

4 Das Fermigas und die Fermi-Flüssigkeit

In diesem Kapitel diskutieren wir die Eigenschaften des Fermi-Gases, d.h. eines Systems von nichtwechselwirkenden Fermionen im freien Raum. Obwohl eine solche Idealisierung unrealistisch erscheint, kann sie erstaunlicherweise das Verhalten von einfachen Metallen bei tiefen Temperaturen beschreiben, wie die spezifische Wärme und den Pauli-Paramagnetismus. Die Tatsache, dass das Potential der Ionen in einem einfachen Metall für manche Größen vernachlässigt werden kann, kann man verstehen, wenn das Bild von stark delokalisierten Fermionen zutrifft. In diesem Fall ist es vorstellbar, dass die Elektronen ein mittleres Potential sehen, das homogen ist. Es soll nur dazu dienen, das gesamte System als ladungsneutral anzusehen. Wenn die Fermionen aber geladen sind, müssen sie auch miteinander wechselwirken. Es ist einer der großen Verdienste von Lev Landau diesen Widerspruch durch Einführung des Begriffs der Fermi-Flüssigkeit gelöst zu haben. Dies wird im letzten Abschnitt dieses Kapitels diskutiert. Daraus wird ersichtlich, dass die Ergebnisse der Idealisierung eines Fermigases bei vielen fermionischen Systemen gültig bleiben. So zum Beispiel bei ^3He bei Temperaturskalen von Millikelvin über gewöhnliche Metalle bei Temperaturen $\sim 10^2$ Kelvin bis hin zu Neutronensternen bei etwa 10^{12} Kelvin.

4.1 Das Fermigas

Wir betrachten hier nichtwechselwirkende Fermionen im dreidimensionalen homogenen Raum. Der Einfachheit halber denken wir an Spin-1/2 Teilchen wie Elektronen.

Um explizite Berechnungen zu ermöglichen, ist es zweckmässig mit einem System von endlichem Volumen zu arbeiten. Dabei sollen Randeffekte vermieden werden, um die Homogenität des Raumes beizubehalten. Dazu führen wir periodische Randbedingungen ein.

4.1.1 Periodische Randbedingungen

Ein endliches System wird i.A. Ränder bzw. Oberflächen besitzen. Als einfaches Beispiel können wir ein System im unendlich tiefen Potentialtopf betrachten. Im Fall eines dreidimensionalen Potentialtopfs mit Kanten der Länge L sind die Eigenfunktionen gegeben durch

$$\psi_{\vec{n}}(\vec{x}) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin(k_{n_x}^x x) \sin(k_{n_y}^y y) \sin(k_{n_z}^z z) \quad (4.1)$$

und die Eigenmoden durch

$$\epsilon_{\vec{n}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}_{\vec{n}}^2}{2m}, \quad (4.2)$$

wobei

$$k_{n_i}^i = \frac{n_i \pi}{L}, \quad i = x, y, \text{ oder } z, \quad n_i = 1, 2, \dots, \infty. \quad (4.3)$$

Bei endlichem L ist die Dichte der Teilchen nicht homogen. Homogenität wird nur im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ erreicht. Dann verdichten sich die Energieniveaus zu einem Kontinuum. Beim unendlich tiefen Potentialtopf verschwinden die Randeffekte nur im thermodynamischen Limes.

Um solche Randeffekte auszuschalten, führen wir periodische Randbedingungen ein. Bei einem Kasten mit Kanten der Länge L verlangen wir, dass die Wellenfunktionen folgende Bedingungen erfüllen.

$$\begin{aligned}\psi(x + L, y, z) &= \psi(x, y, z) , \\ \psi(x, y + L, z) &= \psi(x, y, z) , \\ \psi(x, y, z + L) &= \psi(x, y, z) .\end{aligned}\tag{4.4}$$

Da der Raum nun homogen ist, sind die Lösungen für freie Teilchen ebene Wellen:

$$\psi(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) ,\tag{4.5}$$

wobei

$$k_i = \frac{2\pi}{L} n_i , \quad i = x, y, \text{ oder } z , \quad n_i \in \mathbb{Z} .\tag{4.6}$$

Nun ist die Dichte der Teilchen auch für endliches L homogen.

4.1.2 Hamiltonoperator, Fermi-Impuls und Fermi-Energie

Der Hamiltonoperator für N Elektronen der Masse m sieht in erster Quantisierung wie folgt aus.

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} ,\tag{4.7}$$

mit \vec{p}_i der Impulsoperator des Teilchens i . In zweiter Quantisierung geht dieser Hamiltonoperator über in

$$H = \sum_{\alpha, \beta} f_{\alpha}^{\dagger} \langle \alpha | \frac{\vec{p}^2}{2m} | \beta \rangle f_{\beta} ,\tag{4.8}$$

wobei α und β Quantenzahlen einer Einteilchenbasis kennzeichnen. Im Fall von freien Elektronen haben wir

$$|\alpha\rangle \rightarrow |\vec{k}, \sigma\rangle ,\tag{4.9}$$

mit Impuls \vec{k} gegeben durch Gl. (4.6) und $\sigma = \pm 1/2$. Somit haben wir

$$\begin{aligned}\langle \alpha | \frac{\vec{p}^2}{2m} | \beta \rangle &\rightarrow \langle \vec{k}_1, \sigma_1 | - \frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} | \vec{k}_2, \sigma_2 \rangle \\ &= - \frac{\hbar^2}{2mL^3} \int d^3x e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{x}} \vec{\nabla}^2 e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{x}} \langle \sigma_1 | \sigma_2 \rangle \\ &= \frac{\hbar^2 \vec{k}_2^2}{2m} \delta_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \delta_{\sigma_1, \sigma_2} .\end{aligned}\tag{4.10}$$

