

Решение заданий
ОП "Квантовая теория поля, теория струн и
математическая физика"

Термодинамика и статфизика
(П.И. Арсеев)

Коцевич Андрей Витальевич, группа Б02-920с

5 семестр, 2021

1 Часть I

Задача 1.1. Получить формулу для теплоемкости ансамбля двухуровневых или трехуровневых систем, вычислив статсумму и свободную энергию. Каждая двухуровневая система может находиться только в двух энергетических состояниях, разница энергий между которыми $\Delta\varepsilon$. В трехуровневой системе есть третье состояние, энергия которого также на $\Delta\varepsilon$ больше энергии второго. Задана концентрация таких двухуровневых или трехуровневых систем.

(Примером являются состояния атома со спином $1/2$ (два состояния) или 1 (три состояния) в магнитном поле.)

Решение.

1. Рассмотрим ансамбль двухуровневых систем. Статистическая сумма:

$$\mathcal{Z} = e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_B T}} + e^{-\frac{\varepsilon_1}{k_B T}} = e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_B T}} \left(1 + e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{k_B T}} \right) \quad (1)$$

Пусть N – полное число частиц в системе. Найдём числа заполнения двух уровней:

$$N_0 = \frac{N}{\mathcal{Z}} e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_B T}} = \frac{N}{1 + e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{k_B T}}}, \quad N_1 = \frac{N}{\mathcal{Z}} e^{-\frac{\varepsilon_1}{k_B T}} = \frac{N e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{k_B T}}}{1 + e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{k_B T}}} \quad (2)$$

Средняя энергия системы:

$$E = N_0 \varepsilon_0 + N_1 \varepsilon_1 = N \frac{\varepsilon_0 + \varepsilon_1 e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{k_B T}}}{1 + e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{k_B T}}} \quad (3)$$

Среднюю энергию можно получить и при помощи вычисления свободной энергии и энтропии. Свободная энергия:

$$F = -N k_B T \ln \mathcal{Z} = -N k_B T \ln \left(e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_B T}} \left(1 + e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{k_B T}} \right) \right) = N \left(\varepsilon_0 - k_B T \ln \left(1 + e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{k_B T}} \right) \right) \quad (4)$$

Энтропия:

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = N \left(k_B \ln \left(1 + e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{k_B T}} \right) + \frac{\Delta\varepsilon e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{k_B T}}}{T \left(1 + e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{k_B T}} \right)} \right) \quad (5)$$

$$E = F + TS = N \left(\varepsilon_0 + \frac{\Delta\varepsilon e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{k_B T}}}{1 + e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{k_B T}}} \right) = N \frac{\varepsilon_0 + \varepsilon_1 e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{k_B T}}}{1 + e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{k_B T}}} \quad (6)$$

Свободную энергию и энтропию в явном виде можно было не находить:

$$E = -N k_B T \ln \mathcal{Z} + N k_B T \frac{\partial(T \ln \mathcal{Z})}{\partial T} = N k_B T^2 \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial T} = -N \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (7)$$

$$\boxed{C = \frac{dE}{dT} = \frac{N(\Delta\varepsilon)^2}{4k_B T^2 \cosh^2 \left(\frac{\Delta\varepsilon}{2k_B T} \right)}} \quad (8)$$

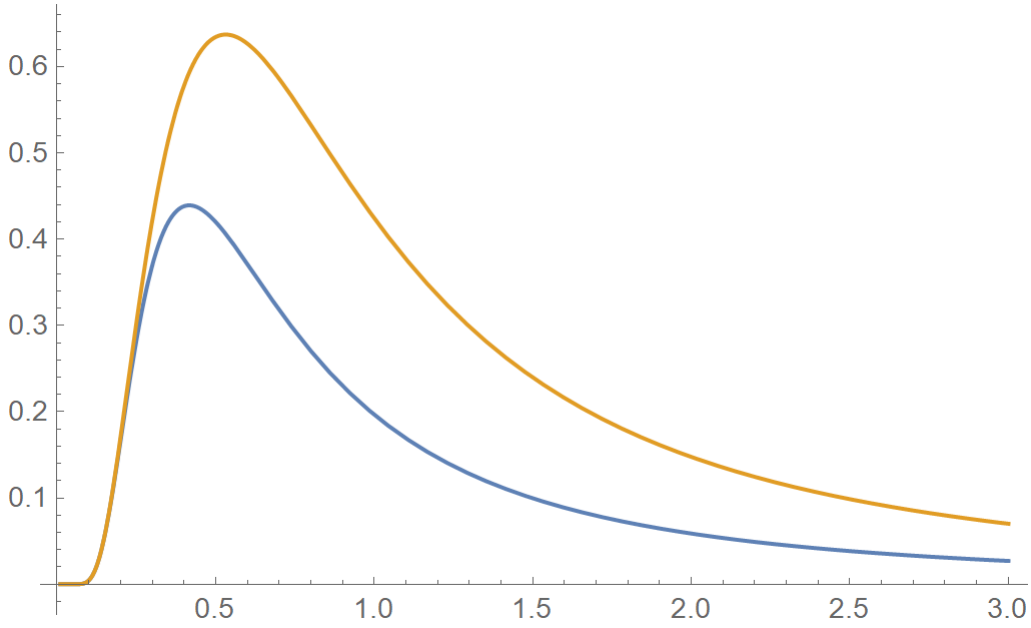


Рис. 1: График зависимости $\frac{C}{Nk_B} \left(\frac{k_B T}{\Delta \varepsilon} \right)$ для двухуровневой (синий) и трёхуровневой (жёлтый) систем

2. Рассмотрим ансамбль трёхуровневых систем. Статистическая сумма:

$$\mathcal{Z} = e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_B T}} + e^{-\frac{\varepsilon_1}{k_B T}} + e^{-\frac{\varepsilon_2}{k_B T}} = e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_B T}} \left(1 + e^{-\frac{\Delta \varepsilon}{k_B T}} + e^{-\frac{2\Delta \varepsilon}{k_B T}} \right) \quad (9)$$

$$N_0 = \frac{N}{\mathcal{Z}} e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_B T}} = \frac{N}{1 + e^{-\frac{\Delta \varepsilon}{k_B T}} + e^{-\frac{2\Delta \varepsilon}{k_B T}}}, \quad N_1 = \frac{N}{\mathcal{Z}} e^{-\frac{\varepsilon_1}{k_B T}} = \frac{N e^{-\frac{\Delta \varepsilon}{k_B T}}}{1 + e^{-\frac{\Delta \varepsilon}{k_B T}} + e^{-\frac{2\Delta \varepsilon}{k_B T}}} \quad (10)$$

$$N_2 = \frac{N}{\mathcal{Z}} e^{-\frac{\varepsilon_2}{k_B T}} = \frac{N e^{-\frac{2\Delta \varepsilon}{k_B T}}}{1 + e^{-\frac{\Delta \varepsilon}{k_B T}} + e^{-\frac{2\Delta \varepsilon}{k_B T}}} \quad (11)$$

Средняя энергия системы:

$$E = N_0 \varepsilon_0 + N_1 \varepsilon_1 + N_2 \varepsilon_2 = N \frac{\varepsilon_0 + \varepsilon_1 e^{-\frac{\Delta \varepsilon}{k_B T}} + \varepsilon_2 e^{-\frac{2\Delta \varepsilon}{k_B T}}}{1 + e^{-\frac{\Delta \varepsilon}{k_B T}} + e^{-\frac{2\Delta \varepsilon}{k_B T}}} \quad (12)$$

Свободная энергия:

$$\begin{aligned} F = -Nk_B T \ln \mathcal{Z} &= -Nk_B T \ln \left(e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_B T}} \left(1 + e^{-\frac{\Delta \varepsilon}{k_B T}} + e^{-\frac{2\Delta \varepsilon}{k_B T}} \right) \right) = \\ &= N \left(\varepsilon_0 - k_B T \ln \left(1 + e^{-\frac{\Delta \varepsilon}{k_B T}} + e^{-\frac{2\Delta \varepsilon}{k_B T}} \right) \right) \end{aligned} \quad (13)$$

Энтропия:

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = N \left(k_B \ln \left(1 + e^{-\frac{\Delta \varepsilon}{k_B T}} + e^{-\frac{2\Delta \varepsilon}{k_B T}} \right) + \frac{\Delta \varepsilon (e^{-\frac{\Delta \varepsilon}{k_B T}} + 2e^{-\frac{2\Delta \varepsilon}{k_B T}})}{T (1 + e^{-\frac{\Delta \varepsilon}{k_B T}} + e^{-\frac{2\Delta \varepsilon}{k_B T}})} \right) \quad (14)$$

$$E = F + TS = N \left(\varepsilon_0 + \frac{\Delta \varepsilon (e^{-\frac{\Delta \varepsilon}{k_B T}} + 2e^{-\frac{2\Delta \varepsilon}{k_B T}})}{1 + e^{-\frac{\Delta \varepsilon}{k_B T}} + e^{-\frac{2\Delta \varepsilon}{k_B T}}} \right) = N \frac{\varepsilon_0 + \varepsilon_1 e^{-\frac{\Delta \varepsilon}{k_B T}} + \varepsilon_2 e^{-\frac{2\Delta \varepsilon}{k_B T}}}{1 + e^{-\frac{\Delta \varepsilon}{k_B T}} + e^{-\frac{2\Delta \varepsilon}{k_B T}}} \quad (15)$$

$$C = \frac{dE}{dT} = \frac{2N(\Delta\varepsilon)^2 \left(2 + \cosh\left(\frac{\Delta\varepsilon}{k_B T}\right)\right)}{k_B T^2 \left(1 + 2 \cosh\left(\frac{\Delta\varepsilon}{k_B T}\right)\right)^2} \quad (16)$$

Графики зависимостей $C(T)$ в приведённых координатах двухуровневой и трёхуровневой систем приведены на рис. 1.

