2.2. Термодинамика классических, ферми- и бозе-систем

Термодинамика больцмановского газа. Термодинамика идеального ферми-газа. Термодинамика идеального бозе-газа

Разреженный газ

- Идеальный разреженный газ $\langle n_k \rangle \ll 1$
- Матрица плотности:

$$\rho_{E,N} = e^{-(E-\mu N)\beta} = e^{-\beta \sum_k (\varepsilon_k - \mu) n_k} = \prod_k \left(e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}\right)^{n_k}$$

- Свободная энергия:

$$F_k = -T\ln\left(\sum_{n_k} \left(e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}\right)^{n_k}\right) \approx -T\ln\left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} + \ldots\right) \approx -Te^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}$$

- Распределение Больцмана:

$$\langle n_k \rangle = -\frac{\partial F_k}{\partial \mu} = e^{(\mu - \varepsilon_k)\beta}$$

- Ферми-статистика – принцип Паули

$$F_k = -T\ln\left(\sum_{n_k = 0;1} \left(e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}\right)^{n_k}\right) = -T\ln\left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}\right);$$

- Распределение Ферми – Дирака:

$$\langle n_k \rangle = -\frac{\partial F_k}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{(\varepsilon_k - \mu)\beta} + 1}$$

Разреженный газ

- Бозе-статистика: нет запрета на количество частиц в одном состоя

$$F_k = -T\ln\left(\sum_{n_k=0}^{\infty}\left(e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}\right)^{n_k}\right) = -T\ln\left(\sum_{n_k=0}^{\infty}\left(e^{-\beta n_k(\varepsilon_k-\mu)}\right)\right)$$

- Для бозе-газа область физических решений соответствует $\mu<0$
- Свободная энергия: $F_k = -T\ln\left(\frac{1}{1-e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}}\right)$
- Распределение Бо

$$\langle n_k\rangle = -\frac{\partial F_k}{\partial\mu} = \frac{1}{e^{(\varepsilon_k-\mu)\beta}-1}$$

- Задача нахождения термодинамических средних для идеального газа с ферми- или бозе-статистикой при конечной температуре и заданном зн

$$\langle N(\mu,T)\rangle = \sum_k f(\varepsilon_k,\mu); \quad E(\mu,T) = \sum_k \varepsilon_k f(\varepsilon_k,\mu)$$

$$C(T) = \sum_k \varepsilon_k \frac{df(\varepsilon_k,\mu)}{dT}; \quad \ldots; \quad f(\varepsilon_k,\mu) = \langle n_k\rangle$$

Плотность состояний

- Рассмотрим макроскопическую систему, в которой число одночастичных квантовых состояний настолько велико, что множество разрешенных импульсов можно считать непрерывным набором квантовых состояний
- Плотность одночастичных состояний:

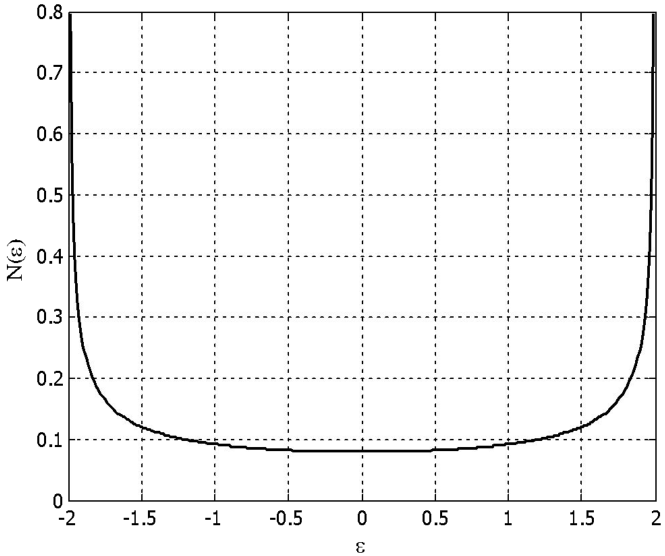
$$N(\varepsilon) = \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$$

- Трехмерный свободный газ с квадратичным законом дисперсии:

$$N(\varepsilon) = \sum_k \delta\left(\varepsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) = V\frac{m\sqrt{m\varepsilon}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}$$

- Одномерный идеальный газ:

$$N(\varepsilon) = L\int \frac{dk}{2\pi}\delta(\varepsilon + 2t\cos(ka)) = V\frac{\theta(2t - |\varepsilon|)}{2\pi a\sqrt{4t^2 - \varepsilon^2}}$$

