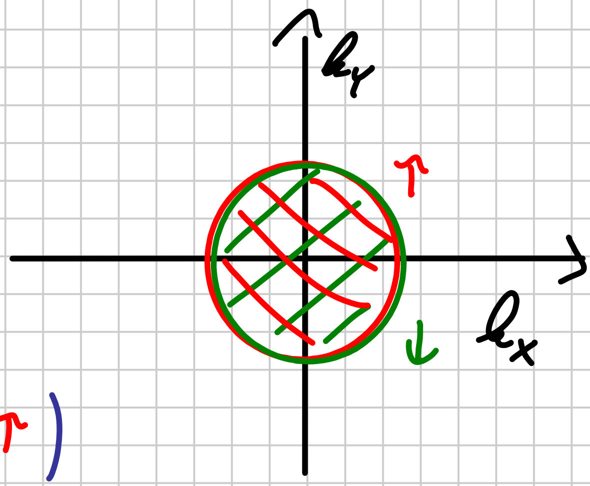
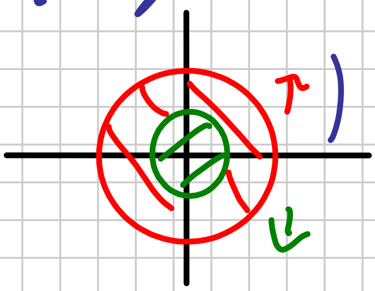
3.8.5 Nicht-wechselwirkende Fermionen bei tiefen Temperaturen: Sommerfeld-Entwicklung

Pauli-Prinzip: Im Grundzustand besetzen Spin-S-Fermionen die $\frac{N}{2S+1}$ niedrigsten Ortsraum-Eigenzustände (jeweils $(2S+1)$-fach, in Abwesenheit von Magnetfeldern).

Beispiel: freie Elektronen in 2 Dimensionen



(Mit Zeeman-Aufspaltung im Magnetfeld:



)

Bei endlichen Temperaturen weicht die Fermi-Funktion $f_F(\varepsilon) = [e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1]^{-1}$ die Grenze zwischen besetzten und unbesetzten Zuständen auf.

Quantitativ: am besten über Zustandsdichte $\nu(\varepsilon)$; Ergebnisse gelten dann für freie Fermionen und auch für nicht-ww Elektronen im Kristallgitter (hier für Teilchen- und Energiedichte):

$$\rho = \frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}\alpha} \langle n_{\vec{k}\alpha} \rangle = (2S+1)\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \ \nu(\varepsilon)\, f_F(\varepsilon)$$

$$u = \frac{U}{V} = \frac{\langle H \rangle}{V} = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}\alpha} \varepsilon_{\vec{k}} \langle n_{\vec{k}\alpha} \rangle = (2S+1)\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \ \varepsilon\, \nu(\varepsilon)\, f_F(\varepsilon)$$

Allgemein: $\langle g \rangle = (2S+1)\int d\varepsilon \ g(\varepsilon)\, f_F(\varepsilon)$

Fermienergie: maximal besetzte Energie im Grundzustand, entspricht Tieftemperaturlimes des chemischen Potentials: $\varepsilon_F = \varepsilon_{\vec{k}_F} = \mu(T=0)$

Für $T=0$: $n_F(\varepsilon) \longrightarrow \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon)$

$$\langle g \rangle/(2S+1) \longrightarrow \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \ g(\varepsilon)$$

Sommerfeld-Entwicklung: nutze Symmetrie und asymptotisches Verhalten der Fermi-Funktion für $T\to 0$ für die Tieftemperaturentwicklung von $\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \ g(\varepsilon)\, f_F(\varepsilon)$:

Definition: $G(\varepsilon) \equiv \int_{-\infty}^{\varepsilon} d\varepsilon' g(\varepsilon')$ Stammfunktion (muss existieren!)

