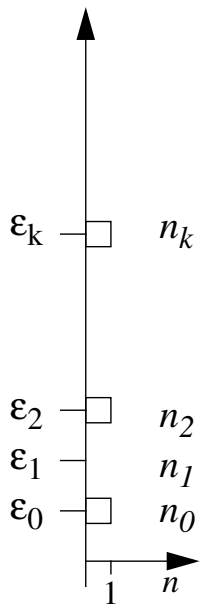
VIII. Fermi-Dirac-statistik

VIII.1. Fermi-Dirac fördelningen

Vi betraktar ett idealgassystem av partiklar så beskaffade att varje kvanttillstånd högst kan ockuperas av en enda partikel (exklusionprincipen). Sådana partiklar kallas Fermi- partiklar eller fermioner. Alla partiklar vars impulsmomentkvanttal antar halva heltalsvärden är fermioner.

Viktiga exempel är elektroner, protoner, neutroner.



Betrakta det subsystem som bildas av partiklarna i det k:te kvanttillståndet med energin ϵ_k.

Sannolikheten för att detta delsystem innehåller n_k (= 0,1) partiklar är då

$$P_{n_k} = e^{(\Omega_k + \mu n_k - n_k \epsilon_k)/k_B T} \tag{1}$$

Summan över alla sannolikheter är givetvis 1, så

$$\sum_{n_k} P_{n_k} = 1 \Rightarrow 1 = e^{\Omega/k_B T} \left\{ 1 + e^{(\mu - \epsilon_k)/k_B T} \right\} \tag{2}$$

där vi använt oss av det faktum att då $n_k = 0, 1$ kan man lätt skriva ut all termer i summan!

Alltså fås vidare

$$\Omega_k = -k_B T \ln \left\{ 1 + e^{(\mu - \epsilon_k)/k_B T} \right\} \tag{3}$$

Den kemiska potentialen kan vara positiv eller negativ (i motsats till Bose-Einstein distributionen där den ju måste vara negativ).

Medelockupationen är

$$< n_k >= -\frac{\partial \Omega_k}{\partial \mu} = k_B T \frac{1}{1 + e^{(\mu - \epsilon_k)/k_B T}} e^{(\mu - \epsilon_k)/k_B T} \frac{1}{k_B T} \tag{4}$$

$$= \frac{1}{e^{(\epsilon_k - \mu)/k_B T} + 1} \tag{5}$$

$$\boxed{n_k = \frac{1}{e^{(\epsilon_k - \mu)/k_B T} + 1}} \tag{6}$$

Detta är **Fermi-Dirac-fördelningsfunktionen!**

Gränsfallet $< n_k >< < 1$ motsvarar $e^{(\mu - \epsilon_k)/k_B T} >> 1$ och

$$n_k \simeq e^{(\mu - \epsilon_k)/k_B T} \tag{7}$$

vilket är Boltzmann-fördelningen (som väntat)

Tillståndsekvationen ges som vanligt av

$$\Omega = \sum_k \Omega_k = -k_B T \sum_k \ln \left[1 + e^{(\mu - \epsilon_k)/k_B T} \right] \tag{8}$$

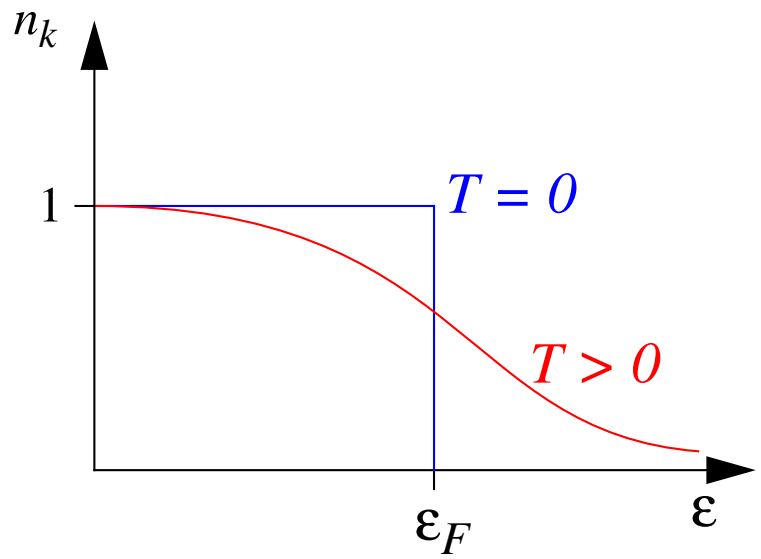
$$N = \sum n_k = \sum_k \frac{1}{e^{(\epsilon_k - \mu)/k_B T} + 1} \tag{9}$$

Vid $T = 0$ är $e^{(\epsilon_k - \mu)/k_B T} = \begin{cases} e^{-\infty} = 0, \ \epsilon_k < \mu \\ e^{+\infty} = \infty, \ \epsilon_k > \mu \end{cases}$

eller alltså

$$n_k = \begin{cases} 1 & \epsilon_k < \mu \\ 0 & \epsilon_k > \mu \end{cases} \tag{10}$$

Detta betyder att distributionen har vid $T = 0$ resp. högre temperatur följande form:



Detta betyder att vid $T = 0$ är alla nivåer under μ är fyllda

Fermigaser med $T \approx 0$ kallas degenererade Fermigaser.

P.g.a. den centrala rollen av kemiska potentialen vid $T = 0$ kallas

$$\boxed{\mu(T = 0) \equiv \epsilon_F = \textbf{Fermi-energin}} \tag{11}$$

VIII.1.1. Fermi-idealgaser

Vi beräknar nu Fermi-idealgasers egenskaper

$$\Omega = -k_B T \sum_k \ln\left(1 + e^{(\mu-\epsilon_k)/k_B T}\right) \tag{12}$$

Vi gör igen (jämför kapitlena på Boltzmann- och Bose-Einstein-gasen) ersättningen

$$\sum_k =\rightarrow \int \frac{d^3 r d^3 p}{h^3} = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \underbrace{\int d^3 r}_{V} \tag{13}$$

$$= \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d\Omega p^2 dp \tag{14}$$

Byte av integrationsvariabel:

$$\epsilon = \frac{p^2}{2m} \rightarrow d\epsilon = \frac{p dp}{m} \tag{15}$$

$$p = \sqrt{2m\epsilon} \tag{16}$$

ger

$$\Omega = -k_B T \frac{V}{8\pi^3\hbar^3} 4\pi\sqrt{2}m\sqrt{m} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{1/2} \ln\left[1 + e^{(\mu-\epsilon)/k_B T}\right] \tag{17}$$

$$\Omega = -\frac{V k_B T m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{1/2} \ln\left[1 + e^{(\mu-\epsilon)/k_B T}\right] \tag{18}$$

Om partiklarnas impulsmomentkvanttal eller spinn är S bör uttrycket multipliceras med degenerationsfaktorn g = (2S + 1)

För elektroner, neutroner och protoner är S = 1/2 och alltså $g = 2$.

Vi använder igen fugacitetsparametern $z = e^{\mu/k_B T}$:

$$\Omega = -g \frac{V k_B T m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \underbrace{\int d\epsilon \epsilon^{1/2} \ln\left[1 + z e^{-\epsilon/k_B T}\right]}_{\equiv I_1} \tag{19}$$

Då

$$\epsilon^{1/2} = \frac{d}{d\epsilon}\frac{2}{3}\epsilon^{3/2} \tag{20}$$

fås med kedjeregeln för integrering

$$I_1 = \underbrace{\Big/_0^\infty \frac{2}{3}\epsilon^{3/2} \ln\left[1 + ze^{-\epsilon/k_BT}\right]}_{=0} \tag{21}$$

$$\underbrace{-\frac{2}{3}\int d\epsilon \epsilon^{3/2} \frac{1}{1 + ze^{-\epsilon/k_BT}} ze^{-\epsilon/k_BT} \frac{(-)}{k_BT}}_{\frac{+2}{3k_BT}\int d\epsilon\epsilon^{3/2} \underbrace{\frac{ze^{-\epsilon/k_BT}}{1 + ze^{-\epsilon/k_BT}}}_{\equiv\mathcal{A}}} \tag{22}$$

Nu ser vi att termen $\mathcal{A}$ är summan av en geometrisk serie:

$$\mathcal{A} = \sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}(ze^{-\epsilon/k_BT})^n = \sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}z^n e^{-n\epsilon/k_BT} \tag{23}$$

Så man får att hela uttrycket är

$$I_1 = \frac{2}{3k_BT}\sum_{n=1}^{\infty}(-)^{n+1}z^n \underbrace{\int_0^{\infty} d\epsilon \epsilon^{3/2} e^{-n\epsilon/k_BT}}_{\equiv\mathcal{B}} \tag{24}$$

Med variabelbytet

$$\epsilon = x^2 \Rightarrow d\epsilon = 2xdx \Rightarrow \epsilon^{3/2} = x^3 \tag{25}$$

kan man skriva integralen

$$\mathcal{B} = 2\int_0^{\infty} dx x^4 e^{-nx^2/k_BT} \tag{26}$$

Vi beräknar integralen med det följande bekanta tricket

$$I_2 = \int dx x^4 e^{-\alpha x^2} = \frac{d^2}{d\alpha^2}\underbrace{\int_0^{\infty} dx e^{-\alpha x^2}}_{\frac{\sqrt{\pi}}{2}\alpha^{-1/2}} \tag{27}$$

och med att derivera två gånger med avseende på α fås

$$I_2 = \frac{3\sqrt{\pi}}{8}\frac{1}{\alpha^{5/2}} \tag{28}$$

Med att sammansätta resultaten för I_1, I_2 och $\mathcal{B}$ fås

$$\Omega = -g\frac{Vk_BTm^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}\frac{2}{3k_BT}\frac{3\sqrt{\pi}}{4}(k_BT)^{5/2}\sum_{n=1}^{\infty}(-)^{n+1}\frac{z^n}{n^{5/2}} \tag{29}$$

$$= -gV(k_BT)n_c\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}\frac{z^n}{n^{5/2}}, \tag{30}$$

där vi igen definierat (denna definition är identisk med den för Bose-Einstein-systemet):

$$n_c \equiv (\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2})^{3/2} \tag{31}$$