Dies führt zum Hamiltonoperator in zweiter Quantisierung

$$H = \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon_{\vec{k}} f_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} f_{\vec{k}, \sigma} \quad (4.11)$$

mit

$$\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} . \quad (4.12)$$

Der Grundzustand wird durch Auffüllen der niedrigsten Niveaus erreicht. Aufgrund des Pauli-Prinzips können bis zu zwei Elektronen denselben Impuls haben, da der Spin unterschiedlich sein kann. Bei einer Gesamtzahl von N Elektronen gibt es

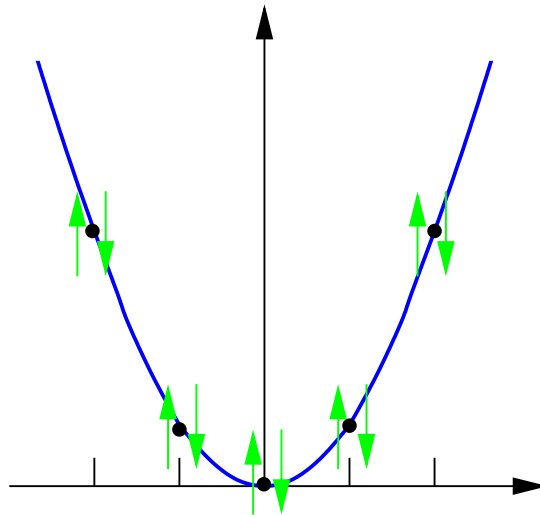


Abbildung 5: Grundzustand für 10 freie Elektronen in einer Dimension.

einen maximalen Wellenvektor, der zum letzten besetzten Zustand gehört. Er wird Fermi-Impuls genannt. Die dazu gehörige Energie ist die Fermi-Energie.

Um den Fermi-Impuls zu bestimmen, berechnen wir den Erwartungswert des Teilchenzahloperators im Grundzustand.

$$\begin{aligned} N &= \langle G | \hat{N} | G \rangle \\ &= \sum_{\vec{k}, \sigma} \langle G | f_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} f_{\vec{k}, \sigma} | G \rangle = \sum_{\vec{k}, \sigma} \theta(k_F - |\vec{k}|) , \end{aligned} \quad (4.13)$$

wobei

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & x \geq 0 , \\ 0 & x < 0 \end{cases} \quad (4.14)$$

die Stufenfunktion ist. Damit erhalten wir

$$(4.13) = g \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 k \theta(k_F - |\vec{k}|) = \frac{gV}{6\pi^2} k_F^3 , \quad (4.15)$$

wobei $g = 2$ der Entartungsfaktor ist. Somit haben wir

$$k_F = \left(\frac{6\pi^2 N}{g V} \right)^{1/3}. \quad (4.16)$$

$(V/N)^{1/3}$ definiert eine Länge. Sie ist der mittlere Abstand zwischen den Teilchen. Dieser Abstand kann als Radius einer Kugel um ein Teilchen aufgefasst werden, so dass

$$V = \frac{4\pi}{3} r_0^3 N. \quad (4.17)$$

Damit können wir sehen, dass der Fermi-Impuls das Inverse des mittleren Abstands zwischen zwei Teilchen ist:

$$k_F = \left(\frac{9\pi}{4r_0^3} \right)^{1/3} \simeq 1.92 r_0^{-1}. \quad (4.18)$$

Mit Hilfe des Fermi-Impulses können wir auch die Fermi-Energie bestimmen.

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3}. \quad (4.19)$$

Im Folgenden betrachten wir Grundzustands- und thermodynamische Eigenschaften bei tiefen Temperaturen des Fermigases.

4.1.3 Grundzustandseigenschaften des Fermigases

a) Grundzustandsenergie

Sie wird durch den Erwartungswert von H im Grundzustand gegeben.

$$\begin{aligned} E_0 &= \langle G | H | G \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\vec{k}, \sigma} \vec{k}^2 \langle G | f_{\vec{k}\sigma}^\dagger f_{\vec{k}\sigma} | G \rangle \\ &= \frac{g\hbar^2}{2m} \sum_{\vec{k}} \vec{k}^2 \theta(k_F - |\vec{k}|) \\ &= \frac{\hbar^2}{m} \frac{V}{2\pi^2} \int_0^{k_F} k^4 dk \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{V}{\pi^2} \frac{k_F^5}{5} = \frac{3}{5} N E_F. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Die Grundzustandsenergie pro Teilchen ist dann

$$\frac{E_0}{N} = \frac{3}{5} E_F. \quad (4.21)$$

Dadurch sehen wir, dass die Fermi-Energie die einzige Energieskala im Problem ist.

