Das Ideale Fermigas und die Thomas-Fermi Näherung
Ergänzung zu den Kursvorlesungen der theoretischen Physik

1 Ideale Fermigase

Wir betrachten ein ideales Fermigas, bestehend aus einem System von N identischen Fermionen im Potential U. Ort, Impuls und Spin des α-ten Teilchen seien bezeichnet $\vec{q}^{(\alpha)}$, $\vec{p}^{(\alpha)}$, $\vec{s}^{(\alpha)}$. Ideal soll hier bedeuten, dass der Hamiltonoperator des Systems eine Summe von identischen Einteilchenoperatoren

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=1}^{N} \hat{H}_1^{(\alpha)} , \qquad \hat{H}_1^{(\alpha)} = \frac{\hat{\vec{p}}^{(\alpha)2}}{2m} + U(\hat{\vec{q}}^{(\alpha)}, \hat{\vec{s}}^{(\alpha)}) , \tag{1}$$

die Teilchen also im klassischen Sinne nicht wechselwirken.

Die stationären Zustände des Einteilchen-Hamiltonoperators $\hat{H}_1$ zum Eigenwert ε_ν seien bezeichnet φ_ν, also $\hat{H}_1\varphi_\nu = \varepsilon_\nu\varphi_\nu$. Der Index ν steht hier für ein Quadrupel von Quantenzahlen, etwa $\nu = (n, \ell, m_\ell, m_s)$ für zentralsymmetrische Potentiale, beispielsweise das Coulombpotential.

Führt man hier Besetzungszahlen $n_\nu = 0, 1$ ein, wobei $n_\nu = 1$ bzw. $n_\nu = 0$ falls φ_ν besetzt bzw. unbesetzt lesen sich die Gesamtenergie

$$E = \sum_\nu n_\nu \varepsilon_\nu , \tag{2}$$

und die Teilchendichte[1]

$$n(x) = \sum_\nu n_\nu |\varphi_\nu(x)|^2 , \tag{3}$$

wobei die Summe aller Besetzungszahlen gleich der gesamten Teilchenzahl,

$$N = \sum_\nu n_\nu . \tag{4}$$

Da wir im Folgenden die Besetzungszahlen nicht brauchen, werden wir – in guter Tradition der Festkörperphysik – den Buchstaben n künftig mit der Teilchendichte assoziieren.[2]

Im Grundzustand des N-Teilchnsystems sind diejenigen N Einteilchenzustände besetzt für die (2) unter der Nebenbedingung (4) ein Minimum annimmt. Bildlich kann man sich vorstellen, den Grundzustand aufzubauen, indem nacheinander die energetisch niedrigst

[1] Pedanten weisen hier darauf hin, dass es sich um den Erwartungswert des Operators der Teilchendichte handelt, $\varrho(x) = \langle \sum_{\alpha=1}^{N} \delta(q^{(\alpha)} - x) \rangle$. Praktiker wissen das, und reden – um Zeit zu sparen – von der Teilchendichte.

[2] Wegen der vielen Teilchen ist Festkörperphysik im wesentlichen Kontinuumphysik; abgezählt wird da eher selten.

liegenden Einteilchenzustände aufgefüllt werden. Ordnet man die Einteilchenenergien nach wachsenden Werten, genauer $\varepsilon_\nu \leq \varepsilon_{\nu+1}$, ist die Grundzustandsenergie gegeben

$$E_0 = \sum_{\nu=0}^{N-1} \varepsilon_\nu \,. \tag{5}$$

Die Energie $\varepsilon_{\nu=N}$ nennt man auch die *Fermi-Energie* des Systems, bezeichnet ε_{F}. Die Fermi-Energie ist die Energie, die man einem anfänglich außerhalb des Systems ruhenden Teilchen mitgeben muss (oder die man gewinnt – je nach Vorzeichen von ε_{F}), um es in das System zu bringen.

Im einfachsten Falle freier Teilchen im Volumen $V = L^3$ sind die Einteilchenenergien

$$\varepsilon_{\vec{k},\sigma} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \tag{6}$$

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

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{L}\vec{n}, \qquad \vec{n} \in \mathbb{Z}^3 \,. \tag{7}$$

Entsprechende Einteilchenzustände sind ebene Wellen $\varphi_{\vec{k}\sigma}(\vec{x},\sigma') = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \delta_{\sigma\sigma'}$, worin das Kronecker-Delta $\delta_{\sigma\sigma'}$ die Spinfunktion zur Spineinstellung σ, mit $\sigma = \pm$ und $\sigma' = \pm$ für Spin-1/2 Fermionen.

Da der Spin energetisch keine Rolle spielt, kann 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 besetzten Zustände, die – wegen Spinentartung mit 2 multipliziert – mit der Gesamtzahl der Teilchen N identifiziert wird. Im Kontinuumlimes[3]

$$N \equiv 2 \sum_{\vec{k}}^{|\vec{k}|\leq k_{\mathrm{F}}} = \frac{k_{\mathrm{F}}^3}{3\pi^2} V \,, \quad \text{bzw. Teilchendichte} \quad n \equiv \frac{N}{V} = \frac{k_{\mathrm{F}}^3}{3\pi^2} \,. \tag{8}$$

Die Grundzustandsenergie erhält man durch Summation der Einteilchenenergien über die besetzten Zustände,

$$E_0 \equiv 2 \sum_{\vec{k}}^{|\vec{k}|\leq k_{\mathrm{F}}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_{\mathrm{F}}^5}{10\pi^2 m} V \,. \tag{9}$$

Eliminiert man hier k_{F} mittels (8) zugunsten N und V,

$$E_0 = \kappa \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} N \quad \text{wobei} \quad \kappa = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{3^{5/3}\pi^{4/3}}{5} \,. \tag{10}$$

Man beachte, dass κ eine Konstante, die nur von der Naturkonstanten $\hbar$ und der elementaren Fermionenmasse m abhängt.