Om vi vidare definierar serieutvecklingen som en funktion av exponenten på n:

$$f_S(z) \equiv \sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}\frac{z^n}{n^s} \tag{32}$$

kan resultatet sammanfattas i den funktionellt enkla formen

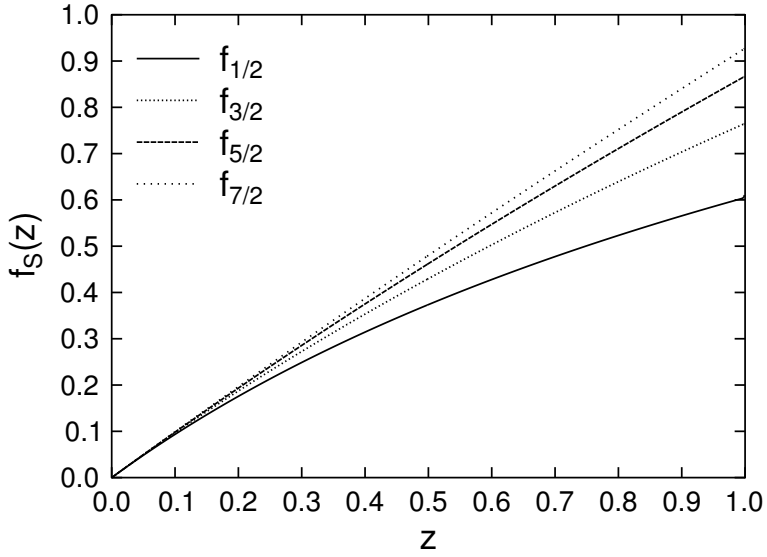
$$\boxed{\Omega = -gV(k_BT)n_cf_{5/2}(z)} \tag{33}$$

där alltså allt beroende på z är i funktionen f

Funktionen f_S kan lätt beräknas med ett datorprogram. (notera att om $z > 1$ divergerar den uppenbart):

```
awk 'BEGIN { for(z=0;z<=1;z+=0.001) { \
s=0; \
for(n=1;n<100;n++) s+=(-1)^(n+1)*z^n/(n^1.5); \
print z,s; \
} \
exit;  }' > f3over2_100.dat
```

vilket ger



(Orsaken att mindre värden på S ger mindre f_S är helt enkelt att termen $n = 2$ drar neråt summan och resten av det kan inte kompensera).

Det totala partikeltalet:

$$N = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = -\frac{\partial \Omega}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial \mu}, \tag{34}$$

Då

$$z = e^{\mu/k_B T}, \tag{35}$$

är

$$\frac{\partial z}{\partial \mu} = \frac{1}{k_B T} z; \tag{36}$$

Den andra delen vi behöver är

$$\frac{\partial f_{5/2}(z)}{\partial z} = \sum_{n=1}^{\infty} (-)^{n+1} \frac{z^{n-1}}{n^{3/2}} \frac{1}{k_B T} z \tag{37}$$

så man får

$$N = +gV(k_B T) n_c \sum_{n=1}^{\infty} (-)^{n+1} \frac{z^{n-1}}{n^{3/2}} \frac{1}{k_B T} z \tag{38}$$

och därmed

$$\begin{cases} N = gV n_c f_{3/2}(z) \\ \Omega = -PV = -gV n_c (k_B T) f_{5/2}(z) \end{cases} \tag{39}$$

vilket är tillståndsekvationen!

Boltzmannstatistiken återfås om $\mu << 0$ och därmed $z << 1$:

Vi ser vad som händer då

$$z \longrightarrow 0 : \tag{40}$$

Då faller termerna i summan på f_S mycket snabbt med ökande n, och kvar blir bara termen $n = 1$:

$$f_{5/2}(z \longrightarrow 0) \simeq (-1)^2 \frac{z^1}{1^{5/2}} \tag{41}$$

$$f_{3/2}(z \longrightarrow 0) \simeq (-1)^2 \frac{z^1}{1^{3/2}} \tag{42}$$

Alltså gäller att

$$\frac{f_{5/2}}{f_{3/2}} \rightarrow 1 \text{ då } z \longrightarrow 0 \tag{43}$$

Om man dividerar ekvationen för N med ekvationen för Ω i ekvationerna 39 ser man alltså att man får

$$\text{Tillståndsekvationen} \rightarrow \frac{PV}{N} \simeq k_B T \text{ då } z \longrightarrow 0 \tag{44}$$

vilket ju är den klassiska idealgaslagen!

VIII.1.2. Den inre energin:

Vi beräknar nu FD-gasens inre energi

$$E = \sum_k \epsilon_k < n_k > \tag{45}$$

$$\simeq g \frac{VTm^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^2} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{3/2} \frac{1}{\frac{1}{z}e^{\epsilon/k_BT} + 1} \tag{46}$$

Detta är samma integral som uppträder i uttrycket för Ω, $\mathcal{B}$, och dess resultat kan skrivas som

$$\mathcal{B} = \frac{3}{2}\frac{\sqrt{\pi}}{2}(k_BT)^{5/2} f_{5/2}(z) \tag{47}$$

så vi får

$$E = \frac{3}{2} g n_c V k_B T f_{5/2}(z) \tag{48}$$

Jämförelse av detta med uttrycket för Ω visar att

$$PV = \frac{2}{3}E \tag{49}$$

vilket vi ju tidigare sett gälla också för en klassiskt Maxwell-Boltzmann-idealgas och Bose-Einstein-idealgasen. Alltså gäller

$$\boxed{E = \frac{3}{2}PV} \tag{50}$$

för alla tre huvudtyper av idealgaser: MB, BE och FD!

VIII.1.3. Tillståndsekvationen vid höga temperaturer:

Vi beräknar nu tillståndsekvationen då T är stor, d.v.s. fugaciteten $z = e^{\mu/k_BT}$ kring 1.

$$N = gVn_c f_{3/2}(z) = gVn_c \left[z - \frac{z^2}{2^{3/2}} + \cdots \right] \tag{51}$$

$$PV = gVn_c(k_BT) f_{5/2}(z) = gVn_c(k_BT) \left[z - \frac{z^2}{2^{5/2}} + \cdots \right] \tag{52}$$

Vi introducerar hjälpvariabeln

$$\lambda \equiv \frac{N}{gVn_c} = \frac{n}{gn_c} = f_{3/2}(z) = z - \frac{z^2}{2^{3/2}} + \cdots \tag{53}$$

För att lösa detta med avseende på z skriver vi

$$z = \alpha_1 \lambda + \alpha_2 \lambda^2 \tag{54}$$

och sätter in detta i uttrycket för λ, behållande termer högst av ordningen λ^2:

$$\lambda = \alpha_1 \lambda + \alpha_2 \lambda^2 - \frac{\alpha_1^2 \lambda^2}{2\sqrt{2}} \tag{55}$$

För att detta skall gälla bör vi ha

$$\alpha_1 = 1 \text{ samt } \alpha_2 = \frac{1}{2\sqrt{2}}; \tag{56}$$

så

$$z = \lambda + \frac{1}{2\sqrt{2}} \lambda^2 \tag{57}$$

Tillståndsekvationen

$$PV = gVn_c(k_B T) \left[z - \frac{z^2}{4\sqrt{2}} \right] \tag{58}$$

blir nu alltså till andra ordningen

$$= gVn_c(k_B T) \left[\lambda + \frac{1}{2\sqrt{2}} \lambda^2 - \frac{\lambda^2}{4\sqrt{2}} \right] \tag{59}$$

och med insättning av $\lambda = n/gn_c$:

$$= gVn_c(k_BT)\frac{n}{gn_c}\left[1 + \frac{1}{4\sqrt{2}}\frac{1}{g}(\frac{n}{n_c}) + ...\right] \tag{60}$$

$$= gV(k_BT)\frac{N}{gV}\left[1 + \frac{1}{4\sqrt{2}}\frac{1}{g}(\frac{n}{n_c}) + ...\right] \tag{61}$$

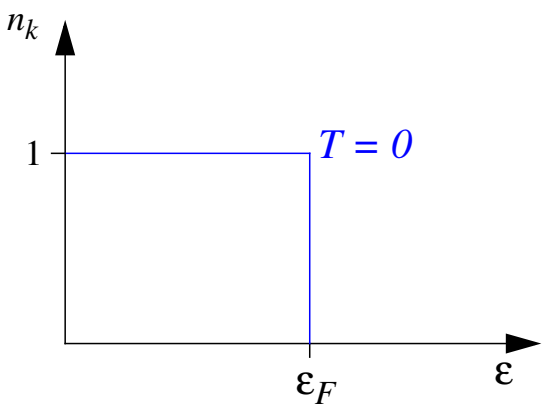
eller alltså

$$PV = Nk_BT\left[1 + \frac{1}{4\sqrt{2}}\frac{1}{g}(\frac{n}{n_c}) + ...\right] \tag{62}$$

Alltså är trycket i en Fermigas större än i en idealgas pga. exklusionsprincipen!

