

Лекция № 7

(Часть-2)

**Элементы квантовой
статистики
И
физики твёрдого тела**

План лекции

- Понятие о квантовых статистиках Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака.
- Вырожденный электронный газ в металлах.
- Теплоемкость кристаллов (классическая теория).
- Теплоемкость кристаллов по Эйнштейну.
- Теплоемкость кристаллов по Дебаю.

Если у нас имеется термодинамическая система состоящая из N частиц, энергии которых могут принимать дискретные значения, то говорят о системе квантовых чисел.

Поведение такой системы описывается квантовой статистикой, в основе которой лежит принцип неразличимости тождественных частиц.

Квантовая статистика

- **Квантовой статистикой** называется статистический метод исследования, применяемый к системам, которые состоят из большого числа частиц и подчиняются законам квантовой механики.

Квантовая статистика строится

- из принципа неразличимости тождественных частиц: **все одинаковые частицы** (*например, все электроны в металлах, все протоны в ядрах атомов*) **считаются принципиально неразличимыми друг от друга.**

1. Для квантовых систем, состоящих из огромного числа неразличимых тождественных квантовых частиц, подчиняющихся законам квантовой механики, применяются методы **квантовой статистики**.

2. В молекулярной физике классических систем распределение частиц идеального газа по энергиям во внешнем потенциальном поле W при заданной температуре T описывается **распределением Больцмана**:

$$n = n_0 \exp\left(-\frac{W}{kT}\right)$$

3. В квантовой статистике используется *модель идеального газа квазичастиц*, причем основной характеристикой данного квантового состояния с данным набором i квантовых чисел, является **число заполнения N_i** , указывающее степень заполнения данного квантового состояния частицами системы, состоящей из множества тождественных частиц.

4. Для систем частиц, образованных **бозонами**, числа заполнения могут принимать любые целые значения: **0, 1, 2... K**. Для систем частиц, образованных **фермионами**, числа заполнения могут принимать лишь два значения: **0** для свободных состояний и **1** для занятых.



**Элементарные
частицы**

фермионы

**электроны,
протоны,
нейтроны**

бозоны

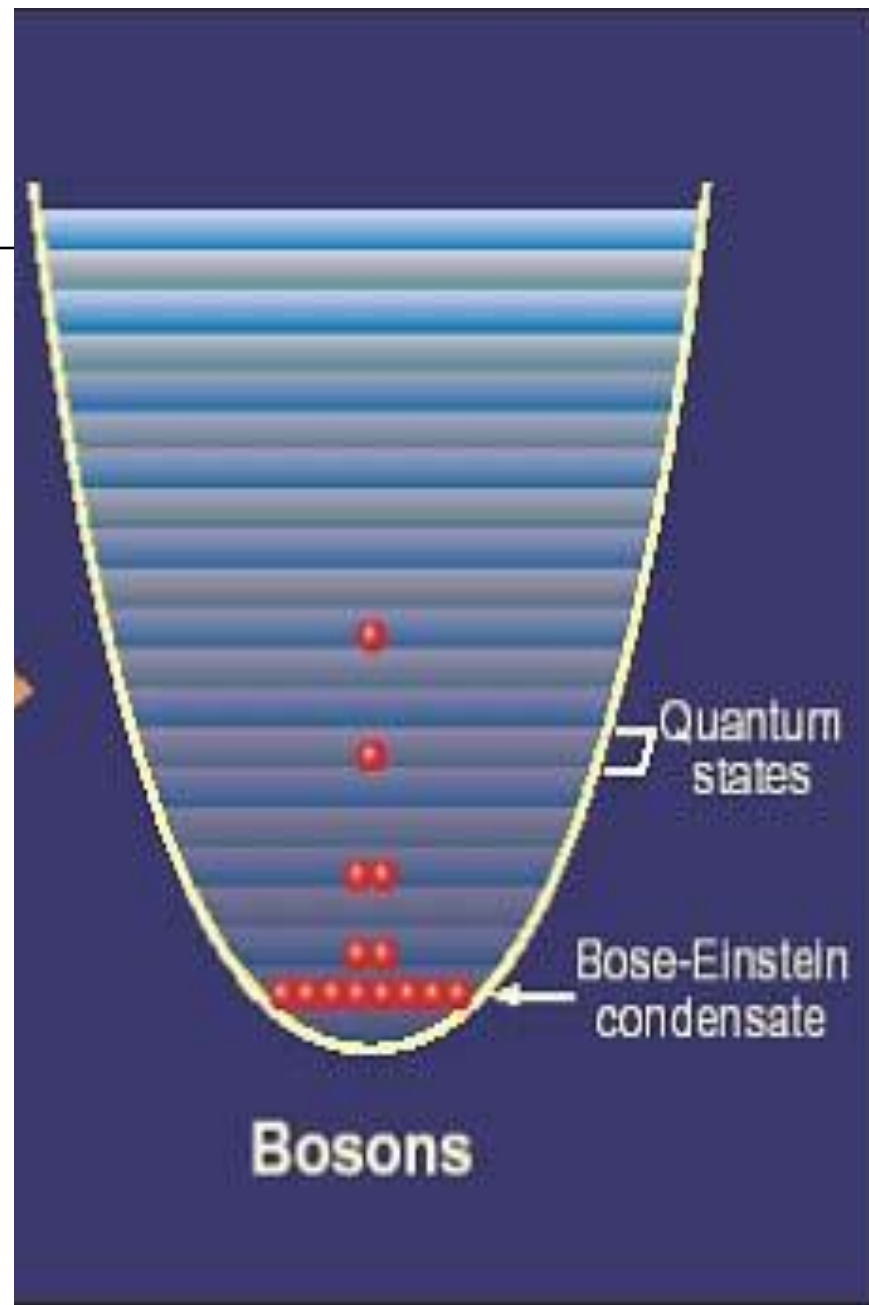
**π - мезоны,
фотоны**

□ Частицы с целым или нулевым спином называются бозонами (например, **фотоны**, **фононы** и некоторые другие ядра).

□ Бозоны

«**КОЛЛЕКТИВИСТЫ**»

при достаточно низкой температуре все они занимают одно (**нижнее по энергии**) квантовое состояние, образуя **бозе-эйнштейновский конденсат**.

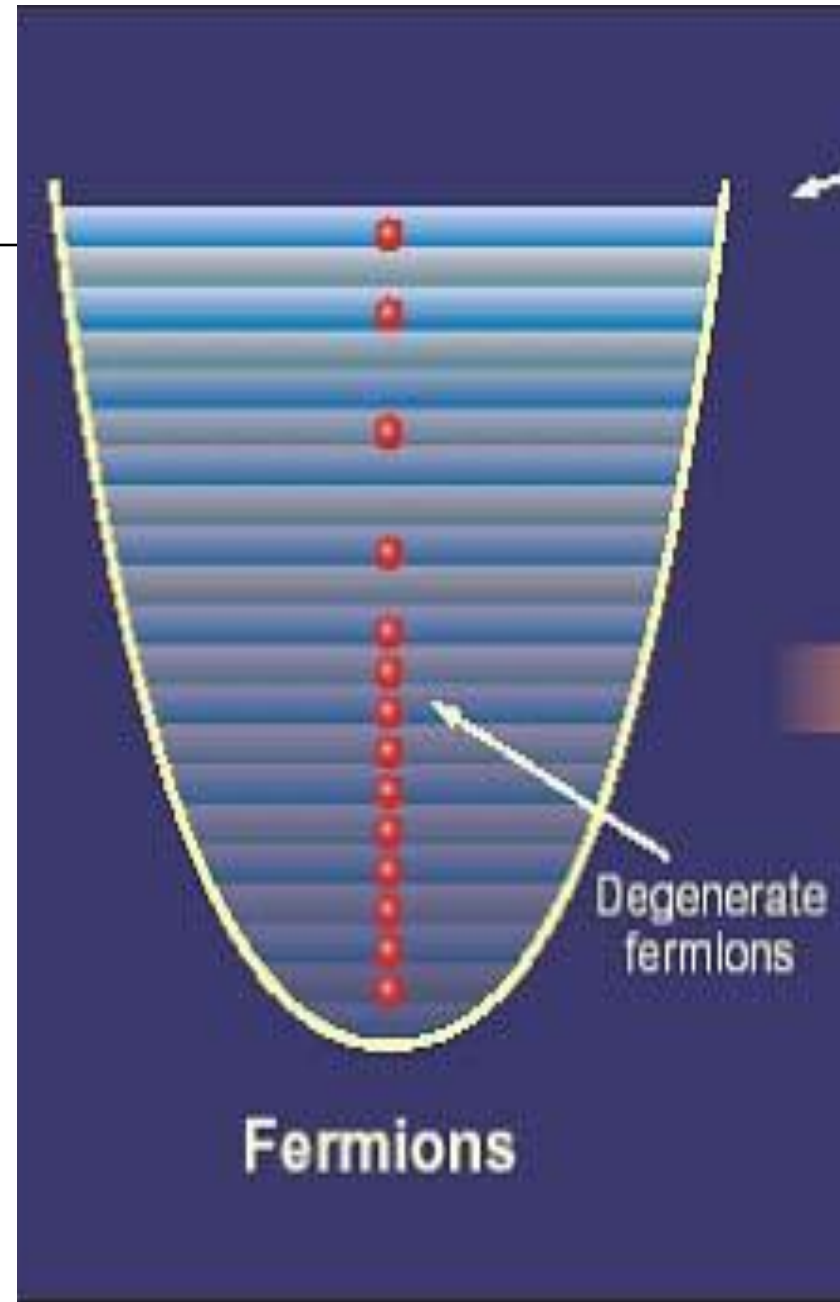


- Частицы с полуцелым спином называются

фермионами (электроны, протоны, нейтроны и др.).

- Фермионы-
«индивидуалисты»
избегают друг друга:

принцип Паули запрещает двум и более электронам находиться в одном состоянии.



Объект изучения квантовой статистики

- Одним из важнейших «объектов» изучения квантовой статистики как и классической, является **идеальный газ**.

Основная задача квантовой статистики

**задача о распределении частиц по
координатам и скоростям.**

Понятие о квантовых статистиках

Бозе – Эйнштейна

Системы бозонов описывается **квантовой статистикой Бозе – Эйнштейна.**

Распределение Бозе — Эйнштейна — формула, описывающая распределение по уровням энергии — формула, описывающая распределение по уровням энергии тождественных частиц — формула, описывающая распределение по уровням энергии тождественных частиц с нулевым или целочисленным спином — формула, описывающая распределение по уровням энергии тождественных частиц с нулевым или целочисленным спином при условии, что взаимодействие частиц в системе слабое и им можно пренебречь (функция

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ Б-Э

- Распределение **Бозе – Эйнштейна** имеет вид

$$\langle N_i \rangle = \frac{1}{\exp((E_i - \mu)/(kT)) - 1}$$

- где $\langle N_i \rangle$ - среднее число бозонов в квантовом состоянии с энергией; k – постоянная Больцмана; T – термодинамическая температура;

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ Б-Э

Распределение Бозе–Эйнштейна — закон, выражающий распределение частиц по энергетическим состояниям в бозе-газе: при статистическом равновесии и отсутствии взаимодействия среднее число частиц в i -м состоянии с энергией E_i равно:

$$\langle N \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{kT}\right) - 1}$$

где k — постоянная Больцмана,
 T — термодинамическая (абсолютная) температура,
 μ — *химический потенциал*

Химический потенциал

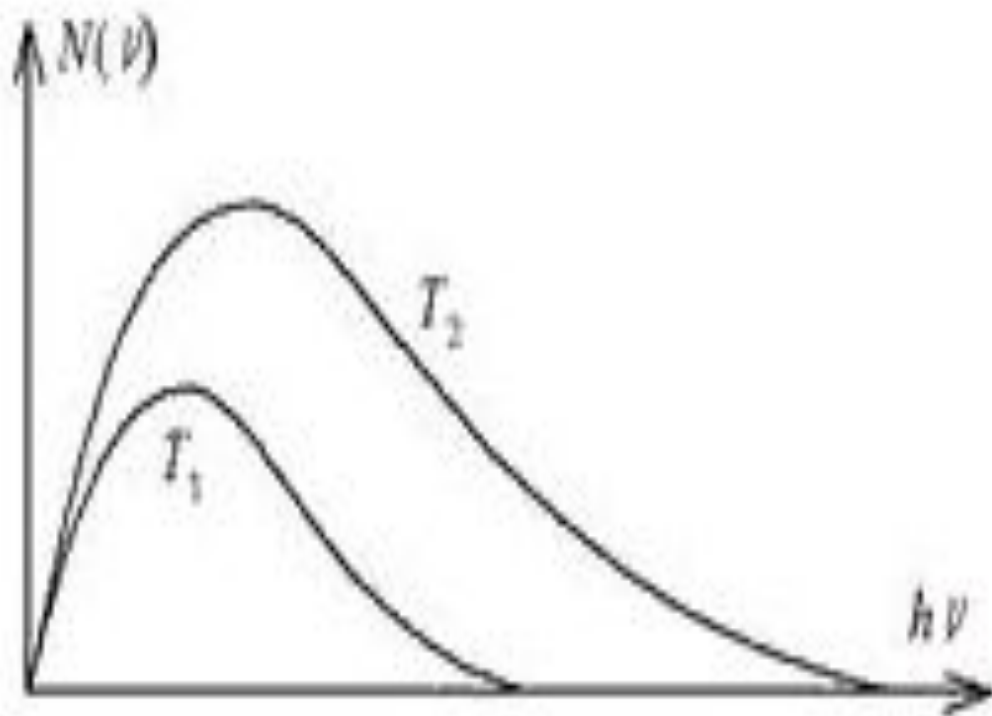
μ — *химический потенциал* — термодинамическая функция состояния, определяющая изменение внутренней энергии системы при изменении числа частиц в системе, при условии, что все остальные величины, от которых зависит внутренняя энергия (энтропия, объем, и т.д.), фиксированы. Химический потенциал необходим для описания свойств *открытых систем*

Открытая система - система с переменным числом частиц.

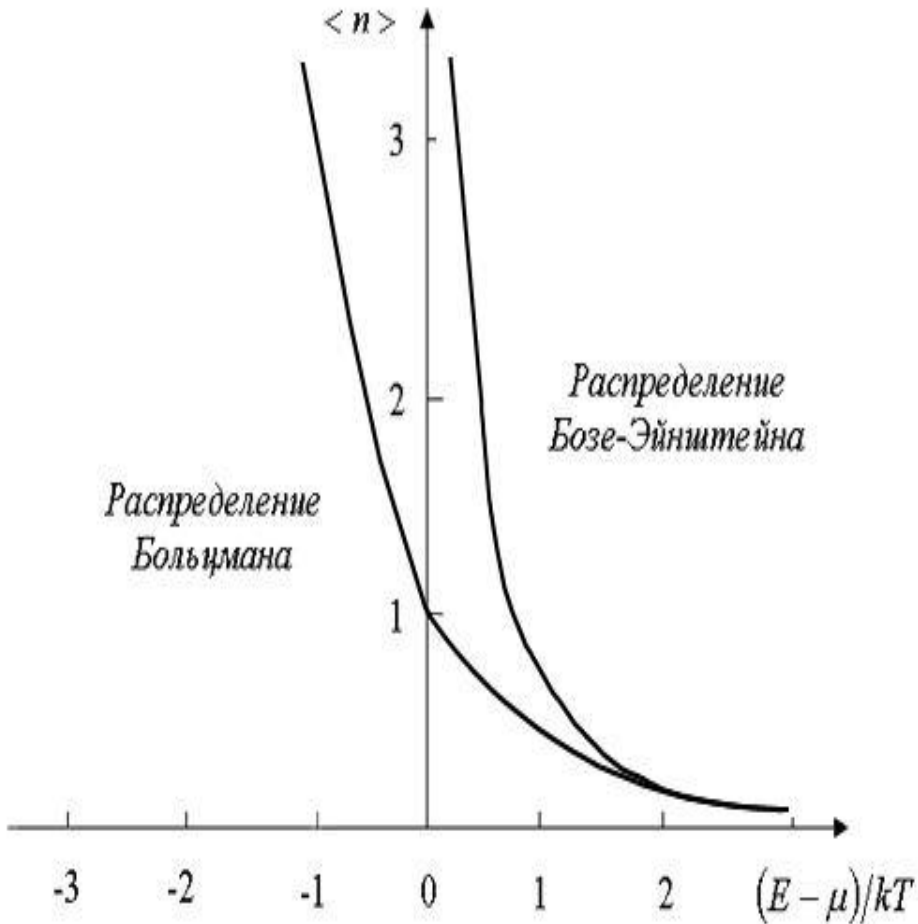
Химический потенциал

- Химический потенциал μ
- Он не зависит от энергии, а определяется только температурой и плотностью числа частиц.
- Кроме того, **химический потенциал** является работой, которая совершается в изобарно – изотермических условиях при увеличении числа частиц в системе на единицу.