Задача 1.2. Рассмотрим следующую модель полимера. Полимер состоит из звеньев (палочек), которые соединяют непрерывным образом узлы квадратной решетки. Длина звена a , общее число звеньев N , концы полимера лежат на оси X , расстояние между концами l . При этом $N \gg 1$, $\frac{l}{a} \gg 1$, $N \gg \frac{l}{a}$, число звеньев в направлении Y тоже всегда считается большим. Оценить свободную энергию F такого полимера при фиксированной длине l и найти силу упругости как $\frac{\partial F(l)}{\partial l}$.

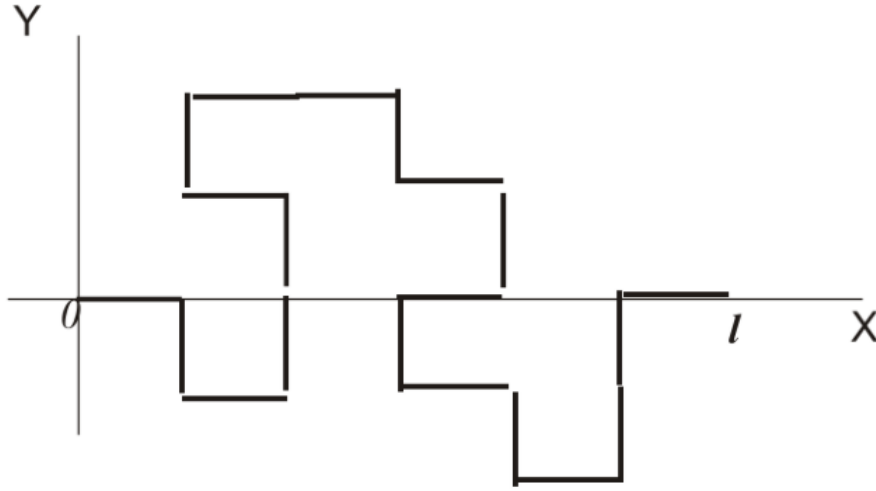


Рис. 2: Двумерная модель полимера

Решение.

Обозначим через n_{\rightarrow} число элементов, повернутых вправо, через n_{\leftarrow} – повернутых влево, через n_{\uparrow} – повернутых вверх, через n_{\downarrow} – повернутых вниз. Выразим через эти числа расстояние между концами цепочки l и число звеньев:

$$l = (n_{\rightarrow} - n_{\leftarrow})a, \quad N = n_{\rightarrow} + n_{\leftarrow} + n_{\uparrow} + n_{\downarrow} \quad (17)$$

Условие того, что концы полимера лежат на оси X :

$$n_{\uparrow} = n_{\downarrow} \quad (18)$$

При помощи 3 соотношений можно выразить все числа через n_{\rightarrow} , N , l :

$$n_{\leftarrow} = n_{\rightarrow} - \frac{l}{a}, \quad n_{\uparrow} = n_{\downarrow} = \frac{N}{2} + \frac{l}{2a} - n_{\rightarrow} \quad (19)$$

Поскольку все числа неотрицательны, то на n_{\rightarrow} накладываются условия:

$$\frac{l}{a} \leq n_{\rightarrow} \leq \frac{N}{2} + \frac{l}{2a} \quad (20)$$

В отличие от одномерного аналога, это число не задано. Число конфигураций с одним и тем же n_{\rightarrow} :

$$\Omega_{n_{\rightarrow}} = \frac{N!}{n_{\rightarrow}!n_{\leftarrow}!n_{\uparrow}!n_{\downarrow}!} \quad (21)$$

Число состояний с фиксированными l, N :

$$\Omega = \sum_{n_{\rightarrow}=\frac{l}{a}}^{\frac{N}{2}+\frac{l}{2a}} \frac{N!}{n_{\rightarrow}!n_{\leftarrow}!n_{\uparrow}!n_{\downarrow}!} = \sum_{n_{\rightarrow}=\frac{l}{a}}^{\frac{N}{2}+\frac{l}{2a}} \frac{N!}{n_{\rightarrow}!(n_{\rightarrow}-\frac{l}{a})!((\frac{N}{2}+\frac{l}{2a}-n_{\rightarrow})!)^2} \quad (22)$$

Пусть $n = n_{\rightarrow}$. Найдём максимальное слагаемое в этой сумме. Формула Стирлинга:

$$n! \approx \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n \quad (23)$$

$$\begin{aligned} n! \left(n - \frac{l}{a}\right)! \left(\left(\frac{N}{2} + \frac{l}{2a} - n\right)!\right)^2 &= \\ &= \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n \sqrt{2\pi \left(n - \frac{l}{a}\right)} \left(\frac{n - \frac{l}{a}}{e}\right)^{n - \frac{l}{a}} 2\pi \left(\frac{N}{2} + \frac{l}{2a} - n\right) \left(\frac{\frac{N}{2} + \frac{l}{2a} - n}{e}\right)^{N + \frac{l}{a} - 2n} = \\ &= 4\pi^2 \frac{n^{n+\frac{1}{2}}}{e^N} \left(n - \frac{l}{a}\right)^{n - \frac{l}{a} + \frac{1}{2}} \left(\frac{N}{2} + \frac{l}{2a} - n\right)^{N + \frac{l}{a} + 1 - 2n} \end{aligned} \quad (24)$$

Максимальному слагаемому соответствует минимальный знаменатель:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial n} \left(n^{n+\frac{1}{2}} \left(n - \frac{l}{a}\right)^{n - \frac{l}{a} + \frac{1}{2}} \left(\frac{N}{2} + \frac{l}{2a} - n\right)^{N + \frac{l}{a} + 1 - 2n} \right) &= \\ &= n^{n+\frac{1}{2}} \left(n - \frac{l}{a}\right)^{n - \frac{l}{a} + \frac{1}{2}} \left(\frac{N}{2} + \frac{l}{2a} - n\right)^{N + \frac{l}{a} + 1 - 2n} \left(\frac{1}{2n} + \frac{1}{2(n - \frac{l}{a})} - \frac{1}{N + \frac{l}{2a} - n} - \right. \\ &\quad \left. - 2 \ln \left(\frac{N}{2} + \frac{l}{2a} - n\right) + \ln \left(n - \frac{l}{a}\right) + \ln n \right) = 0 \end{aligned} \quad (25)$$

Пренебрежём первыми 3 слагаемыми:

$$2 \ln \left(\frac{N}{2} + \frac{l}{2a} - n\right) = \ln \left(n - \frac{l}{a}\right) + \ln n \quad (26)$$

$$n \left(n - \frac{l}{a}\right) = \left(\frac{N}{2} + \frac{l}{2a} - n\right)^2 \quad (27)$$

$$n^2 - \frac{nl}{a} = \frac{N^2}{4} + \frac{l^2}{4a^2} + n^2 + \frac{Nl}{2a} - nN - \frac{ln}{a} \quad (28)$$

$$n = \frac{\left(N + \frac{l}{a}\right)^2}{4N} = \frac{N}{4} + \frac{l}{2a} + \frac{l^2}{4a^2N} \quad (29)$$

Поскольку $\frac{l}{a} \ll N$, то 3 слагаемым пренебрегаем.

$$\Omega = \frac{N!}{\left(\frac{N}{4}!\right)^2 \left(\frac{N}{4} - \frac{l}{2a}\right)! \left(\frac{N}{4} + \frac{l}{2a}\right)!} \quad (30)$$

$$\Omega = \frac{\sqrt{2\pi N} \left(\frac{N}{e}\right)^N}{\frac{\pi N}{2} \left(\frac{N}{4e}\right)^{\frac{N}{2}} \pi \left(\frac{N}{2e} - \frac{l}{ae}\right)^{\frac{N}{4} - \frac{l}{2a} + \frac{1}{2}} \left(\frac{N}{2e} + \frac{l}{ae}\right)^{\frac{N}{4} + \frac{l}{2a} + \frac{1}{2}}} = \frac{2^{N+\frac{3}{2}} N^{\frac{N-1}{2}}}{\pi^{\frac{3}{2}} e \left(\frac{N}{2} - \frac{l}{a}\right)^{\frac{N}{4} - \frac{l}{2a} + \frac{1}{2}} \left(\frac{N}{2} + \frac{l}{a}\right)^{\frac{N}{4} + \frac{l}{2a} + \frac{1}{2}}}$$

Энтропия:

$$S = k_B \ln \Omega = k_B \left(\left(N + \frac{3}{2} \right) \ln 2 + \frac{N-1}{2} \ln N - \frac{3}{2} \pi - 1 - \left(\frac{N}{4} - \frac{l}{2a} + \frac{1}{2} \right) \ln \left(\frac{N}{2} - \frac{l}{a} \right) - \right. \\ \left. - \left(\frac{N}{4} + \frac{l}{2a} + \frac{1}{2} \right) \ln \left(\frac{N}{2} + \frac{l}{a} \right) \right) \quad (31)$$

Свободная энергия:

$$F = E - TS = -TS \quad (32)$$

$$F = k_B T \left(-\frac{N \ln N}{2} + \left(\frac{N}{4} - \frac{l}{2a} \right) \ln \left(\frac{N}{2} - \frac{l}{a} \right) + \left(\frac{N}{4} + \frac{l}{2a} \right) \ln \left(\frac{N}{2} + \frac{l}{a} \right) \right) \quad (33)$$

Сила упругости:

$$f = -\frac{\partial F}{\partial l} = k_B T \left(\frac{\frac{N}{2} + \frac{l}{a}}{a(\frac{l}{a} + \frac{N}{2})} - \frac{\frac{N}{2} - \frac{l}{a}}{a(\frac{N}{2} - \frac{l}{a})} + \frac{1}{2a} \ln \left(\frac{\frac{N}{2} + \frac{l}{a}}{\frac{N}{2} - \frac{l}{a}} \right) \right) \approx \frac{k_B T}{2a} \ln \left(\frac{\frac{N}{2} + \frac{l}{a}}{\frac{N}{2} - \frac{l}{a}} \right) \quad (34)$$

$$f = \frac{2k_B T l}{Na^2} \quad (35)$$

Задача 1.3. Определить поведение химического потенциала 2D и 1D бозе-газа при стремлении температуры к нулю. Задана концентрация бозе-частиц, закон дисперсии квадратичный.

