

Universität Bielefeld Fakultät für Physik	Theoretische Physik III WS 2007/2008	Prof. Dr. Jürgen Schnack jschnack@uni-bielefeld.de
--	---	---

Aufgabenblatt 12

12.1 Mittlere Besetzungszahl des Einteilchenzustandes

- Geben Sie die Formel für die mittlere Besetzungszahl \bar{n} des Einteilchenzustandes für ideale Fermionen an und erläutern Sie die auftretenden Größen.
- Bestimmen Sie die Energie ε , bei der $\bar{n}(\varepsilon)$ einen Wendepunkt hat.
- Begründen Sie, warum $\mu(T = 0) = \varepsilon_F$.

12.2 Zweidimensionales Fermigas

Betrachten Sie analog zur Vorlesung ein zweidimensionales Fermigas aus Fermionen mit einem Spin $s = 1/2$. Die Einheitszelle des Systems habe die Abmessungen $L \times L$, die Eigenzustände sollen periodische Randbedingungen am Rand der Zelle erfüllen.

- Geben Sie den Hamiltonoperator des Systems sowie seine Eigenwerte und Eigenvektoren an.
- Skizzieren Sie in einem zweidimensionalen Koordinatensystem die erlaubten \vec{k} -Quantenzahlen und begründen Sie, warum die im Grundzustand besetzten \vec{k} -Quantenzahlen für große N in guter Näherung eine Kreisfläche bilden.
- Berechnen Sie ε_F als Funktion der Dichte $\rho = N/L^2$.
- Berechnen Sie die Einteilchenzustandsdichte $g(\varepsilon)$.
- Zusatzaufgabe:** Berechnen Sie das chemische Potential, die innere Energie und die Wärmekapazität bis zur quadratischen Ordnung in T (analog zur Vorlesung).

12.3 Wiensches Verschiebungsgesetz

Leiten Sie das Wiensche Verschiebungsgesetz aus der spektralen Energiedichte (Plancksche Strahlungsformel) her.

12.4 Pauli-Paramagnetismus

Studieren Sie die Ausführungen zum Pauli-Paramagnetismus aus W. Greiner, *Theoretische Physik*, Band 9, die im Anhang als Kopie vorliegen.

- a. Leiten Sie Gleichung 13 aus Gleichung 12 ab.
- b. Weshalb ist die Suszeptibilität paramagnetischer Metalle kaum temperaturabhängig?
- c. **Zusatzaufgabe:** Aus welcher Auflage des Buches ist die Kopie entnommen?

14.6 Beispiel: Pauli-Paramagnetismus

In diesem Beispiel soll die Suszeptibilität eines idealen Fermi-Gases von N Elektronen (Elektronengas in Metallen) mit dem magnetischen Moment $d_z = \gamma \mu_B m$, $m = \pm \frac{1}{2}$, $\gamma = 2$, für niedrige Temperaturen ($kT \ll \epsilon_f$) in einem äußeren Magnetfeld berechnet werden. Wir schreiben hier \vec{d} für das magnetische Moment, um Verwechslungen mit dem chemischen Potential μ zu vermeiden, $\mu_B = e\hbar/(2mc)$ ist das Bohrsche Magneton. Dabei sind wir hauptsächlich an den Abweichungen des paramagnetischen Verhaltens vom klassischen Maxwell-Boltzmann-Limes (siehe Abschnitt "Paramagnetismus", Kapitel 8) interessiert.

Um die Rechnung so einfach wie möglich zu gestalten, sei der Einfluß des äußeren Magnetfeldes auf die Wellenfunktionen der Elektronen vernachlässigt (siehe nächstes Beispiel). Dann ändert sich lediglich die Energie der freien Elektronen