-
- Распределение Бозе-Эйнштейна используется для описания свойств систем, состоящих из бозе-частиц.
 - С его помощью описываются свойства теплового излучения, теплоемкость кристаллов и многие другие физические явления.



- Функцией распределения
- Бозе –Эйнштейна называется средняя «заселенность» бозонами состояний с данной энергией, то есть, среднее число частиц в одном состоянии.

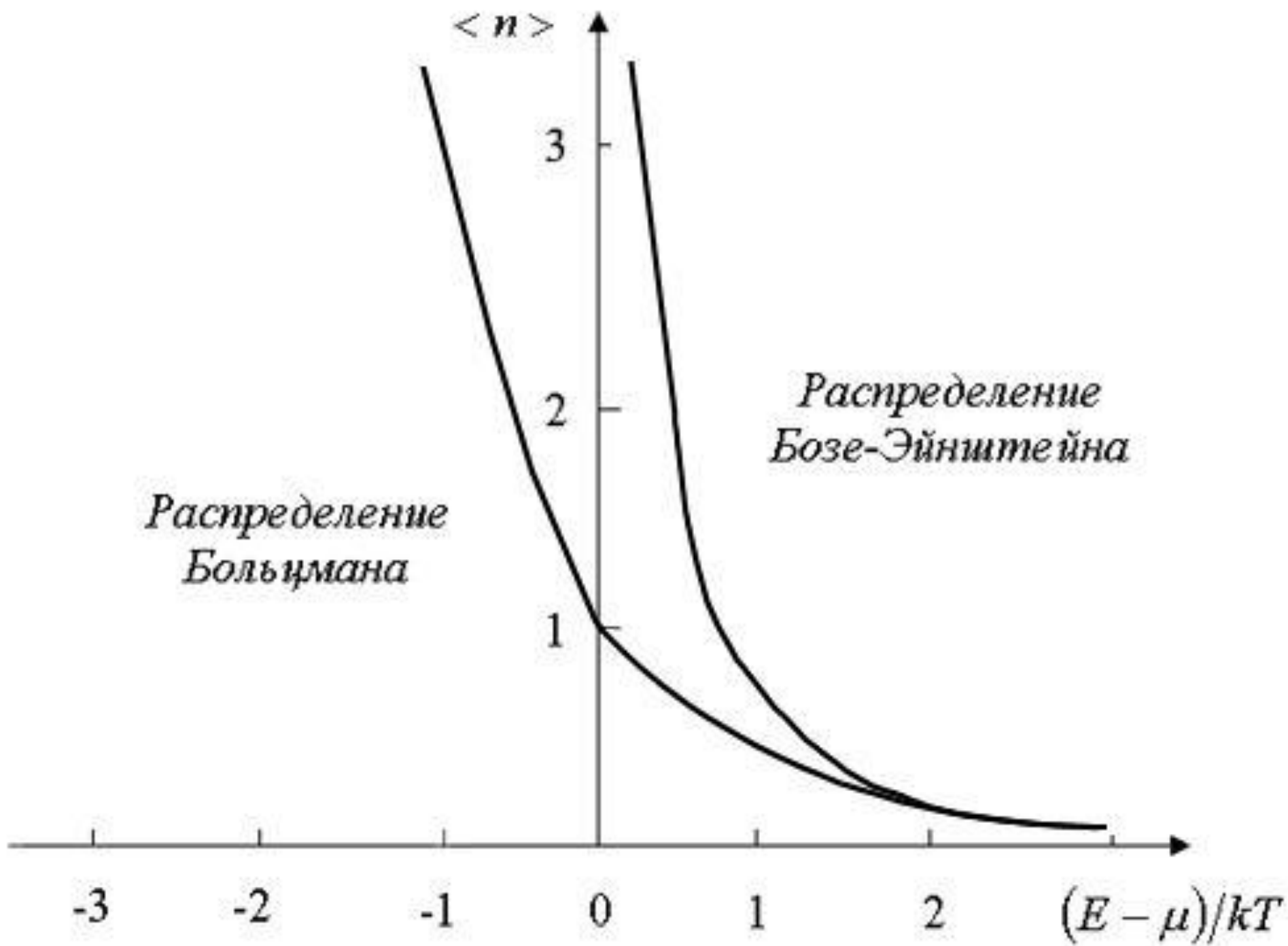


- На рис. приведены графики распределений **Бозе-Эйнштейна** и **Больцмана**.

При $(E - \mu) \ll kT$ эти распределения

Различие между распределениями обнаруживается при

в этом случае будут проявляться свойства бозе-газа, обусловленные квантовой природой его частиц.



Понятие о квантовых статистиках Ферми – Дирака

□ Системы фермионов описываются
антисимметричными волновыми функциями и
подчиняются **статистике Ферми-Дирака**.

Идеальный газ из фермионов — ферми-газ — описывается квантовой статистикой Ферми-Дирака.

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ Ф-Д

Распределение Ферми–Дирака — закон, выражающий распределение частиц по энергетическим состояниям в ферми-газе: при статистическом равновесии и отсутствии взаимодействия среднее число частиц в i -м состоянии с энергией E_i равно:

$$\langle N_i \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{kT}\right) + 1}$$

Функции Ферми-Дирака

□ В термодинамическом равновесии электроны распределяются по энергетическим состояниям в соответствии с функцией распределения Ферми - Дирака:

$$f(E, T) = \frac{1}{e^{\frac{E - E_F}{kT}} + 1}$$

□ где $f(E, T)$ – вероятность нахождения электрона в состоянии с энергией E ;

□ T – температура системы (К);

□ k – постоянная Больцмана;

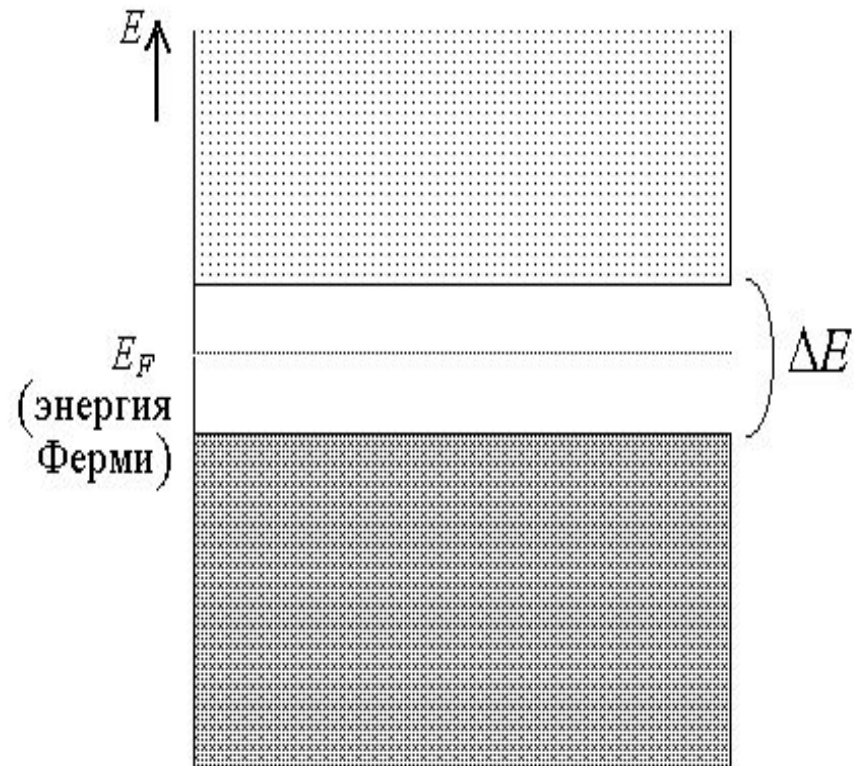
□ E_F – энергия уровня Ферми

(это характеристическая энергия системы, ниже которой при $T = 0 \text{ K}$ все состояния **заполнены**, **выше – пустые**).

$$f(E, T) = \frac{1}{e^{\frac{E - E_F}{kT}} + 1}$$

- **Уровень Ферми** уровень, вероятность нахождения электрона на котором равна **0,5** **должен** находиться между зоной проводимости и валентной зоной, т.е. **лежать в запрещенной зоне**.

Почему???



E



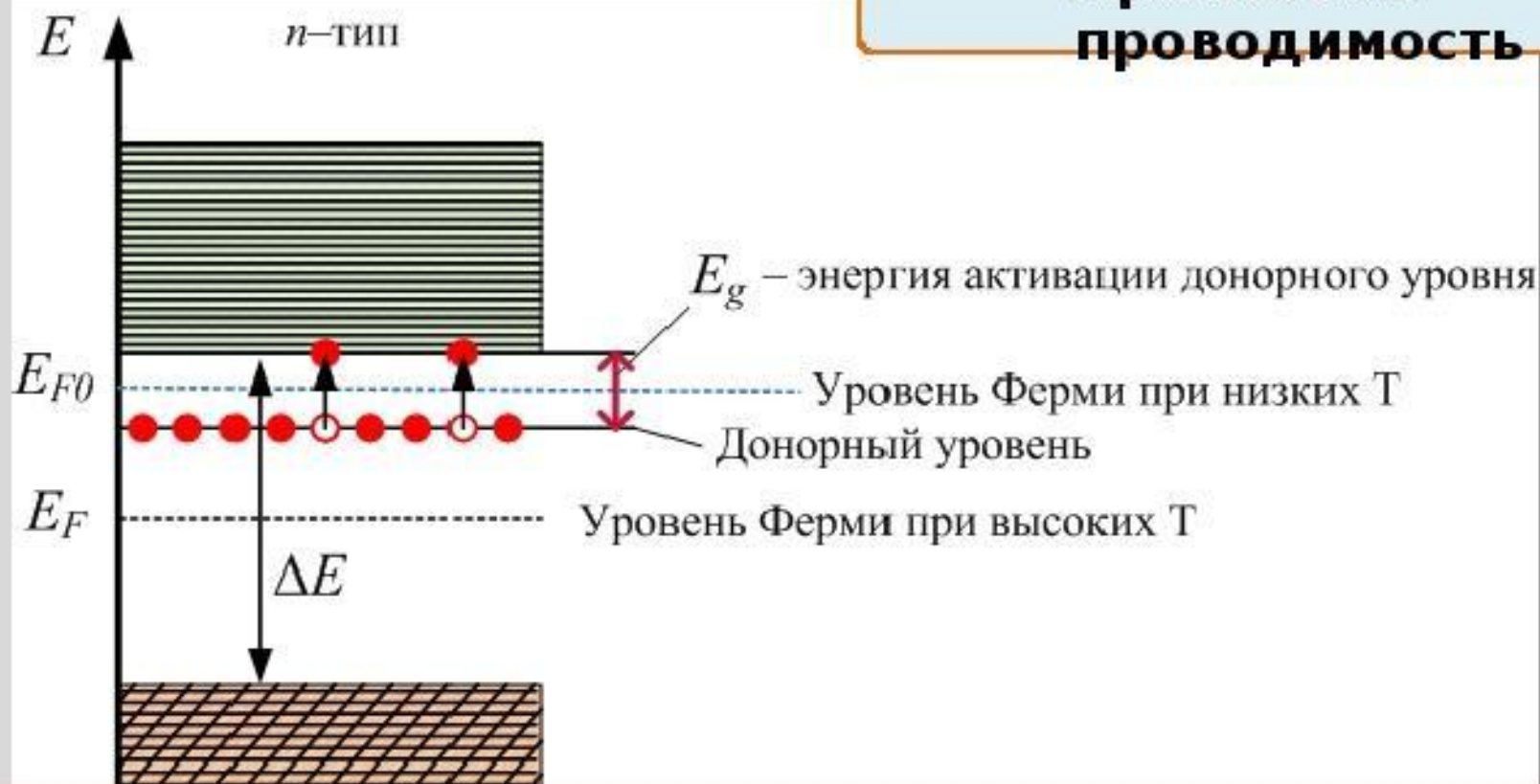
An upward-pointing arrow next to the letter E, indicating the direction of increasing energy.

E_F

(энергия Ферми)

ΔE

Примесная проводимость

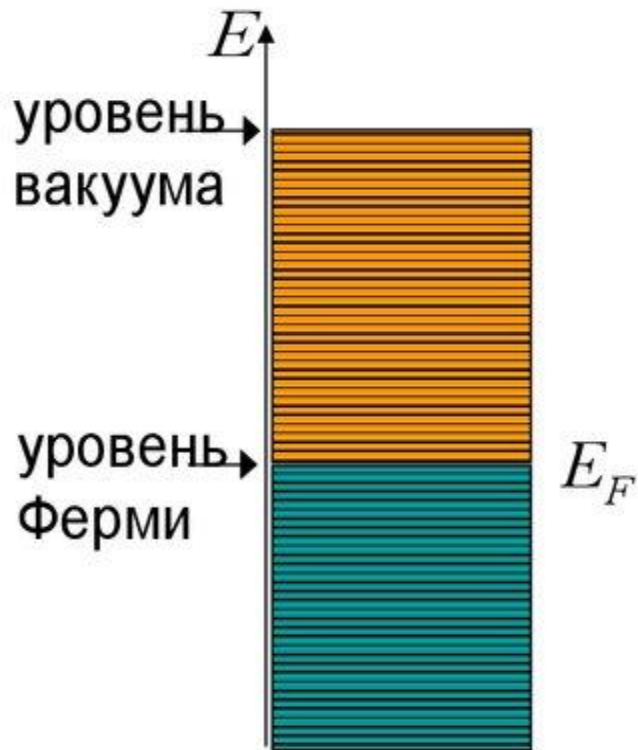


При низких температурах уровень Ферми почти совпадает с примесным уровнем

При высоких T примесный уровень истощается, а электроны перебрасываются из валентной зоны в зону проводимости – преобладает собственная проводимость

Уровень Ферми перемещается к центру запрещённой зоны, как в собственных полупроводниках

Элементы зонной теории в металлах



E_F – уровень Ферми

$F(E)$ – вероятность нахождения
электрона на уровне E

$$F(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)}$$

функция
Ферми-Дирака

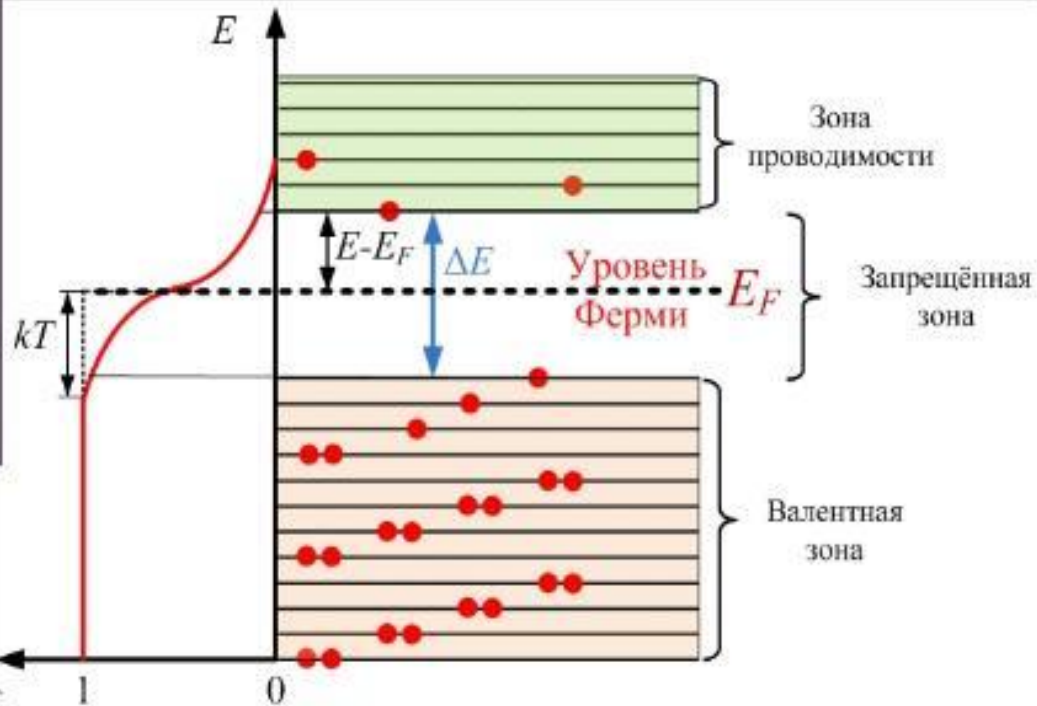
Уровень Ферми в металлах – максимальная энергия,
которую может иметь электрон при $T=0$ К

