
ЛЕКЦИЯ 2

ИДЕАЛЬНЫЕ ФЕРМИ- И БОЗЕ-ГАЗЫ

Идеальные газы просты для изучения, потому что их энергия есть сумма энергий отдельных частиц, и поэтому вычисление термодинамических величин не составляет труда.

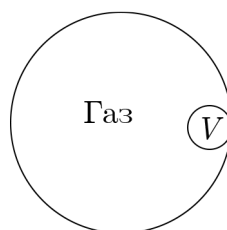


Рис. 2.1

Рассмотрим идеальный газ. Разобьём весь объём газа на равные малые объёмы V . Энергия и число частиц в элементе объёма флуктуируют. Будем рассматривать для простоты квантовую механику, поскольку в её рамках все физические величины дискретны. Также сначала речь будет идти о ферми-газе, так что исследуемые частицы — это электроны. Состояние газа описывается величиной α , которая характеризуется набором волновых функций каждого из электронов.

$$\alpha = n_1 n_2 n_3 \dots, \quad (2.1)$$

где n_i — числа заполнения, $i = 1, 2, \dots$. Самое удобное в данном случае математическое описание — это представление чисел заполнения, или вторичное квантование.

Энергия и число частиц — это два аддитивных интеграла движения; как известно из прошлой лекции, они флуктуируют. Обозначим как w_α полную функцию распределения.

$$w_\alpha = w_1 w_2 w_3 \dots, \quad (2.2)$$

где w_i — функция распределения одной подсистемы. Если состояние стационарно, то w_α постоянна. Если подсистем много, то $w_\alpha = w_1 w_2 \dots$, а $\ln w_\alpha = \sum_p \ln w_p$. Следовательно,

$\ln w_\alpha$ — аддитивный интеграл движения, значит,

$$\ln w_\alpha = AE_\alpha + BN_\alpha. \quad (2.3)$$

Выбрав соответствующие A и B , запишем эту функцию распределения в таком виде:

$$w_\alpha = \frac{1}{Z} e^{\frac{1}{T}(E_\alpha - \mu N_\alpha)}. \quad (2.4)$$

Разные физические состояния характеризуются разными значениями температуры T , химического потенциала μ . $Z(T, \mu)$ — это нормировочный множитель. Он зависит от T и μ , поскольку полная вероятность $\sum_\alpha w_\alpha = 1$.

Если заданы значения химического потенциала и температуры, то тем самым задано состояние газа. Если газ электронный, это **ферми-газ**, и для него выполняется **принцип Паули**: число заполнения каждого одночастичного уровня равно либо нулю, либо единице, или $w_i = 0, 1$. Здесь i — номер уровня 1 электрона.

$$w_\alpha = \frac{1}{Z} e^{-\frac{1}{T}(E_\alpha - \mu N_\alpha)}, \quad (2.5)$$

$$\sum_\alpha w_\alpha = 1 = \sum_\alpha \frac{1}{Z} e^{-\frac{1}{T}(E_\alpha - \mu N_\alpha)}, \quad (2.6)$$

$$Z = \sum_\alpha e^{-\frac{1}{T}(E_\alpha - \mu N_\alpha)} \quad (2.7)$$

Величина Z называется **статистической суммой**. Также вместо Z вводят выражение

$$\frac{1}{Z} = e^{\frac{\Omega}{T}}, \quad (2.8)$$

где $\Omega = -T \ln Z$. Величина Ω также является аддитивным интегралом движения. Это термодинамический потенциал, который есть функция от температуры и химического потенциала. Если удастся вычислить потенциал Ω , то, как будет видно из дальнейшего, легко вычисляются и остальные термодинамические величины.

После того как получено значение w_α , вторая величина, которую следует найти — это среднее число частиц. Введём обозначение $\beta \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{T}$. Тогда

$$N = \sum_\alpha w_\alpha N_\alpha = \sum_\alpha \frac{1}{Z} N_\alpha e^{-\beta(E_\alpha - \mu N_\alpha)} \quad (2.9)$$

Сравнивая (2.9) с выражением для Z (2.7), получаем

$$N = \frac{\partial}{\partial \beta \mu} \frac{\sum_\alpha e^{-\beta(E_\alpha - \mu N_\alpha)}}{Z}, \quad (2.10)$$

$$N = \frac{1}{Z} \frac{\partial(TZ)}{\partial \mu} = \frac{\partial T \ln Z}{\partial \mu} = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}. \quad (2.11)$$

! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

С другой стороны, существует термодинамический потенциал Ω , который определяется так:

$$d\Omega = -SdT - pdV - Nd\mu. \quad (2.12)$$

Из равенств (2.11), (2.12) следует, что эти две величины Ω — на самом деле одно и то же, и $N = -\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}$.

