

Konsultacje z Podstaw Fizyki IV

poniedziałek, 22 czerwca 2020 17:17

Zespoły statystyczne

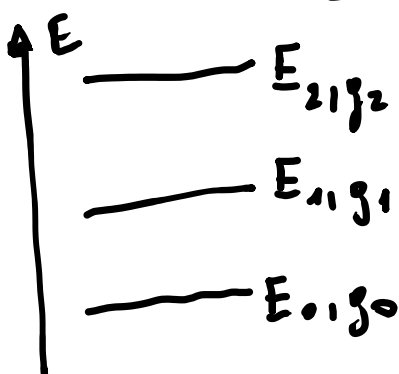
Kiedy korzystać z danego zespołu statystycznego?

- Gdy wskazują na to parametry makroskopowe wymienione w zadaniu:
 - przy ustalonym E, V, N posługujemy się zespołem mikrokanonicznym
 - przy ustalonym T, V, N posługujemy się zespołem kanonicznym
 - przy ustalonym T, V, μ posługujemy się wielkim zespołem kanonicznym
- Zespół mikrokanoniczny stosujemy głównie do problemów w których da się go sprowadzić do problemu kombinatorycznego, np. Zadanie domowe z gumą lub model Einsteina ciała stałego, itd.
- Z zespołu kanonicznego korzystamy, gdy układ posiada skończoną liczbę poziomów energetycznych w których może znajdować się cząstka, lub można układ w ten sposób przybliżyć, wtedy

$$Z = \sum_{E_n} g_n e^{-\beta E_n}$$

\uparrow degeneracja poziomu E_n

Na przykład:



• dla pojedynczej cząstki

$$Z_1 = g_0 e^{-\beta E_0} + g_1 e^{-\beta E_1} + g_2 e^{-\beta E_2}$$

- Z wielkiego zespołu kanonicznego korzysta się praktycznie tylko w Przypadku doskonałych gazów kwantowych (dla potrzeb tego przedmiotu)

Microzróżnialność cząstek i ich niezależność

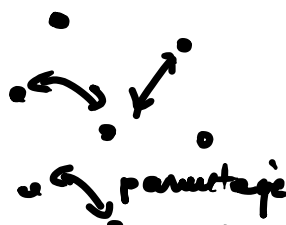
$$= \frac{z_1^N}{N!} \frac{z_1 \times \dots \times z_1}{N\text{-razy}} = 1 \Rightarrow z_N = z_1$$

Dla cząstek nierozróżnialnych jest analogicznie tylko trzeba wykonać permutacje po indeksach $i_1, i_2, i_3, \dots, i_N$, gdyż nie możemy powiedzieć, która cząstka jest która, czyli

$$\sum_{i_1, i_2, \dots, i_N} \frac{1}{z_1^N} g_{i_1} \dots g_{i_N} e^{-\beta E_{i_1}} \dots e^{-\beta E_{i_N}} =$$

$$= N! \frac{1}{z_1^N} \left(\sum_{E_{i_1}} g_{i_1} e^{-\beta E_{i_1}} \right) \dots \left(\sum_{E_{i_N}} e^{-\beta E_{i_N}} g_{i_N} \right) = N!$$

↑
permutacje
po indeksach
czyli

$$z_N = \frac{1}{N!} (z_1)^N$$


↔ permutacje

Jeżeli dana cząstka może wykonywać translacje, rotacje, oscylacje i znajdować się w różnych stanach elektronowych i te różne formy energii są niezależne, tj.

$$E_{\text{całk}} = E_{\text{trans}} + E_{\text{rot}} + E_{\text{osc}} + E_{\text{el.}} + \dots$$

wtedy suma statystyczna także się faktoryzuje:

$$Z_1 = Z_{\text{trans}} Z_{\text{rot}} Z_{\text{osc}} Z_{\text{el.}} \dots$$

Jeżeli układ składa się z N takich niezależnych i nierozróżnialnych cząstek, wtedy

$$Z_N = Z_1^N \frac{1}{N!} = \frac{1}{N!} Z_{\text{trans}}^N Z_{\text{rot}}^N Z_{\text{osc}}^N Z_{\text{el.}}^N \dots$$

