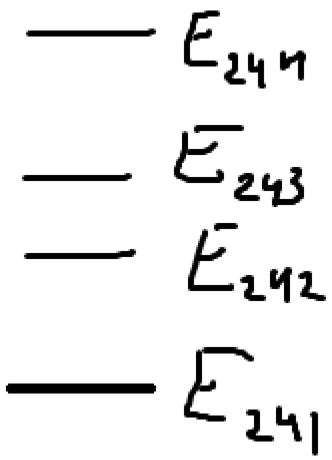
Переходим к квантовым системам!

1. Числа заполнения – чё это такое?

Да просто матожидание числа частиц на каком-то энергическом уровне.

В случае, когда спектр энергий непрерывен, концентрация частиц с энергией E равна $n(E) = const * \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{\theta}\right)}$. Пример: атмосфера, концентрация падает экспоненциально. (Отметим, что благодаря наличию μ, который мы можем менять, const можно не писать: $n(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{\theta}\right)}$).

Если у нас энергии квантуются, т.е. появляются дискретные уровни:



(между ними вовсе не обязательно одинаковое расстояние!)

То там распределение Больцмана чуть модифицируется:

Для бозе-частиц (сколько хошь на одном уровне): $n(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{\theta}\right)-1}$

А для Ферми (не более одной на 1 уровне!) $n(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{\theta}\right)+1}$

Чуть сменим обозначения, чтобы синхронизоваться с Квасом. Т.к. E у нас непроизвольная, а из списка уровней энергии $\{E_0, E_1, \dots, E_{241}, E_{242}, \dots\}$, то лучше писать $n(E_p)$ (n – номер уровня энергии), т.е. просто n_p. А вероятности, Это и есть числа заполнения.

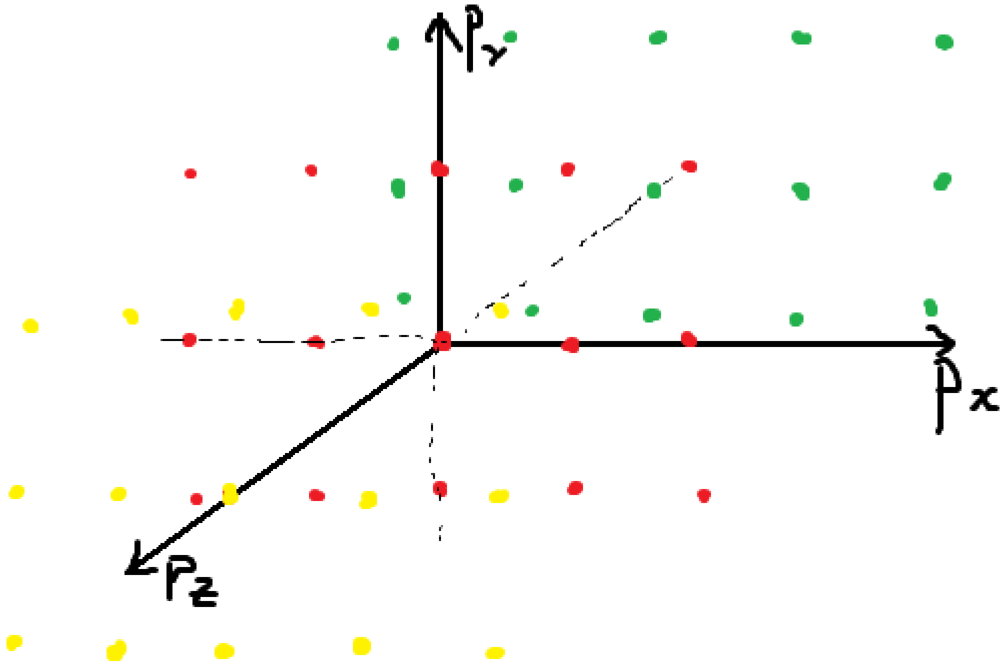
Замечание. Условие нормировки: $\sum_{n=0}^{+\infty} n_p = N$, где N – общее число частиц в объёме V – было бы верно, если бы у нас было бы просто каноническое распределение, где число частиц постоянно. Увы, у нас, как правило, распределение большое каноническое, что вызовет у нас в дальнейших формулах наличие химпотенциала μ, который будет нас бесить.

В этой методичке мы смотрим ферми-газы. Причём сперва мы их исследуем качественно и посмотрим на полученные результаты, а потом займёмся счётом.

