Wykład 11

Rozkłady FD i BE

10.4 Entropia w kwantowej mechanice stat.

Przypomnijmy, że klasyczna entropia dla rozkładu prawdopodobieństwa danego przez funkcję $f(x)$ dana jest przez

$$S(f) = -\int f(x) \ln f(x) \, dx$$

Dla rozkładu dyskretnego $S(\{p\}) = -\sum_k p_k \ln p_k$

Stan kwantowy (mieszany) $\Rightarrow$ macierz gęstości

$$\rho = \sum_i p_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$$

$$\mathrm{Tr}\,\rho = 1 \Rightarrow \sum p_i = 1, \; p_i > 0$$

$\{p_i\}$ zadaje rozkład prawdopodobieństwa

Z rachunku funkcyjnego otrzymujemy, że

$$-\sum_i p_i \ln p_i = -\mathrm{Tr}(\rho \ln \rho)$$

Stąd

Entropia von Neumanna

$$S(\rho) = -\mathrm{Tr}(\rho \ln \rho)$$

11. Doskonałe gazy kwantowe

11.1. Bozony i fermiony

Dlaczego liczba mnoga? Bo cząstki nierozróżnialne dzielimy na bozony i fermiony.

Nierozróżnialność $\Rightarrow$ $|\psi(x_1, x_2)|^2 = |\psi(x_2, x_1)|^2$

$$\Rightarrow \quad \psi(x_1, x_2) = \pm \psi(x_2, x_1)$$

Bozony — symetryczne funkcje falowe

Fermiony — antysymetryczne funkcje falowe.

11.2. Bozonowe i fermionowe stany własne energii kinetycznej

Operator energii kinetycznej:

$$\hat{K} = \sum_{i=1}^{N} (-\Delta_{x_i})$$

rozważamy cząstki w pudle z periodycznymi warunkami brzegowymi $L^2(\Lambda)$

Fale płaskie (cz.) : $\Lambda = [0, L]^3$

$$u_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

$$k \in \frac{2\pi}{L} \mathbb{Z}^3$$

FAKT

Niech $\varphi_\pm(x_1,\dots,x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma\in S_N} (\pm 1)^{\operatorname{sgn}\sigma} u_{k_{\sigma(1)}}(x_1)\cdots u_{k_{\sigma(N)}}(x_N)$

permutacje

gdzie w przypadku fermionowym (−) musimy dodatkowo założyć, że $k_1 \neq k_2 \neq \dots \neq k_N$. Wtedy

$$\langle \varphi_\pm , \hat{K} \varphi_\pm \rangle = \sum_{i=1}^{N} \vec{k}_i^{\,2}$$

Jest to dość prosty rachunek, który opuścimy. Dla $N=2$ był liczony on na ćwiczeniach.

Powyższe stany nazywamy (anty-) symetrycznymi stanami produktowymi. W przypadku fermionów mówi się też wyznacznikami Slatera.

FAKT Powyższe $\{\varphi_\pm\}_{k_{i_1},\dots,k_{i_N} \in \frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}}$ stanowią bazę $\mathcal{H}_N^\pm$ N cząstkowej p-ni Hilberta bozonowej (+) / fermionowej (−))

Ten fakt prowadzi do tak ważnej reprezentacji liczby obsadzeń:

numerujemy bazę od 1 do ∞ (poprzez ustawienie w kolejności pędów).

Bozony:

$$\psi_+ \cong |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle$$

gdzie $n_i = 0, 1, 2, \dots$ i n_i mówi ile jest cząstek z pędem k_i (ile razy w $\psi_+(x_1, \dots, x_N)$ występuje k_i)

Fermiony:

$$\psi_- \cong |n_1, n_2, \dots\rangle$$ jak wyżej,

ALE $n_i = 0, 1.$ (zakaz Pauliego)

11.3. Rozkłady Bose-Einsteina i Fermiego-Diraca

Żeby poznać własności doskonałych gazów kwantowych, chcemy policzyć sumy statystyczne.

Kanonicznie:

$$Z_N = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H_N}$$

$$H_N = \sum_{i=1}^{N} (-\Delta_{x_i}), \quad \text{w} \quad L^2_{\text{sym/asym}}(\Lambda^N) \text{ z p.b.c.}$$

Z powyższych rozważań, wiemy jak wygląda baza: $\{\vec{e}_\alpha\}$ - zadaje tę bazę.

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_N} e^{-\beta H_N} = \sum_{\{\vec{k}_\alpha\}}{}' \exp\left(-\beta \sum_{\alpha=1}^{N} \varepsilon(\vec{k}_\alpha)\right) =$$

reprezentuje liczby obsadzeń

ograniczenie dla bozonów / fermionów N cząstek

$$= \sum_{\{n_k\}}{}' \exp\left(-\beta \sum_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k})\, n_{\vec{k}}\right)$$

$n_k = 0, 1, 2, \dots$ – bozony

$n_k = 0$ lub 1 – fermiony

oraz $\sum_k n_k = N$!

