Раздел 8

Элементы физики конденсированных состояний

8.3. Элементы квантовой статистики

Курс лекций по общей физики

Доцент Петренко Л.Г.

Кафедра общей и экспериментальной физики НТУ «ХПИ»

Харьков - 2012 год

8.3. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКИ

8.3.1. *Статистическое описание квантовой системы. Различие между квантово-механической и статистической вероятностью. Фазавое пространство. Элементарная ячейка как способ учёта в квантовой статистике корпускулярно-волновой природы частиц. Плотность состояний.*

Некоторые явления природы достаточно хорошо описываются на основе ***классической модели вещества***. Распределение частиц по энергиям в этом случае подчиняется ***классической статистике Максвелла-Больцмана***.

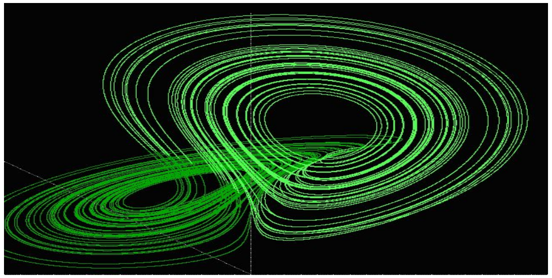
Если нельзя игнорировать квантовые законы движения частиц системы, то выбирают ***квантовую модель вещества***, а распределение частиц по энергиям описывается ***квантовыми статистиками***.

Квантовая статистика - это раздел статистической физики, изучающий системы, состоящие из огромного числа частиц, подчиняющихся законам квантовой механики.

Главные особенности квантовой статистики – это соблюдение ***принципа дополнительности*** ***(соотношений неопределённостей)***, ***принципа тождественности*** и ***принципа Паули*** (три принципа).

Состояние частицы в статистической физике описывается с помощью ***воображаемого 6-мерного пространства***,
осями которого являются ***координаты*** и ***проекции импульса***.
Его называют ***фазовым μ-пространством***.

В классической физике состоянию частицы в μ-пространстве соответствует **точка**,
а состояние системы определяется тем, как распределены в нём фазовые точки всех частиц системы.

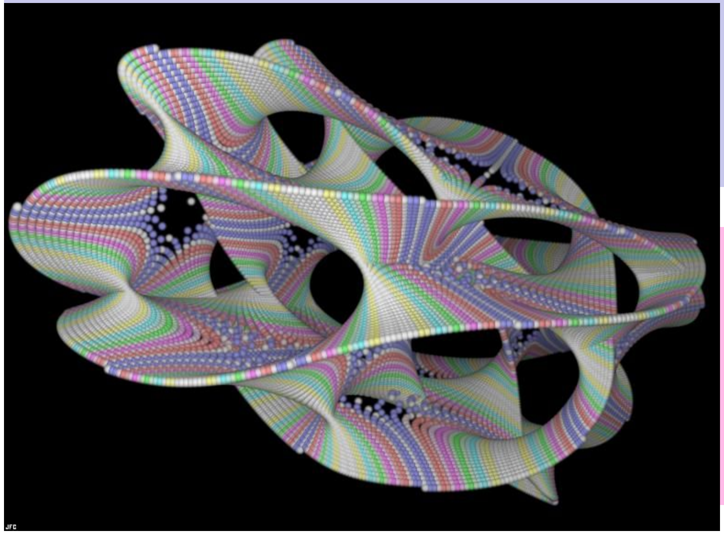


Состояние квантовой частицы, благодаря соотношениям неопределённостей, в ***фазовом μ-пространстве*** характеризуется не фазовой точкой, а **элементарной ячейкой**, имеющей объём $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot \Delta p_x \cdot \Delta p_y \cdot \Delta p_z = h^3$.

Элемент фазового объёма $d\Gamma$ не может быть меньше h^3:

$$d\Gamma = dx \cdot dy \cdot dz \cdot dp_x \cdot dp_y \cdot dp_z = dq \cdot dp \geq h^3,$$

где q - совокупность координат,
p - совокупность проекций импульсов частицы.



Состояние системы квантовых частиц определяется особенностями их размещения в фазовом пространстве по ячейкам с объёмом h^3.

