СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И ТЕРМОДИНАМИКА

Задачи и упражнения 13

1. Модель Дебая в 1d. Рассмотрим одномерную цепочку N связанных осцилляторов в тепловом равновесии при температуре T. Нормальные моды колебаний системы определяются как

$$\omega_n = \omega_0 \sqrt{2\left[1 - \cos\left(\frac{2\pi n}{N}\right)\right]}$$

где $\omega_0 =$ *const* и целое число $n \in [-N/2, N/2]$. Рассчитать теплоемкость квантовомеханической модели, проанализировать высокотемпературный и низкотемпературный пределы.

2. Энергия ультрарелятивистского фермиона определяется соотношением

$$\varepsilon_p = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} \to pc$$

при импульсе $p \to \infty$. Показать что уравнение состояния газа ультрарелятивистских фермионов имеет вид $E = 3PV$.

3. Проверить что энтропия идеального квантового газа определяется соотношением

$$S = -k_B \sum_i \left[n_i \ln(n_i) \mp (1 \pm n_i)\ln(1 \pm n_i)\right]$$

где верхний знак соответствует статистике Бозе-Эйнштейна, а нижний - статистике Ферми-Дирака.

4. Рассмотрим идеальный газ Ферми-Дирака при температуре T.

(i) Определить вероятность того, что n частиц находятся в данном одночастичном состоянии как функцию среднего числа заполнения $\langle n\rangle$.

(ii) Вычислить среднеквадратичную флуктуацию $\delta n^2 = \langle(n - \langle n\rangle)^2\rangle$ как функцию среднего числа заполнения $\langle n\rangle$.

5. Используя формулу распределения Ферми=Дирака

$$n_i = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} + 1}$$

получить выражение, которое может позволить в дальнейшем выразить химический потенциал электронного газа через его плотность (в данной задаче этого делать не требуется!). Показать что статистика Ферми-Дирака редуцируется к статистике Больцмана в пределе $N/V\lambda^3 \ll 1$, где λ - тепловая длина волны де Бройля.

Решения

1. Рассмотрим внутреннюю энергию системы

$$E = \sum_{n=-N/2}^{N/2} \frac{\hbar\omega_n}{e^{\hbar\omega_n/k_BT} - 1}$$

В высокотемпературном пределе $k_BT \gg \hbar\omega_n$ и $e^{\hbar\omega_n/k_BT} \approx 1 + \frac{\hbar\omega_n}{k_BT}$, то есть

$$E \approx \sum_{n=-N/2}^{N/2} \hbar\omega_n \frac{k_BT}{\hbar\omega_n} = Nk_BT$$

и теплоемкость $C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = Nk_B$.

В низкотемпературном пределе $k_BT \ll \hbar\omega_n$ и $e^{\hbar\omega_n/k_BT} \gg 1$.

$$E \approx 2\sum_{n=0}^{N/2} \hbar\omega_n e^{-\hbar\omega_n/k_BT}$$

При этом теплоемкость модели определяется как

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = 2\sum_{n=0}^{N/2} \frac{(\hbar\omega_n)^2}{k_BT^2} e^{-\hbar\omega_n/k_BT} \approx 2\frac{\hbar^2\omega_0^2}{k_BT^2} \int_0^{N/2} 2\left(1 - \cos\frac{2\pi x}{N}\right) e^{-(\hbar\omega_0/\pi k_BT)\sin(\pi x/N)} dx$$

$$= 8\frac{\hbar^2\omega_0^2}{k_BT} \int_0^{N/2} \frac{\sin^2\frac{\pi x}{N} e^{-(\hbar\omega_0/\pi k_BT)\sin(\pi x/N)}}{\cos\frac{\pi x}{N}} \cdot \frac{N}{\pi} d\left(\sin\frac{\pi x}{N}\right) = \frac{8N\hbar^2\omega_0^2}{\pi k_BT} \int_0^1 dt \frac{t^2 e^{-t\hbar\omega_0/\pi k_BT}}{\sqrt{1-t^2}}$$

Поскольку функция $e^{-t\hbar\omega_0/\pi k_BT}$ быстро уменьшается при приближении переменной t к верхнему пределу интегрирования, можно оценить интеграл как

$$C_V \approx \frac{8N\hbar^2\omega_0^2}{\pi k_BT} \int_0^1 dt\ t^2 e^{-t\hbar\omega_0/\pi k_BT} \approx \frac{8N\hbar^2\omega_0^2}{\pi k_BT} \left(\frac{k_BT}{\hbar\omega_0}\right)^3 \int_0^\infty dz\ z^2 e^{-z}$$

так как $\int\limits_0^\infty dz\ z^2 e^{-z} = 2$, то

$$C_V \approx \frac{16Nk_B^2}{\pi\hbar} \cdot \frac{T}{\omega_0}$$

2. Плотность числа состояний частицы со спином $1/2$ в интервале значений импульса от p до $p+dp$ равна

$$g(p) = 2\frac{4\pi V}{h^3}p^2dp$$

Поскольку $\varepsilon = cp$,

$$g(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{8\pi V}{c^3h^3}\varepsilon^2 d\varepsilon$$