Уровень Ферми связан с концентрацией свободных электронов в металле

Зависимость проводимости Полупроводников от температуры

Концентрация n_n свободных электронов в зоне проводимости пропорциональна функции распределения f – вероятности заполнения уровней

$$n_n = n_p \sim f(E) = e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}$$



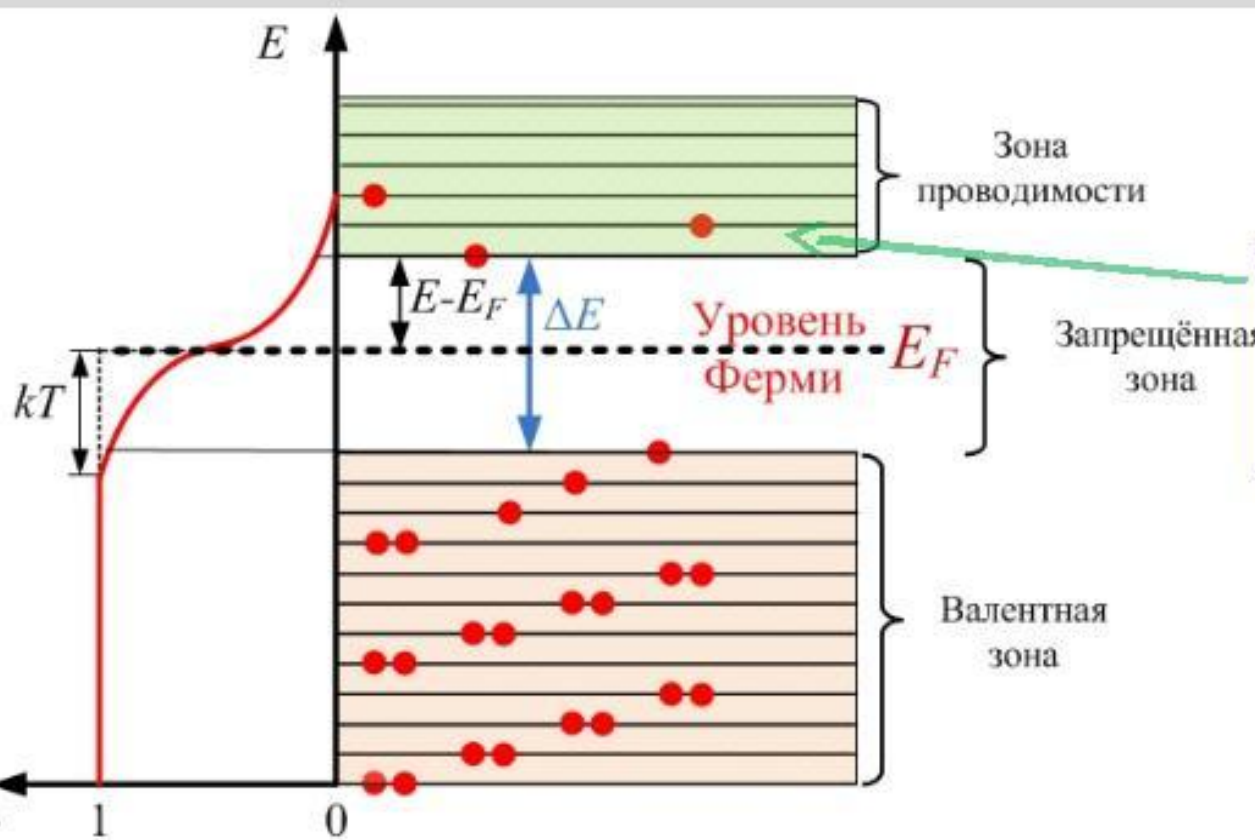
Это – классическое больцмановское распределение
Электронный газ в полупроводнике – классический, невырожденный

При обычных (комнатных) температурах энергия теплового возбуждения много меньше ширины ΔE запрещённой зоны ($\Delta E \sim 1$ эВ):

$$kT \approx 1.38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{Дж}}{\text{К}} \cdot 300\text{К} \approx 4 \cdot 10^{-21} \text{ Дж} \approx 2.6 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}$$

$$kT \ll \Delta E$$

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1}$$



Электроны находятся в зоне проводимости практически у её дна

$$E - E_F = \frac{\Delta E}{2}$$

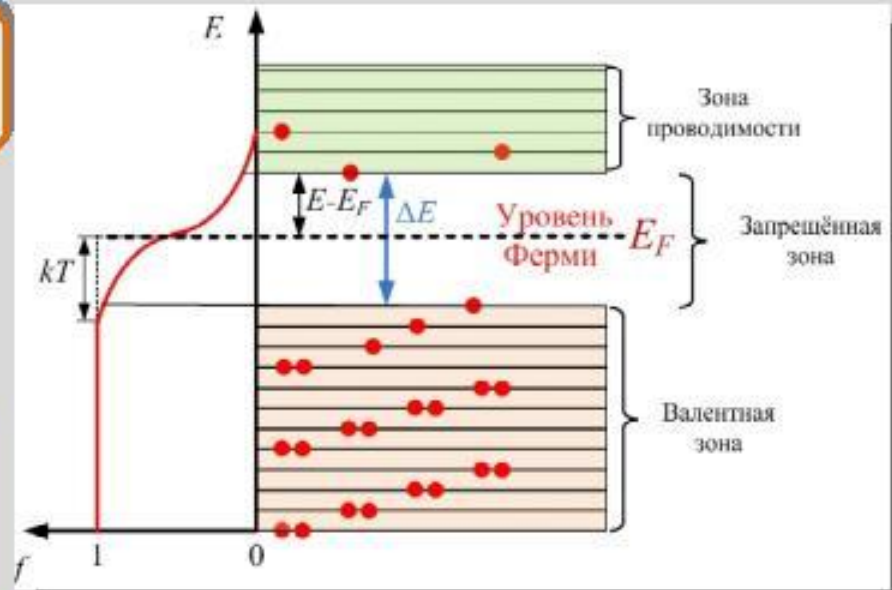
$$E - E_F \gg kT$$

Зависимость проводимости полупроводников от температуры

$$E - E_F = \frac{\Delta E}{2}$$

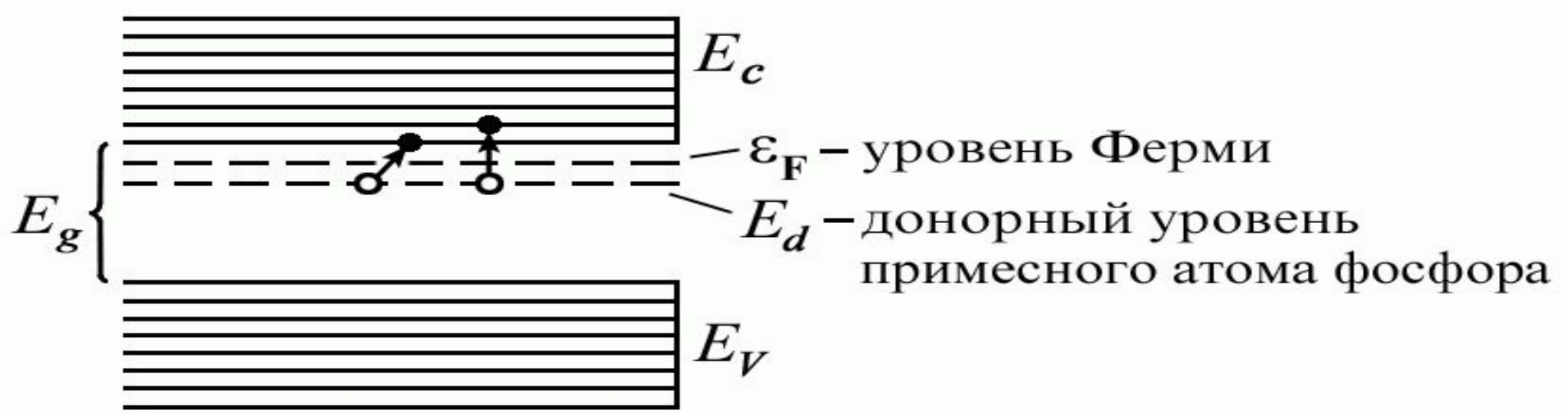
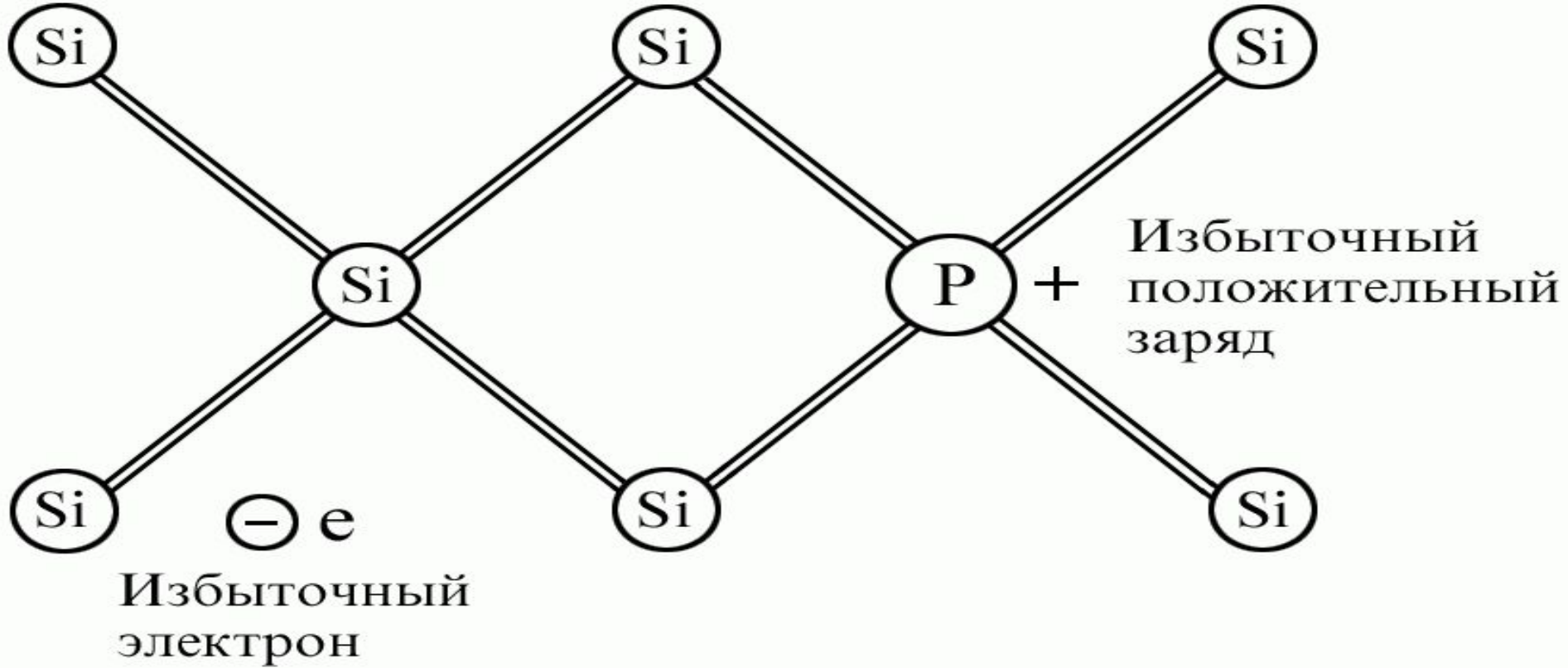
$$\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) = \exp\left(\frac{\Delta E}{2kT}\right) \gg 1$$

$$kT \ll \Delta E$$

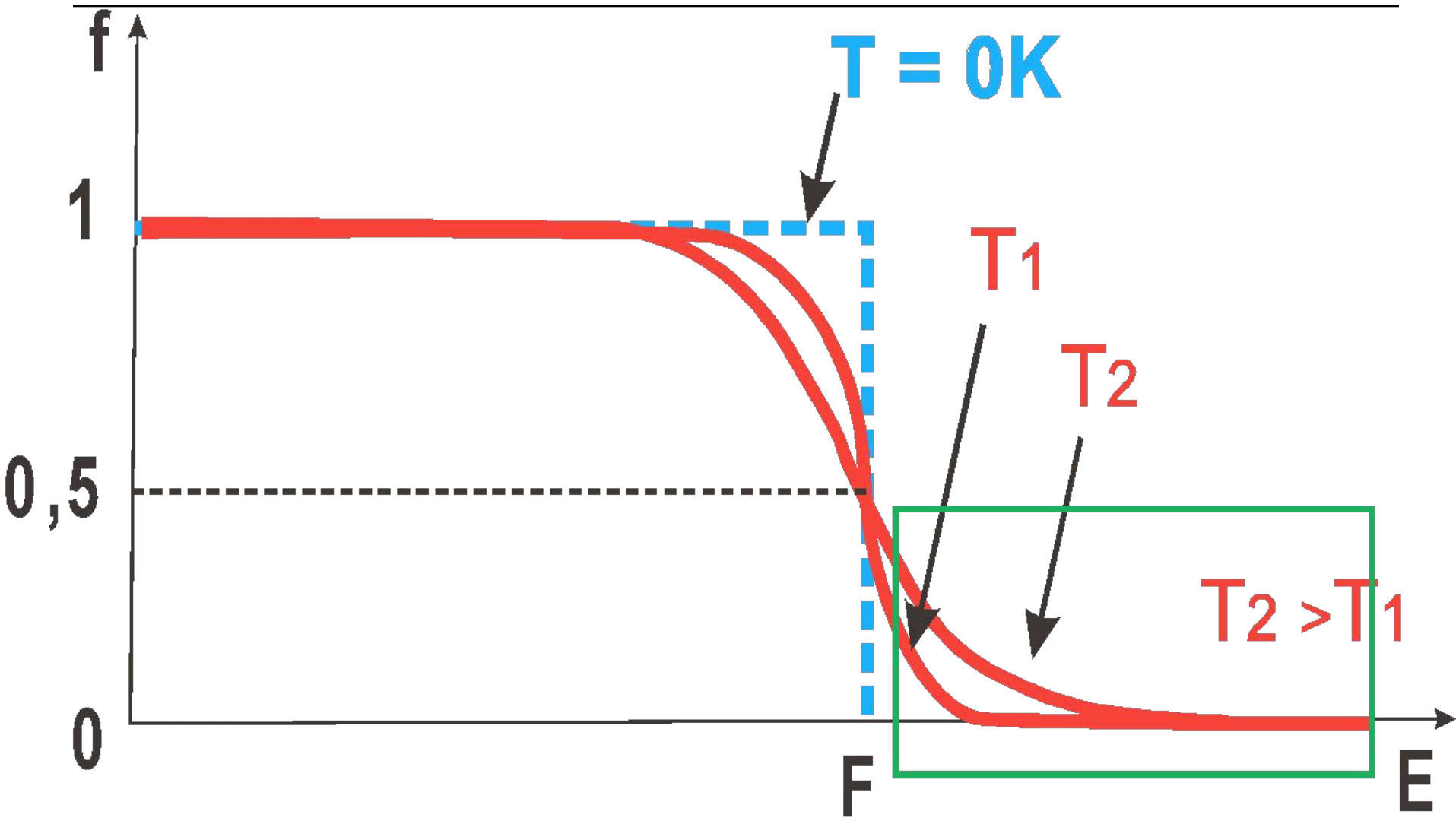


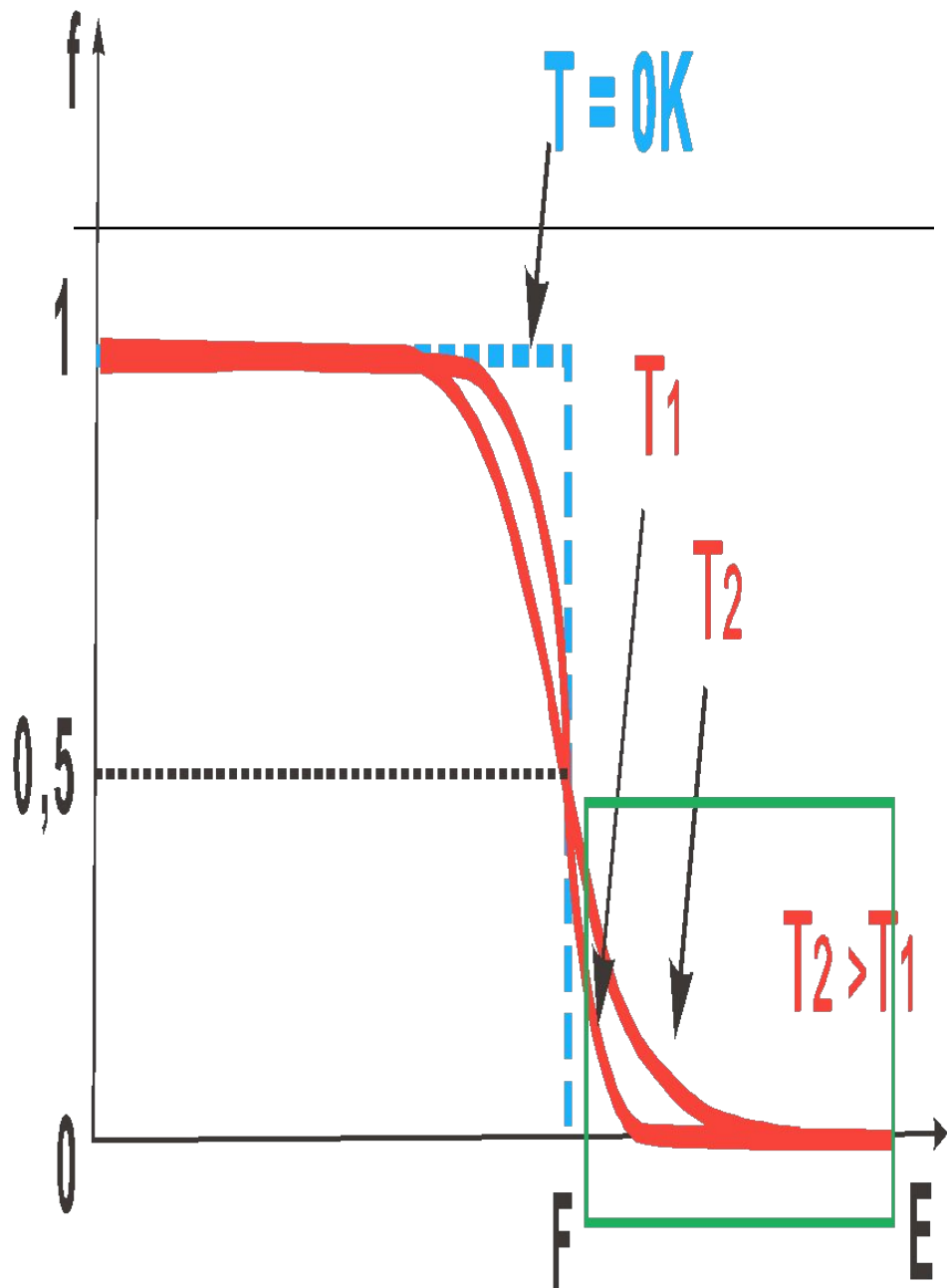
$$\exp\left(\frac{\Delta E}{2kT}\right) + 1 = \exp\left(\frac{\Delta E}{2kT}\right)$$

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1} = \exp\left(-\frac{\Delta E}{2kT}\right) \equiv e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}$$



Функции Ферми-Дирака при различных значениях температуры

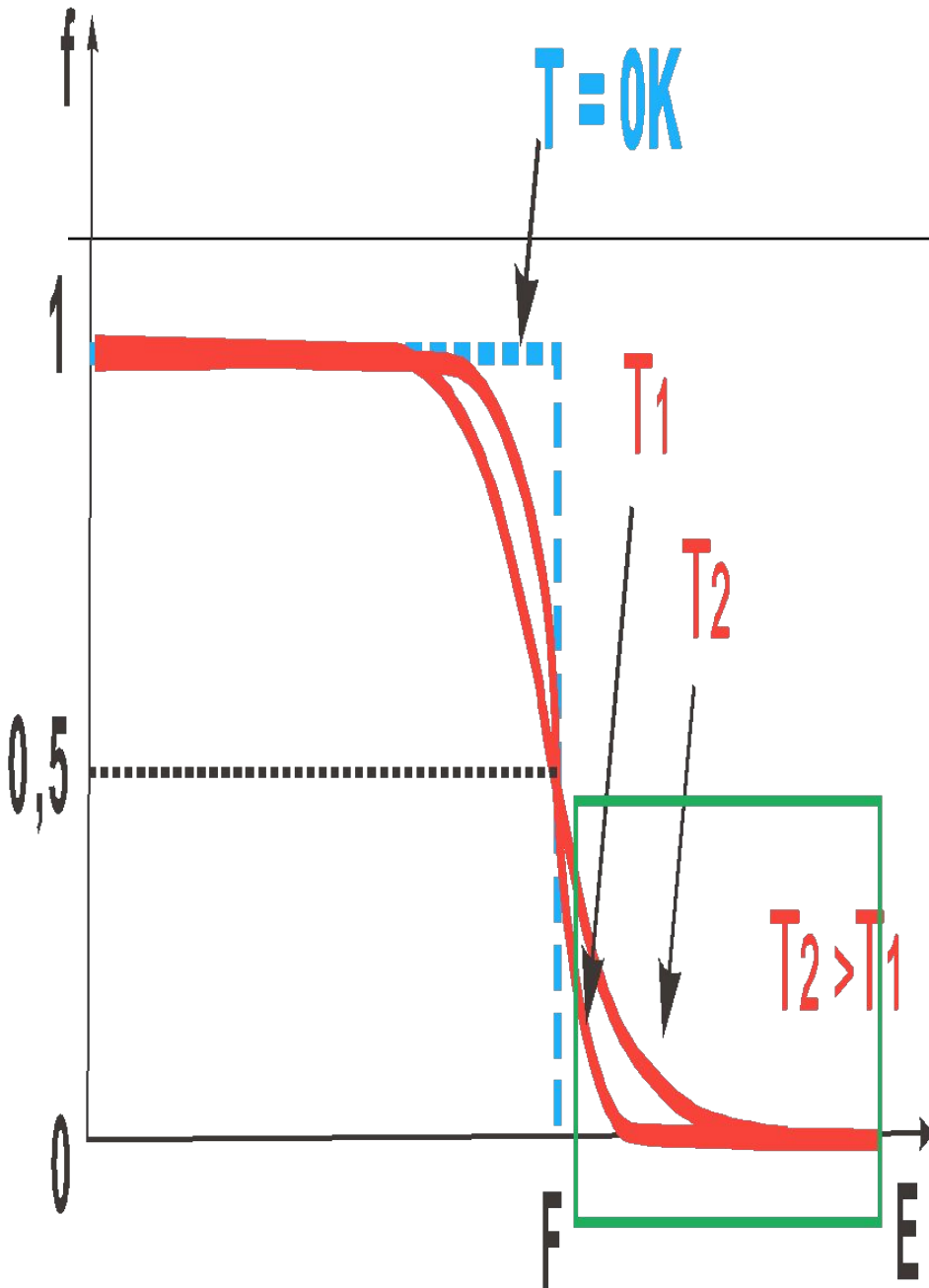




Почему?

**вероятность
нахождения
частицы**

на уровне с энергией E_F
всегда равна **0,5**
при всех температурах.



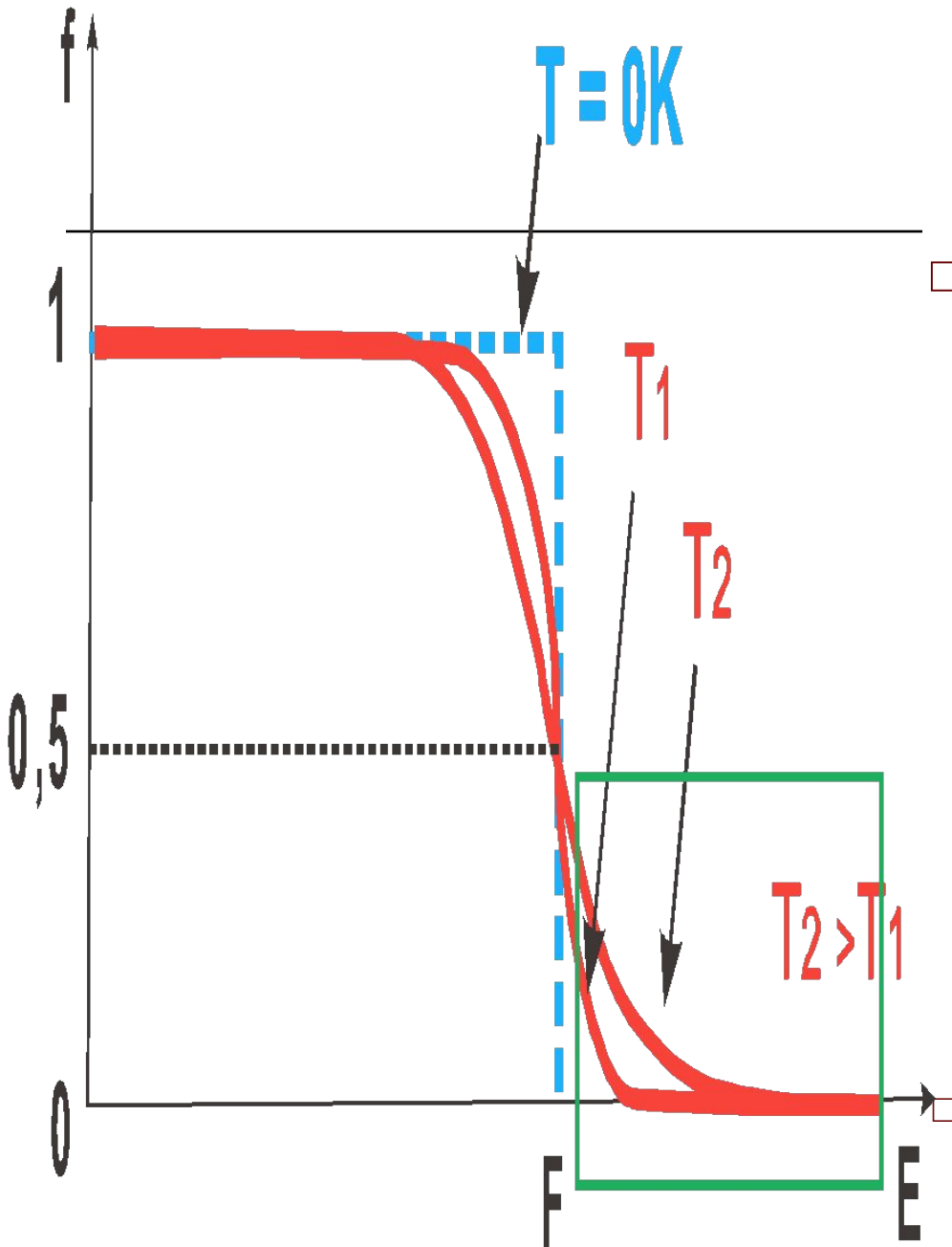
Почему ?

с ростом температуры

**вероятность появления
частиц**

выше уровня **Ферми**

возрастает



Почему ?

- при температурах отличных от нуля,

$E - E_F > kT$
функция
Ферми-Дирака

представляется

экспоненциальной
зависимостью

(область в квадрате
 рисунка)

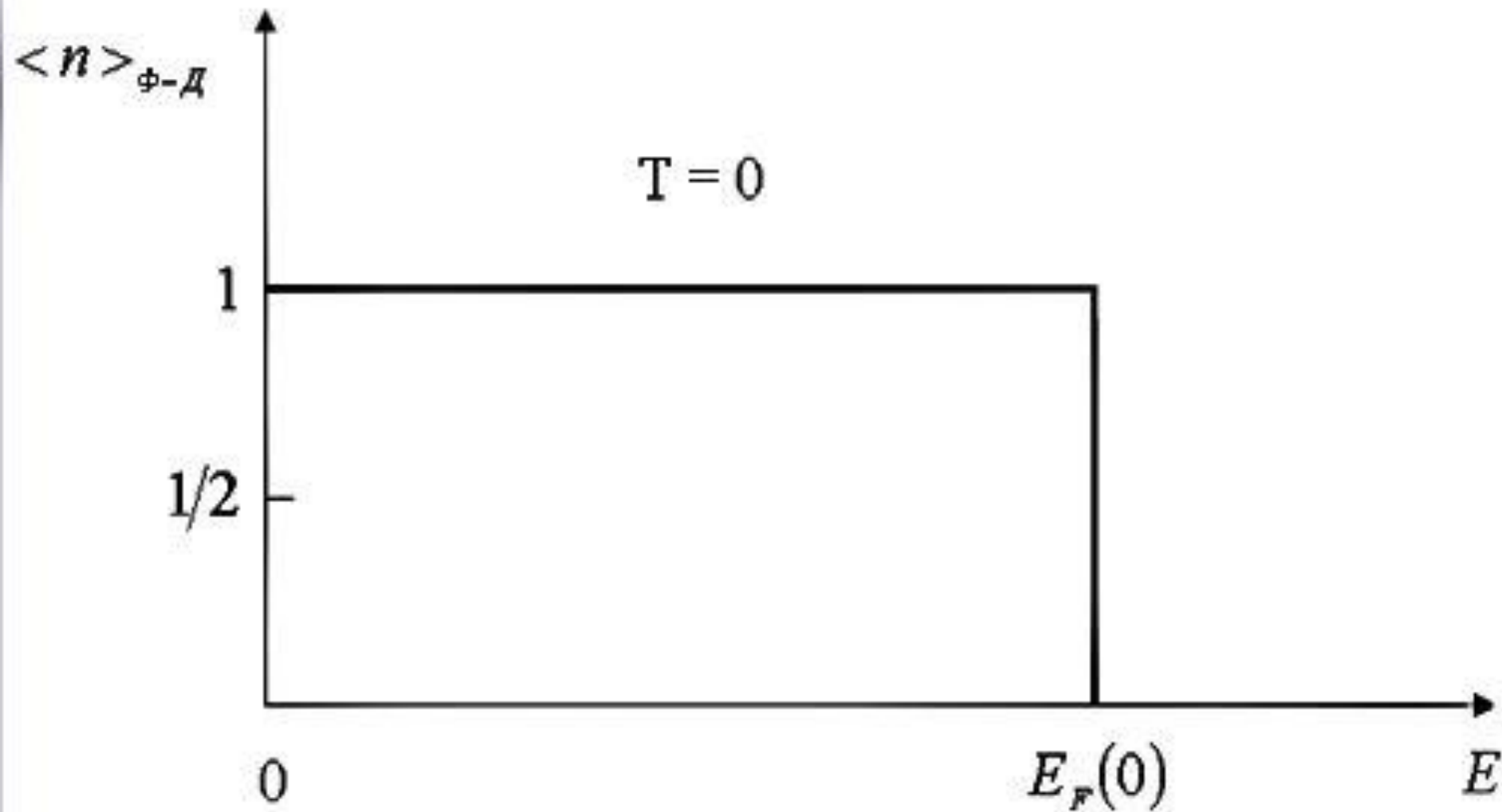
Распределение Ферми – Дирака

- Распределение Ферми – Дирака имеет вид

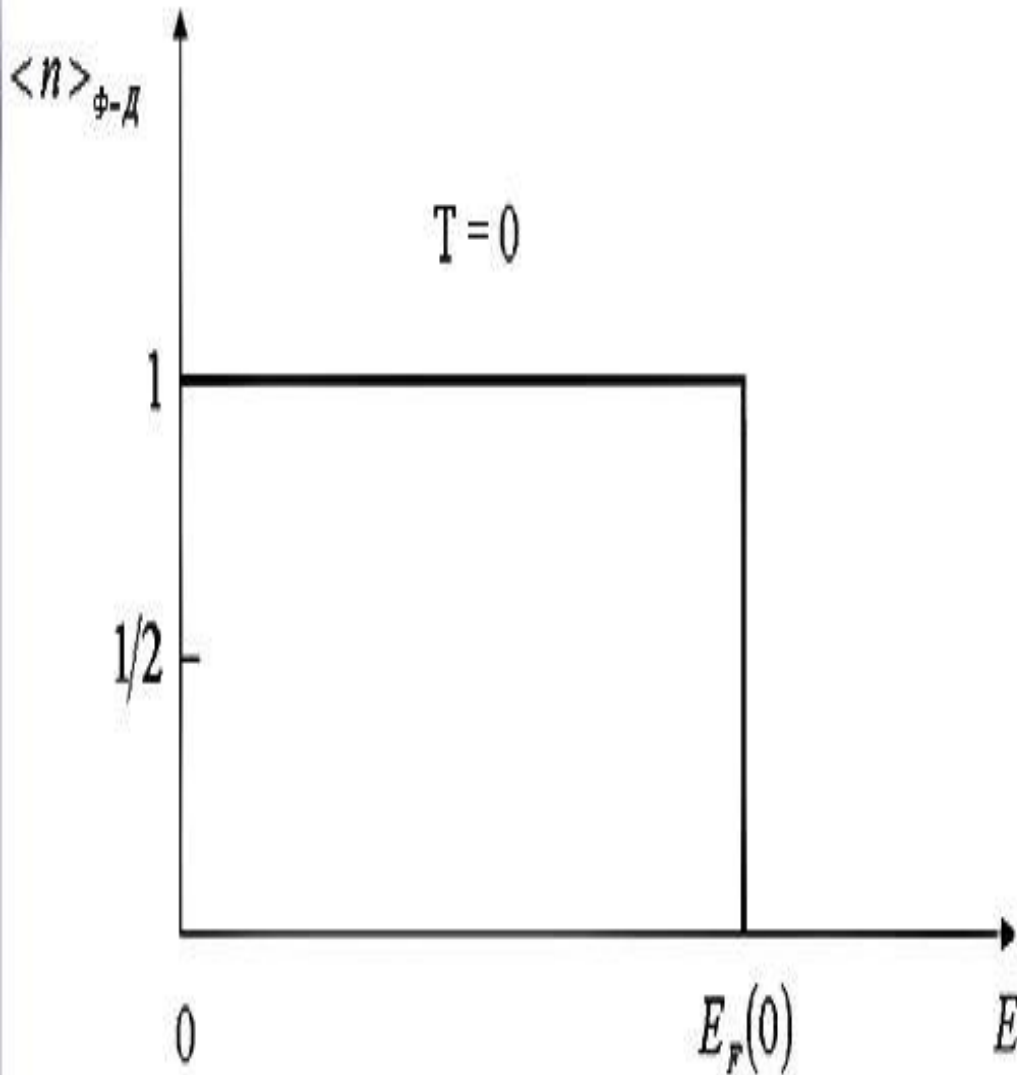
$$\langle N_i \rangle = \frac{1}{\exp((E_i - \mu)/(kT)) + 1}$$

- где $\langle N_i \rangle$ среднее число фермионов в квантовом состоянии с энергией E_i .

Распределение Ферми-Дирака



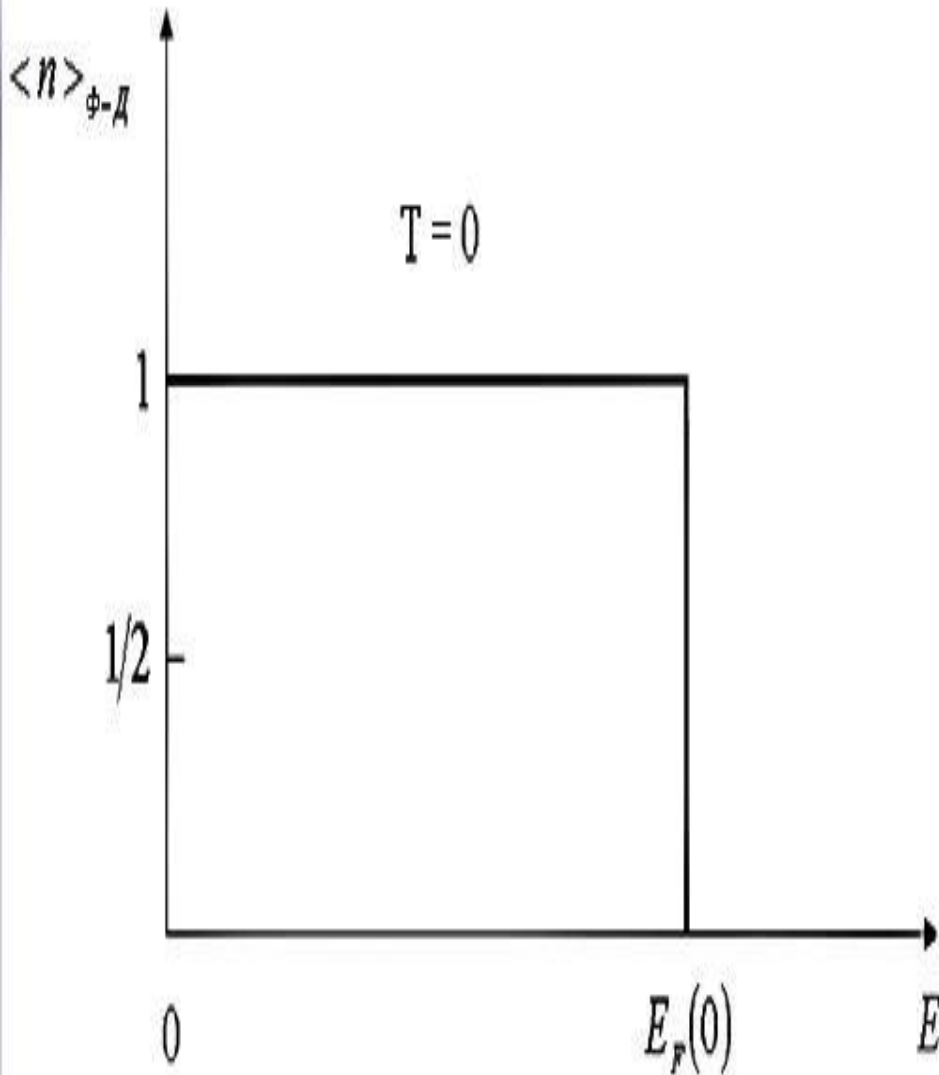
Распределение Ферми-Дирака



Почему ?

- при **$T=0$**
- **энергия Ферми** является **максимальной энергией**, которой могут обладать **ферми-частицы.**

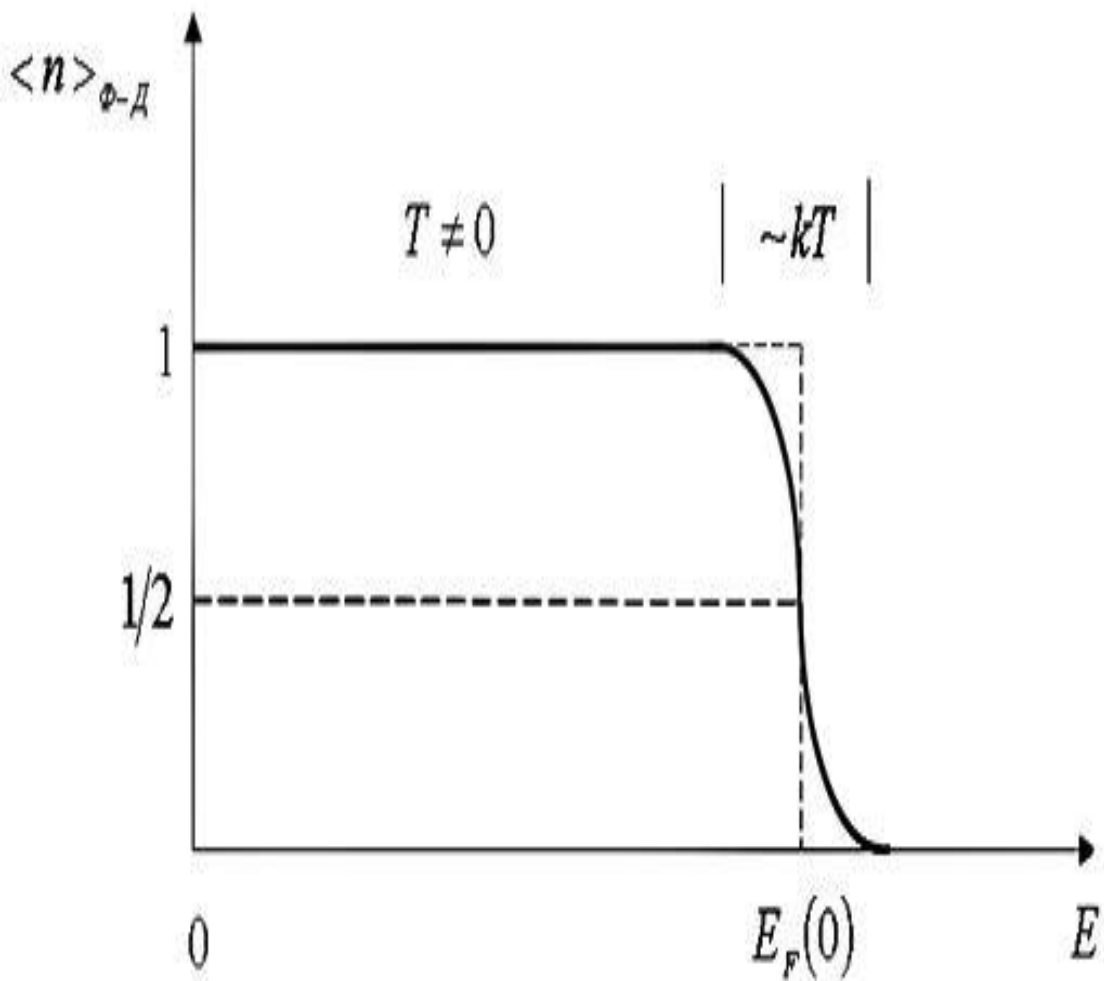
Распределение Ферми-Дирака



Почему ?

- Распределение **Ферми-Дирака**
- представляет собой ступенчатую функцию единичной высоты, обрывающуюся при

$$E = E_f(0)$$

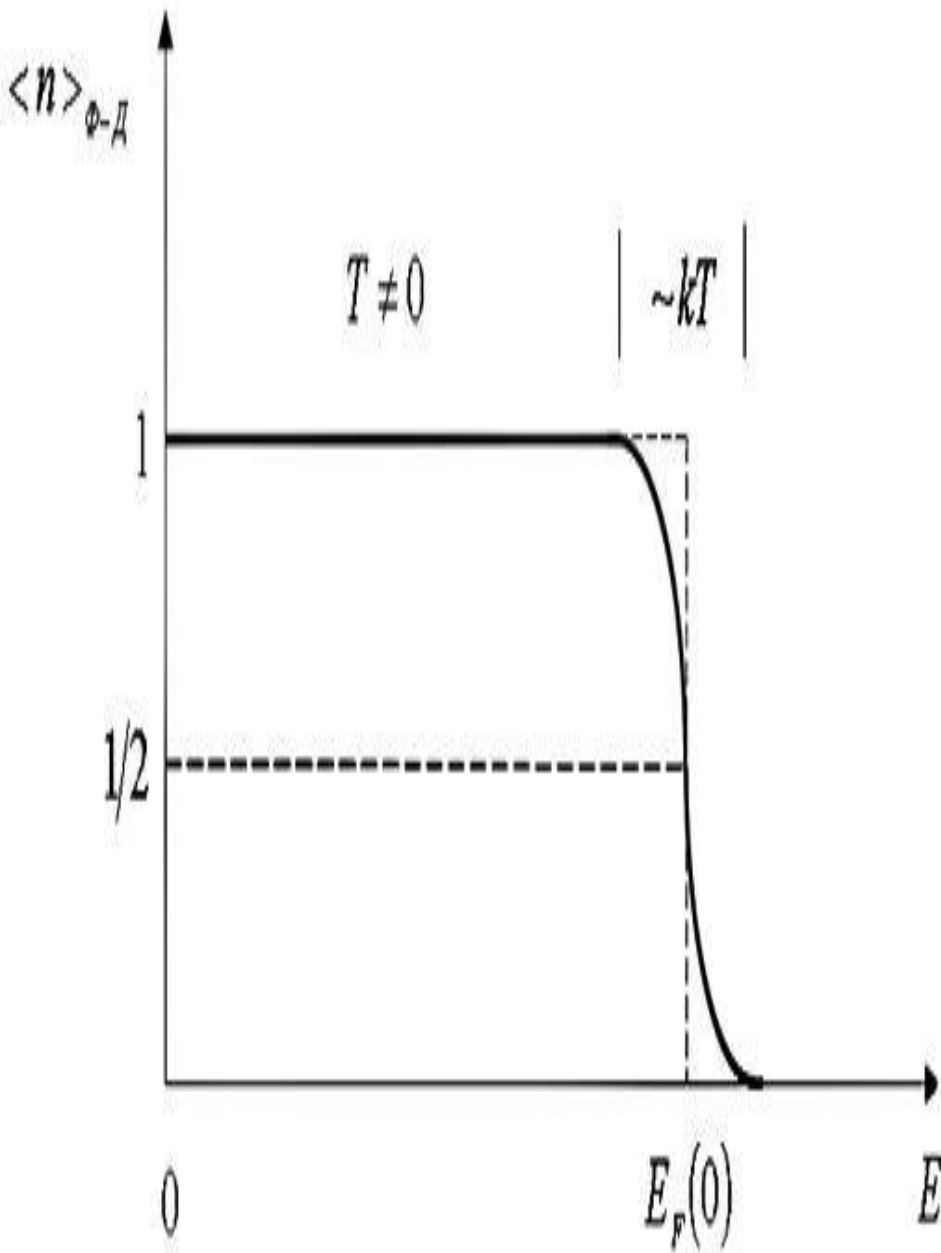


- При $T \neq 0$
- ВИД ЗАВИСИМОСТИ

ОТ **E**

$$\langle n \rangle_{\Phi-D}$$

ИМЕЕТ ВИД



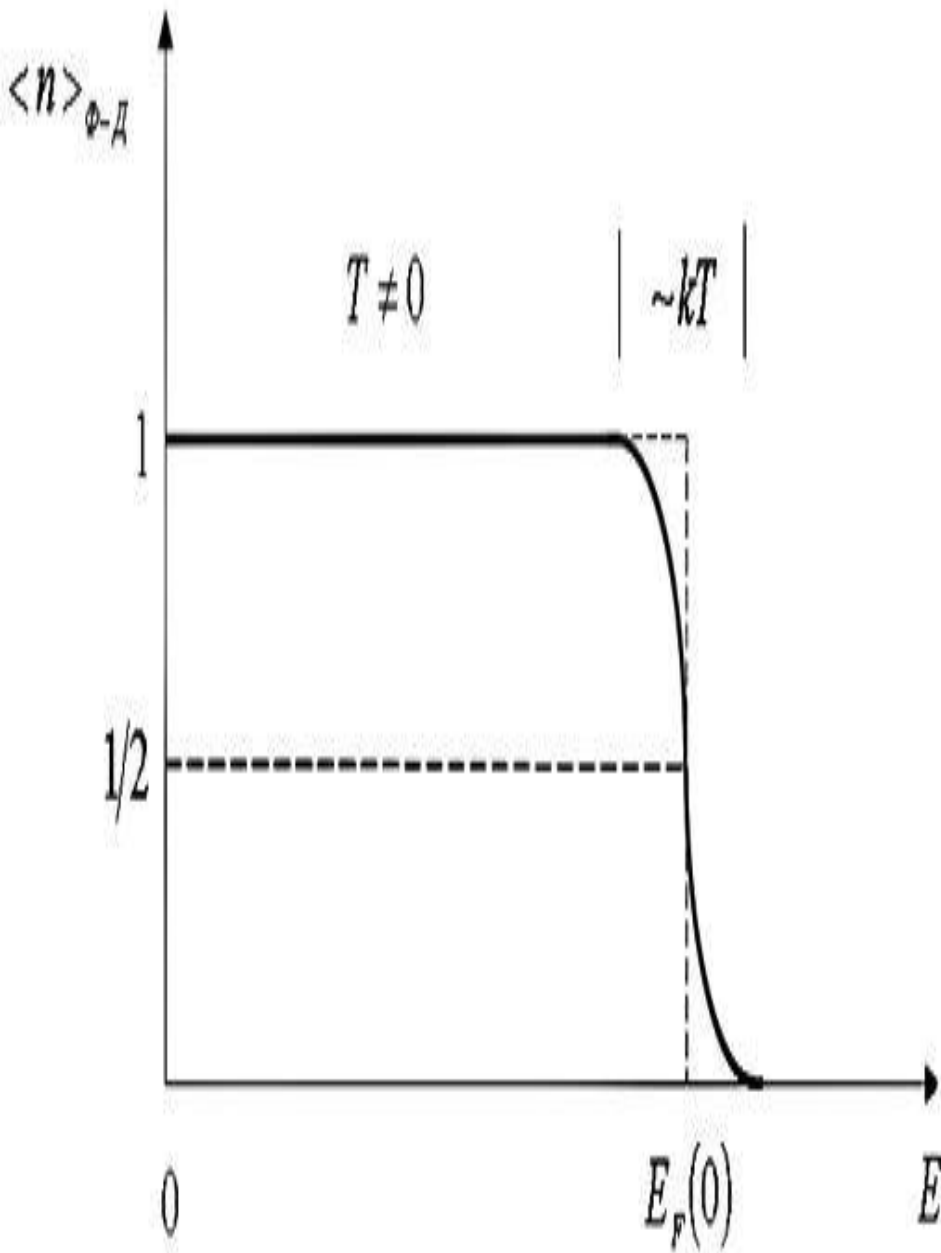
резкий скачок

$$\langle n \rangle_{\Phi-D}$$

от единицы до нуля

становится **более**
размытым и
 происходит в области
 энергий, шириной
порядка нескольких