[3] Sprich $\sum_{\vec{k}}^{|\vec{k}|\leq k_{\mathrm{F}}} f(\vec{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{|\vec{k}|\leq k_{\mathrm{F}}} f(\vec{k}) d^3k$

Druck und chemisches Potential im N-Teilchen Grundzustand sind nun schnell bestimmt,

$$P_0 \equiv -\left(\frac{\partial E_0}{\partial V}\right)_N = \frac{2}{3}\frac{E_0}{V}\,, \qquad \mu_0 \equiv \left(\frac{\partial E_0}{\partial N}\right)_V = \frac{5}{3}\frac{E_0}{N} \tag{11}$$

bzw. $\mu_0 = \frac{5}{3}\kappa\left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}$. Eliminiert man hier die Dichte N/V unter Verwendung von (8) zugunsten k_F, findet man $\mu_0 = \varepsilon_\mathrm{F}$ wo

$$\varepsilon_\mathrm{F} = \frac{\hbar^2 k_\mathrm{F}^2}{2m}\,. \tag{12}$$

die Fermi-Energie des Systems.

Die zweite Gleichung in (11) impliziert $E_0 = \frac{3}{5}N\varepsilon_\mathrm{F}$. Die mittlere Energie pro Teilchen, E_0/N ist demnach von Ordnung ε_F. Anders gesagt

$$\boxed{\text{Im idealen Fermigas haben fast alle Teilchen maximale Energie!}}$$

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 a_0, die fundamentale Energieskala das Rydberg Ry,

$$a_0 = 4\pi\epsilon_0\frac{\hbar^2}{me_0^2}\,, \qquad \mathrm{Ry} = \frac{1}{2}\frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} \approx 13.6\mathrm{eV}\,. \tag{13}$$

Eine Material-spezifische Längenskala r_0 vermittelt das Kugelvolumen, das jedem Leitungselektron zukommt,

$$\frac{V}{N} \equiv \frac{1}{n} =: \frac{4\pi}{3}r_0^3\,, \quad r_0 = \left(\frac{3}{4\pi n}\right)^{1/3} \tag{14}$$

Typische Werte von r_0/a_0 sind 2 bis 6. Charakteristische Fermi-Skalen in Metallen sind demnach

$$k_\mathrm{F} = \frac{3.63}{r_0/a_0}\mathrm{Å}^{-1}\,, \qquad v_\mathrm{F} = \frac{4.20}{r_0/a_0}\times 10^6\mathrm{m/sec}\,, \qquad \varepsilon_\mathrm{F} = \frac{50.1}{(r_0/a_0)^2}\mathrm{eV}\,. \tag{15}$$

Mit typischen Geschwindigkeiten entsprechend einem Prozent der Lichtgeschwindigkeit sind Elektronen dank Pauli-Verbot in Metallen ziemlich schnell![4]

Noch extremer die Verhältnisse in kosmischen Körpern, wie etwa weißen Zwergen oder Neutronensternen. Deren "extreme" Physik wird fast ausschließlich durch das Pauli-Verbot bestimmt – und kann in einer sog. *Thomas-Fermi Näherung* gut erfasst werden.

▷ **Aufgabe 1 (Relativistisches Fermigas)** Berechnen Sie die Grundzustandsenergie und den Druck des N-Teilchen relativistischen Spin-1/2 Fermigases im Volumen V.

[4] 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.

▷ **Lösung 1** Für relativistische Teilchen ist die die Einteilchenenergie $\varepsilon_{\vec{k}} = \sqrt{m^2c^4 + c^2\hbar^2\vec{k}^2}$. Die Grundzustandsenergie infolgedessen

$$E_0 \equiv 2\sum_{\vec{k}}^{|\vec{k}|\leq k_\mathrm{F}} \sqrt{m^2c^4 + c^2\hbar^2\vec{k}^2} = 2\cdot\frac{V}{(2\pi)^3}\cdot 4\pi\cdot mc^2\int_0^{k_\mathrm{F}}\sqrt{1+\left(\frac{\hbar k}{mc}\right)^2}k^2dk \quad (16)$$

$$= 2\cdot\frac{V}{(2\pi)^3}\cdot 4\pi\cdot mc^2\cdot\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^3 I \quad (17)$$

wo I das Integral

$$I = \int_0^\alpha \sqrt{1+x^2}x^2dx \quad (18)$$

mit $\alpha = \hbar k_\mathrm{F}/(mc)$. Mit der Substiution $x = \sinh(y/4)$, $dx = \cosh(y/4)dy/4$,

$$I = \frac{1}{4}\int_0^\beta \cosh^2(y/4)\sinh^2(y/4)dy = \frac{1}{16}\int_0^\beta \sinh^2(y/2)dy = \frac{1}{32}\left\{\sinh\beta - \beta\right\}, \quad (19)$$

ergo

$$E_0/V = mc^2\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^3\frac{1}{32\pi^2}\left\{\sinh\beta - \beta\right\} \quad (20)$$

wo β implizit gegeben

$$\alpha \equiv \frac{\hbar k_\mathrm{F}}{mc} = \sinh(\beta/4) \quad \text{bzw.} \quad \beta = 4\ln\left(\sqrt{1+\alpha^2}+\alpha\right). \quad (21)$$

---

2 Thomas-Fermi Näherung für Atome

In einem neutralen Z-Elektronen Atom tummeln sich Z negativ geladene Elektronen um einen Z-fach positiv geladenen Kern. Mit Ausnahme $Z = 1$ ist es hoffnungslos, den Grundzustand dieses komplizierten Vielteilchensystems exakt zu berechnen. Man ist auf Näherungsverfahren angewiesen

Ein solches Näherungsverfahren ist die Molekularfeldnäherung von Thomas und Fermi. In dieser Näherung wird angenommen, dass jedes Elektron ein und dasselbe zeitunabhängige, effektive Potential verspürt, das einerseits durch den Kern, andererseits durch die Verteilung der Elektronen selbst bestimmt ist. Kern und Elektronen sind Quelle eines Coulombfeldes. Für gegebene Teilchendichte $n(\vec{x})$ der Elektronen ist nach den Regeln der klassischen Elektrostatik das effektive Einteilchenpotential gegeben

$$U(\vec{x}) = -\frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{Z}{|\vec{x}|} + \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0}\int\frac{n(\vec{x}')}{|\vec{x}-\vec{x}'|}d^3x', \quad (22)$$

wobei $r = |\vec{x}|$ (der Kern ist im Ursprung des Koordinatensystems plaziert), und

$$\int n(\vec{x})d^3x = Z \quad (23)$$

aufgrund der Neutralität des Atoms.

