Белорусский Государственный Университет, Минск
Физический факультет SS 2011/2012
Я.М. Шнир

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И ТЕРМОДИНАМИКА

Задачи и упражнения 11

1. Система состоящая из N тождественных бозонов со спином 0 и массой m находится в ящике объемом $V = L^3$ при температуре $T > 0$.

   (i) Запишите общее выражение для числа частиц n, имеющих энергию в интервале значений между ε и $\varepsilon + d\varepsilon$ как функцию массы частицы, ее энергии, температуры, химического потенциала, объема и всех прочих относящихся к делу параметров.

   (ii) Покажите, что в пределе очень большого расстояния между частицами $d >> \lambda$, где λ - тепловая длина волны де Бройля, это распределение согласуется с классическим распределением Больцмана.

   (iii) Определите в первом порядке различие между средней энергией системы N тождественных бозонов со спином 0 при $d >> \lambda$ и средней энергией системы различимых бесспиновых частиц. В обоих случаях частицы массы m находятся в объеме $V = L^3$.

2. Рассмотрим квантовомеханический газ невзаимодействующих частиц массы m со спином 0 свободно двигающихся в объеме V.

   (i) Найти внутреннюю энергию газа и его теплоемкость при низких температурах. Поясните, почему при низких температурах химический потенциал газа можно положить равным нулю.

   (ii) Решите аналогичную задачу для фотонного газа ($m = 0$). Покажите, что его энергия пропорциональна T^4.

3. (i) Определить одночастичную матрицу плотности в координатном представлении.

   (ii) Рассмотрим величину

$$\rho(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \langle N_k \rangle e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

   где $\langle N_k \rangle$ - усредненное по ансамблю при конечной температуре число частиц находящихся в состоянии с импульсом $\vec{k}$. Проанализируйте поведение этой величины при $\vec{r} \to \infty$ при переходе температуры через критическую температуру конденсации Бозе-Эйнштейна T_C.

4. Проанализируйте, возможна ли бозе-эйнштейновская конденсация в двумерной и одномерной системе?

Решения

1. (i) Напомним что элемент объема фазового пространства определен как

$$\int dw = \int g d\vec{r} d\vec{p} = g \int dxdydz \frac{dp_x dp_y dp_z}{(2\pi\hbar)^3} = V \int \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3}$$

и для нерелятивистских бозонов

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m}; \quad d\varepsilon = \frac{pdp}{m}; \quad p = \sqrt{2m\varepsilon}$$

то есть

$$dw = 2\pi V \frac{(2m)^{3/2}\sqrt{\varepsilon}d\varepsilon}{h^3}$$

Следовательно, число частиц имеющих энергию в интервале значений между ε и $\varepsilon + d\varepsilon$ определяется как

$$n(\varepsilon) = \frac{2\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} \cdot \frac{\sqrt{\varepsilon}d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1}$$

(ii) В приближении разреженного бозонного газа выполняется условие $\exp(-\beta\mu) \gg 1$ и распределение Бозе-Эйнштейна переходит в распределение Больцмана. Поскольку при этом

$$N = \frac{2\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} \int\limits_0^\infty \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon e^{-\beta\varepsilon} e^{\beta\mu} = V \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2} e^{\beta\mu} \right)^{3/2}$$

то есть

$$e^{-\beta\mu} = \frac{V}{N\lambda^3} = \left(\frac{d}{\lambda}\right)^3$$

где $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$ - тепловая длина волны де Бройля и $d = (V/N)^{1/3}$. Следовательно, приближение $\exp(-\beta\mu) \gg 1$ эквивалентно условию $D \gg \lambda$.

(iii) В первом порядке разложения экспоненты можно записать

$$\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} \approx e^{-\beta(\varepsilon-\mu)} \left[1 + e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}\right]$$

Тогда средняя энергия системы есть

$$E = \frac{2\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} \left[\int\limits_0^\infty \varepsilon\sqrt{\varepsilon} e^{\beta\mu} e^{-\beta\varepsilon} d\varepsilon + \int\limits_0^\infty \varepsilon\sqrt{\varepsilon} e^{2\beta\mu} e^{-2\beta\varepsilon} d\varepsilon \right] = \frac{3}{2} N k_B T \left(1 + \frac{\lambda^3}{4\sqrt{2}d^3}\right)$$

