- 量子理想气体

微观态：$\{n_k\}$.

对无相互作用系统：

$$N=\sum_k n_k,\quad E=\sum_k n_k\varepsilon_k .$$

$$Z(T,V,N)=\sum_{E(\{n_k\})} e^{-\beta E(\{n_k\})}$$

$$=\sum_{\{n_k\}}{}' e^{-\beta\sum_k n_k\varepsilon_k}$$

$\hookrightarrow$ 限制：$\sum_k n_k=N$.

为了拿掉限制，取巨正则系综：

$$Q(T,V,\mu)=\sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N}\cdot Z(T,V,N)$$

$$=\sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu\sum_k n_k}\sum_{\{n_k\}}{}' e^{-\beta\sum_k\varepsilon_k n_k}$$

$$=\sum_{\{n_k\}} e^{-\beta\sum_k(\varepsilon_k-\mu)n_k}$$

$$=\sum_{\{n_k\}}\prod_k e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)n_k}$$

$$=\prod_k\sum_{n_k} e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)n_k}.$$ [积分号之后恰好是 Q_k 的定义!]

$$\sum_{n_k}\begin{cases}\text{玻色子：}\sum_{n_k=0}^{\infty}, & Q=\prod_k\frac{1}{1-e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}}.\\ \text{费米子：}\sum_{n_k=0}^{1}, & Q=\prod_k\left[1+e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}\right].\end{cases}$$

$$\ln Q=\begin{cases}-\sum_k\ln(1-e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}), & \text{玻色子}\\ \sum_k\ln(1+e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}), & \text{费米子}\end{cases},$$ $\ln Q=\sum_k\ln Q_k$. 无相互作用体系的特点.

$$\langle N\rangle=\frac{\partial\ln Q}{\partial(\beta\mu)}=\begin{cases}\sum_k\frac{e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}}{1-e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}}=\sum_k\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)}-1}=:\sum_k\langle n_k\rangle.\\ \sum_k\frac{e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}}{1+e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}}=\sum_k\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)}+1}=:\sum_k\langle n_k\rangle.\end{cases}$$

每个态的平均占据数：

$$\langle n_k\rangle=\begin{cases}\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)}-1}, & \text{B-E 分布}\\ \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)}+1}, & \text{F-D 分布}\end{cases}$$ $\Leftrightarrow$ 经典：M-B 分布. $\langle n_k\rangle=e^{-\beta(\varepsilon_k-\mu)}$.

若有

$e^{-\beta\mu}>>1$ $(z=e^{\beta\mu}<<1)$ 非简并极限 （条件2：$k_BT>>\Delta\varepsilon$. 忘记能级的离散性！）

则三种分布趋于相同！

物理上：$\langle n_k\rangle<<1$. 看不出"是否相容"，这时玻色子、费米子的区别不重要了.

高温极限下：

$e^{\beta\mu}=n\lambda_T^3\to 0$. $\beta\mu\xrightarrow{T\to\infty}-\infty$. μ 与 T 有关！ [这个在11.29的笔记中有详细说]

$$\begin{cases}<<1: & \text{量子效应弱}\\ \sim 1: & \text{显著.}\end{cases}$$

- 理想玻色气体

$$N=\sum_k n_k=\sum_k\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k-\mu)}-1}=\sum_k\frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon_k}-1}$$

$$E=\sum_k\varepsilon_k n_k=\sum_k\frac{\varepsilon_k}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon_k}-1}$$

$$\frac{PV}{k_BT}=\ln Q=-\sum_k\ln(1-ze^{-\beta\varepsilon_k})$$

非相对论性自由粒子：$\varepsilon_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$. （无散量子）

波函数

$$\phi_k(x)=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$$

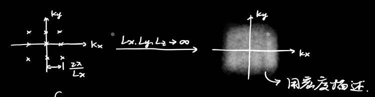
周期性边界条件

$$\phi_k(x_\alpha+L_\alpha)=\phi_k(x_\alpha),\quad \alpha=x,y,z.$$

来源：近无穷大体系中的平移不变性. 好处：波函数是k的本征态，k是"好"量子数.
且在热力学极限下，体系(bulk)的性质与边界存在是无关的. 边界条件可任取.

$$e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}+\vec{L})}=e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}},\quad\Rightarrow\quad\vec{k}\cdot\vec{L}=2\pi n.$$

