

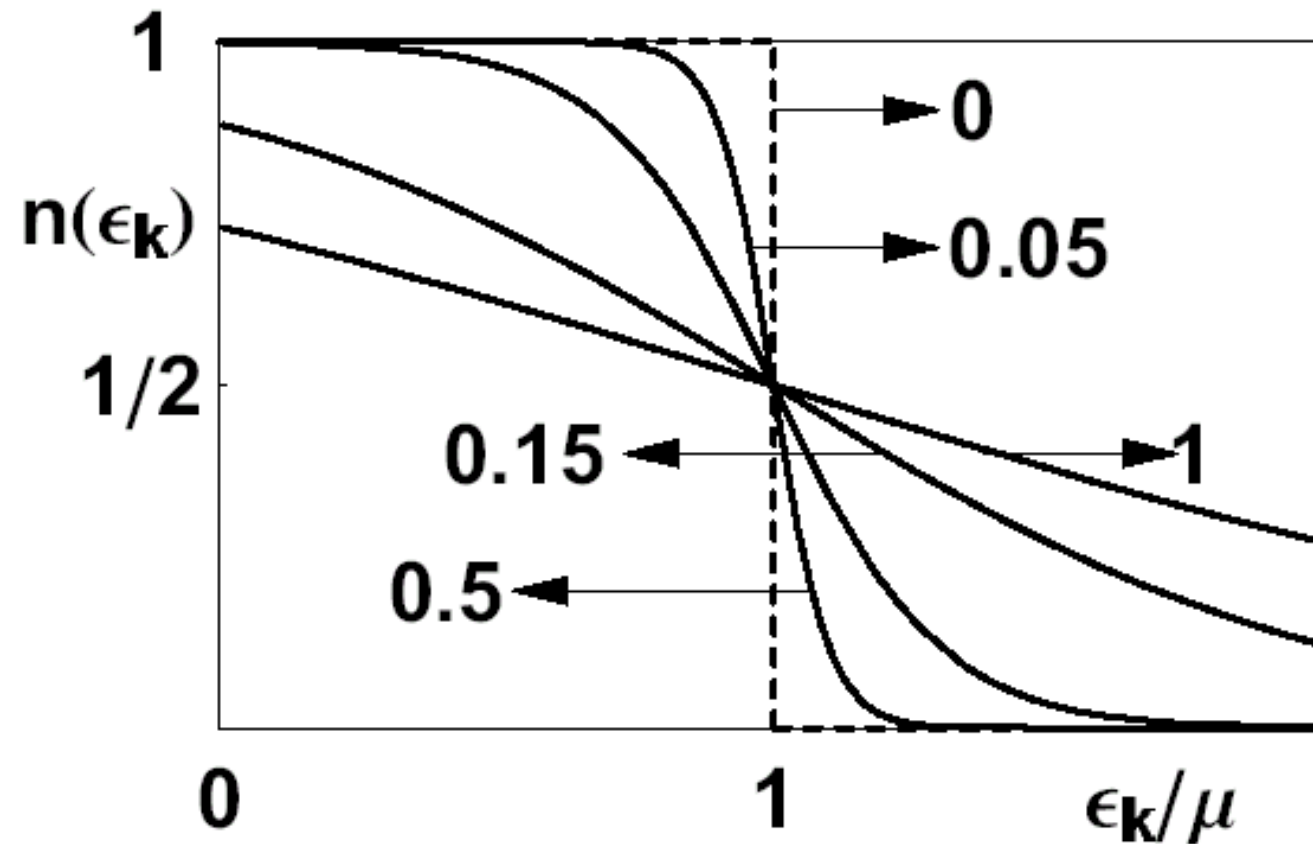
Silnie zwyrodniałe gazy kwantowe

Statystyka nieoddziaływujących gazów Fermiego:

- Rozkład Fermiego-Diraca
- Stan podstawowy gazu (cieczy) Fermiego
- Rozwinięcie Sommerfelda
- Ciepło właściwe
- Zastosowania
- Analiza numeryczna dla $T > 0$: izotermy, energia wewnętrzna, ciepło właściwe

$$n(\epsilon_k) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1} \rightarrow \begin{cases} 0, & T \rightarrow 0; & \epsilon_k > \mu \\ 1, & T \rightarrow 0; & \epsilon_k < \mu. \end{cases}$$

Każdy stan `k` jest 2s+1 razy zdegenerowany



Będziemy używać gęstość stanów dla cząstek nieoddziaływujących, wyrażoną jako rozkład po energiach:

$$\int D(k)dk = \sigma h^{-3}V \underbrace{\int d^3\mathbf{p}}_{(\epsilon = \frac{p^2}{2m}; md\epsilon = pdp; d^3\mathbf{p} = 4\pi p^2 dp)} = 2\pi\sigma V (2m/h^2)^{3/2} \int \epsilon^{1/2}d\epsilon = \int D(\epsilon)d\epsilon$$

Zaczniemy analizę od zbadania stanu podstawowego:

Silnie zwyrodniały gaz fermionów. Stan podstawowy ($T = 0$)

$$\xi_0 = \frac{N(h^{3/2})^2}{\sigma V \pi^{3/2} (2mk_B T)^{3/2}} = \frac{N \lambda_T^3}{V \sigma} = \frac{\lambda_T^3}{\tilde{v} \sigma}, \quad \longleftrightarrow \quad T_{\xi_0=1} \approx 10^4 \text{ K}$$

Uwzględniając degenerację:

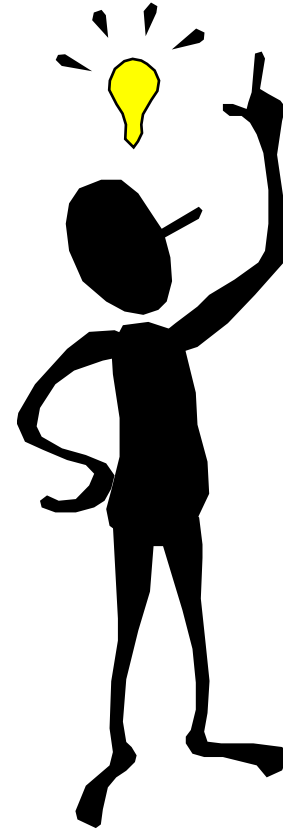
$$\sigma n(\epsilon_k) = \frac{\sigma}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1} \rightarrow \begin{cases} 0, & T \rightarrow 0; \quad \epsilon_k > \mu \\ \sigma, & T \rightarrow 0; \quad \epsilon_k < \mu. \end{cases}$$

Stąd $\mu(T = 0) \equiv \mu_0 = \mu_0(N, V) = \epsilon_F$, gdzie energia fermiego $\epsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$