Решение.

Распределение Бозе-Эйнштейна:

$$n_B(\varepsilon_p) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_p - \mu}{k_B T}} - 1} \quad (36)$$

Число частиц в d -мерном случае:

$$N = \sum_p n(\varepsilon_p) = V \int_0^\infty d\varepsilon \nu(\varepsilon) n(\varepsilon) \quad (37)$$

где $n(\varepsilon_p)$ – среднее число частиц с энергией ε_p , $\nu(\varepsilon_p)$ – плотность числа состояний для единицы объёма, которую можно выразить из предыдущей формулы:

$$\nu(\varepsilon) = \frac{1}{V} \sum_p \delta(\varepsilon - \varepsilon_p) \quad (38)$$

Перепишем последнюю сумму в виде d -мерного интеграла:

$$\nu(\varepsilon) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int d^d \vec{p} \delta(\varepsilon - \varepsilon_p) \quad (39)$$

Квадратичная дисперсия:

$$\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m} \quad (40)$$

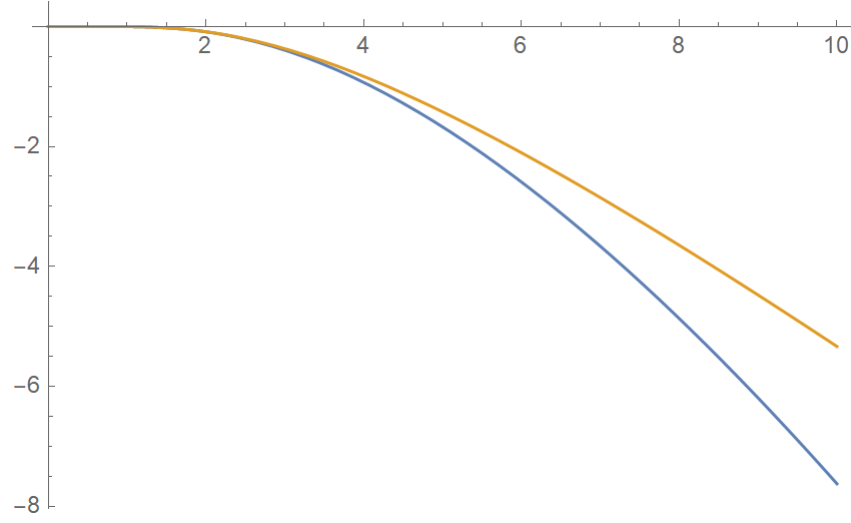


Рис. 3: Графики точной (синий) и приближённой (жёлтый) зависимостей $\frac{\mu}{E_F} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)$ 2D бозе-газа

1. Получим плотность числа состояний для 2D случая:

$$\nu(\varepsilon) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int d^2\vec{p} \delta(\varepsilon - \varepsilon_p) = \frac{1}{4\pi^2\hbar^2} \int_0^\infty dp \, 2\pi p \delta(\varepsilon - \varepsilon_p) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty d\varepsilon_p \delta(\varepsilon - \varepsilon_p) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \quad (41)$$

Как видно, в двумерном случае плотность числа состояний от энергии не зависит. Число частиц:

$$N = \frac{mV}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty \frac{d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} - 1} = -\frac{mV k_B T}{2\pi\hbar^2} \ln \left(1 - e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right) \quad (42)$$

Выразим из последнего равенства химический потенциал:

$$\boxed{\mu(T) = k_B T \ln \left(1 - e^{-\frac{2\pi N \hbar^2}{mV k_B T}} \right)} \quad (43)$$

При $T \ll \frac{N \hbar^2}{mV k_B}$:

$$\boxed{\mu(T) = -k_B T e^{-\frac{2\pi N \hbar^2}{mV k_B T}}} \quad (44)$$

Графики точной и приближённой зависимостей $\mu(T)$ в двумерном случае приведены на рис. 3.

2. Получим плотность числа состояний для 1D случая:

$$\nu(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \delta(\varepsilon - \varepsilon_p) = \frac{\sqrt{m}}{2\sqrt{2}\pi\hbar} \int_0^\infty \frac{d\varepsilon_p}{\sqrt{\varepsilon_p}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_p) = \frac{\sqrt{m}}{2\sqrt{2}\pi\hbar} \quad (45)$$

Число частиц:

$$N = \frac{\sqrt{m}V}{2\sqrt{2}\pi\hbar} \int_0^\infty \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} \left(e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} - 1 \right)} = \frac{\sqrt{m k_B T} V}{2\sqrt{2}\pi\hbar} \text{Li}_{\frac{1}{2}} \left(e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right) \quad (46)$$

где $\text{Li}_{\frac{1}{2}}(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{\sqrt{k}}$ – полилогарифм. Выразим из последнего равенства химический потенциал:

$$\mu(T) = k_B T \ln \left(\text{Li}_{\frac{1}{2}}^{-1} \left(\frac{2\sqrt{2\pi\hbar}N}{\sqrt{mk_B TV}} \right) \right) \quad (47)$$

Вычислим интеграл 46 при малых T :

$$N = \frac{\sqrt{mk_B TV}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{\infty} \frac{du}{e^{u^2 - \frac{\mu}{k_B T}} - 1} = \frac{\sqrt{mk_B TV}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{\infty} du \exp \left(-\ln \left(e^{u^2 - \frac{\mu}{k_B T}} - 1 \right) \right) \quad (48)$$

Возьмём интеграл методом перевала:

$$\Phi'(u) = \frac{2ue^{u^2}}{e^{\frac{\mu}{k_B T}} - e^{u^2}} = 0 \rightarrow u = 0 \quad (49)$$

$$\Phi''(0) = \frac{2}{e^{\frac{\mu}{k_B T}} - 1} \quad (50)$$

Перевальная точка находится на границе интервала, по которому ведётся интегрирование, поэтому перейдём к интегралу по прямой:

$$N = \frac{\sqrt{mk_B TV}}{2\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} du \exp \left(-\ln \left(e^{u^2 - \frac{\mu}{k_B T}} - 1 \right) \right) = \frac{\sqrt{mk_B TV}}{2\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{\sqrt{\pi \left(1 - e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right)}}{e^{-\frac{\mu}{k_B T}} - 1} = \frac{\sqrt{mk_B TV} e^{\frac{\mu}{k_B T}}}{2\sqrt{2\pi\hbar} \sqrt{1 - e^{\frac{\mu}{k_B T}}}}$$

$$e^{\frac{\mu}{k_B T}} = 1 + \frac{\mu}{k_B T} + \mathcal{O} \left(\left(\frac{\mu}{k_B T} \right)^2 \right) \quad (51)$$

$$N = \frac{\sqrt{mk_B TV}}{2\sqrt{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{\mu}{k_B T}}} = \frac{\sqrt{mk_B TV}}{2\sqrt{-2\pi\mu\hbar}} \quad (52)$$

Выразим химический потенциал:

$$\mu(T) = -\frac{mk_B^2 V^2}{8\pi\hbar^2 N^2} T^2 \quad (53)$$

Также можно найти численно 2 производную $\mu(T)$ и уточнить оценку:

$$\mu(T) = -\frac{0.122mk_B^2 V^2}{\hbar^2 N^2} T^2 \quad (54)$$

Графики точной и приближённой зависимостей $\mu(T)$ в одномерном случае приведены на рис. 4.

Задача 1.4. Определить, увеличивается или уменьшается химический потенциал 1D ферми-газа при увеличении температуры от нуля. Задана концентрация ферми-частиц, закон дисперсии квадратичный.

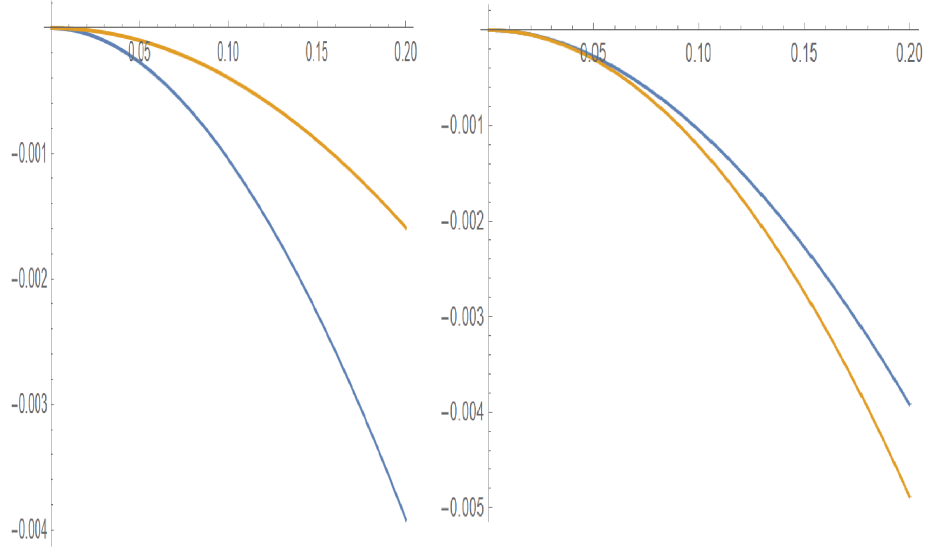


Рис. 4: Графики точной (синий) и приближённой (жёлтый) зависимостей $\mu(T)$ 1D бозе-газа (слева – приближенная зависимость (53), справа – (54))

Решение.

