PODSTAWY FIZYKI IV

2.06.2020

Ćwiczenia #14

▶ KWANTOWE GAZY DOSKONAŁE

• Kwantowy wielki zespół kanoniczny

Ustalamy T, V, μ jako makroskopowe parametry termodynamiczne. Jeżeli hamiltonian N cząstkowy to $\hat{H}_N$, wtedy

$$\hat{H}_N |N,i\rangle = E_{N,i} |N,i\rangle ,$$

gdzie $|N,i\rangle$ to N cząstkowy stan własny układu o energii $E_{N,i}$.

Prawdopodobieństwo, że układ znajduje się w stanie energetycznym $E_{N,i}$ o N cząstkach wynosi

$$p_{N,i} = \exp\left(-\beta[E_{N,i}-\mu N]\right)/\Xi(T,V,\mu), \quad \sum_N \sum_i p_{N,i} = 1 \qquad (14.1.)$$

gdzie z warunku normalizacji otrzymujemy wielką sumę statystyczną { kolejność sumowania ma znaczenie

$$\Xi(T,V,\mu) = \sum_N \sum_i e^{-\beta(E_{N,i}-\mu N)} \qquad (14.2)$$

Wielka suma statystyczna jest związana z wielkim potencjałem termodynamicznym w następujący sposób:

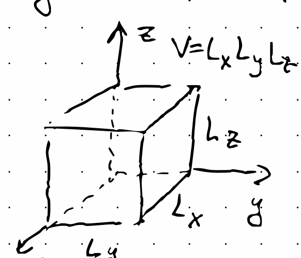
$$\Omega(T,V,\mu) = -pV = -k_B T \ln \Xi(T,V,\mu) \qquad (14.3)$$

• Kwantowe gazy doskonałe

Hamiltonian N-cząstkowy gazu doskonałego ma postać:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_i \Delta_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_i \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}\right) = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_i^0 ,$$

gdzie $\hat{H}_i^0 |k\rangle = \varepsilon_k |k\rangle$, $|k\rangle$ to stan jednocząstkowy.



Nakładamy periodyczne warunki brzegowe, wtedy

$$\psi_k(0,y,z) = \psi_k(L_x,y,z), \quad \text{(analogicznie dla pozostałych kierunków)}$$

gdzie $\psi_k(x,y,z) = \langle x,y,z|k\rangle = \langle \vec{r}|k\rangle$,
przy czym wektor stanu $|k\rangle = |\vec{p}, s_z\rangle$ składa się z pędu $\vec{p}$ i z-towej składowej spinu s_z, wtedy

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 \vec{q}^{\,2}}{2m}, \quad \vec{q} = (q_x, q_y, q_z) = \left(\frac{2\pi}{L_x} n_x, \frac{2\pi}{L_y} n_y, \frac{2\pi}{L_z} n_z\right),$$

gdzie $\vec{q}$ to wektor falowy $\vec{p} = \hbar\vec{q}$, a $n_i \in \mathbb{Z}$ (porównaj z problemem cząstki w poruszającej się po torusie z Mechaniki kwantowej).

Będziemy korzystać z formalizmu liczby obsadzeń, tzn. zamiast posługiwać się N-cząstkową funkcją falową stan układu określimy poprzez zestaw liczb obsadzeń mówiących ile cząstek znajduje się danym jednocząstkowym stanie energetycznym, czyli

n_k – liczba cząstek obsadzających jednocząstkowy stan $|k\rangle = |\vec{p}, s_z\rangle$.

Dla fermionów $n_k = 0,1$ z powodu antysymetrii funkcji falowej ze względu na przestawianie cząstek (cząstki są nierozróżnialne), czyli tzw. zakaz Pauliego.
Dla bozonów $n_k = 0,1,2,3,\ldots$
Jeżeli w układzie jest N cząstek, wtedy $N = \sum_k n_k$, oraz $E_{N,i} = \sum_k n_k \varepsilon_k$, wtedy

$$\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_k\}}{}' \, z^N e^{-\beta \sum_k n_k \varepsilon_k},$$

gdzie $\sum'$ oznacza, że sumowanie przebiega przy ograniczeniu $\sum_k n_k = N$, $z = \exp(\beta\mu)$ to tzw. aktywność (nie mylić z aktywnością w roztworach rzeczywistych), wtedy

$$\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_k\}}{}' \, z^N e^{-\sum_k n_k \varepsilon_k} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_k\}}{}' \, e^{-\beta \sum_k (\varepsilon_k - \mu) n_k} =$$

$$=\sum_{N=0}^{\infty}\sum_{\{n_k\}}{}' \prod_k e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)n_k} = \sum_{\{n_k\}}\prod_k e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)n_k} =$$

$$=\sum_{n_1}\sum_{n_2}\sum_{n_3}\dots e^{-\beta(\varepsilon_1-\mu)n_1}\, e^{-\beta(\varepsilon_2-\mu)n_2}\cdot\ldots =$$

$$=\prod_k \underbrace{\sum_{n_k} e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)n_k}} = \prod_k\left(1 \mp e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}\right)^{\mp 1},$$

bozony (górne znaki), fermiony (dolne znaki)

dla fermionów suma ta ma tylko dwa wyrazy
dla bozonów jest to szereg geometryczny
(przy czym aby szereg był zbieżny $\forall_k\ \mu<\varepsilon_k$, gdy spełnione jest $\mu<\varepsilon_0$, wtedy spełnione jest dla dowolnego stanu).