2. Импульс и энергия Ферми – чё это такое. Случай $\theta=0$

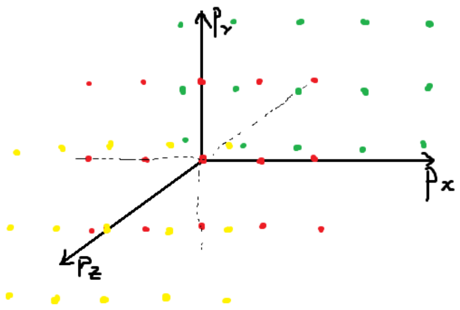
Коли у нас низкие температуры, то атомы стоят на месте, движутся только электроны.

Как вы знаете, электроны – квантовые частицы, какие подряд импульсы (в кристаллической решётке) они принимать не могут (всякие теоремы Блоха…). На рисунке ниже точками обозначены возможные состояния (значения импульсов):



Чем дальше частицы от центра, чем больше у них суммарный импульс $p = \sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}$. Частицы и рады были бы подсесть поближе к центру, но «местов нету». Аналогия с театром:  - зрители были бы рады сесть на первый ряд партера, но если их много, кому-то придётся быть в амфитеатре.

При θ=0 все электроны сидят как можно более плотно, образуя «сферу» в импульсном пространстве



. Эта сфера и называется сферой Ферми, а её квадрат её радиуса, поделённый на 2m – энергией Ферми. Так, если мы решим засунуть ещё один электрон, то ему придётся приобрести энергию именно Ферми. (Аналогия с театром – если явился опоздавший зритель, ему придётся сесть на последний заполненный ряд, он же первый свободный).

График из Квасникова:

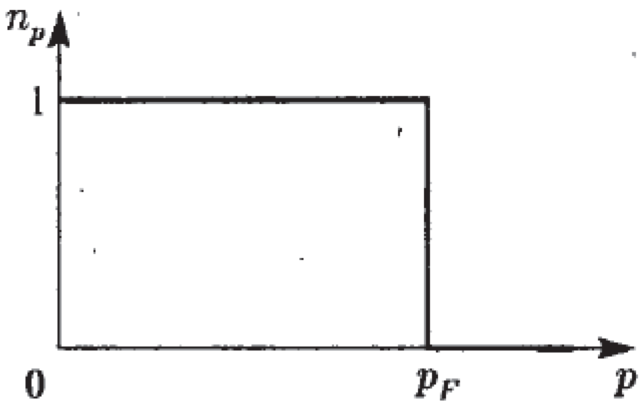


Рис. 39. Распределение чисел заполнения для идеальной ферми-системы при равной нулю температуре

Всё логично – при малых импульсах (и энергиях!) все уровни заняты (на каждом сидит электрон), а при больших свободны.

Формулы для p_F и ε_F:

$$p_F = \hbar\,(3\pi^2 n)^{1/3}$$

$$\varepsilon_F = \hbar^2(3\pi^2 n)^{2/3}/(2m),$$

Для электронного газамреальных металлов $\varepsilon_F \sim 10^5$ K..

Какой физический смысл этих формул? Чем больше концетрация частиц n, чем дальше и дальше «от сцены им приходится садиться» - тем больше импульсы им приходится иметь!

В дальнейшем мы эти формулы выведем.

Второй случай: $\boldsymbol{\theta > 0}$, но $\ll \boldsymbol{\varepsilon_F}$

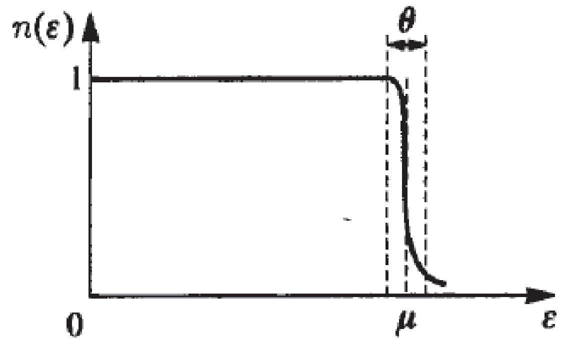


Рис. 42. Характер температурного размытия ферми-распределения при $\frac{\theta}{\mu} \ll 1$

Как мы видим, часть электронов, почувствовав приход температуры, пересела за сферу Ферми. А в театре часть зрителей отсела (но большинство осталось на своих местах).

3. Любуемся на формулы из Квасникова

Энергия, теплоёмкость и число частиц на единицу объёма при разных температурах:

$$\mathscr{E} = \sum_p E_p n_p = \frac{\gamma m^{3/2} V}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty \varepsilon^{3/2} \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/\theta} \mp 1}\, d\varepsilon$$

$$\mathscr{N} = \sum_p n_p = \frac{\gamma m^{3/2} V}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty \varepsilon^{1/2} \frac{1}{e^{\varepsilon-\mu/\theta} \mp 1}\, d\varepsilon$$

Мы их потом выведем, а пока что полюбуемся.