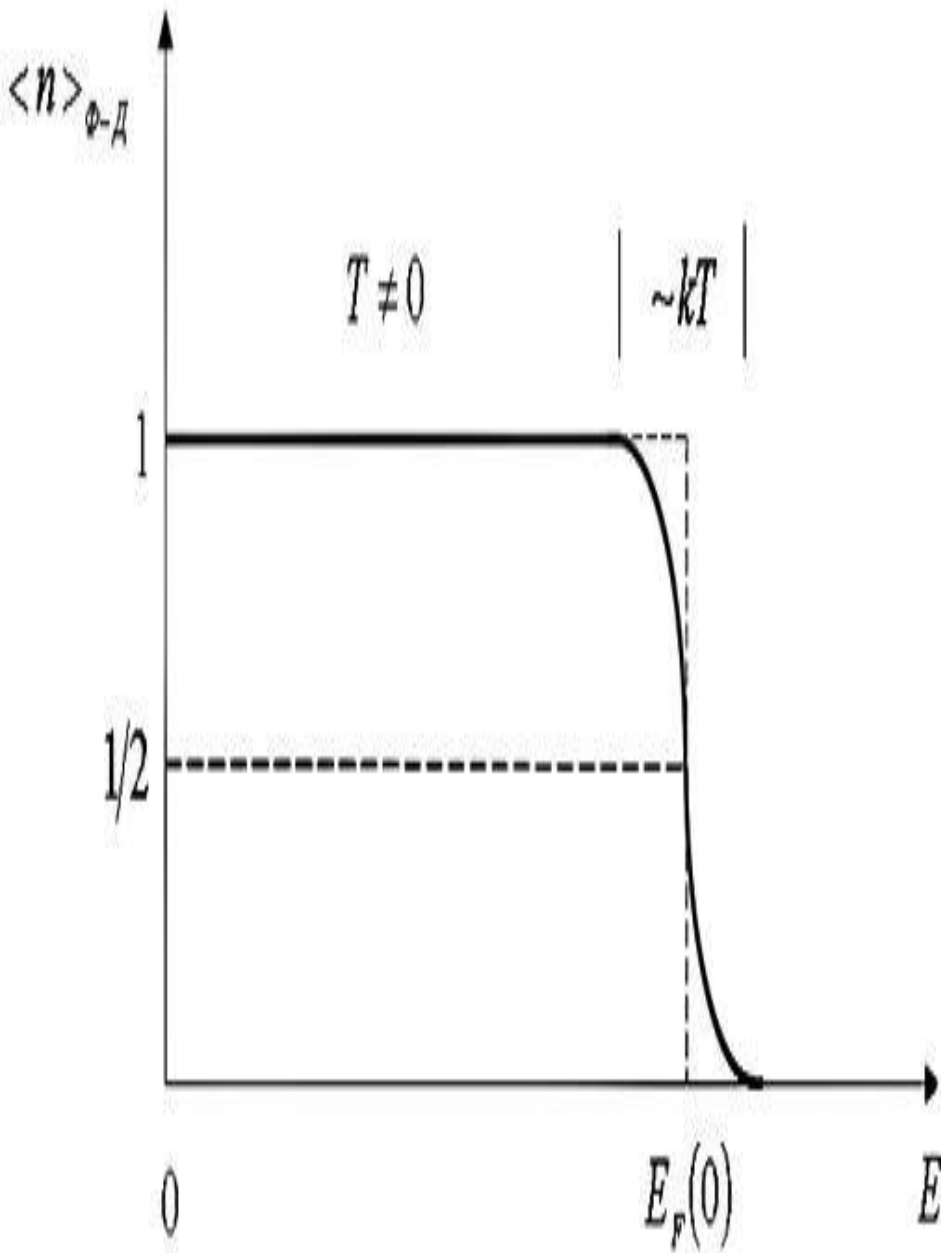
$$kT$$



Чем выше температура,
тем шире область, в
которой

$$\langle n \rangle_{\Phi-D}$$

меняется от единицы
до нуля, и тем **более**
плавно происходит
переход от
заполненных состояний
к незаполненным.

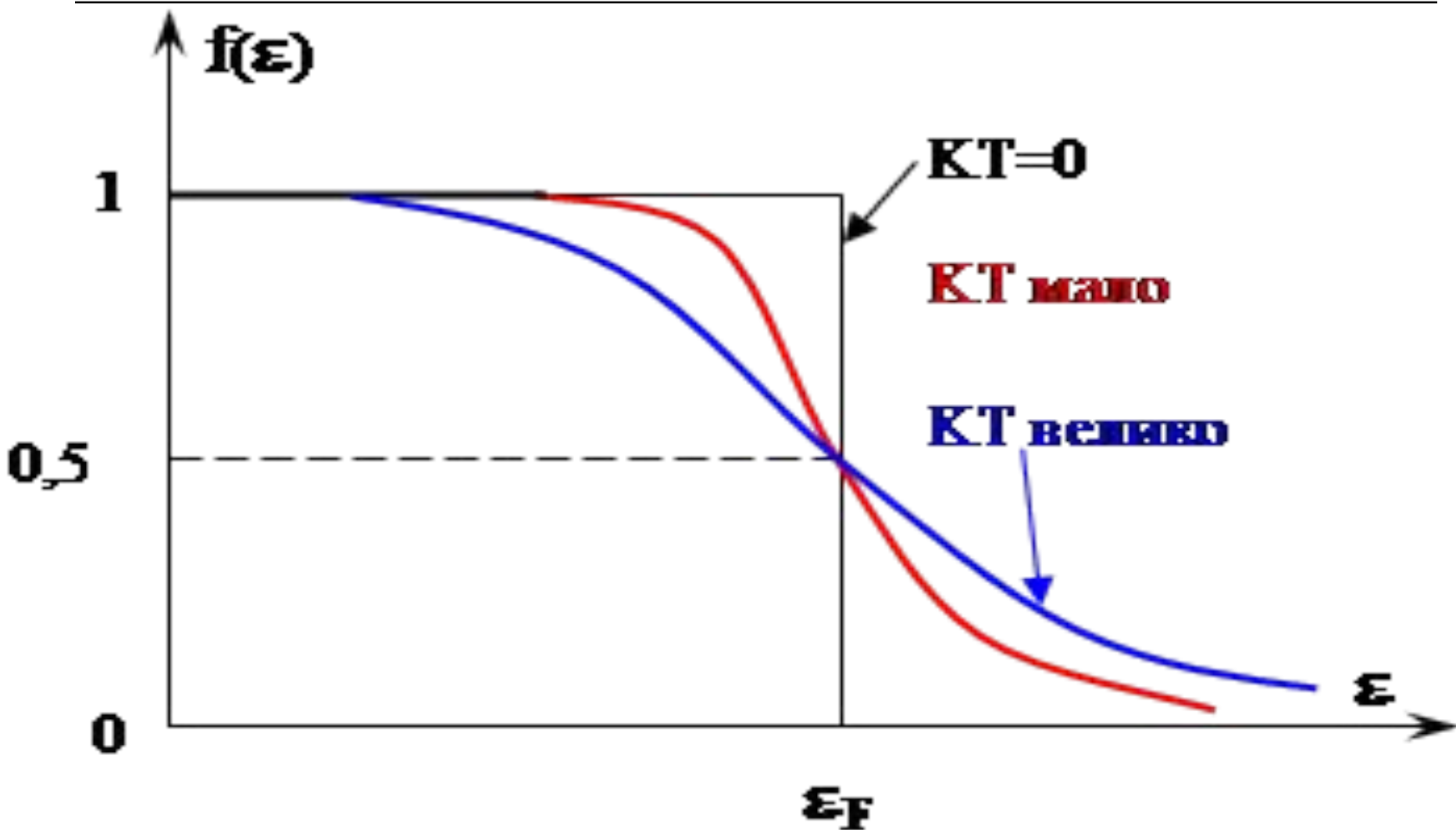


при любой температуре

при $E = E_F$

значение $\langle n \rangle_{\Phi-D} = \frac{1}{2}$

Распределение Ферми - Дирака при различных значениях kT





Если

$$\exp(E_i - \mu) / (kT) \gg 1$$

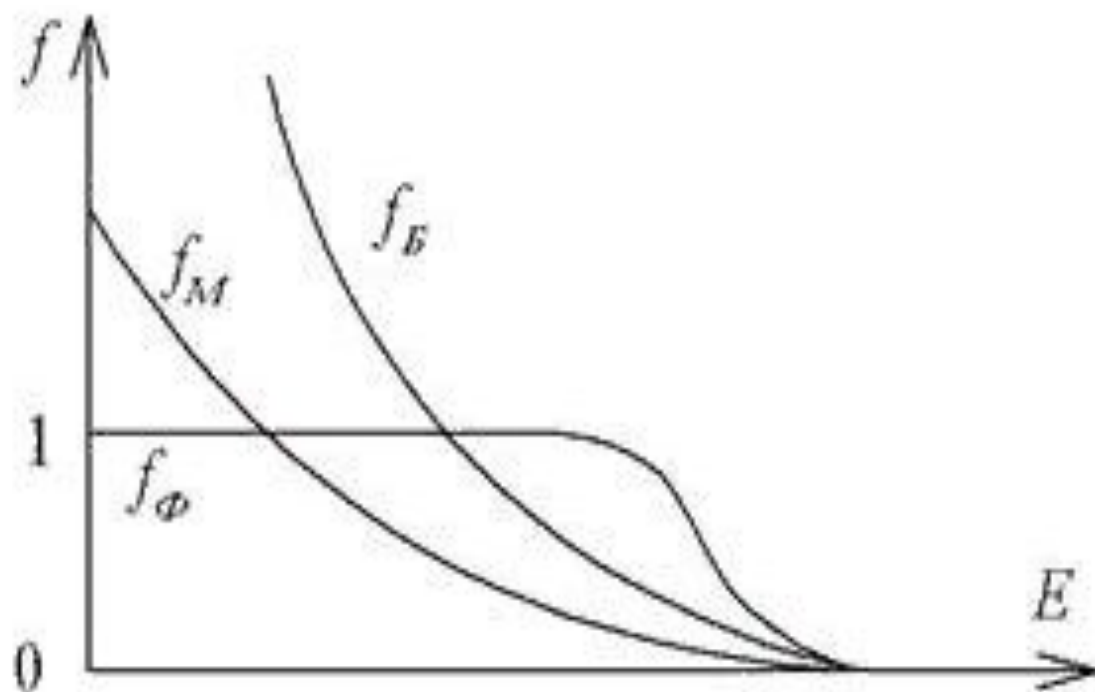
то распределения Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака переходят в классическое распределение Максвелла – Больцмана

$$\langle N_i \rangle = A \exp(-E_i / kT)$$

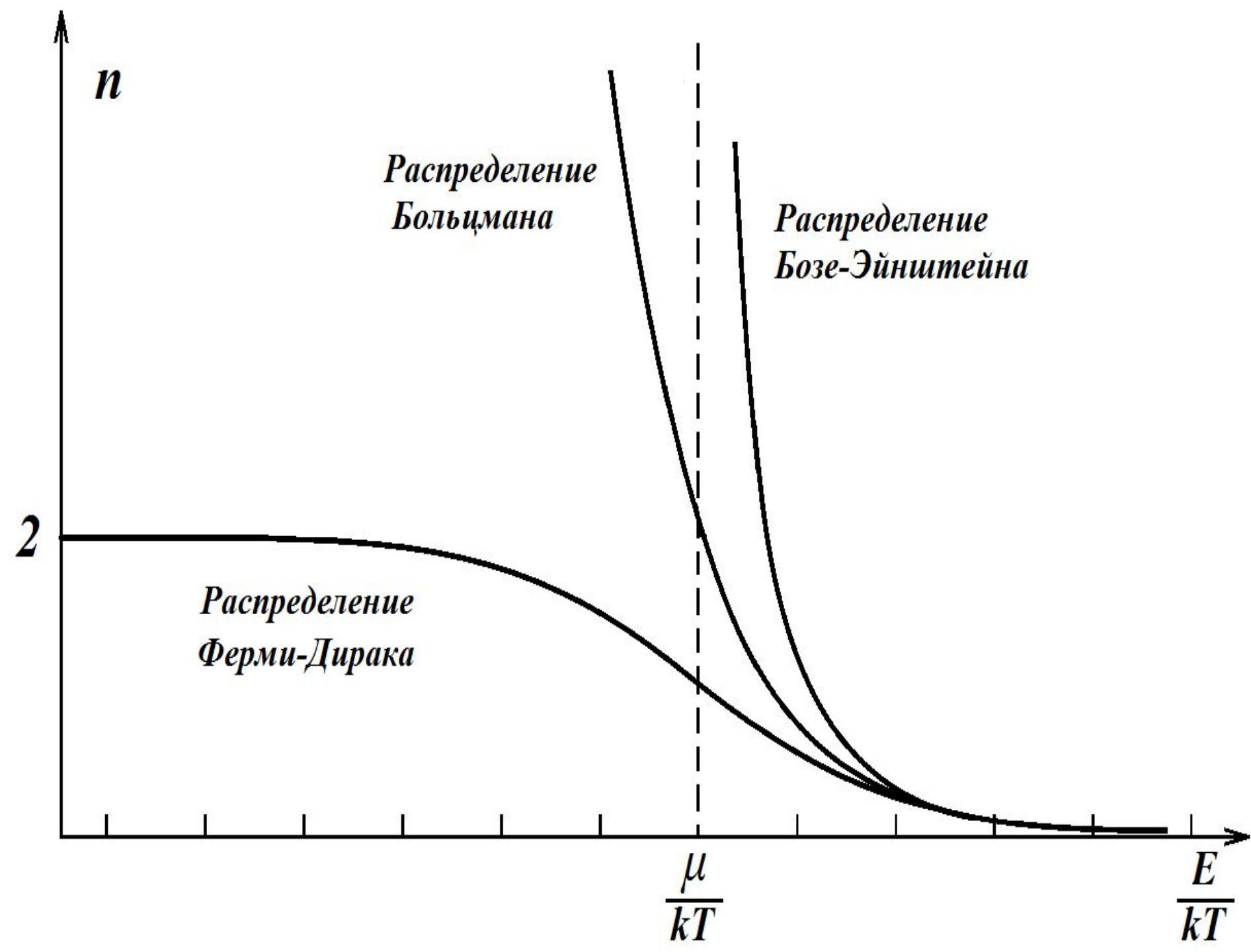
где A – параметр вырождения, он определяется следующим образом

$$A = \exp(\mu / kT)$$

Рис. 3.6. Графики функций распределения Максвелла-Больцмана (f_M), Ферми-Дирака (f_D) и Бозе-Эйнштейна (f_B)



На графиках видно, что значения функций распределения для малых энергий сильно отличаются, но при больших значениях энергии квантовые статистики переходят в классическую статистику Максвелла-Больцмана. Применение классической статистики оказывается допустимым, поскольку в каждом состоянии оказывается в среднем меньше одной частицы. Из сказанного можно сделать вывод о возможности замены в определенных условиях квантовых функций на классическую функцию распределения.