Распределение Ферми-Дирака:

$$n_F(\varepsilon_p) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_p - \mu}{k_B T}} + 1} \quad (55)$$

Число частиц (вывод плотности числа состояний в 1D случае см. в задаче 1.3.):

$$N = V \int_0^\infty d\varepsilon \nu(\varepsilon) n_F(\varepsilon) = \frac{\sqrt{m}V}{2\sqrt{2\pi}\hbar} \int_0^\infty \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} \left(e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}} + 1 \right)} = -\frac{\sqrt{mk_B TV}}{2\sqrt{2\pi}\hbar} \text{Li}_{\frac{1}{2}} \left(-e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right) \quad (56)$$

Выразим из последнего равенства химический потенциал:

$$\boxed{\mu(T) = k_B T \ln \left(-\text{Li}_{\frac{1}{2}}^{-1} \left(-\frac{2\sqrt{2\pi}\hbar N}{\sqrt{mk_B TV}} \right) \right)} \quad (57)$$

Введём обозначение $A = \frac{\sqrt{m}V}{2\sqrt{2\pi}\hbar}$ и вычислим интеграл (56) при малых T по частям:

$$N = A \int_0^\infty \frac{n_F d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}} = 2A \sqrt{\varepsilon} n_F(\varepsilon) \Big|_0^\infty - 2A \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} \frac{dn_F}{d\varepsilon} d\varepsilon \quad (58)$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sqrt{\varepsilon} n_F(\varepsilon) = 0, \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \sqrt{\varepsilon} n_F(\varepsilon) = 0 \quad (59)$$

Разложим $\sqrt{\varepsilon}$ близи $\varepsilon = \mu$:

$$\sqrt{\varepsilon} = \sqrt{\mu} + \frac{1}{2\sqrt{\mu}}(\varepsilon - \mu) - \frac{1}{8\mu^{\frac{3}{2}}}(\varepsilon - \mu)^2 + \mathcal{O}(\varepsilon - \mu)^3 \quad (60)$$

$$\begin{aligned}
N = -2A \int_0^\infty \left(\sqrt{\mu} + \frac{1}{2\sqrt{\mu}}(\varepsilon - \mu) - \frac{1}{8\mu^{\frac{3}{2}}}(\varepsilon - \mu)^2 \right) \frac{dn_F}{d\varepsilon} d\varepsilon = -2A\sqrt{\mu}(n_F(\infty) - n_F(0)) + \\
+ \frac{A}{4\mu^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^\infty (\varepsilon - \mu)^2 \frac{dn_F}{d\varepsilon} d\varepsilon = 2A\sqrt{\mu} - \frac{A}{4\mu^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^\infty \frac{(\varepsilon - \mu)^2 e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}}}{\left(1 + e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}}\right)^2 k_B T} d\varepsilon \quad (61)
\end{aligned}$$

Второго слагаемого нет, поскольку это интеграл произведения чётной и нечетной функций (если сдвинуть начало координат в точку $\varepsilon = \mu$).

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^\infty \frac{(\varepsilon - \mu)^2 e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}}}{\left(1 + e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}}\right)^2 k_B T} d\varepsilon = k_B^2 T^2 \int_{-\infty}^\infty \frac{u^2 e^u}{(1 + e^u)^2} du = 2k_B^2 T^2 \int_0^\infty \frac{u^2 e^u}{(1 + e^u)^2} du = -2k_B^2 T^2 \frac{t^2}{e^t + 1} \Big|_0^\infty + \\
+ 2k_B^2 T^2 \int_0^\infty \frac{2tdt}{e^t + 1} = \frac{k_B^2 T^2 \pi^2}{3} \quad (62)
\end{aligned}$$

$$N = A \left(2\sqrt{\mu} - \frac{k_B^2 T^2 \pi^2}{12\mu^{\frac{3}{2}}} \right) = 2A\sqrt{\mu} \left(1 - \frac{k_B^2 T^2 \pi^2}{24\mu^2} \right) \quad (63)$$

При $T = 0$:

$$n_F = \begin{cases} 1, & \varepsilon < E_F \\ 0, & \varepsilon > E_F \end{cases} \quad (64)$$

$$N = A \int_0^{E_F} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}} = 2A\sqrt{E_F} \rightarrow E_F = \frac{2\pi^2 \hbar^2 N^2}{mV^2} \quad (65)$$

$$\mu(T = 0) = E_F, \quad \sqrt{\mu} \left(1 - \frac{\pi^2}{24} \left(\frac{k_B T}{\mu} \right)^2 \right) = \sqrt{E_F} \quad (66)$$

Параметр $\frac{k_B T}{\mu}$ является малым, поэтому в нём можно заменить μ на E_F :

$$\sqrt{\mu} \left(1 - \frac{\pi^2}{24} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right) = \sqrt{E_F} \rightarrow \mu = \frac{E_F}{\left(1 - \frac{\pi^2}{24} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right)^2} \quad (67)$$

$$\boxed{\mu(T) = E_F \left(1 + \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right)} \quad (68)$$

Графики точной и приближённой зависимостей $\mu(T)$ на рис. 5. Опишем поведение химического потенциала 1D ферми-газа. При $T = 0$ химический потенциал $\mu(0) = E_f > 0$, $\mu'(0) = 0$ и $\mu''(0) > 0$. Т.е. $\mu(T)$ начинает возрастать. Затем $\mu''(T)$ меняет знак и химический потенциал достигает своего максимума ($\mu'(T)$ меняет знак). Далее происходит уменьшение химического потенциала, $\mu(T)$ меняет знак и $\lim_{T \rightarrow \infty} \mu(T) = -\infty$. График зависимости $\mu(T)$ представлен на рис. 6. То, что химический потенциал сначала будет возрастать, предсказывалось, поскольку плотность числа частиц – убывающая функция и для сохранения числа частиц $\mu(T)$ сначала должен двигаться вправо (рассуждение из лекции 6).

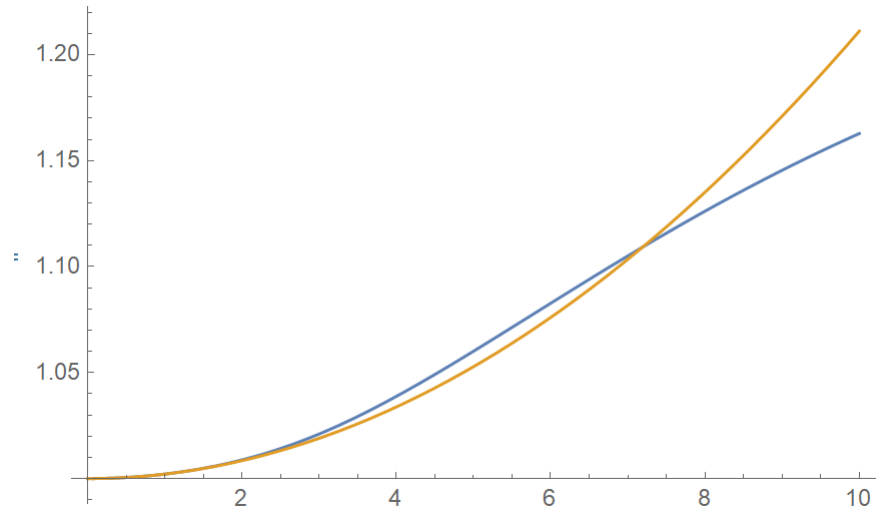


Рис. 5: Графики точной (синий) и приближённой (жёлтый) зависимостей $\frac{\mu}{E_F} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)$ 1D ферми-газа

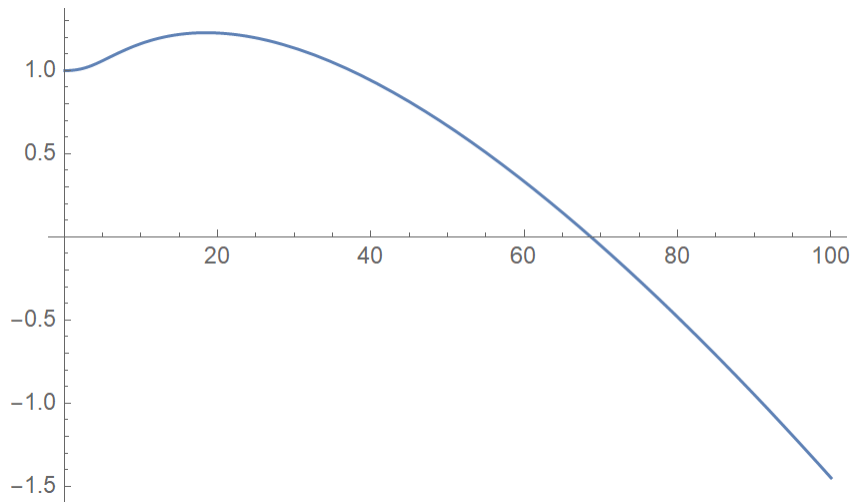


Рис. 6: График зависимости $\frac{\mu}{E_F} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)$ 1D ферми-газа

2 Часть II

Задача 2.1. В системе фермионов с заданным числом частиц (концентрацией) и данной температурой убираем все частицы с энергиями выше химического потенциала. После того, как в данной системе опять восстановится термодинамически равновесное состояние произойдет охлаждение системы. Написать систему уравнений, определяющую изменение температуры. Получить аналитические выражения при низких температурах (сильно вырожденный случай).

Решение.

Распределение Ферми-Дирака:

$$n_F(\varepsilon_p) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_p - \mu}{k_B T}} + 1} \quad (69)$$

Плотность числа состояний в 3D (выведена на лекции 4):

$$\nu(\varepsilon) = \frac{2\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{\varepsilon} \quad (70)$$

Введём обозначение: $A = \frac{2\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{(2\pi\hbar)^3}$.