Далее, чтобы сосчитать термодинамические величины Ω , N , E , нужно вычислить статсумму

$$Z = \sum_{n_1 n_2 \dots} e^{-\beta(E_\alpha - \mu N_\alpha)}. \quad (2.13)$$

Учитывая, что

$$N_\alpha = \sum_p n_p(\alpha), \quad (2.14)$$

$$E_\alpha - \mu N_\alpha = \sum_p n_p^{(\alpha)}(\epsilon_p - \mu), \quad (2.15)$$

получаем

$$Z = \sum_{n_1 n_2 \dots} e^{-\beta \sum_p n_p^{(\alpha)}(\epsilon_p - \mu)} = \sum_{n_1} e^{-\beta(\epsilon_1 - \mu)n_1} \cdot \sum_{n_2} e^{-\beta(\epsilon_2 - \mu)n_2} \cdot \dots \quad (2.16)$$

В каждой сумме в силу принципа Паули два слагаемых ($n_i = 0, 1$).

Формально умножение можно производить до бесконечности, поскольку $\epsilon_p = \frac{p^2}{2m}$, а импульс может быть сколь угодно велик. Таким образом, для идеального ферми-газа

$$Z_\Phi = \prod_p (1 + e^{-\beta(\epsilon_p - \mu)}). \quad (2.17)$$

Заметим, что у всех идеальных газов энергия и число частиц есть сумма независимых членов. Соответственно,

$$\Omega_\Phi = -T \sum_p \ln(1 + e^{-\beta(\epsilon_p - \mu)}). \quad (2.18)$$

В случае **бозе-газа** члены в статсумме меняются уже не от 0 до 1, а от 0 до ∞ , то есть $1 + q + q^2 + \dots = \frac{1}{1 - q}$. Поэтому

$$Z_\sigma = \prod_p \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_p - \mu)}}, \quad (2.19)$$

$$\Omega_\sigma = T \sum_p \ln(1 - e^{-\beta(\epsilon_p - \mu)}). \quad (2.20)$$

Теперь вычислим N для ферми- и бозе-газа.

Для ферми-газа:

$$N = -\frac{\partial\Omega_\Phi}{\partial\mu} = \sum_p T \frac{\beta e^{-\beta(\epsilon_p - \mu)}}{1 + e^{-\beta(\epsilon_p - \mu)}} = \sum_p \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_p - \mu)} + 1}, \quad (2.21)$$

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

$$n_p = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_p - \mu)} + 1}. \quad (2.22)$$

Распределение (9.19) называется **распределением Ферми**. При высоких температурах заполнено много уровней, n_p при каждом импульсе мало. При всех импульсах это происходит в том случае, если единицей в знаменателе можно пренебречь. Тогда распределение Ферми превращается в распределение Больцмана:

$$n_p = e^{-\beta(\epsilon_p - \mu)}. \quad (2.23)$$

Для бозе-газа:

$$N = -\frac{\partial \Omega_0}{\partial \mu} = -\sum_p T \frac{\beta e^{-\beta(\epsilon_p - \mu)}}{1 - e^{-\beta(\epsilon_p - \mu)}} = \sum_p \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_p - \mu)} - 1}, \quad (2.24)$$

$$n_p = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_p - \mu)} - 1}. \quad (2.25)$$

Если минимальную энергию, — энергию основного состояния частицы, принять равной нулю, то

$$n_0 = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1}. \quad (2.26)$$

Следовательно, химический потенциал бозе-газа всегда отрицателен.

Распределение (2.25) называется **распределением Бозе – Эйнштейна**. При высоких температурах оно также превращается в распределение Больцмана.

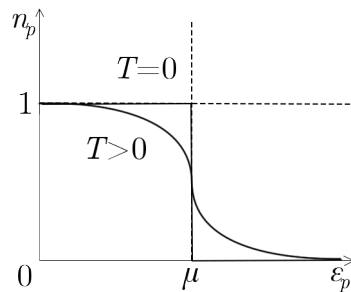


Рис. 2.2: Распределение Ферми.