Otrzymujemy, więc

$$\boxed{\Omega(T,V,\mu) = -pV = \pm k_B T \sum_k \ln\left(1 \mp z e^{-\beta\varepsilon_k}\right)} \qquad (14.4.)$$

bozony (górne znaki), fermiony (dolne znaki)

Średnie obsadzenie stanu $|k\rangle$ wynosi:

$$\langle n_k\rangle = \frac{\sum_{N=0}^{\infty}\sum_{\{n_i\}}{}' n_k e^{-\beta\left(\sum_\ell(\varepsilon_\ell-\mu)n_\ell\right)}}{\sum_{N=0}^{\infty}\sum_{\{n_i\}}{}' e^{-\beta\left(\sum_\ell(\varepsilon_\ell-\mu)n_\ell\right)}} = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\varepsilon_k}\ln\Xi =$$

$$= -k_B T \frac{\partial}{\partial \varepsilon_k}\left[\mp\sum_\ell \ln\left(1\mp z e^{-\beta\varepsilon_\ell}\right)\right] =$$

$$= -k_B T(\mp 1)\,\frac{(\mp 1)(-1)\beta e^{-\beta\varepsilon_k} z}{1\mp z e^{-\beta\varepsilon_k}},$$

czyli

$$\boxed{\langle n_k\rangle = \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon_k}\mp 1} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)}\mp 1}} \qquad (14.5.)$$

ze znakiem „−" otrzymujemy statystykę Bosego-Einsteina, a ze znakiem „+" otrzymujemy statystykę Fermiego-Diraca.

W otrzymywanych sumach możemy zamienić dyskretne sumowanie na całkę Riemanna, gdy:

$$\frac{1}{\lambda_T}\frac{\lambda_T}{L_i}\sum_{n_i\in\mathbb{Z}}\underbrace{\varphi}_{\text{pewne funkcje}}\left(\frac{\lambda_T}{L_i}n_i\right)\xrightarrow[\frac{\lambda_T}{L_i}\to 0]{}\frac{1}{\lambda_T}\int_{\mathbb{R}}\varphi(x_i)\,dx_i\,,$$

wektor falowy $x_i = \frac{q_i\lambda_T}{2\pi}$

gdzie $\lambda_T=\frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$ to termiczna długość fali de Brogile'a. Na przykład:

$$\frac{\langle N\rangle}{V}=\frac{1}{L_xL_yL_z}\sum_{\vec q}\sum_{s_z}\frac{1}{\exp\left(\beta\left(\frac{\hbar^2q^2}{2m}-\mu\right)\right)\mp1}=\left\{\begin{array}{c}\text{sumowanie po spinach daje}\\ \text{degenerację spinową}\\ g_s=2s+1\end{array}\right\}=$$

$$=\frac{g_s}{L_xL_yL_z}\sum_{n_x}\sum_{n_y}\sum_{n_z}\left[\exp\left(\beta\left[\frac{\hbar^2(2\pi)^2}{2m}\left\{\left(\frac{n_x}{L_x}\right)^2+\left(\frac{n_y}{L_y}\right)^2+\left(\frac{n_z}{L_z}\right)^2\right\}-\mu\right]\right)\mp1\right]^{-1}=$$

$$=\frac{g_s}{L_xL_yL_z}\sum_{n_x}\sum_{n_y}\sum_{n_z}\left[\exp\left(\pi\left\{\left(\frac{\lambda_T}{L_x}\right)^2n_x^2+\left(\frac{\lambda_T}{L_y}\right)^2n_y^2+\left(\frac{\lambda_T}{L_z}\right)^2n_z^2\right\}-\beta\mu\right)\mp1\right]^{-1}\longrightarrow$$

$$\xrightarrow[\frac{\lambda_T}{L_i}\to 0]{}\frac{g_s}{\lambda_T^3}\int_{\mathbb{R}}dx\int_{\mathbb{R}}dy\int_{\mathbb{R}}dz\,\frac{1}{e^{\pi(x^2+y^2+z^2)-\beta\mu}\mp1}=\left\{q_i=\frac{2\pi x_i}{\lambda_T}\right\}=$$

czyli gdy $T\to 0$

$$=\frac{g_s}{(2\pi)^3}\int_{\mathbb{R}}d^3\vec q\,\frac{1}{\exp\left(\frac{\beta\hbar^2}{2m}\vec q^{\,2}-\beta\mu\right)\mp1}\,,$$

W ogólności

$$\sum_{\vec q}\varphi(\vec q)=\underbrace{\frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3\vec q\,\varphi(\vec q)}_{\text{wkład objętościowy}}+\underbrace{V^{2/3}[\ldots]}_{\text{wkład powierzchniowy}}+\underbrace{V^{1/3}[\ldots]}_{\text{wkład krawędziowy}}$$

czyli $$\lim_{\infty} \frac{1}{V}\sum_{\vec{q}} \varphi(\vec{q}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\vec{q}\; \varphi(\vec{q}) \qquad (14.6.)$$