zwykle czynnik kombinatoryczny
włacza się do osi translacyjnej

czyli

$$Z_{N, \text{trans}} = Z_{1, \text{trans}}^N \frac{1}{N!}$$

$Z_{1,trans}$ w przypadku klasycznym

można rozdzielić na części konfiguracyjną i pędową, np. dla gazu doskonałego

$Z = \int d\Gamma e^{-\beta H}$ dla cząstek niezależnych

mamy: $H = \sum_{i=1}^N H_i = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m}$

cząstki są niezależne, gdy nie oddziałują

Mamy wtedy

$$Z = \frac{1}{h^{3N} N!} \int d^N \vec{q} d^N \vec{p} e^{-\beta \sum_{i=1}^N H_i} =$$

$$= \frac{1}{h^{3N} N!} \underbrace{\int d^N \vec{q}}_{\text{części konfiguracyjne}} \underbrace{\int d^N \vec{p}}_{\text{części pędowe}} \prod_{i=1}^N e^{-\beta \frac{p_i^2}{2m}} =$$

$$= \left\{ \begin{array}{l} \text{cząstki} \\ \text{są niezależne} \end{array} \right\} = \frac{1}{h^{3N} N!} \left[\int d^3 \vec{q} \right]^N \left[\int d^3 \vec{p} e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} \right]^N =$$

$$= \frac{1}{N!} \underbrace{\left[\int d^3 \vec{q} \right]^N}_{\text{części konfiguracyjne}} \left[\int \frac{d^3 \vec{p}}{h^3} e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} \right]^N = \frac{V^N}{N!} \lambda_T^{3N},$$

czyli $Z_{1,trans} = V \lambda_T^3$

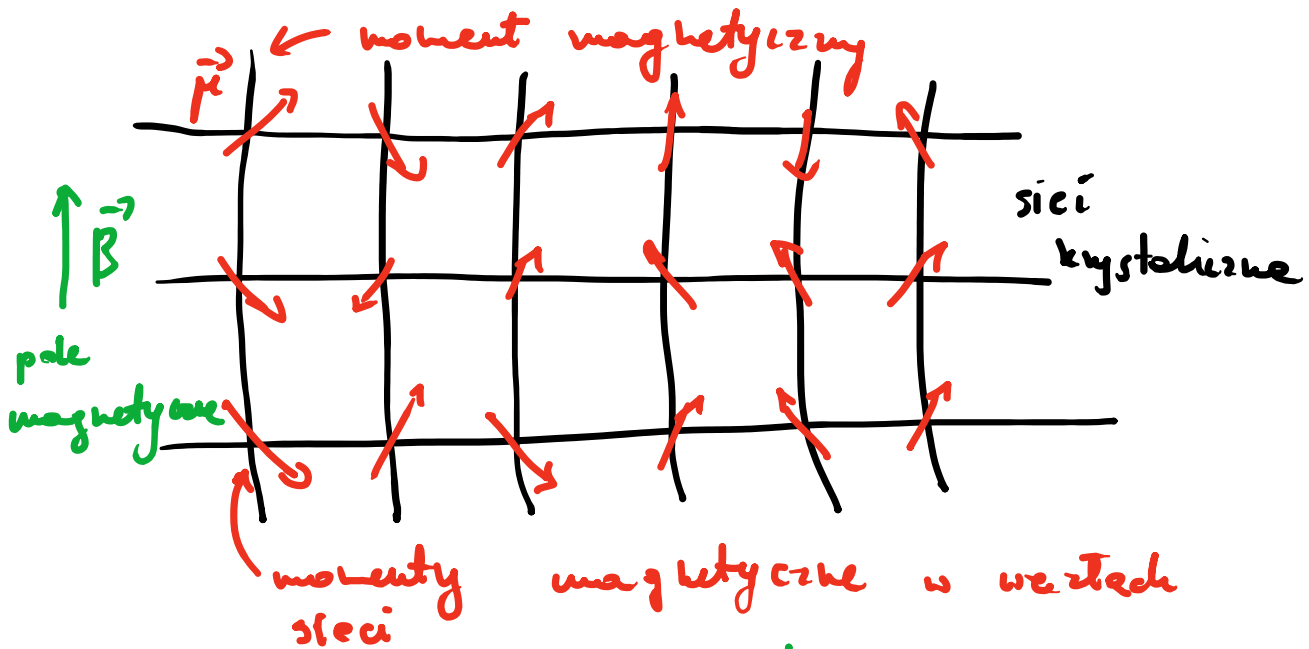
term. dł. fali de Broglie'a

Z też powodu mogę napisać, że

$$Z_{N,rot} = Z_{1,rot}^N; \quad Z_{N,osc} = Z_{1,osc}^N; \quad Z_{N,d} = Z_{1,d}^N$$