$\vec{k} = \left(\frac{2\pi}{L_x}n_x, \frac{2\pi}{L_y}n_y, \frac{2\pi}{L_z}n_z\right)$. $n_\alpha = 0, 1, 2, \cdots$



$$\sum_k \longrightarrow \int d^3k \cdot \text{(状态密度)}$$

$\rho_k = \frac{1}{v_k}$, v_k：每个态占据的体积.

$$v_k = \frac{(2\pi)^3}{V}. \qquad \sum_k \longrightarrow \frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3k. \qquad \left[\alpha\text{维}: \frac{L^\alpha}{(2\pi)^\alpha}\int d^\alpha k\right]$$

[这也可用半经典得到：$\int \frac{d^3p\, d^3q}{h^3} = \frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3k$]

现在计算期望值：

$$N = \frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3k \cdot \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\frac{\hbar^2k^2}{2m}}-1}$$

$$= \frac{V}{2\pi^2}\int_0^\infty dk\, \frac{k^2}{z^{-1}e^{\beta\frac{\hbar^2k^2}{2m}}-1}$$

，不会算，但可以把物理相关量拿出来！

定义无量纲数

$$x = \beta\frac{\hbar^2k^2}{2m}.$$

$$k\,dk = \frac{m\,dx}{\beta\hbar^2}, \quad dk = \sqrt{\frac{m}{2\beta\hbar^2}}\cdot\frac{dx}{\sqrt{x}} = \frac{\sqrt{\pi}}{\lambda}\cdot\frac{dx}{\sqrt{x}}.$$

$$k^2 = \frac{2m}{\beta\hbar^2}x = \frac{4\pi}{\lambda^2}x.$$

代入，得

$$N = \frac{V}{2\pi^2}\cdot\int\frac{\sqrt{\pi}}{\lambda}\frac{dx}{\sqrt{x}}\cdot\frac{\frac{4\pi}{\lambda^2}x}{z^{-1}e^x-1}$$

$$= \frac{2V}{\sqrt{\pi}}\cdot\frac{1}{\lambda^3}\int_0^\infty dx\,\frac{\sqrt{x}}{z^{-1}e^x-1}.$$

定义

$$g_m(z) = \frac{1}{\Gamma(m)}\int_0^\infty dx\,\frac{x^{m-1}}{z^{-1}e^x-1}.$$

Polylogarithm $\mathrm{Li}_m(z)$.

得

$$N = \frac{2V}{\sqrt{\pi}}\cdot\frac{1}{\lambda^3}\cdot\Gamma\left(\tfrac{3}{2}\right)\cdot g_{3/2}(z)$$

$$= \frac{V}{\lambda^3}g_{3/2}(z).$$

$$E = \frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3k\cdot\frac{\frac{\hbar^2k^2}{2m}}{z^{-1}e^{\beta\frac{\hbar^2k^2}{2m}}-1}$$

相当于乘了 $\frac{x}{\beta}$.

$$= \frac{2V}{\sqrt{\pi}}\cdot\frac{k_BT}{\lambda^3}\int_0^\infty dx\,\frac{x^{3/2}}{z^{-1}e^x-1}.$$

$$= \frac{2V}{\sqrt{\pi}}\cdot\frac{k_BT}{\lambda^3}\cdot\Gamma\left(\tfrac{5}{2}\right)\cdot g_{5/2}(z)$$

$$= \frac{V}{\lambda^3}\cdot\frac{3}{2}k_BT\cdot g_{5/2}(z).$$

$$\ln\mathcal{Q} = -\frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3k\,\ln\left(1-ze^{-\beta\frac{\hbar^2k^2}{2m}}\right)$$

$$= -\frac{2V}{\sqrt{\pi}}\cdot\frac{1}{\lambda^3}\cdot\int_0^\infty dx\cdot\sqrt{x}\,\ln(1-ze^{-x})$$

分部积分：$\frac{2}{3}x^{3/2}\ln(1-ze^{-x})\Big|_0^\infty = 0$

$$= \frac{2V}{\sqrt{\pi}}\cdot\frac{1}{\lambda^3}\cdot\frac{2}{3}\int_0^\infty dx\cdot x^{3/2}\frac{ze^{-x}}{1-ze^{-x}}$$

$$= \frac{2V}{\sqrt{\pi}}\cdot\frac{1}{\lambda^3}\cdot\frac{2}{3}\cdot\Gamma\left(\tfrac{5}{2}\right)g_{5/2}(z)$$

$$= \frac{V}{\lambda^3}g_{5/2}(z).$$

$$\ln\mathcal{Q} = \frac{pV}{k_BT} \Rightarrow E = \frac{3}{2}pV.$$