \\ &= \frac{1}{N!} \det \left[ (e_{k_i\tau_i}, e_{\tilde{k}_j\tilde{\tau}_j}) \right]_{1 \leq i, j \leq N} \\ &= \frac{1}{N!} \prod_{k\tau} \delta_{n_{k\tau}, \tilde{n}_{k\tau}} \end{aligned} \quad (24)$$

Mit dieser Notation gilt dann

$$H_N | \{n_{k\tau}\} \rangle_a = E_{\{n_{k\tau}\}} | \{n_{k\tau}\} \rangle_a \quad (25)$$

mit den  $N$ -Teilchen Eigenenergien

$$E_{\{n_{k\tau}\}} = \sum_{k\tau} n_{k\tau} \varepsilon_k \quad (26)$$

## Grundzustand ideales Fermi-Gas

Da jeder Impulszustand  $e_k$  nur mit maximal zwei Elektronen besetzt sein darf, mit einem Spin-up und einem Spin-down Elektron, können wir jetzt nicht einfach alle  $N$  Teilchen in das niedrigste Energie-Niveau mit  $\varepsilon_{k=0} = 0$  packen, sondern wir müssen nacheinander auch die nächst höheren Energie-Niveaus besetzen. Wenn wir das höchste Energieniveau, was wir auf diese Weise erreichen können, mit  $\varepsilon_F$  bezeichnen, das nennt sich dann die Fermi-Energie, dann muss die Anzahl der Impulse innerhalb der Impulsraum-Kugel mit Radius  $k_F = \sqrt{2m\varepsilon_F}/\hbar$  gleich  $N/2$  sein,

$$\left| \left\{ k \in \Gamma_k \mid \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \leq \varepsilon_F \right\} \right| \stackrel{!}{=} \frac{N}{2} \quad (27)$$

Im Kontinuums-Limes  $\Delta x \rightarrow 0$  ist

$$k = j\Delta k = (j_1, \dots, j_d)\Delta k = (j_1, \dots, j_d) \frac{2\pi}{2L}, \quad j \in \mathbb{Z}^d \quad (28)$$

und die Bedingung (27) können wir dann auch folgendermassen schreiben:

$$\begin{aligned} \frac{N}{2} &\stackrel{!}{=} \sum_k \chi\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \leq \varepsilon_F\right) \\ &= \frac{1}{(\Delta k)^d} \sum_k (\Delta k)^d \chi\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \leq \varepsilon_F\right) \\ &\approx \frac{1}{(\Delta k)^d} \int_{\mathbb{R}^d} d^d k \chi\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \leq \varepsilon_F\right) \\ &= \frac{(2L)^d}{(2\pi)^d} \omega_d \int_0^\infty dk k^{d-1} \chi(k \leq k_F) \\ &= V \frac{\omega_d}{(2\pi)^d} \frac{k_F^d}{d} = V \frac{\tau_d}{(2\pi)^d} k_F^d \end{aligned} \quad (29)$$

mit dem Volumen  $V = (2L)^d$ , der Fermi-Wellenzahl

$$k_F := \frac{\sqrt{2m\varepsilon_F}}{\hbar} \quad (30)$$

und  $\omega_d$  die Oberfläche und  $\tau_d = \omega_d/d$  das Volumen der  $d$ -dimensionalen Einheitssphäre,

$$\omega_d = \begin{cases} 2 & \text{für } d = 1 \\ 2\pi & \text{für } d = 2 \\ 4\pi & \text{für } d = 3 \end{cases}, \quad \tau_d = \begin{cases} 2 & \text{für } d = 1 \\ \pi & \text{für } d = 2 \\ 4\pi/3 & \text{für } d = 3 \end{cases} \quad (31)$$

Also,

$$k_F^d = \frac{(2\pi)^d}{2\tau_d} \frac{N}{V} =: c_d n \quad (32)$$

mit der Konzentration  $n := N/V$  und der numerischen Konstanten  $c_d := (2\pi)^d/(2\tau_d)$ . Das liefert dann