b) Zustandsdichte

Die Anzahl der Einteilchenzustände im Energieintervall $[E, E+dE]$ ist $N(E)dE$, so dass $N(E)$ die Zustandsdichte ist. Beim Fermigas ist die Energiedispersion durch (4.12) gegeben. D.h. im dreidimensionalen \vec{k} -Raum sind die Flächen konstanter Energie Kugelflächen. Demnach wird die Anzahl der Zustände im Energieintervall $[E, E + dE]$ durch einer Kugelschale gegeben.

$$N(E)dE \propto \frac{4\pi}{3} \left\{ \left[\frac{2m}{\hbar^2}(E + dE) \right]^{3/2} - \left[\frac{2m}{\hbar^2}E \right]^{3/2} \right\}. \quad (4.22)$$

Die Proportionalitätskonstante wird durch die Dichte der Punkte im \vec{k} -Raum und durch den Entartungsfaktor bestimmt. Mit periodischen Randbedingungen sind die \vec{k} -Punkte durch (4.6) gegeben. D.h. es gibt einen \vec{k} -Punkt pro Volumenelement $(2\pi/L)^3$. Somit haben wir

$$N(E)dE = g \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} \left\{ \left[\frac{2m}{\hbar^2}(E + dE) \right]^{3/2} - \left[\frac{2m}{\hbar^2}E \right]^{3/2} \right\}. \quad (4.23)$$

Somit lautet die Zustandsdichte pro Volumeneinheit wie folgt:

$$\rho(E) = \frac{g}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2}. \quad (4.24)$$

Das entspricht dem Verlauf der Zustandsdichte in einfachen Metallen (Alkali-metallen).

4.1.4 Tieftemperatureigenschaften des Fermigases

Im Abs. 3.2.4 haben wir schon gesehen, wie die Zustandssumme im großkanonischen Ensemble definiert ist. Die erste Gleichung in (3.100) gibt den allgemeinen Ausdruck wieder. Die Zustandssumme bestimmt das großkanonische Potential $\Omega(T, V, \mu)$, wie folgt.

$$\Omega(T, V, \mu) = -k_B T \ln Z. \quad (4.25)$$

Andererseits wird das großkanonische Potential in der Thermodynamik durch die innere Energie E , die Entropie S und die Teilchenzahl N gegeben:

$$\Omega(T, V, \mu) = E - TS - \mu N. \quad (4.26)$$

Aus den beiden Gleichungen können wir S und N bestimmen. Dafür betrachten wir die folgende Ableitung

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{V, \mu} &= -k_B \left(\frac{\partial}{\partial T} T \ln Z \right)_{V, \mu} \\ &= \frac{\Omega}{T} - \frac{\langle H \rangle}{T} + \frac{\mu \langle N \rangle}{T}. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Aus dem Vergleich des obigen Ergebnisses mit Gl. (4.26) erhalten wir

$$S = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{V, \mu} \quad (4.28)$$

und

$$N = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, V} . \quad (4.29)$$

Somit sehen wir, dass aus dem großkanonischen Potential alle andere thermodynamische Potentiale erhalten werden können.

Wir haben schon im Abs. 3.2.4 die Zustandssumme im Fall freier Fermionen berechnet. Um den Ausdruck für das Fermigas zu erhalten, brauchen wir nur die Energiedispersion (4.12) in das Ergebnis (3.100) einzuführen.

$$\Omega = -k_B T \sum_{\vec{k}, \sigma} \ln \{ 1 + \exp [\beta (\mu - \epsilon_{\vec{k}})] \} . \quad (4.30)$$

Die Summe über alle Impulse kann mit Hilfe der Zustandsdichte zu einem Integral über die Energie umgewandelt werden. Dafür gehen wir davon aus, dass die Länge L des Systems mit periodischen Randbedingungen viel größer ist als alle mikroskopischen Skalen, so dass die Summe in ein Integral übergeht:

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{k}, \sigma} &= \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \sum_{\vec{k}, \sigma} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^3 \\ &\rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} g \int d^3k = \frac{V}{(2\pi)^3} g 4\pi \int k^2 dk , \end{aligned} \quad (4.31)$$

wobei wir beim Übergang zur letzten Gleichung die Isotropie im Fall des Fermigases berücksichtigt haben. Andererseits, wenn wir die Zustandsdichte pro Volumeneinheit betrachten, haben wir

$$\rho(E) dE = \frac{g}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk . \quad (4.32)$$

Somit sehen wir, dass im thermodynamischen Limes folgendes gilt:

$$\sum_{\vec{k}, \sigma} f(\epsilon_{\vec{k}}) = V \int \rho(E) f(E) dE . \quad (4.33)$$

Mit Hilfe des Ausdrucks (4.24) haben wir für das großkanonische Potential

$$\begin{aligned} \Omega &= -k_B T V \frac{g}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty E^{\frac{1}{2}} \ln [1 + \exp (\mu - E)] dE \\ &= -\frac{gV}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{2}{3} \int_0^\infty dE \frac{E^{\frac{3}{2}}}{1 + \exp [\beta(E - \mu)]} . \end{aligned} \quad (4.34)$$

