Moderne Theoretische Physik III (Theorie F – Statistische Mechanik) SS 17

Prof. Dr. Alexander Mirlin
PD Dr. Igor Gornyi, Janina Klier

Musterlösung: Blatt 9
Besprechung: 23.06.2017

---

1. Ideales Fermi-Gas in zwei Dimensionen: (4+12+12=28 Punkte)

Betrachten Sie ein freies Elektronengas mit der Dispersionsrelation

$$\epsilon_{\vec{p}} = \frac{|\vec{p}\,|^2}{2m} \tag{1}$$

in $D = 2$ räumlichen Dimensionen (ein solches zweidimensionales Elektronengas kann z.B. in Halbleiterstrukturen realisiert werden).

(a) Berechnen Sie die Zustandsdichte $\nu(\epsilon)$ pro Spinprojektion.

Lösung:

Hier ist es hilfreich, Polarkoordinaten zu benutzen, das Volumenelement ist dann $d^2p = d\varphi p dp$. Die Zustandsdichte ergibt sich:

$$\begin{aligned}\nu(\epsilon) &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} \frac{pdp}{(2\pi\hbar)^2}\delta\left(\epsilon - \frac{p^2}{2m}\right) = \frac{m}{\pi\hbar^2}\int_0^{\infty} dp\,p\,\delta\left(p^2 - 2m\epsilon\right) \\ &= \frac{m}{\pi\hbar^2}\,\frac{1}{2\sqrt{2m\epsilon}}\left[\int_0^{\infty} dp\,p\,\delta\left(p - \sqrt{2m\epsilon}\right)dk + \int_0^{\infty} dp\,p\,\delta\left(p + \sqrt{2m\epsilon}\right)\right] \\ &= \frac{m}{2\pi\hbar^2},\end{aligned} \tag{2}$$

wobei das zweite Integral wegfällt, da dort die Deltafunktion um ein negatives k zentriert ist und hier nur von $[0, \infty)$ integriert wird.

Wichtiges Ergebnis: Offenbar ist die Zustandsdichte in zwei Dimensionen konstant.

(b) Gegeben sei der Fermi-Impuls p_F. Berechnen Sie die Gesamtteilchenzahl N, die innere Energie U, das großkanonische Potential Ω und den Druck P des Elektronengases im Volumen V bei $T = 0$. Verwenden Sie die erhaltenen Werte von Ω, U und N und überprüfen Sie, dass diese Werte die Beziehung $\Omega = U - TS - \mu N$ erfüllen.

Lösung:

Wir betrachten ein Fermi-Gas bei $T = 0$. Aus der Vorlesung ist bekannt, dass sich die Fermi-Funktion $n_F(\epsilon) = \langle n_\lambda\rangle$ zu $n_F(\epsilon) = \theta(\mu - \epsilon)$ reduziert. Dabei ist auch bekannt, dass das chemische Potential μ des Fermi-Gases bei $T = 0$ gerade der Fermi-Energie $\epsilon_F = p_F^2/2m$ entspricht, mit dem Fermi-Impuls p_F.

In dieser Aufgabe erweist es sich als vorteilhaft, die Summen als Integrale über die Zustandsdichte auszudrücken:

$$\sum_{\vec{p}} f(\epsilon_{\vec{p}}) \to \frac{V}{(2\pi\hbar)^2}\int d^2p\, f(\epsilon_{\vec{p}}) = V\int d\epsilon\,\nu(\epsilon)\,f(\epsilon)$$

wovon man sich durch Einsetzen der Definition der Zustandssichte überzeugen kann. Die Gesamtteilchenzahl ist im großkanonischen Ensemble durch

$$
\begin{aligned}
N &= \sum_\lambda \langle n_\lambda \rangle = \sum_\lambda n_F(\epsilon_\lambda) = \sum_\sigma \sum_{\vec{p}} n_F(\epsilon_{\vec{p}}) \stackrel{T=0}{=} \sum_\sigma \sum_{\vec{p}} \theta(\epsilon_F - \epsilon_{\vec{p}}) \\
&= (2s+1) \sum_{\vec{p}} \theta(\epsilon_F - \epsilon_{\vec{p}}),
\end{aligned}
$$