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (c_d n)^{2/d} \quad (33)$$

$$\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F} = \left(\frac{2\tau_d}{n}\right)^{1/d} = (2\tau_d v)^{1/d} \quad (34)$$

mit dem Volumen pro Teilchen  $v := V/N$ . Schauen wir uns ein paar numerischen Werte für die Elektronen-Konzentration  $n$ , die Fermi-Energie  $\varepsilon_F$ , die Fermi-Geschwindigkeit  $v_F = \hbar k_F/m$  und die Fermi-Temperatur  $T_F = \varepsilon_F/k_B$  in realen Metallen an (aus: Charles Kittel, Introduction to Solid State Physics, Eighth Edition):

**Table 1** Calculated free electron Fermi surface parameters for metals at room temperature

(Except for Na, K, Rb, Cs at 5 K and Li at 78 K)

Valency	Metal	Electron concentration in $\text{cm}^{-3}$	Radius <sup>a</sup> parameter $r_n$	Fermi wavevector, in $\text{cm}^{-1}$	Fermi velocity, in $\text{cm s}^{-1}$	Fermi energy, in eV	Fermi temperature $T_F \equiv \varepsilon_F/k_B$ , in deg K
1	Li	$4.70 \times 10^{22}$	3.25	$1.11 \times 10^8$	$1.29 \times 10^8$	4.72	$5.48 \times 10^4$
	Na	2.65	3.93	0.92	1.07	3.23	3.75
	K	1.40	4.86	0.75	0.86	2.12	2.46
	Rb	1.15	5.20	0.70	0.81	1.85	2.15
	Cs	0.91	5.63	0.64	0.75	1.58	1.83
	Cu	8.45	2.67	1.36	1.57	7.00	8.12
	Ag	5.85	3.02	1.20	1.39	5.48	6.36
	Au	5.90	3.01	1.20	1.39	5.51	6.39
	2	Be	24.2	1.88	1.93	2.23	14.14
Mg		8.60	2.65	1.37	1.58	7.13	8.27
Ca		4.60	3.27	1.11	1.28	4.68	5.43
Sr		3.56	3.56	1.02	1.18	3.95	4.58
Ba		3.20	3.69	0.98	1.13	3.65	4.24
Zn		13.10	2.31	1.57	1.82	9.39	10.90
Cd		9.28	2.59	1.40	1.62	7.46	8.66
3	Al	18.06	2.07	1.75	2.02	11.63	13.49
	Ga	15.30	2.19	1.65	1.91	10.35	12.01
	In	11.49	2.41	1.50	1.74	8.60	9.98
4	Pb	13.20	2.30	1.57	1.82	9.37	10.87
	Sn( <i>w</i> )	14.48	2.23	1.62	1.88	10.03	11.64

<sup>a</sup>The dimensionless radius parameter is defined as  $r_n = r_0/a_H$ , where  $a_H$  is the first Bohr radius and  $r_0$  is the radius of a sphere that contains one electron.

Schreiben wir noch die Dichte-Funktion oder Dichte-Matrix für den fermionischen Grundzustand hin, sie ist gegeben durch

$$\rho(x\sigma, x'\sigma') = \sum_{x_2\sigma_2, \dots, x_N\sigma_N \in \Gamma_{x,s}} \bar{\psi}_0(x\sigma, x_2\sigma_2, \dots, x_N\sigma_N) \psi_0(x'\sigma', x_2\sigma_2, \dots, x_N\sigma_N) \quad (35)$$

wenn  $\psi_0$  den normierten Grundzustand bezeichnet,

$$\psi_0 = \sqrt{N!} |n_{k\tau} = \chi_{k \leq k_F}\rangle =: \sqrt{N!} | \{n_{k\tau}^0\} \rangle \quad (36)$$