Число частиц после того, как убрали все частицы с энергией выше μ :

$$N_1 = V \int_0^\mu \nu(\varepsilon) n_F(\varepsilon) d\varepsilon = A \int_0^\mu \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}} + 1} \quad (71)$$

Энергия частиц после того, как убрали все частицы с энергией выше μ :

$$E_1 = V \int_0^\mu \varepsilon \nu(\varepsilon) n_F(\varepsilon) d\varepsilon = A \int_0^\mu \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}} + 1} \quad (72)$$

Число частиц после того, как в системе установится термодинамическое равновесие:

$$N_2 = V \int_0^\infty \nu(\varepsilon) n_F(\varepsilon) d\varepsilon = A \int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon - \mu'}{k_B T'}} + 1} \quad (73)$$

Энергия частиц после того, как в системе установится термодинамическое равновесие:

$$E_2 = V \int_0^\infty \varepsilon \nu(\varepsilon) n_F(\varepsilon) d\varepsilon = A \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon - \mu'}{k_B T'}} + 1} \quad (74)$$

Законы сохранения числа частиц и энергии:

$$N_1 = N_2, \quad E_1 = E_2 \quad (75)$$

Получаем систему уравнений, определяющую изменение температуры:

$$\boxed{\begin{cases} \int_0^\mu \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}} + 1} = \int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon - \mu'}{k_B T'}} + 1}, \\ \int_0^\mu \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}} + 1} = \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon - \mu'}{k_B T'}} + 1}. \end{cases}} \quad (76)$$

Рассмотрим низкие температуры.

$$\int_0^\mu \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1} = \int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1} - \int_\mu^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1}, \quad \int_0^\mu \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1} = \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1} - \int_\mu^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1} \quad (77)$$

Интегралы в пределах от 0 до ∞ были посчитаны на лекции 6:

$$\int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1} = \frac{2\mu^{\frac{3}{2}}}{3} \left(1 + \frac{\pi^2 k_B^2 T^2}{8\mu^2} \right), \quad \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1} = \frac{2\mu^{\frac{5}{2}}}{5} \left(1 + \frac{5\pi^2 k_B^2 T^2}{8\mu^2} \right) \quad (78)$$

$$\begin{aligned} \int_\mu^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1} &= k_B T \int_0^\infty \frac{\sqrt{k_B T u + \mu} du}{e^u + 1} = k_B T \sqrt{\mu} \int_0^\infty \frac{\sqrt{1 + \frac{k_B T u}{\mu}} du}{e^u + 1} \approx k_B T \sqrt{\mu} \int_0^\infty \frac{\left(1 + \frac{k_B T u}{2\mu} \right) du}{e^u + 1} = \\ &= k_B T \sqrt{\mu} \left(\ln 2 + \frac{\pi^2 k_B T}{24\mu} \right) \end{aligned} \quad (79)$$

$$\begin{aligned} \int_\mu^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1} &= k_B T \int_0^\infty \frac{(k_B T u + \mu)^{\frac{3}{2}} du}{e^u + 1} = k_B T \mu^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty \frac{\left(1 + \frac{k_B T u}{\mu} \right)^{\frac{3}{2}} du}{e^u + 1} \approx k_B T \mu^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty \frac{\left(1 + \frac{3k_B T u}{2\mu} \right) du}{e^u + 1} = \\ &= k_B T \mu^{\frac{3}{2}} \left(\ln 2 + \frac{\pi^2 k_B T}{8\mu} \right) \end{aligned} \quad (80)$$

$$\begin{aligned} \int_0^\mu \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1} &= \frac{2\mu^{\frac{3}{2}}}{3} \left(1 + \frac{\pi^2 k_B^2 T^2}{8\mu^2} \right) - k_B T \sqrt{\mu} \left(\ln 2 + \frac{\pi^2 k_B T}{24\mu} \right) = \frac{2\mu^{\frac{3}{2}}}{3} \left(1 + \frac{\pi^2 k_B^2 T^2}{16\mu^2} \right) - \\ &- k_B T \sqrt{\mu} \ln 2 \end{aligned} \quad (81)$$

$$\begin{aligned} \int_0^\mu \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1} &= \frac{2\mu^{\frac{5}{2}}}{5} \left(1 + \frac{5\pi^2 k_B^2 T^2}{8\mu^2} \right) - k_B T \mu^{\frac{3}{2}} \left(\ln 2 + \frac{\pi^2 k_B T}{8\mu} \right) = \frac{2\mu^{\frac{5}{2}}}{5} \left(1 + \frac{5\pi^2 k_B^2 T^2}{16\mu^2} \right) - \\ &- k_B T \mu^{\frac{3}{2}} \ln 2 \end{aligned} \quad (82)$$

Пусть $\mu' = \mu + \Delta\mu$, $T' = T + \Delta T$.

$$\int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu'}{k_B T'}} + 1} = \frac{2\mu'^{\frac{3}{2}}}{3} \left(1 + \frac{\pi^2 k_B^2 T'^2}{8\mu'^2} \right) = \frac{2}{3} (\mu + \Delta\mu)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi^2 k_B^2 (T + \Delta T)^2}{12(\mu + \Delta\mu)^{\frac{1}{2}}} \quad (83)$$

$$\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu'}{k_B T'}} + 1} = \frac{2\mu'^{\frac{5}{2}}}{5} \left(1 + \frac{\pi^2 k_B^2 T'^2}{8\mu'^2} \right) + \mu'^{\frac{3}{2}} \left(\frac{\Delta\mu}{\mu} \left(1 - \frac{\pi^2 k_B^2 T^2}{24\mu^2} \right) + \frac{\Delta T}{T} \frac{\pi^2 T^2}{8\mu^2} \right) \quad (84)$$

$$\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu'}{k_B T'}} + 1} = \frac{2\mu'^{\frac{5}{2}}}{5} \left(1 + \frac{5\pi^2 k_B^2 T'^2}{8\mu'^2} \right) = \frac{2}{5} (\mu + \Delta\mu)^{\frac{5}{2}} + \frac{\pi^2 k_B^2 (T + \Delta T)^2 (\mu + \Delta\mu)^{\frac{1}{2}}}{4} \quad (85)$$

$$\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu'}{k_B T}} + 1} = \frac{2\mu^{\frac{5}{2}}}{5} \left(1 + \frac{5\pi^2 k_B^2 T^2}{8\mu^2}\right) + \mu^{\frac{5}{2}} \left(\frac{\Delta\mu}{\mu} \left(1 + \frac{\pi^2 k_B^2 T^2}{8\mu^2}\right) + \frac{\Delta T}{T} \frac{\pi^2 k_B^2 T^2}{2\mu^2}\right) \quad (86)$$

Подставим вычисленные интегралы в систему уравнений (76):

$$\begin{cases} \frac{2\mu^{\frac{3}{2}}}{3} \left(1 + \frac{\pi^2 k_B^2 T^2}{16\mu^2}\right) - k_B T \sqrt{\mu} \ln 2 = \frac{2\mu^{\frac{3}{2}}}{3} \left(1 + \frac{\pi^2 k_B^2 T^2}{8\mu^2}\right) + \mu^{\frac{3}{2}} \left(\frac{\Delta\mu}{\mu} \left(1 - \frac{\pi^2 k_B^2 T^2}{24\mu^2}\right) + \frac{\Delta T}{T} \frac{\pi^2 T^2}{8\mu^2}\right), \\ \frac{2\mu^{\frac{5}{2}}}{5} \left(1 + \frac{5\pi^2 k_B^2 T^2}{16\mu^2}\right) - k_B T \mu^{\frac{3}{2}} \ln 2 = \frac{2\mu^{\frac{5}{2}}}{5} \left(1 + \frac{5\pi^2 k_B^2 T^2}{8\mu^2}\right) + \mu^{\frac{5}{2}} \left(\frac{\Delta\mu}{\mu} \left(1 + \frac{\pi^2 k_B^2 T^2}{8\mu^2}\right) + \frac{\Delta T}{T} \frac{\pi^2 k_B^2 T^2}{2\mu^2}\right). \end{cases}$$

$$\begin{cases} -\frac{\pi^2 k_B^2 T^2}{24\sqrt{\mu}} - k_B T \sqrt{\mu} \ln 2 = \mu^{\frac{3}{2}} \left(\frac{\Delta\mu}{\mu} \left(1 - \frac{\pi^2 k_B^2 T^2}{24\mu^2}\right) + \frac{\Delta T}{T} \frac{\pi^2 T^2}{8\mu^2}\right), \\ -\frac{5\pi^2 k_B^2 T^2 \sqrt{\mu}}{8} - k_B T \mu^{\frac{3}{2}} \ln 2 = \mu^{\frac{5}{2}} \left(\frac{\Delta\mu}{\mu} \left(1 + \frac{\pi^2 k_B^2 T^2}{8\mu^2}\right) + \frac{\Delta T}{T} \frac{\pi^2 k_B^2 T^2}{2\mu^2}\right). \end{cases} \quad (87)$$

Решая систему уравнений, получим ответ:

$$\boxed{\Delta T = -\frac{T}{4} + \frac{\ln 2}{2\mu} T^2 \approx -\frac{T}{4}} \quad (88)$$

Задача 2.2. Из точной формулы для большого термодинамического потенциала Ω для невзаимодействующих ферми и бозе частиц получить первые квантовые поправки к классическому значению Ω и уравнению состояния $PV = \dots$ в пределе высоких температур, когда $e^{-\mu/T} \gg 1$.

Решение.

Связь большого термодинамического потенциала Ω с давлением и объёмом:

$$\Omega = -PV \quad (89)$$

Плотность числа состояний в 3D (выведена на лекции 4):

$$\nu(\varepsilon) = \frac{2\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{\varepsilon} \quad (90)$$

Введём обозначение $A = \frac{2\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{(2\pi\hbar)^3}$.