- Granica klasyczna

Niech $$\frac{\langle N\rangle}{V} = \frac{1}{V}\int dN_{\vec{p}}\,,$$

wtedy $$\frac{1}{V}\, dN^{kwant}_{\vec{p}} = \frac{g_s}{h^3}\,\frac{d^3\vec{p}}{\exp\left(\frac{\beta \vec{p}^{\,2}}{2m}\right) z^{-1} \mp 1}$$ dla statystyk kwantowych

oraz $$\frac{1}{V}\, dN^{klas}_{\vec{p}} = \frac{n}{(2\pi m k_B T)^{3/2}}\, e^{-\beta \vec{p}^{\,2}/2m}\, d^3\vec{p}$$ dla statystyki klasycznej

czyli gdy $$\frac{1}{V}\, dN^{kwant}_{\vec{p}} \xrightarrow[z \ll 1]{} \frac{g}{h^3}\, e^{-\beta \vec{p}^{\,2}/2m}\, z\, d^3\vec{p}\,,$$

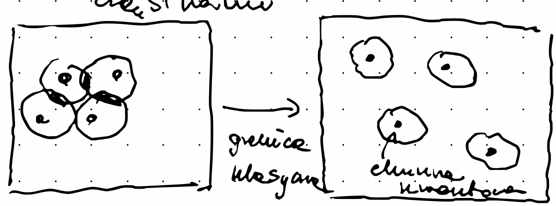
zatem utożsamienie $\frac{1}{V} dN^{klas}_{\vec{p}} = \frac{1}{V} dN^{kwant}_{\vec{p}}$ prowadzi do warunku

$$z = \frac{n\lambda_T^3}{g} \qquad (14.7.)$$

$$n\lambda_T^3 = \frac{\langle N\rangle}{V}\lambda_T^3 = 1\Big/\left(\left(\frac{V}{\langle N\rangle}\right)^{1/3}\frac{1}{\lambda_T}\right)^3$$

średnia odległość między cząstkami

Średnia odległość między cząstkami musi być duża w porównaniu z λ_T, czyli wielkości chmury kwantowej reprezentującej cząstkę.



Gdy chmury nie przykrywają się dostajemy rozkład klasyczny (Maxwell-Boltzmann). Gdy chmury kwantowe przykrywają się dostajemy rozkład Fermiego-Diraca lub Bosego-Einsteina.

ZADANIA

1. Gęstość stanów $g(\varepsilon)$ jest funkcją opisującą liczbę dostępnych stanów kwantowych na jednostkę

energii. Dla swobodnych fermionów ($\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$) o spinie σ oblicz gęstości stanów w granicy termodynamicznej dla $d=1,2$ i 3, gdzie d to wymiarowość problemu. Porównaj zależność $g(\varepsilon)$ od ε w tych przypadkach.

Rozwiązanie:

Zgodnie z równaniem (14.6) mamy, że dla d wymiarowego problemu:

pewna funkcja

$$\lim_{\infty} \frac{1}{V} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}} \varphi(\vec{k}) = \underset{\substack{\| \\ (2\sigma+1)}}{g_\sigma} \int \frac{d^d \vec{k}}{(2\pi)^d} \varphi(\vec{k})$$

Korzystając z relacji dyspersji $\varepsilon = \varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ możemy dokonać zamiany zmiennych w powyższym wyrażeniu, wtedy

$$g_\sigma \int \frac{d^d \vec{k}}{(2\pi)^d} \varphi(\vec{k}) = \int d\varepsilon \, g(\varepsilon) \varphi(\varepsilon),$$

gdzie $g(\varepsilon)$ to liczba stanów pędowych przypadająca na zakres $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$, co poprzez porównanie prowadzi do relacji:

$$g(\varepsilon) = g_\sigma \int \frac{d^d \vec{k}}{(2\pi)^d} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}})$$

we współrzędnych sferycznych mamy:

$$d^d \vec{k} = \begin{cases} 2dk & \text{dla } d=1 \\ 2\pi k \, dk & \text{dla } d=2 \\ 4\pi k^2 dk & \text{dla } d=3 \end{cases} \qquad (k = |\vec{k}|)$$

W przypadku $d=1$ czynnik 2 bierze się stąd, że wektor falowy może być dodatni i ujemny, a w naszym przypadku $k \geq 0$.

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \implies k = \frac{\sqrt{2m\varepsilon_k}}{\hbar} \implies dk = \left(\frac{m}{2\hbar^2 \varepsilon_k}\right)^{1/2} d\varepsilon_k$$

czyli

$$g(\varepsilon)=\begin{cases} \frac{g_\sigma}{2\pi}\int_0^\infty 2\delta(\varepsilon-\varepsilon_k)\left(\frac{m}{2\hbar^2\varepsilon_k}\right)^{1/2}d\varepsilon_k = g_\sigma\frac{\sqrt{2m}}{2\pi\hbar}\varepsilon^{-1/2} & \text{dla } d=1 \\ \frac{g_\sigma 2\pi}{(2\pi)^2}\int_0^\infty \delta(\varepsilon-\varepsilon_k)\frac{\sqrt{2m\varepsilon_k}}{\hbar}\left(\frac{m}{2\hbar^2\varepsilon_k}\right)d\varepsilon_k = g_\sigma\frac{m}{2\pi\hbar^2} & \text{dla } d=2 \\ \frac{g_\sigma}{(2\pi)^3}\int_0^\infty \delta(\varepsilon-\varepsilon_k)4\pi\frac{2m\varepsilon_k}{\hbar^2}\left(\frac{m}{2\hbar^2\varepsilon_k}\right)^{1/2}d\varepsilon_k = g_\sigma\frac{\sqrt{2m^3}}{2\pi^2\hbar^3}\varepsilon^{1/2} & \text{dla } d=3 \end{cases},$$

czyli $g_{1D}(\varepsilon)\sim\varepsilon^{-1/2}$, $g_{2D}(\varepsilon)\sim\varepsilon^0$, $g_{3D}(\varepsilon)\sim\varepsilon^{1/2}$

