СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И ТЕРМОДИНАМИКА

Задачи и упражнения 14

1. Рассмотрим систему N электронов, плотность состояний которых $g(\varepsilon) = g_0 = const$ при $\varepsilon > 0$ и $g(\varepsilon) = 0$ при $\varepsilon < 0$. Вычислить энергию Ферми ε_F системы при $T = 0$. Определить при каких условиях при ненулевой температуре T система является невырожденной. Показать, что теплоемкость сильно вырожденного электронного газа пропорциональна его температуре (не вычисляя энергию электронного газа и его теплоемкость в явном виде!).

2. Определить химический потенциал и внутреннюю энергию сильно вырожденного идеального ферми-газа частиц со спином $1/2$ с точностью до членов порядка T^4.

3. Показать что уравнение состояния идеального ферми-газа имеет вид

$$PV = \frac{2E}{3}$$

   Вывести формулу для сжимаемости сильно вырожденного ферми-газа $\kappa = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T$.

Решения

1. При $T = 0$ все уровни ниже уровня Ферми ε_F заняты, а все состояния с энергией выше ε_F свободны. Учитывая вырождение по спину можно тогда записать

$$2g_0\varepsilon_F V = N, \quad \Longrightarrow \quad \varepsilon_F = \frac{N}{2Vg_0}$$

Далее, поскольку для невырожденной системы фермионов должно выполняться условие

$$\exp\left(\frac{\mu}{k_B T}\right) \ll 1$$

при котором статистика Ферми-Дирака редуцируется к статистике Больцмана

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

то выражение для плотности невырожденного электронного газа имеет вид:

$$n = \frac{N}{V} = \int_0^\infty \frac{2g_0 d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} = 2g_0 k_B T\ e^{\frac{\mu}{k_B T}}$$

Следовательно, условие отсутствия вырождения можно записать в виде

$$k_B T \gg \frac{N}{2Vg_0} = \varepsilon_F$$

Заметим что при $T = 0$ все электроны находятся внутри поверхности Ферми. Если $T \neq 0$ но $k_B T \ll \varepsilon_F$, то возбуждены только те электроны, которые близки к поверхности Ферми, их число можно оценить как $N_{eff} \sim k_B T g_0$ - число состояний в интервале $k_B T$. Наконец, поскольку каждый электрон вносит в теплоемкость сильно вырожденного электронного газа вклад $C_0 = 3k_B/2$, то $C \propto T$.

2. Плотность состояний нерелятивистской частицы со спином $1/2$ в объеме V равна

$$dw(\varepsilon) = 4\pi V\frac{(2m)^{3/2}\sqrt{\varepsilon}d\varepsilon}{h^3} = A\sqrt{\varepsilon}d\varepsilon; \qquad A = 4\pi V\frac{(2m)^{3/2}}{h^3} \tag{1}$$

Поскольку при $T = 0$ все состояния ниже уровня Ферми заняты, то полное число частиц в системе определяется из соотношения

$$N = \int f(\varepsilon)dw = A\int_0^\infty f(\varepsilon)\sqrt{\varepsilon}d\varepsilon; \qquad f(\varepsilon) = \begin{cases} 1, & \varepsilon < \mu_0 = \varepsilon_F \\ 0, & \varepsilon > \mu_0 = \varepsilon_F \end{cases}$$

то есть

$$N = A\int\limits_0^{\mu_0} \sqrt{\varepsilon}\; d\varepsilon = \frac{2}{3}A\mu_0^{3/2} = \frac{8\pi}{3}V\left(\frac{2m\mu_0}{h^2}\right)^{3/2}$$

и энергия Ферми вырожденного ферми-газа равна

$$\varepsilon_F = \frac{h^2}{2m}\left(\frac{3N}{8\pi V}\right)^{2/3}$$

Следовательно, плотность состояний (1) может быть выражена через энергию Ферми как

$$dw(\varepsilon) = \frac{3}{2}\frac{N\sqrt{\varepsilon}}{\mu_0^{3/2}}$$

Рассмотрим теперь систему при конечной температуре. Число частиц при этом определяется соотношением

$$N = \int\limits_0^{\infty} dw(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{3}{2}N\mu_0^{-3/2}\int\limits_0^{\infty}\sqrt{\varepsilon} f(\varepsilon) d\varepsilon; \qquad f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} \tag{2}$$