Detta är motsatt resultat till det som erhölls för Bose-Einstein-gasen, men ett mycket naturligt resultat då man inte kan sätta många fermioner i samma tillstånd (och vice versa för bosoner!)

VIII.2. Degenererade Fermisystem



Vi betraktar nu i mer detalj det degenererade Fermisystemet:

$$n_k = \begin{cases} 1 & \epsilon_k < \epsilon_F \\ 0 & \epsilon_k > \epsilon_F \end{cases} \tag{63}$$

Vi byter än en gång summan till en integral:

$$\sum_k \longrightarrow \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \underbrace{\int d\Omega}_{4\pi} \underbrace{p^2 dp}_{\sqrt{2m\epsilon}\, m d\epsilon} \tag{64}$$

Men den avgörande skillanden är nu den att i alla integraler över n_k räcker det med att integrerar till Fermi-energin ϵ_F!

Alltså är t.ex.

$$N = \sum_k n_k = g\frac{4\pi V\sqrt{2m}m}{(2\pi\hbar)^3}\underbrace{\int_0^{\epsilon_F} d\epsilon\epsilon^{1/2}}_{\frac{2}{3}\epsilon_F^{3/2}} \tag{65}$$

$$N = \frac{V}{3}\frac{m^{3/2}\sqrt{2}\epsilon_F^{3/2}}{\pi^2\hbar^3}g \tag{66}$$

Detta binder fast värdet på ϵ_F om partikeltätheten $n = N/V$ är känt, och man får:

$$\boxed{\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{m}n^{2/3}\left(\frac{3\pi^2}{g\sqrt{2}}\right)^{2/3}} \tag{67}$$

Detta ger också villkoret för när ett fermionsystem är praktiskt taget degenerarat, eller **termodynamiskt kallt:**

$$\epsilon_F >> k_B T \tag{68}$$

Nu kan man också definiera flera relaterade storheter:

Fermi-temperaturen:

$$T_F = \frac{\epsilon_F}{k_B} \tag{69}$$

Fermi-impulsen (rörelsemängden)

$$p_F = \sqrt{2m\epsilon_F} \tag{70}$$

$$= \hbar n^{1/3}\sqrt{2}(\frac{3\pi^2}{\sqrt{2}g})^{1/3} \tag{71}$$

Som funktion av denna kan man skriva

$$n = (\frac{p_F}{\hbar})^3 \frac{\sqrt{2}g}{3\pi^2}\frac{1}{2\sqrt{2}} = \frac{g}{6\pi^2}(\frac{p_F}{\hbar})^3 \tag{72}$$

Fermi-hastigheten definieras logiskt av

$$v_F = p_F/m \tag{73}$$

VIII.2.1. Exempel på kalla Fermionsystem

VIII.2.1.1. Elektrongasen i metaller:

För elektroner är som sagt $g = 2$. Lednings-elektrondensiteten i metaller kan uppskattas som att varje atom avger av storleksordningen 1 elektron till den ledande elektrongasen (för alkalimetaller stämmer detta med god noggrannhet, transitionsmetaller avger i själva verket några fler).

Atomernas storlek ges av storleksordningen på atomradien 1 Å. Alltså fås

$$n_{el} \sim n_{jon} \sim n_{at} \sim \frac{1}{4\pi 1\ \text{Å}^3/3} \sim 0.2\text{Å}^{-3} \sim 0.2 \times 10^{30}\text{m}^{-3} \tag{74}$$

Insättning av detta och $g = 2$ i ekvationen för ϵ_F ger

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{m_e} n^{2/3} (\frac{3\pi^2}{2\sqrt{2}})^{2/3} \sim 12 \text{ eV} \tag{75}$$

och motsvarande Fermitemperatur

$$T_F \approx 140000 \text{ K} \tag{76}$$

Jämförelse av detta med rumstemperatur

$$300 \text{ K} \approx \frac{1}{40} \text{ eV} \tag{77}$$

visar att elektrongasen i metaller är extremt kall vid rumstemperatur!

Jämförelse av detta med typiska smälttemperaturer på metaller 2000 K $\approx$ 0.2 eV visar att elektrongasen i metaller är mycket kall i fasta metaller vid alla temperaturer!!

Detta är den första stora orsaken varför FD-distributionen är så viktig i fasta ämnens fysik: ledningselektronerna beter sig helt enligt Fermistatistik vid nästan degenerarat tillstånd, som ju totalt avviker från den klassiska Boltzmann-statistiken!

Här är ännu en tabell på några verkliga värden på ϵ_F:

Metall	ϵ_F (eV)
Li	4.7
Na	3.1
K	2.1
Cu	7.0
Ag	5.5
Au	5.5

Vår enkla uppskattning var alltså ung. en faktor 2 för stor, men detta förändrar inte den kvalitativa slutsatsen.

VIII.2.1.2. Kärnmaterie

Nukleonerna (protoner och neutroner) är av storleksordning 1 fm så

$$n \sim \frac{1}{4\pi 1 \text{ fm}^3/3} \sim 0.2\text{fm}^{-3} \sim 0.2 \times 10^{45}\text{m}^{-3} \tag{78}$$

och deras massa är ung. 1 u så:

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{u} n^{2/3} (\frac{3\pi^2}{2\sqrt{2}})^{2/3} \sim 68 \text{ MeV} \tag{79}$$

och motsvarande Fermitemperatur

$$T_F \approx 7.9 \times 10^{11} \text{ K} \tag{80}$$

Alltså är kärnmaterian helt otroligt termodynamiskt kall vid rumstemperatur. Alla nukleoner är garanterat i grundtillståndet.

Kärnmaterien blir exciterad (varm) först vid $T \sim \epsilon_F \sim$ 70 MeV.

Detta är faktiskt en riktigt bra uppskattning: det ger en första förklaring till varför kärnexcitationsenergier typiskt är av ordningen MeV. För att verkligen hetta upp kärnor krävs högenergetiska ($>>$ MeV) partikelacceleratorer.

VIII.2.1.3. Vita dvärgstjärnor

Vita dvärgstjärnor består huvudsakligen av He atomer.

För vita dvärgar gäller typiskt (experimentella obsevationer):

$$M_{exp} \sim 2M_{\odot}; \quad M_{\odot} = 2 \cdot 10^{30}\text{kg} \tag{81}$$

$$\rho \sim 10^{7}\text{g/cm}^{3} \tag{82}$$

$$T \sim 10^{7} K \tag{83}$$

Att temperaturen är så hög innebär att alla He-atomer är joniserade:

$$10^{7}\text{K} \sim 10^{3}\text{eV} >> 10\text{eV} = \quad \text{He} - \text{atomens jonisationsenergi.} \tag{84}$$

Så man inser att vita dvärgar består av He-kärnor och elektroner i ett plasma.

För elektronsystemet gäller då (vi approximerar att He-kärnans massa är $4u$):

$$n_{el} = \frac{N}{V} = \frac{2M/4u}{M/\rho} = \frac{\rho}{2u} \tag{85}$$

$$\sim \frac{10^7 \text{ g/cm}^3}{2 \cdot 1.7 \cdot 10^{-24} \text{ g}} \sim 3 \cdot 10^6 \text{ Å}^{-3} \tag{86}$$

och därmed

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{m}(\frac{3\pi^2}{2\sqrt{2}}n)^{2/3} \sim 0.8 \text{ MeV} >> 1 \text{ keV} \tag{87}$$

Alltså är vita dvärgars temperatur ungefär 10 miljoner grader Kelvin, men de är ändå termodynamiskt kalla!

VIII.2.2. Den inre energin hos att degenererat fermisystem

[Landau-Lifshitz 57]

Vi räknar nu inre energin för den degenererade Fermigasen. Integralen behöver givetvis bara göras till ϵ_F:

$$E = U = \sum n_k \epsilon_k \tag{88}$$

$$\simeq \frac{V m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \int_0^{\epsilon_F} \underbrace{d\epsilon \sqrt{\epsilon} \epsilon g}_{\frac{2}{5} g \epsilon_F^{5/2}} \tag{89}$$

$$\Longrightarrow E = \frac{\sqrt{2}}{5} \frac{V m^{3/2} g}{\pi^2 \hbar^3} \epsilon_F^{5/2} \tag{90}$$

Jämförelse med det tidigare resultatet, ekvation 66

$$N = \frac{V}{3} \frac{\sqrt{2} m^{3/2} g}{\pi^2 \hbar^3} \epsilon_F^{3/2} \tag{91}$$

Jämförelse av dessa två ekvationer visar att:

$$\boxed{\frac{E}{N} = \frac{3}{5}\epsilon_F} \tag{92}$$

vilket ger energin per fermion!

VIII.2.3. Tillståndsekvationen vid T = 0

Nu har vid den märkbara förenklingen att

$$E = F \quad (T = 0) \tag{93}$$

så

$$P = -\frac{\partial F}{\partial V} = -\frac{\partial E}{\partial V} \tag{94}$$

Med hjälp av resultatet för E/N (ekv. 92) får man

$$P = -\frac{3}{5}N\frac{\partial \epsilon_F}{\partial V} = -\frac{3}{5}N(\frac{\partial \epsilon_F}{\partial n})\frac{dn}{dV} \tag{95}$$

Då

$$n = \frac{N}{V} \Longrightarrow \frac{dn}{dV} = -\frac{N}{V^2} \tag{96}$$

Så man får för trycket

$$P = +\frac{3}{5}n^2(\frac{\partial \epsilon_F}{\partial n}) \tag{97}$$

Då

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{m}(\frac{3\pi^2}{g\sqrt{2}})^{2/3}n^{2/3} \Longrightarrow \frac{\partial \epsilon_F}{\partial n} = \frac{2}{3}\frac{\epsilon_F}{n} \tag{98}$$

så trycket blir

$$P = \frac{3}{5}n^2\frac{2}{3}\frac{\epsilon_F}{n} = \frac{2}{5}n\epsilon_F \tag{99}$$

och genom att skriva ut ϵ_F

$$P = \frac{2\hbar^2}{5m}n^{5/3}(\frac{3\pi^2}{g\sqrt{2}})^{2/3} \tag{100}$$

Då

$$n = \frac{\rho}{m} \tag{101}$$

ser man att

$$P \propto \rho^{5/3} \Longleftrightarrow P \propto V^{-5/3} \tag{102}$$

Vi kan nu använda oss av detta för att räkna ut ljudets hastighet i en degenererad Fermigas.

Ljudets hastighet c kan skrivas som

$$c = \frac{1}{\sqrt{\rho\kappa_S}}, \quad \kappa_S = -\frac{1}{V}(\frac{\partial V}{\partial P})_S \tag{103}$$

där κ_S är den isentropiska kompressibiliteten.

Vid $T = 0$ är $\kappa_S = \kappa_T$

Vu räknar nu

$$\kappa_S = -\frac{1}{V}(\frac{\partial V}{\partial P}) = -\frac{1}{V}\frac{1}{(\frac{\partial P}{\partial V})} \tag{104}$$

$$P \propto V^{-5/3} \Longrightarrow \frac{\partial P}{\partial V} = -\frac{5}{3}\frac{P}{V} \tag{105}$$

så

$$\kappa_S = -\frac{1}{V}(-\frac{3}{5})\frac{V}{P} = \frac{3}{5P} \tag{106}$$

$$c = \frac{1}{\sqrt{\rho\frac{3}{5P}}} = \sqrt{\frac{5}{3}\frac{P}{\rho}} \propto \rho^{1/3} \tag{107}$$

Då $\rho = mn$ kan man skriva ut detta som

$$c = \frac{1}{\sqrt{mn\frac{3}{5} \cdot \frac{5m}{2\hbar^2}n^{-5/3}(\frac{g\sqrt{2}}{3\pi^2})^{2/3}}} = \frac{\hbar}{m\sqrt{\frac{3}{2}n^{-2/3}(\frac{g\sqrt{2}}{3\pi^2})^{2/3}}} \tag{108}$$

Om man tillämpar detta på en elektrongas i metaller (jämför vårt tidigare estimat) får man

$$P = \frac{2}{5} n \epsilon_F = 0.4 \times 0.2 \cdot 10^{30} \times 12 eV = 1.5 \times 10^{11} \text{Pa} \tag{109}$$

Kompressibiliteten blir

$$\kappa_S = \frac{3}{5 \times 1.5 \times 10^{11} \text{Pa}} = 4 \times 10^{-12} \tag{110}$$

och därmed bulkmodulen

$$B = \frac{1}{\kappa_S} = 2.5 \times 10^{11} \text{Pa} \tag{111}$$

Ljudets hastighet:

$$c = \frac{\hbar}{m_e \sqrt{\frac{3}{2}(0.2 \times 10^{30})^{-2/3} (\frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2})^{2/3}}} \approx 1.2 \times 10^6 \text{m/s} \tag{112}$$

Vad betyder dessa värden? Kompressibiliteten är helt vettig, verkliga metallers bulkmoduler är typiskt av storleksordningen 2.5×10^{11} Pa. Detta är faktiskt en av de viktiga komponenterna för kompressibliteten i metaller! [Ashcroft-Mermin kap. 2]

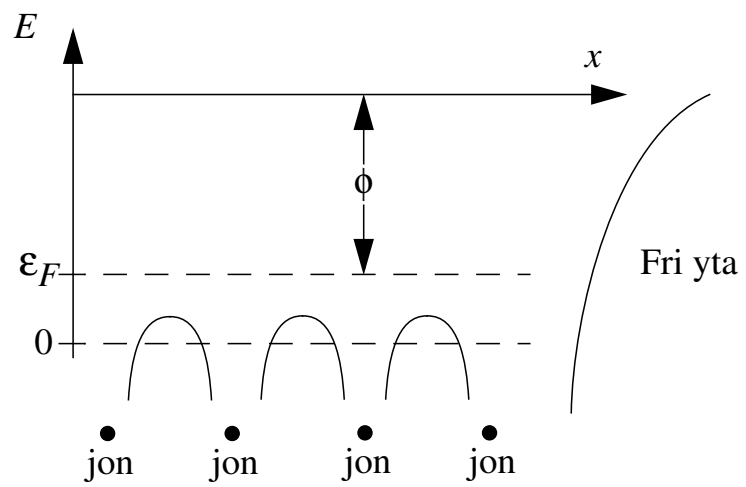
Det inre trycket å andra sidan kan uppenbart inte vara den enda tryckkomponenten i en metall ty 10^{11} Pa $= 1$ Mbar, en miljon gånger normaltryck. Det som ger en motstående komponent är attraktionen mellan elektronerna och de positivt laddade metalljonerna.

Ljudets hastighet är mycket större än de som experimentellt observeras, ~ 1 km/s. Elektrongasen kan alltså inte förklara ljudets framskridande i metaller; istället är det fononerna/gittervibrationerna som gör det. Orsaken hänger igen ihop med växelverkan med jonerna, dock inte på något enkelt sätt. [för mer info se Ashcroft-Mermin kap. 26].

På denna kurs går vi inte djupare in i ämnet gitter-elektron-växelverkningar.

VIII.3. Elektrongasen i metaller

Potentialenergin för elektroner i kristaller har kvalitativt sett följande form:



För att en elektron i det översta elektronbandet (= de elektroner som är svagast bundna till jonerna) skall kunna frigöras från en metallyta bör den ha en energi som överstiger arbetsfunktionen ϕ. Arbetsfunktionens storlek är i allmänhet några eV.

De elektroner vars hastighetskomponent vinkelrätt mot den fria ytan är positiv och vars energi $> \phi$ frigörs från kristallen och bildar en s.k. emissionsström.

Vi vill nu räkna ut denna ström. Då skall man räkna hur många elektroner som har en tilläcklig hastighet att komma över barriären ϕ i en dimension x.

$$N = \sum_k n_k = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \frac{g}{e^{(\epsilon-\mu)/k_BT} + 1} \tag{113}$$

För elektroner är som känt

$$g = 2 \tag{114}$$

Då

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} \tag{115}$$

$$d^3p = m^3 d^3v \tag{116}$$

så

$$dN(\mathbf{v}) = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} 2m^3 d^3v \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_BT} + 1} \tag{117}$$

Vi vill nu integrera bort dimensionerna y och z:

$$dN(v_x) = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} 2m^3 dv_x \int_{-\infty}^{\infty} dv_y \int_{-\infty}^{\infty} dv_z \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_B T} + 1} \tag{118}$$

$$\epsilon = \frac{1}{2} m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) \tag{119}$$

Vi byter om till polära koordinater i de 2 dimensionerna y och z:

$$\begin{cases} v_y = \rho cos\varphi \\ v_z = \rho sin\varphi \end{cases} \tag{120}$$

$$\rho^2 = v_y^2 + v_z^2 \tag{121}$$

$$dv_y dv_z = d\varphi \rho d\rho \tag{122}$$

så man får

$$e^{(\epsilon-\mu)/k_B T} = e^{\frac{1}{2}m\rho^2/k_B T} e^{(\frac{1}{2}mv_x^2 - \mu/k_B T)} \tag{123}$$

Vi gör variablebytet $a = e^{(\frac{1}{2}mv_x^2-\mu)/k_B T}$:

$$dN(v_x) = \frac{2Vm^3}{(2\pi\hbar)^3} dv_x \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} \rho d\rho \frac{1}{ae^{m\rho^2/2k_BT} + 1} \tag{124}$$

samt $\zeta \equiv e^{m\rho^2/2k_BT}$

$$\Longrightarrow d\zeta = \frac{m\rho}{k_BT} d\rho e^{m\rho^2/2k_BT} \tag{125}$$

så man ser att

$$\rho d\rho = \frac{d\zeta}{\frac{m}{k_BT} e^{m\rho^2/2k_BT}} = \frac{k_BT}{m} \frac{d\zeta}{\zeta} \tag{126}$$

Integreringsgränserna blir nu 1 och ∞ ty $\rho = 0$ ger $\zeta = e^0 = 1$

Alltså blir

$$dN(v_x) = \frac{2Vm^3}{(2\pi\hbar)^3} dv_x 2\pi \frac{k_BT}{m} \int_1^{\infty} \frac{d\zeta}{\zeta(a\zeta + 1)} \tag{127}$$

Integralen blir

$$\int_1^{\infty} d\zeta \frac{1}{\zeta(a\zeta + 1)} = \int_1^{\infty} d\zeta \frac{1}{\zeta} - \frac{a}{a\zeta + 1} = \Big/_1^{\infty} \ln\zeta - \ln(a\zeta + 1) \tag{128}$$

$$= \ln\infty - \ln 1 - \ln(a\infty + 1) + \ln(a+1) \tag{129}$$

$$= \ln\infty - \ln 1 - \ln\left(a(\infty + \frac{1}{a})\right) + \ln\left(a(1 + \frac{1}{a})\right) \tag{130}$$

$$= \ln\frac{\infty}{1} - \ln\frac{\overbrace{\infty + \frac{1}{a}}^{=\infty}}{1 + \frac{1}{a}} \tag{131}$$