1. Большой термодинамический потенциал ферми частиц:

$$\begin{aligned} \Omega_F &= -k_B TV \int_0^\infty \nu(\varepsilon) \ln \left(1 + e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}}\right) d\varepsilon = -k_B TV A \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} \ln \left(1 + e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}}\right) d\varepsilon = \\ &= -\frac{2}{3} k_B TV A \varepsilon^{\frac{3}{2}} \ln \left(1 + e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}}\right) \Big|_0^\infty - \frac{2}{3} V A \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}}}{1 + e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}}} d\varepsilon \approx \\ &\approx -\frac{2}{3} V A \int_0^\infty \varepsilon^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} (1 - e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}}) d\varepsilon = AV \sqrt{\pi} (k_B T)^{\frac{5}{2}} e^{\frac{\mu}{k_B T}} \left(\frac{\sqrt{2} e^{\frac{\mu}{k_B T}}}{16} - \frac{1}{2}\right) \end{aligned} \quad (91)$$

Распределение Ферми-Дирака:

$$n_F(\varepsilon_p) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_p - \mu}{k_B T}} + 1} \quad (92)$$

Число частиц:

$$\begin{aligned}
N &= V \int_0^\infty \nu(\varepsilon) n_F(\varepsilon) d\varepsilon = AV \int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1} = AV \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} (1 - e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}}) d\varepsilon = \\
&= AV \sqrt{\pi} (k_B T)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{\mu}{k_B T}} \left(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{2} e^{\frac{\mu}{k_B T}}}{8} \right) \quad (93)
\end{aligned}$$

$$\frac{PV}{N} = -\frac{\Omega}{N} = k_B T \frac{1 - \frac{\sqrt{2} e^{\frac{\mu}{k_B T}}}{8}}{1 - \frac{\sqrt{2} e^{\frac{\mu}{k_B T}}}{4}} \quad (94)$$

$$PV = N k_B T \left(1 + \frac{\sqrt{2}}{8} e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right) \quad (95)$$

Выразим $e^{\frac{\mu}{k_B T}}$ из (93), учитывая, что это малая величина:

$$e^{\frac{\mu}{k_B T}} = \frac{2N}{AV \sqrt{\pi} (k_B T)^{\frac{3}{2}}} = \frac{N (2\pi \hbar)^3}{V (2\pi m k_B T)^{\frac{3}{2}}} = \frac{N \hbar^3}{V} \left(\frac{2\pi}{m k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (96)$$

$$\boxed{PV = N k_B T \left(1 + \frac{N \hbar^3}{2V} \left(\frac{\pi}{m k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \right)} \quad (97)$$

2. Большой термодинамический потенциал бозе частиц:

$$\begin{aligned}
\Omega_B &= k_B T V \int_0^\infty \nu(\varepsilon) \ln \left(1 - e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} \right) d\varepsilon = k_B T V A \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} \ln \left(1 - e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} \right) d\varepsilon = \\
&= \frac{2}{3} k_B T V A \varepsilon^{\frac{3}{2}} \ln \left(1 - e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} \right) \Big|_0^\infty - \frac{2}{3} V A \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}}}{1 - e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}}} d\varepsilon \approx \\
&\approx -\frac{2}{3} V A \int_0^\infty \varepsilon^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} (1 + e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}}) d\varepsilon = -AV \sqrt{\pi} (k_B T)^{\frac{5}{2}} e^{\frac{\mu}{k_B T}} \left(\frac{\sqrt{2} e^{\frac{\mu}{k_B T}}}{16} + \frac{1}{2} \right) \quad (98)
\end{aligned}$$

Распределение Бозе-Эйнштейна:

$$n_B(\varepsilon_p) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_p - \mu}{k_B T}} - 1} \quad (99)$$

Число частиц:

$$\begin{aligned}
N &= V \int_0^\infty \nu(\varepsilon) n_F(\varepsilon) d\varepsilon = AV \int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} - 1} = AV \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} (1 + e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}}) d\varepsilon = \\
&= AV \sqrt{\pi} (k_B T)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{\mu}{k_B T}} \left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{2} e^{\frac{\mu}{k_B T}}}{8} \right) \quad (100)
\end{aligned}$$

$$\frac{PV}{N} = -\frac{\Omega}{N} = k_B T \frac{1 + \frac{\sqrt{2}e^{\frac{\mu}{k_B T}}}{8}}{1 + \frac{\sqrt{2}e^{\frac{\mu}{k_B T}}}{4}} \quad (101)$$

$$PV = Nk_B T \left(1 - \frac{\sqrt{2}}{8} e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right) \quad (102)$$

Выразим $e^{\frac{\mu}{k_B T}}$ из (126), учитывая, что это малая величина:

$$e^{\frac{\mu}{k_B T}} = \frac{2N}{AV\sqrt{\pi}(k_B T)^{\frac{3}{2}}} = \frac{N(2\pi\hbar)^3}{V(2\pi mk_B T)^{\frac{3}{2}}} = \frac{N\hbar^3}{V} \left(\frac{2\pi}{mk_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (103)$$

$$PV = Nk_B T \left(1 - \frac{N\hbar^3}{2V} \left(\frac{\pi}{mk_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \right) \quad (104)$$

Задача 2.3. В полупроводнике есть локализованные состояния с энергией E_0 , лежащие ниже зоны проводимости ($E_0 < 0$, если энергии отсчитывать от дна зоны проводимости). Зона проводимости описывается как свободные электроны с квадратичным законом дисперсии. При $T = 0$ все электроны находятся на локализованных состояниях, концентрация которых N_0 (т.е. в системе фиксировано число электронов N_0). Написать выражения, определяющие изменение химического потенциала с температурой и определить зависимость числа частиц (концентрации) в зоне проводимости от температуры для случая двумерной и трехмерной систем.

Решение.

Распределение Ферми-Дирака:

$$n_F(\varepsilon_p) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_p - \mu}{k_B T}} + 1} \quad (105)$$

Рассмотрим случай $T = 0$ – все электроны находятся на уровне $\varepsilon = E_0 < 0$:

$$N_0 = G_0 n_F(-E_0) = G_0 \quad (106)$$

где G_0 – число состояний с энергией ε .

В случае $T \neq 0$ электроны могут располагаться в состояниях с положительной энергией:

$$N_0 = V \int_0^\infty \nu(\varepsilon) n_F(\varepsilon) d\varepsilon + G_0 n_F(-E_0) \quad (107)$$

$$N_0 = V \int_0^\infty \frac{\nu(\varepsilon)}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}} + 1} d\varepsilon + \frac{N_0}{e^{\frac{E_0 - \mu}{k_B T}} + 1} \quad (108)$$

Число частиц в зоне проводимости:

$$N_{\text{пр}} = \frac{N_0}{1 + e^{\frac{\mu - E_0}{k_B T}}} = V \int_0^\infty \frac{\nu(\varepsilon)}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}} + 1} d\varepsilon \quad (109)$$

1. Рассмотрим двумерную систему. Плотность числа состояний для 2D:

$$\nu(\varepsilon) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \quad (110)$$

$$\frac{N_0}{1 + e^{\frac{\mu-E_0}{k_B T}}} = \frac{mV}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty \frac{d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1} = -\frac{mVk_B T}{2\pi\hbar^2} \ln \left(1 - e^{\frac{\mu}{k_B T}}\right) \quad (111)$$

Получилось уравнение на μ :

$$\boxed{\frac{N_0}{1 + e^{\frac{\mu-E_0}{k_B T}}} = -\frac{mVk_B T}{2\pi\hbar^2} \ln \left(1 - e^{\frac{\mu}{k_B T}}\right)} \quad (112)$$

Число частиц в зоне проводимости:

$$N_{\text{пр}} = \frac{N_0}{1 + e^{\frac{\mu-E_0}{k_B T}}} \quad (113)$$

Провёл численное решение двух последних уравнений (см. графики 9 и 10).

Найдём приближённое решение уравнения (112) при низких температурах (при этом $|\frac{\mu}{k_B T}| \gg 1$):

$$\frac{N_0}{e^{\frac{\mu-E_0}{k_B T}}} = \frac{mVk_B T}{2\pi\hbar^2} e^{\frac{\mu}{k_B T}} \quad (114)$$

$$\boxed{\mu(T) = \frac{k_B T}{2} \ln \frac{2\pi\hbar^2}{mVk_B T} - \frac{k_B T}{2} \ln T + \frac{E_0}{2}} \quad (115)$$

Число частиц в зоне проводимости:

$$\boxed{N_{\text{пр}} = N_0 e^{\frac{E_0}{2k_B T}} T \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B V}}} \quad (116)$$

2. Рассмотрим трёхмерную систему. Плотность числа состояний для 3D:

$$\nu(\varepsilon) = \frac{2\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{\varepsilon} \quad (117)$$

$$\frac{N_0}{1 + e^{\frac{E_0+\mu}{k_B T}}} = \frac{2\pi(2m)^{\frac{3}{2}}V}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1} = -\frac{(mk_B T)^{\frac{3}{2}}V}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}\hbar^3} \text{Li}_{\frac{3}{2}} \left(e^{\frac{\mu}{k_B T}}\right) \quad (118)$$

Получилось уравнение на μ :

$$\boxed{\frac{N_0}{1 + e^{\frac{E_0+\mu}{k_B T}}} = -\frac{(mk_B T)^{\frac{3}{2}}V}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}\hbar^3} \text{Li}_{\frac{3}{2}} \left(e^{\frac{\mu}{k_B T}}\right)} \quad (119)$$

Число частиц в зоне проводимости:

$$N_{\text{пр}} = \frac{N_0}{1 + e^{\frac{E_0+\mu}{k_B T}}} \quad (120)$$

Провёл численное решение двух последних уравнений (см. графики ?? и ??).