В соответствии с ***принципом неразличимости тождественных частиц***, их размещение по ячейкам имеет ***вероятностный характер***.

Число квантовых состояний в фазовом объёме **dГ** равно:

$$d\Omega = g \cdot \frac{d\Gamma}{h^3},$$

где **g** - количество квантовых состояний, соответствующих заданной энергии.

Плотность числа состояний (***плотность состояний***) равна:

$$\frac{d\Omega}{dW} = \frac{g}{h^3}\frac{d\Gamma}{dW}.$$

Вероятность данного состояния системы, то есть того, что её частица находится в элементе фазового объёма **dГ**, расположенного вблизи точки фазового пространства ($\mathbf{x,y,z,p_x,p_y,p_z}$), равна:

$$dP = f(q,p) \cdot dq \cdot dp,$$

где **f(q,p)** - **функция распределения** или иначе - **плотность вероятности определённого состояния системы.**

Для функции распределения должно выполняться ***условие нормировки***:

$$\int f(q,p) \cdot dq \cdot dp = 1$$

(здесь интегрирование производится по всему фазовому пространству).

Зная функцию распределения **f(q,p)**, можно решить

основную задачу квантовой статистики –

определить средние значения величин, характеризующих данную систему.

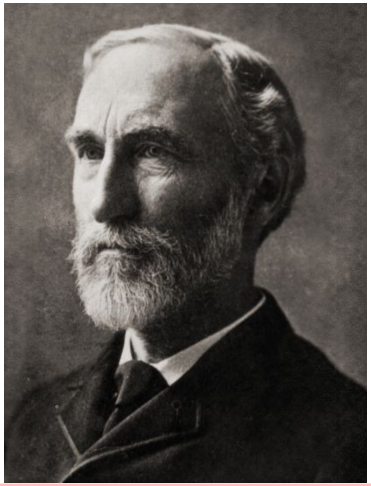
Среднее значение некоторой функции **L(q,p)** равно:

$$\langle L(q,p)\rangle = \int L(q,p)\cdot f(q,p)\cdot dq\cdot dp.$$

Если энергия квантовой частицы имеет ***дискретный спектр*** - W_n,

то и ***функция распределения*** $f(W_n)$ ***является дискретной***.

Явное выражение функции распределения в самом общем виде получил американский физик Дж.Гиббс.



В квантовой статистике

Каноническое распределение Гиббса имеет вид:

$$f(W_n) = A\cdot e^{-W_n/kT},$$

где $A = const$ (определяется из условия нормировки),

n - совокупность всех квантовых чисел, характеризующих данное состояние.

$f(W_n)$ - ***определяет вероятность данного состояния***,

а не вероятность того, что система обладает энергией W_n,

т.к. ***данной энергии*** может соответствовать не одно, а ***несколько состояний***.

8.3.2. *Квантовые идеальные газы.*
Распределения Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна.

Во многих случаях реальные квантово-механические системы можно с хорошим приближением считать идеальным газом.

Однако, в квантовой механике даже в отсутствие силового взаимодействия имеет место взаимное влияние частиц друг на друга - ***обменные эффекты***.

Так ***принцип Паули*** запрещает фермионам находиться в одном квантовом состоянии (с одинаковым набором квантовых чисел).

В связи с этим ***идеальные газы фермионов и бозонов подчиняются разным квантовым статистикам***.

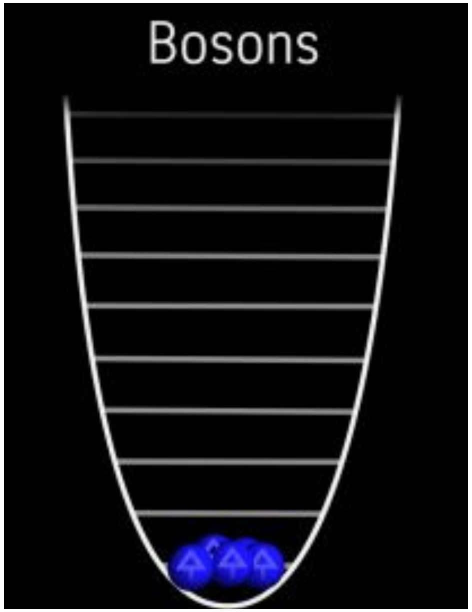
Состояние квантового идеального газа характеризуется так называемыми **числами заполнения** N_i , указывающими ***степень заполнения какого-либо квантового состояния (с определённым набором квантовых чисел***).