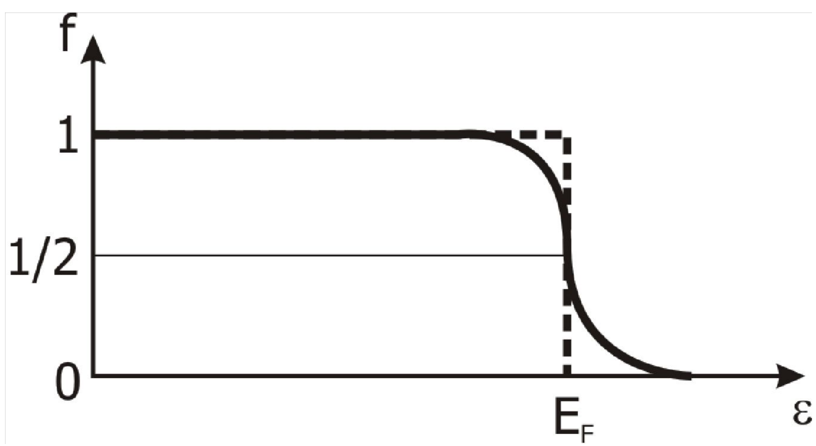


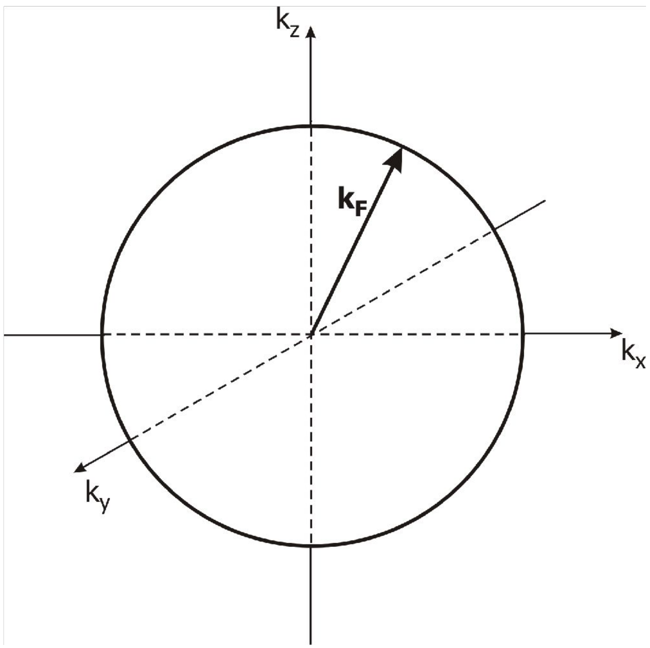
Термодинамика идеального ферми-газа

- Энергия Ферми:

$$f_k \equiv f(\varepsilon_k) = \left(\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)}+1}\right) \xrightarrow{T\to 0} \theta(\mu(0)-\varepsilon_k); \quad \mu(0) = E_F$$

- Электронный газ при нулевой температуре называется *вырожденным*





Термодинамика идеального ферми-газа

- Свободный ферми-газ является неплохим приближением для простых металлов
- Уравнение состояния ферми-газа при нулевой температуре:

$$PV^{5/3} = \frac{\hbar^2}{5m}(3\pi^2)^{2/3}N^{5/3}$$

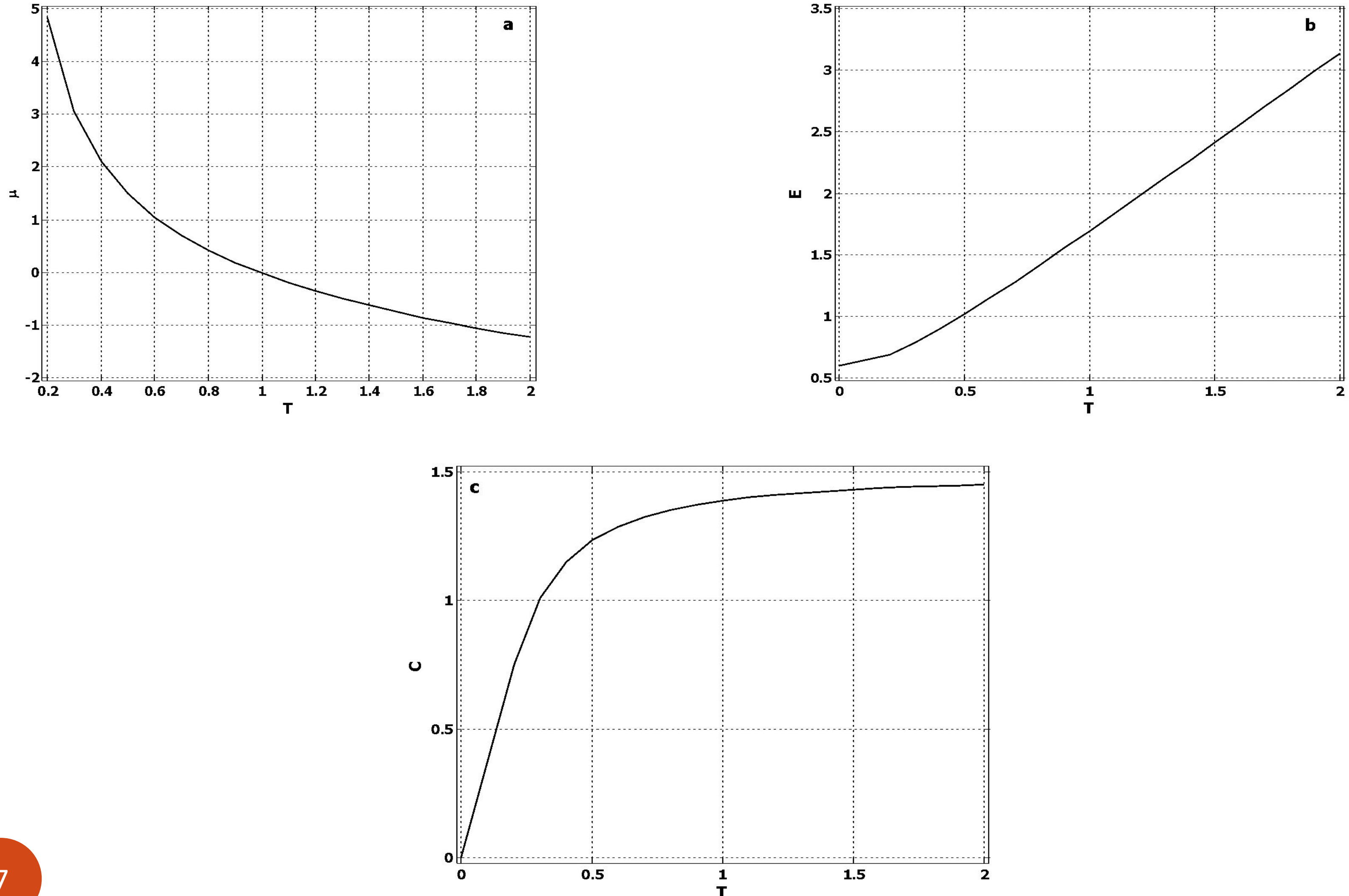
- Даже при нулевой температуре существует конечное давление идеального ферми-газа, связанное с его квантовым вырождением и конечной плотностью
- Система уравнений для численного анализа ферми-газа:

$$1 = \frac{3}{2}\int_0^\infty \sqrt{E'}dE'\left(\frac{1}{e^{(E'-\mu')/T'}+1}\right);$$

$$\frac{E'(T')}{N} = \frac{3}{2}\int_0^\infty (E')^{3/2}dE'\left(\frac{1}{e^{(E'-\mu')/T'}+1}\right); \qquad E' = \frac{E}{E_F}; \quad \mu' = \frac{\mu}{E_F}; \quad T' = \frac{T}{E_F}.$$

$$\frac{C(T')}{N} = \frac{3}{8(T')^2}\int_0^\infty (E')^{3/2}(E'-\mu')\frac{dE'}{\mathrm{ch}^2\left(\frac{E'-\mu'}{2T'}\right)};$$

Термодинамика идеального ферми-газа



Термодинамика идеального ферми-газа

- <u>Предельные случаи</u>
- Низкие температуры:

$$\mu = E_F\left(1 - \frac{T^2\pi^2}{12E_F}\right); \quad E = \frac{3}{5}NE_F\left(1 + \frac{5\pi^2}{12}\left(\frac{T}{E_F}\right)^2\right);$$

$$C = \gamma T; \quad \gamma = \frac{\pi^2}{3}N(E_F); \quad T \ll T_0 = E_F$$

- Высокие температуры: статистика газа становится больцмановской, и зависимости энергии и теплоемкости электронного газа выходят на классический предел

$$E \to \frac{3}{2}NT; \quad C \to \frac{3}{2}N$$

Термодинамика идеального бозе-газа

- Температура бозе-конденсации:

$$T(\mu = 0) \equiv T_0 = \frac{2\pi\hbar^2}{m\varsigma^{2/3}(3/2)}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} = \frac{3.31\hbar^2}{m}n^{2/3}$$

- Количество частиц, находящихся в основном состоянии:

$$N_{\varepsilon=0} = N\left(1 - \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}\right)$$

- Задача делится на две температурные области – выше и ниже температуры конденсации
- Для низких температур:

$$E = \frac{V\sqrt{2}m^{3/2}T^{5/2}}{2\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty t^{3/2}\frac{dt}{e^t - 1} = \frac{15V\sqrt{2}m^{3/2}T^{5/2}\varsigma(5/2)}{8\pi^{3/2}\hbar^3};$$

$$C(T) = \frac{5E}{2T} \sim T^{3/2}$$

Термодинамика идеального бозе-газа

- Для высоких температур:

$$1 = \xi \int_0^\infty \sqrt{E'} \frac{dE'}{e^{(E'-\mu')/T'} - 1}; \quad \xi = \frac{2}{\sqrt{\pi}\varsigma(3/2)} = 0.432;$$

$$\frac{E'(T')}{N} = \xi \int_0^\infty (E')^{3/2} \frac{dE'}{e^{(E'-\mu')/T'} - 1};$$

$$\frac{C(T')}{N} = \frac{\xi}{4} \frac{1}{(T')^2} \int_0^\infty (E')^{3/2} (E' - \mu') \frac{dE'}{\mathrm{sh}^2\left(\frac{E'-\mu'}{2T'}\right)}; \quad T > T_0$$

- λ-точка:

$$\frac{C(T_0)}{C(T \to \infty)} = 1.28$$

- Классический предел:

$$E \to \frac{3}{2} NT; \quad C \to \frac{3}{2} N$$

Термодинамика идеального бозе-газа