распределение Бозе-Эйнштейна:

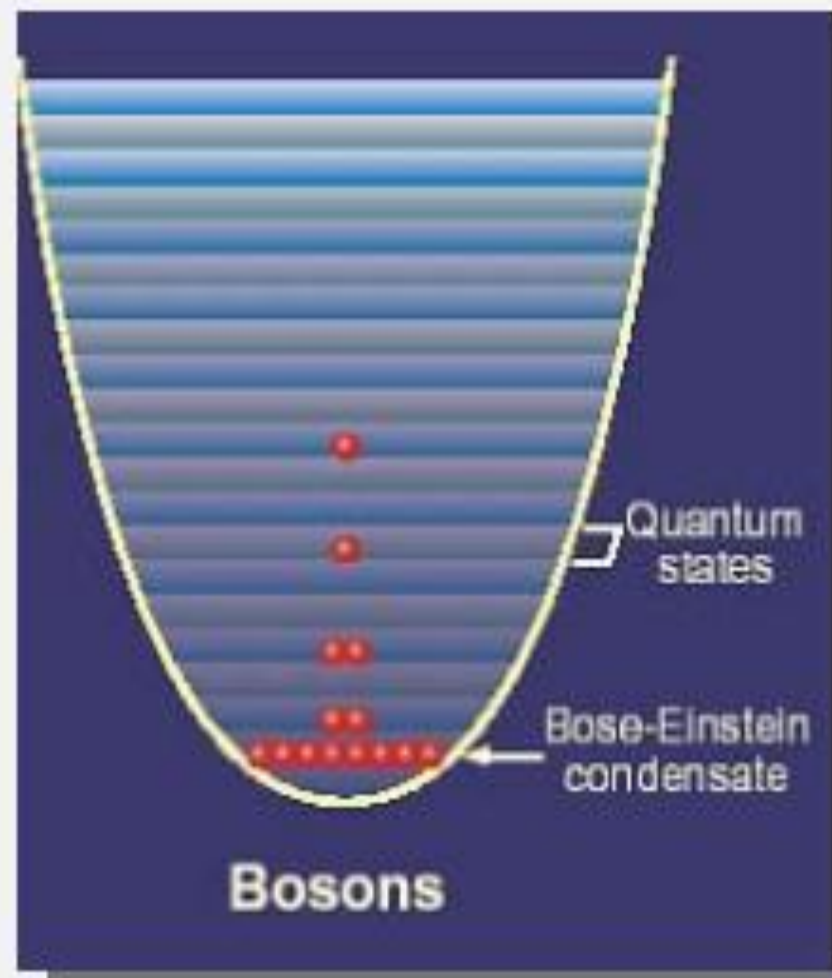
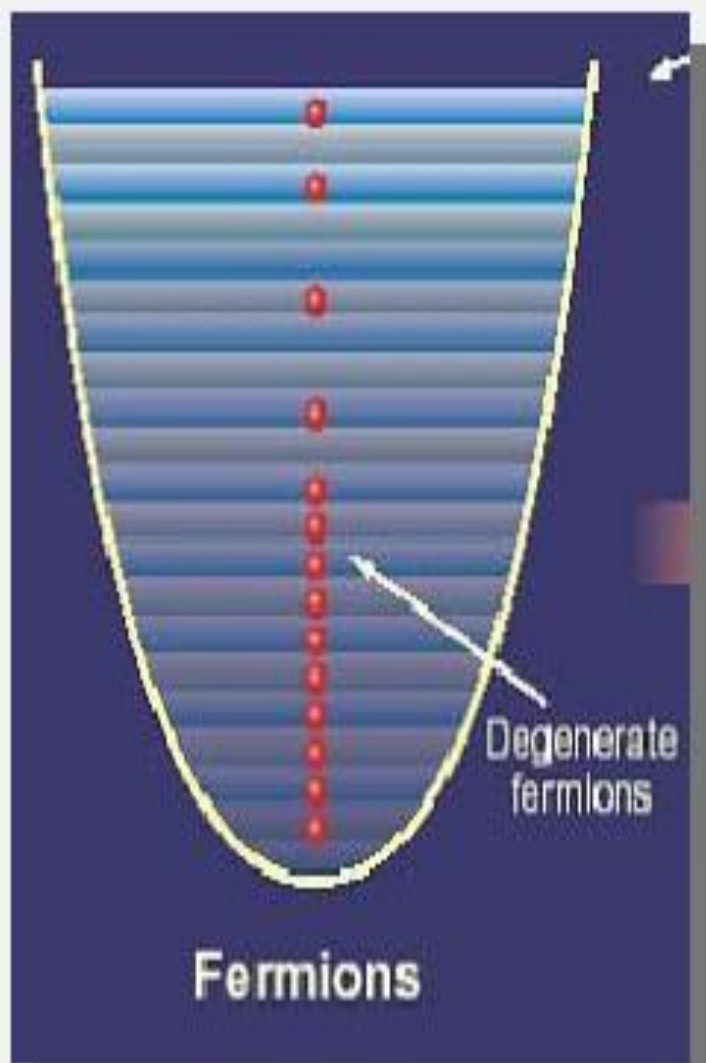
$$\langle N_i \rangle = \frac{1}{e^{(E_i - \mu)/kT} - 1} ;$$

распределение Ферми-Дирака:

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

Спин - полуцелый

Спин - целый



Квантовая теория электропроводимости металлов, основывающаяся на статистике Ферми-Дирака, даёт удельную электропроводимость металлов:

концентрация электронов
проводимости в металле

средняя длина свободного
пробега электронов,
имеющих энергию Ферми

$$\gamma = \frac{ne^2 \langle \lambda_F \rangle}{m^* \langle u_F \rangle}$$

средняя скорость теплового
движения электронов,
имеющих энергию Ферми

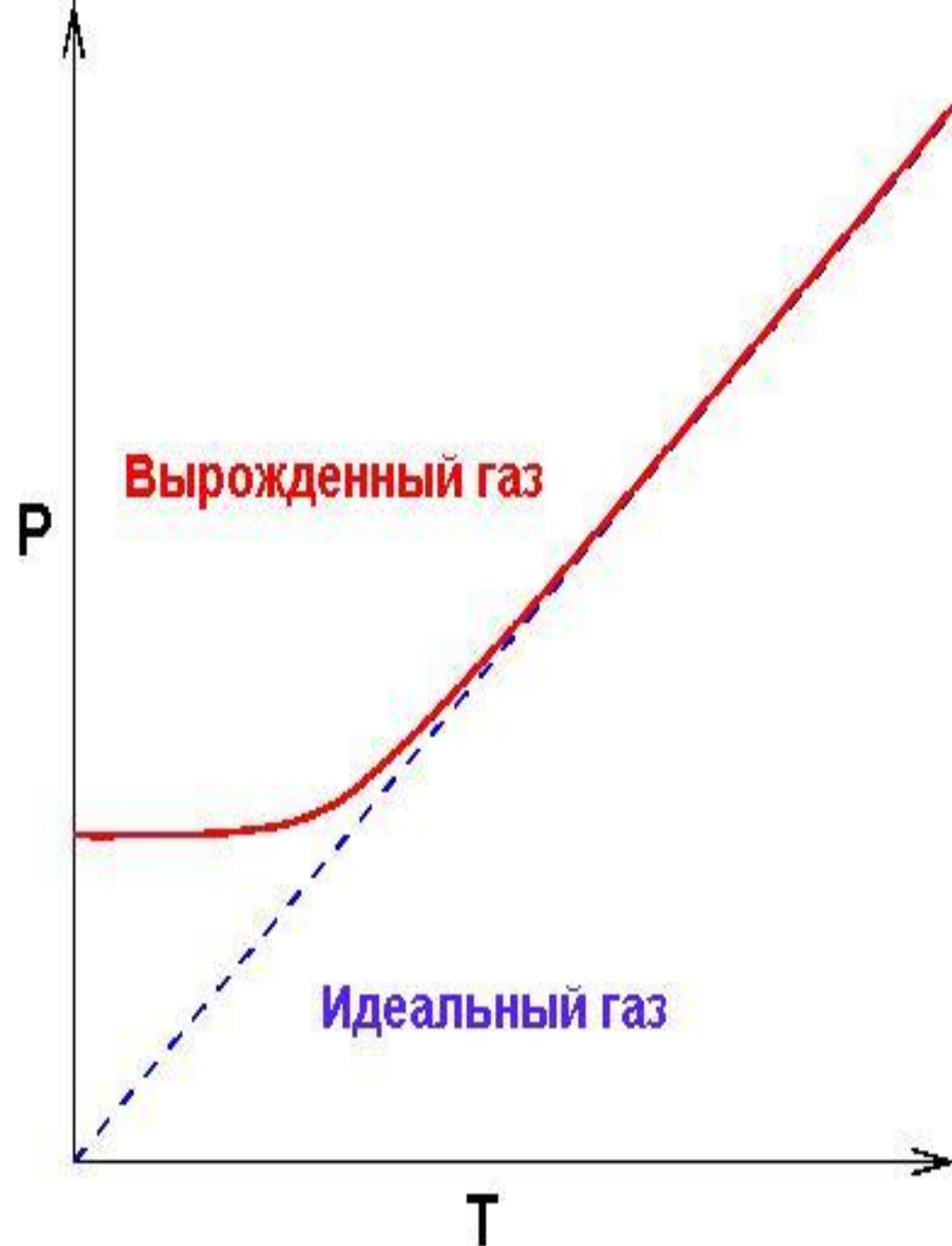
эффективная масса
электрона

Вырожденная система частиц

- Система частиц называется **вырожденной**, если ее свойства, описываемые квантовыми закономерностями, отличаются от свойств обычных систем, подчиняющихся классическим законам.

Вырожденный газ

- Отступление в поведении бозе – и ферми – газов от классического максвелл-больцмановского газа называется **вырождением газов (вырожденный газ)**.
- Вырождение газов становится **существенным при низких температурах и больших плотностях.**



- Вырождение Ферми- и Бозе-газов.
- Вырожденный газ.



**Нейтронный вырожденный газ
уравновешивает силы тяготения звезды**

Температура вырождения

- **Температурой вырождения** T_B называется температура, при которой вырождение становится существенным.
- Она определяется из условия

$$A = \frac{n_0 \cdot h^3}{(2 \cdot \pi \cdot m \cdot k \cdot T_B)^{3/2}} = 1$$

\Rightarrow

$$T_B = \frac{h^2 \cdot n_0^{2/3}}{2 \cdot \pi \cdot m \cdot k}$$

Температурный критерий вырождения

- $T \ll T_V$ – система частиц вырождена,
- $T \gg T_V$ – система частиц не
вырождена, и ее поведение описывается
классическими законами.

Вырожденный электронный газ в металлах

- Электроны проводимости в металле можно рассматривать как идеальный газ, подчиняющийся распределению Ферми – Дирака

$$\langle N(E) \rangle = \frac{1}{\exp((E - \mu_0)/(kT)) + 1}$$

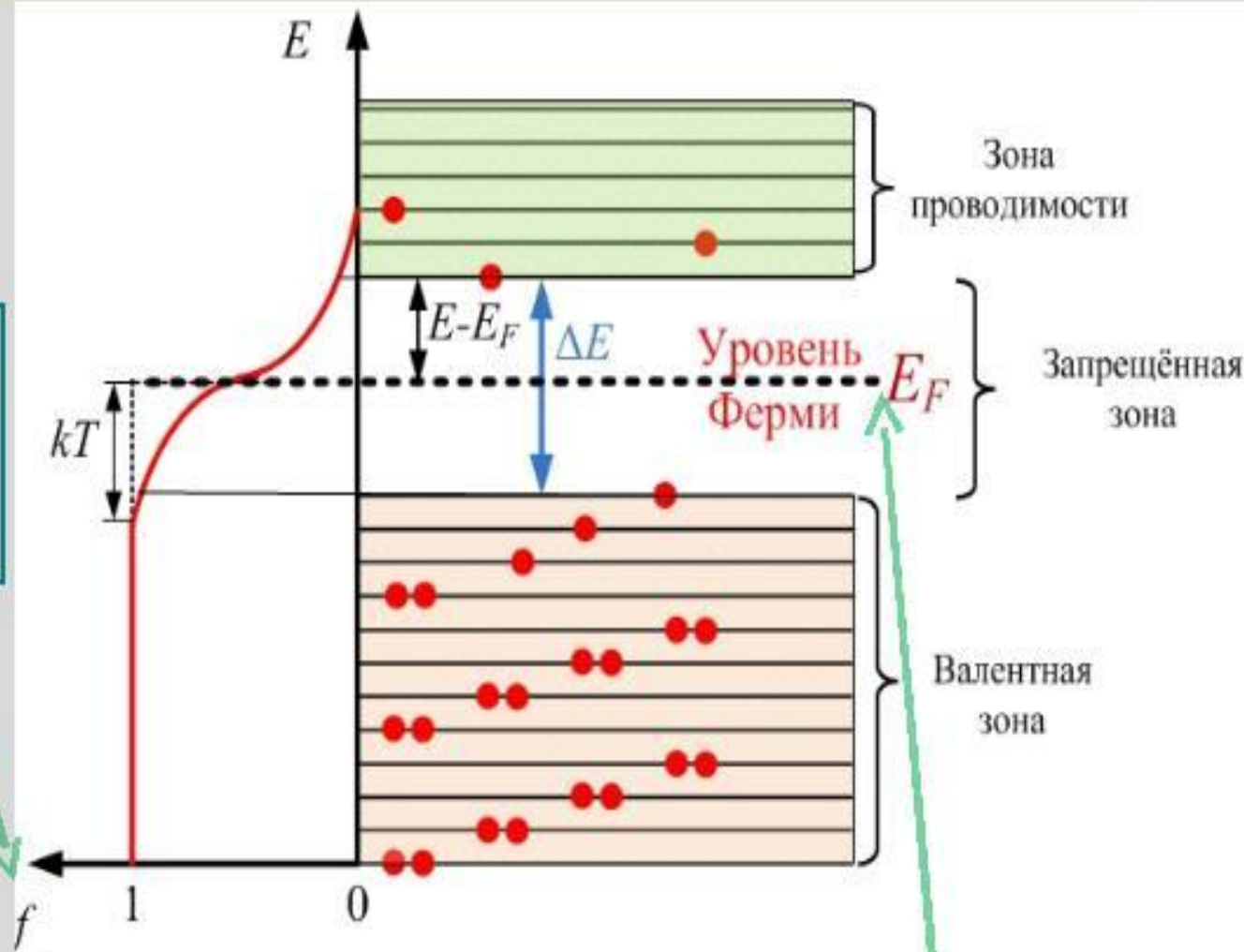
- где $\langle N(E) \rangle$ среднее число электронов в квантовом состоянии с энергией E ;
- μ_0 - химический потенциал электронного газа при $T=0 \text{ K}$.

Химический потенциал

Энергия Ферми

Распределение электронов описывается функцией Ферми-Дирака:

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu}{kT}\right) + 1}$$



$\mu = E_F$ – энергия Ферми (энергия уровня, вероятность заполнения которого равна 0.5)
Для полупроводника уровень Ферми лежит в середине запрещённой зоны

Распределение Ферми – Дирака

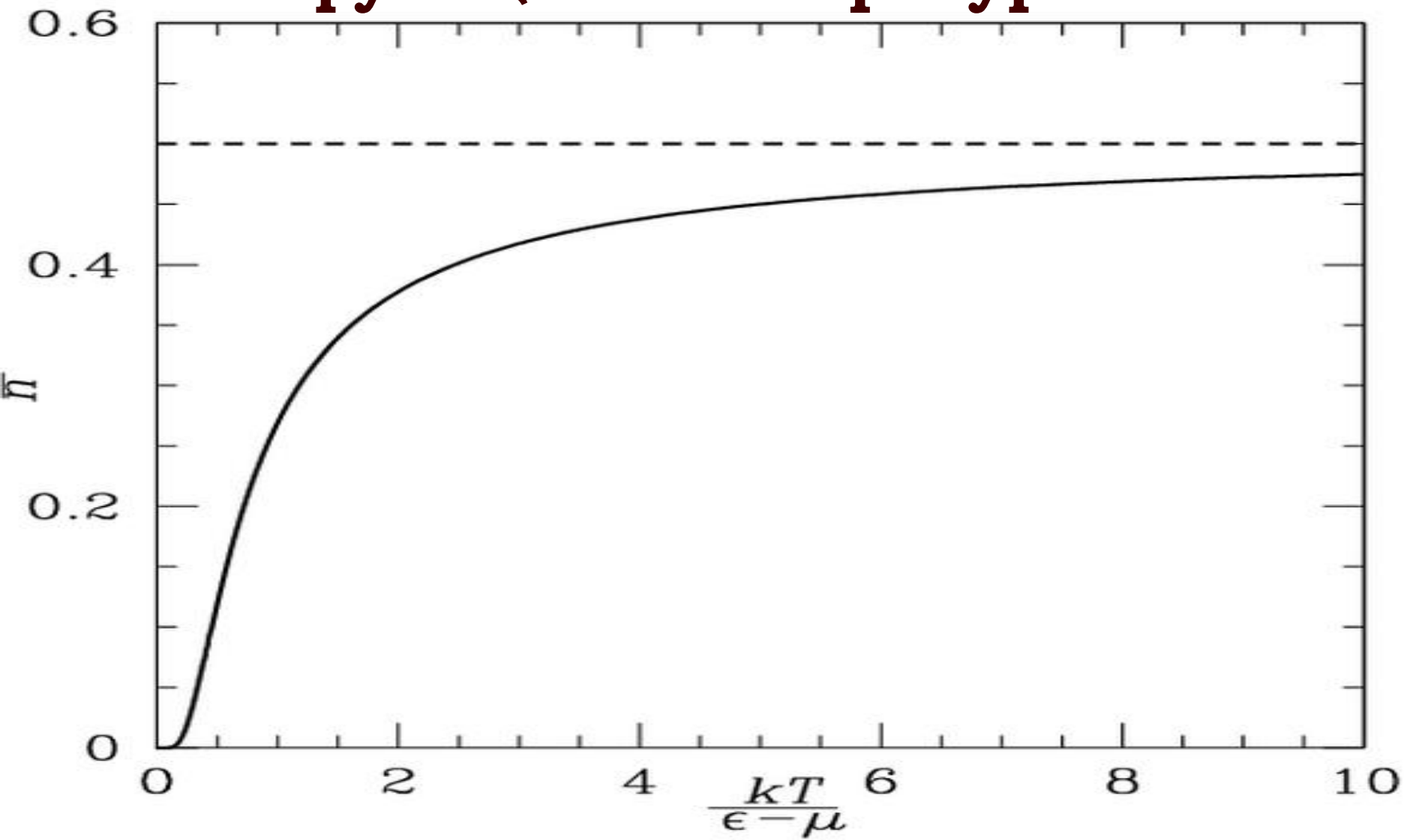
- **Химический потенциал**, является максимальной кинетической энергией, которой обладают электроны проводимости в металле при 0 К.