Для **бозонов** N_i = **0, 1, 2, 3, ...** (любые целые положительные числа).
Для **фермионов** N_i = **0, 1** (для свободного и занятого состояний соответственно).
Сумма всех чисел заполнения равна числу частиц системы - **N**.

Задачей квантовой статистики является подсчёт среднего числа частиц в данном квантовом состоянии.

Бозоны.

В одном и том же квантовом состоянии может находиться любое число бозонов, но ***среднее число бозонов***, находящихся в состоянии с энергией $\mathbf{W_i}$ при температуре **T**, равно :

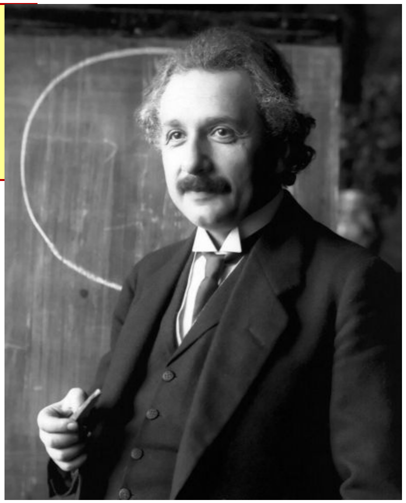


$$\langle N_i \rangle = \frac{1}{e^{(W_i - \mu)/kT} - 1}.$$

Здесь **k** - постоянная Больцмана; **μ** - ***химический потенциал*** *).

Для бозонов **μ** < 0 и зависит только от температуры **T** и плотности числа частиц.

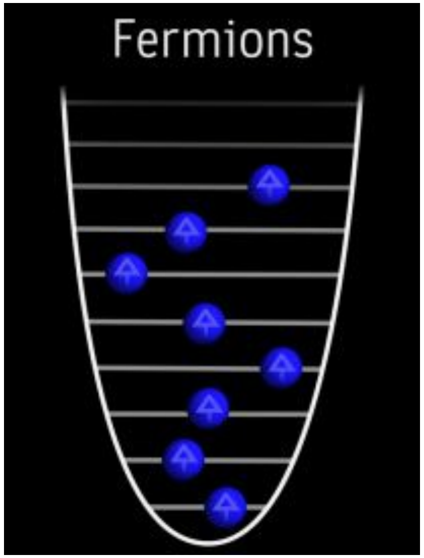
Это распределение называется **распределением Бозе-Эйнштейна**.



*) химический потенциал **μ** определяет изменение внутренней энергии системы при добавлении к ней одной частицы при постоянном объёме **V** и постоянной энтропии S, для бозонов **μ** < 0, иначе для некоторых чисел заполнения $N_i < 0$, что не имеет физического смысла.

Фермионы.

Идеальный газ **фермионов** подчиняется ***принципу Паули*** и описывается квантовой **статистикой Ферми-Дирака**:



$$\langle N_i \rangle = \frac{1}{e^{(W_i - \mu)/kT} + 1}.$$

Химический потенциал **μ** может иметь ***положительные и отрицательные*** значения.

Поведение ***бозе-газа*** и ***ферми-газа*** существенно ***отличается*** от поведения ***классического газа***, подчиняющегося классическим статистикам.

Бозе-газ и ферми-газ являются вырожденными системами и подчиняются квантовым статистикам.

При высоких температурах* и *малых плотностях
квантовый идеальный газ ведёт себя подобно ***классическому***.

При этом $e^{(W_i - \mu)/kT} >> 1$ и

распределения Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака переходят в классическое распределение Максвелла-Больцмана:

$$\langle N_i \rangle = A \cdot e^{-W_i/kT},$$

где $A = e^{\mu/kT}$, W_i – кинетическая или потенциальная энергия частиц (в квантовой механике такое разделение не возможно).

Таким образом, ***выраждение газов становится существенным только при низких температурах***.

Температура T_B, ниже которой отчётливо проявляются квантовые свойства газа, обусловленные ***тождественностью*** его частиц, называется **температурой вырождения**.