- μ_0 dla gazu elektronowego

$$\begin{aligned} N &= \sum_{k, \sigma_k = \sigma} n(\epsilon_k) = 2\pi\sigma V (2m/h^2)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{1/2} n(\epsilon) \\ &= 2\pi\sigma V (2m/h^2)^{3/2} \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon^{1/2} \\ &= \frac{4}{3}\pi\sigma \frac{V}{h^3} (2m\epsilon_F)^{3/2} \Big|_{\epsilon_F = \mu_0} \end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow \boxed{2m\mu_0 = 2m\epsilon_F = \left(\frac{N}{V} \frac{3h^3}{4\pi\sigma} \right)^{2/3}}$$



- Energia wewnętrzna



$$E_0 = U_0 = F_0 = \lim_{T \rightarrow 0} \sum_{k, \sigma_k} \frac{\sigma \epsilon_k}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1} =$$

$$= 2\pi\sigma V (2m/h^2)^{3/2} \lim_{T \rightarrow 0} \int_0^\infty \frac{\epsilon^{1/2} \epsilon d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1}$$

$$= 2\pi\sigma V (2m/h^2)^{3/2} \int_0^{\epsilon_F} \epsilon^{3/2} d\epsilon$$

$$= \underbrace{\left(2\pi\sigma V (2m/h^2)^{3/2} \frac{2}{5} \epsilon_F^{3/2} \cdot \frac{5}{3} \right)}_N \cdot \frac{3}{5} \epsilon_F$$

$$= \frac{3}{5} N \epsilon_F$$

- Równanie stanu

$$U_0 = \frac{3}{2}p_0V \quad \Leftrightarrow \quad p_0 = \frac{2N}{5V}\epsilon_F$$

Są to ogromne ciśnienia. Jeśli wziąć, na przykład, elektrony w metalu dla których

$$1 \text{ mol} \approx 6 \text{ cm}^3$$

$$1 \text{ cm}^3 \sim 10^{23} \text{ elektronów przewodnictwa (swobodnych)}$$

$$m_e \approx 9.1 \times 10^{-28} g, \quad \sigma = 2,$$

$$\text{wtedy } p_0 \approx 10^5 \text{ Atm.}$$

$$v_F \approx 1.6 \cdot 10^8 \text{ cm/sec} \approx \frac{1}{200} c.$$

Rozwinięcie Sommerfelda wokół stanu podstawowego ($T \gtrsim 0$)

Jest to rozwinięcie asymptotyczne wokół

$$\beta = 1/k_B T \rightarrow \infty;$$

w tym przypadku μ nie różni się zbytnio od energii

Fermiego ϵ_F .

Możemy zatem również przyjąć $\mu > 0$.

Pożyteczny wzór:

Niech $h(\epsilon)$ jest dowolną funkcją niezależną od temperatury, ciągłą i różniczkowalną dla $\epsilon = \mu$, a także wolnozmienną w przedziale $|\epsilon - \mu| \lesssim k_B T$. Wtedy

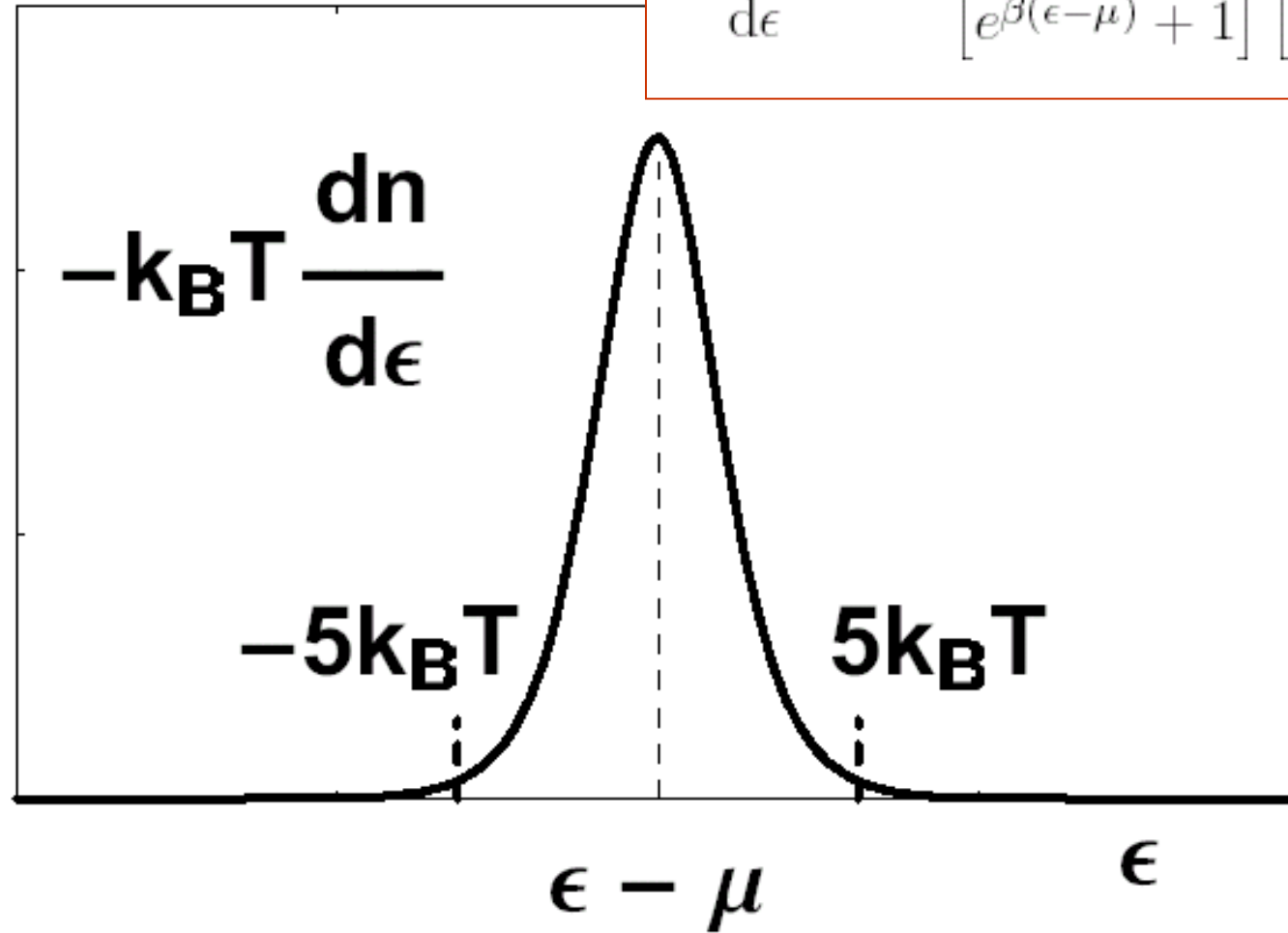
$$\begin{aligned}\int_0^\infty h(\epsilon)n(\epsilon)d\epsilon &= \int_0^\infty \frac{h(\epsilon)d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} \\ &= \int_0^\mu h(\epsilon)d\epsilon + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 h'(\mu) + \frac{7\pi^4}{360}(k_B T)^4 h'''(\mu) + \dots\end{aligned}$$

lub

$$\begin{aligned}-\int_0^\infty \varphi(\epsilon)\frac{dn(\epsilon)}{d\epsilon}d\epsilon &= \varphi(\mu) + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \varphi''(\mu) \\ &+ \frac{7\pi^4}{360}(k_B T)^4 \varphi^{(IV)}(\mu) + \dots, \quad \text{gdzie } \varphi' = h \text{ oraz } \varphi(0) = 0.\end{aligned}$$

$$-\int_0^\infty \varphi(\epsilon) \frac{dn(\epsilon)}{d\epsilon} d\epsilon$$

$$\frac{dn(\epsilon)}{d\epsilon} = -\frac{\beta}{[e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1][e^{-\beta(\epsilon-\mu)} + 1]},$$