Исследуем вид распределения Ферми при различных температурах. Сначала рассмотрим случай $T \ll 1$. Тогда $\beta \gg 1$, и под знаком экспоненты стоит большой множитель. Химический потенциал при нулевой температуре называется **энергией Ферми**: $\epsilon_F = \mu_0$. В случае $T \ll 1$ $\mu \approx \epsilon_F$. При $\epsilon > \mu$ в знаменателе распределения Ферми большая положительная величина, так что $n_p = 0$, частиц с высокой энергией нет. Наоборот, если $\epsilon < \mu$, то под знаком экспоненты стоит большая отрицательная величина, и экспонентой можно пренебречь по сравнению с единицей, и $n_p = 1$. На рисунке 2.2 изображён график функции $n_p(\epsilon_p)$. Чистый скачок в $\epsilon_p = \epsilon_F$ происходит при $T = 0$, $\beta \rightarrow +\infty$.

Если же β конечна, то в окрестности точки $\epsilon_p = \mu$ происходит плавный переход от 1 до 0 на интервале энергии шириной \mathbb{T} , а $n_p(\mu) = \frac{1}{2}$. Этот интервал энергии шириной \mathbb{T} также называется **корочкой Ферми**.

! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

Когда речь идёт о газе в свободном пространстве, нужно применить правила квантования Бора – Зоммерфельда:

$$N = \sum_p n_p = g \sum_p \frac{d^3pV}{(2\pi\hbar)^3} n_p \quad (2.27)$$

Запишем d^3p в сферических координатах.

$$d^3p = 4\pi p^2 dp. \quad (2.28)$$

Учитывая, что $p^2 = 2m\epsilon$ и $\epsilon d\sqrt{\epsilon} = \frac{\epsilon^{\frac{1}{2}}}{2} d\epsilon$, получаем:

$$N = bV \int d\epsilon \epsilon^{\frac{1}{2}} n_p, \quad (2.29)$$

где b — константа;

$$E = bV \int d\epsilon \epsilon^{\frac{3}{2}} n_p; \quad (2.30)$$

$$\Omega = -bV \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{\frac{1}{2}} \ln(1 + e^{-\beta(\epsilon_p - \mu)}). \quad (2.31)$$

Возьмём этот интеграл по частям.

$$\Omega = -bV \frac{2}{3} \int_0^\infty d\epsilon \cdot \epsilon^{\frac{3}{2}} n_p = -\frac{2}{3} E. \quad (2.32)$$

С другой стороны, из термодинамики известно, что $\Omega = -pV$. Отсюда

$$p = \frac{2}{3} \frac{E}{V}. \quad (2.33)$$

Если температура высокая, то $E = \frac{3}{2} NT$, поэтому из (2.33) получаем, что $pV = NT$, как для классического идеального газа. При низких температурах для больцмановского газа энергия равна температуре, она стремится к нулю с уменьшением температуры до нуля. Однако для ферми-газа это не так:

$$E_0 = bV \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon^{\frac{3}{2}} = \frac{2}{5} bV \mu^{\frac{5}{2}}. \quad (2.34)$$

Таким образом, из-за положительного химического потенциала энергия ферми-газа при $T = 0$ отлична от нуля. Это связано с тем тривиальным обстоятельством, что все уровни от 0 до ϵ_F заполнены, а энергия каждого уровня равна $\frac{p^2}{2m}$.

Теплоёмкость C ферми-газа при низких температурах определяется энергией на возбуждение в слое T . Из рис. 2.3 следует, что $E = E_0 + \xi T^2$, где ξ — некоторая константа. Следовательно,

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu



Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = 2\xi T \sim T. \quad (2.35)$$

Теплоёмкость — это наиболее легко измеряемая экспериментально величина, так что она хорошо известна для металлов.