Nun betrachten wir das Integral

$$I = \int_0^\infty dE \frac{E^{\frac{3}{2}}}{1 + \exp[\beta(E - \mu)]} \quad (4.35)$$

im Limes niedriger Temperaturen. Wir führen zunächst eine neue Variable ein,

$$x \equiv \frac{E - \mu}{k_B T}, \quad (4.36)$$

und definieren

$$\alpha \equiv \frac{\mu}{k_B T}. \quad (4.37)$$

Mit den obigen Änderungen haben wir

$$I = (k_B T)^{\frac{5}{2}} I(\alpha), \quad (4.38)$$

wobei

$$\begin{aligned} I(\alpha) &\equiv \int_{-\alpha}^\infty dx \frac{(x + \alpha)^{\frac{3}{2}}}{e^x + 1} \\ &= \int_{-\alpha}^0 dx \frac{(x + \alpha)^{\frac{3}{2}}}{e^x + 1} + \int_0^\infty dx \frac{(x + \alpha)^{\frac{3}{2}}}{e^x + 1} \\ &= \int_0^\alpha dx \frac{(\alpha - x)^{\frac{3}{2}}}{e^{-x} + 1} + \int_0^\infty dx \frac{(x + \alpha)^{\frac{3}{2}}}{e^x + 1} \\ &= \int_0^\alpha dx (\alpha - x)^{\frac{3}{2}} \\ &\quad + \int_0^\infty dx \frac{(x + \alpha)^{\frac{3}{2}} - (\alpha - x)^{\frac{3}{2}}}{e^x + 1} + \int_\alpha^\infty dx \frac{(\alpha - x)^{\frac{3}{2}}}{e^x + 1}. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Nun beschränken wir uns auf den Tieftemperaturimes. In diesem Fall hat das chemische Potential einen endlichen Wert ($\mu \rightarrow E_F$), so dass $\alpha \rightarrow \infty$. Für das letzte Integral impliziert dies, dass

$$\int_\alpha^\infty dx \frac{(\alpha - x)^{\frac{3}{2}}}{e^x + 1} \sim e^{-\alpha} \longrightarrow 0. \quad (4.40)$$

Weiterhin haben wir

$$(x + \alpha)^{\frac{3}{2}} - (\alpha - x)^{\frac{3}{2}} \xrightarrow{\alpha \rightarrow \infty} 3x\alpha^{\frac{1}{2}} + \mathcal{O}\left(\alpha^{-\frac{1}{2}}\right), \quad (4.41)$$

so dass wir für das entsprechende Integral

$$3\alpha^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty dx \frac{x}{e^x + 1} = 3\alpha^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2} \Gamma(2) \zeta(2) \quad (4.42)$$

erhalten, wobei $\Gamma(z)$ die Gamma-Funktion ist, mit $\Gamma(n+1) = n!$ für n ganzzahlig und positiv, und

$$\zeta(z) = \sum_{p=1}^{\infty} p^{-z}, \quad \text{Re } z > 1, \quad (4.43)$$

die Riemannsche ζ -Funktion ist. Es gilt $\zeta(2) = \pi^2/6$. Schließlich haben wir für das erste Integral in (4.39)

$$\int_0^\alpha dx (\alpha - x)^{\frac{3}{2}} = -\frac{2}{5}(\alpha - x)^{\frac{5}{2}} \Big|_0^\alpha = \frac{2}{5} \alpha^{\frac{5}{2}}. \quad (4.44)$$

Zusammenfassend erhalten wir für das Integral (4.38)

$$I = (k_B T)^{\frac{5}{2}} \left[\frac{2}{5} \left(\frac{\mu}{k_B T} \right)^{\frac{5}{2}} + \frac{\pi^2}{4} \left(\frac{\mu}{k_B T} \right)^{\frac{1}{2}} + \dots \right], \quad (4.45)$$

und somit

$$\Omega = -\frac{gV}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{2}{3} \left[\frac{2}{5} \mu^{\frac{5}{2}} + \frac{\pi^2}{4} \mu^{\frac{1}{2}} (k_B T)^2 + \dots \right]. \quad (4.46)$$

Anhand des obigen Resultates können wir nun verschiedene thermodynamische Größen berechnen.

a) Das chemische Potential

Um die Temperaturabhängigkeit des chemischen Potentials zu erhalten, berechnen wir den Erwartungswert der Teilchenzahl aus dem großkanonischen Potential. Aus (4.29) erhalten wir

$$\begin{aligned} N &= - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T,V} \\ &= \frac{gV}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{2}{3} \left[\mu^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi^2}{8} \mu^{-\frac{1}{2}} (k_B T)^2 + \dots \right]. \end{aligned} \quad (4.47)$$

Für $T = 0$ haben wir aus der Gl. (4.19)

$$\frac{N}{V} = \left(E_F \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{g}{6\pi^2}. \quad (4.48)$$

Somit erhalten wir

$$\mu = E_F \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{\mu} \right)^2 + \dots \right]^{-\frac{2}{3}} \quad (4.49)$$

und bis $\mathcal{O}(T^2)$

$$\mu = E_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^2 + \dots \right]. \quad (4.50)$$

Da bei einfachen Metallen der Wert der Fermi-Energie sich im Bereich $E_F \sim 1 - 10 \text{ eV} \sim 10^4 - 10^5 K$ befindet, ist es eine gute Näherung $\mu \simeq E_F$ zu setzen. Weiterhin zeigt das obige Ergebnis, dass das chemische Potential mit der Temperatur abnimmt.