- Potencjał chemiczny Przypominamy, że dla $T = 0$ potencjał chemiczny (czyli energia Fermiego) dane są wyrażeniem

$$\mu_0 = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3N}{4\pi\sigma V} \right)^{2/3}.$$

$$N = \int_0^\infty d\epsilon D(\epsilon) n(\epsilon) = 2\pi\sigma V \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{1/2} n(\epsilon) = \frac{3}{2} N \mu_0^{-3/2} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{1/2} n(\epsilon).$$

Natomiast dla $T > 0$ (ale niezbyt dużo)

dla $h(\epsilon) = \epsilon^{1/2}$ otrzymamy

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

Odwracając dostaniemy (patrz dodatek)

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

Stąd możemy wyliczyć już dowolną z funkcji termodynamicznych:

- Energia Wewnętrzna

$$E = \int_0^\infty d\epsilon D(\epsilon) \epsilon n(\epsilon) = \frac{3}{2} N \mu_0^{-3/2} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{3/2} n(\epsilon).$$

$$h(\epsilon) = \epsilon^{3/2}$$

$$\begin{aligned} E &= \frac{3}{5} N \left(\frac{\mu}{\mu_0} \right)^{3/2} \mu \left\{ 1 + \frac{5\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{\mu} \right)^2 - \mathcal{O}(T^4) \right\} \\ &= \frac{3}{5} N \mu_0 \left\{ 1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\mu_0} \right)^2 - \mathcal{O}(T^4) \right\} \end{aligned}$$

- Ciepło właściwe

$$C_{V,N} = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{V,N} = \frac{3}{5} N \mu_0 \frac{5\pi^2}{12} \frac{k_B^2}{\mu_0^2} 2T + \mathcal{O}(T^3) = \frac{1}{2} N \frac{k_B^2 \pi^2}{\mu_0} T + \mathcal{O}(T^3).$$

Wnioski:

– Otrzymany wzór na ciepło właściwe wymaga komentarza. Po pierwsze zauważamy, że zgodnie z III zasadą termodynamiki $C_{V,N} \rightarrow 0$ oraz $S \rightarrow 0$ gdy $T \rightarrow 0$.

– Nawet w pokojowych temperaturach przyczynek do ciepła właściwego pochodzący od elektronów przewodnictwa jest bardzo mały.

– Otrzymany wzór dobrze zgadza się z doświadczeniem, a stała

$$C_{V,N}/T \simeq 2.08 \text{ mJ/mol K}^2 + 2.57 T^2$$

jest odtworzona do 20%.

- Metale mają więc w przybliżeniu pojemność cieplną taką jak izolatory (ten fakt był znany doświadczalnie stosunkowo wcześniej i początkowo niewytłumaczalny. Metale zachowują się jak pudełka na gaz elektronowy.

- Dziwić może fakt, że otrzymujemy tak dobrą zgodność z doświadczeniem, mimo nieuwzględnienia Kulombowskiego odpychania między elektronami. Dzisiaj wiemy, że jest to efekt ekranowania wynikły z polaryzacji jąder atomowych.

Zastosowanie statystyki Fermiego-Diraca

Ważnym parametrem tutaj jest energia Fermiego dla $T = 0$

$$\epsilon_F = \mu_0 = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3N}{4\pi\sigma V} \right)^{2/3}$$

- np. dla elektronów walencyjnych w metalu

$$\frac{N}{V} \sim (1 - 10) \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}, \quad \sigma = 2$$

co daje

$$\epsilon_F \sim (2 - 8) \text{ eV} \quad T_F \sim 20\,000 - 80\,000 \text{ K},$$

- Białe karty. Są to gwiazdy złożone głównie z Helu, o masie zbliżonej do masy słońca i promieniu porównywalnym z promieniem ziemi:

$$M \sim 2 \times 10^{33} g$$

$$R \sim 2 \times 10^9 cm = 20\,000 km$$

$$\rho \sim 0.7 \times 10^5 g cm^{-3} \Rightarrow 1 cm^3 \sim 1 tona$$

Można to przeliczyć na odległości między atomami, co daje $0.01 \text{ \AA}$. Wobec powyższego, struktura atomowa w gwieździe nieistnieje; atomy są w pełni zjonizowane, a elektrony tworzą gaz. Gęstość tych elektronów jest większa o czynnik 10^8 niż gęstość gazu elektronowego w metalu

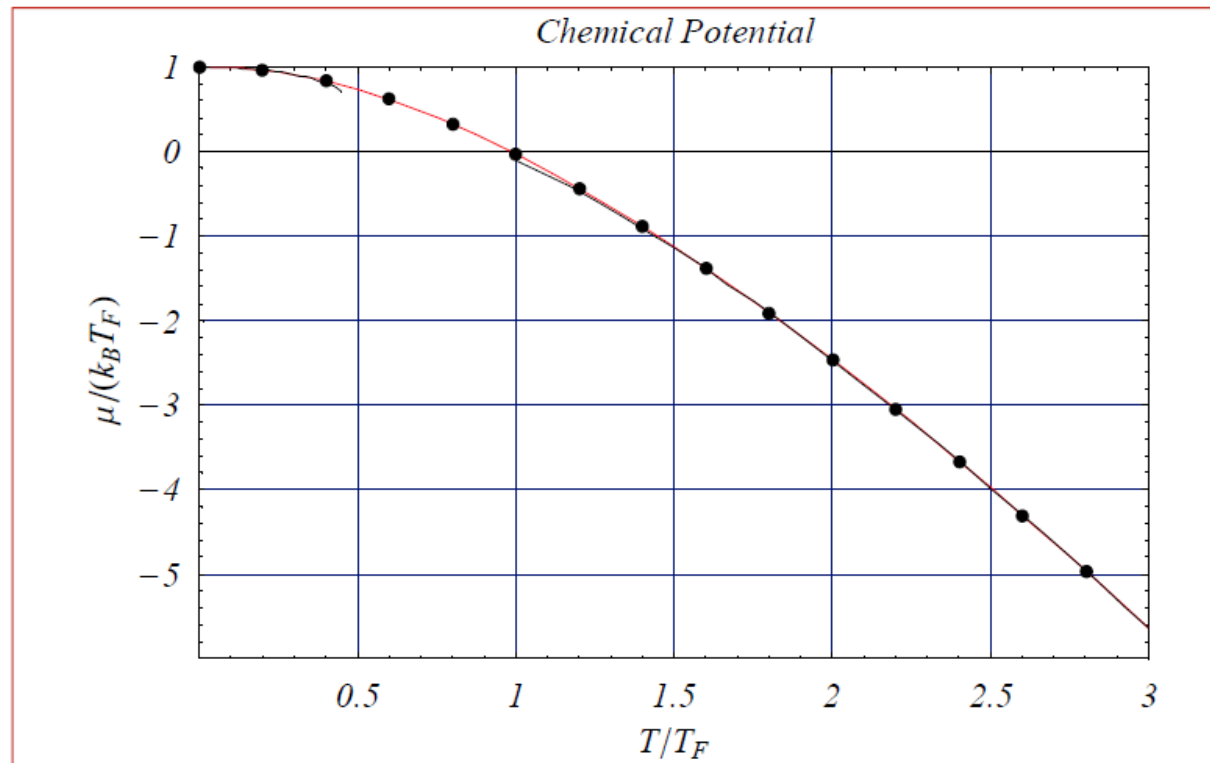
$$\epsilon_F \sim 10^5 - 10^6 \text{ eV} \quad T_F \sim 10^9 - 10^{10} \text{ K}.$$