Ist Z genügend groß, werden sich aufgrund des Pauliprinzips die meisten Elektronen in einem hochenergetischen Zustand befinden. Die De-Broglie Wellenlängen sind klein, und es darf erwartet werden dass das effektive Potential $U(\vec{x})$, in dem sich ein typisches Elektron bewegt, über viele Wellenlängen praktisch konstant ist. Greift man sich nun ein bei $\vec{x}$ zentriertes Volumenelement ΔV heraus, das einerseits so klein gewählt wurde, dass in ihm das Potential überall nahezu den Wert $U(\vec{x})$ hat, andererseits groß genug dass in ihm zu jedem Zeitunkt genügend viele Elektronen befinden, kann dieses Subsystem als ideales Fermigas behandelt werden. Der klassische Energiesatz $\varepsilon = \frac{\vec{p}^2}{2m} + U(\vec{x})$ besagt dann, dass der Fermiimpuls in diesem Volumenelement den Wert

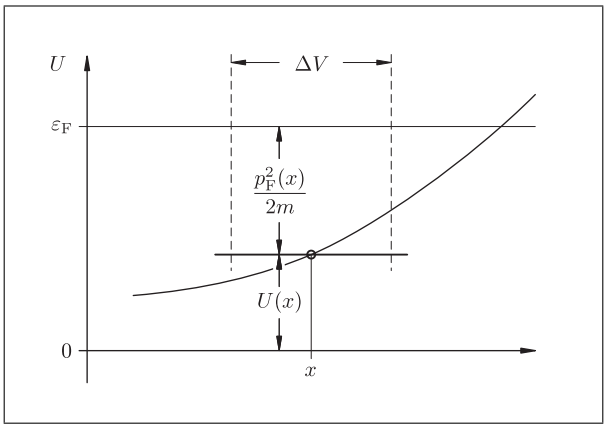

Abbildung 1: *Prinzip der Thomas-Fermi-Näherung.*

$$p_{\mathrm{F}}(\vec{x}) = \sqrt{2m\left(\varepsilon_{\mathrm{F}} - U(\vec{x})\right)} \quad \text{für } \vec{x} \text{ mit } U(\vec{x}) < \varepsilon_{\mathrm{F}} \tag{24}$$

annimmt, wobei ε_{F} die Fermienergie des Gesamtsystems. Die Einschränkung berücksichtigt, dass der Fermi-Impuls nur im Inneren des Atoms definiert ist, also in einer Region, in denen sich die Elektronen tatsächlich frei bewegen können.

Nach (8) sind die Teilchendichte und der Fermiimpuls verknüpft $n = \frac{p_{\mathrm{F}}^3}{3\pi^2\hbar^3}$, angesichts Gl. (24) also

$$n(\vec{x}) = \begin{cases} \frac{1}{3\pi^2\hbar^3}\left[2m\left(\varepsilon_{\mathrm{F}} - U(\vec{x})\right)\right]^{3/2}, & \text{für } \vec{x} \text{ mit } \varepsilon_{\mathrm{F}} - U(\vec{x}) > 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{25}$$

Die Teilchendichte ist demnach eine Funktion des effektiven Potentials, das wiederum selber eine Funktional der Teilchendichte, vgl. Gl. (22). Um das Potential bzw. die Teilchendichte zu berechnen, erweist sich der Umweg über die Poissongleichung für U als zielführend,

$$\Delta U = -\frac{e_0^2}{\varepsilon_0} n(\vec{x}) + Z\frac{e_0^2}{\varepsilon_0}\delta^{(3)}(\vec{x}), \tag{26}$$

wobei n die in (25) angegebene Funktion von U.

Im Grundzustand ist die Dichte $n(\vec{x})$ kugelsymmetrisch, lediglich eine Funktion der Radialkoordinate $r = |\vec{x}|$. Die Poissongleichung reduziert sich auf eine gewöhnliche Differentialgleichung,

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr}U(r) = -\frac{e_0^2}{3\pi^2\epsilon_0\hbar^3}\left[2m\left(\varepsilon_{\mathrm{F}} - U(r)\right)\right]^{3/2}, \qquad r > 0. \tag{27}$$

Die Randwert für $r \to 0$ und $r \to \infty$ lassen sich aus (22) ablesen. Unter der Annahmen, dass n für $r \to 0$ endlich, und dass U überall stetig differenzierbar

$$\lim_{r\to 0} rU(r) = -Z\frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0}, \qquad \lim_{r\to\infty} rU(r) = 0, \tag{28}$$