gegeben, wobei wir hier auch den Spin der Fermionen berücksichtigt haben ($s = 1/2$ für Elektronen). Wir ersetzen nun $\sum_{\vec{p}}$ durch ein Integral über die Zustandsdichte:

$$
\begin{aligned}
N &= (2s+1)V \int_0^\infty d\epsilon \nu(\epsilon)\, \theta(\epsilon_F - \epsilon) \stackrel{(2)}{=} (2s+1)V \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \cdot 1 \\
&= (2s+1)V \frac{m\epsilon_F}{2\pi\hbar^2} = (2s+1)V \frac{p_F^2}{4\pi\hbar^2}.
\end{aligned}
$$

Wir berechnen die innere Energie im großkanonischen Ensemble:

$$
U = \langle E \rangle = \sum_\lambda \epsilon_\lambda W_\lambda(\epsilon_\lambda) = \sum_\lambda \frac{\epsilon_\lambda}{Z_\lambda} e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}.
$$

Mit dem bekannten Ausdruck für Z_λ ergibt das:

$$
U = \sum_\lambda \frac{\epsilon_\lambda e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}}{1 + e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}} = \sum_\lambda \frac{\epsilon_\lambda}{e^{\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} + 1} = \sum_\lambda \epsilon_\lambda n_F(\epsilon_\lambda) \stackrel{T=0}{=} \sum_\lambda \epsilon_\lambda\, \theta(\epsilon_F - \epsilon_\lambda). \tag{3}
$$

Analog zum vorigen Aufgabenteil berechnen wir diese Summe wieder als Integral über die Zustandsdichte:

$$
\begin{aligned}
U &= (2s+1)V \int_0^\infty d\epsilon\, \nu(\epsilon)\, \epsilon\, \theta(\epsilon_F - \epsilon) = (2s+1)V \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon\, \epsilon \\
&= (2s+1)V \frac{m\epsilon_F^2}{4\pi\hbar^2} = (2s+1)V \frac{p_F^4}{16m\pi\hbar^2}.
\end{aligned}
$$

Wir berechnen nun das großkanonische Potential $\Omega = -k_B T \ln(Z_G)$. Im Falle des idealen Fermi-Gases faktorisiert die Zustandssumme und man erhält:

$$
\begin{aligned}
\Omega &= -k_B T \ln\left(\prod_\lambda Z_\lambda \right) = -k_B T \sum_\lambda \ln\left(1 + e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}\right) \\
&= -(2s+1) k_B T V \int_0^\infty d\epsilon\, \nu(\epsilon)\, \ln\left(1 + e^{-\beta(\epsilon - \mu)}\right),
\end{aligned}
$$

wobei wir die Summe wieder in ein Integral umgeschrieben haben. Dieses Integral kann man nun partiell integrieren:

$$
\begin{aligned}
\Omega = &-(2s+1) k_B T V \left[\ln\left(1 + e^{-\beta(\epsilon - \mu)}\right) \int_0^\epsilon d\epsilon'\, \nu(\epsilon') \right]_0^\infty \\
&+ (2s+1) k_B T V \int_0^\infty d\epsilon\, \underbrace{\left(\int_0^\epsilon d\epsilon' \nu(\epsilon') \right)}_{\frac{m\epsilon}{2\pi\hbar^2}} (-\beta)\, \underbrace{\frac{e^{-\beta(\epsilon - \mu)}}{1 + e^{-\beta(\epsilon - \mu)}}}_{n_F(\epsilon)}.
\end{aligned} \tag{4}
$$

Der erste Summand in (4) verschwindet für $\epsilon = \infty$, da $e^{(\dots)} \to 0$ in diesem Limes. Er verschwindet auch für $\epsilon = 0$ da $\int_0^{\epsilon=0} d\epsilon' \, \nu(\epsilon') = 0$ gilt. Im Limes $T \to 0$ gilt wieder $n_F(\epsilon) = \theta(\epsilon_F - \epsilon)$ und wir erhalten:

$$\Omega = -(2s+1)V\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int_0^{\epsilon_F} d\epsilon\, \epsilon = -(2s+1)V\frac{m\epsilon_F^2}{4\pi\hbar^2} = -(2s+1)V\,\frac{p_F^4}{16m\pi\hbar^2}.$$

Hier berechnen wir den Druck des entarteten ($T = 0$) Fermigases aus der Relation

$$P = -\left.\frac{\partial\Omega}{\partial V}\right|_{T,\mu} : \qquad P(T=0) = (2s+1)\frac{p_F^4}{16\pi\hbar^2 m} = \left(\frac{\pi\hbar^2}{2s+1}\right)\left(\frac{N}{V}\right)^2.$$

Wenn man das mit dem Ergebnis für ein klassiches Gas

$$P = k_B T\frac{N}{V}$$

vergleicht, so sieht man ein völlig verschiedenes Tieftemperaturverhalten von dem des Quantengases.

Die Ergebnisse für Ω, U und N bei $T = 0$ waren:

$$\begin{aligned}
\Omega(T=0) &= -\frac{1}{16}\frac{(2s+1)V}{\pi\hbar^2}\frac{p_F^4}{m} = -\frac{1}{16}A,\\
U(T=0) &= \frac{1}{16}\frac{(2s+1)V}{\pi\hbar^2}\frac{p_F^4}{m} = \frac{1}{16}A,\\
\mu N &= \frac{1}{8}\frac{(2s+1)V}{\pi\hbar^2}\frac{p_F^4}{m} = \frac{1}{8}A,
\end{aligned}$$

wobei

$$A = \frac{(2s+1)V}{\pi\hbar^2}\frac{p_F^4}{m}.$$

Die zu überprüfende Relation

$$\Omega = U - TS - \mu N$$

gilt offensichtlich, weil

$$-\frac{1}{16} = \frac{1}{16} - \frac{1}{8}$$

und wir uns im Grenzfall $T = 0$ befinden.

(c) Betrachten Sie nun das freie Elektronengas bei tiefen Temperaturen $T \ll \epsilon_F/k_B$, wobei $\epsilon_F = p_F^2/2m$ die Fermi-Energie des Gases bezeichnet. Mit Hilfe der Sommerfeld-Entwicklung bestimmen Sie das führende Tieftemperaturverhalten des chemischen Potentials $\mu(T)$. Finden Sie dabei die innere Energie $U(T)$ und die Wärmekapazität $c_V(T)$ des Elektronengases in niedrigster nichtverschwindender Ordnung in der Temperatur.

Lösung:

Wir verwenden wie in der Vorlesung diskutiert die Sommerfeld-Entwicklung für das großkanonische Potential um das chemische Potential zu berechnen:

$$\Omega(T,V,\mu) = -(2s+1)V\int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon\, b(\epsilon)\left[n_F'(\epsilon)\right], \tag{5}$$

wobei

$$a(\epsilon) = \int_0^\epsilon d\epsilon_1 \nu(\epsilon_1) = \frac{m\epsilon}{2\pi\hbar^2}, \qquad b(\epsilon) = \int_0^\infty d\epsilon_1 a(\epsilon_1) = \frac{m\epsilon^2}{4\pi\hbar^2}.$$

Mit

$$n_F'(\epsilon) = \frac{1}{4k_B T \cosh^2\left(\frac{\epsilon-\mu}{2k_B T}\right)}$$

kann das Integral exakt berechnet werden. Mit den Relationen aus der Vorlesung lautet die Lösung

$$\Omega(T, V, \mu) = -\frac{(2s+1)Vm}{4\pi\hbar^2}\left[\mu^2 + \frac{\pi^2}{3}(k_B T)^2\right]. \tag{6}$$