$$\epsilon = \frac{\vec{p}^2}{2m} - d_z B, \quad 1$$

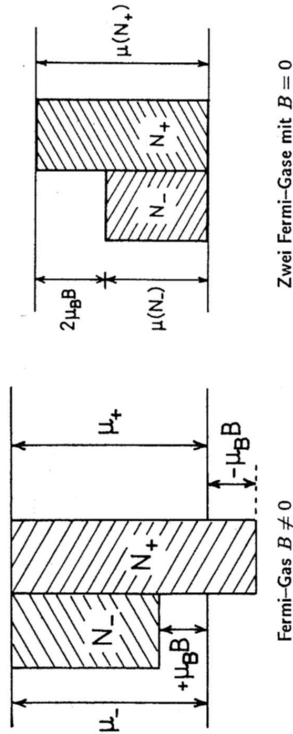
wenn das Magnetfeld in z -Richtung gelegt wird. Ist der Spin des Elektrons parallel zum Magnetfeld ($m = +\frac{1}{2}$), so ergibt sich eine Absenkung der Energie um $\mu_B B$, für antiparallele Einstellung ($m = -\frac{1}{2}$) eine Anhebung um $\mu_B B$. Dadurch wird die Entartung der Energiezustände mit verschiedener Spinprojektion im feldfreien Fall aufgehoben. Wir können das System als eine ideale Mischung zweier Fermi-Gase mit $d_z = +\mu_B$ und $d_z = -\mu_B$ auffassen, wobei N_+ Elektronen mit $m = +\frac{1}{2}$ und N_- mit $m = -\frac{1}{2}$ vorhanden sein mögen ($N_+ + N_- = N$). Diese beiden Gase können in einem gewissen Sinn chemisch miteinander reagieren. Es kann nämlich der Spin eines Elektrons umkippen, was einer Reaktionsgleichung

$$\epsilon_+ \rightleftharpoons \epsilon_- + \Delta E \quad 2$$

entspricht, wenn $\Delta E = 2\mu_B B$ die hierfür benötigte bzw. abgegebene Energie ist. Daraus ergibt sich nun nach (10), Kapitel 3 eine Bedingung an die chemischen Potentiale μ_+ und μ_- der beiden Gase, die von der jeweiligen Teilchenzahl N_+ und N_- (sowie von T und V) abhängen:

$$\mu_+(N_+) = \mu_-(N_-). \quad 3$$

Andererseits sind die beiden Gase bis auf die Energieverschiebung mit dem idealen Fermi-Gas vom Anfang des Kapitels identisch (Entartung ist jetzt $g = 1$, da das Magnetfeld die Spinartung der Elektronen aufhebt). Die chemischen Potentiale μ_{\pm} können daher durch das chemische Potential μ eines feldfreien Fermi-Gases ausgedrückt werden:



Zwei Fermi-Gase mit $B = 0$

Fermi-Gas $B \neq 0$

$$\begin{aligned} \mu_+(N_+) &= \mu(N_+) - \mu_B B, \\ \mu_-(N_-) &= \mu(N_-) + \mu_B B, \end{aligned} \quad 4$$

da lediglich die Energieskala der beiden Gase um $\pm\mu_B B$ verschoben ist. Die Bedingung 3 läßt sich deshalb durch eine Bedingung an die chemischen Potentiale zweier feldfreier Fermi-Gase (mit Entartungsfaktor $g = 1$ und Teilchenzahl N_+, N_-) ausdrücken,

$$\mu(N_+) - \mu(N_-) = 2\mu_B B. \quad 5$$

Der Vorteil dieser Uminterpretation (Figur 1 \rightarrow Figur 2) liegt darin, daß uns die chemischen Potentiale im feldfreien Fall schon bekannt sind. Sie müssen aus der allgemeinen Gleichung ($g = 1$)

$$f_{3/2}(z) = \frac{N}{V} \lambda^3 \quad 6$$

bestimmt werden, mit $z = \exp\{\beta\mu\}$, was die Funktionen $\mu(N_+)$, $\mu(N_-)$ liefert, wenn für N_+ bzw. N_- eingesetzt wird. Nun ist $\mu_B = 0.578 \cdot 10^{-8} \text{ eV Gauß}^{-1}$, und die magnetische Energie $\mu_B B$ ist daher auch für starke Magnetfelder (einige 10000 Gauß oder einige Tesla) klein gegen die Fermi-Energie eines realistischen Elektronengases in Metallen (einige eV). Entsprechend den Figuren werden die Zahlen N_+ und N_- deshalb nur wenig verschieden von $N/2$ im feldfreien Fall sein. Wir setzen also