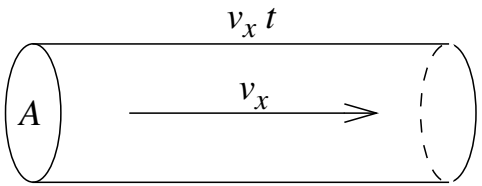
$$= \ln\frac{\infty}{1}\frac{1 + \frac{1}{a}}{\infty} = \ln(1 + \frac{1}{a}); \tag{132}$$

Alltså blir

$$dN(v_x) = \frac{4\pi V}{(2\pi\hbar)^3} dv_x \frac{k_B T}{m} \ln\left\{1 + e^{-(\frac{1}{2}mv_x^2 - \mu)/k_B T}\right\} \tag{133}$$

Antalet elektroner som emitteras genom ytan med en hastighet mellan (v_x) och $(v_x + dv_x)$ per tidsenhet dt och ytenhet dA ges av följande resonemang. Antalet partiklar dN_V i volymen $dV = dAv_x dt$ är denna volym gånger tätheten av partiklar $dN(v_x)/V$:

$$dN_V = dAv_x dt \frac{dN(v_x)}{V} \tag{134}$$



Antalet som kommer ut per tidsenhet och areaenhet är detta dividerat med $dAdt$ eller alltså

$$\frac{dN(v_x)}{V} \cdot v_x \tag{135}$$

Emissionsströmtätheten är

$$j = e \int_{v_0}^{\infty} \frac{dN(v_x)}{V} v_x \tag{136}$$

där e är elektronens laddning och gränshastigheten v_0 ges av

$$\frac{1}{2} m v_0^2 = \phi + \epsilon_F \Rightarrow v_0 = \sqrt{\frac{2(\phi + \epsilon_F)}{m}} \tag{137}$$

Alltså

$$j = e\frac{Vm^2k_BT}{2\pi^2\hbar^3V}\int_{v_0}^{\infty} dv_x v_x \ln\left\{1 + e^{(\mu-\frac{1}{2}mv_x^2)/k_BT}\right\} \tag{138}$$

μ är i termodynamisk kalla system ungefär ϵ_F. För att en elektron skulle emitteras från metallen bör det gälla at elektronen har en kinetisk energi som är klart ovanför ϵ_F (kom ihåg formen på Fermi-distributionen). Alltså är

$$\mu - \frac{1}{2}mv_x^2 < 0 \tag{139}$$

Å andra sidan är i termodynamiskt kalla system

$$kT << \epsilon_F \tag{140}$$

så

$$(\mu - \frac{1}{2}mv_x^2)/k_BT << 0 \text{ och därmed } e^{(\mu-\frac{1}{2}mv_x^2)/k_BT} << 1 \tag{141}$$

Därmed kan man approximera

$$\ln\left\{1 + e^{(\mu-\frac{1}{2}mv_x^2)/k_BT}\right\} \approx e^{\mu/k_BT}e^{-\frac{1}{2}mv_x^2/k_BT} \tag{142}$$

så

$$j = e\frac{m^2 k_B T}{2\pi^2\hbar^3} e^{\mu/k_B T} \underbrace{\int_{v_0}^{\infty} dv_x v_x e^{-\frac{1}{2}mv_x^2/k_B T}}_{\equiv \mathcal{A}} \tag{143}$$

$$\mathcal{A} = -\frac{k_B T}{m} \int_{v_0}^{\infty} dv_x \frac{d}{dv_x} e^{-\frac{1}{2}mv_x^2/k_B T} \tag{144}$$

$$= -\frac{k_B T}{m}(-) e^{-\frac{1}{2}mv_0^2/k_B T} \tag{145}$$

så

$$j = e\frac{m(k_B T)^2}{2\pi^2\hbar^3} e^{-(\phi-\mu+\epsilon_F)/k_B T} \tag{146}$$

Då

$$\mu \approx \epsilon_F \tag{147}$$

fås

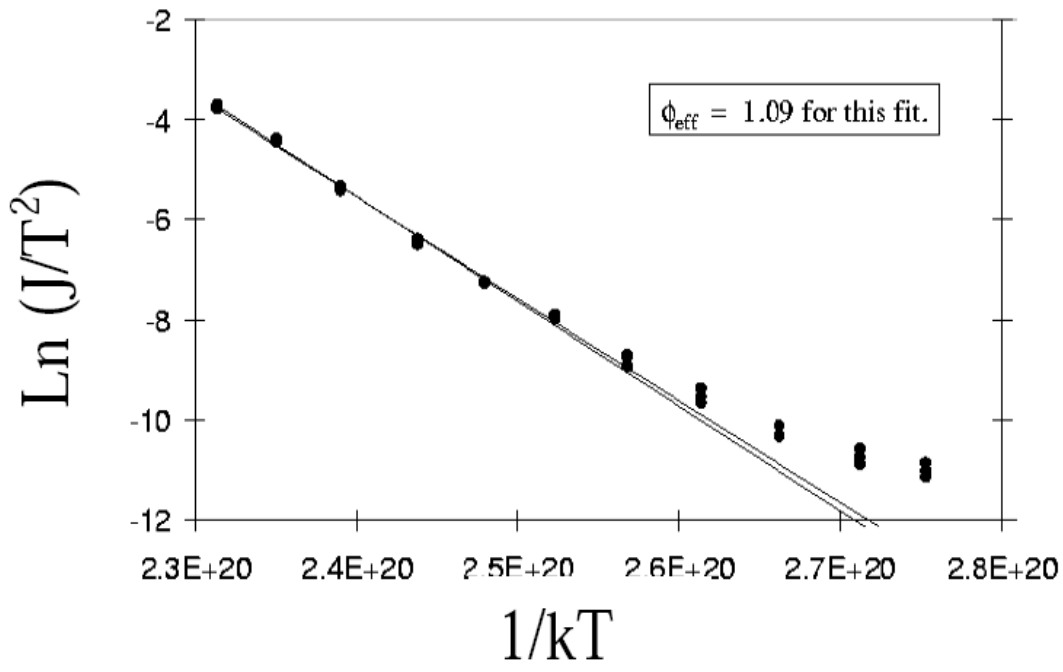
$$\boxed{j \simeq e\frac{m}{2\pi^2\hbar^3}(k_B T)^2 e^{-\phi/k_B T}} \tag{148}$$

vilket är känt som Richardson-Dushmans ekvation.

Detta avviker klart från resultatet för Boltzmann-statistik som skulle ha gett:

$$j \sim \sqrt{T} e^{-\phi/k_B T} \tag{149}$$

Richardson-Dushmans ekvation visar sig stämma väl överens med experiment vid höga temperaturer. Nedan är färskt data över $\ln j/T^2$ vs. $1/kT$ som ju skall bli en rak linje om Richardson-Dushmans ekvation stämmer:



[Cushman, Heering, CMS HCAL Hybrid Photodiode Design and Quality Assurance Stations, ICFA Instrumentation bulleting Vol.25 (2002)]

Alltså kan en helt makroskopisk strömmätning användas för att bestämma ϕ, som är helt mikroskopisk till sitt ursprung!

Man kan räkna ihop konstanterna till

$$A = e\frac{m}{2\pi^2\hbar^3}k_B^2 = 120.2\frac{\mathsf{A}}{\mathsf{cm}^2\mathsf{K}^2} \tag{150}$$

vilket är mycket nära det experimentella värdet på $A = 120\frac{\mathsf{A}}{\mathsf{cm}^2\mathsf{K}^2}$ för Cs, och rätt storleksordning för många andra metaller! [Paakkari sid. 152]

VIII.4. Fermigaser vid låga temperaturer

Nu skall vi se på Fermigasen vid låga temperaturer, som alltså är *högre* än temperaturen $T = 0$ vi just såg på! Skillnaden är nu att vi inte kan mera betrakta Fermidistributionen som en box, utan måste betrakta den lilla avvikelsen från boxformen.

Vid låga temperaturer är $\mu > 0$ för fermigaser (ty μ avviker bara litet från ϵ_F, som ju måste vara positiv enligt ekvation 67) vilket innebär att fugaciteten z är $>> 1$:

$$z = e^{\mu/k_B T} >> 1. \tag{151}$$

De allmänna uttryckena

$$N = gVn_c f_{3/2}(z) \tag{152}$$

$$\Omega = -PV = -gVn_c(k_B T) f_{5/2}(z), \tag{153}$$

med funktionerna f givna som potensserier av z blir då värdelösa då serierna inte konvergerar snabbt:

$$f_S(z) = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} \frac{z^k}{k^n} \tag{154}$$

För att få användbara uttryck nära T = 0 måste funktionerna skrivas i sin ursprungliga form som integraler (jämför ekv. 23-32).