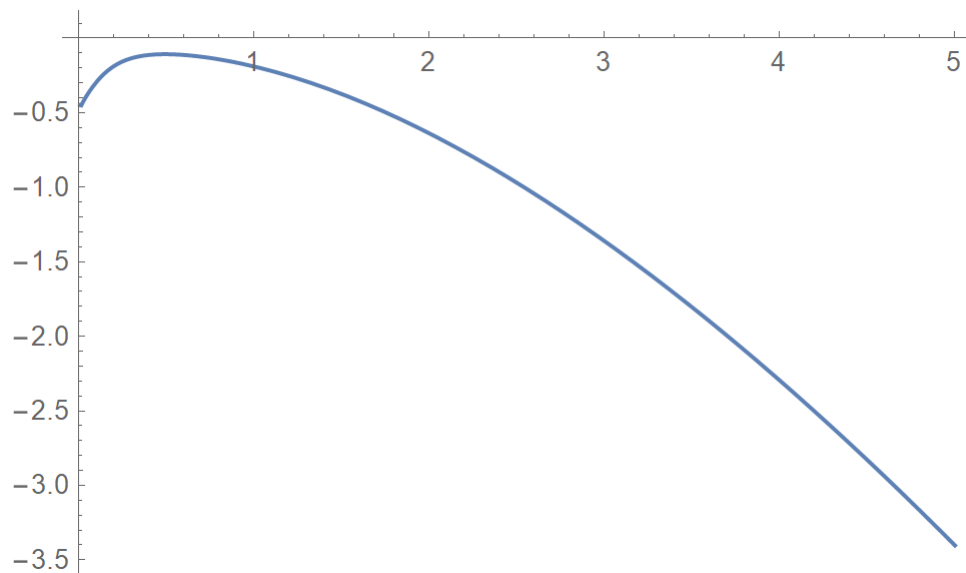


Рис. 7: Зависимость $\mu(T)$ полупроводника в приведённых координатах в двумерном случае

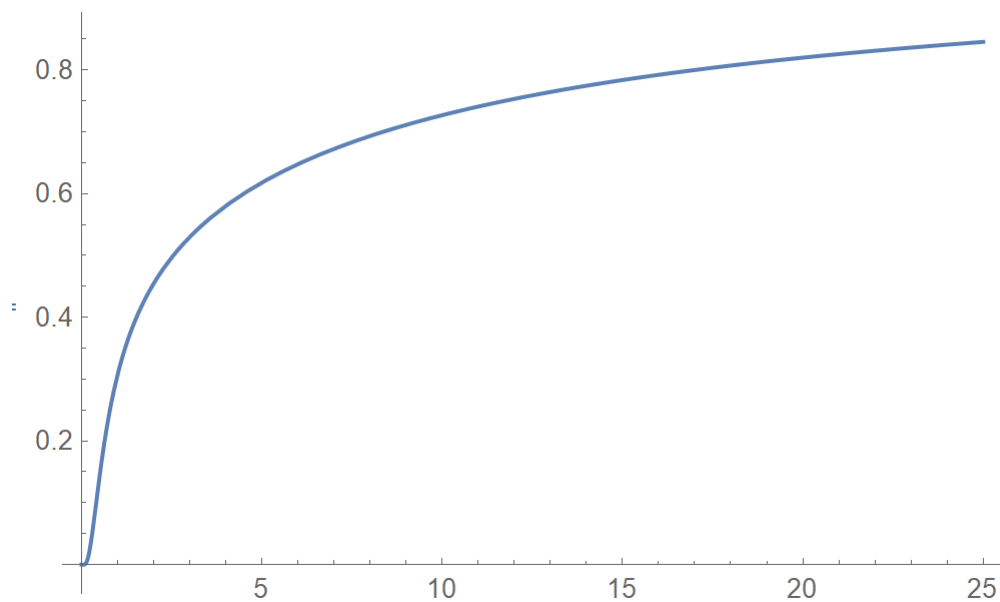


Рис. 8: Зависимость $N_{\text{пр}}(T)$ полупроводника в приведённых координатах в двумерном случае

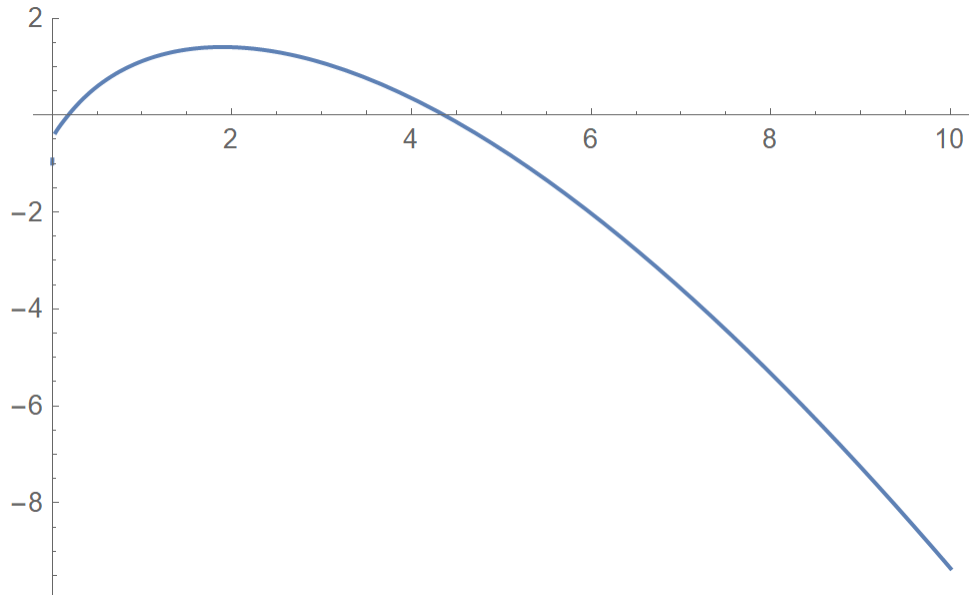


Рис. 9: Зависимость $\mu(T)$ полупроводника в приведённых координатах в трёхмерном случае

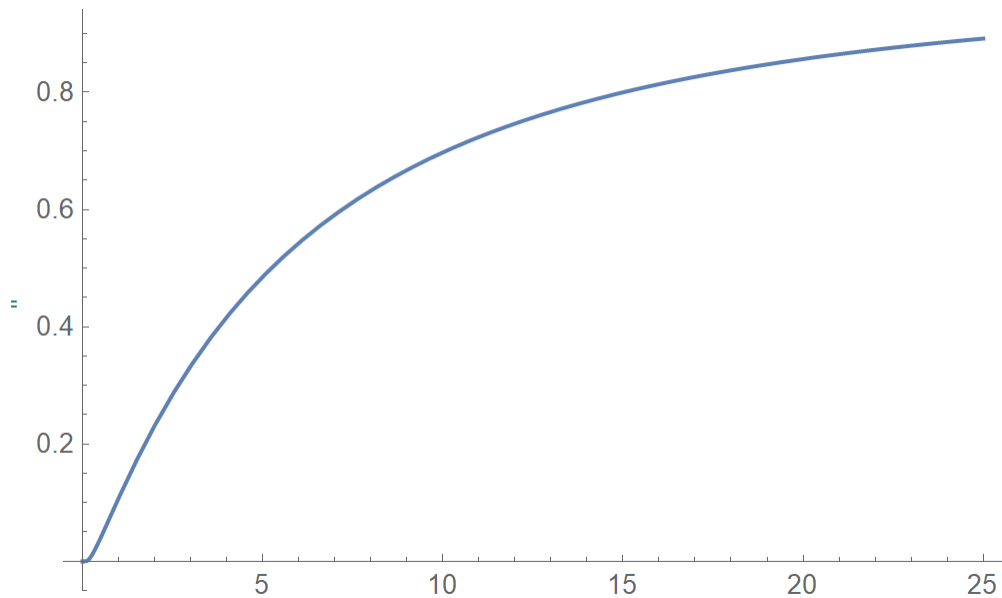


Рис. 10: Зависимость $N_{\text{пр}}(T)$ полупроводника в приведённых координатах в трёхмерном случае

Задача 2.4. Найти поляризуемость газа свободных электрических диполей с заданной концентрацией. Вычислить статсумму и свободную энергию в заданном электрическом поле \vec{E} (энергия взаимодействия каждого диполя с полем равна $-\vec{E} \cdot \vec{p}$), затем найти среднюю поляризацию в системе как $P = -\frac{\partial F(E)}{\partial E}$. Определить величину среднеквадратичного отклонения (флуктуации) поляризации от её среднего значения.

Решение.

Проекция дипольного момента на направление поля:

$$p_{||} = p \cos \theta \quad (121)$$

Энергия взаимодействия поля с диполем:

$$U(\theta) = -\vec{E} \cdot \vec{p} = -Ep_{||} = -Ep \cos \theta \quad (122)$$

Доля диполей, расположенных в телесном угле $d\Omega$:

$$d\mathcal{N} = e^{-\frac{U(\theta)}{k_B T}} d\Omega = e^{\frac{Ep \cos \theta}{k_B T}} \sin \theta d\theta d\varphi \quad (123)$$

Статистическая сумма:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \int d\mathcal{N} = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi e^{\frac{Ep_{||}}{k_B T}} \sin \theta d\theta d\varphi = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi e^{\frac{Ep \cos \theta}{k_B T}} \sin \theta d\theta d\varphi = \\ &= \frac{2\pi k_B T}{Ep} \left(e^{\frac{Ep}{k_B T}} - e^{-\frac{Ep}{k_B T}} \right) = \frac{4\pi k_B T}{pE} \operatorname{sh} \left(\frac{pE}{k_B T} \right) \end{aligned} \quad (124)$$

Число диполей, расположенных в телесном угле $d\Omega$:

$$dN = N \frac{d\mathcal{N}}{\mathcal{Z}} \quad (125)$$

где N – общее число диполей в газе.