Следует добавить, что, когда рассматривают систему, состоящую из электронов, часто речь идёт не о замкнутой системе, а о системе в контакте с землёй или с окружающими заряженными устройствами. Тогда химический потенциал зафиксирован и не зависит от температуры. Но если разорвать связь с окружающей средой и рассмотреть изолированную систему, то число частиц от температуры не зависит.

$$N = bV \int_0^{\infty} d\epsilon \frac{\epsilon^{\frac{1}{2}}}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1}. \quad (2.36)$$

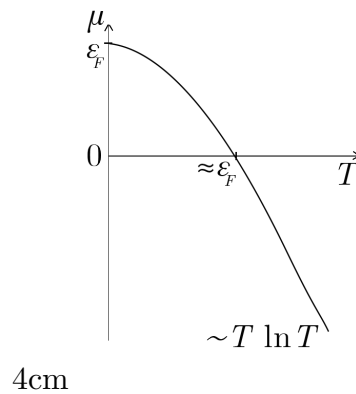


Рис. 2.3: Химический потенциал ферми-газа.

В замкнутой системе число частиц от температуры не зависит, а знаменатель подынтегрального выражения в (2.36) явно зависит от T . Поэтому, если сначала $\beta = +\infty$, химический потенциал равен энергии Ферми, поскольку заполнены только состояния с $\epsilon < \epsilon_F$. Потом начинается расплывание, β падает и становится конечной, знаменатель (2.36) растёт. Чтобы интеграл (2.36) оставался постоянным, нужно, чтобы химический потенциал падал с увеличением температуры.

Химический потенциал, как показывает расчёт, становится равным нулю в районе $T \approx \mu_0 = \epsilon_F$. При высоких температурах это бoльцмановский газ, и, как известно из общей физики, $\mu = -T \ln T$.

Теперь перейдём к бозе-газу.

Применяя формулы (2.29) и (2.20), получаем:

$$N = bV \int_0^{\infty} d\epsilon \frac{\epsilon^{\frac{1}{2}}}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1}. \quad (2.37)$$

В замкнутой системе интеграл (2.37), разумеется, тоже не зависит от температуры. При высоких температурах бозе-газ также является бoльцмановским газом, и $\mu = -T \ln T$. При уменьшении температуры химический потенциал обращается в ноль



Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

при так называемой **температуре конденсации**:

$$N = bV \int_0^{\infty} d\epsilon \frac{\epsilon^{\frac{1}{2}}}{e^{\beta_c(\epsilon-\mu)} - 1}. \quad (2.38)$$

Количество частиц с импульсом, равным нулю:

$$n_0 = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1}. \quad (2.39)$$

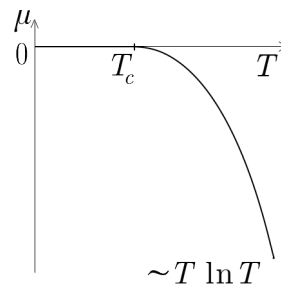


Рис. 2.4: Химический потенциал бозе-газа.

Отсюда видно, что химический потенциал не может быть больше нуля, так как тогда n_0 по формуле (2.39) меньше нуля. Следовательно, при $T < T_c$ $\mu \leq 0$.

Итак, одно из отличий ферми-газа от бозе-газа заключается в том, что при низких температурах в ферми-газе химический потенциал положителен и определяется ϵ_F , а в бозе-газе возникает парадокс: согласно (2.39), число частиц на нулевом уровне должно равняться бесконечности. На самом деле нужно переписать формулу (2.38) так:

$$N = n_0 + bV \int_0^{\infty} d\epsilon \frac{\epsilon^{\frac{1}{2}}}{e^{\beta_c(\epsilon-\mu)} - 1}. \quad (2.40)$$

Когда $\epsilon \rightarrow 0$, подынтегральное выражение в (2.40) превращается в

$$\frac{\epsilon^{\frac{1}{2}}}{\beta\epsilon} \sim \epsilon^{-\frac{1}{2}}. \quad (2.41)$$

Интеграл $\int_0^{\infty} \frac{d\epsilon}{\epsilon^{\frac{1}{2}}}$ сходится при $\epsilon \rightarrow 0$, поэтому и число частиц на самом деле бесконечным не будет. Второе слагаемое в (2.40) определяет число **надконденсатных частиц**,

а первое — число частиц в **бозе-конденсате**. Не следует путать бозе-конденсацию с конденсацией жидкостей: здесь речь идёт о конденсации в фазовом пространстве, когда частицы выпадают в состояние с импульсом, равным нулю.