$$N_+ = \frac{N}{2}(1 + \tau), \quad N_- = \frac{N}{2}(1 - \tau) \quad 7$$

und fassen τ als einen kleinen Parameter auf, nach dem die chemischen Potentiale $\mu(N_+)$ und $\mu(N_-)$ entwickelt werden können. Damit wird aus der Bedingung 5 durch Entwicklung nach τ

$$\mu \left(\frac{N}{2} (1+r) \right) - \mu \left(\frac{N}{2} (1-r) \right) \approx \frac{\partial \mu(Nx)}{\partial x} \Big|_{x=\frac{1}{2}} r = 2\mu_B B. \quad 8$$

Aus dieser Gleichung ist nun der Bruchteil r zu bestimmen, woraus sofort die Teilchenzahlen N_+ , N_- folgen. Es ist klar, daß es sich hier nur um mittlere Teilchenzahlen handelt, da durch die dauernden Spin-flip Prozesse im Wärmebad die aktuellen Teilchenzahlen schwanken.

Das totale mittlere magnetische Moment erhält man aus

$$(D_x) = \mu_B (N_+ - N_-) = \mu_B N r = \frac{2\mu_B B N}{\mu \left(\frac{N}{2} \right) N}, \quad 9$$

da

$$\frac{\partial \mu(Nx)}{\partial x} \Big|_{x=\frac{1}{2}} = \mu \left(\frac{N}{2} \right) \frac{\partial \mu(Nx)}{\partial x} = \mu \left(\frac{N}{2} \right) N. \quad 10$$

Die mittleren magnetischen Momente in x - und y -Richtung verschwinden natürlich. Aus 9 ergibt sich die Suszeptibilität

$$\chi = \lim_{B \rightarrow 0} \frac{\partial (D_x)}{\partial B} = \frac{2\mu_B^2 N}{\mu \left(\frac{N}{2} \right) N} = \frac{2\mu_B^2}{\mu \left(\frac{N}{2} \right)}. \quad 11$$

Es ist jetzt also nur noch $\mu(N/2)$ zu bestimmen. Dies ist allerdings leider nur für die Grenzfälle $kT \gg \epsilon_f$ (klassischer Grenzfall) und $kT \ll \epsilon_f$ analytisch möglich. Für $T \rightarrow \infty$ dürfen wir die Näherung $f_{3/2}(z) \approx z - z^2/2^{3/2} + \dots$ verwenden. In erster bzw. zweiter Näherung wird dann

$$z \approx \frac{N}{V} \lambda^3 \quad \text{bzw.} \quad z \approx \frac{N}{V} \lambda^3 \left(1 + \frac{N \lambda^3}{V} \right) \quad \text{für} \quad kT \gg \epsilon_f. \quad 12$$

Löst man dies nach $\mu(N)$ auf und ersetzt N durch Nx , so kann die Ableitung 10 berechnet werden,

$$\mu \left(\frac{N}{2} \right) N = 2kT \left(1 + \frac{N \lambda^3}{V} \right) \quad \text{für} \quad kT \gg \epsilon_f. \quad 13$$

Die Suszeptibilität hat damit die Form

$$\chi \approx \chi_{\infty} \left(1 - \frac{n \lambda^3}{2^{5/2}} \right) \quad \text{mit} \quad \chi_{\infty} = \frac{\mu_B^2 N}{kT} \quad \text{für} \quad kT \gg \epsilon_f, \quad 14$$

wobei $n = N/V$ ist. Der Wert von χ_{∞} entspricht genau der Formel (41), Kapitel 8 für $j = \frac{1}{2}$ (Curie-Gesetz), die wir dort mit der klassischen Maxwell-Boltzmann-Statistik abgeleitet hatten. Für $kT \ll \epsilon_f$ erhalten wir mit Hilfe von (46)

$$\mu(N) \approx \epsilon_f(N) \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\epsilon_f(N)} \right)^2 \right), \quad \epsilon_f(N) = \left(\frac{3}{4\pi} \frac{N}{V} \right)^{2/3} \frac{h^2}{2m}. \quad 15$$