2. (i) Распределение Бозе-Эйнштейна

$$\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}$$

Поскольку число частиц не может быть отрицательным, должно выполняться условие $\mu \leq 0$. Число частиц в интервале энергии между ε и $\varepsilon + d\varepsilon$ определяется как

$$N(\varepsilon) = \frac{2\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} \cdot \frac{\sqrt{\varepsilon}d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}$$

С уменьшением температуры химический потенциал газа возрастает пока не становится равным нулю, тогда

$$N(\varepsilon) \approx \frac{2\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} \cdot \frac{\sqrt{\varepsilon}d\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon}-1}$$

Бозе-Эйнштейновская конденсация происходит при дальнейшем уменьшении температуры, при этом химпотенциал продолжает оставаться равным нулю, однако число частиц находящихся не в основном состоянии, продолжает уменьшаться. Энергия системы и ее теплоемкость равны ($x = \beta\varepsilon$)

$$E = \frac{2\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} \int\limits_0^\infty \frac{\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon}-1}\sqrt{\varepsilon}d\varepsilon = \frac{2\pi V(2m)^{3/2}}{h^3}(k_B T)^{3/2} \int\limits_0^\infty \frac{x^{3/2}}{e^x-1}dx$$

Вычислим интеграл этого типа

$$I_n = \int\limits_0^\infty \frac{x^n dx}{f^{-1}e^x - 1}$$

где мы определили фугитивность (активность) $f = e^{\beta\mu}$, $0 \leq F \leq 1$. Воспользуемся далее известной формулой прогрессии $1+x+x^2+\cdots = \frac{1}{1-x}$; $(x<1)$ и, поскольку $\frac{1}{f^{-1}e^x-1} = fe^{-x}\frac{1}{1-fe^{-x}}$, запишем интеграл в виде бесконечного ряда:

$$I_n = \int\limits_0^\infty x^n dx \sum_{k=1}^\infty f^k e^{-kx} = \sum_{k=1}^\infty \frac{f^k}{k^{n+1}} \int\limits_0^\infty (kx)^n e^{-kx} d(kx)$$

Возникающий при этом интеграл одинаков для каждого члена рада и связан с гамма-функцией $\Gamma(n+1) = \int\limits_0^\infty t^n e^{-t}dt$. Далее, при нулевом значении химического потенциала $\mu = 0$ оставшийся ряд сводится к ζ-функции Римана: $\sum\limits_{k=1}^\infty k^{-(n+1)} = \zeta(n+1)$ и окончательно

$$I_{1/2} = \Gamma(\frac{3}{2})\zeta(\frac{3}{2}) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot 2.613 \qquad I_{3/2} = \Gamma(\frac{5}{2})\zeta(\frac{5}{2}) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \cdot 1.3415$$

Таким образом,

$$E = \frac{3V}{\sqrt{\pi}} \frac{k_B T}{\lambda^3} I_{3/2}(f)$$

Теплоемкость бозонного газа равна

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{15V}{2\sqrt{\pi}} \frac{k_B}{\lambda^3} I_{3/2}(f) + \frac{3V}{\sqrt{\pi}} \frac{k_B T}{\lambda^3} \frac{\partial I_{3/2}}{\partial f} \frac{\partial f}{\partial T}$$

(ii) Для фотонного газа химический потенциал равен нулю при любой температуре и энергия одного фотона равна $\varepsilon = \hbar\omega = c\hbar k$. Следовательно, число фотонов с импульсом в интервале между k и $k + \delta k$ определяется соотношением

$$g(k)dk = 2\frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk$$

и элемент объема фазового пространства записывается как

$$g(\varepsilon) = V \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}$$

Тогда энергия фотонного газа есть

$$E = \int\limits_0^\infty g(\varepsilon) \frac{\varepsilon d\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon} - 1} = \frac{1}{\pi^2 c^3} \int\limits_0^\infty \frac{\hbar\omega^3}{e^{\hbar\beta\omega} - 1} d\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^4 \int\limits_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$$

Окончательно, вычислим возникающий здесь интеграл

$$\int\limits_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = I_3 = \Gamma(4) \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{n^4} = \Gamma(4)\zeta(4) = 6\zeta(4) = \frac{\pi^4}{15}$$

получим известный закон Стефана-Больцмана:

$$\frac{E}{V} = \sigma T^4 = \frac{\pi^2 k_B^4}{15(\hbar c)^3} T^4; \qquad \sigma = \frac{\pi^2 k_B^4}{15 \hbar^3 c^3}$$