Свободная энергия:

$$F = -Nk_B T \ln \mathcal{Z} = -Nk_B T \ln \left(\frac{4\pi k_B T}{pE} \operatorname{sh} \left(\frac{pE}{k_B T} \right) \right) \quad (126)$$

Поляризация среды:

$$\vec{P} = \frac{\sum_i \vec{p}_i}{V} \rightarrow \langle \vec{P} \rangle = \frac{\langle \sum_i \vec{p}_i \rangle}{V} = \frac{\sum_i \langle \vec{p}_i \rangle}{V} = \frac{N}{V} \langle \vec{p} \rangle \quad (127)$$

Средний дипольный момент:

$$\langle \vec{p} \rangle = \frac{\int \vec{p} dN}{N} \rightarrow \vec{P} = \frac{\int \vec{p} dN}{V} \quad (128)$$

Проекция средней поляризации среды на направление \vec{E} :

$$\langle P_{||} \rangle = \frac{\int p_{||} dN}{V} = \frac{N \int_0^{2\pi} \int_0^\pi p_{||} e^{\frac{Ep_{||}}{k_B T}} \sin \theta d\theta d\varphi}{\mathcal{Z} V} = \frac{Nk_B T}{\mathcal{Z} V} \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial E} = \frac{Nk_B T}{V} \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial E} \quad (129)$$

Сравним выражения (126) и (138):

$$\langle P_{||} \rangle = -\frac{1}{V} \frac{\partial F}{\partial E} = \frac{Nk_B T}{V} \left(\frac{p \operatorname{cth} \left(\frac{Ep}{k_B T} \right)}{k_B T} - \frac{1}{E} \right) = np \left(\operatorname{cth} \left(\frac{Ep}{k_B T} \right) - \frac{k_B T}{Ep} \right) \quad (130)$$

где n – концентрация диполей в газе.

$$\boxed{\langle P_{||} \rangle = npL \left(\frac{pE}{k_B T} \right)} \quad (131)$$

где $L(x) = \operatorname{cth} x - \frac{1}{x}$ – функция Ланжевена (её график с асимптотиками см. на рис. 11).

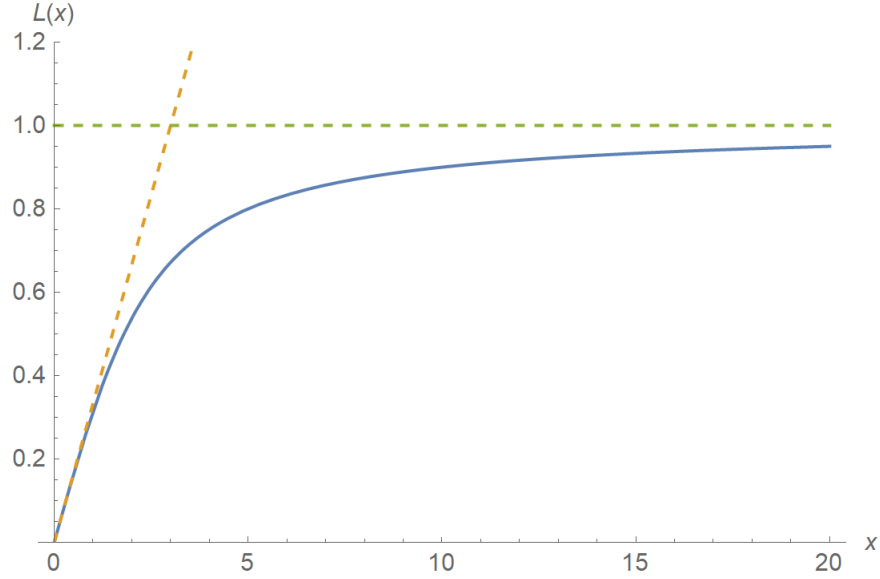


Рис. 11: Функция Ланжевена $L(x)$ (синий график), $\frac{x}{3}$ (жёлтый), 1 (зелёный)

1. Рассмотрим случай малого поля $E \ll \frac{k_B T}{p}$.

$$L \left(\frac{pE}{k_B T} \right) = \frac{pE}{3k_B T} + \mathcal{O} \left(\frac{pE}{k_B T} \right)^3 \quad (132)$$

$$\langle P_{||} \rangle = \frac{np^2}{3k_B T} E \quad (133)$$

Связь поляризации среды и поля \vec{E} :

$$\langle P_{||} \rangle = \chi E \quad (134)$$

где χ – поляризуемость газа. Таким образом,

$$\boxed{\chi = \frac{np^2}{3k_B T}} \quad (135)$$

2. Рассмотрим случай большого поля $E \gg \frac{k_B T}{p}$.

$$L\left(\frac{pE}{k_B T}\right) \approx 1 \quad (136)$$

$$\langle P_{\parallel} \rangle = np \quad (137)$$

С увеличением напряжённости поля дипольные моменты всё более интенсивно ориентируются в направлении напряжённости. Достигается максимально возможная поляризация и дальнейшее увеличение напряжённости поля не приводит к её увеличению.

Проекция средней поляризации среды на направление, перпендикулярное \vec{E} :

$$\langle P_{\perp} \rangle = \frac{\int p_{\perp} dN}{V} = \frac{N \left(\int_0^{\pi} \int_0^{\pi} p_{\perp} e^{\frac{Ep_{\parallel}}{k_B T}} \sin \theta d\theta d\varphi - \int_{\pi}^{2\pi} \int_0^{\pi} p_{\perp} e^{\frac{Ep_{\parallel}}{k_B T}} \sin \theta d\theta d\varphi \right)}{\mathcal{Z}V} = 0 \quad (138)$$

Средняя поляризация:

$$\langle \vec{P} \rangle = \begin{pmatrix} np \left(\text{cth} \left(\frac{Ep}{k_B T} \right) - \frac{k_B T}{Ep} \right) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (139)$$

Среднеквадратичное отклонение поляризации:

$$\sigma_P^2 = \langle \vec{P}^2 \rangle - \langle \vec{P} \rangle^2 \quad (140)$$

Средний квадрат поляризации:

$$\langle \vec{P}^2 \rangle = \frac{\langle (\sum_i \vec{p}_i)^2 \rangle}{V^2} = \frac{\langle \sum_i p_i^2 + \sum_{i \neq j} \vec{p}_i \cdot \vec{p}_j \rangle}{V^2} = \frac{N \langle p^2 \rangle + N(N-1) \langle \vec{p} \rangle^2}{V^2} \quad (141)$$

Дисперсия:

$$\sigma_P^2 = \langle \vec{P}^2 \rangle - \langle \vec{P} \rangle^2 = \frac{N \langle p^2 \rangle + N(N-1) \langle \vec{p} \rangle^2}{V^2} - \frac{N^2}{V^2} \langle \vec{p} \rangle^2 = \frac{N}{V^2} (\langle p^2 \rangle - \langle \vec{p} \rangle^2) \quad (142)$$

$$\sigma_P^2 = \frac{N}{V^2} p^2 - \frac{N}{V^2} p^2 \left(\text{cth} \left(\frac{Ep}{k_B T} \right) - \frac{k_B T}{Ep} \right)^2 \quad (143)$$

$$\sigma_P^2 = \frac{Np^2}{V^2} \left(1 - \left(\text{cth} \left(\frac{Ep}{k_B T} \right) - \frac{k_B T}{Ep} \right)^2 \right) \quad (144)$$

Дисперсия проекции \vec{P} на направление \vec{E} :

$$\sigma_{P_{\parallel}}^2 = \langle P_{\parallel}^2 \rangle - \langle P_{\parallel} \rangle^2 = \frac{N \langle p_{\parallel}^2 \rangle + N(N-1) \langle p_{\parallel} \rangle^2}{V^2} - \frac{N^2}{V^2} \langle p_{\parallel} \rangle^2 = \frac{N}{V^2} (\langle p_{\parallel}^2 \rangle - \langle p_{\parallel} \rangle^2) \quad (145)$$

$$\langle p_{\parallel}^2 \rangle = \frac{\int p_{\parallel}^2 dN}{N} = \frac{N \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} p_{\parallel}^2 e^{\frac{Ep_{\parallel}}{k_B T}} \sin \theta d\theta d\varphi}{\mathcal{Z}N} = \frac{k_B^2 T^2}{\mathcal{Z}} \frac{\partial^2 \mathcal{Z}}{\partial E^2} \quad (146)$$

$$\sigma_{P_{||}}^2 = \frac{N}{V^2} \left(\frac{k_B^2 T^2}{\mathcal{Z}} \frac{\partial^2 \mathcal{Z}}{\partial E^2} - \left(\frac{k_B T}{\mathcal{Z}} \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial E} \right)^2 \right) = \frac{N k_B^2 T^2}{V^2} \left(\frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\partial^2 \mathcal{Z}}{\partial E^2} - \frac{1}{\mathcal{Z}^2} \left(\frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial E} \right)^2 \right) \quad (147)$$

$$\sigma_{P_{||}}^2 = \frac{N k_B^2 T^2}{V^2 E^2} \left(1 - \frac{p^2 E^2}{k_B^2 T^2 \sinh^2 \left(\frac{pE}{k_B T} \right)} \right) \quad (148)$$

Дисперсия проекции \vec{P} на направление, перпендикулярное к \vec{E} :

$$\sigma_{P_{\perp}}^2 = \langle P_{\perp}^2 \rangle - \langle P_{\perp} \rangle^2 = \frac{N \langle p_{\perp}^2 \rangle + N(N-1) \langle p_{\perp} \rangle^2}{V^2} - \frac{N^2}{V^2} \langle p_{\perp} \rangle^2 = \frac{N}{V^2} (\langle p_{\perp}^2 \rangle - \langle p_{\perp} \rangle^2) \quad (149)$$

$$\langle p_{\perp}^2 \rangle = p^2 - \langle p_{||}^2 \rangle = p^2 - \frac{k_B^2 T^2}{\mathcal{Z}} \frac{\partial^2 \mathcal{Z}}{\partial E^2} \quad (150)$$

$$\sigma_{P_{\perp}}^2 = -\frac{N k_B^2 T^2}{V^2 E^2} \left(1 - \frac{pE \coth \left(\frac{pE}{k_B T} \right)}{k_B T} \right) \quad (151)$$

1. Рассмотрим случай малого поля $E \ll \frac{k_B T}{p}$.

$$\sigma_P^2 = \frac{N p^2}{V^2}, \quad \sigma_{P_{||}}^2 = \frac{N p^2}{3V^2}, \quad \sigma_{P_{\perp}}^2 = \frac{2N p^2}{3V^2} \quad (152)$$

2. Рассмотрим случай большого поля $E \gg \frac{k_B T}{p}$.

$$\sigma_P^2 = \sigma_{P_{||}}^2 = \sigma_{P_{\perp}}^2 = 0 \quad (153)$$