Wir wenden das Resultat aus Aufgabe 1 vom Übungsblatt 5 an, die antisymmetrische Version, und bekommen

$$\begin{aligned} \rho(x\sigma, x'\sigma') &= N! \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N (-1)^{i+j} \bar{e}_{k_i\tau_i}(x\sigma) e_{k_j\tau_j}(x'\sigma') \times \\ &\quad (e_{k_1\tau_1} \otimes_a \cdots \widehat{e_{k_i\tau_i}} \cdots \otimes_a e_{k_N\tau_N}, e_{k_1\tau_1} \otimes_a \cdots \widehat{e_{k_j\tau_j}} \cdots \otimes_a e_{k_N\tau_N}) \\ &= \frac{(N-1)!}{N} \sum_{i=1}^N \bar{e}_{k_i\tau_i}(x\sigma) e_{k_i\tau_i}(x'\sigma') \times \\ &\quad (e_{k_1\tau_1} \otimes_a \cdots \widehat{e_{k_i\tau_i}} \cdots \otimes_a e_{k_N\tau_N}, e_{k_1\tau_1} \otimes_a \cdots \widehat{e_{k_i\tau_i}} \cdots \otimes_a e_{k_N\tau_N}) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{e}_{k_i\tau_i}(x\sigma) e_{k_i\tau_i}(x'\sigma') \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k\tau \in \Gamma_{k,s}} n_{k\tau}^0 \bar{e}_{k\tau}(x\sigma) e_{k\tau}(x'\sigma') \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k \in \Gamma_k} n_k^0 \bar{e}_k(x) e_k(x') \times \sum_{\tau \in \{\uparrow, \downarrow\}} \delta_{\sigma, \tau} \delta_{\sigma', \tau} \\ &= \delta_{\sigma, \sigma'} \frac{1}{N} \sum_{k \in \Gamma_k} n_k^0 \bar{e}_k(x) e_k(x') =: \delta_{\sigma, \sigma'} \rho(x, x') \end{aligned} \quad (37)$$

mit der Spin-unabhängigen Dichte-Matrix

$$\begin{aligned} \rho(x, y) &= \frac{1}{N} \sum_{k \in \Gamma_k} \chi(k \leq k_F) \bar{e}_k(x) e_k(y) = \frac{1}{N} \sum_{k \in \Gamma_k} \chi(k \leq k_F) \frac{1}{|\Gamma_x|} e^{-ik(x-y)} \\ &= (\Delta x)^d \times \sum_{k \in \Gamma_k} \frac{(\Delta k)^d}{(2\pi)^d} \frac{\chi(k \leq k_F)}{N} e^{-ik(x-y)} \end{aligned} \quad (38)$$

Dabei haben wir in der letzten Gleichung wieder die Identität

$$\frac{1}{|\Gamma_x|} = \frac{(\Delta x)^d (\Delta k)^d}{(2\pi)^d} \quad (39)$$

benutzt. Checken wir vielleicht noch kurz die Normierung,

$$1 \stackrel{!}{=} \sum_{x\sigma} \rho(x\sigma, x\sigma) = \sum_{x \in \Gamma_x} \sum_{\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}} \delta_{\sigma, \sigma} \rho(x, x) = 2 \sum_{x \in \Gamma_x} \rho(x, x) \quad (40)$$

mit

$$\begin{aligned} \sum_{x \in \Gamma_x} \rho(x, x) &= \sum_{x \in \Gamma_x} (\Delta x)^d \sum_{k \in \Gamma_k} \frac{(\Delta k)^d}{(2\pi)^d} \frac{\chi(k \leq k_F)}{N} \\ &\stackrel{\text{Def. von } k_F}{=} \sum_{x \in \Gamma_x} (\Delta x)^d \frac{(\Delta k)^d}{(2\pi)^d} \frac{N/2}{N} = \frac{|\Gamma_x|}{|\Gamma_x|} \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (41)$$

das passt also alles.

## Dichte-Matrix bei positiver Temperatur

Die Dichte-Matrix bei positiver Temperatur ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \langle \rho \rangle_\beta(x\sigma, x'\sigma') &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \rho_n(x\sigma, x'\sigma') e^{-\beta E_n}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n}} \\ &= \frac{\sum_{\{n_{k\tau}\} \in I_N} \rho_{\{n_{k\tau}\}}(x\sigma, x'\sigma') e^{-\beta E_{\{n_{k\tau}\}}}}{\sum_{\{n_{k\tau}\} \in I_N} e^{-\beta E_{\{n_{k\tau}\}}}} \end{aligned} \quad (42)$$