Z obserwacji wiadomo, że temperatura wewnątrz białego karła jest rzędu 10^7 K , a więc dużo mniejsza niż temperatura Fermiego, co oznacza, że gaz elektronowy gwiazdy jest zdegenerowany. Ciśnienie gazu elektronowego jest równoważone przez grawitacyjne przyciąganie atomów *He*. Jeśli jednak masa gwiazdy przekracza granicę Chandrasekhara ($1.4 \times$ masa słońca, wtedy ciśnienie jest za małe aby zatrzymać kolaps grawitacyjny. Nukleony białego karła także tworzą gaz fermionów. Jednak masa nukleonu jest większa od masy elektronu o czynnik 2000, a zatem temperatura Fermiego nukleonu jest mniejsza o czynnik 2000. Zatem dla gazu nukleonów w białym karle nie jest spełniony warunek silnego zwyrodnienia.

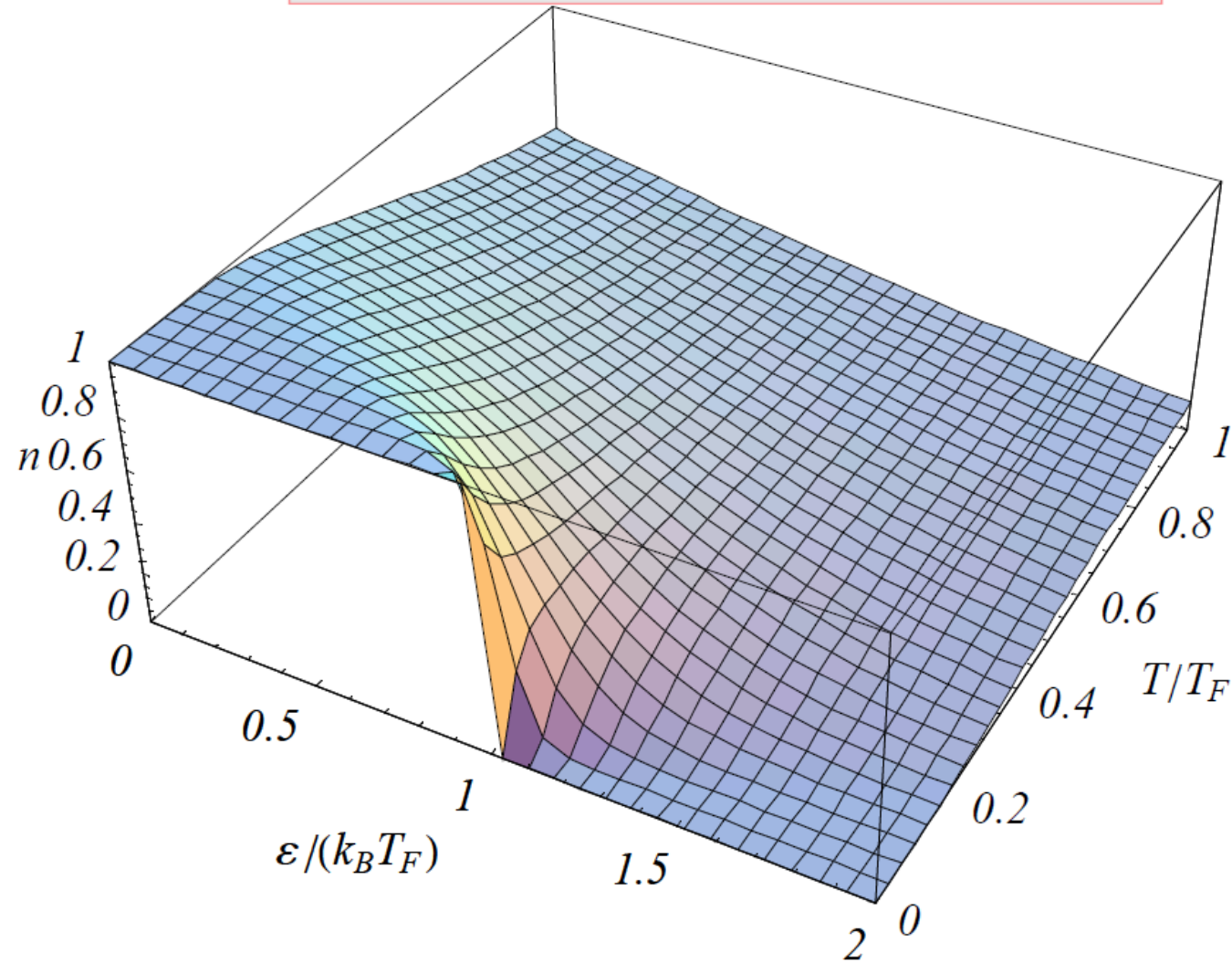
- Gwiazda neutronowa. Neutrony w gwiazdzie neutronowej tworzą zdegenerowany gaz Fermiego. Jest to związane z faktem, że gwiazdy neutronowe mają masę 10^9 razy większą niż białe karły ($N/V \sim 10^{39} \text{ cm}^{-3}$, $T_F \sim 10^{12}$)