Physikalisch bringt dieser Randwerte zum Ausdruck, dass U für kleine Abstände in das Kernpotential übergeht (ein kernnahes Elektron 'sieht' vornehmlich den Kern, der je weniger durch die anderen Elektronen abgeschirmt erscheint je näher das Elektron ihm kommt)

und das das Potential wegen strikter Ladungsneutralität des Atoms im Fernfeld keinen Monopolbeitrag aufweist. Stetige Differenzierbarkeit des Potentials bedeutet im übrigen auch, dass die Verteilung der Elektronen sich nicht auf ein endliches Kugelvolumen beschränken lässt. Nimmt man nämlich gegenteilig an, dass die Elektronendichte nur in einem endlichen Kugelvolumen vom Radius R verschieden von Null, bedeutet das aufgrund der Kugelsymmetrie und Ladungsneutralität $U(r > R) = 0$, insbesondere also auch $U(R) = 0$. Trivialerweise $U'(r > R) = 0$, und mit U stetig und differenzierbar eben auch $\lim_{\epsilon\to 0_+} U'(R-\epsilon) = 0$. Die DGL impliziert dann neben $U(R) = 0$ und $U'(R) = 0$ auch $U''(R) = 0$, und das wiederum bedeutet, sofern R endlich, $U = 0$ überall, entsprechend $n = 0$ überall, womit $\int n d^3x = 0$ im Widerspruch zu (23).

Da also die Dichte $\propto [\varepsilon_{\mathrm{F}} - U(r)]^{3/2}$ im Endlichen keine Nullstelle, sondern nur für $r \to \infty$ gegen Null, ist wegen $\lim_{r\to\infty} U(r) = 0$ der Wert der Fermi-Energie

$$\varepsilon_{\mathrm{F}} = 0\,. \tag{29}$$

In geeignet skalierten Variablen

$$r = \frac{a}{Z^{1/3}} x\,, \qquad U(r) = -Z^{4/3} \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 a} \frac{\chi(x)}{x}\,, \quad a = \frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3} a_0 \approx 0.8853 a_0 \tag{30}$$

worin $a_0 = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{m e_0^2}$ der Bohr'sche Radius, wird aus (27) die *Thomas-Fermi-Gleichung*

$$\boxed{\chi'' = x^{-1/2} \chi^{3/2}} \tag{31}$$

und (28) übersetzt sich in

$$\lim_{x\to 0} \chi(x) = 1\,, \qquad \lim_{x\to\infty} \chi(x) = 0\,. \tag{32}$$

Die Lösung der TF Gleichungen (31), (32) kann nur numerisch erfolgen.[5] Die nebenstehende Abbildung zeigt das Resultat. Mittels Potenzreihenansatz erhält man für kleine x

$$\chi(x) = 1 - Ax + \frac{4}{3}x^{3/2} - \frac{2A}{5}x^{5/2} + \frac{1}{3}x^3 + \dots\,, \tag{33}$$

mit einer zunächst unbestimmten Konstanten A, die das Verhalten von $\chi(x)$ für $x \to \infty$ bestimmt. Mit der Wahl

$$A = 1.588070972\dots \tag{34}$$

genügt χ der erforderlichen Randbedingung im Unendlichen, $\lim_{x\to\infty} \chi(x) = 0$, so dass asymptotisch für große x

$$\chi(x) = \frac{144}{x^3} + \dots\,, \qquad x \to \infty\,, \tag{35}$$

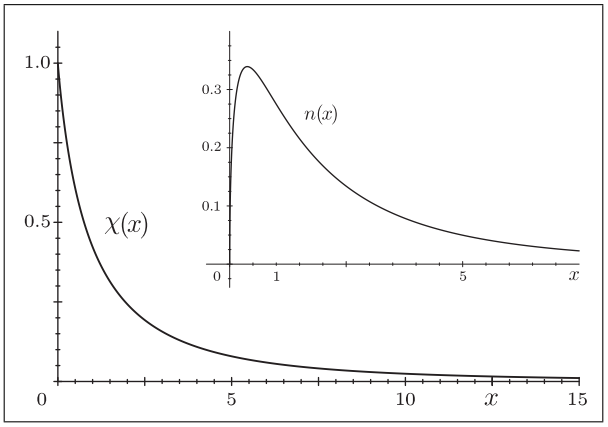

Abbildung 2: *Numerische Lösung der Thomas-Fermigleichung. Inset: Die radiale Dichte $n(x) = x^2\chi(x)$.*

[5] Tabelliert in: A. Galindo und P. Pascual, *Quantum Mechanics II* (Springer 1991), p. 274. Da die DGL bei $x = 0$ singulär muss die numerische Integration bei einen Startwert $x_1 > 0$ erfolgen – beispielsweise $x_1 = 0.1$ mit $\chi(0.1) = 0.882$ und $\chi'(0.1) = -0.9958412$ in einer Runge-Kutta mit adaptiver Schrittgöße ...

worin ... für $x \to \infty$ schneller als $1/x^3$ nach Null.

Ausgedrückt durch χ ist die Teilchendichte

$$n(r) = \frac{Z^2}{4\pi a^3}\left[\frac{a}{Z^{1/3}r}\chi\left(Z^{1/3}r/a\right)\right]^{3/2} . \tag{36}$$

Die Verteilung der Elektronen ist demnach in verschieden schweren Atomen (Atomen mit verschiedener Kernladungszahl Z) ähnlich.

Gemäß (36) geht die Elektronendichte $\propto r^{-6}$ für große Abstände in die Knie, also nicht exponentiell, wie etwa bei der Quantentheorie des Wasserstoffatoms, sondern lediglich algebraisch. Das Atom nimmt, streng genommen, keinen begrenzten Raum ein. Als Maß für seine Größe soll uns hier der Radius R_1 derjenigen um den Kern zentrierten Kugel dienen, in dem sich alle bis auf ein Elektron befinden,

$$\begin{aligned} Z-1 &\equiv 4\pi\int_0^{R_1} n(r)r^2dr && (37)\\ &= Z\int_0^{x_1}\sqrt{x}\chi(x)^{3/2} \qquad (\text{wobei } x_1 = Z^{1/3}R_1/a - \text{vgl. (30)}) && (38)\\ &= Z\left(1+x_1\chi'(x_1)-\chi(x_1)\right) . && (39)\end{aligned}$$