także dla cząstek nierozróżnialnych, bo zwyczajowo $N!$ łączy się z częścią translacyjną sumy statystycznej.

Typowym przypadkiem w którym cząstki mogą traktować jako rozróżnialne są momenty magnetyczne umieszczone w węzłach sieci krystalicznej



$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

wtedy dla klasycznych momentów

$$Z_N = Z_1^N \quad \text{oraz} \quad Z_1 \sim \int d\theta e^{-\beta E(\theta)}$$

dla momentów kwantowych

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad \text{jest dyskretna}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} E_i \end{array} \right\} \quad \text{wtedy} \quad Z_1 = \sum_i e^{-\beta E_i}$$

Dany węzeł jest rozróżnialny z powodów geometrycznych nawet jeżeli znajdujący się w nim jon był nierozróżnialny z sąsiednim to i tak stosujemy wzory napisane powyżej.

Gdy jednak momenty magnetyczne mogą się poruszać, wtedy w przypadku kwantowym jest to trochę bardziej złożony problem [trzeba użyć innego zespołu], a w przypadku klasycznym mamy, że ze względu na ruch momentów

magnetycznych suma statystyczna N takich momentów ma postać

$$Z_N = \frac{1}{N!} Z_1^N = \frac{1}{N!} Z_{\text{trans}}^N Z_{\text{mag}}^N$$

↑ ← permutacje
↓ ↑ ↓

gdzie $Z_{\text{mag}} \sim \int d\theta e^{-\beta E(\theta)}$,

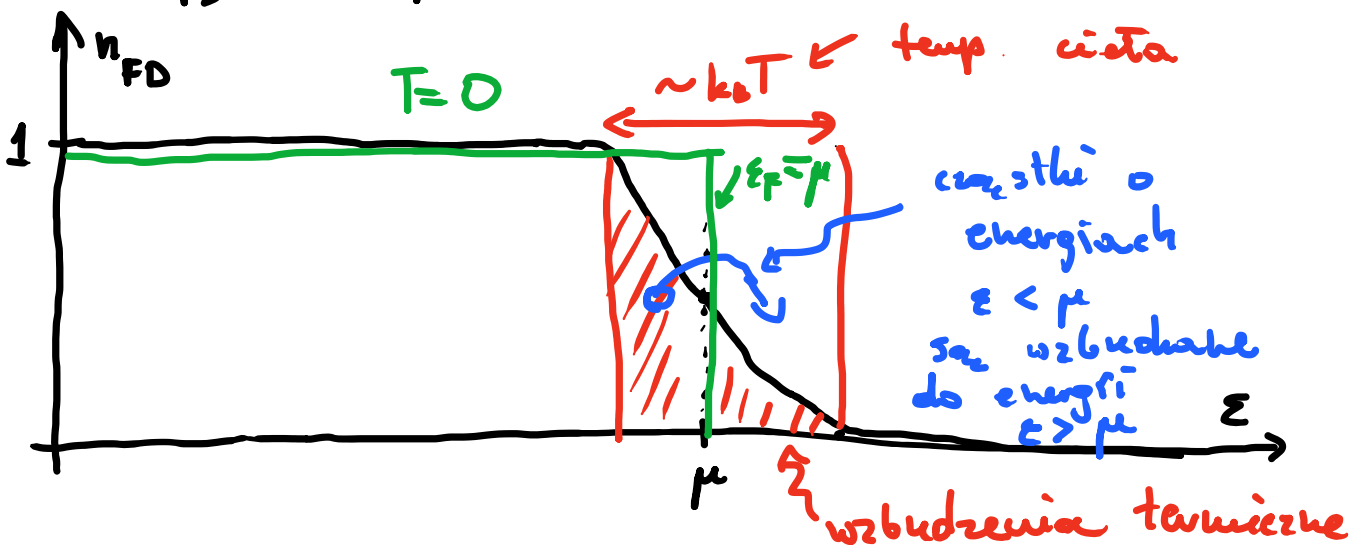
razem z ruch cząstki traktuje się klasycznie, ale inne stopnie swobody już kwantowo, wtedy

$$Z_N = Z_1^N \frac{1}{N!} = Z_{\text{trans}}^N \frac{1}{N!} Z_{\text{mag}}^N$$

$$Z_{\text{mag}} = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad E(\theta) \rightsquigarrow E_i - \text{dyskretne spójniki}$$

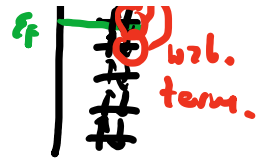
Rozkład Fermiego-Diraca

$$n_{\text{FD}}(\epsilon) = [\exp(\beta(\epsilon - \mu)) + 1]^{-1}$$

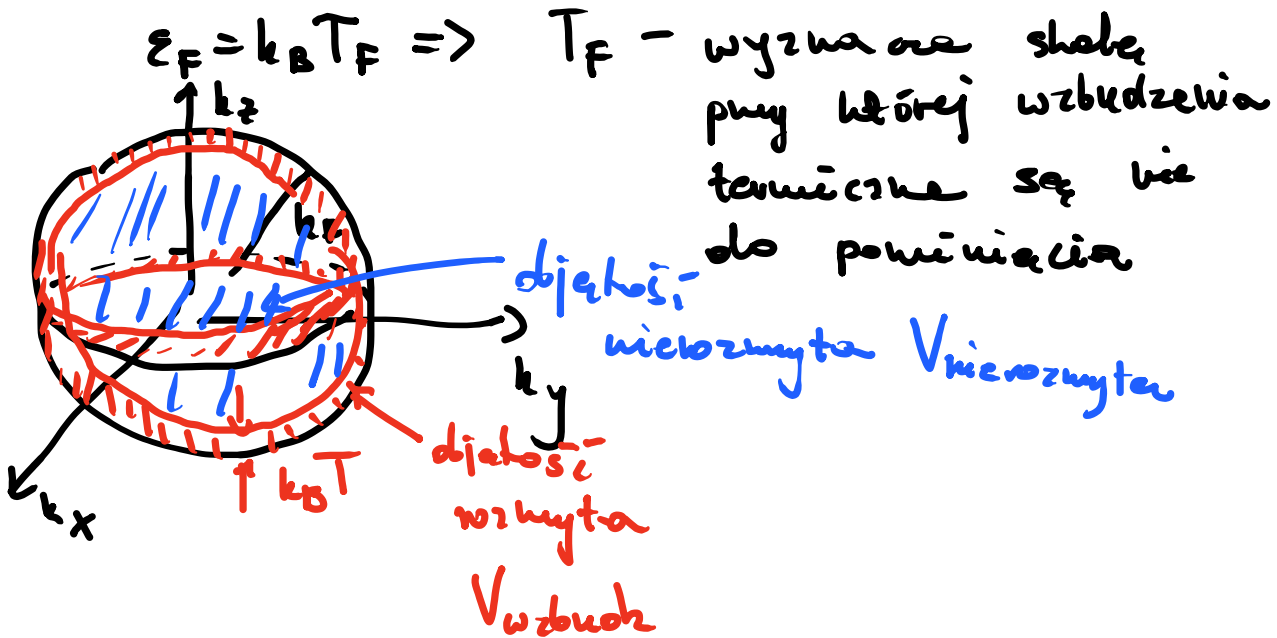


Wzbudzenia termiczne powodują rozmycie położenia poziomu Fermiego oraz ↑ =

pojawienie się w tym obszarze
 średniego obsadzenia $\langle n_{FD} \rangle < 1$.



w $T=0$ powierzchnia Fermiego jest
 ostra, w $T>0$ ulega rozmyciu



Gdy $V_{wzb} / V_{nierozmyta} \ll 1$, wtedy można stosować przybliżenie, że

$$T=0,$$

czyli objętość kuli w przestrzeni pędowej

$$V_{nierozmyta} \sim p_F^3 \sim \epsilon_F^{3/2} \sim T_F^{3/2}$$

$$V_{wzbudz} \sim V_{nierozmyta}(T_F+T) - V_{nierozmyta}(T_F-T) = \\ \sim (T_F+T)^{3/2} - (T_F-T)^{3/2},$$

czyli

$$V_{wzb} / V_{nierozmyt} \sim \left(1 + \frac{T}{T_F}\right)^{3/2} - \left(1 - \frac{T}{T_F}\right)^{3/2} \rightarrow 0,$$

gdy $T \ll T_F$

Rozkład Fermiego-Diraca mogą zastąpić klasyczną statystyką Boltzmann, gdy

$$n_{FD}(\epsilon) = [z^{-1} e^{\beta \epsilon} + 1]^{-1} \approx z e^{-\beta \epsilon},$$

gdy $z e^{\beta \epsilon} \gg 1$

porównując $z e^{\beta \epsilon}$ z rozkładem Maxwella-Boltzmann dostajemy, że

$$z \sim n \lambda_T^3, \text{ czyli}$$

gdy $z \ll 1$, wtedy mogą przybliżyć rozkład Fermiego-Diraca za pomocą statystyki Boltzmann, czyli gdy

$$n \ll 1 \text{ lub } \lambda_T \sim \frac{1}{\sqrt{T}} \ll 1, \text{ czyli}$$

gdy T - duże

Gęstość stanów

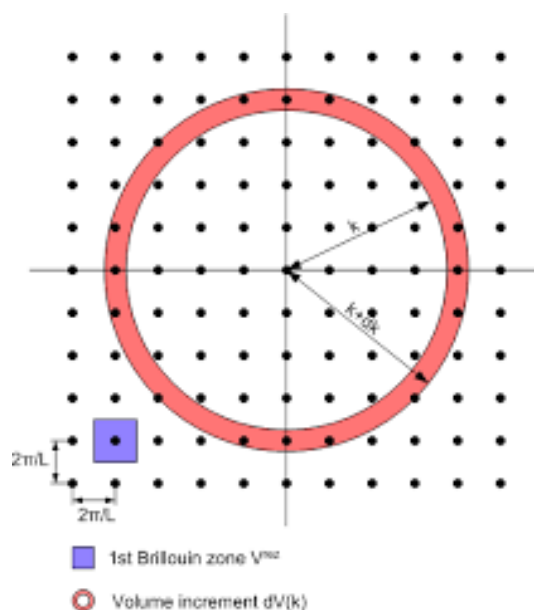
Gęstość stanów możemy wprowadzić i policzyć w alternatywny w stosunku do tego, co wprowadziliśmy na ćwiczeniach

z ćwiczeń wiemy, że

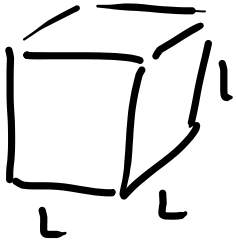
$$N = V \int d\epsilon g(\epsilon) n_{FD}(\epsilon)$$

przed przejściem do granicy termodynamicznej

$$N = \sum_{\text{deg. spinowe}} 2 n_{FD}(\epsilon_k),$$



gdzie $\vec{k} = \frac{2\pi}{L} (n_x, n_y, n_z)$ $n_i \in \mathbb{Z}$

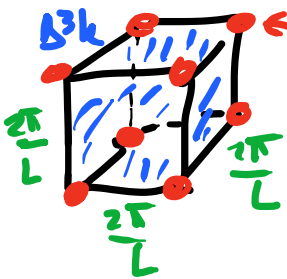


dla układu o $V = L^3$
 oraz periodycznych warunków
 brzegowych

odległość między kolejnymi stanami pędowymi
 dla danej składowej wynosi

$$\Delta k_i = \frac{2\pi}{L} \quad \left[\begin{array}{l} \text{na wysokości wyżej} \\ \text{kropki to odpowiednie stany pędowe} \end{array} \right]$$