Ścisłe wyniki dla $T > 0$, analiza numeryczna

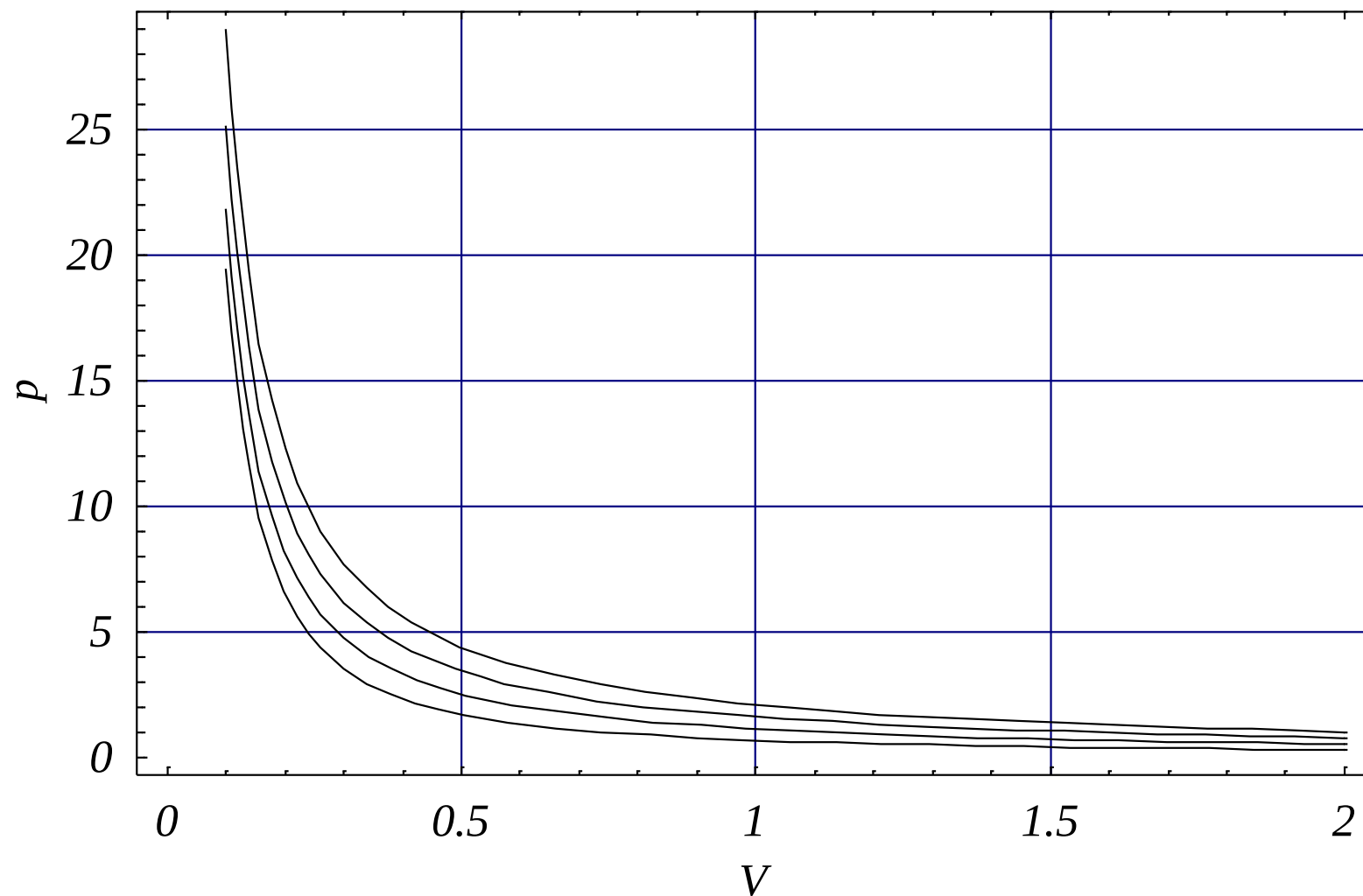
$$N = \int_0^\infty d\epsilon D(\epsilon) n(\epsilon) = 2\pi\sigma V \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{1/2} n(\epsilon) = \frac{3}{2} N \mu_0^{-3/2} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{1/2} n(\epsilon).$$