Für genügend große Z darf erwartet werden, dass die Lösung x_1 genügend groß, so dass für χ die Fernfeld-Asymptotik verwendet werden kann, $\chi(x_1) \approx \frac{144}{x_1^3}$. Man erhält dann $x_1 \approx (4\times 144Z)^{1/3}$ bzw.

$$R_1 \equiv \frac{x_1}{Z^{1/3}}a = 3\left(\frac{3\pi^2}{2}\right)^{1/3} a_0 \approx 7.37a_0 . \tag{40}$$

Kurz: die einfach positiv geladenen Ionenrümpfe aller schweren – d.h. hoch-Z – Atome sind nach der Thomas-Fermi Theorie ungefähr gleich groß! Allerdings sind in den Randbezirken $r \approx R_1$ nur vergleichsweise wenige Elektronen zu finden. Allein die Hälfte aller Elektronen findet sich in einer Kugel vom Radius $R_{Z/2} \approx 1.682Z^{-1/3}a_0$. Der 'harte Kern' schwerer Atoms wird also mit wachsender Masse immer kleiner!

Die räumliche Dichte der kinetischen Energie, integriert über der gesamten Raum, gibt die kinetische Gesamtenergie,

$$\begin{aligned} E_{\text{kin}} &= \kappa\int n(\vec{x})^{5/3}d^3x && (41)\\ &= \frac{16}{5\pi}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{1/3} Z^{7/3}I\ \text{Ry} && (42)\end{aligned}$$

worin $\text{Ry} = \frac{1}{2}\frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} \approx 13.6\text{eV}$ die Energieeinheit Rydberg ($-$Ry ist die Grundzustandsenergie von Wasserstoff), und

$$I = \int_0^\infty \frac{\chi(x)^{5/2}}{\sqrt{x}}dx . \tag{43}$$

In den Übungen zeigen Sie

$$I = -\frac{5}{7}\chi'(0) , \tag{44}$$

mit Blick auf (42) also

$$E_{\text{kin}} = 1.5375 Z^{7/3}\text{Ry} \tag{45}$$

Die gesamte Energie des Atoms ist $E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}}$, wo E_{pot} die potentielle Energie der Coulombwechselwirkung,

$$E_{\text{pot}} = -Z\frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0}\int \frac{n(\vec{x})}{r}d^3x + \frac{1}{2}\left(\frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\int \frac{n(\vec{x})n(\vec{x}')}{|\vec{x}-\vec{x}'|}d^3x d^3x' \,. \tag{46}$$

Der Virialsatz besagt für Coulombwechselwirkung $E_{\text{pot}} = -2E_{\text{kin}}$, daher $E = -E_{\text{kin}}$ und also

$$E = -20.8 Z^{7/3}\text{eV} \,. \tag{47}$$

Für leichte Atome vergleicht sich der Wert nur schwerlich mit dem Experiment. Für mittelschwere Atome, beispielsweise Eisen $_{26}$Fe, liefert () allerdings keine schlechte Abschätzung: $\text{E(Fe)}/Z^{7/3} = -17.3\text{eV}$. Für Atome jenseits Eisen liegen bislang keine experimentellen Daten vor (Stichjahr: 2008). Man ist auf subtilere Näherungsverfahren angewiesen. Ein selbstkonsistentes Hartree-Fock Verfahren liefert beispielsweise für Blei $_{82}$Pb den Wert $\text{E(Pb)}/Z^{7/3} = 19.0\text{eV}$, also schon ziemlich nahe am Wert der Thomas-Fermi Näherung.

▷ **Aufgabe 2** Für die Thomas-Fermi-Funktion χ berechne man das Energie-Integral $I = \int_0^\infty \frac{\chi(x)^{5/2}}{\sqrt{x}}dx$, d.h. man bestätige $I = -\frac{5}{7}\chi'(0)$.

▷ **Lösung 2** Einerseits

$$I \equiv \int_0^\infty \frac{\chi(x)^{5/2}}{\sqrt{x}}dx = \int_0^\infty \underbrace{\frac{\chi^{3/2}}{\sqrt{x}}}_{\chi''}\chi dx = \chi'\chi|_0^\infty - \int_0^\infty (\chi')^2 dx \,. \tag{48}$$

Andererseits

$$\begin{aligned} I &\equiv \int_0^\infty \frac{\chi(x)^{5/2}}{\sqrt{x}}dx = 2\int_0^\infty \chi^{5/2}(\sqrt{x})'dx && (49)\\ &= \underbrace{2\,\chi^{5/2}\sqrt{x}|_0^\infty}_{=0} - 2\int_0^\infty (\chi^{5/2})'\sqrt{x}dx = -5\int_0^\infty \underbrace{\frac{\chi^{3/2}}{\sqrt{x}}}_{\chi''}\chi' x dx && (50)\\ &= -\frac{5}{2}\int_0^\infty x\frac{d}{dx}(\chi')^2 dx = -\frac{5}{2}\,x(\chi')^2|_0^\infty + \frac{5}{2}\int_0^\infty (\chi')^2 dx \,. && (51) \end{aligned}$$

Im Vergleich von () und () also

$$\int_0^\infty (\chi')^2 dx = \frac{2}{7}\,\chi'\chi|_0^\infty \tag{52}$$

daher

$$I = \frac{5}{7}\,\chi'\chi|_0^\infty \overset{(32)}{=} -\frac{5}{7}\chi'(0) \tag{53}$$

wie behauptet.