2. Bardziej realistyczne modele ciała stałego niż model Einsteina konstruujemy przyjmując, iż ciało stałe może być traktowane jako układ $3N$ niezależnych, jednowymiarowych i rozróżnialnych oscylatorów o częstości z przedziału $[\omega,\omega+d\omega]$. Zgodnie z teorią Debye'a:

$$\tilde{g}(\omega)=\begin{cases}\frac{3V}{2\pi^2 v_0^3}\omega^2, & \text{gdy } \omega\le\omega_{max} \\ 0, & \text{gdy } \omega>\omega_{max}\end{cases}$$

gdzie v_0 jest „średnią" prędkością dźwięku określoną ze związku:

$$\frac{1}{v_0^3}=\frac{1}{3}\left(\frac{1}{v_l^3}+\frac{2}{v_t^3}\right),$$

gdzie v_t to prędkość fal poprzecznych, a v_l jest prędkością fal podłużnych, zaś wartość ω_{max} wynika ze związku

$$\int_0^{\omega_{max}} \tilde{g}(\omega)\,d\omega = 3N$$

Wyznaczyć ciepło właściwe c_V ciała stałego zgodnie z tą teorią. Zbadać przypadek $T\gg T_D$ oraz

$T \ll T_D$, gdzie $T_D = \hbar\omega_{max}/k_B$ jest temperaturą Debye'a. Układ znajduje się w kontakcie z termostatem o temperaturze T.

Rozwiązanie:

Kwantami kolektywnych drgań sieci są tzw. fonony. Podobnie jak fotony mają one zerowy potencjał chemiczny oraz dla fononów akustycznych (patrz wykład) relacja dyspersji jest liniowa, tj. $\omega = v k$. W ogólności fale w krysztale mogą mieć 3 polaryzacje - dwie poprzeczne i jedną podłużną, przy czym prędkości dźwięku dla tych dwóch rodzajów dźwięku mogą być różne.

liczba drgań normalnych o częstościach pomiędzy ω, a $\omega + d\omega$

$$= \tilde{g}(\omega)d\omega = \sum_{\lambda} \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk$$

suma po polaryzacjach

analog indeksu spinowego

Korzystając z tego, że $\omega = v_\lambda k$ mamy:

prędkość dla danej polaryzacji

$$\tilde{g}(\omega)d\omega = \sum_{\lambda} \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \left(\frac{\omega}{v_\lambda}\right)^2 \frac{d\omega}{v_\lambda} =$$

$$\stackrel{\xi}{=} \frac{V}{2\pi^2}\left[\frac{2}{v_t^3} + \frac{1}{v_l^3}\right]\omega^2 d\omega, \text{ czyli}$$

dwie polaryzacje poprzeczne „t" i jedna podłużna „l"

$$\left\{ \frac{1}{v_0^3} = \frac{1}{3}\left[\frac{2}{v_t^3} + \frac{1}{v_l^3}\right] \right.$$

$$\tilde{g}(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 v_0^3}\omega^2$$, czyli tak jak w treści zadania.

Częstość maksymalną $\omega_{max} \equiv \omega_D$ zwaną częstością Debye'a wyznaczamy z warunku:

$$\int_0^{\omega_D} \tilde{g}(\omega)\,d\omega = \int_0^{\omega_D} \frac{3V}{2\pi^2 v_0^3}\,\omega^2 d\omega =$$

$$= \frac{V}{2\pi^2 v_0^3}\,\omega_D^3 = 3N \Rightarrow \quad \omega_D = \left(6\pi^2 n\right)^{1/3} v_0 ,$$

gdzie $n = N/V$. Powyższy warunek wynika stąd, że dla N atomów w krysztale istnieje $3N$ modów normalnych drgań.

Dla oscylatorów harmonicznych $\varepsilon_i = \hbar\omega_i (n_i + \frac{1}{2})$ o $\mu = 0$ mamy $(\sum_i n_i = N)$

$$\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}{}' e^{-\beta \sum_i \hbar\omega n_i - \beta \sum_i \hbar\omega_i \frac{1}{2}} =$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}{}' \prod_i e^{-\beta(\hbar\omega_i n_i - \frac{1}{2}\hbar\omega_i)} = \sum_{\{n_i\}} \prod_i e^{-\beta\hbar\omega_i (n_i + \frac{1}{2})} =$$

$$= \prod_i \Big[\sum_{n_i} \exp(-\beta\hbar\omega_i n_i)\Big] \exp\!\left(-\frac{\beta}{2}\hbar\omega_i\right) = \prod_i \frac{e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_i}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_i}} ,$$

czyli
$$\Omega = -kT_B \sum_i \ln\left(\frac{e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_i}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_i}}\right)$$

Ponadto korzystając z (14.1) i (14.2) otrzymujemy, że energia wewnętrzna wynosi:

$$U = \langle E_N \rangle = \frac{1}{\Xi} \sum_{N=0}^{\infty} \sum_j E_{N,j} \exp(-\beta(E_{N,j} - \mu N)) = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln \Xi ,$$

czyli
$$U = \frac{\partial}{\partial\beta}(\beta\Omega) = -\frac{\partial}{\partial\beta} \sum_i \ln\left(\frac{\exp(-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_i)}{1 - \exp(-\beta\hbar\omega_i)}\right) =$$

$$= -\sum_i \frac{1 \cancel{- e^{-y_i}}}{\cancel{e^{-y_i/2}}} \; \frac{(1 - e^{-y_i})\cancel{e^{-y_i/2}}(-\frac{1}{2}\hbar\omega_i) - \cancel{e^{-y_i/2}}(-)e^{-y_i}(-\hbar\omega_i)}{(1 - e^{-y_i})^{\cancel{2}}} =$$