Wykonanie powyższych sum jest bardzo trudne (kombinatoryczne), można [illegible] tylko [illegible] przybliżenia.

Wyjście: zespół wielki kanoniczny

$$Q(T, V, \mu) = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta \mu N} \sum_{\{n_k\}}{}' \exp\left(-\beta \sum_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k})\, n_{\vec{k}}\right)$$

$$= \sum_{\{n_k\}} \exp\left(-\beta \sum_{\vec{k}} (\varepsilon(\vec{k}) - \mu)\, n_k\right) =$$

suma dowolna

$$= \sum_{\{n_k\}} \prod_k e^{-\beta(\varepsilon(\vec{k}) - \mu)\, n_k}$$

$$= \begin{cases} \prod_k \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon(\vec{k}) - \mu)}\right) & \text{fermiony} \\ \prod_k \left(1 - e^{-\beta(\varepsilon(\vec{k}) - \mu)}\right)^{-1} & \text{bozony} \end{cases}$$

Można to wspólnie zapisać jako:

$$\boxed{\ln Q(T,V,\mu) = \mp \sum_{\vec{k}} \ln\left(1 \mp e^{-\beta(\varepsilon(\vec{k})-\mu)}\right)}$$

Average number of particles:

$$\langle N \rangle = \frac{\partial \ln Q}{\partial(\beta\mu)} = \mp \sum_{\vec{k}} \frac{\mp e^{-\beta(\varepsilon(\vec{k})-\mu)}}{1 \mp e^{-\beta(\varepsilon(\vec{k})-\mu)}}$$

$$= \sum_{\vec{k}} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon(\vec{k})-\mu)} \mp 1} = \sum_{\vec{k}} \langle n_k \rangle$$

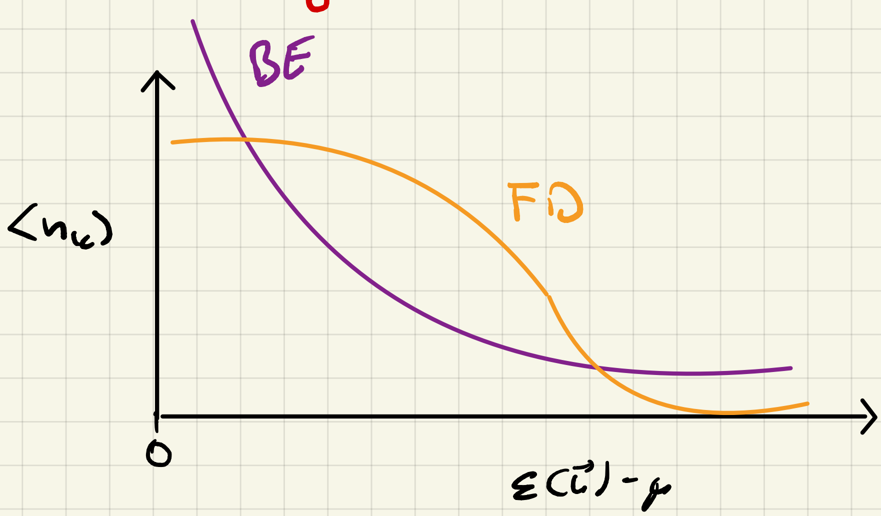
$$\Downarrow$$

$$\boxed{\langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon(\vec{k})-\mu)} \mp 1}}$$

oczekiwana liczba cząstek w stanie $\vec{k}$

Rozkłady Fermiego-Diraca (+) i Bosego-Einsteina (−)

$\mu < 0$



Wartość oczekiwana energii

$$\langle E \rangle = \sum_k \frac{\varepsilon(\vec{k})}{e^{\beta(\varepsilon(\vec{k})-\mu)} \mp 1} = \sum_k \varepsilon(\vec{k}) \langle n_k \rangle$$

11.4. Granica termodynamiczna

Chcąc rozważać układy o dodatniej gęstości musimy umieścić skończoną liczbę cząstek w skończonej objętości.

$$N, V, \qquad \frac{N}{V} = \rho$$

Granica termodynamiczna : $N, V \to \infty$: $\rho = \text{const}$

Jako, że $k = \frac{2\pi}{L} \mathbb{Z}$, $V = L^3$

$$\Rightarrow \frac{1}{V} \sum_k \xrightarrow[V \to \infty]{} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k$$

W szczególności, w granicy termodynamicznej mamy dla bozonów:

$$\frac{\langle N \rangle}{V} = \langle \rho \rangle \overset{V \gg 1}{\approx} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k}{e^{\beta(\varepsilon(\vec{k})-\mu)} - 1} \leq$$

$$\leq C \int_0^\infty \frac{k^2 \, dk}{\exp(\beta \varepsilon(\vec{k})) - 1} \leq \tilde{C}(\beta). \quad \text{Dziwne!}$$