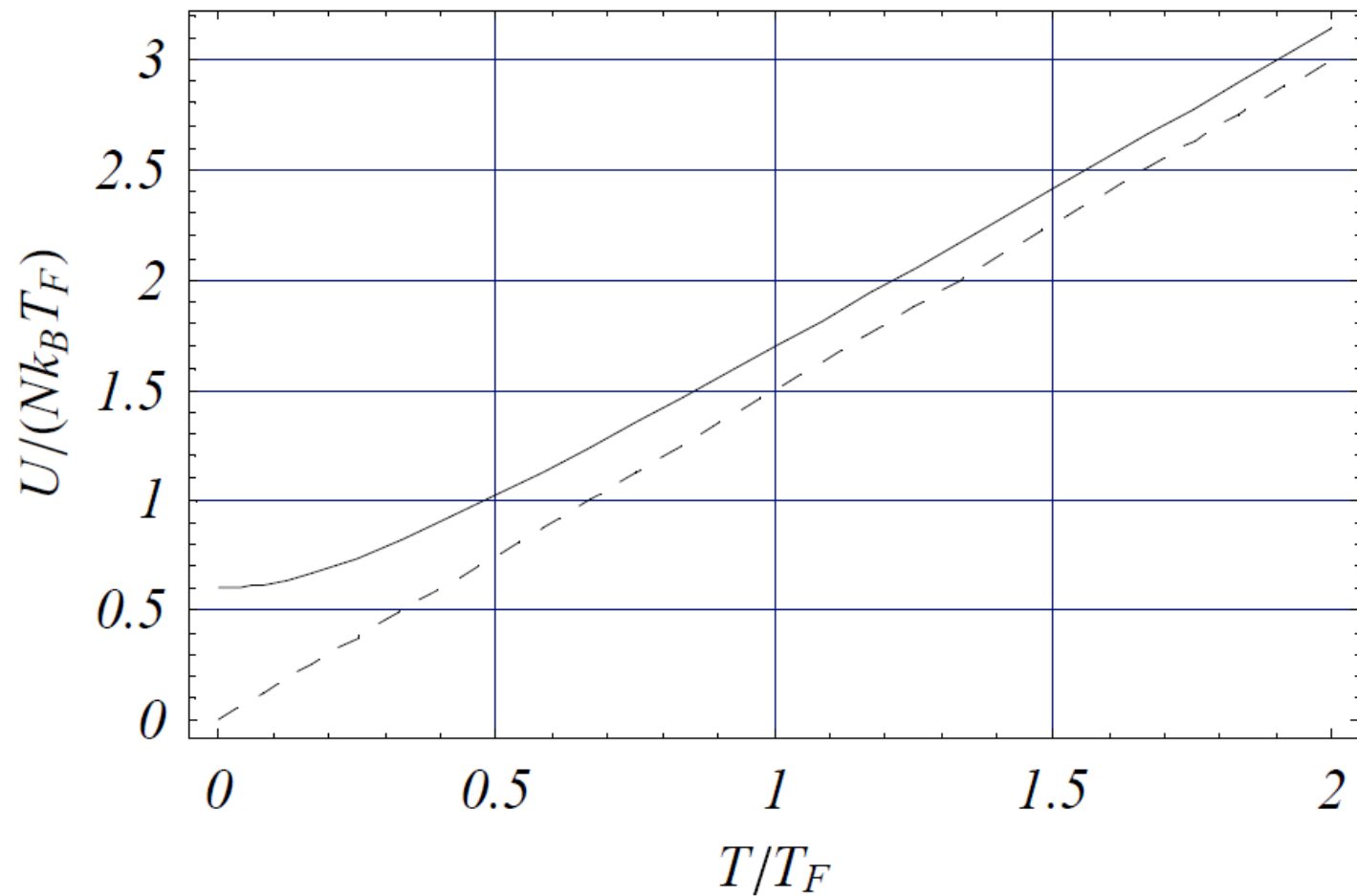
Średnie obsadzenie poziomów

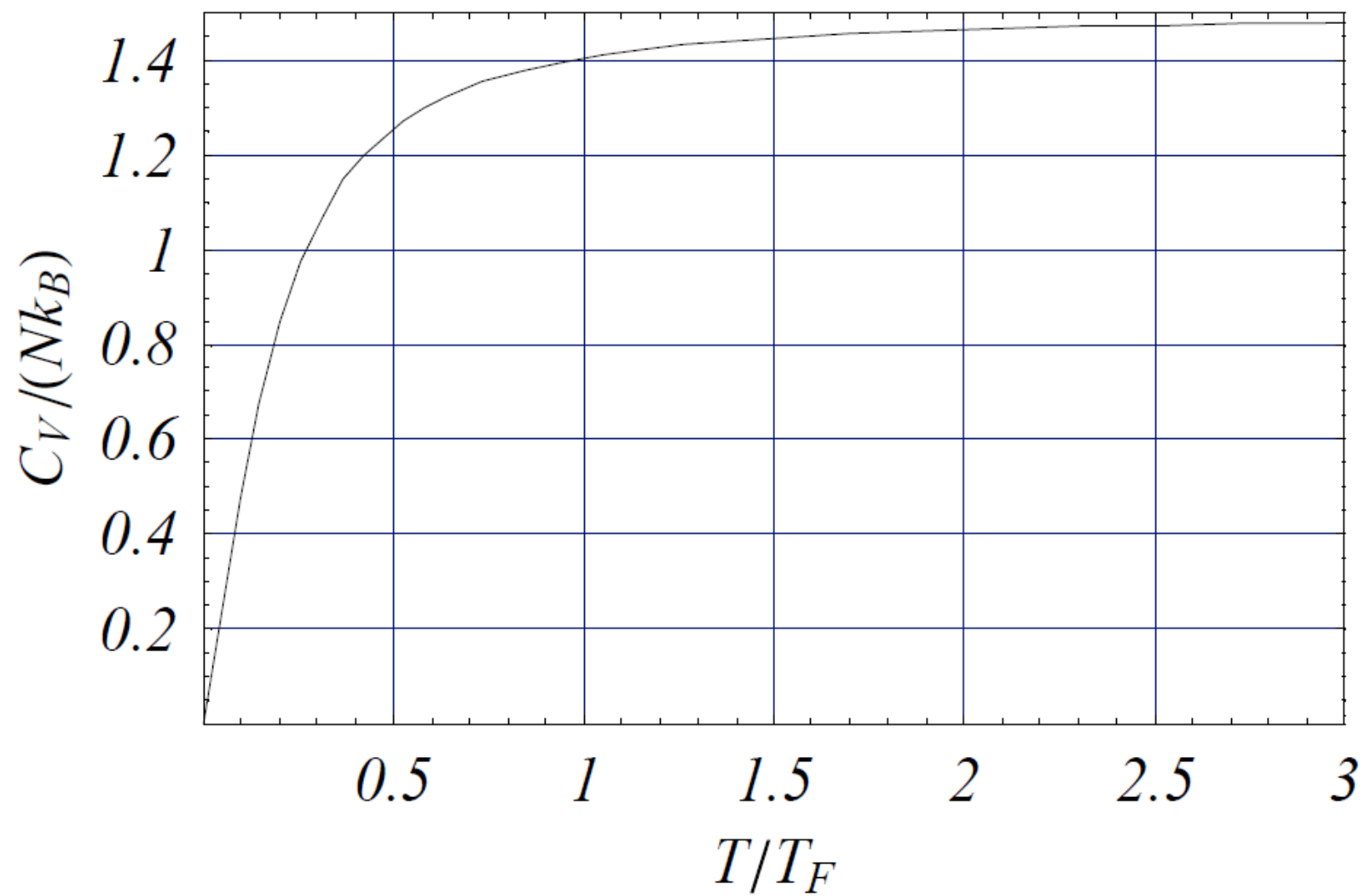


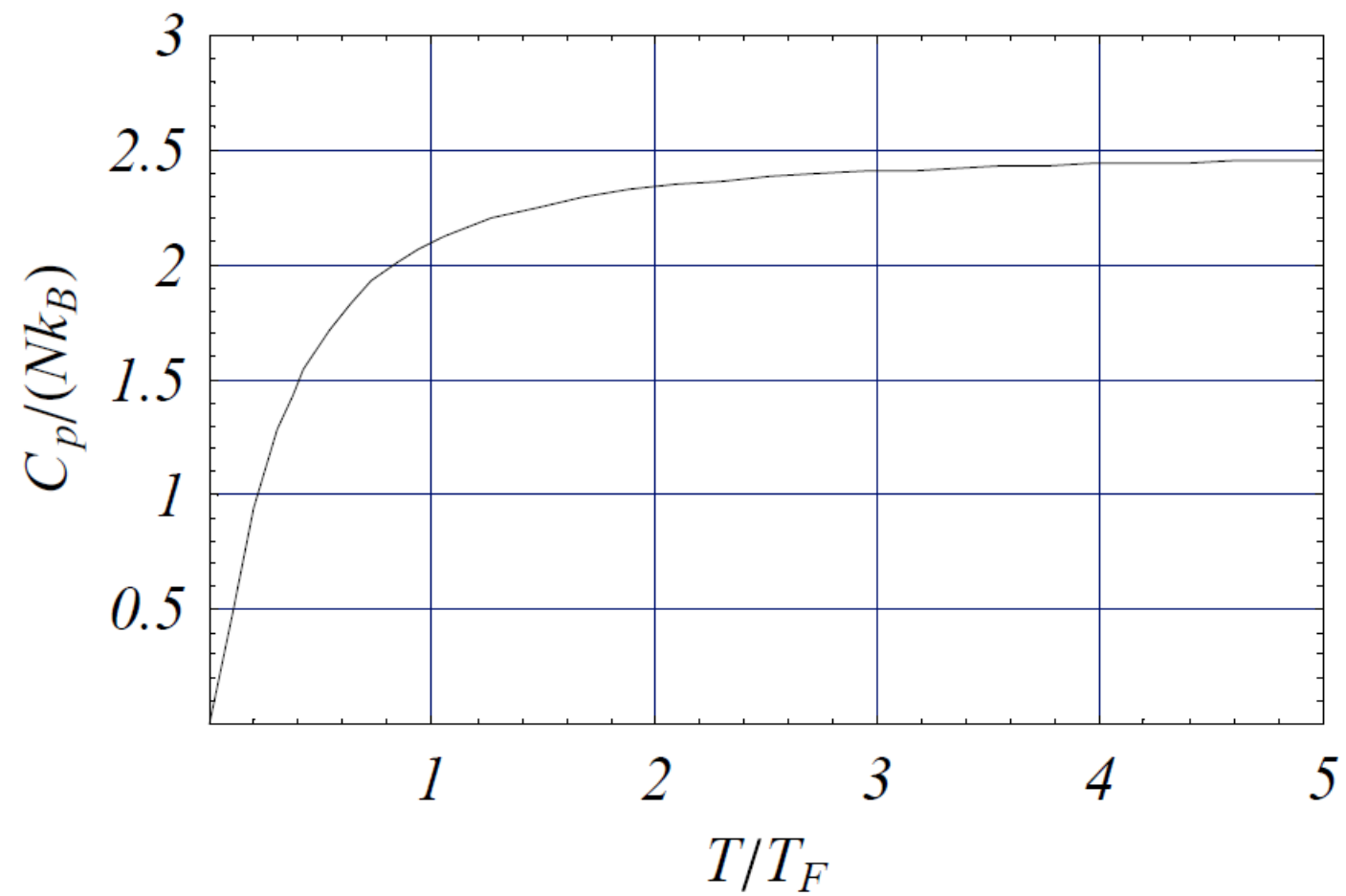
Izotermy w idealnym gazie Fermiego