$$\langle N(E) \rangle = \frac{1}{\exp((E - E_f)/(kT)) + 1}$$

- Эта максимальная кинетическая энергия называется **энергией Ферми** и обозначается E_f

$$E_f = \mu_0$$

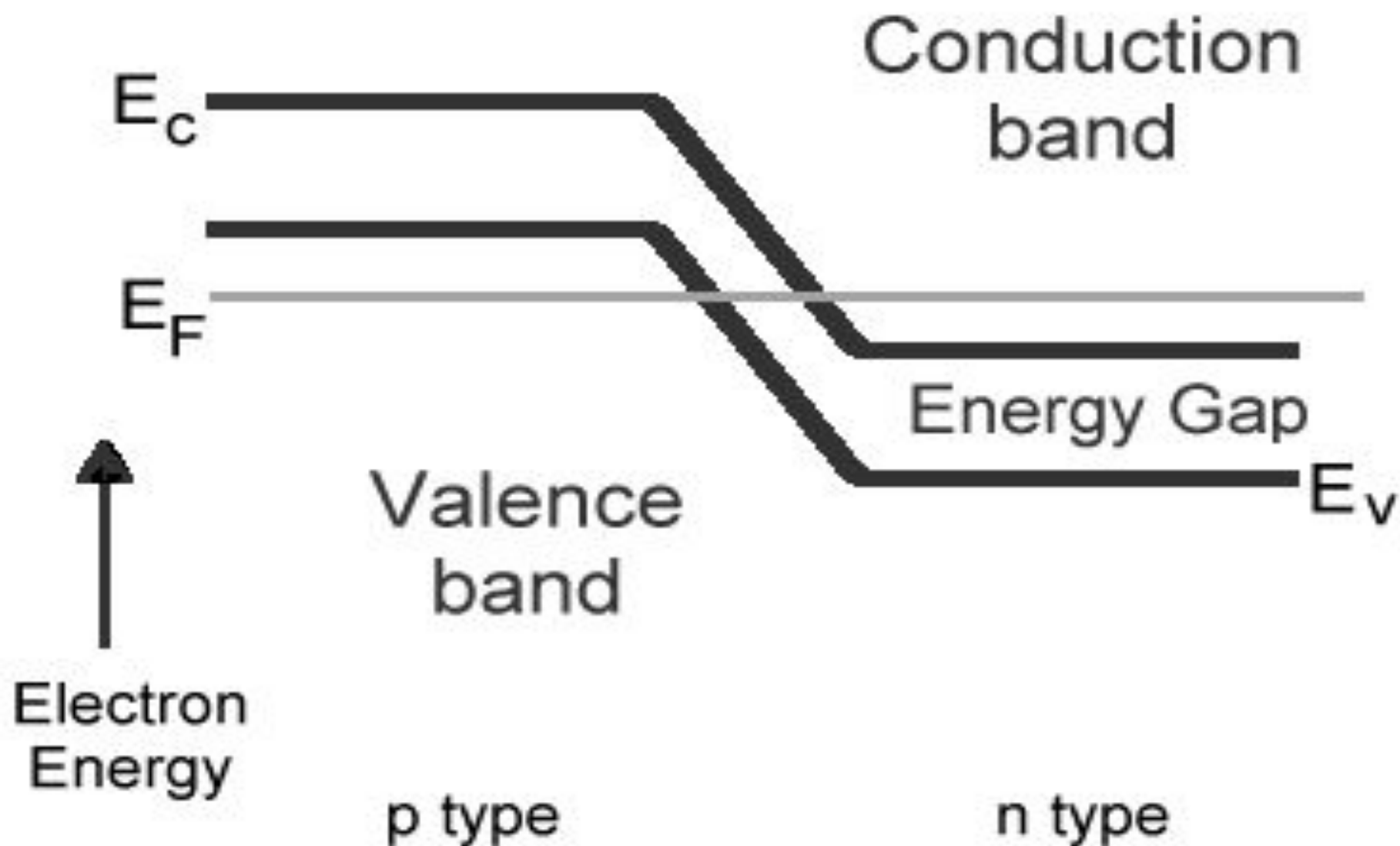
Распределение Ферми - Дирака как функция температуры.

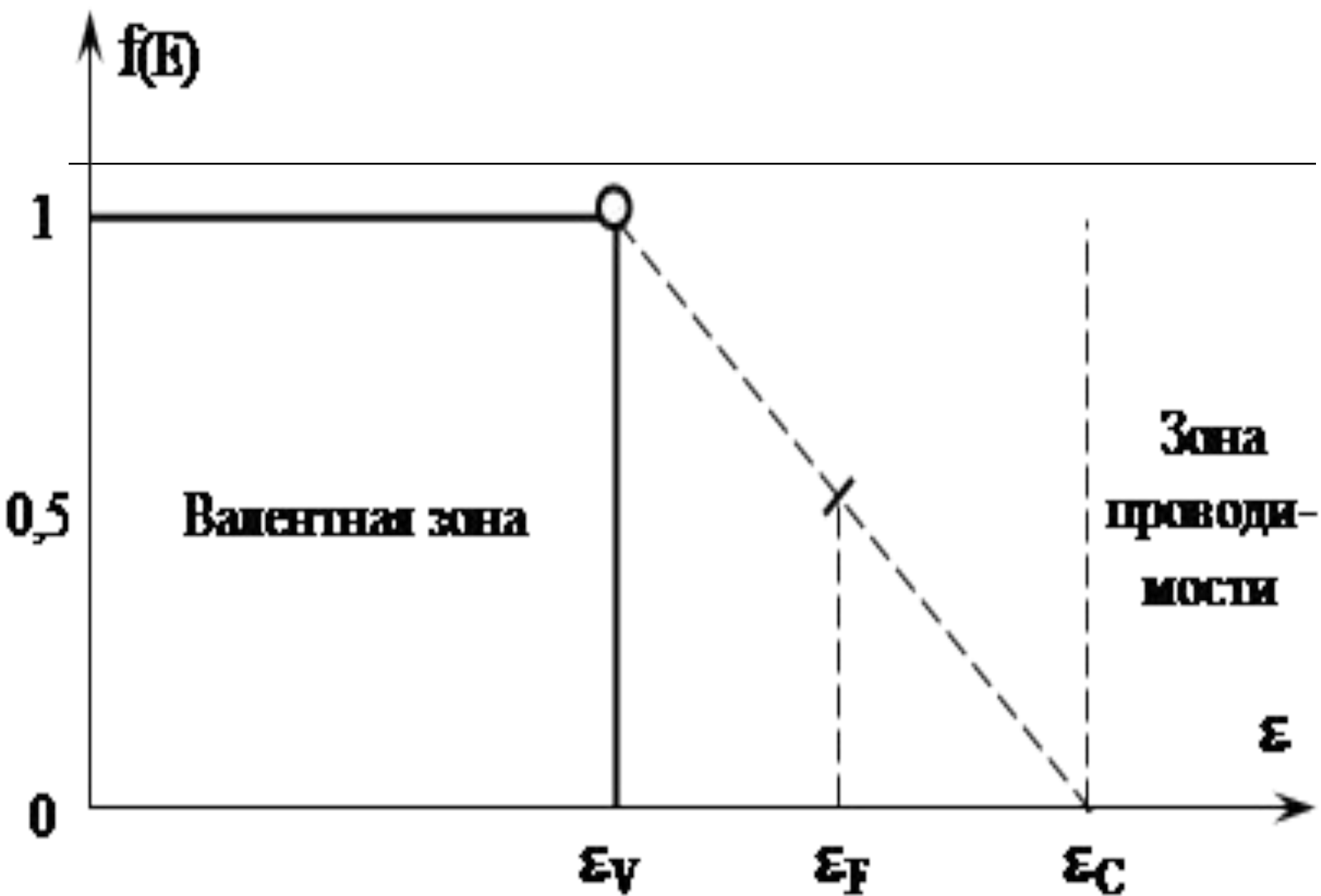


Уровень Ферми

- Наивысший энергетический уровень, занятый электронами, называется **уровнем Ферми**.
- Уровню Ферми соответствует **энергия Ферми**, которую имеют электроны на этом уровне.
- Уровень Ферми будет тем выше, чем больше плотность электронного газа.

Energy Band Diagram for a P-N Junction in a Tunneling Diode





Молярная теплоемкость электронного газа

- Молярная теплоемкость электронного газа определяется следующим образом

$$C_{V\mu} = \frac{\pi^2}{2} N_A \cdot k \cdot \frac{k \cdot T}{E_f}$$

- где N_A – число Авогадро;
- k – постоянная Больцмана.

Теория электропроводности металлов,
построенная на основе квантовой механики и
квантовой статистики **Ферми–Дирака,**
называется

**квантовой теорией
электропроводности металлов.**

Теплоемкость кристаллов (классическая теория)

□ В XIX в. Дюлонг и Пти при измерении теплоемкости твердых тел эмпирически установили закон: **теплоемкость одноатомных кристаллов при комнатной температуре очень близка к значению**

$$C_V = 25 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{K})$$

и мало изменяется с повышением температуры, стремясь к указанному значению.

Классическая модель внутреннего строения твёрдых тел

одноатомный кристалл - совокупность
атомов, колеблющихся в узлах
кристаллической решетки под действием
упругих сил.

- Колебания каждого атома можно описать тремя степенями свободы.
-

- Таким образом, твердое тело в этом случае можно представить как совокупность классических осцилляторов, число которых в одном моле равно числу Авогадро.

- **Внутренняя энергия моля кристалла будет равна**

$$E = 6 \cdot \frac{1}{2} N_A \cdot k \cdot T$$

- а молярная теплоемкость

$$C_V = \frac{dE}{dT} = 3N_A k = 3R$$

Недостатки модели



не объясняет:

- температурной зависимости теплоемкости,
- разницы в поведении диэлектриков и металлов при очень низких температурах

не объясняет:

- исключений из закона Дюлонга и Пти: **алмаз, бериллий, бор, кремний и алюминий** имеют при комнатной температуре теплоемкость, значительно меньшую $3R$.
- При повышении температуры этих веществ их теплоемкость растет, приближаясь к $3R$ при существенно более высокой температуре.
- **Строгую теорию теплоемкости можно построить лишь на базе квантовой механики.**

Теплоемкость кристаллов по Эйнштейну

**Модель для объяснения
температурного хода
теплоемкости кристаллов**

- Каждый атом представляет собой осциллятор, колеблющийся с некоторой частотой, одинаковой для всех атомов кристалла.
-

- В отличие от классической модели здесь

рассматривается квантовый осциллятор, энергия которого может принимать только дискретные значения, кратные

$$h\nu_0$$

- где ν_0 - частота колебаний осциллятора.

Теплоемкость твердых тел

- Теплоемкость твердых тел по Эйнштейну будет определена следующим образом

$$C_V = \frac{dE}{dT} = 3R \left(\frac{h\nu_0}{kT} \right)^2 \frac{\exp\left(\frac{h\nu_0}{kT}\right)}{\left(\exp\left(\frac{h\nu_0}{kT}\right) - 1\right)^2}$$

$$C_m = \frac{3R}{\left(\frac{h\nu}{e^{kT}} - 1 \right)^2} \cdot e^{\frac{h\nu}{kT}} \cdot \left(\frac{h\nu}{kT} \right)^2$$

Определение:

$$kT_E = h\nu$$

T_E – характеристическая температура Эйнштейна

$$C_m = 3R \left(\frac{T_E}{T} \right)^2 \frac{e^{\frac{T_E}{T}}}{\left(\frac{T_E}{T} e^{\frac{T_E}{T}} - 1 \right)^2}$$

Температура Эйнштейна

□ введём характерный параметр

$$\theta = \frac{h\nu_0}{k}$$

□ где θ температура Эйнштейна

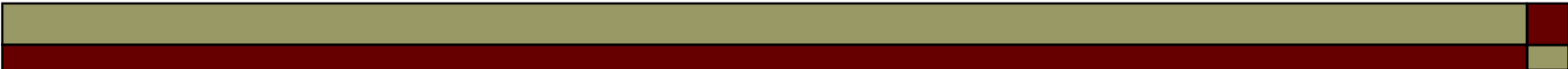
$$C_V = 3R \left(\frac{\theta}{T}\right)^2 \frac{\exp\left(\frac{\theta}{T}\right)}{\left(\exp\left(\frac{\theta}{T}\right) - 1\right)^2}$$

□ При $\frac{\theta}{T} \ll 1$ теплоемкость стремится к $3R$.

□ При очень низких температурах

$$C_V \rightarrow 0$$

Недостатки модели

- 
- Модель дает качественно верную температурную зависимость теплоемкости диэлектриков, не давая при этом хорошего количественного совпадения с экспериментом, особенно при низких температурах.
 - Следующим шагом в развитии представлений о взаимодействии атомов в кристаллической решетке явилась **модель Дебая**

Теплоемкость кристаллов по Дебаю

- Дебай предложил рассматривать совокупность атомов кристалла как упругую среду, ограниченную размером кристалла, в которой коллективные колебания атомов представляются суперпозицией собственных типов колебаний такой среды.

Внутренняя энергия кристалла

- Определим внутреннюю энергию кристалла

$$E = \frac{3\pi^4}{5} N_A k T^4 \theta_D^{-3}$$

$$\theta_D = \frac{h\nu_{\max}}{k}$$

- где θ_D — **температура Дебая**.
- **Теплоемкость** при низких температурах в одноатомном кристалле изменяется пропорционально T^3 .

$$C_V = \frac{12}{5} \pi^4 N_A k \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3$$

При высоких температурах

$$T \gg \theta_D$$

теплоемкость будет равна

$$C_V = 3R$$

Понятие о фонемах

Фонон. Энергия фонона

- **Фонон** - квант энергии звуковой волны (так как упругие волны – волны звуковые).
- **Фононы** являются квазичастицами – элементарными возбуждениями, ведущими себя подобно микрочастицам.
- **Энергия фонона** $E_i = \hbar \omega_i$

Импульс фонона

- **Импульс фонона** обладает своеобразным СВОЙСТВОМ: при столкновении фононов в кристалле их импульс может дискретными порциями передаваться кристаллической решетке – **он при этом не сохраняется.**
- Поэтому в случае фононов говорят о **квазиимпульсе.**

- 
-
- **Энергия кристаллической решетки рассматривается как энергия фононого газа, подчиняющегося статистике Бозе – Эйнштейна, так как фононы являются бозонами (их спин равен нулю).**

Распределение Бозе-Эйнштейна

- Распределение Бозе-Эйнштейна

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp(\hbar \omega_i / kT) - 1}$$

- где $\langle n_i \rangle$ - среднее число фононов частоты ω_i

Бозон Хиггса Бозон Хиггса – «божественная частица»,

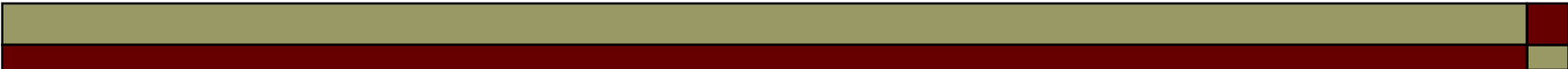
- Как и прежде, главной целью Большого коллайдера физики считают обнаружение таинственного бозона Хиггса **бозона Хиггса** – «божественной частицы», которая отвечает за массу элементарных частиц.
- Она состоит из двух кварков: так называемого **прелестного кварка** и его антагониста – **прелестного антикварка.**



□ Новая частица поможет специалистам лучше понять, при помощи какой силы атомы соединяются друг с другом.

□ Задание. Подготовить реферат на тему

Бозон ХиггсаБозон Хиггса –
«божественная частица»,

- 
-
- Отметим, что эксперименты по поиску бозона Хиггса пугают некоторых ученых своей непредсказуемостью - по одной из теорий, обнаружение этой частицы может привести к цепной реакции произвольного роста массы с образованием черной дыры, что грозит уничтожением всему живому.

Физики надеются

- Предполагается, что открытие "божественной частицы" позволит совершить революцию в науке, поможет значительно продвинуться в понимании фундаментальных законов физики и принципов строения Вселенной.