b) Die spezifische Wärme

Die spezifische Wärme bei konstantem Volumen ist wie folgt definiert:

$$c_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{V,N}, \quad (4.51)$$

wobei die innere Energie $E = E(S, V, N)$ eine Funktion von S , V und N ist. Mit Hilfe der Beziehung (4.26) und der Tatsache, dass bei tiefen Temperaturen, d.h. bis $\mathcal{O}(T^2)$ N und μ wie folgt miteinander verknüpft sind

$$N = \frac{gV}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{2}{3} \mu^{\frac{3}{2}}, \quad (4.52)$$

können wir c_V aus der Entropie erhalten:

$$c_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{V,N}. \quad (4.53)$$

Die Entropie kann aus dem großkanonischen Potential wie in Gl. (4.28) angegeben berechnet werden.

$$\begin{aligned} S &= - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{V,\mu} \\ &= \frac{gV}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{2}{3} \left[\frac{\pi^2}{2} k_B^2 T \mu^{\frac{1}{2}} + \dots \right]. \end{aligned} \quad (4.54)$$

Mit der Beziehung (4.52) haben wir

$$S(T, V, N) \simeq N k_B \frac{\pi^2 k_B T}{2 E_F}, \quad (4.55)$$

was zu

$$c_V = N k_B \frac{\pi^2 k_B T}{2 E_F} \quad (4.56)$$

führt. Wir können die spezifische Wärme auch als Funktion der Zustandsdichte an der Fermi-Energie ausdrücken, da

$$\rho(E_F) = \frac{g}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E_F^{\frac{1}{2}} \quad (4.57)$$

ist. Zusammen mit Gl. (4.48) erhalten wir

$$c_V = V \frac{\pi^2 k_B}{3} \rho(E_F) k_B T . \quad (4.58)$$

Somit sehen wir, dass c_V ein Maß für die Zustandsdichte bei der Fermi-Energie ist. Weiterhin sehen wir, dass die spezifische Wärme eines Fermigas für $k_B T \ll E_F$ linear mit der Temperatur abnimmt. Dieses Verhalten wird tatsächlich in einfachen Metallen beobachtet. Es steht aber im klaren Widerspruch mit der klassischen Thermodynamik. Dort gilt bei freien Teilchen die Gleichverteilung der Energie

$$E^{(kl.)} = \frac{1}{2} N k_B T , \quad (4.59)$$

so dass

$$c_V^{(kl.)} = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \text{const} . \quad (4.60)$$

Die Tatsache, dass die spezifische Wärme bei tiefen Temperaturen proportional zur Temperatur ist, ist eine Konsequenz des Pauli-Ausschlußprinzips. Dadurch, dass zwei Elektronen sich nicht im selben Zustand befinden können, können nur Elektronen mit einer Energie innerhalb eines Intervalls $k_B T$ um E_F zur spezifischen Wärme beitragen. Dies führt zu einem Anteil $N k_B T / E_F$, bei dem die Energie $k_B T$ verteilt wird, d.h.

$$\Delta E(T) \sim N \frac{k_B T}{E_F} k_B T , \quad (4.61)$$

so dass ein lineares Verhalten der spezifischen Wärme resultiert.

c) Pauli-Paramagnetismus

In diesem Abschnitt betrachten wir das Verhalten eines Elektronengases beim Anlegen eines Magnetfeldes.

In der Vorlesung Quantenmechanik im Bachelorstudiengang wurde die Wechselwirkung eines Elektrons mit einem Magnetfeld schon diskutiert. Da das Elektron eine Ladung e besitzt, erfährt es eine Lorentzkraft. Darüber hinaus hat das Elektron ein intrinsisches magnetisches Moment

$$\vec{M}_S = \frac{g S \mu_B}{\hbar} \vec{S} , \quad (4.62)$$

wobei \vec{S} ein Spin-1/2 Operator ist, g_S der gyromagnetischer Faktor ist und $\mu_B = e\hbar/2mc$ das Bohrsche Magneton ist. Der Hamiltonoperator, der diese Wechselwirkungen beschreibt, ist

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \vec{M}_S \cdot \vec{B}. \quad (4.63)$$

Hier beschränken wir uns auf schwache Magnetfelder, so dass wir nur Effekte diskutieren, die linear in \vec{B} sind. Aus dem ersten Term in H ergeben sich ein paramagnetischer Anteil

$$H_1 = -\frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{B} \quad (4.64)$$

und ein diamagnetischer Anteil

$$H_2 = \frac{e^2 \vec{B}^2}{8mc^2} \left[\vec{x}^2 - \frac{(\vec{x} \cdot \vec{B})^2}{\vec{B}^2} \right]. \quad (4.65)$$

Der letzte Beitrag kann im Fall von schwachen Feldern vernachlässigt werden. Weiterhin können wir im linearen Bereich den Erwartungswert des Drehimpulses $\langle \vec{L} \rangle$ mit den Eigenzuständen des Elektronengases berechnen. Dabei wählen wir das Koordinatensystem so, dass $\vec{B} = (0, 0, B)$ ist. Damit haben wir

$$\begin{aligned} \langle \vec{k} | L^z | \vec{k} \rangle &= \frac{\hbar}{iV} \int d^3x e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \\ &= \frac{\hbar}{V} \int d^3x e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} (x k_y - y k_x) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} = 0. \end{aligned} \quad (4.66)$$

Somit sehen wir, dass im Fall schwacher Felder die Kopplung an die Spins dominiert. Der Hamiltonoperator für die weitere Behandlung hat die Form

$$H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m} - \frac{g_S \mu_B}{\hbar} \vec{S}_i \cdot \vec{B} \right), \quad (4.67)$$

wobei wir nun N Elektronen betrachten.