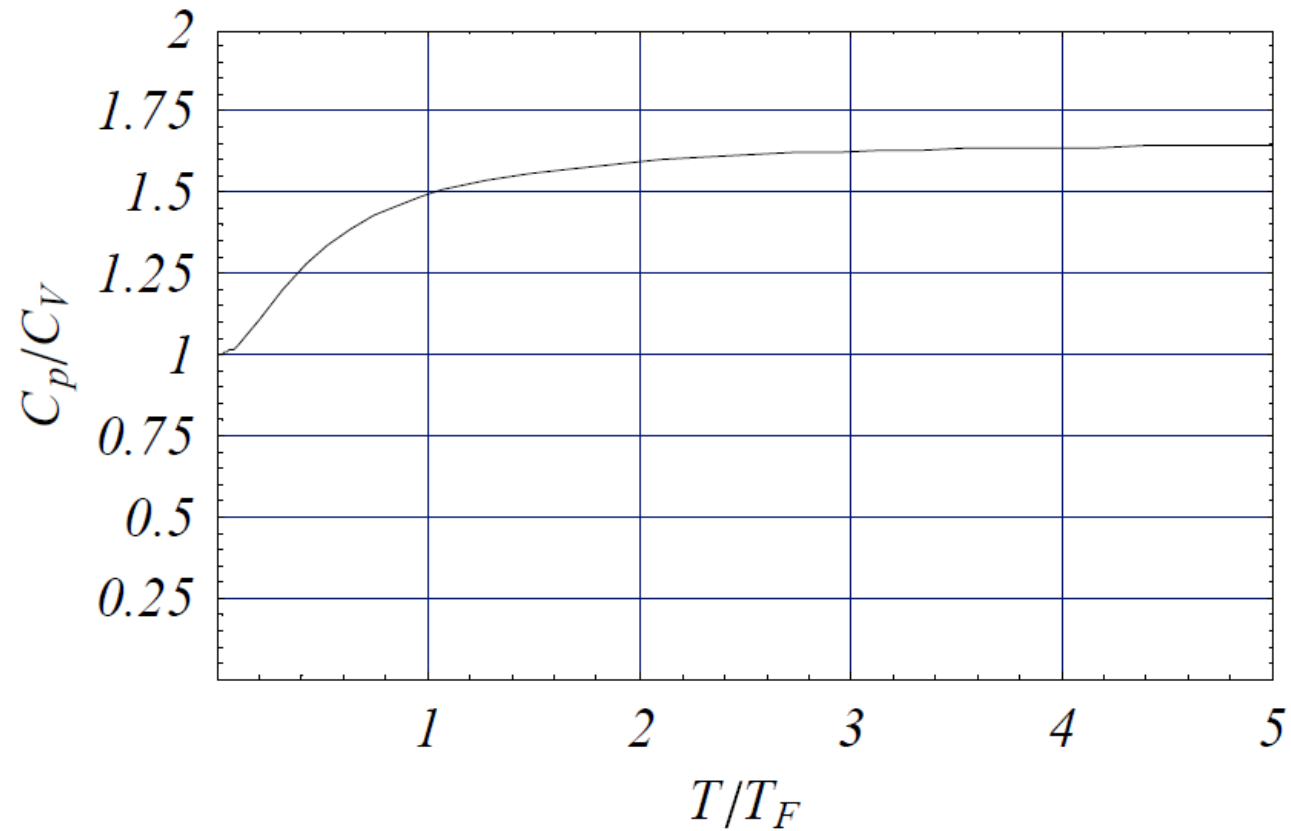


Energia wewnętrzna









Klasycznie:

$$C_V = \frac{3}{2} N k_B \quad C_p = \frac{5}{2} N k_B \quad \frac{C_p}{C_V} = \frac{5}{3}$$



KONIEC



DODATKI:

Dowód:

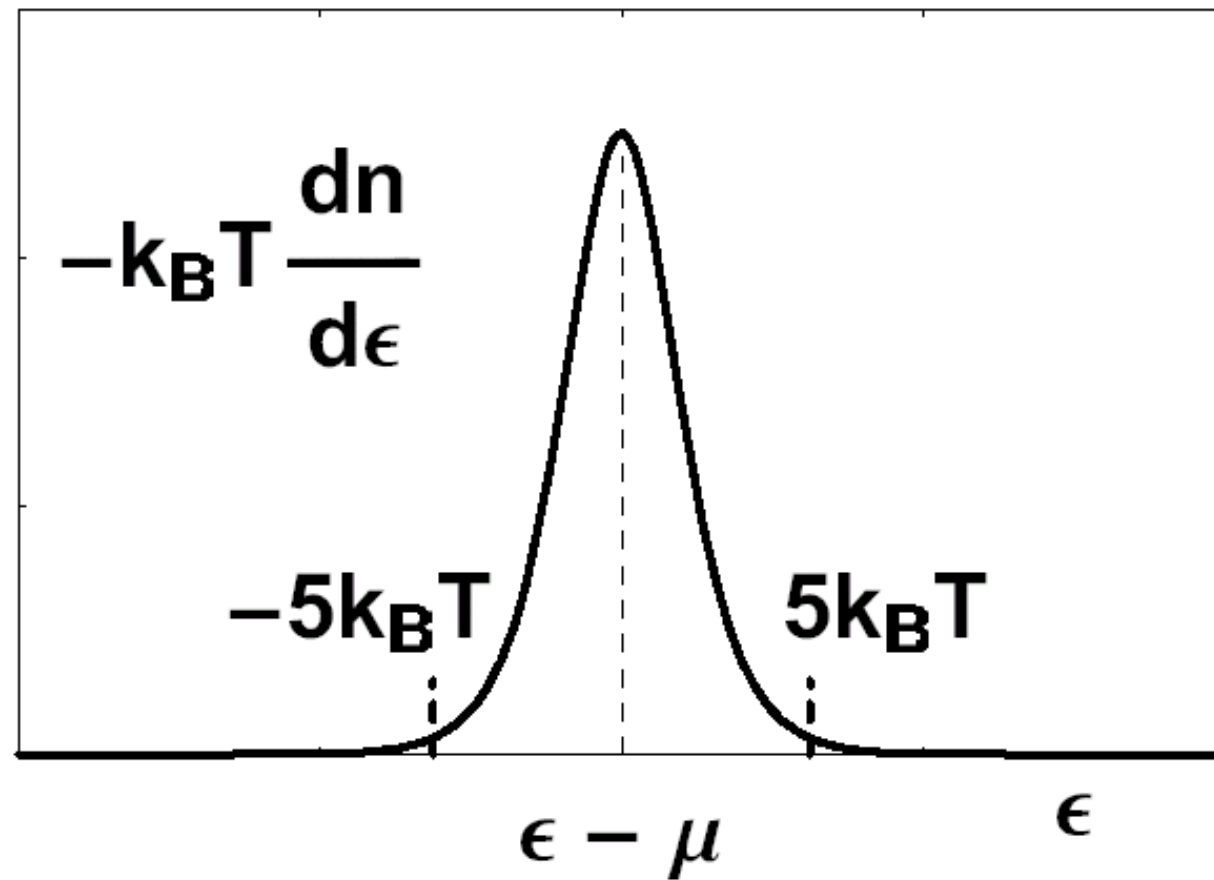
Najpierw zauważmy, że obie relacje są równoważne. Wynika to z wzoru

$$I = \int_0^\infty \varphi'(\epsilon)n(\epsilon)d\epsilon = \underbrace{\varphi(\epsilon)n(\epsilon)\Big|_0^\infty}_{=0 \text{ w myśl założeń}} - \int_0^\infty \varphi(\epsilon)\frac{dn(\epsilon)}{d\epsilon}d\epsilon.$$

Zatem udowodnienie drugiej relacji jest równoważne udowodnieniu pierwszej. Zobaczmy teraz na pochodną

$$\frac{dn(\epsilon)}{d\epsilon} = -\frac{\beta}{[e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1][e^{-\beta(\epsilon-\mu)} + 1]},$$

która występuje w drugiej z relacji. Funkcja ta ma ostre maksimum wokół $\epsilon - \mu$ i przyjmuje małe wartości poza obszarem $|\epsilon - \mu| \lesssim k_B T$ (patrz rysunek poniżej)



Można zatem rozwinąć $\varphi(\epsilon)$ w szereg względem $(\epsilon - \mu)$

$$\varphi(\epsilon) = \varphi(\mu) + (\epsilon - \mu)\varphi'(\mu) + \frac{1}{2}(\epsilon - \mu)^2\varphi''(\mu) + \dots,$$

i wstawić do wzoru na I , i wycałkować wyraz po wyrazie. Pod całką, dolną granicę całkowania, równą 0, można zastąpić (bez poważnej zmiany wartości całki dla niezbyt dużych $k_B T$) przez $-\infty$.

Formuły są następujące:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dn(\epsilon)}{d\epsilon} d\epsilon &= -1 \\ \int_{-\infty}^{\infty} (\epsilon - \mu)^n \frac{dn(\epsilon)}{d\epsilon} d\epsilon &= 0 \quad (n - \text{nieparzyste}) \\ \int_{-\infty}^{\infty} (\epsilon - \mu)^n \frac{dn(\epsilon)}{d\epsilon} d\epsilon &= -\frac{1}{k_B T} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\epsilon - \mu)^n e^{\beta(\epsilon - \mu)}}{[e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1]^2} d\epsilon = -(k_B T)^n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^n e^x dx}{(e^x + 1)^2} \\ &= -2(k_B T)^n n! (1 - 2^{-n+1}) \zeta(n), \quad (n - \text{parzyste})\end{aligned}$$

gdzie ζ to funkcja ζ Riemanna: $\zeta(n) = \sum_{l=1}^{\infty} l^{-n}$; $\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}$; $\zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}$
Reasumując

$$I = \varphi(\mu) + \sum_{r=1}^{\infty} 2 \cdot (1 - 2^{1-2r}) \zeta(2r) (k_B T)^{2r} \varphi^{(2r)}(\mu). \quad (5.4.4)$$

Wstawiając $h = \varphi'(\epsilon)$ otrzymuje się pierwszą z równości.

II.

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

Startujemy jak zwykle z

$$N = \int_0^\infty d\epsilon D(\epsilon) n(\epsilon) = 2\pi\sigma V \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{1/2} n(\epsilon) = \frac{3}{2} N \mu_0^{-3/2} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{1/2} n(\epsilon).$$

Używając obecnie pierwsze z rozwinięć asymptotycznych dla $h(\epsilon) = \epsilon^{1/2}$ otrzymamy

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

Dalej, rozwijając μ w szereg Taylora wokół $T = 0$ ($\mu = \mu_0$)

$$\begin{aligned}\mu = \mu_0 + \left. \frac{d\mu}{d(k_B T)} \right|_{T=0} (k_B T) + \frac{1}{2!} \left. \frac{d^2 \mu}{d(k_B T)^2} \right|_{T=0} (k_B T)^2 + \\ \frac{1}{3!} \left. \frac{d^3 \mu}{d(k_B T)^3} \right|_{T=0} (k_B T)^3 + \frac{1}{4!} \left. \frac{d^4 \mu}{d(k_B T)^4} \right|_{T=0} (k_B T)^4 + \dots\end{aligned}$$

i różniczkując równanie z poprzedniej strony otrzymamy

$$\begin{aligned}\left. \frac{d\mu}{d(k_B T)} \right|_{T=0} &= 0 \\ \left. \frac{d^2 \mu}{d(k_B T)^2} \right|_{T=0} &= -\frac{\pi^2}{6\mu_0} \\ \left. \frac{d^3 \mu}{d(k_B T)^3} \right|_{T=0} &= 0 \\ \left. \frac{d^4 \mu}{d(k_B T)^4} \right|_{T=0} &= -\frac{3\pi^4}{10\mu_0^3}\end{aligned}$$

co daje ostatecznie

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