Заметим, что у нас именно большое каноническое распределение, т.е. число частиц в объёме V может быть разным (см. формулу выше) и зависит от хим.потенциала μ, который имеет смысл «привлекательности» объёма V для частиц. Продолжая аналогию с театром, –μ, есть интересность спектакля. Чем больше –μ, чем больше зрителей в объём V приходит и тем больше там число частиц и энергия в объёме V.

Как мы видим, основная сложность заточена в интеграле с параметрами ν и θ:

$$I_\nu = \int_0^\infty \varepsilon^\nu n(\varepsilon)\, d\varepsilon, \quad n(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/\theta} \mp 1}.$$

Они называются интегралами Ферми, или фермиевскими интегралами. При любой θ он не берётся, но можно рассматривать предельные случаи:

Приближение высоких температур:

$$pV = -\Omega = \frac{2}{3}\mathscr{E}.$$

$$\varepsilon = \frac{3}{2}\theta\left(1 \mp \frac{\pi^{3/2}\hbar^3}{2\gamma v(m\theta)^{3/2}} + \ldots\right),$$

$$c_{VN} = \frac{\partial\varepsilon}{\partial\theta} = \frac{3}{2}\left(1 \pm \frac{1}{2}\,\frac{\pi^{3/2}\hbar^3}{2\gamma v(m\theta)^{3/2}} + \ldots\right)$$

$$\frac{pv}{\theta} = \frac{2}{3}\,\frac{\varepsilon}{\theta} = 1 \mp \frac{\pi^{3/2}\hbar^3}{2\gamma v(m\theta)^{3/2}} + \ldots .$$

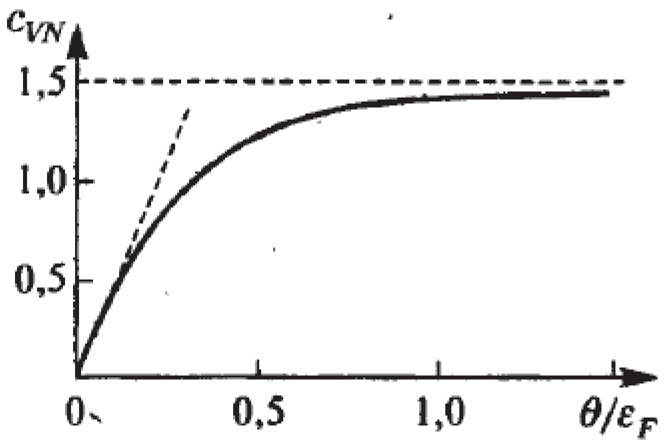
Вот это вот слагаемое $\frac{\pi^{3/2}\hbar^3}{2\gamma v(m\theta)^{3/2}}$ и обозначает «квантовую» поправку. Если бы у нас её не было, у нас был бы идеальный ***неквантовый*** газ. При θ->0 она стремится к 0, т.е. любой газ при сильном нагреве становится классическим, т.е. не квантовым.

Приближение низких температур:

$$pv = \frac{2}{3}\varepsilon = \frac{2}{5}\mu_0\left(1 + \frac{5}{12}\pi^2\left(\frac{\theta}{\mu_0}\right)^2 + \ldots\right)$$

$$c_{VN} = \frac{\partial\varepsilon}{\partial\theta} = \frac{\pi^2}{2}\,\frac{\theta}{\varepsilon_F}\left(1 + O\left(\left(\frac{\theta}{\varepsilon_F}\right)^2\right)\right)$$

Таким образом, при малых θ c_V прямо пропорционально θ, а при больших θ выходит на асимптоту:



А что там для E и N? Надо брать тот противный интеграл:

$$I_\nu = \int_0^\infty \varepsilon^\nu n(\varepsilon)\, d\varepsilon = \frac{\mu^{\nu+1}}{\nu+1}\left(1 + (\nu+1)\nu\,\frac{\pi^2}{6}\left(\frac{\theta}{\mu}\right)^2 + \ldots\right).$$

Тогда

$$\mathcal{N} = gVI_{1/2} = gV\cdot\frac{2}{3}\,\mu^{3/2}\left[1 + \frac{1}{8}\,\pi^2\left(\frac{\theta}{\mu}\right)^2 + \ldots\right]$$

$$\mathscr{E} = gVI_{3/2} = gV\cdot\frac{2}{5}\,\mu^{5/2}\left[1 + \frac{5}{8}\,\pi^2\left(\frac{\theta}{\mu}\right)^2 + \ldots\right]$$

$$\varepsilon = E/N = \frac{3}{5}\mu\left(1 + 5\frac{\pi^2}{8}\frac{\theta^2}{\mu^2} - \frac{\pi^2}{8}\frac{\theta^2}{\mu^2}\right) = \frac{3}{5}\mu\left(1 + \frac{\pi^2}{2}\frac{\theta^2}{\mu^2}\right)$$

