Theoretische Physik V
- Quantenmechanik II (WS 2012/2013) -

Übungsblatt 1

Ausgabe 16.10.12 – Abgabe 19.10.12– Besprechung 19.10.12

▷ **Aufgabe 1 (Ideales Fermigas bei $T = 0$)**

Die folgenden Ausführungen handeln vom idealen Fermigas, und sind daher eigentlich "Bachelor-Stoff". In den nächsten Vorlesungen werden wir sie nutzen, um damit die Thomas-Fermi Theorie der Atome und der weißen Zwerge zu entwickeln, die Chandrasekhar-Masse zu bestimmen usw.

Wir betrachten ein ideales Spin-1/2 Fermigas aus N Teilchen in einem Volumen V, also etwa Leitungselektronen in einem Festkörper. Von der Coulombwechselwirkung der Elektronen untereinander wie auch mit dem Ionengitter sei zunächst abgesehen. Das System befinde sich im Grundzustand bei $T = 0$ Kelvin.

(a) Unter Annahme periodischer Randbedinungen bestätige man die Eigenwerte der Einteilchen Energie

$$\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \tag{1}$$

wo $\vec{k}$ diskrete Wellenvektoren, für periodische Randbedingungen

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{L}\vec{n}, \qquad \vec{n} \in \mathbb{Z}^3 \,. \tag{2}$$

Wie würden Sie die dazugehörigen Einteilchenorbitale notieren?

Unter der Annahme, dass der Spin energetisch keine Rolle spielt, kann nach dem Pauliprinzip jeder Impulszustand, angefangen beim Impulzustand $\hbar\vec{k} = (0, 0, 0)$ zweifach besetzt werden. Die Imulszustände liegen in einer "Impulskugel" vom Radius $p_{\mathrm{F}} := \hbar k_{\mathrm{F}}$, die sog *Fermikugel.* Der Radius dieser Kugel ergibt sich aus der Zahl der Impulszustände in der Fermikugel, die – wegen Spinentartung mit 2 multipliziert – mit der Gesamtzahl der Teilchen identifiziert wird.

(b) Zeigen Sie: Im Kontinuumlimes

$$N = 2 \sum_{\vec{k}}^{|\vec{k}| \le k_{\mathrm{F}}} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_{\mathrm{F}}^3 \tag{3}$$

und also Teilchenzahldichte

$$n \equiv N/V = \frac{k_{\mathrm{F}}^3}{3\pi^2} \,. \tag{4}$$

(c) Die Grundzustandsenergie erhält man durch Summation der Einteilchenenergien. Bestätigen Sie für den Kontinuumlimes

$$E_0 = 2 \sum_{\vec{k}}^{|\vec{k}|\leq k_{\mathrm{F}}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} = N \frac{3}{5} \varepsilon_{\mathrm{F}} \tag{5}$$

worin ε_{F} die sog *Fermi-Energie*,

$$\varepsilon_{\mathrm{F}} = \frac{\hbar^2 k_{\mathrm{F}}^2}{2m} \tag{6}$$

Bemerkenswert ist hier, dass die mittlere Energie pro Teilchen, E_0/N, von Ordnung der maximalen Einteilchenenergie ε_{F}: Ist die Teilchenzahl in einem drei-dimensionalen System nur groß genug, so dass der Kontinuumlimes gerechtfertigt ist, habe fast alle Teilchen die maximale (kinetische) Energie!

(d) Bestätigen Sie die wichtige Beziehung zwischen Fermi-Energie und Teilchendichte,

$$\varepsilon_{\mathrm{F}} = (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} n^{2/3} \,. \tag{7}$$

und eine ebenso wichtige Beziehung zwischen der räumlichen Dichte der Energie im Grundzustand – die ja reine kinetische Energie ist – und der Teilchendichte,

$$\text{Dichte der kinetischen Energie} \equiv E_0/V = \kappa n^{5/3} \,, \qquad \kappa = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{3^{5/3}\pi^{4/3}}{5} \tag{8}$$

entsprechend einem Druck

$$P_0 \equiv -\left(\frac{\partial E_0}{\partial V}\right)_N = \frac{2}{3} \frac{E_0}{V} \,. \tag{9}$$

In der Festkörperhysik ist das ideale Fermigas ein beliebter Ausgangspunkt für die Physik der Elektronen in Metallen oder Halbleitern. Die fundamentale Längenskala ist hier der Bohr'sche Radius, die fundamentale Energieskala das Rydberg. Eine Material-spezifische Längenskala vermittelt das Kugelvolumen, das jedem Leitungselektron zukommt,

$$\frac{V}{N} \equiv \frac{1}{\varrho} =: \frac{4\pi}{3} r_s^3 \,, \quad r_s = \left(\frac{3}{4\pi\varrho}\right)^{1/3} \tag{10}$$

Typische Werte von r_s/a_0 sind 2 bis 6.

(d) Bestätigen Sie

$$k_F = \frac{3.63}{r_s/a_0} \mathrm{A} \,, \qquad v_F = \frac{4.20}{r_s/a_0} \times 10^6 \mathrm{m/sec} \,, \qquad \varepsilon_F = \frac{50.1}{(r_s/a_0)^2} \mathrm{eV} \,. \tag{11}$$

Mit typischen Geschwindigkeiten entsprechend einem Prozent der Lichtgeschwindigkeit sind Elektronen dank Pauli-Verbot in Metallen zwar ziemlich schnell![1], dürfen aber getrost nicht-relativistisch behandelt werden.

[1]Und üben angesichts $P \sim 10^8$Atm einen ziemlichen Druck aus. Kompensiert wir dieser Fermidruck in Metallen durch die Coulombwechselwirkungen der beteiligten Ladungsträfger – das sind die Ionenrümpfe und die Elektronen – die hier allerdings unberücksichtigt bleiben.

Anders bei weißen Zwergen. In einem weißen Zwerg nimmt die Materie die Form eines Plasma an, bestehend aus frei beweglichen Elektronen und positiv geladenen Atomkernen, etwa zweifach geladenen Heliumkernen. Das ganze System ist im hohen Maß ladungsneutral. Auf jedes Elektron entfällt dann eine einfach positiv geladene Menge von Kernmaterie der Masse $m_\mathrm{K} = \mu m_\mathrm{N}$, worin $m_\mathrm{N} \approx 1,67 \times 10^{-27}$kg die Nukleonenmasse und $\mu = \langle A/Z \rangle$ das mittlere Verhältnis von Massezahl A zu Kernladungszahl Z, typischerweise $\mu \approx 2$. Mit n die Teilchendichte der Elektronen, und unter Vernachlässigung der Elektronenmasse $m \approx 9,109 \times 10^{-31}$kg gegenüber der Nukleonenmasse – schließlich ist $m/m_\mathrm{N} \approx 1/1836$ – ist die Massedichte gegeben

$$\varrho = \mu m_\mathrm{N} n \,, \tag{12}$$

und es verbleibt, die Elektronendichte näher zu bestimmen.

Die Elektronen bilden ein Fermigas. In der Thomas-Fermi-Theorie bestimmt der Fermiimpuls der Elektronen p_F gemäß (4) die Elektronendichte n, entsprechend

$$\varrho = \mu \frac{(mc)^3}{3\pi^2\hbar^3} m_N (p_\mathrm{F}/mc)^3 = (0.97 \times 10^6 \mathrm{g/cm^3}) \mu (p_\mathrm{F}/mc)^3 \,, \tag{13}$$

(e) Zeigen Sie: Für weiße Zwerge im nichtrelativistischen Regime gilt die Masse-Radius Beziehung

$$MR^3 = const. \tag{14}$$

Bestimmen Sie die Konstante auf der rechten Seite.

Hinweis: Gehen Sie von einer homogenen Massedichte aus. Erinnern Sie sich an die gravitative Selbstenergie der homogenen Massekugel (die Formel können Sie nach geeigneter Re-Interpretation aus der Elektrodynamik, Stichwort Selbstenergie der homogen geladenen Kugel, übernehmen), die hier die Rolle der potentiellen Energie des Systems übernimmt. Für die kinetische Energie reicht ein Blick auf Gl. (5). Damit kennen Sie die Gesamtenergie als Funktion des Sternenradius bei gegebener Gesamtmasse und können sich die Masse-Radius Beziehung über die Bestimmung des Minimums beschaffen ...

Nun ist aber die Massedichte in weißen Zwergen typischerweise eine Tonne pro cm^3, ist $p_\mathrm{F} \sim mc$, die Elektronen also relativistisch. Die entsprechende Fermienergie $\sim mc^2$ entspricht einer Temperatur von 0.5×10^{10}K, die Temperatur weißer Zwerge ist aber weit darunter: thermische Effekte für die Elektronen dürfen also getrost vernachlässigt werden. Kurz: die Elektronen im weißen Zwerg bilden ein $T = 0$ entartetes Fermigas für das relativistische Effekte nicht vernachlässigt werden dürfen.

(f) Bestimmen Sie unter Verwendung der relativistischen Energie-Impulsbeziehung die Grundzustandsenergie des idealen Fermigases (i.e. die relativistische Verallgemeinerung von Gl. (5)). Wie lautet der Ausdruck für die Gesamtenergie (Summe aus potentieller und kinetischer Energie) im ultrarelativistischen Regime?