Mit Hilfe einer partiellen Integration und Taylor-Entwicklung von G finden wir:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \, g(\varepsilon) f_F(\varepsilon) \overset{P.I.}{=} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \, G(\varepsilon) \left[-\frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon}(\varepsilon) \right]$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\varepsilon-\mu)^n}{n!} G^{(n)}(\mu) \right] \left(-\frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon} \right)$$

n-te Ableitung von G

Summand für $n=0$: $\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon} \right) = f_F(-\infty) - f(\infty) = 1 - 0 = 1$

Substitution: $x = \beta(\varepsilon - \mu) \Rightarrow dx = \beta d\varepsilon$

$$\rightsquigarrow I = G(\mu) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\beta^{-n}}{n!} G^{(n)}(\mu) \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \, x^n \frac{\beta}{(e^x+1)(e^{-x}+1)}$$

symmetrisch in x

$$= G(\mu) + \sum_{n=1}^{\infty} a_n G^{(2n)}(\mu) (k_B T)^{2n}$$

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \, g(\varepsilon) f_F(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\mu} d\varepsilon \, g(\varepsilon) + \sum_{n=1}^{\infty} a_n g^{(2n-1)}(\mu) (k_B T)^{2n}}$$

Dabei gilt für die Sommerfeld-Koeffizienten

$$a_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x^{2n}}{(2n)!} \left[-\frac{d}{dx} \frac{1}{e^x+1} \right] = 2 \int_0^{\infty} dx \ldots$$

$$\overset{P.I.}{=} 2 \int_0^{\infty} dx \frac{x^{2n-1}}{(2n-1)!} \frac{1}{e^x+1} = 2 \int_0^{\infty} dx \frac{x^{2n-1}}{(2n-1)!} \frac{e^{-x}}{e^{-x}+1}$$

geom. Reihe

$$= 2 \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m-1} \int_0^{\infty} dx \, \frac{x^{2n-1}}{(2n-1)!} \, e^{-mx}$$

$$= 2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m-1}}{m^{2n}} \frac{1}{(2n-1)!} \underbrace{\int_0^{\infty} dt \, t^{2n-1} e^{-t}}$$

$t = mx \Rightarrow dt = m\,dx$

Definition der Gamma-Funktion $\Gamma(z) = \int_0^{\infty} dt \, t^{z-1} e^{-t}$

$$= 2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m-1}}{m^{2n}} \underbrace{\frac{\Gamma(2n)}{(2n-1)!}}_{=1}$$

$$= 2 \left[\sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^{2n}} - 2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{(2m)^{2n}} \right]$$

$$= 2 \left[1 - 2^{1-2n} \right] \underbrace{\sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^{2n}}}$$

Definition der Zeta-Funktion $\zeta(z) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^z}$

$$= 2 \left(1 - 2^{1-2n} \right) \zeta(2n)$$

Funktionswerte: $\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}$, $\zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}$; $\zeta(n) \xrightarrow{n \to \infty} 1$

$$\rightsquigarrow a_1 = 2\left(1 - \tfrac{1}{2}\right) \zeta(2) = \zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}$$

$$a_2 = 2\left(1 - \tfrac{1}{8}\right) \zeta(4) = \tfrac{7}{4} \zeta(4) = \frac{7\pi^4}{360}$$

$$a_n \xrightarrow{n \to \infty} 2$$

Achtung: Die Entwicklung ist um $\mu = \mu(T)$, für eine volle Tieftemperaturentwicklung bei fester Dichte bzw. Teilchenzahl muss μ mit entwickelt werden:

$$\mu(T) = \varepsilon_F + b_2 (k_B T)^2 + b_4 (k_B T)^4 + \mathcal{O}(T^6)$$

Dabei ergeben sich die Koeffizienten aus der Selbstkonsistenzbedingung $n(T) \overset{!}{=} n(0) = \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, \nu(\varepsilon)$

In allen Sommerfeld-Entwicklungen ist dabei um ε_F zu entwickeln, z.B.

$$n(T) = \int_{-\infty}^{\mu} d\varepsilon\, \nu(\varepsilon) + \sum_{n=1}^{\infty} a_n\, \nu^{(2n-1)}(\mu)\, (k_B T)^2$$

$$\nu(\varepsilon) = \nu(\varepsilon_F) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_F)^n}{n!} \nu^{(n)}(\varepsilon_F)$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\mu} d\varepsilon\, \nu(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\varepsilon\, \nu(\varepsilon) + \int_{\varepsilon_F}^{\mu} d\varepsilon\, \nu(\varepsilon)$$

$$= n(T=0) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\mu - \varepsilon_F)^{n+1}}{(n+1)!} \nu^{(n)}(\varepsilon_F)$$

Trick: die Ergebnisse der Sommerfeld-Entwicklung für $n(T)$ lassen sich mit $\nu(\varepsilon) \to \tilde{\nu}(\varepsilon) = \varepsilon\, \nu(\varepsilon)$ auf die Entwicklung für $u(T)$ übertragen. // 21.12.2010