Na jeden stan w przestrzeni pędowej
 przypada objętość $\Delta^3 k = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$



stan pędowy jest idę 8, ale każdy
 przynależy do $\Delta^3 k$ w 1/8, czyli

Gęstość stanów w przestrzeni
 pędowej wynosi $g_k = \frac{1}{\Delta^3 k} = \frac{L^3}{(2\pi)^3} = \frac{V}{(2\pi)^3}$

W granicy termodynamicznej $L \rightarrow \infty$,

czyli $\Delta k_i \rightarrow 0$, a więc możemy
 zamienić na całkę (procedura Riemanna)

$$N = 2 \sum_{k_x, k_y, k_z} 1 \cdot n_{FD}(\epsilon_k) = 2 \sum_{k_x, k_y, k_z} \frac{V}{(2\pi)^3} \Delta^3 k n_{FD}(\epsilon_k),$$

\nearrow k_x, k_y, k_z
 deg. spinowe
 czynniki

$$n = \frac{N}{V} = \lim_{\infty} \sum_{k_x, k_y, k_z} \frac{2}{(2\pi)^3} \Delta^3 k n_{FD}(\epsilon_k) =$$

, bsp.

$$= 2 \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} n_{FD}(\epsilon_k) = \left\{ k = |\vec{k}| \right\} = \downarrow \text{stany}$$

$$= 2 \int_0^\infty \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} n_{FD}(\epsilon_k) = \left\{ \begin{array}{l} \text{zmienna} \\ \text{zmiennych} \\ \epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{array} \right\} =$$

$$= \int_0^\infty 2 \frac{1}{2\pi^2} \frac{\sqrt{2m\epsilon}}{\hbar^2} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \epsilon^{1/2} n_{FD}(\epsilon) d\epsilon =$$

$$= 2 \int_0^\infty \frac{1}{2\pi^2} \frac{\sqrt{2m\epsilon}}{\hbar^3} \epsilon^{1/2} n_{FD}(\epsilon) d\epsilon = \int_0^\infty g(\epsilon) n_{FD}(\epsilon) d\epsilon,$$

czyli $g(\epsilon) = \frac{2}{2\pi^2} \frac{\sqrt{2m\epsilon}}{\hbar^3} \epsilon^{1/2}$

log. spinowa.

Możemy to zapisać symbolicznie jako

$$g(\epsilon) = \sum_{\sigma} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \delta(\epsilon - \epsilon_k)$$

Z drugiej strony, jeżeli

$V_{ped}(E)$ będzie objętością kuli

w przestrzeni pędowej o promieniu $p = \sqrt{2mE}$

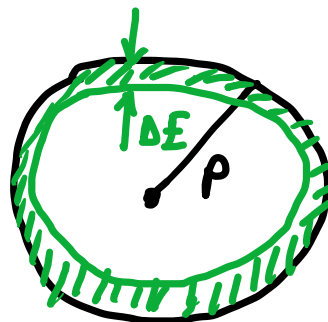
wtedy ilość stanów pędowych

związanych z objętością

powłoki związanej z ΔE

wynosi

$$g(E) \Delta E \sim \frac{dV_{ped}(E)}{dr} \Delta E$$



dE

Dla gazu relatywistycznego możemy rozważyć dwa przypadki graniczne:

$$\varepsilon_k = \sqrt{(pc)^2 + (mc^2)^2}, \text{ gdzie } p = \hbar k$$

- granica nierelatywistyczna
 $mc^2 \gg pc$

$$\varepsilon_k = mc^2 \sqrt{1 + \left(\frac{pc}{mc^2}\right)^2} \approx mc^2 + \frac{p^2}{2m} + \dots$$

- granica ultrarelatywistyczna
 $mc^2 \ll pc$

$$\begin{aligned} \varepsilon_k &= pc \sqrt{1 + \left(\frac{mc^2}{pc}\right)^2} = pc \left(1 + \left(\frac{mc^2}{pc}\right)^2 \frac{1}{2} + \dots\right) = \\ &= pc + \frac{m^2 c^4}{2pc} + \dots \end{aligned}$$

N zerowej temperaturze $n_{FD}(\varepsilon) \rightarrow \theta(\varepsilon_F - \varepsilon)$

w połączeniu z powyższymi rozwinięciami pozwala to na zbadanie gazu fermionów w zerowej temperaturze.