Почти победа! Но у нас остался химпотенциал μ. Он зависит от θ ***как-то***. А как?

$$\mu(\theta, V, \mathcal{N}) = \mu_0\left(1 - \frac{1}{12}\,\pi^2\left(\frac{\theta}{\mu}\right)^2 + \ldots\right) = \mu_0\left(1 - \frac{1}{12}\pi^2\left(\frac{\theta}{\mu_0}\right)^2 + \ldots\right)$$

Тогда наконец получаем $\varepsilon = \frac{3}{5}\,\mu_0\left(1 + \frac{5}{12}\,\pi^2\left(\frac{\theta}{\mu_0}\right)^2 + \ldots\right)$ и

$$pv = \frac{2}{3}\,\varepsilon = \frac{2}{5}\,\mu_0\left(1 + \frac{5}{12}\,\pi^2\left(\frac{\theta}{\mu_0}\right)^2 + \ldots\right)$$

Заметим, что все эти формулы на полторы страницы – это всё приближения вот этих двух интегралов

$$\mathscr{E} = \sum_p E_p n_p = \frac{\gamma m^{3/2} V}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \varepsilon^{3/2}\frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/\theta} \mp 1}\, d\varepsilon$$

$$\mathcal{N} = \sum_p n_p = \frac{\gamma m^{3/2} V}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \varepsilon^{1/2}\frac{1}{e^{\varepsilon-\mu/\theta} \mp 1}\, d\varepsilon$$

, так что особой ценности их нет – просто математики своими математическими методами приближённо считали интегралы.

Глядеть на формулы из Квасникова можно долго. Но

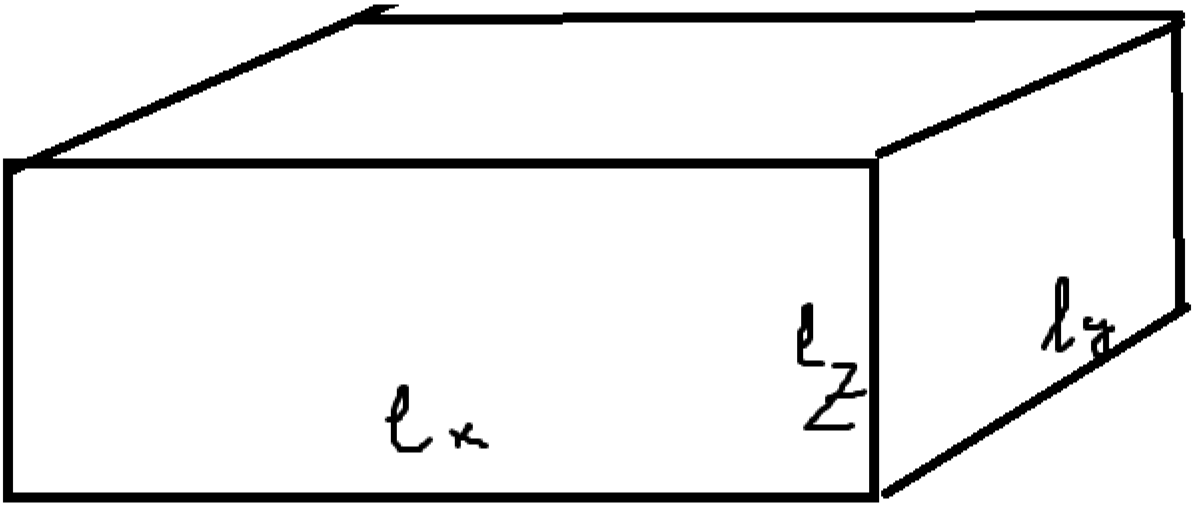
, так что давайте что-нибудь попробуем подсчитать сами.

4. Решаем задачу 63

(63) Для классического ид. газа рассчитать: а) стат. вес $\Gamma(\varepsilon, V, N)$ газа из N частиц в объеме V, если его энергия задана в интервале значений от $\varepsilon - \delta\varepsilon$ до ε.
б) канонич. стат. сумму $Z(\theta, V, N)$
в) большую канон. стат. сумму $\xi(\theta, V, \mu)$.