Das chemische Potential in Abhängigkeit der Teilchenzahl wird mit $N = -\partial_\mu \Omega$ berechnet. Mit der Sommerfeld-Entwicklung erhält man

$$N = \frac{(2s+1)mV}{2\pi\hbar^2}\mu \qquad \Rightarrow \qquad \mu = \frac{2\pi\hbar^2}{(2s+1)m}\frac{N}{V} = \epsilon_F.$$

Die Wärmekapazität wird mit Hilfe der inneren Energie $U(T)$ berechnet. Aus Gl. (3) und (4) sieht man, dass folgende Relation gilt

$$\Omega(T) = -U(T).$$

Damit erhalten wir in der Sommerfeld-Entwicklung

$$U(T) = \frac{(2s+1)Vm}{4\pi\hbar^2}\left[\mu^2 + \frac{\pi^2}{3}(k_B T)^2\right]$$

$$\Rightarrow \qquad c_V(T) = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{(2s+1)Vm\pi}{6\hbar^2}k_B^2 T.$$

Bemerkung: Die Sommerfeld-Entwicklung ergibt nicht das Niedrigtemperaturverhalten von $\mu(T)$ für zweidimensionales Fermi-Gase, da die Zustandsdichte konstant ist, $\partial\nu(\mu)/\partial\mu = 0$, und die Korrekturen führender Ordnung nur nicht-perturbativ berechnet werden können. Dies kann mit der exakten Berechung des chemischen Potentials gezeigt werden (s. Zusatzaufgabe). Die Korrekturen in führender Ordnung ergeben sich aus $\epsilon = 0$, wenn die Integrationsgrenze in Gl. (5) nicht durch $-\infty$ ersetzt wird:

$$\mu(T) \approx \epsilon_F - k_B T \underbrace{\exp\left(-\frac{\epsilon_F}{k_B T}\right)}_{\text{nicht-perturbativ um } T=0}.$$

2. **Ultrarelativistisches Fermi-Gas:** (8+8+6=22 Punkte)

Wir betrachten ein ultrarelativistisches Elektronengas in $D = 3$ räumlichen Dimensionen. Die Energie der Teilchen soll im Folgenden als groß im Vergleich zu mc^2 angenommen werden, wobei m die Masse der Teilchen ist und c die Lichtgeschwindigkeit bezeichnet. In diesem Fall kann man die lineare Dispersionsrelation verwenden:

$$\epsilon_{\vec{p}} = c|\vec{p}|. \tag{7}$$

Bemerkung: Der Einfachheit halber ignorieren wir die thermische Aktivierung von Antiteilchen (d.h. wir betrachten nur die Zustände mit positiver Energie $\epsilon > 0$).

(a) Betrachten Sie das ultrarelativistischen Elektronengas mit dem linearen Spektrum (7) bei $T = 0$. Finden Sie den Fermi-Impuls p_F, die Fermi-Energie ϵ_F, die innere Energie des Systems U und den Druck P in Abhängigkeit von dem Volumen V und der Dichte $n = N/V$.

Lösung:

Bei $T = 0$ haben wir gerade einen gefüllten Fermi-See. Die Relation zwischen Fermi-Impuls und der Dichte ist unabhängig vom jeweiligen Spektrum. Daraus folgt durch Zählen von ein-Teilchenzuständen (der Fakor 2 resultiert vom Spin: $2s + 1 = 2$)

$$n = 2\frac{4\pi p_F^3}{3(2\pi\hbar)^3}, \qquad p_F = \hbar(3\pi^2 n)^{1/3} \tag{8}$$

Es gilt zudem $\epsilon_F = cp_F$.

Die innere Energie und der Druck $P = -\partial U/\partial V$ sind

$$U = 4\pi V \int_0^{p_F} \frac{p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} cp = \frac{cp_F^4}{8\pi^2\hbar^3} = \frac{3}{4}\left(3\pi^2\right)^{1/3} \hbar c N \left(N/V\right)^{1/3}, \tag{9}$$

$$P = U/3V. \tag{10}$$

(b) Für beliebige Temperaturen kann man die thermodynamische Größen durch Integrale über die Fermi-Funktion ausdrücken. Bestimmen Sie auf diesem Weg die innere Energie $U(T)$ und das großkanonische Potential $\Omega(T)$ (die explizite Berechnung der Integrale über die Fermi-Funktion ist nicht gefordert). Überprüfen Sie außerdem, dass $\Omega = -U/3$ gilt.

Lösung:

Für die folgenden Teilaufgaben wollen wir aus Gründen der Bequemlichkeit nun wirklich die Zustandsdichte $\nu(\epsilon)$ benutzen:

$$\nu(\epsilon) = \frac{1}{V}\sum_p \delta(\epsilon - \epsilon_p) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\delta(\epsilon - cp) = \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3}\int_0^\infty dp\, p^2\delta(\epsilon - cp)$$
$$= \frac{\epsilon^2}{2\pi^2(\hbar c)^3}. \tag{11}$$

Das großkanonische Potential ist dann durch

$$\begin{aligned}
\Omega &= -2k_BT\int_0^\infty d\epsilon\ \nu(\epsilon)\ln\left(1 + e^{-\beta(\epsilon-\mu)}\right) \\
&\overset{(11)}{=} -2k_BT\frac{1}{2\pi^2(\hbar c)^3}\int_0^\infty d\epsilon\epsilon^2\ln\left(1 + e^{-\beta(\epsilon-\mu)}\right) \\
&\overset{\text{part. Int.}}{=} -\frac{1}{\pi^2(\hbar c)^3}\int_0^\infty d\epsilon\ \frac{\epsilon^3}{3}\ \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1}
\end{aligned} \tag{12}$$

gegeben. Für die inenere Energie gilt:

$$\begin{aligned}
U &= \sum_\lambda \epsilon_\lambda f(\epsilon_\lambda) = 2\sum_p \epsilon_p\frac{1}{e^{\beta(\epsilon_p-\mu)} + 1} \\
&= 2\int_0^\infty d\epsilon\,\nu(\epsilon)\,\epsilon\frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} \overset{(11)}{=} \frac{1}{\pi^2(\hbar c)^3}\int_0^\infty d\epsilon\,\epsilon^3\frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1}.
\end{aligned} \tag{13}$$

Nun vergleichen wir Gl. (12) und Gl. (13):

$$\Omega = -U/3.$$

(c) Mit Hilfe der Sommerfeld-Entwicklung bestimmen Sie das führende Tieftemperaturverhalten der Entropie $S(T)$ des entarteten ultrarelativistischen Fermi-Gas.

Lösung:

Um das Tieftemperaturverhalten der Wärmekapazität zu bestimmen, führen wir die Sommerfeld-Entwicklung des großkanoischen Potentials Ω für unser System durch (s. Vorlesung)

$$\Omega(T,V,\mu) \simeq \Omega(T=0,V,\mu) - \frac{\pi^2}{3} V\nu(\mu)(k_BT)^2 \tag{14}$$

Die Entropie lautet

$$S(T,V,\mu) \simeq \frac{2\pi^2}{3} V\nu(\mu)k_B^2 T. \tag{15}$$

An diesem Punkt sollten wir im Prinzip das chemische Potential dieses Systems als Funktion von T, V, und N schreiben: $\mu(T,V,N)$. Allerdings bemerken wir, dass es ausreichend ist das chemische Potential $\mu(T,V,N)$ an seinem Wert für $T=0$,

$$\mu(T=0,V,N) = \epsilon_F(n),$$

zu betrachten. Die temperaturabhängigen Terme in $\mu(T,V,N)$ werden nur kleine Korrekturen zum Endresultat liefern. Die Zustandsdichte wurde in der letzten Aufgabe berechnet

$$\nu(\epsilon_F) = \frac{\epsilon_F^2}{2\pi^2(\hbar c)^3}.$$

Wir erhalten:

$$\begin{aligned} S(T,V,N) &\simeq \frac{2\pi^2}{3} V \frac{\epsilon_F^2}{2\pi^2(\hbar c)^3} k_B^2 T = \frac{1}{3(\hbar c)^3} V \underbrace{\left[c\hbar\left(3\pi^2\frac{N}{V}\right)^{1/3}\right]^2}_{\epsilon_F^2 = c^2 p_F^2} k_B^2 T \\ &= k_B\left(\pi^2 N\right)^{2/3} \frac{(3V)^{1/3}}{\hbar c} k_B T. \end{aligned} \tag{16}$$

Bemerkung: Das lineare Spektrum findet sich auch in sogenannten Weyl-Halbmetallen.

Bonusaufgabe. Elektronen in Graphen: (10 Bonuspunkte)

Betrachten Sie ein ultrarelativistisches Elektronengas mit linearen Dispersionsrelation (7) im zweidimensionalen Volumen V (wie in Aufgabe 2 ignorieren Sie die Zustände mit negativer Energie).

Zeigen Sie, dass für einen adiabatischen Prozess

$$PV^\gamma = \text{konst}, \quad PT^\delta = \text{konst}$$

gilt, wobei P der Druck des Gases bezeichnet und T die Temperatur ist. Bestimmen Sie die Exponenten γ und δ.

Hinweis: Die Bestimmung dieser Exponenten erfordert keine explizite Berechnung von Integralen über die Fermi-Funktion.

Lösung:

Hierzu verwenden wir das großkanonische Potential (Faktor 2 wegen Spin)

$$\Omega = -2k_BT \sum_{\vec{p}} \ln\left(1 + e^{-\beta(\epsilon_{\vec{p}}-\mu)}\right) = -2k_BT \frac{V}{(2\pi\hbar)^2} \int d^2p \ln\left(1 + e^{-\beta(\epsilon_{\vec{p}}-\mu)}\right)$$
$$= -k_BT \frac{4\pi V}{(2\pi\hbar)^2 c^2} \int_0^\infty d\epsilon\epsilon \ln\left(1 + e^{-\beta(\epsilon-\mu)}\right) = \frac{V}{\beta^3} f\left(\beta\mu\right), \tag{17}$$

wobei

$$f\left(y\right) = -\frac{1}{\pi\hbar^2 c^2} \int_0^\infty dx x \ln\left(1 - e^{-x+y}\right). \tag{18}$$

Die Entropie berechnet sich zu

$$S = -\frac{\partial\Omega}{\partial T} = k_B\beta^2 \frac{\partial\Omega}{\partial\beta} = -\frac{3k_BV}{\beta^2} f\left(\beta\mu\right) + \frac{k_BV\mu}{\beta} f'\left(\beta\mu\right) = k_B \frac{V}{\beta^2}\, g\left(\beta\mu\right), \tag{19}$$

mit

$$g(y) = -3f\left(y\right) + yf'\left(y\right). \tag{20}$$

Die Teilchenzahl lässt sich ebenfalls über Ω bestimmen:

$$N = -\frac{\partial\Omega}{\partial\mu} = \frac{V}{\beta^2} f'\left(\beta\mu\right). \tag{21}$$

Da ein adiabatischer Prozess ($S = \text{konst.}$ und $N = \text{konst.}$) betrachtet wird, ergibt sich

$$\frac{S}{N} = k_B \frac{g\left(\beta\mu\right)}{f'\left(\beta\mu\right)} = \text{konst.}, \tag{22}$$

und somit

$$\beta\mu = \text{konst.} \tag{23}$$

Es folgt dann aus Gl. (21):

$$\frac{N}{VT^2} = \text{konst} \quad \Rightarrow \quad VT^2 = \text{konst.} \tag{24}$$

Des Weiteren gilt

$$\Omega = -PV = T^3V \underbrace{k_B^3 f\left(\beta\mu\right)}_{\text{konst.}} \quad \Rightarrow \quad \frac{P}{T^3} = \text{konst.} \tag{25}$$

Somit ist

$$P \propto T^3 \propto V^{-3/2} \quad \Rightarrow \quad PV^{3/2} = \text{konst.} \tag{26}$$

Die gesuchten Exponenten sind also durch

$$\gamma = \frac{3}{2}, \quad \delta = -3 \tag{27}$$

gegeben.