Im Folgenden diskutieren wir den Übergang zur zweiten Quantisierung für den Spin-Term, wobei wir zunächst nur die dazugehörigen Zustände betrachten. Es handelt sich um einen Einteilchen-Operator, so dass er wie folgt geschrieben werden kann

$$\sum_{i=1}^N \vec{S}_i \rightarrow \sum_{\alpha, \beta} f_{\alpha}^{\dagger} \langle \alpha | \vec{S} | \beta \rangle f_{\beta}, \quad (4.68)$$

wobei $|\alpha\rangle = |\uparrow\rangle$ oder $|\downarrow\rangle$ und $\vec{S} = \vec{\sigma}/2$, mit den Pauli-Matrizen $\vec{\sigma}$. Damit haben wir

$$(4.68) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} f_{\alpha}^{\dagger} \vec{\sigma}_{\alpha, \beta} f_{\beta}, \quad \text{mit } \alpha, \beta = \uparrow, \downarrow. \quad (4.69)$$

Da wir angenommen haben, dass das Magnetfeld entlang der z -Richtung liegt, brauchen wir nur die Pauli-Matrix σ^z zu betrachten.

$$\sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (4.70)$$

Wenn wir den kinetische Anteil berücksichtigen, sind die Einteilchen-Zustände auch durch den Impuls gekennzeichnet, d.h. wir arbeiten wie schon früher mit Zuständen $|\vec{k}, \sigma\rangle$. Dies führt zum folgenden Hamiltonoperator

$$H = \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon_{\vec{k}, \sigma} f_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} f_{\vec{k}, \sigma}, \quad (4.71)$$

wobei

$$\epsilon_{\vec{k}, \sigma} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \mp \mu_B B, \quad \sigma = \uparrow, \downarrow. \quad (4.72)$$

Hier sehen wir, dass das Spektrum je nach Spinorientierung verschoben wird. Da im Gleichgewicht die Fermi-Energie dieselbe für beide Spinrichtungen ist, ist die Anzahl der Elektronen mit Spin \uparrow und \downarrow nicht gleich. Dadurch entsteht eine Magnetisierung. Sie wird durch die Summe aller magnetischen Momente gegeben:

$$\begin{aligned} M &= \frac{1}{V} \left\langle \sum_i M_{S,i}^z \right\rangle \\ &= \frac{g_S \mu_B}{\hbar V} \left\langle \sum_i S_i^z \right\rangle \\ &= \frac{g_S \mu_B}{2V} \left\langle \sum_{\vec{k}} \left(f_{\vec{k}, \uparrow}^{\dagger} f_{\vec{k}, \uparrow} - f_{\vec{k}, \downarrow}^{\dagger} f_{\vec{k}, \downarrow} \right) \right\rangle \\ &= \frac{\mu_B}{V} (N_{\uparrow} - N_{\downarrow}), \end{aligned} \quad (4.73)$$

wobei wir $g_S = 2$ gesetzt haben und

$$N_{\sigma} = \left\langle \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} f_{\vec{k}, \sigma} \right\rangle \quad (4.74)$$

ist.

Um die Magnetisierung zu erhalten, brauchen wir die Anzahl der Teilchen mit Spin \uparrow und \downarrow zu berechnen. Im großkanonischen Ensemble können die entsprechenden Erwartungswerte wie im Abs. 4.1.4 a) erhalten werden. Dazu müssen wir den Term mit dem chemischen Potential berücksichtigen:

$$\begin{aligned}
 H - \mu N &= \sum_{\vec{k}, \sigma} \left(\epsilon_{\vec{k}, \sigma} f_{\vec{k}, \sigma}^\dagger f_{\vec{k}, \sigma} - \mu f_{\vec{k}, \sigma}^\dagger f_{\vec{k}, \sigma} \right) \\
 &= \sum_{\vec{k}} \left\{ \left[\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} - (\mu + \mu_B B) \right] f_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger f_{\vec{k}, \uparrow} \right. \\
 &\quad \left. + \left[\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} - (\mu - \mu_B B) \right] f_{\vec{k}, \downarrow}^\dagger f_{\vec{k}, \downarrow} \right\}. \quad (4.75)
 \end{aligned}$$

Für jede Spinprojektion kommen wir auf das schon behandelte Problem ohne Magnetfelder mit chemischen Potentialen, die für jede Spinprojektion verschieden sind. Da nun die Spinentartung aufgehoben wurde, müssen wir den Entartungsfaktor auf $g = 1$ setzen. Aus der Gl. (4.47) haben wir mit den entsprechenden Ersetzungen

$$\frac{N_{\uparrow, \downarrow}}{V} = \frac{1}{6\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (\mu \pm \mu_B B)^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{\mu \pm \mu_B B} \right)^2 + \dots \right] \quad (4.76)$$