Integralerna är

$$f_{3/2}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{\frac{1}{z}e^x + 1} \tag{155}$$

$$f_{5/2}(z) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \frac{x^{3/2}}{\frac{1}{z}e^x + 1} \tag{156}$$

Man kommer fram till dessa former genom att räkna:

$$\int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{\frac{1}{z}e^x + 1} = \int_0^\infty dx\, z e^{-x} \frac{x^{1/2}}{1 + z e^{-x}} \tag{157}$$

Den senare delen är summan av en geometrisk serie så man får

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^\infty dx z e^{-x} x^{1/2} (-1)^n z^n e^{-nx} \tag{158}$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} \int_0^{\infty} dx z^k (-1)^{k+1} x^{1/2} e^{-kx} \tag{159}$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} z^k (-)^{k+1} \underbrace{\int_0^{\infty} dx x^{1/2} e^{-kx}}_{2 \underbrace{\int_0^{\infty} dy y^2 e^{-ky^2}}_{-\frac{\partial}{\partial k} \underbrace{\int_0^{\infty} dy e^{-ky^2}}_{\frac{\sqrt{\pi}}{2} k^{-1/2}}}} \tag{160}$$

$$-\frac{\sqrt{\pi}}{4} k^{-3/2}$$

$$= \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} \frac{z^k}{k^{3/2}} \tag{161}$$

Vi definierar en allmän I_n:

$$I_n = \int_0^\infty dx \frac{x^n}{\frac{1}{z}e^x + 1} = \int_0^\infty dx \frac{x^n}{e^{x-\mu/k_BT} + 1} \tag{162}$$

Nu är alltså $n = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ intressanta fall.

Vi delar upp integralen i två olika intervall:

$$I_n = \int_0^{\mu/k_BT} dx \frac{x^n}{e^{x-\mu/k_BT} + 1} + \int_{\mu/k_BT}^\infty dx \frac{x^n}{e^{x-\mu/k_BT} + 1} \tag{163}$$

och förlänger den första integralens kvot med $e^{-x+\mu/k_BT}$:

$$= \int_0^{\mu/k_BT} dx \frac{x^n e^{-x+\mu/k_BT}}{e^{-x+\mu/k_BT} + 1} + \int_{\mu/k_BT}^\infty dx \frac{x^n}{e^{x-\mu/k_BT} + 1} \tag{164}$$

Nu kan man skriva om den första integranden som

$$x^n \frac{e^{-x+\mu/k_BT}}{e^{-x+\mu/k_BT} + 1} = x^n \frac{e^{-x+\mu/k_BT} + 1 - 1}{e^{-x+\mu/k_BT} + 1} \tag{165}$$

$$= x^n - x^n \frac{1}{1 + e^{-x+\mu/k_BT}} \tag{166}$$

och därmed dela den första integralen i två delar:

$$I_n = \int_0^{\mu/k_BT} dx x^n + \int_{\mu/k_BT}^{\infty} dx \frac{x^n}{e^{x-\mu/k_BT} + 1} - \int_0^{\mu/k_BT} dx \frac{x^n}{e^{-x+\mu/k_BT} + 1} \tag{167}$$

Vi gör variabelbytena

$$x - \mu/k_BT = y \text{ i andra integralen och } -x + \mu/k_BT = y \text{ i tredje} \tag{168}$$

vilket innebär att integreringsgränserna också ändras:

$$\mu/k_BT \to 0; \infty \to \infty \text{ i andra integralen} \tag{169}$$

$$0 \to \mu/k_BT; \mu/k_BT \to 0 \text{ i tredje integralen} \tag{170}$$

Men i tredje integralen är också $dx = -dy$ så det slutliga integreringsintervallet blir samma som det ursprungliga efter teckenbyte!

Därmed får man

$$I_n = \int_0^{\mu/k_BT} dx x^n + \int_0^\infty dy \frac{(\frac{\mu}{k_BT} + y)^n}{e^y + 1} - \int_0^{\mu/k_BT} dy \frac{(\frac{\mu}{k_BT} - y)^n}{e^y + 1} \tag{171}$$

Då $k_BT \to 0$ blir den sista integralen approximativt

$$\int_0^\infty dy \frac{(\frac{\mu}{k_BT} - y)^n}{e^y + 1} \tag{172}$$

Med denna approximation och med att utföra den första integralen får man

$$I_n \approx \frac{1}{(n+1)}(\frac{\mu}{k_BT})^{n+1} + \int_0^\infty dy \frac{(\frac{\mu}{k_BT} + y)^n - (\frac{\mu}{k_BT} - y)^n}{e^y + 1} \tag{173}$$

$$= \frac{1}{(n+1)}(\frac{\mu}{k_BT})^{n+1} + (\frac{\mu}{k_BT})^n \int_0^\infty dy \underbrace{\frac{(1+\frac{yk_BT}{\mu})^n - (1-\frac{yk_BT}{\mu})^n}{e^y+1}}_{\approx \frac{\frac{2k_BTn}{\mu}y}{e^y+1}} \tag{174}$$

där vi använt oss av det faktum att då $k_BT \to 0$ ger Taylorutvecklingen av $(1+x)^n \approx 1 + nx$.

Alltså blir

$$I_n = \frac{1}{(n+1)}(\frac{\mu}{k_BT})^{n+1} + 2n(\frac{\mu}{k_BT})^{n-1} \underbrace{\int_0^\infty dy \frac{y}{e^y+1}}_{\frac{\pi^2}{12}} \tag{175}$$

Alltså fås för de två intressanta fallen:

$$I_{1/2} \simeq (\frac{2}{3})(\frac{\mu}{k_BT})^{3/2} + 2 \cdot \frac{1}{2}(\frac{\mu}{k_BT})^{-1/2}\frac{\pi^2}{12} + ... \tag{176}$$

$$= \frac{2}{3}(\frac{\mu}{k_BT})^{3/2}\{1 + \frac{\pi^2}{8}(\frac{k_BT}{\mu})^2\} \tag{177}$$

$$I_{3/2} \simeq \frac{2}{5}(\frac{\mu}{k_B T})^{5/2} + 2 \cdot \frac{3}{2}(\frac{\mu}{k_B T})^{1/2}\frac{\pi^2}{12}... \tag{178}$$

$$= \frac{2}{5}(\frac{\mu}{k_B T})^{5/2}[1 + \frac{5}{8}\pi^2(\frac{k_B T}{\mu})^2 + ..] \tag{179}$$

Därmed får vi nu tillståndsekvationen för Fermigasen nära $T = 0$:

$$N = V g n_c f_{3/2}\ (z) = V g n_c \frac{2}{\sqrt{\pi}} I_{1/2} \tag{180}$$

$$: \Omega = -PV = -gVn_c(k_B T) f_{5/2}(z) = -Vgn_c(k_B T)\frac{4}{3\sqrt{\pi}} I_{3/2} \tag{181}$$

VIII.4.0.1. Den kemiska potentialen nära T = 0

Vi har nu alltså:

$$N = V g n_c \frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{2}{3}(\frac{\mu}{k_B T})^{3/2}[1 + \frac{\pi^2}{8}(\frac{k_B T}{\mu})^2] \tag{182}$$

Å andra sidan är ju $\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{m} n^{2/3} \left(\frac{3\pi^2}{g\sqrt{2}}\right)^{2/3}$ där $n = N/V$ (utan någon approximation). Om man löser ut N ur detta får man

$$N = Vg\frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{2}{3}(\frac{\epsilon_F}{k_B T})^{3/2}(\frac{m}{2\pi\hbar^2})^{3/2} \tag{183}$$

För att dessa två ekvationer skall vara konsistenta med varann bör man ha

$$1 = (\frac{\mu}{\epsilon_F})^{3/2}\left[1 + \frac{\pi^2}{8}(\frac{k_B T}{\mu})^2\right] \tag{184}$$

Detta ger oss nu första approximationen på temperaturnberoendet av $\mu(T)$. För att få den gör vi en ansats $\mu(T) = \epsilon_F + \alpha T^2 + O(T^4)$:

$$1 = \left[1 + \frac{\alpha T^2}{\epsilon_F}\right]^{3/2}\left[1 + \frac{\pi^2}{8}(\frac{k_B T}{\epsilon_F})^2 ...\right] \tag{185}$$

där vi genast lämnat bort termer av ordningen T^4/ϵ_F^4.

Alltså är med Taylorserien $(1+x)^n \approx 1 + nx$:

$$1 \simeq \left[1 + \frac{3}{2}\frac{\alpha T^2}{\epsilon_F}\right]\left[1 + \frac{\pi^2}{8}(\frac{k_B T}{\epsilon_F})^2\right] \tag{186}$$

$$1 \simeq 1 + T^2\left[\frac{3}{2}\frac{\alpha}{\epsilon_F} + \frac{\pi^2 k^2}{8\epsilon_F^2}\right] + ... \tag{187}$$

För att denna likhet skall gälla bör vi givetvis ha

$$\frac{3}{2}\frac{\alpha}{\epsilon_F} = -\frac{\pi^2 k_B^2}{8\epsilon_F^2} \tag{188}$$

varur

$$\alpha = -\frac{\pi^2 k_B^2}{12\epsilon_F} \tag{189}$$

Alltså är i denna approximation

$$\mu(T) = \epsilon_F - \frac{\pi^2 k_B^2 T^2}{12\epsilon_F} \tag{190}$$

$$\boxed{\mu(T) = \epsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_B T}{\epsilon_F}\right)^2 + ...\right]} \tag{191}$$

Detta är alltså den kemiska potentialens temperaturberoende!