$y_i = \beta\hbar\omega_i$

$$= \sum_i \left(\frac{1}{2}\hbar\omega_i + \hbar\omega_i \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_i} - 1}\right) = \sum_i \hbar\omega_i \left(\langle n_i \rangle + \frac{1}{2}\right)$$

Posługując się wyznaczoną gęstością stanów możemy zastąpić sumowanie całkowaniem:

$$\mathcal{U} = \frac{1}{2}\int d\omega\, \hbar\omega\, \tilde{g}(\omega) + \int d\omega \frac{\hbar\omega\, \tilde{g}(\omega)}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)-1} = \left\{ \tilde{g}(\omega) = 0 \text{ dla } \omega > \omega_D \right\}$$

$$= \frac{3V\hbar}{16\pi^2 v_0^3}\omega_D^4 + \frac{3V\hbar}{2\pi^2 v_0^3}\int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3 d\omega}{\exp(\beta\hbar\omega)-1}$$

pojemność cieplna wynosi:

$$C_V = \left(\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial T}\right)_{V,N} = \frac{3V\hbar^2}{2\pi^2 v_0^3 k_B T^2}\int_0^{\omega_D} \frac{\omega^4 e^{\beta\hbar\omega}}{\left(e^{\beta\hbar\omega}-1\right)^2} d\omega =$$

$$= \left\{ \begin{array}{l} \text{wprowadzamy} \\ T_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} \quad \text{i} \quad x = \hbar\beta\omega \end{array} \right\} = 9Nk_B\left(\frac{T}{T_D}\right)^3 \int_0^{T_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x-1)^2} dx$$

Dla $T \gg T_D$ mamy:

$$\int_0^{T_D/T} \frac{x^4 e^x}{\underbrace{(e^x-1)^2}_{1+x-1+\ldots}} \simeq \int_0^{T_D/T} \frac{x^4}{x^2} dx = \frac{1}{3}\left(\frac{T_D}{T}\right)^3, \text{ czyli } C_V = 3Nk_B$$

(prawo Dulonga-Petita)

Dla $T \ll T_D$ mamy:

$$\frac{1}{n}C_V = c_V$$

$$c_V \overset{\{n = \frac{N}{N_A},\ k_B N_A = R\}}{=} 9R\left(\frac{T}{T_D}\right)^3 \left\{ \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{x^4 e^x}{(e^x-1)^2} dx}_{\frac{4}{15}\pi^4} + \mathcal{O}\left(\frac{T}{T_D}\right) \right\} \simeq \frac{12}{5}R\left(\frac{T}{T_D}\right)^3$$

zanik potęgowy

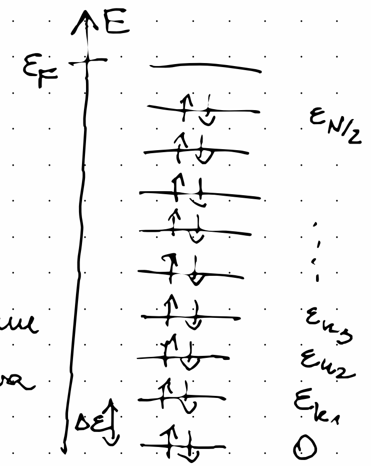
Dla modelu Einsteina (porównaj ćwiczenia #12 i #13):

$$c_V \xrightarrow[T\to 0]{} 3k_B\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)^2 e^{-\hbar\omega/k_BT}$$

zanik wykładniczy

(3) Rozwiązać zagadnienie gazu N nieoddziałujących elektronów w $T=0$. Wypisać stan podstawowy dla tego układu i znaleźć energię stanu podstawowego. Policzyć ciśnienie tego gazu i porównać je z wynikiem dla gazu doskonałego. Co ten wynik mówi nam o stabilności gazu nieoddziałujących elektronów?

<u>Rozwiązanie:</u>



Z powodu zakazu Pauliego N elektronów w gazie w $T=0$ zajmuje coraz wyższe stany energetyczne:

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Energia odpowiadająca najwyższemu zajmowanemu poziomowi nazywa się energią Fermiego (poziomem Fermiego).

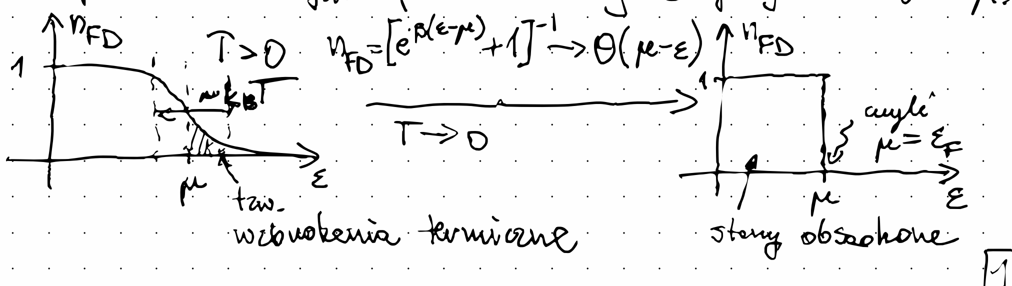
Stan podstawowy ($T=0$) dla takiego gazu nazywany morzem Fermiego $|FS; N\rangle$:

$$|FS; N\rangle = |0,\uparrow; 0,\downarrow; k_1,\uparrow; k_2,\downarrow; \ldots; k_{N/2},\uparrow; k_{N/2},\downarrow\rangle =$$

$$= |0,\uparrow\rangle \otimes |0,\downarrow\rangle \otimes |k_1,\uparrow\rangle \otimes \ldots \otimes |k_{N/2},\uparrow\rangle \otimes |k_{N/2},\downarrow\rangle$$

stan iloczynowy

Nim przejdziemy do obliczeń zwrócimy uwagę, że rozkład Fermiego dla $T=0$ (tzn. gazu silnie zdegenerowanego) ma postać funkcji schodkowej z progiem dla $\varepsilon=\mu$:



Z równania (14.4) wiemy, że

$$\Omega = -k_B T \sum_{\vec{k},\sigma} \ln\left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}\right)$$

Całkowita liczba cząstek:

$$N = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{T,V} = +k_B T \sum_{\vec{k},\sigma} \frac{1}{e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}+1} e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)} \beta =$$

$$= \sum_{\vec{k},\sigma} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)}+1} = \sum_{\vec{k},\sigma} \langle n_{\vec{k}} \rangle$$

Zamieniając sumę na całkę otrzymujemy w granicy termodynamicznej (dla $d=3$):

$$n = \lim_{\infty} \frac{1}{V} \sum_{\vec{k},\sigma} \langle n_{\vec{k}} \rangle \underset{\substack{\text{wzór} \\ (14.6.)}}{=} \int d\varepsilon \, \underbrace{g(\varepsilon)}_{\text{patrz zad. 1}} \frac{1}{e^{+\beta(\varepsilon-\mu)}+1} =$$

$$= \int_0^\infty d\varepsilon \, 2 \frac{\sqrt{2m^3}}{2\pi^2\hbar^3} \varepsilon^{1/2} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} \xrightarrow[T\to 0]{} \int_0^\infty 2 \frac{\sqrt{2m^3}}{2\pi^2\hbar^3} \varepsilon^{1/2} \Theta(\mu-\varepsilon) \, d\varepsilon$$

$$= \int_0^\mu \frac{\sqrt{2m^3}}{\pi^2\hbar^3} \varepsilon^{1/2} d\varepsilon = \frac{2}{3} \mu^{3/2} \frac{2^{1/2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3},$$ czyli

udało nam się wyznaczyć wartość μ odpowiadającą wartości oczekiwanej elektronów w układzie równej N, czyli:

$$\mu = \varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m},$$ k_F – wektor falowy Fermiego

$$n = \frac{1}{3} \frac{\hbar^3 k_F^3}{(2m)^{3/2}} \frac{(2m)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \Rightarrow k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$$

Np. dla miedzi Cu: $n \simeq 8{,}47 \cdot 10^{28}\, m^{-3}$, wtedy

$$k_F \simeq 13{,}6 \cdot 10^9\, m^{-1} = 13{,}6\, nm^{-1}, \quad \varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \simeq 7 eV$$

z kolei temperatura Fermiego $T_F = \frac{\varepsilon_F}{k_B} = 10^5 K$, tzn. wiedź w temperaturze pokojowej bardzo dobrze jest przybliżana wynikiem dla $T=0$.

Analogicznie policzmy entropię:

$$+S = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right)_{V,\mu} \underset{\substack{\uparrow \\ \left\{dT = -\frac{1}{k_B\beta^2}d\beta\right\}}}{=} +k_B\beta^2\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \beta}\right)_{V,\mu} = -k_B\beta^2\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{1}{\beta}\sum_{\vec{k},\sigma}\ln\left(1+e^{-\beta(\varepsilon_{\vec{k}}-\mu)}\right) =$$

$$= +k_B\beta^2\beta^{-2}\sum_{\vec{k},\sigma}\ln\left(1+e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}\right) - k_B\beta\sum_{\vec{k},\sigma}\frac{-(\varepsilon_{\vec{k}}-\mu)}{e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)}+1} =$$

$$= k_B\sum_{\vec{k},\sigma}\ln\left(1+e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}\right) + k_B\beta\sum_{\vec{k},\sigma}\langle n_{\vec{k}}\rangle(\varepsilon_k-\mu)$$

Korzystając z tego, że $\Omega = U - TS - \mu N$ mamy, że energia wewnętrzna wynosi:

$$U = \Omega + TS + \mu N = -\frac{1}{\beta}\sum_{\vec{k},\sigma}\ln\left(1+e^{-\beta(\varepsilon_{\vec{k}}-\mu)}\right) + \frac{1}{\beta}\sum_{\vec{k},\sigma}\ln\left(1+e^{-\beta(\varepsilon_{\vec{k}}-\mu)}\right)$$

$$+\sum_{\vec{k},\sigma}\langle n_{\vec{k}}\rangle(\varepsilon_k-\mu) + \sum_{\vec{k},\sigma}\mu\langle n_{\vec{k}}\rangle = \sum_{\vec{k},\sigma}\langle n_{\vec{k}}\rangle\varepsilon_k,$$

czyli w granicy termodynamicznej:

$$u = \lim_{\infty}\frac{U}{V} = \int_0^\infty d\varepsilon\, g(\varepsilon)\frac{\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} \xrightarrow[T\to 0]{} \int_0^\infty d\varepsilon\, g(\varepsilon)\,\varepsilon\,\Theta(\mu-\varepsilon)$$

$$= \int_0^\mu d\varepsilon\, 2\frac{\sqrt{2m^3}}{2\pi^2\hbar^3}\varepsilon^{3/2}d\varepsilon = \frac{2}{5}\frac{\sqrt{2m^3}}{\pi^2\hbar^3}\mu^{5/2} = \frac{3}{5}\underbrace{\frac{2}{3}\frac{\sqrt{2m^3}}{\pi^2\hbar^3}\mu^{3/2}}_{n}\mu =$$

$$\underset{\substack{\uparrow \\ \mu=\varepsilon_F}}{=} \frac{3}{5}n\varepsilon_F \Longrightarrow \underline{\underline{U = \frac{3}{5}N\varepsilon_F}}$$

Liczymy ciśnienie:

$$U = \frac{3}{5} N \varepsilon_F = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2)^{2/3} n^{2/3} N =$$

$$= \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2)^{2/3} V^{-2/3} N^{5/3},$$

czyli

$$p = -\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_N = \frac{2}{5} \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2)^{2/3} n^{5/3} \underset{\text{dla Cu}}{=} 10^6 \text{ atm!}$$

ciśnienie Pauliego (wynika z zakazu Pauliego)

Dla gazu doskonałego:

$$p = \frac{N}{V} RT = nRT = 0, \text{ bo } T = 0$$

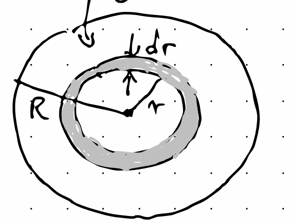
Wysokie ciśnienie wskazuje na niestabilność gazu elektronowego. Dopiero uwzględnienie oddziaływań między elektronami daje dobry wynik dla metali.

4) Gwiazdy ciągu głównego takie jak Słońce pozostają w równowadze dzięki równowadze pomiędzy ciśnieniem grawitacyjnym starającym się dokonać kolapsu gwiazdy, a ciśnieniem wywieranym przez promieniowanie produkowane w trakcie fuzji termojądrowej w jej wnętrzu. U kresu ich życia fuzja ustaje i zaczyna dominować grawitacja zgniatając je. Jeżeli dana gwiazda jest odpowiednio mało masywna ciśnienie Pauliego zdegenerowanego gazu elektronów w jej wnętrzu jest w stanie zrównoważyć ciśnienie grawitacyjne i zapobiec dalszemu kolapsowi. Powstała w ten sposób gwiazda jest nazywana białym karłem. Rozważmy prosty model takich gwiazd i przedyskutujemy ich stabilność.

a) Energia całkowita białego karła może być zapisana w postaci $E = \mathcal{U} + K$, gdzie K jest energią kinetyczną silnie zdegenerowanego gazu elektronów, a $\mathcal{U}$ jest grawitacyjną energią potencjalną gwiazdy. Przyjmując najprostszy model w którym gwiazda jest jednorodną kulą o promieniu R i masie M oblicz ile wynosi $\mathcal{U}$. Wnętrze białego karła składa się głównie z atomów takich jak C^{12}, O^{16}, etc., które zawierają równą liczbę protonów, neutronów i elektronów, czyli $M \simeq 2N m_p$, gdzie N jest liczbą elektronów, a m_p jest masą protonu ($m_n \simeq m_p$). Wzbudzenia termiczne dla zdegenerowanego gazu fermionów mogą zachodzić tylko w pobliżu powierzchni Fermiego, która dla olbrzymiej liczby fermionów jest porównywalna z wnętrzem morza Fermiego. Oznacza to, że możemy przybliżyć zdegenerowanych gazu elektronów w białym karle przyjmując, że jego temperatura wynosi zero (mimo iż temperatura powierzchni typowego białego karła wynosi 25000K!). Korzystając z tego przybliżenia oblicz K zakładając, że elektrony w tym przypadku są opisane relacją dyspersji $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$, gdzie m_e – masa elektronu.

Rozwiązanie:

$$\rho = \frac{M}{\frac{4}{3}\pi R^3} = \text{const}$$



• grawitacyjna energia potencjalna

$$\mathcal{U} = -\int_0^R \frac{G}{r}\left(\frac{4}{3}\pi \rho r^3\right)\left(4\pi r^2 \rho\, dr\right) =$$

$$= -\frac{16}{3}\pi^2 G \rho^2 \int_0^R r^4 dr = -\frac{16}{15}\pi^2 \rho^2 G R^5 =$$

$$= -\frac{3}{5}\frac{GM^2}{R}$$

• Energia kinetyczna zdegenerowanego gazu elektronów.