Напомним метод вычисления интегралов такого вида. Рассмотрим

$$I_n = \int\limits_0^{\infty} f(\varepsilon)\varepsilon^n d\varepsilon$$

Интегрируя по частям, получим

$$I_n = \frac{\varepsilon^{n+1}}{n+1}f(\varepsilon)\Big|_0^{\infty} - \frac{1}{n+1}\int\limits_0^{\infty}\varepsilon^{n+1}\frac{\partial f}{\partial\varepsilon}d\varepsilon = -\frac{1}{n+1}\int\limits_0^{\infty}\varepsilon^{n+1}\frac{\partial f}{\partial\varepsilon}d\varepsilon$$

поскольку первое слагаемое обращается в ноль как на верхнем, так и на нижнем пределах интегрирования. Определяя новую переменную $x = (\varepsilon-\mu)/k_BT;\ \varepsilon = k_BTx + \mu$, заметим что

$$f(x) = \frac{1}{e^x+1}; \qquad \frac{\partial f}{\partial\varepsilon}d\varepsilon = \frac{\partial f}{\partial x}dx$$

Следовательно, рассматриваемый интеграл может быть представлен в виде

$$I_n = -\frac{1}{n+1}\int\limits_{\beta\mu}^{\infty}(\mu + k_BTx)^{n+1}\frac{\partial f}{\partial x}dx = -\frac{\mu^{n+1}}{n+1}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\big(1 + \frac{x}{\beta\mu}\big)^{n+1}\frac{\partial f}{\partial x}dx \tag{3}$$

где мы воспользовались тем, что в случае малых температур нижний предел интегрирования может быть устремлен к $-\infty$.

Следующий шаг состоит в разложении полинома в подинтегральном выражении в ряд

$$(1+\frac{x}{\beta\mu})^{n+1} \approx 1+(n+1)\frac{x}{\beta\mu}+\frac{(n+1)n}{2}(\frac{x}{\beta\mu})^2+\frac{(n+1)n(n-1)}{2\cdot 3}(\frac{x}{\beta\mu})^3$$
$$+\frac{(n+1)n(n-1)(n-2)}{2\cdot 3\cdot 4}(\frac{x}{\beta\mu})^4+\dots$$

и последующем почленным интегрированием. При этом первое и второе слагаемые вносит вклады

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial f}{\partial x}dx = f(x)\Big|_{-\infty}^{\infty} = \frac{1}{e^x+1}\Big|_{-\infty}^{\infty} = -1 \qquad \int\limits_{-\infty}^{\infty} x\frac{\partial f}{\partial x}dx = 0$$

и, вообще говоря, вклад всех членов нечетных степеней равен нулю (интегрирование по частям). Поскольку $\frac{\partial f}{\partial x} = -\dfrac{e^x}{(e^x+1)^2}$, для квадратичного члена получим

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2\frac{e^{-x}}{(1+e^{-x})^2} \approx -2\int\limits_{0}^{\infty} x^2(e^{-x}-2e^{-2x}+3e^{-3x}-\dots)dx = -4(1-\frac{1}{2^2}+\frac{1}{3^2}-\dots) = -\frac{\pi^2}{3}$$

и, вообще говоря, все вклады четных степеней определяются ζ-функцией Римана:

$$\int\limits_{\infty}^{\infty} x^n\frac{e^x}{(e^x+1)^2}dx = 2n!(1-2^{1-n})\zeta(n)$$

При этом

$$\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}; \quad \zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}$$

и для интеграла (3) получаем с точностью до членов 4-го порядка:

$$I_n \approx \frac{\mu^{n+1}}{n+1}\left[1+\frac{\pi^2(n+1)n}{6}\left(\frac{k_BT}{\mu}\right)^2+\frac{7\pi^4}{360}(n+1)n(n-1)(n-2)\left(\frac{k_BT}{\mu}\right)^4\right]\dots$$

В рассматриваемом случае $n = 1/2$ и следовательно, выражение (2) может быть записано с той же точностью как

$$1 = \left(\frac{\mu}{\mu_0}\right)^{-3/2}\left[1+\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{k_BT}{\mu}\right)^2+\frac{7\pi^4}{640}\left(\frac{k_BT}{\mu}\right)^4+\dots\right]$$