Я подсчитаю только Z для канонического ансамбля, но очень подробно.
Замечание: если вы посмотрите эту задачу в семинарах Васи Пупкина, то решение там короткое. Это обманчивая простота достигается за счёт того, что семинарист считает, что человек ходил на лекции. Мы же будем решать ab ovo – с начала!

Ещё это задача на ***квантовый*** газ. Не классический. Если вы посмотрите на решения, то оно для квантового газа.
У нас какой-то выделенный объём V. Пусть это кирпич со сторонами l_x, l_y, l_z:

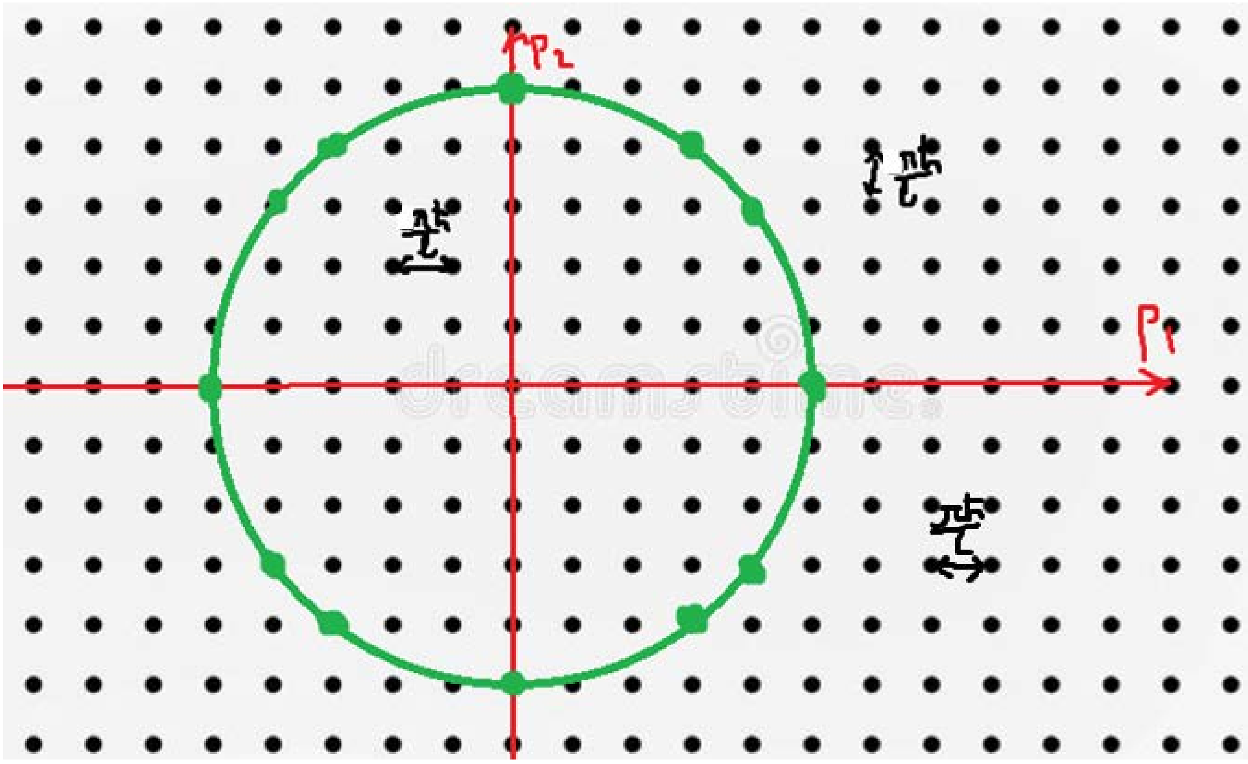


Для удобства возьмём куб: $l_x = l_y = l_z = l$
Утверждаю, что p_x нельзя измерить точнее, чем $\frac{2\pi h}{l}$ (аналогично py и pz), иначе придётся учитывать возможное «туннелирование» частицы из ящика. (Можно сказать и иначе, вспомнив, что в l должно укладываться целое число волн де Бройля – отсюда и вылезает коэф 2π).
Заметим, что отсюда не следует конечность числа импульсов p_x. Их по-прежнему бесконечно много, просто они хотя бы с интервалом:
$0, \frac{2\pi h}{l}, \frac{4\pi h}{l}, \frac{6\pi h}{l}, \ldots$
И это только импульс p_x! В реальности у нас три проекции импульса у N частиц. Т.е. суммарно 3N проекций импульсов.

$$E(\text{состояния}) = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m}$$

И вероятность каждого такого состояния $\exp\left(-\frac{E}{\theta}\right) = \exp\left(-\frac{\sum_{i=1}^{3N}\frac{p_i^2}{2m}}{\theta}\right)$.