3. (i) Гамильтониан частицы имеет вид $H = \frac{p^2}{2m}$, его собственные функции $|E\rangle$ образуют ортонорированный базис энергетического представления. Соответствующая матрица плотности в координатном представлении тогда записывается как

$$\langle \mathbf{r}|\rho|\mathbf{r}'\rangle = \sum_{E,E'} \langle \mathbf{r}|E\rangle\langle E|e^{-\beta H}|E'\rangle\langle E'|\mathbf{r}'\rangle = \sum_{E,E'} \Psi_E(\mathbf{r}) e^{-\beta E} \delta_{EE'} \Psi^*_{E'}(\mathbf{r}') = \sum_E \Psi_E(\mathbf{r}) e^{-\beta E} \Psi^*_E(\mathbf{r}')$$

а волновые функции в координатном представлении имеют вид

$$\Psi_E(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - iEt}; \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Таким образом

$$\langle \mathbf{r}|\rho|\mathbf{r}'\rangle = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')-\hbar^2k^2/2mk_BT} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\mathbf{k}\exp\left(i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - \frac{h^2k^2}{8\pi mk_BT}\right)$$
$$= \left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{2\pi^2mk_BT(r-r')^2}{h^2}\right)$$

(ii) Число свободных бозонов находящихся в состоянии с импульсом $\vec{k}$ при температуре T определяется распределением Бозе-Эйнштейна:

$$\langle N_k\rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar^2k^2}{2mk_BT} - \frac{\mu}{k_BT}\right) - 1}$$

Таким образом

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}}\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\exp\left(\frac{\hbar^2k^2}{2mk_BT} - \frac{\mu}{k_BT}\right) - 1} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\mathbf{k}\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\exp\left(\frac{\hbar^2k^2}{2mk_BT} - \frac{\mu}{k_BT}\right) - 1}$$
$$= \frac{2}{(2\pi)^2}\frac{1}{r}\int_0^\infty dk\cdot k\sin(kr)\frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar^2k^2}{2mk_BT} - \frac{\mu}{k_BT}\right) - 1}$$

где мы воспользовались тем, что

$$\int d^3\mathbf{k}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 2\pi\int dk\cdot k^2\int_0^\pi d\theta\sin\theta e^{ikr\cos\theta} = -2\pi\int dk\frac{k}{r}\int d(kr\cos\theta)e^{ikr\cos\theta}$$
$$= -2\pi i(e^{-ikr} - e^{ikr}) = 4\pi\sin(kr)$$

При $T = T_C$ химический потенциал обращается в ноль, то есть

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{2}{(2\pi)^2}\frac{1}{r}\int_0^\infty dk\cdot k\sin(kr)\frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar^2k^2}{2mk_BT_C}\right) - 1}$$

При $r \to \infty$ можно выполнить приближенную оценку этого интеграла:

$$\rho(\mathbf{r}) \approx \frac{2}{(2\pi)^2}\frac{1}{r^3}\int_0^{r\sqrt{2mk_BT_C}/\hbar} dx\cdot x\sin x\frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar^2x^2}{2mk_BT_Cr^2}\right) - 1}$$
$$\approx \frac{2}{(2\pi)^2}\frac{1}{r}\left(\int_0^{r\sqrt{2mk_BT_C}/\hbar} dx\frac{\sin x}{x}\right)\frac{2mk_BT_C}{\hbar^2} \approx \frac{4mk_BT_C}{(2\pi)^2\hbar^2r}\int_0^\infty dx\frac{\sin x}{x} \approx \frac{mk_BT_C}{2\pi\hbar^2}\frac{1}{r}$$

4. Условием конденсации бозонов в основном состоянии является обращение в ноль химического потенциала. Для газа бозонов в двумерном пространстве мы можем записать выражение для среднего числа частиц

$$N = \frac{2\pi m S}{h^2}\int\limits_0^\infty \frac{d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1} = \frac{2\pi m S}{h^2}\int\limits_0^\infty \left. \sum_{k=1}^{\infty} e^{-k\beta(\varepsilon-\mu)} \right) d\varepsilon = \frac{2\pi m S}{h^2} k_B T \sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k}e^{k\beta\mu}$$

где $S = \int dxdy$ - площадь двумерной поверхности (аналог объема V). Очевидно, что это выражение расходится в пределе $\mu = 0$ - конденсация невозможна.

Для одномерного газа аналогичное выражение для среднего числа часлиц имеет вид

$$N = \frac{\sqrt{2mL}}{2h}\int\limits_0^\infty \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}(e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1)}$$

При $\mu = 0$ этот интеграл расходится, то есть конденсация также невозможна.