то есть

$$\begin{aligned}\mu &= \mu_0\left[1+\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{k_BT}{\mu}\right)^2+\frac{7\pi^4}{640}\left(\frac{k_BT}{\mu}\right)^4+\dots\right]^{-3/2} \\ &= \mu_0\left[1-\frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_BT}{\mu}\right)^2+\frac{\pi^4}{720}\left(\frac{k_BT}{\mu}\right)^4+\dots\right]\end{aligned} \tag{4}$$

где мы воспользовались разложением функции $f(x) = \left[1 + \frac{\pi^2}{8}(x)^2 + \frac{7\pi^4}{640}(x)^4 + \dots\right]^{-3/2}$ в ряд по степеням x около значения $x = 0$. В первом приближении

$$\mu = \mu_0 \left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_B T}{\mu_0}\right)^2 + \dots\right]$$

и во втором приближении

$$\mu = \mu_0 \left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_B T}{\mu_0}\right)^2 - \frac{\pi^4}{80}\left(\frac{k_B T}{\mu_0}\right)^4 + \dots\right] \tag{5}$$

Внутренняя энергия ферми-газа определяется с помощью похожих вычислений. Поскольку

$$E = \int_0^\infty f(\varepsilon)\varepsilon dw(\varepsilon) = \frac{3}{2}N\mu_0^{-3/2}\int_0^\infty \varepsilon^{3/2} f(\varepsilon) d\varepsilon$$

то задача сводится к вычислению интеграла (3) в случае $n = 3/2$:

$$I_{3/2} \approx \frac{2\mu^{5/2}}{5}\left[1 + \frac{5\pi^2}{8}\left(\frac{k_B T}{\mu}\right)^2 - \frac{7\pi^4}{384}\left(\frac{k_B T}{\mu}\right)^4 + \dots\right]$$

то есть

$$E = \frac{3}{5}N\mu\left(\frac{\mu}{\mu_0}\right)^{3/2}\left[1 + \frac{5\pi^2}{8}\left(\frac{k_B T}{\mu}\right)^2 - \frac{7\pi^4}{384}\left(\frac{k_B T}{\mu}\right)^4 + \dots\right]$$

Окончательно, учитывая что во втором порядке выполняется соотношение (5), получим

$$E = \frac{3}{5}N\mu_0\left[1 + \frac{5\pi^2}{12}\left(\frac{k_B T}{\mu_0}\right)^2 - \frac{\pi^4}{16}\left(\frac{k_B T}{\mu_0}\right)^4 + \dots\right] \tag{6}$$

3. Рассмотрим большой термодинамический потенциал $\Phi = -PV$, связанный с большой статсуммой

$$\begin{aligned}
\Phi &= -k_B T \ln \mathcal{Z} = -k_B T \sum_{\{i\}} \ln\left[1 + \exp\left(\frac{\mu - \varepsilon_i}{k_B T}\right)\right] \\
&= -4\pi V \frac{(2m)^{3/2}}{h^3} k_B T \int_0^\infty \ln\left[1 + \exp\left(\frac{\mu - \varepsilon}{k_B T}\right)\right] d\varepsilon \\
&= -\frac{8\pi}{3} V \frac{(2m)^{3/2}}{h^3} k_B T \varepsilon^{3/2} \ln\left[1 + \exp\left(\frac{\mu - \varepsilon}{k_B T}\right)\right]_0^\infty - \frac{8\pi}{3} V \frac{(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty \frac{d\varepsilon\ \varepsilon^{3/2}}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right) + 1} \\
&= -\frac{8\pi}{3} V \frac{(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty \frac{d\varepsilon\ \varepsilon^{3/2}}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right) + 1} = -\frac{2}{3}E
\end{aligned}$$

где мы выполнили интегрирование по частям и использовали определение внутренней энергии ферми-газа.

Из соотношения (6) тогда следует что давление сильно вырожденного ферми-газа зависит от температуры как

$$P = \frac{N}{V}\left[\frac{2}{5}\mu_0 + \frac{\pi^2}{6}\frac{k_B^2 T^3}{\mu_0} + \dots\right]$$

и следовательно сжимаемость можно записать как

$$\begin{aligned}
\kappa &= -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T^{-1} = \frac{V}{N}\left(\frac{2\mu_0}{3} + \frac{\pi^2}{18}\frac{k_B^2 T^2}{\mu_0} + \dots\right)^{-1} \\
&= \frac{3V}{2N\mu_0}\left[1 - \frac{\pi^2}{18}\left(\frac{k_B T}{\mu_0}\right)^2 + \dots\right]
\end{aligned} \tag{7}$$