VIII.4.0.2. Tillståndsekvationen nära T = 0

Vi kan nu också beräkna tillståndsekvationen ur vårt resultat för Ω, ekv. 181:

$$PV = -\Omega = Vg(\frac{m}{2\pi\hbar^2})^{3/2}(k_B T)^{5/2}\frac{4}{3\sqrt{\pi}}\frac{2}{5}(\frac{\mu}{k_B T})^{5/2}\left\{1 + \frac{5}{8}\pi^2(\frac{k_B T}{\mu})^2 + ...\right\} \tag{192}$$

$$= Vg(\frac{m}{2\pi\hbar^2})^{3/2}\frac{8}{15\sqrt{\pi}}\mu^{5/2}\left\{1+\frac{5}{8}\pi^2(\frac{k_BT}{\mu})^2+...\right\} \tag{193}$$

Vid $T = 0$ har vi alltså (då där är $\mu = \epsilon_F$):

$$PV = Vg(\frac{m}{2\pi\hbar^2})^{3/2}\frac{8}{15\sqrt{\pi}}\epsilon_F^{5/2} \qquad (T=0) \tag{194}$$

Men tidigare härledde vi

$$PV = \frac{2}{3}E; \quad E = \frac{3}{5}N\epsilon_F \quad (T=0) \tag{195}$$

$$\Rightarrow PV = \frac{2}{5}N\epsilon_F(T=0) \tag{196}$$

Jämförelse av de två uttryckena för PV vid $T = 0$ visar att vi måste ha:

$$\frac{2}{5}N\epsilon_F = Vg(\frac{m}{2\pi\hbar^2})^{3/2}\frac{8}{15\sqrt{\pi}}\epsilon_F^{5/2}; \tag{197}$$

Därmed kan uttrycket för PV vid ändlig T skrivas i enklare form som

$$PV = \frac{2}{5}N\epsilon_F \underbrace{\underbrace{(\frac{\mu}{\epsilon_F})^{5/2}}_{\left[1-\frac{\pi^2}{12}(\frac{k_BT}{\epsilon_F})^2\right]^{5/2}}}_{1-\frac{5\pi^2}{24}(\frac{k_BT}{\epsilon_F})^2} \underbrace{\left\{1+\frac{5}{8}\pi^2(\frac{k_BT}{\mu})^2+\ldots\right\}}_{\left[1+\frac{5}{8}\pi^2(\frac{k_BT}{\epsilon_F})^2\right]} \tag{198}$$

varvid till andra ordningen:

$$PV = \frac{2}{5}N\epsilon_F\left[1-\frac{5\pi^2}{24}(\frac{k_BT}{\epsilon_F})^2+\frac{5}{8}\pi^2(\frac{k_BT}{\epsilon_F})^2+\ldots\right] \tag{199}$$

$$PV = \frac{2}{5}N\epsilon_F\left[1+\frac{5}{12}\pi^2(\frac{k_BT}{\epsilon_F})^2+\ldots\right] \tag{200}$$

Här är det intressant att notera att (för första gången på denna kurs) reduceras denna gas-tillståndsekvation inte uppenbart till $PV = Nk_BT$ med något enkelt gränsvärde!

VIII.4.0.3. Det specifika värmet nära T = 0:

För Fermigaser vid godtycklig T gäller

$$E = U = -\frac{3}{2}\Omega = \frac{3}{2}PV \tag{201}$$

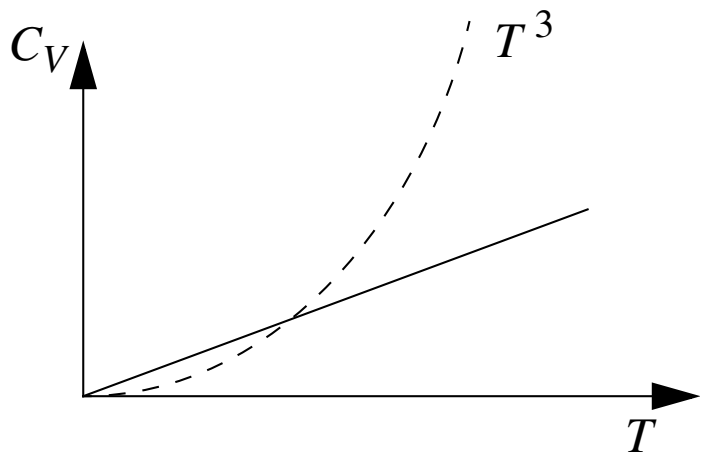
Vår approximation för PV ger därmed för energin

$$E \tilde{=} \frac{3}{5}N\epsilon_F\{1 + \frac{5}{12}\pi^2(\frac{k_BT}{\epsilon_F})^2 + ...\} \tag{202}$$

varvid

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{3}{5}N\epsilon_F\frac{5}{12}\pi^2 2\frac{k_B^2T}{\epsilon_F^2} \tag{203}$$

$$C_V = \frac{\pi^2}{2}(\frac{k_B^2 T}{\epsilon_F}) \tag{204}$$



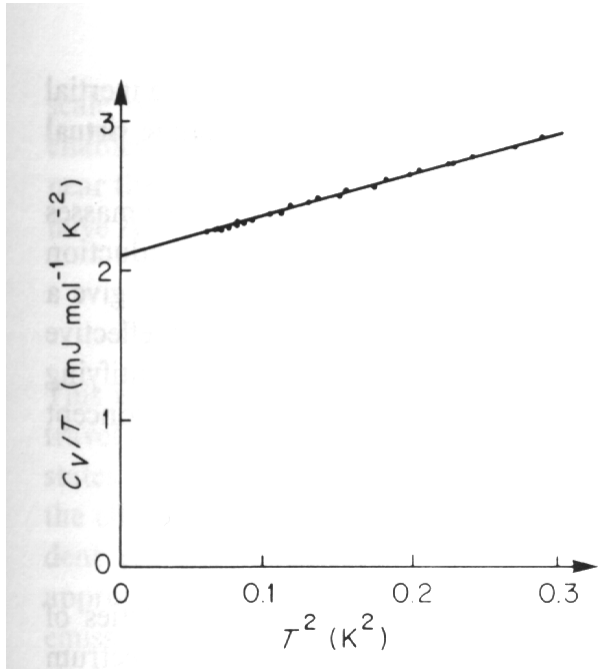
Då elektrongasen är en kall Fermigas gäller för metaller vid ytterst låga temperaturer där blott elektrongasens specifika värme spelar någon roll att $C_V \sim T$. Vid högre temperaturer gäller Debye's teori och $C_V \sim T^3$.

Alltså kan man genom att anpassa kurvor av typen

$$C_V = \gamma T + AT^3 \Leftrightarrow C_V/T = \gamma + AT^2 \tag{205}$$

till experimentellt C_V-data testa Fermi-elektrongasmodellen. Om man plottar data i formen C_V/T vs. T^2 borde man ha ett linjärt beroende som skär x-axeln vid ett ändligt värde

Här är en sådan plot för K:



som alltså följer teorins förutspåelse extremt bra!

Termen γ testar då elektrongas-bidraget och T^3 Debye-modellens fononer.

Här är en tabell av experimentella resultat, och resultat som fåtts med formeln (204)

Table 2.3

SOME ROUGH EXPERIMENTAL VALUES FOR THE COEFFICIENT OF THE LINEAR TERM IN T OF THE MOLAR SPECIFIC HEATS OF METALS, AND THE VALUES GIVEN BY SIMPLE FREE ELECTRON THEORY

ELEMENT	FREE ELECTRON γ (in 10^{-4} cal-mole^{-1}-K^{-2})	MEASURED γ	RATIO[a] (m^*/m)
Li	1.8	4.2	2.3
Na	2.6	3.5	1.3
K	4.0	4.7	1.2
Rb	4.6	5.8	1.3
Cs	5.3	7.7	1.5
Cu	1.2	1.6	1.3
Ag	1.5	1.6	1.1
Au	1.5	1.6	1.1
Be	1.2	0.5	0.42
Mg	2.4	3.2	1.3
Ca	3.6	6.5	1.8
Sr	4.3	8.7	2.0
Ba	4.7	6.5	1.4
Nb	1.6	20	12
Fe	1.5	12	8.0
Mn	1.5	40	27
Zn	1.8	1.4	0.78
Cd	2.3	1.7	0.74
Hg	2.4	5.0	2.1
Al	2.2	3.0	1.4
Ga	2.4	1.5	0.62
In	2.9	4.3	1.5
Tl	3.1	3.5	1.1
Sn	3.3	4.4	1.3
Pb	3.6	7.0	1.9
Bi	4.3	0.2	0.047
Sb	3.9	1.5	0.38

I de allra flesta fall stämmer teorin alltså bra överens med resultaten, men i några (Nb, Fe, Mn, Bi, Sb) misslyckas den fenomenalt.

VIII.5. Fermigasernas paramagnetism

Den magnetiska suskeptibiliteten definieras som

$$M = \chi B/\mu_0 \quad (M = \chi H) \tag{206}$$

Paramagnetism har per definition $\chi > 0$ och diamagnetism $\chi < 0$.

Vid låga temperaturer uppvisar fermisystem både paramagnetiskt och diamagnetiskt beteende. Fermisystemens paramagnetism kallas Pauli-paramagnetism.

En elektrongas suskeptibilitet är en kombination av den paramagnetiska och den diamagnetiska suskeptibiliteten:

$$\chi = \chi_P + \chi_D \tag{207}$$

I allmänhet är $\chi_P >> \chi_D$.

Energin hos en elektron i ett yttre magnetiskt fält (flödestäthet) B är om elektronens magnetiska

moment är $\mathbf{m}$:

$$\epsilon = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mathbf{m}_0 \cdot \mathbf{B} \tag{208}$$

För elektroner kan spinnet vara lika riktad med fältet eller motsatt riktat med fältet: $\mathbf{m}_0 \uparrow\uparrow B$ eller $\mathbf{m}_0 \downarrow\uparrow B$ där den första pilen symboliserar elektronens och den andra fältets riktning.