Im Limes schwacher Felder brauchen wir nur Beiträge bis $\mathcal{O}(B)$. Dabei erhalten wir

$$\frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{V} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \mu_B B \mu^{1/2} \left[1 - \frac{\pi^2}{24} \left(\frac{k_B T}{\mu} \right)^2 \right]. \quad (4.77)$$

Schließlich berücksichtigen wir nur Beiträge bis $\mathcal{O}(k_B^2 T^2)$, ersetzen dementsprechend μ durch E_F und führen die Zustandsdichte ein. Damit lautet die Magnetisierung wie folgt:

$$\begin{aligned}
 M &= \mu_B \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{V} \\
 &= \rho(E_F) \mu_B^2 B \left[1 - \frac{\pi^2}{24} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right]. \quad (4.78)
 \end{aligned}$$

Die magnetische Suszeptibilität ist durch die Ableitung der Magnetisierung nach dem Magnetfeld gegeben:

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} = \rho(E_F) \mu_B^2 B \left[1 - \frac{\pi^2}{24} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right]. \quad (4.79)$$

Da i.A. bei Zimmertemperatur $E_F \gg k_B T$ ist, ist die Temperaturabhängigkeit der magnetischen Suszeptibilität vernachlässigbar. Dieses Verhalten wird bei Metallen beobachtet. Weiterhin sehen wir, dass die magnetische Suszeptibilität wie die spezifische Wärme ein Maß für die Zustandsdichte an der Fermi-Energie ist.

4.2 Die Fermi-Flüssigkeit

Die oben diskutierten Eigenschaften des Fermigas findet man in vielen physikalischen Systemen, obwohl die Fermionen dort durch verschiedene Wechselwirkungen gekennzeichnet sind.

i) Metalle

Elektronen in Metallen sind geladene Teilchen, so dass sie der Coulomb-Wechselwirkung unterliegen. Diese Wechselwirkung kann bei abnehmenden Abständen sehr stark werden. Dennoch findet man i.A. $c_V \sim T$ und $\chi \sim \text{konst.}$ bei Temperaturen $\sim 10^2$ K.

ii) ^3He

^3He zeigt auch die Eigenschaften eines Fermigas bei Temperaturen zwischen etwa 100 mK und 3 mK, wo ein Phasenübergang zu einer suprafluiden Phase stattfindet. Hier spielt die Coulomb-Wechselwirkung keine Rolle, da die Atome ladungsneutral sind. Dennoch ist ^3He bei kleinen Abständen durch eine *hard-core* Wechselwirkung gekennzeichnet und im obigen Temperaturbereich ist die Dichte so, dass der mittlere Abstand zwischen Atomen vergleichbar mit dem *hard-core* Radius ist. (Siehe z.B. A. J. Leggett, Rev. Mod. Phys. **47**, 331 (1975) - A. Leggett erhielt den Nobel-Preis 2008 für seine Arbeiten über ^3He).

iii) Atomkerne

Die Atomkerne bestehen aus Nukleonen (Protonen und Neutronen), die der Coulomb- und der Starken Wechselwirkung unterliegen. Hier wird auch das Fermigas als Modell für Kerne verwendet. Die Energieskala hier liegt bei etwa 10^{10} K.

iv) Weißer Zwerge

Die Stabilität von solchen Sternen kann dadurch erklärt werden, dass man sie als ein entartetes Elektronengas betrachtet (Chandrasekar-Grenze - S. Chandrasekar erhielt den Nobel-Preis 1983 für seine theoretische Arbeit über die Struktur und Evolution von Sternen). Die Energieskala hier liegt bei etwa 10^7 K (siehe z.B. Kerson Huang, *Statistical Mechanics*, Wiley & Sons, (1987), Abs. 11.2).

v) Neutronensterne

Bei Neutronensternen wird als Basis auch die Fermi-Flüssigkeits-Theorie verwendet, jedoch in einem relativistischen Rahmen. Die relevante Energieskala liegt hier bei etwa 10^{12} K.

Die Tatsache, dass das Fermigas die niederenergetischen Eigenschaften von so vielen fermionischen Systemen mit verschiedenen Wechselwirkungen gut beschreibt, wurde von Lev Landau (Soviet. Phys. JETP **3**, 920 (1957) - Landau erhielt den Nobel-Preis 1962 für seine Arbeiten über flüssiges Helium) phenomenologisch gedeutet. Er ging davon aus, dass die niederenergetischen Eigenschaften durch sog. Quasiteilchen beschrieben werden können, welche miteinander schwach wechselwirken. Asymptotisch ($k_B T \ll E_F$) können sie als freie Fermionen mit einer effektiven Masse m^* angesehen werden.