Но каждая энергия E может быть представлена в виде суммы p_i некоторыми способами!
Теоретики строят 3N-мерное фазовое пространство импульсов… Так, я чувствую, что «3N-мерное» звучит страшно. Давайте для примера рассмотрим не 3N-мерное, а двухмерное пространство:



Где точками отмечены возможные значения проекций импульсов. Шаг - $\frac{2\pi h}{l}$.
Энергия – тогда квадрат радиуса круга (см. на рисунке).
Так вот, в статсумме

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{E_n}{\theta}\right)$$

Нам нужно будет интегрировать не по всем энергиям E_n, а по всем возможным проекциям импульса:

$$Z = \sum_{\text{по 1ой п}-\text{ции импульса}}^{\infty} \sum_{\text{по 2ой п}-\text{ции импульса}}^{\infty} \sum_{\text{по 3й п}-\text{ции импульса}}^{\infty} \ldots \text{ тут всего } 3N \text{ сумм } \ldots \sum_{\text{по } 3N-\text{й п}-\text{ции импульса}}^{\infty} \exp\left(-\frac{\frac{p_j^2}{2m}}{\theta}\right)$$

Т.е. просуммировать все точки сетки в 3N-пространстве!

Заметили. Помните, как для классических частиц мы могли бы рассматривать каждую частицу в отдельности? В квантовых ансамблях такого нет: они, хоть и называются идеальными (терминология, блин, такая!), из-за принципа запрета Паули они друг на друга действуют. Поэтому в статсумме мы вынуждены учитывать все частицы вместе.

К счастью, статсумму можно представить как:

$$Z = \left(\sum_{\text{по одной из проекций импульса}}^{\text{до } \infty} \exp\left(-\frac{p_i^2}{2m\theta}\right)\right)^{3N}$$

Т.е.

$$Z = \left(\sum_{k=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{\left(\frac{2\pi h}{l}k\right)^2}{2m\theta}\right)\right)^{3N}$$

А эта сумма уже считается! Запишем её как

$$Z = \left(\sum_{k=0}^{\infty} \exp\left(-\left(\frac{2\pi h}{\sqrt[3]{V}\sqrt{2m\theta}}k\right)^2\right)\right)^{3N} = \left(\sum_{k=0}^{\infty} \exp\left(-\left(\frac{(2\pi h)^3}{V(2m\theta)^{3/2}}k\right)^2\right)\right)^{N}$$

Её можно приближённо заменить на интеграл $\int_0^\infty exp(-(ax)^2) = \frac{\sqrt{\pi}}{2a}$, где a= $\frac{(2\pi h)^3}{V(2m\theta)^{3/2}}$: https://www.wolframalpha.com/widgets/view.jsp?id=1fc8c2a70cd315e3066c37c09891d96c , $\int_0^{+\infty} \exp(-(a\,x)^2)\,dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\,|a|}$

Вот и получаем

$$\left\{ \frac{(2\pi m\theta)^{3/2}\cdot V}{(2\pi\hbar)^3} \right\}^N$$

π в числителе (если непонятно) возникает на этапе взятия интеграла: $\frac{\sqrt{\pi}}{2a}$

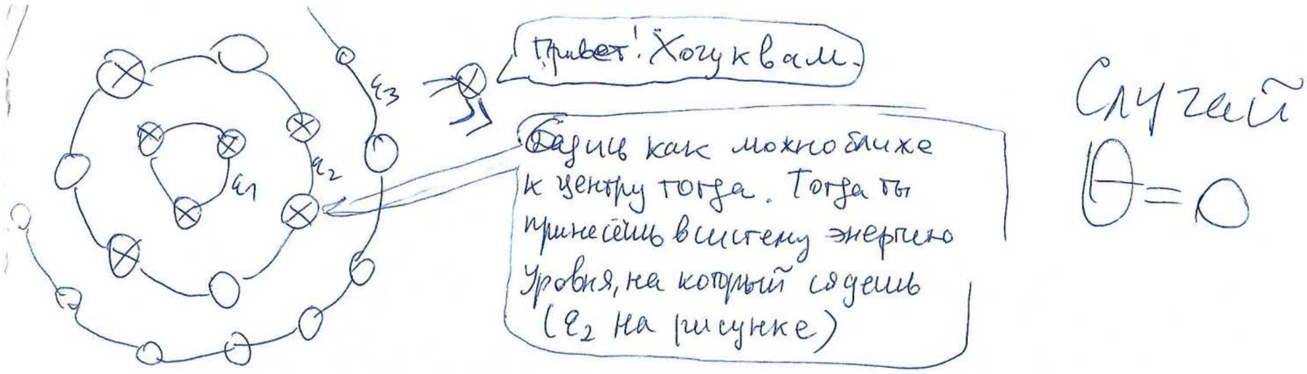
И тут ещё надо на N! поделить: $\frac{1}{N!}\left\{ \frac{(2\pi m\theta)^{3/2}\cdot V}{(2\pi\hbar)^3} \right\}^N$, потому что частицы тождественные. Ответ получен.

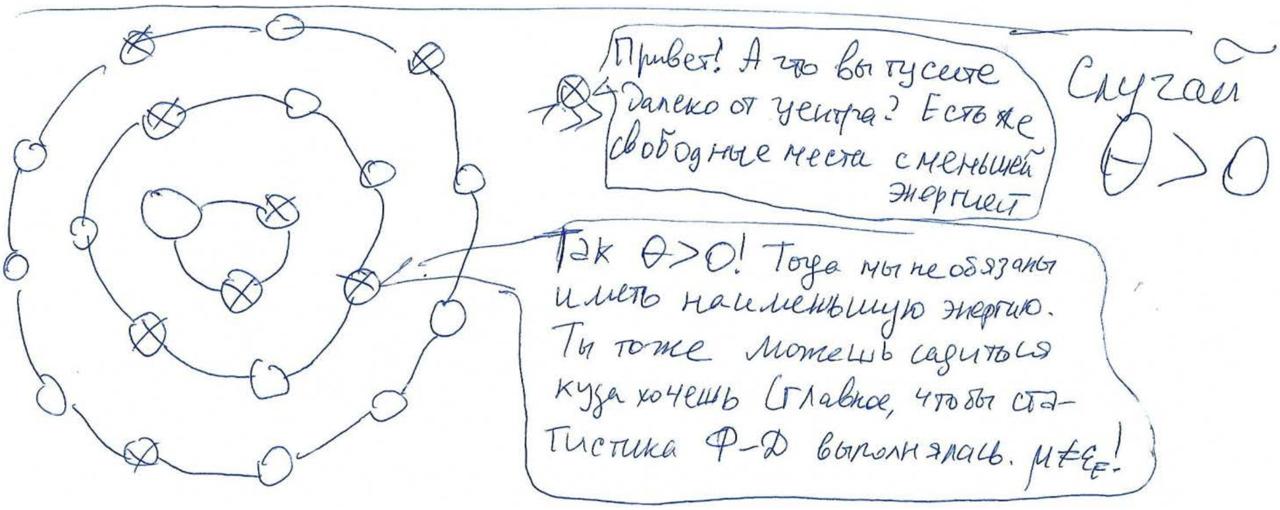
5. Немного передохнём и обсудим качественную задачу

Вопрос на понимание: почему энергия Ферми и химпотенциал не равны друг другу? Зачем нужны два понятия для одного и того же?

Ведь давайте вместе рассуждать: энергия Ферми – это энергия частиц, сидящих дальше всего от «сцены» – т.е. от центра шара Ферми – т.е. имеющих наиболее большую энергию.

Химпотенциал – кин.энергия, которую приносит в система ещё одна частица. Она автоматически подсаживается как можно ближе к «сцене», чтобы иметь энергию как можно меньше. Но тогда она как раз садится на поверхность шара Ферми, принося как раз энергию Ферми!





Ответ: при θ=0 химпотенциал действительно равен энергии Ферми. А вот при θ>0 частица вовсе не обязана садиться как можно ближе – она может и чуть подальше! Поэтому при θ>0 $\mu > \varepsilon_F$.

6. Доказываем формулы из Квасникова

Отлично, поняли, передохнули! А теперь давайте выведем эти результаты:

$$\mathscr{E} = \sum_p E_p n_p = \frac{\gamma m^{3/2} V}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty \varepsilon^{3/2} \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/\theta} \mp 1}\, d\varepsilon$$