▷ **Aufgabe 3** Zeigen Sie, dass sich die Thomas-Fermi-Gleichung auch aus einem Variationsprinzip $\delta E|_{N=Z} = 0$ mit Energiefunktional

$$E[n] = \kappa \int n(\vec{x})^{5/3} d^3x - Z\frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0}\int \frac{n(\vec{x})}{r} d^3x + \frac{1}{2}\left(\frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\int \frac{n(\vec{x})n(\vec{x}')}{|\vec{x}-\vec{x}'|} d^3x d^3x' \,. \tag{54}$$

gewinnen lässt. Welche Bedeutung haben die einzelne Terme?
Hinweis: Die Variation ist bei fester Teilchenzahl $N[n] = \int n(x) d^3x$ durchzuführen.

▷ **Lösung 3** Wird die Nebenbedingung einer festen Teilchenzahl mit einem Lagrange'schen Multiplikator λ berücksichtigt, lautet die Extremalbedingung $\delta E + \lambda \delta N = 0$ bzw.

$$\frac{5}{3}\kappa n^{2/3} \underbrace{+\frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0}\int \frac{n(\vec{x}')}{|\vec{x}-\vec{x}'|} d^3x' - \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0} Z \frac{1}{|\vec{x}|}}_{\equiv U(\vec{x})} + \lambda = 0 \tag{55}$$

Die Potentialfunktion $U(\vec{x})$ genügt der Poissongleichung $\Delta U = -\frac{e_0^2}{\epsilon_0} n(\vec{x})\,, (\vec{x} \neq \vec{o})$. Drückt man hier mit Blick auf () die Dichte durch die Potentialfunktion aus, $n \propto (-U)^{3/2}$, führt geeignete Abkürzungen ein, schaut man auf die Thomas-Fermi-Gleichung ().

---

3 Thomas-Fermi-Näherung für Weiße Zwerge

Man erinnert sich an die Newton'sche Gravitationstheorie: jede Masseverteilung $\varrho(\vec{x})$ ist Quelle eines Gravitationspotentials Φ,

$$\Phi(\vec{x}) = -G \int \frac{\varrho(\vec{x}')}{|\vec{x}-\vec{x}'|} d^3x' \,, \tag{56}$$

worin G die Gravitationskonstante, $G = 6.67(3) \times 10^{-11}\mathrm{Nm}^2\mathrm{kg}^{-2}$.

Das Gravitationspotential genügt einer Poissongleichung

$$\Delta\Phi = 4\pi G \varrho \,. \tag{57}$$

Die hier betrachteten Himmelskörper sind kugelförmig, kompakt und regulär. Das heißt die Massendichte ϱ hängt nur von $r := |\vec{x}|$ ab, ist nur in einer Kugel vom endlichen Radius R verschieden von Null, und ist dort überall endlich. In diesem Fall

$$\lim_{\vec{x}\to 0} \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|} \cdot \nabla\Phi = 0 \,, \qquad \Phi(\vec{x}) = -\frac{GM}{r} \quad \text{für } r = |\vec{x}| \geq R \tag{58}$$

worin M die Gesamtmasse des Himmelskörpers,

$$M = 4\pi \int_0^R \varrho(r) r^2 dr \,. \tag{59}$$

Die Lösung der Poissongleichung mit Randbedingungen (58) ist eindeutig, gegeben durch Gl. (56).

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

$$\varrho(\vec{x}) = \mu m_{\mathrm{N}} n(\vec{x}) \,, \tag{60}$$

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 (8) die Elektronendichte n, entsprechend

$$\varrho = \mu \frac{(mc)^3}{3\pi^2\hbar^3} m_N (p_{\mathrm{F}}/mc)^3 = (0.97 \times 10^6 \mathrm{g/cm}^3) \mu (p_{\mathrm{F}}/mc)^3 \,, \tag{61}$$

und da 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 weit darunter, d.h. thermische Effekte dürfen getrost vernachlässigt werden. Kurz: die Elektronen bilden ein $T = 0$ entartetes Fermigas.

Greift man sich nun ein bei $\vec{x}$ zentriertes Volumenelement ΔV heraus, das einerseits so klein gewählt wurde, dass in ihm das Gravitationspotential überall nahezu den festen Wert $\Phi(\vec{x})$ hat, andererseits groß genug, dass sich in ihm zu jedem Zeitunkt genügend viele Elektronen befinden (und ebensoviele in den Kernen gebundene Protonen), kann dieses Subsystem als mehrkomponentiges Gas behandelt werden. Die Gesamtenergie im Volumen ΔV setzt sich dann zusammen aus der kinetischen Energie der in ihm befindlichen Elektronen und Kerne, ihrer Coulombenergie, und der potentiellen Energie der Gravitation. Unter der Annahme, dass das System jederzeit strikt Ladungsneutral ist die Coulombenergie gleich Null. Somit verbleiben die potentielle Energie der Gravitation, die kinetischen Energien der Elektronen und die kinetische Energie der Kerne. Unter Vernachlässigung der Elektronenmasse gegenüber der Nukleonenmasse ist die gesamte potentielle Energie der Gravitation im betrachteten Volumen ΔV

$$\Delta E_{\mathrm{grav}}(\vec{x}) = \Delta N_{\mathrm{e}}(\vec{x}) \mu m_N \Phi(\vec{x}) \,, \tag{62}$$

wobei $\Delta N_{\mathrm{e}}(\vec{x})$ die Zahl der Elektronen in dem bei $\vec{x}$ zentrierten Volumen ΔV, also $\Delta N_{\mathrm{e}} = n(\vec{x}) \Delta V$.