Введём обозначение $\epsilon \stackrel{\text{def}}{=} Tz$, чтобы обезразмерить формулу (2.40). Тогда

$$N = n_0 + bVT^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} \frac{z^{\frac{1}{2}} dz}{e^z - 1}, \quad (2.42)$$

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

$$n_0 = N \left(1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}} \right). \quad (2.43)$$

Из формулы (2.43) видно, что при $T = 0$ все частицы находятся в конденсате. С увеличением температуры число надконденсатных частиц растёт, и при $T = T_c$ оно становится равным полному числу частиц, а бозе-конденсат исчезает. Заметим, что при вблизи нулевой температуры, когда $n_0 \approx N$, из (2.39) получаем, что химический потенциал не равен строго нулю, но очень мал: $\mu = -\frac{T}{N}$.

При $T = 0$ во вторичном квантовании $\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}}(a_0^+)^N |0\rangle$, все частицы находятся в конденсате. Далее будет видно, что в случае неидеального бозе-газа такую волновую функцию написать можно, но она неудобна, и вот почему. Если подействовать на эту функцию оператором поглощения, получим $\hat{a}\Psi \rightarrow (a^+)^{N-1}$. То есть относительно оператора поглощения волновая функция не диагональна.

Когда число частиц макроскопическое, то бозе-газ должен быть не чувствителен к точному числу частиц, и поэтому более удобным является т. н. **когерентное состояние** — состояние, которое является собственным состоянием оператора поглощения:

$$\hat{a}\Psi_{\text{ког}} = a_{\text{ког}}\Psi_{\text{ког}}, \quad (2.44)$$

$$\Psi_{\text{ког}} = \sum_n C_n (a^+)^n |0\rangle. \quad (2.45)$$

Значит, в системе число частиц не строго равняется N , а флуктуирует.

$$\hat{a}\Psi_{\text{ког}} = \sum_n C_n \hat{a}(a^+)^n |0\rangle = \sum_n C_n (\hat{a}a^+) ((a^+)^{n-1}) |0\rangle. \quad (2.46)$$

Как известно, $aa^+ - a^+a = 1$, то есть $aa^+ = 1 + a^+a$. Тогда

$$\begin{aligned} \hat{a}\Psi_{\text{ког}} &= \sum_n C_n (1 + \hat{a}^+ \hat{a}) ((a^+)^{n-1}) |0\rangle = \sum_n C_n (1 + (n-1)) (a^+)^{n-1} |0\rangle = \\ &= \sum_n C_n n (a^+)^{n-1} |0\rangle. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Теперь используем соотношение (2.44):

$$\hat{a}\Psi_{\text{ког}} = \sum_n C_n n (a^+)^{n-1} |0\rangle = a_{\text{ког}} \sum_n C_{n-1} (a^+)^{n-1} |0\rangle. \quad (2.48)$$

Следовательно,

$$C_n = a_{\text{ког}} \frac{C_{n-1}}{n} = \frac{a_{\text{ког}}^n}{n!} C_0. \quad (2.49)$$

Поскольку в знаменателе (2.49) стоит факториал n , C_n быстро уменьшается при увеличении n , и волновая функция (2.45) сходится при $n \rightarrow \infty$. Нормированная функция когерентного конденсата имеет вид

$$\Psi_{\text{ког}} = e^{-\frac{1}{2}|a_{\text{ког}}|^2} \sum_n \frac{1}{n!} (a_{\text{ког}} \hat{a}^+)^n |0\rangle = e^{-\frac{1}{2}|a_{\text{ког}}|^2} e^{a_{\text{ког}} a^+} |0\rangle, \quad (2.50)$$



Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

причём

$$N_{\text{ког}} = |a_{\text{ког}}|^2, \quad \langle (\delta N_{\text{ког}}) \rangle = N_{\text{ког}}. \quad (2.51)$$

Подведём итог сегодняшней лекции. Ферми-газ с ростом температуры из газа с корочкой Ферми постепенно превращается в больцмановский, не претерпевая при этом фазовых переходов. Но в бозе-газе есть явление бозе-конденсации, причём при увеличении температуры происходит фазовый переход без выделения тепла, то есть второго рода. Вернее, как говорят, это переход 2,5-рода, поскольку первая производная энергии — теплоёмкость — не испытывает скачка, а терпит скачок только производная от теплоёмкости. Самое интересное в бозе-газе начинается тогда, когда появляется взаимодействие между частицами, и этот случай будет рассмотрен в следующих лекциях.



Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu