

Seria 6

Wielki zespół kanoniczny i gazy kwantowe

Zadanie 1

Powierzchnia adsorbenta, czyli czegoś co łapie cząsteczki, ma N_s miejsc, z których każde może uwięzić jedną cząsteczkę otaczającego gazu. Złapana cząsteczka ma wtedy energię $-\varepsilon$. Traktując gaz cząstek otaczających adsorbent jak rezerwuuar o temperaturze T i potencjale chemicznym μ , z którym to rezerwuarem adsorbent pozostaje w równowadze mogąc z nim wymieniać materię (cząsteczki) i energię, wyznaczyć stopień adsorpcji, tj. średnią liczbę $\bar{n}$ uwięzionych cząsteczek gazu oraz średnią kwadratową fluktuację σ_n^2 tej liczby. Podać wynik przyjmując, że gaz cząsteczek ma taki potencjał chemiczny $\mu(T, p)$, jak klasyczny jednoatomowy gaz doskonały o ciśnieniu p i temperaturze T .

Zadanie 2

Kwantowy gaz idealny

Rozważ układ N identycznych, nieoddziałujących cząstek z zadany Hamiltonianem $\hat{H}$

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m},$$

gdzie $\hat{\mathbf{p}}_i$ jest operatorem pędu i -tej cząstki, a m - jej masą. Jednocząstkowe poziomy energetyczne dane są wzorem $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / (2m)$, gdzie $\mathbf{k}$ jest wektorem falowym. Zależność $\mathbf{k}$ od dopuszczalnych liczb kwantowych zależy od warunków brzegowych; dla uproszczenia przyjmijmy periodyczne warunki brzegowe.

1. Stan układu jest jednoznacznie określony przez zbiór liczb obsadzeń $\{n_{\mathbf{k}}\}$, gdzie $n_{\mathbf{k}}$ oznacza liczbę cząstek o pędzie $\hbar \mathbf{k}$. Pokaż, że sumę statystyczną można zapisać w następujący sposób

$$Z(N, V, T) = \sum_{\{N_{\mathbf{k}}\}}' \exp \left(-\beta \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \right)$$

Jakie jest ograniczenie na powyższą sumę (oznaczone primem)?

2. Sumę statystyczną najłatwiej obliczyć w wielkim zespole kanonicznym. Pokaż, że można ją zapisać w postaci

$$\Xi(\mu, V, T) = \prod_{\mathbf{k}} \left[1 \mp e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} \right]^{\mp 1}.$$

W powyższym wzorze górny znak odpowiada fermionom a dolny bozonom.

3. Policz odpowiedni potencjał termodynamiczny i za jego pomocą wyznacz średnią liczbę cząstek $\langle N \rangle$. W szczególności pokaż, że $\langle N \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle$. Dla bozonów $\langle n_{\mathbf{k}} \rangle$ jest zadana rozkładem Bosego-Einsteina, dla fermionów $\langle n_{\mathbf{k}} \rangle$ jest dana rozkładem Fermiego-Diraca.
4. Pokaż, że ciśnienie ma postać

$$\beta p V = \pm \sum_{\mathbf{k}} \ln(1 \pm \langle n_{\mathbf{k}} \rangle),$$

gdzie znaki odpowiadają tym samym przypadkom co w poprzednim podpunkcie.

5. Pokaż, że $U = \frac{3}{2} p V$ zarówno dla bozonów jak i fermionów.

Zadanie 3

Kwantowe poprawki do gazu idealnego.

1. Pokróćce wyjaśnij dlaczego w granicy klasycznej zachodzi $\langle n_{\mathbf{k}} \rangle \ll 1$. W szczególności pokaż, że w tej granicy

$$\langle N \rangle = \sum_{\mathbf{k}} n_{\text{MB}}(\epsilon_{\mathbf{k}}),$$

gdzie n_{MB} jest rozkładem Maxwella-Boltzmanna.

2. Wyprowadź pierwszą kwantową poprawkę do równania stanu dla gazu idealnego, tzn.

$$\beta pV = \langle N \rangle \mp \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle^2 + \dots$$

Przeanalizuj otrzymany wynik osobno dla bozonów i fermionów.

3. Porównaj powyższy wynik z wirialnym równaniem stanu gazu klasycznego,

$$\beta p = \rho + B_2(T)\rho^2 + \dots,$$

gdzie $B_2(T) = (1/2) \int d\mathbf{r} \{1 - \exp[-\beta\phi(\mathbf{r})]\}$ jest drugim współczynnikiem wirialnym, a $\phi(\mathbf{r})$ oznacza potencjał oddziaływania międzycząsteczkowego.