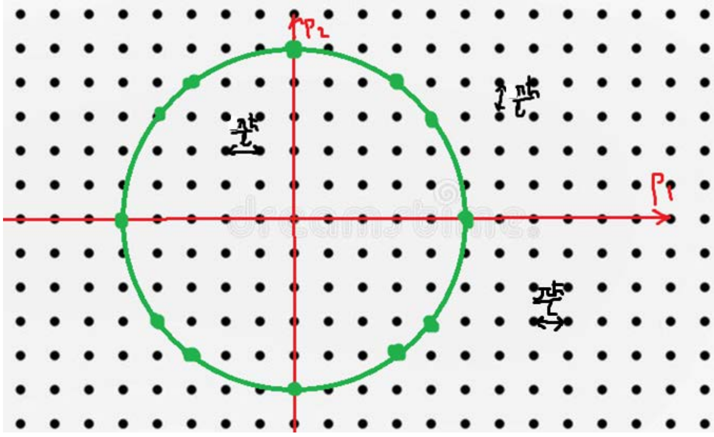
$$\mathcal{N} = \sum_p n_p = \frac{\gamma m^{3/2} V}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty \varepsilon^{1/2} \frac{1}{e^{\varepsilon-\mu/\theta} \mp 1}\, d\varepsilon$$

Сперва вспомогательная задача. Пусть энергия Ферми ε_F. Сколько частиц мы можем напихать в шар радиусом ε_F (т.е. сколько у нас частиц тогда в системе?)

Решение: объём

$$V_{\text{импульсного шара}} = \frac{4\pi {p_F}^3}{3}$$

где $p_F = \sqrt{2m\varepsilon_F}$ - импульс Ферми.



Все точки в импульсном пространстве разделены отрезком длиной $\frac{\pi h}{L}$. Тогда объём, приходящийся на каждую точку в фазовом импульсном пространстве, равен

$$V_{\text{на 1 импульсную точку}} = \left(\frac{\pi h}{L}\right)^3$$

Тогда хочется сказать, что в шар Ферми напихается

$$N_{\text{точек}}(\varepsilon_F) = \frac{4\pi}{3}\left(\frac{\sqrt{2m\varepsilon_F}L}{\pi h}\right)^3$$

А вот и нет – в 8 раз меньше! Это связано с тем, что импульсы могут принимать и положительные, и отрицательные значения, а в формуле для шара у нас. Поэтому

$$N_{\text{точек}}(\varepsilon_F) = \frac{\pi}{6}\left(\frac{\sqrt{2m\varepsilon_F}L}{\pi h}\right)^3$$

На самом деле тут надо ещё добавить множитель γ, связанный с наличием спина, благодаря которому можно напихать больше частиц:

$$N_{\text{точек}}(\varepsilon_F) = \frac{\gamma\pi}{6}\left(\frac{\sqrt{2m\varepsilon_F}L}{\pi h}\right)^3$$

(тот же результат получает Квас: $\boldsymbol{\varepsilon_F = \hbar^2(3\pi^2 n)^{2/3}/(2m)}$ - только он наоборот, выражает ε_F через концентрацию $n = N/V$)

Попытаемся же теперь получить эти результаты.

$$< N > = \sum_k \frac{1}{e^{E-\mu/\theta} + 1} n_k$$

Очень логично: просуммируем по всем энергетическим уровням, на каждом из которых вероятность встретить частицу $\sum_k \frac{1}{e^{E-\mu/\theta}+1}$. Нам удобней записать через интеграл:

$$< N > = \int_0^\infty \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{\theta}}+1}\rho(\varepsilon)d\varepsilon$$

Где $\rho(\varepsilon)$ - плотность числа частиц с энергией ε. Как её будем искать? А с помощью вспомогательной задачи: $\rho(\varepsilon) = \frac{dN(\varepsilon)}{d\varepsilon}$. Подставляем:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{dN}{d\varepsilon} = \frac{\gamma\pi}{6} * \left(\frac{\sqrt{2m}L}{\pi h}\right)^3 * \frac{3}{2}\varepsilon_F = \frac{\gamma\pi}{\sqrt{2}}\left(\frac{\sqrt{m}L}{\pi h}\right)^3 \varepsilon^{1/2} = \frac{\gamma V m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 h^3}\left(\frac{4\sqrt{m}}{h}\right)^3 \varepsilon^{1/2}$$

Сравним результат с Квасниковым:

$$\mathcal{N} = \sum_p n_p = \frac{\gamma m^{3/2} V}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3}\int_0^\infty \varepsilon^{1/2}\frac{1}{e^{\varepsilon-\mu/\theta} \mp 1}d\varepsilon = VgI_{1/2}$$

А что насчёт средней энергии? А там изначально нам нужно было подсчитать вот такой вот интеграл

$$< E > = \int_0^\infty \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{\theta}}+1}\varepsilon\rho(\varepsilon)d\varepsilon$$

Так что там то же самое, но с уже с $\varepsilon^{3/2}$:

$$\mathscr{E} = \sum_p E_p n_p = \frac{\gamma m^{3/2} V}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3}\int_0^\infty \varepsilon^{3/2}\frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/\theta} \mp 1}d\varepsilon$$


EEE. DOUBLE VICTORY