Um die obigen Ideen quantitativ diskutieren zu können, stellen wir uns ein fermionisches System bei tiefen Temperaturen $k_B T \ll E_F$ vor. Dabei brauchen wir nur Teilchen in der Nähe der Fermi-Fläche zu betrachten. Sei ein Fermion mit Energie $\epsilon > E_F$ und Impuls \vec{k} gegeben, das mit den Fermionen unterhalb der Fermi-Energie wechselwirkt. Es wird von einem Fermion mit Energie $\epsilon' < E_F$ und Impuls \vec{k}' gestreut. Aufgrund des Pauli-Prinzips werden die Endzustände sich außerhalb der Fermi-Kugel befinden. Da bei der Wechselwirkung sowohl Energie als auch Impuls erhalten bleiben, muss gelten, dass

$$\epsilon + \epsilon' = \epsilon_1 + \epsilon'_1, \quad \vec{k} + \vec{k}' = \vec{k}_1 + \vec{k}'_1, \quad (4.80)$$

wobei $\epsilon_1, \epsilon'_1, \vec{k}_1$ und \vec{k}'_1 den Endzuständen gehören. Wir können weiterhin die Abstände zur Fermi-Energie explizit berücksichtigen:

$$\begin{aligned} \epsilon &= E_F + \delta, & \epsilon_1 &= E_F + \delta_1, \\ \epsilon' &= E_F - \delta', & \epsilon'_1 &= E_F + \delta'_1, \end{aligned} \quad (4.81)$$

mit $\delta, \delta' > 0$. Wegen Energieerhaltung gilt $\delta > \delta', \delta_1, \delta'_1$. Nun geben wir eine Abschätzung der Streurrate für ein Fermion mit Energie ϵ . Sie wird durch die zur Verfügung stehenden Anfangs- und Endzustände bestimmt:

$$\Gamma_{\vec{k}} \propto \int d^3 k' \int d^3 k_1 \int d^3 k'_1 \delta \left[\vec{k} + \vec{k}' - (\vec{k}_1 + \vec{k}'_1) \right]. \quad (4.82)$$

Die Integrale über Impulse können mit Hilfe der Zustandsdichte in Integrale über Energie umgewandelt werden. Dabei erhalten wir

$$\begin{aligned} \Gamma_{\vec{k}} &\propto \int_0^{E_F} d\epsilon' \int_{E_F}^{\infty} d\epsilon_1 \int_{E_F}^{\infty} d\epsilon'_1 \rho(\epsilon') \rho(\epsilon_1) \rho(\epsilon'_1) \delta(\epsilon + \epsilon' - \epsilon_1 - \epsilon'_1) \\ &\leq \int_{E_F}^{E_F+\delta} d\epsilon_1 \int_{E_F}^{E_F+\delta} d\epsilon'_1 \rho(\epsilon_1 + \epsilon'_1 - \epsilon) \rho(\epsilon_1) \rho(\epsilon'_1) \\ &\leq \bar{\rho}^3 \int_{E_F}^{E_F+\delta} d\epsilon_1 \int_{E_F}^{E_F+\delta} d\epsilon'_1 = \bar{\rho}^3 \delta^2, \end{aligned} \quad (4.83)$$

wobei $\bar{\rho}$ der maximale Wert von $\rho(\epsilon)$ für $E_F \leq \epsilon \leq E_F + \delta$ ist. Falls die Zustandsdichte in der Nähe von E_F endlich ist, sehen wir, dass ein Teilchen mit Energie ϵ eine Streurrate

$$\Gamma \sim (\epsilon - E_F)^2 \quad (4.84)$$

erfährt. Im Limes $\epsilon \rightarrow E_F$ verschwindet die Streurrate, so dass die Lebensdauer des Teilchens unendlich wird.

Die spezifische Wärme und die Pauli-Suszeptibilität einer Fermi-Flüssigkeit haben als einzige Größe, die von der Art des betrachteten Systems abhängt, die Zustandsdichte an der Fermi-Fläche. Die einzige Größe, die bei der Zustandsdichte an der Fermi-Energie Auskunft über das System gibt, ist die Masse der Teilchen. Somit muß die gesamte Information über das System, insbesondere über die Wechselwirkung, in einer effektiven Masse beinhaltet werden.

Das hier verwendete Phasenraum-Argument, das nur auf die Fermi-Statistik basiert, ist sehr allgemein, da die Form der Wechselwirkung nicht explizit vorkommt. Es wird lediglich angenommen, dass sie nicht divergiert. Deswegen wird dadurch verständlich, dass so viele verschiedene Systeme als Fermi-Flüssigkeit beschrieben werden können. Andererseits sehen wir, dass, um eine Abweichung einer Fermi-Flüssigkeit zu erhalten, Divergenzen eine Rolle spielen könnten. Dies ist der Fall von Fermionen in einer Dimension, wo anstatt einer Fermi-Flüssigkeit die Luttinger-Flüssigkeit den generischen Fall im niederenergetischen Bereich darstellt. Der Grund dafür ist, dass in einer räumlichen Dimension das Fermigas instabil gegenüber Modulationen mit dem Wellenvektor $2k_F$ ist. Andere Möglichkeiten für Abweichungen von einer Fermi-Flüssigkeit sind Eichfelder, die nicht abgeschirmt werden können (transversale Eichfelder). In diesem Fall wird die Wechselwirkung langreichweitig, was zu Divergenzen für kleine Impulse führen kann. Schliesslich kann auch die Nähe eines quantenkritischen Punktes, d.h. eines kontinuierlichen Phasenübergangs bei $T = 0$, durch langreichweitige Fluktuationen zum Zusammenbruch des Modells einer Fermi-Flüssigkeit führen.