Unter Berücksichtigung einer relativistischen Kinematik für die Elektronen, der Annahme strikter Ladungsneutralität, und bei Vernachlässigung der kinetischen Energie der Kerne,[6] lautet die Gleichgewichtsbedingung für das Sterneneninnere in der Thomas-Fermi-Näherung

$$\sqrt{p_{\mathrm{F}}^2(\vec{x})c^2 + m^2c^4} + \mu m_N \Phi(\vec{x}) = \varepsilon_{\mathrm{F}} \quad \text{ortsunabhängig für } 0 \le r = |\vec{x}| \le R \,, \tag{63}$$

[6] Selbst wenn die Kerne identische Fermionen, wäre die Fermienergie des Kernsystems $\sim (m_e c)^2/m_K$ um den Faktor $m_e/m_K \lesssim 10^{-3}$ kleiner als die Fermienergie der Elektronen.

wobei ε_{F} die Fermienergie des Gesamtsystems. Man beachte, dass die potentielle Energie die Nukleonenmasse involviert – vgl. (62). Ausserhalb des Sterns, also für $r > R$ wo $\varrho = 0$ – und auch $p_{\mathrm{F}} = 0$ – ist $\Phi(\vec{x}) = -\frac{GM}{r}$. Setigkeit am Sternenrand $r = R$ fixiert die Fermienergie,

$$\varepsilon_{\mathrm{F}} = mc^2 - \mu \frac{GMm_{\mathrm{N}}}{R} \,. \tag{64}$$

Umstellen von Gl. (63) liefert $\Phi(\vec{x}) = -\frac{mc^2}{\mu m_N}\sqrt{1 + (p_{\mathrm{F}}/mc)^2} + const.$. Für die in Gl. (61) angegebene Massedichte nimmt die Poissongleichung (57) nun die Form an

$$\Lambda_*^2 \Delta \sqrt{1 + \left(\frac{p_{\mathrm{F}}(\vec{x})}{mc}\right)^2} = -\left(\frac{p_{\mathrm{F}}(\vec{x})}{mc}\right)^3 \tag{65}$$

worin Λ_* eine Konstante der Dimension "Länge",

$$\Lambda_* = \sqrt{\frac{3\pi}{4}} \frac{1}{\mu} \frac{m_{\mathrm{Pl}}}{m_{\mathrm{N}}} \lambda\!\!\!^{-}_{\mathrm{C}} = 7.8 \times 10^8 \frac{1}{\mu} \mathrm{cm} \,. \tag{66}$$

Hier bezeichnet m_{Pl} die *Planckmasse*, $m_{\mathrm{Pl}} = \sqrt{\hbar c/G}$, und $\lambda\!\!\!^{-}_{\mathrm{C}}$ die *Comptonwellenlänge* des Elektrons, $\lambda\!\!\!^{-}_{\mathrm{C}} = \hbar/(mc)$. Abgesehen von der systemspezifischen Kompositionskonstanten μ ist die Längenskala eines weißen Zwerges ausschließlich durch Naturkonstanten bestimmt.

Die Wurzel in (65) gibt die kinetische Energie in Einheiten der Ruheenergie mc^2. Diese Energie ist maximal im Zentrum des Sterns – schließlich ist die Gravitation anziehend, daher Φ in Richtung Zentrum monoton fallend, angesichts der Gleichgewichtsbedingung (63) die kinetische Energie in Richtung Zentrum monoton wachxend. Der Maximalwert, in Einheiten der Ruheenergie mc^2

$$\eta := \sqrt{1 + \left(\frac{p_{\mathrm{F}}(0)}{mc}\right)^2} \tag{67}$$

dient im Folgenden dazu, die weißen Zwerge zu klassifizieren. Im nichtrelativistischen Regime $\eta \approx 1$ (man beachte $\eta \geq 1$), im ultrarelativistischen Regime $\eta \to \infty$.

Führt man an dieser Stelle eine Hilfsfunktion ϕ und eine dimensionslose Radialkoordinate ζ ein,

$$\phi(\zeta) := \frac{1}{\eta}\sqrt{1 + \left(\frac{p_{\mathrm{F}}(r)}{mc}\right)^2} \quad \text{wobei } \zeta := \eta r/\Lambda_* \,, \tag{68}$$

liest sich die Poissongleichung (65)

$$\frac{1}{\zeta^2}\frac{d}{d\zeta}\left(\zeta^2 \frac{d\phi}{d\zeta}\right) = \begin{cases} -\left(\phi^2 - \frac{1}{\eta^2}\right)^{3/2} & \text{für } \zeta \text{ mit } \phi > \eta^{-1} \\ 0 & \text{für } \zeta \text{ mit } \chi \leq \eta^{-1}. \end{cases} \,, \tag{69}$$

sog. *Chandrasekhar-Gleichung*. Die Randbedingungen der bei $\zeta = 0$ singulären Gleichung lassen sich aus der Defintion der Hilfsfunktion, Gl. (68), und (58) und ablesen,

$$\phi(0) = 1 \,, \qquad \frac{d\phi}{d\zeta}(0) = 0 \,. \tag{70}$$

Ausgedrückt durch die Hilfsfunktion ϕ ist die Massdichte ϱ gegeben

$$\varrho = \frac{1}{4\pi}\frac{M_*}{\Lambda_*^3}\eta^3\left(\phi^2 - \frac{1}{\eta^2}\right)^{3/2}, \tag{71}$$

worin

$$M_* = \sqrt{\frac{3\pi}{4}}\frac{m_{\mathrm{Pl}}^3}{\mu^2 m_{\mathrm{N}}^2} \tag{72}$$

die Masseskala des weißen Zwergs. Abgesehen von der Kompositionskonstanten μ ist auch die Massenskala, genau wie die Längenskala Λ_*, ausschließlich durch Naturkonstanten bestimmt.