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{3\pi^2} k_F^3 \Rightarrow k_F = \frac{p_F}{\hbar} = (3\pi^2)^{1/3} \left(\frac{N}{V}\right)^{1/3}$$

Wprowadzamy oznaczenia: $p_F = \Lambda \left(\frac{N}{V}\right)^{1/3}$,

$\Lambda = (3\pi^2)^{1/3}\hbar$ ponadto $V = \frac{4}{3}\pi R^3$.

$$K = \frac{3}{5} \frac{V}{\Lambda^3} \frac{p_F^5}{2m_e} = \frac{3}{5} N \frac{\Lambda^2}{2m_e} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}, \text{ czyli}$$

Energia całkowita białego karła w funkcji promienia gwiazdy:

$$E(R) = \underbrace{\frac{A}{R^2}}_{K} - \underbrace{\frac{B}{R}}_{U}, \text{ gdzie } A = \frac{3}{20}\left(\frac{9\pi}{8}\right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{m_e}\left(\frac{M}{m_p}\right)^{5/3}$$

$$B = \frac{3}{5} G M^2$$

b) Znajdując minimum E białego karła znajdź równowagowy promień R_* takiej gwiazdy. Jak zależy promień w funkcji masy gwiazdy? Wyraź uzyskany wyniki przy pomocy masy Słońca $M_\odot$ i jego promienia $R_\odot$ w postaci $\frac{R_*}{R_\odot} = C \times f\left(\frac{M}{M_\odot}\right)$, gdzie C to stała liczbowa, a $f(\cdot)$ to pewna funkcja.

Rozwiązanie:

• Promień białego karła:

$$\left.\frac{dE}{dR}\right|_{R_*} = \left.\left(\frac{B}{R^2} - \frac{2A}{R^3}\right)\right|_{R_*} = 0 \Rightarrow R_* = \frac{2A}{B},$$

czyli $$R_* = \frac{(9\pi)^{2/3}}{8} \frac{\hbar^2}{m_e} \frac{1}{G m_p^{5/3} M^{1/3}},$$

korzystając z $M_\odot = 2 \times 10^{30}$ kg oraz $R_\odot = 7 \times 10^5$ kg mamy:

$$\frac{R_*}{R_\odot} = 0{,}010 \left(\frac{M_\odot}{M}\right)^{1/3},$$

czyli biały karzeł o masie naszego Słońca ma promień wynoszący 7000 km, co jest rzędu promienia Ziemi.

c) Im większą masę ma gwiazda tym większą muszą mieć energię kinetyczną elektrony w jej wnętrzu, aby zrównoważyć ciśnienie grawitacyjne. Oznacza to, że dla dostatecznie ciężkich gwiazd elektrony trzeba będzie traktować relatywistycznie, tj. $\varepsilon_k = \sqrt{\hbar^2 k^2 c^2 + m_e^2 c^4}$, gdzie c to prędkość światła. W przypadku ultrarelatywistycznym, tj. $p \gg m_e c$ uwzględniając dwa pierwsze wyrazy w rozwinięciu powyższego pierwiastka w ε_k oblicz energię kinetyczną K ultrarelatywistycznego silnie zdegenerowanego gazu elektronów.

Rozwiązanie:

petrz dalej
Energia kinetyczna skaluje się z masą $K \propto M^{4/3}$.
Energia kinetyczna zdegenerowanego gazu w przypadku ultrarelatywistycznym:

$$K = \frac{3V}{\Lambda^3}\int_0^{p_F} (p^2c^2 + m_e^2 c^4)^{1/2} p^2 dp \overset{p \gg m_e c}{\simeq} \frac{3V}{\Lambda^3}\int_0^{p_F}\left(p^3 + \frac{m_e^2c^2}{2}p + \dots\right)dp =$$

$$\simeq \frac{3}{4}\frac{Vc}{\Lambda^3}\left[p_F^4 + m_e^2c^2p_F^2 + \dots\right]$$

d) W przypadku ultrarelatywistycznym dla odpowiednio dużych mas gwiazdy M jej kolaps spowodowany ciśnieniem grawitacyjnym nie może zostać zrównoważony przez ciśnienie zdegenerowanego gazu w jej wnętrzu. Znajdź wartość masy krytycznej M_c przy której wygrywa przyciąganie grawitacyjne i wyraź ją przy pomocy masy Słońca $M_\odot$. Wynik ten jest nazywany granicą Chandrasekhara, przy czym w swojej oryginalnej pracy z 1931 roku

Chandrasekhar uwzględnił, że rozkład masy w realistycznej gwieździe nie jest jednorodny uzyskując tym samym wynik $M = 1.4\,M_{\odot}$. Wynik ten jest niezwykle ważny dla astronomii obserwacyjnej. Mając białego karła w układzie podwójnym z inną masywną gwiazdą następuje transfer masy w kierunku białego karła. Osiągając masę przewidywaną przez Chandrasekhara wybucha on dając początek supernowej Ia o ściśle określonej jasności (jasność supernowej zależy od masy wybuchającej gwiazdy). Oznacza to, że tego typu supernowa może być wykorzystana jako świeca standardowa za pomocą której można wyznaczyć odległość do takiego obiektu.

<u>Rozwiązanie:</u>

Energia całkowita w tym przypadku wynosi:

$$E(R) \simeq \frac{A-B}{R} + CR,$$

gdzie
$$A = \frac{3}{8}\left(\frac{9\pi}{8}\right)^{1/3} \hbar c \left(\frac{M}{m_p}\right)^{4/3}$$
$$B = \frac{3}{5} G M^2$$
$$C = \frac{3}{4}\,\frac{1}{(9\pi)^{1/3}}\,\frac{m_e^2 c^3}{\hbar}\left(\frac{M}{m_p}\right)^{2/3}$$

Gdy $A-B>0$ istnieje minimum $E(R)$, gdy $A-B<0$ nie istnieje minimum, czyli z warunku $A=B$ wyznaczamy masę krytyczną:

$$M_c = \frac{15}{64}(5\pi)^{1/2}\left(\frac{\hbar c}{G}\right)^{1/2}\frac{1}{m_p^2} = 1{,}72\,M_{\odot}$$

Gdy $M < M_c$ biały karzeł jest stabilny.