Zur Berechnung der Fermi-Energie ist hier $g = 1$ zu setzen, da wir $\epsilon_f(N)$ für die nichtentarteten Teilsysteme (N_+ , N_-) benötigen. Um die Ableitung 10 zu berechnen, berücksichtigen wir

$$\frac{\partial \epsilon_f(Nx)}{\partial x} \Big|_{x=\frac{1}{2}} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{3}{4\pi} \frac{Nx}{V} \right)^{2/3} \frac{h^2}{2m} \Big|_{x=\frac{1}{2}} = \frac{4}{3} \epsilon_f \left(\frac{N}{2} \right), \quad 16$$

so daß

$$\begin{aligned} \mu \left(\frac{N}{2} \right) N &= \frac{\partial}{\partial x} \mu(Nx) \Big|_{x=\frac{1}{2}} \\ &\approx \frac{4}{3} \epsilon_f \left(\frac{N}{2} \right) \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\epsilon_f \left(\frac{N}{2} \right)} \right)^2 \right) + \frac{8}{3} \epsilon_f \left(\frac{N}{2} \right) \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\epsilon_f \left(\frac{N}{2} \right)} \right)^2 \\ &\approx \frac{4}{3} \epsilon_f \left(\frac{N}{2} \right) \left(1 + \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\epsilon_f \left(\frac{N}{2} \right)} \right)^2 \right). \end{aligned} \quad 17$$

Nun ist die Fermi-Energie $\epsilon_f(N/2)$ eines Fermi-Gases mit $g = 1$ gerade die Fermi-Energie des realen Systems mit N Teilchen im feldfreien Fall ($g = 2$), wegen

$$\epsilon_f \left(\frac{N}{2} \right) = \left(\frac{3}{4\pi} \frac{N}{2V} \right)^{2/3} \frac{h^2}{2m} = \left(\frac{3}{4\pi} \frac{N}{gV} \right)^{2/3} \frac{h^2}{2m} \quad \text{mit} \quad g = 2. \quad 18$$

Wir dürfen $\epsilon_f(N/2)$ also mit der Fermi-Energie des ganzen Systems im feldfreien Fall identifizieren. Setzt man 17 in die Suszeptibilität 11 ein, so folgt

$$\chi \approx \frac{3}{2} \frac{\mu_B^2 N}{\epsilon_f} \left(1 + \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\epsilon_f} \right)^2 \right)^{-1} \approx \chi_0 \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\epsilon_f} \right)^2 \right) \quad \text{für} \quad kT \ll \epsilon_f. \quad 19$$

χ_0 ist die Suszeptibilität im Grenzfall $T = 0$,

$$\chi_0 = \frac{3}{2} \frac{\mu_B^2 N}{\epsilon_f} \quad \text{für} \quad T = 0. \quad 20$$

Das paramagnetische Verhalten eines Fermi-Gases von Elektronen ist für hohe Temperaturen bzw. kleine Fermi-Energien durch das Curie-Gesetz gegeben (klass. Grenzfall). Für Elektronen des Leitungsbandes in Metallen ist dies aber wegen $kT \ll \epsilon_f$ nicht richtig. Für diese trifft 19 bzw. 20 zu, weshalb die Suszeptibilität paramagnetischer Metalle kaum temperaturabhängig ist. Es war Pauli, der um 1927 erkannte, daß die Temperaturabhängigkeit der Suszeptibilität der paramagnetischen Alkalimetalle auf die Entartung des Elektronengases dieser Substanzen zurückzuführen ist.

Dagegen ist die klassische Näherung mit dem Curie-Gesetz für viele paramagnetische Nichtmetalle gut zu gebrauchen, wenn deren Atome halbzahligen Gesamtspin haben. Die Fermi-Energie von Atomen mit halbzahligen Gesamtspin liegt nämlich wegen ihrer größeren Masse (bei gleicher Teilchendichte) sehr viel niedriger als die von Elektronen, und die klassische Näherung $kT \gg \epsilon_f$ trifft dann zu.