mit  $I_N$  gegeben durch (46) weiter unten,

$$\begin{aligned} \rho_{\{n_{k\tau}\}}(x\sigma, x'\sigma') &= \\ \sum_{x_2\sigma_2, \dots, x_N\sigma_N \in \Gamma_{x,s}} \bar{\psi}_{\{n_{k\tau}\}}(x\sigma, x_2\sigma_2, \dots, x_N\sigma_N) \psi_{\{n_{k\tau}\}}(x'\sigma', x_2\sigma_2, \dots, x_N\sigma_N) \end{aligned} \quad (43)$$

und den normierten Eigenfunktionen

$$\psi_{\{n_{k\tau}\}}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sqrt{N!} \prod_{k\tau \in \Gamma_{k,s}} e_{k\tau}^{n_{k\tau}} \quad (44)$$

und Eigen-Energien

$$E_{\{n_{k\tau}\}} = \sum_{k\tau \in \Gamma_{k,s}} n_{k\tau} \varepsilon_k \quad (45)$$

Die Eigenfunktionen und die Energieeigenwerte werden also wieder nicht durch ein einzelnes  $n$  indiziert, sondern durch eine Auswahl von Besetzungszahlen

$$\{n_{k\tau}\} \in \left\{ \{n_{k\tau}\}_{k\tau \in \Gamma_{k,s}} \mid \forall k\tau : n_{k\tau} \in \{0, 1\}, \sum_{k\tau} n_{k\tau} = N \right\} =: I_N \quad (46)$$

die im Gegensatz zum bosonischen Fall jetzt also nur 0 oder 1 sein dürfen. Wie in Gleichung (37) bekommen wir

$$\rho_{\{n_{k\tau}\}}(x\sigma, x'\sigma') = \frac{1}{N} \sum_{k\tau \in \Gamma_{k,s}} n_{k\tau} \bar{e}_{k\tau}(x\sigma) e_{k\tau}(x'\sigma') \quad (47)$$

Also,

$$\begin{aligned} \langle \rho \rangle_\beta(x\sigma, x'\sigma') &= \frac{\sum_{\{n_{k\tau}\} \in I_N} \rho_{\{n_{k\tau}\}}(x\sigma, x'\sigma') e^{-\beta E_{\{n_{k\tau}\}}}}{\sum_{\{n_{k\tau}\} \in I_N} e^{-\beta E_{\{n_{k\tau}\}}}} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k\tau \in \Gamma_{k,s}} \langle n_{k\tau} \rangle_{\beta, N} \bar{e}_{k\tau}(x\sigma) e_{k\tau}(x'\sigma') \end{aligned} \quad (48)$$

mit

$$\langle n_{k\tau} \rangle_{\beta, N} := \frac{\sum_{\{n_{k\tau}\} \in I_N} n_{k\tau} e^{-\beta \sum_{k\tau} n_{k\tau} \varepsilon_k}}{\sum_{\{n_{k\tau}\} \in I_N} e^{-\beta \sum_{k\tau} n_{k\tau} \varepsilon_k}} \quad (49)$$

Zur weiteren Berechnung von  $\langle n_{k\tau} \rangle_{\beta, N}$  betrachten wir wieder die Grössen

$$Z_{k\sigma}(z) := \sum_{N=1}^{\infty} z^N \sum_{\{n_{q\tau}\} \in I_N} n_{k\sigma} e^{-\beta \sum_{q\tau} n_{q\tau} \varepsilon_q} \quad (50)$$

$$Z(z) := \sum_{N=0}^{\infty} z^N \sum_{\{n_{q\tau}\} \in I_N} e^{-\beta \sum_{q\tau} n_{q\tau} \varepsilon_k} \quad (51)$$