и энергия газа определяется соотношением

$$E = \frac{8\pi V}{c^3h^3}\int\limits_0^\infty \frac{\varepsilon^3 d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}$$

Получить уравнение состояния можно из определения большого канонического потенциала $\Phi = -PV = -k_BT\ln \mathcal{Z}$, то есть

$$PV = k_BT\ln\mathcal{Z} = k_BT\int\limits_0^\infty \frac{8\pi V\varepsilon^2}{c^3h^3}\ln[1+e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}]d\varepsilon = \frac{8\pi V\varepsilon^2}{3c^3h^3}k_BT\int\limits_0^\infty \ln[1+e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}]d(\varepsilon^3)$$

Интегрируя по частям (то есть переходя от $\ln[1+e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}]d(\varepsilon^3) \to d\left(\ln[1+e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}]\right)\varepsilon^3$), получим

$$PV = \frac{8\pi V\varepsilon^2}{3c^3h^3}\int\limits_0^\infty \frac{\varepsilon^3 e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}}{1+e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}}d\varepsilon = \frac{E}{3}$$

3. Воспользуемся формулами распределений Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака для среднего числа частиц в i-м квантовом состоянии

$$n_i = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i-\mu)}\mp 1} \equiv \frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_i}\mp 1}$$

откуда следует что

$$e^{\alpha+\beta\varepsilon_i} = \frac{1\pm n_i}{n_i}; \qquad \alpha+\beta\varepsilon_i = \ln(1\pm n_i) - \ln(n_i)$$

Следовательно, логарифм большой статсуммы может быть записана как

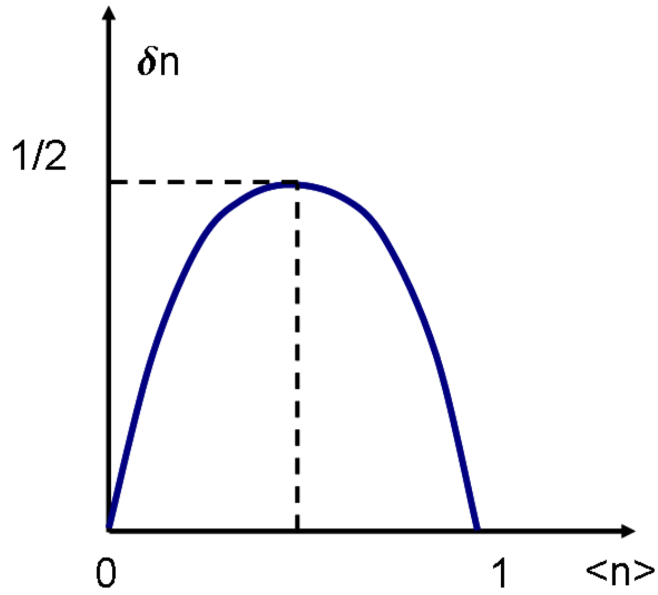
$$\ln\mathcal{Z} = \mp\sum_i \ln(1\mp e^{-\alpha-\beta\varepsilon_i}) = \mp\sum_i \ln\frac{1}{1\pm n_i} = \pm\sum_i \ln(1\pm n_i)$$

Поскольку энтропия большого канонического ансамбля определяется как

$$S = k_B\left[\ln\mathcal{Z} - \alpha\left(\frac{\partial\ln\mathcal{Z}}{\partial\alpha}\right)_\beta - \beta\left(\frac{\partial\ln\mathcal{Z}}{\partial\beta}\right)_\alpha\right]$$

то очевидно что

$$S = -k_B\sum_i\left[n_i\ln(n_i) \mp (1\pm n_i)\ln(1\pm n_i)\right]$$



4. (i) Статсумма рассматриваемой системы фермионов определена как

$$Z = \sum_n e^{n\beta(\mu-\varepsilon)} = [n = 0, 1] = 1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon)}$$

где ε - энергия одночастичного состояния. Следовательно, среднее значение числа заполнения равно

$$\langle n\rangle = k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1}$$

и искомая вероятность определена соотношением

$$P(n) = \frac{1}{Z} e^{n\beta(\mu-\varepsilon)} = \frac{(1 - \langle n\rangle)^n}{\langle n\rangle^{n-1}}$$

(ii) Поскольку $\langle n\rangle = k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial \mu}$

$$\langle (n - \langle n\rangle)^2\rangle = k_B T \frac{\partial \langle n\rangle}{\partial \mu} = \langle n\rangle(1 - \langle n\rangle)$$

5. Элемент объема конфигурационного пространства электронного газа равен

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

Плотность электронного газа определяется соотношением

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

Следовательно,

$$\frac{N}{V} = n = \frac{1}{\lambda^3} \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int\limits_0^\infty \frac{\sqrt{x} dx}{e^{-\beta\mu} e^x + 1}$$

Это выражение может быть использовано для выражения химического потенциала через плотность электронного газа.

Если выполняется условие $n\lambda^3 \ll 1$, то очевидно что в правой части предыдущей формулы должно выполняться условие

$$f = e^{-\beta\mu} \gg 1$$

то есть

$$n_i = \frac{1}{f e^{\beta\varepsilon_i} + 1} \approx f^{-1} e^{-\beta\varepsilon_i}$$

что согласуется с распределением Больцмана.