För de elektroner som har spinn parallelt till fältet $\mathbf{m} \uparrow\uparrow B$ är

$$\epsilon = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - m_0 B, \tag{209}$$

medan för de som har $\mathbf{m} \downarrow\uparrow B$

$$\epsilon = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + m_0 B. \tag{210}$$

En elektrongas i ett yttre fält kan betraktas som en kombination av två skilda fermigaser: den ena med alla spinn (magnetiska moment) "upp" (dvs. i fältets riktning) och den andra med spinn "ned".

Vi betecknar:

$N =$ totalt antal elektroner

$N_+ = \#$ el. med spinn upp $\quad m_0 : +$

$N_- = \#$ el. med spinn ned $\quad m_0 : -$

$N_+ + N_- = N$

$(+)$ systemets kemiska potential är

$$\mu_+ = \mu(N_+) - m_0 B \tag{211}$$

$\mu(N_+) =$ kemisk potential för ett fermisystem med N_+ partiklar och degenerationsfaktorn 1.

$(-)$ systemets kemiska potential är

$$\mu_- = \mu(N_-) + m_0 B \tag{212}$$

Om $(+)$ och $(-)$ systemen är i jämvikt gäller

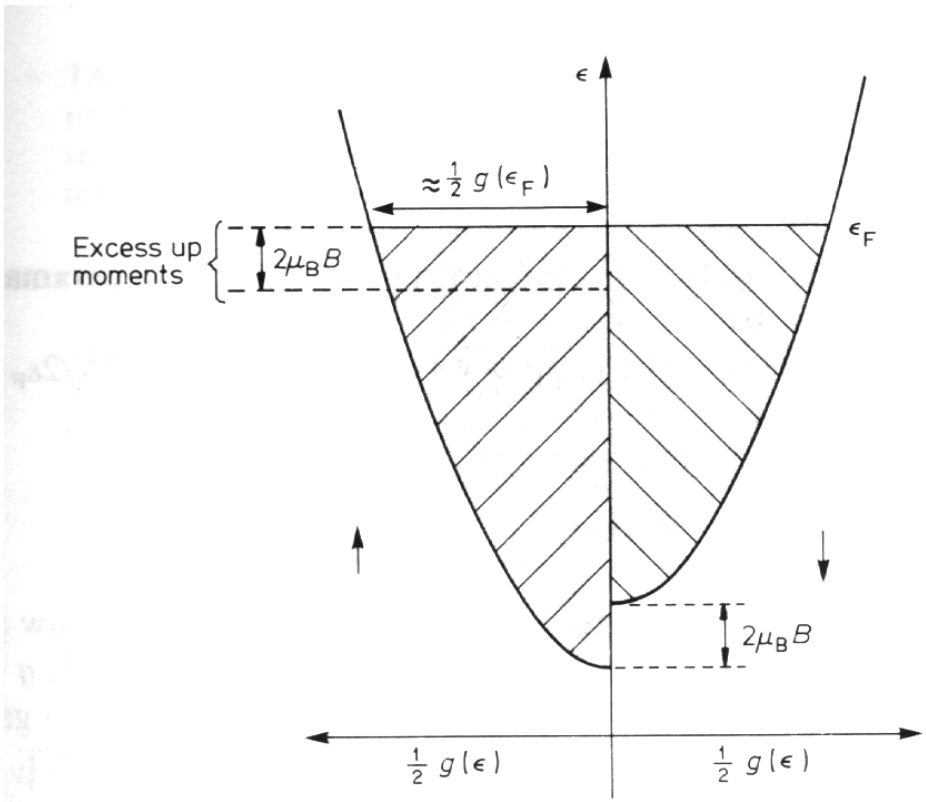
$$\boxed{\mu_+ = \mu_-} \tag{213}$$

så

$$2m_0 B = \mu(N_+) - \mu(N_-) \tag{214}$$

I fallet $B = 0$ är $\mu(N_+) = \mu(N_-)$ varav följer att $N_+ = N_- = N/2$, vilket ju är ett helt naturligt resultat.

Om $B \neq 0$ kommer magnetfältet att förflytta energinivån för de två systemen i obalans:



Vi definierar ν = överskott av $\uparrow$ partiklar:

$$N_+ = \frac{N}{2} + \nu, \tag{215}$$

$$N_- = \frac{N}{2} - \nu. \tag{216}$$

Med denna definition är

$$2m_0 B = \mu(\frac{N}{2} + \nu) - \mu(\frac{N}{2} - \nu) \tag{217}$$

Om B är ett svagt fält kan ν förväntas vara litet varigenom

$$\mu(\frac{N}{2} + \nu) \simeq \mu(\frac{N}{2}) + \nu \left(\frac{\partial \mu}{\partial N}\right)_{N/2} + \ldots \tag{218}$$

$$\mu(\frac{N}{2} - \nu) \simeq \mu(\frac{N}{2}) - \nu \left(\frac{\partial \mu}{\partial N}\right)_{N/2} + \ldots \tag{219}$$

så man får

$$2m_0 B \simeq 2\nu \left(\frac{\partial \mu}{\partial N}\right)_{N/2} \tag{220}$$

$$m_0 B \simeq \nu \left(\frac{\partial \mu}{\partial N}\right)_{N/2} \tag{221}$$

Magnetiseringen är

$$M = \frac{1}{V}[m_0 N_+ - m_0 N_-] = \frac{m_0}{V} 2\nu; \tag{222}$$

eller med insättningen av ν löst ur ekv. 221

$$M = \frac{m_0^2}{V} \frac{B}{(\frac{\partial \mu}{\partial N})_{N/2}} \tag{223}$$

Då

$$M = \chi H; \quad B = \mu_0 H \tag{224}$$

ser man att detta ger

$$\chi = \frac{2m_0^2 \mu_0}{V} \frac{1}{\left(\frac{\partial \mu}{\partial N}\right)_{N/2}} \tag{225}$$

Vid termodynamiskt kalla system eller alltså nära T = 0 är

$$\mu(N) = \epsilon_F(N) = \frac{\hbar^2}{m} (\frac{3\pi^2 n}{g_s \sqrt{2}})^{2/3} \tag{226}$$

När vi nu betraktar elektroner med enbart ett spinntillstånd åt gången är degenerationsfaktorn 1:

$$g_s = 1 \rightarrow \mu(N) = \frac{\hbar^2}{m}(\frac{3\pi^2 N}{V\sqrt{2}})^{2/3} \tag{227}$$

och därmed

$$\frac{\partial \mu}{\partial N} = \frac{2}{3}\frac{\mu(N)}{N} \tag{228}$$

så

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial N}\right)_{N/2} = \frac{2}{3}\frac{\mu(N/2)}{(N/2)} = \frac{2}{3}\frac{2}{N}\frac{\hbar^2}{m}(\frac{3\pi^2 N}{V 2\sqrt{2}})^{2/3} \tag{229}$$

Om vi jämför detta med ϵ_F för det totala fermisystemet då $B = 0$ med både spinn-upp och spinn-ner ($\uparrow + \downarrow$)-elektroner ($g = 2$)

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{m}(\frac{3\pi^2 n}{2\sqrt{2}})^{2/3} \tag{230}$$

ser man att man kan skriva

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial N}\right)_{N/2} = \frac{4}{3N}\epsilon_F \tag{231}$$

varmed vi får från ekv. 225

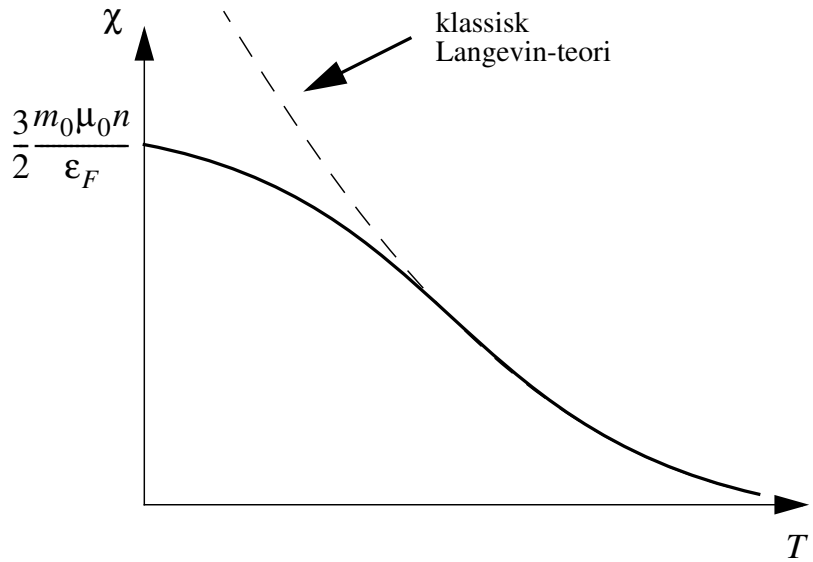
$$\boxed{\chi = \frac{2m_0^2\mu_0}{V}\frac{3N}{4\epsilon_F} = \frac{3}{2}\frac{m_0^2\mu_0 n}{\epsilon_F}} \tag{232}$$

Detta kan vi jämföra med vårt resultat från klassisk Curie-teori (se kapitel 6):

$$\chi = \frac{m_0^2 n\mu_0}{T} \tag{233}$$

som beskrev elektroner med Boltzmann-statistik.

Vi ser alltså en dramatisk skillnad vid låga T mellan det klassiska och kvantmekaniska beteendet:



Men som det konstaterades tidigare på kursen (kapitel III.5) kan inte Curies lag gälla vid $T = 0$ p.g.a. III grundlagen. Nu har vi alltså äntligen härlett det korrekta beteendet!