Wir bekommen mit einer ähnlichen Rechnung wie im week6 (Ü-Blatt 7)

$$Z_{k\sigma}(z) = z e^{-\beta \varepsilon_k} \prod_{q\tau \neq k\sigma} (1 + z e^{-\beta \varepsilon_q}) \quad (52)$$

$$Z(z) = \prod_{q\tau} (1 + z e^{-\beta \varepsilon_q}) \quad (53)$$

Insbesondere für den Quotienten

$$\langle n_{k\sigma} \rangle_{\beta}(z) := \frac{Z_{k\sigma}(z)}{Z(z)} = \frac{z e^{-\beta \varepsilon_k}}{1 + z e^{-\beta \varepsilon_k}} \quad (54)$$

wobei das  $z = z(N)$  wieder so zu wählen ist, dass

$$\langle N \rangle_{\beta}(z) := \frac{1}{Z(z)} \sum_{N=0}^{\infty} N z^N \sum_{\{n_{k\tau}\} \in I_N} e^{-\beta \sum_{k\tau} n_{k\tau} \varepsilon_k} \stackrel{!}{=} N \quad (55)$$

Schauen wir uns Gleichung (55) an: Wir können schreiben

$$\begin{aligned} \langle N \rangle_{\beta}(z) &= \frac{1}{Z(z)} z \frac{d}{dz} \sum_{N=0}^{\infty} z^N \sum_{\{n_{q\tau}\} \in I_N} e^{-\beta \sum_{q\tau} n_{q\tau} \varepsilon_q} \\ &= \frac{1}{Z(z)} z \frac{d}{dz} Z(z) = z \frac{d}{dz} \log Z(z) = z \frac{d}{dz} \sum_{q\tau} \log[1 + z e^{-\beta \varepsilon_q}] \\ &= \sum_{q\tau} \frac{z e^{-\beta \varepsilon_q}}{1 + z e^{-\beta \varepsilon_q}} = 2 \sum_q \frac{z e^{-\beta \varepsilon_q}}{1 + z e^{-\beta \varepsilon_q}} \end{aligned} \quad (56)$$

Es ist üblich, das  $z$  durch ein  $\mu$ , das sogenannte chemische Potential, gemäss

$$z = e^{\beta \mu} \quad (57)$$

zu parametrisieren, wir bekommen dann

$$\langle N \rangle_{\beta}(z) = 2 \sum_q \frac{e^{-\beta(\varepsilon_q - \mu)}}{1 + e^{-\beta(\varepsilon_q - \mu)}} = 2 \sum_q \frac{1}{e^{+\beta(\varepsilon_q - \mu)} + 1} \stackrel{!}{=} N \quad (58)$$

Im Limes  $T \rightarrow 0$  oder  $\beta \rightarrow \infty$  wird das zu

$$\sum_{q \in \Gamma_k} \chi(\varepsilon_q < \mu) = N/2 \quad (59)$$

so dass das  $\mu$  identisch ist mit der Fermi-Energie  $\varepsilon_F$ ,

$$\mu = \varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda_F^2} \quad (60)$$

mit der Fermi-Wellenlänge

$$\lambda_F = (2\tau_d v)^{1/d} \quad (61)$$

und  $v = V/N$  dem Volumen pro Teilchen. Für  $\beta\mu \gg 1$  ist etwa

$$\int_0^\infty dx \frac{e^{-\beta(x-\mu)}}{1+e^{-\beta(x-\mu)}} = \frac{1}{\beta} \log[1+e^{\beta\mu}] \approx \mu = \int_0^\infty dx \chi(x < \mu) \quad (62)$$

so dass dann auch für positive Temperaturen, so lange  $\beta\varepsilon_F \gg 1$  oder

$$T \ll T_F = \varepsilon_F/k_B \quad (63)$$

gilt, das  $\mu$  durch die Fermi-Energie  $\varepsilon_F$  gegeben ist. Für typische Metalle ist die Fermi-Energie im einstelligen Elektronenvolt-Bereich,

$$\varepsilon_F \sim 1 - 10 \text{ eV} \quad (\text{typische Metalle}) \quad (64)$$

so dass dann

$$T_F \sim \frac{1 - 10 \text{ eV}}{8.62 \times 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{K}}} \sim 10^4 - 10^5 \text{ K} \quad (65)$$

Bei Raumtemperatur  $T \approx 300 \text{ K}$  kann man die Bedingung  $T \ll T_F$  also als erfüllt ansehen und wir können

$$\mu \approx \varepsilon_F \quad (66)$$

setzen. Die Funktion

$$f(\varepsilon) := \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/(k_B T)} + 1} \quad (67)$$

wird dann auch als Fermi-Dirac Verteilung bezeichnet und ist auf der nächsten Seite für verschiedene Temperaturen  $T$  geplottet:

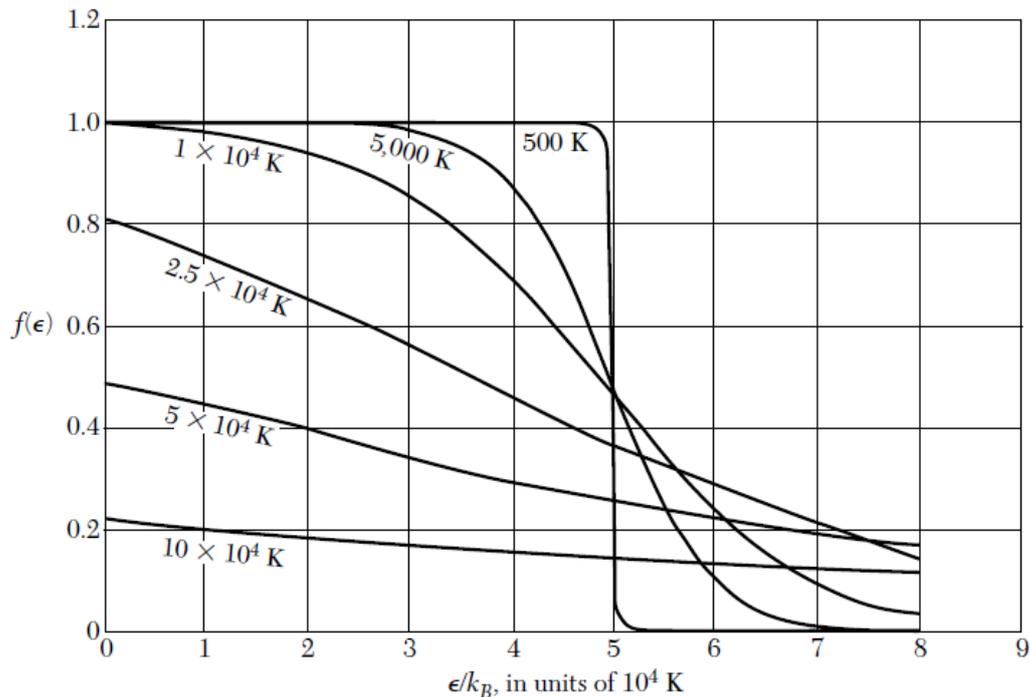
Das Folgende aus:

*Charles Kittel, Solid State Physics, Kapitel 6: Free Electron Fermi Gas*

The kinetic energy of the electron gas increases as the temperature is increased: some energy levels are occupied which were vacant at absolute zero, and some levels are vacant which were occupied at absolute zero (Fig. 3). The **Fermi-Dirac distribution** gives the probability that an orbital at energy  $\epsilon$  will be occupied in an ideal electron gas in thermal equilibrium:

$$f(\epsilon) = \frac{1}{\exp[(\epsilon - \mu)/k_B T] + 1} . \quad (5)$$

The quantity  $\mu$  is a function of the temperature;  $\mu$  is to be chosen for the particular problem in such a way that the total number of particles in the system comes out correctly—that is, equal to  $N$ . At absolute zero  $\mu = \epsilon_F$ , because in the limit  $T \rightarrow 0$  the function  $f(\epsilon)$  changes discontinuously from the value 1 (filled) to the value 0 (empty) at  $\epsilon = \epsilon_F = \mu$ . At all temperatures  $f(\epsilon)$  is equal to  $\frac{1}{2}$  when  $\epsilon = \mu$ , for then the denominator of (5) has the value 2.



**Figure 3** Fermi-Dirac distribution function (5) at the various labelled temperatures, for  $T_F \equiv \epsilon_F/k_B = 50,000$  K. The results apply to a gas in three dimensions. The total number of particles is constant, independent of temperature. The chemical potential  $\mu$  at each temperature may be read off the graph as the energy at which  $f = 0.5$ .