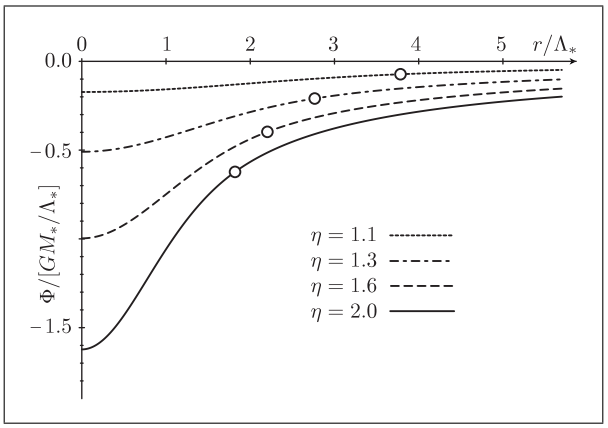

Abbildung 3: *Das Gravitationspotential eines weißen Zwerges für verschiedene Werte von η (= kinetische Energie der Elektronen im Zentrum in Einheiten der Ruheenergie).*

Die Chandrasekhar-Gleichung ist nur numerisch lösbar. Das resultierende Gravitationspotential für verschiedene Werte der Einteilchen-Zentralenergie (in Einheiten der Ruheenergie) η ist in Abb. (3) dargestellt.

Der Radius des Sterns ist durch die erste Nullstelle der Funktion $\phi^2 - \eta^{-2}$ bestimmt, d.h.

$$R = \zeta_0\Lambda_*/\eta\,, \tag{73}$$

wo ζ_0 Lösung der Gleichung $\phi(\zeta_0) = \eta^{-1}$.

Die Gesamtmasse des Sterns ergibt sich zu

$$M = 4\pi\int \varrho r^2 dr = M_*\int\left(\phi^2 - \frac{1}{\eta^2}\right)^{3/2}\zeta^2 d\zeta = \zeta_0^2|\phi'(\zeta_0)|M_* \tag{74}$$

Die Numerik zeigt, dass die Masse mit η monoton zunimmt, der Radius abnimmt. Die Masse-Radius-Beziehung ist in Abbildung 4 gezeigt. Im nicht-relativistische Regime $\eta \approx 1$

$$M^{1/3}R = 2.54828 M_*^{1/3}\Lambda \tag{75}$$

Im ultrarelativistischen Limes $\eta \to \infty$ – wenn also die kinetische Energie der Elektronen im Sternenzentrum über alle Grenzen wächst – wird aus der Chandrasekhar-Gleichung die Lane-Emden-Gleichung zum Index 3,

$$\frac{1}{\zeta^2}\frac{d}{d\zeta}\left(\zeta^2\frac{d\phi}{d\zeta}\right) + \phi^3 = 0 \tag{76}$$

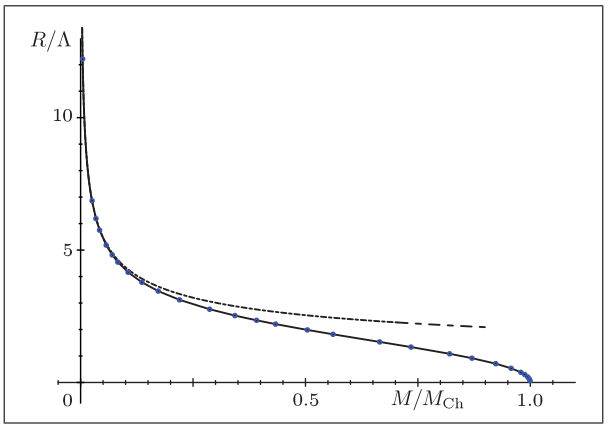

Abbildung 4: *Die Masse-Radius-Beziehung für weiße Zwerge. Gestrichelt: die Asymptote für das nichtrelativistische Regime $MR^3 = const.$.*

Die Bestimmungsgleichung für ζ_0 lautet nun $\phi(\zeta_0) = 0$, numerisch

$$\zeta_0 = 6.8968\,, \qquad \zeta_0^2|\phi'(\zeta_0)| = 2.01824\,. \tag{77}$$

Mit $\eta \to \infty$ bleibt also ζ_0 endlich, der Sternenradius schrumpft angesichts () $\lim_{\eta\to\infty} R = 0$, und die Masse erreicht den Grenzwert

$$M_{\mathrm{Ch}} = \frac{5.84}{\mu^2} M_\odot \tag{78}$$

sog. *Chandrasekhar-Masse.*

Es kann keine weißen Zwerge geben, deren Gesamtmasse die Chandrasekhar-Masse übersteigt. Der Fermidruck des Elektronengases könnte in solchen Systemen die Gravitationskräfte nicht kompensieren. Allerdings kann in solchen Systemen durch "inversen Beta-Zerfall" $p + e \to n + \nu$ letzlich ein Zustand erreicht werden, bei dem der gesamte Stern nur noch aus Neutronen besteht, und die Schwerkraft nur durch den Fermidruck des Neutronengases kompensiert wird.

4 Ergänzung: Virialsatz

Wir betrachten N Punktmassen m_i, $i = 1, \ldots, N$ die sich gemäß den Prinzipien der Newton'schen Mechanik bewegen,

$$\frac{d}{dt}\vec{p}_i = \vec{F}_i\,, \qquad \vec{v}_i \equiv \frac{d}{dt}\vec{r}_i = \frac{1}{m_i}\vec{p}_i \tag{79}$$

wo $\vec{F}_i$ die Resultierende aller auf Teilchen i einwirkenden Kräfte.

$$\frac{d}{dt}\sum_i \vec{r}_i \cdot \vec{p}_i = \sum_i \vec{v}_i \cdot \vec{p}_i + \sum_i \vec{r}_i \cdot \frac{d}{dt}\vec{p}_i = 2E_{\mathrm{kin}} + \sum_i \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i \tag{80}$$

$$\overline{E_{\mathrm{kin}}} = -\frac{1}{2}\overline{\sum_i \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i} \tag{81}$$

Im besonderen Fall des abgeschlossenen System

$$\vec{F}_i = \sum_j \vec{F}_{ij} \tag{82}$$

worin $\vec{F}_{ij}$ die durch Teilchen j auf Teilchen i ausgeübte Kraft. Gemäß Newton's "Actio gleich Reactio"

$$\vec{F}_{ij} = -\vec{F}_{ji}\,. \tag{83}$$