

## Лекція №5

**Теорія слабо неідеальних квантових газів.**

**Розподіли Бозе-Ейнштейна та Фермі-Дірака.**



**Вікіпедія** **Шатъендранат Бозе** (*Satyendra Nath Bose*; 1 січня 1892 — 4 лютого 1974) — індійський фізик, один з творців квантової статистики систем частинок із цілим спіном, професор університету в Калькутті. Розглядаючи випромінювання як ідеальний газ фотонів, вперше аналітично вивів закон випромінювання Планка, висунувши гіпотезу, згідно з якою перестановка фотонів однакової енергії та поляризації у фазовому просторі системи не змінює стану системи.

## Історія відкриття

Відкриття принципу нерозрізнюваності частинок почалося з помилки, яку Бозе зробив, читаючи лекцію студентам. Він помилково сказав, що для системи двох частинок, кожна з яких може перебувати в двох можливих станах, існує три можливі комбінації, а саме:

обидві частинки в першому стані (умовно назвемо його нижнім,  $\downarrow\downarrow$ );

обидві частинки у другому (верхньому) стані ( $\uparrow\uparrow$ );

одна частинка у верхньому стані, а друга — у нижньому  $\uparrow\downarrow$

Будь-який математик одразу ж помітив би помилку, бо останній стан формально складається з двох:

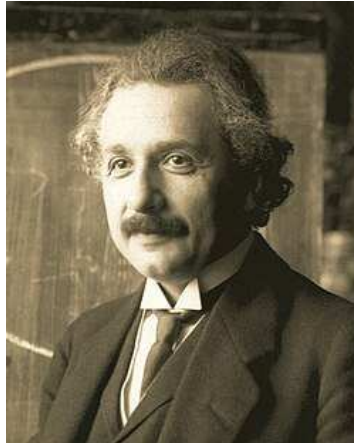
- перша частинка в нижньому стані, друга — у верхньому ( $\downarrow\uparrow$ )
- навпаки: перша частинка у верхньому стані, друга — у нижньому ( $\uparrow\downarrow$ ).

Однак попри цю помилку, Бозе отримав правильний результат розрахунків. Потім він помітив помилку й замислився над питанням: чому результат вийшов правильним? Врешті-решт він дійшов висновку, що частинки неможливо розрізнити, і що насправді існують три комбінації, які графічно позначають формулами

- ,
- ,
- 

Усі ці комбінації характеризуються симетрією щодо перестановки частинок.

Оскільки його статтю не приймали в наукових журналах, Бозе написав Ейнштейну, який зумів оцінити ідею, і вони разом доопрацювали теорію.



**Вікіпедія.** Альбeрт Ейнштeйн (також *А́льберт А́йнштайн*<sup>[4][5][6]</sup>, нім. *Albert Einstein* ['albɐt 'aɪnʃtaɪn], англ. *Albert Einstein* ['ælbət 'aɪnstain]<sup>[7]</sup>; 14 березня 1879, Ульм, королівство Вюртемберг, Німецька імперія — 18 квітня 1955, Принстон, штат Нью-Джерсі, США) — американський, німецький та швейцарський фізик-теоретик єврейського походження, лауреат Нобелівської премії з фізики 1921 року. Один із найвизначніших фізиків та науковців XX століття. Людина XX століття згідно з версією журналу Тайм. Відомий завдяки Загальна теорія відносності, Спеціальна теорія відносності, Броунівський рух, Фотоелектричний ефект, Ейнштейна - Подольського - Розена парадокс, Еквівалентність маси і енергії, Статистика Бозе — Ейнштейна, Конденсація Бозе — Ейнштейна.

## Суть парадоксу

У парадоксі Ейнштена — Подольського — Розена розглядається зв'язана система двох частинок та доводиться, що виконання вимірювання над однією з просторово рознесених частинок призводить до миттєвого впливу на стан іншої.

В оригінальній роботі Ейнштена, Подольського та Розена розглядаються просторово рознесенні системи *I* та *II*, які до початку спостереження були у взаємодії протягом певного часу. Знаючи стани обох систем до початку взаємодії, за допомогою рівняння Шредінгера можна визначити стан (тобто знайти хвильову функцію) об'єднаної системи *I+II* у будь-який наступний момент часу. Стани ж окремих систем *I* та *II* може бути визначено вимірюванням над однією з систем шляхом, так званого, процесу редукції хвильової функції.

## Розв'язання парадоксу

Наразі домінує думка про цілісність квантової механіки як фізичної теорії, а причиною парадоксу є неправомірність прямого використання класичних уявлень для опису квантових об'єктів.

Автори парадоксу вживають поняття «стан об'єкта» в класичному значенні, тобто як чогось повністю об'єктивного та незалежного від будь-яких даних про нього. Але в квантовій механіці під поняттям стану слід розуміти «знання про стан», яке отримують у результаті здійснення вимірювань над об'єктом. Саме на такій зміні в тлумаченні фізичної реальності наполягав Нільс Бор у його відповіді на статтю Ейнштейна, Подольського та Розена. У класичній механіці вимірюванням над системою можна визначити повний набір всіх механічних величин, що її характеризують. Тому можна вести мову про стан об'єкта не зазначаючи, шляхом якого саме вимірювання було отримано відповідні значення. Інакше відбувається процес вимірювання в квантовій механіці. Згідно з співвідношеннями Гайзенберга можна зробити висновок, що деякі вимірювання можуть «заважати» одне одному, наприклад, вимірювання координати та швидкості. Відповідно, для побудови опису стану об'єкта, необхідно буде здійснити кілька вимірювань, кожному результату яких зіставляється відповідна хвильова функція.

Тлумачення порушення принципу локальності залежить від інтерпретації квантової механіки, яка застосовується для аналізу. Так, у Копенгагенській інтерпретації процес редукції хвильової функції розглядається як математичний опис, а не як фізична реальність. Редукція не є передачею інформації, бо під час редукції не відбувається пересилання фізичних об'єктів зі швидкостями більшими за швидкість світла.

Як нами було зазначено в попередній лекції, нерівноважні стани систем багатьох частинок описуються рівнянням Ліувілля

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [\hat{H}, \rho]. \quad (1)$$

Знаючи гамільтоніан системи, і вміючи розв'язувати це рівняння, ми зможемо в принциповому відношенні описати поведінку системи в часі.

Але це рівняння треба забезпечити «початковою умовою». У цій іпостасі зазвичай використовують так зване ергодичне співвідношення. Воно відображає простий та ясний факт, що будь-яка ізольована система, будучи надана сама собі, в результаті еволюції прийде до стану статистичної рівноваги

$$\rho(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} w, \quad (2)$$

Статистичне рівновагу описується розподілом Гіббса  $w$ :

$$w = \exp \left\{ \Omega - \frac{1}{T} (\hat{H} - \mathbf{u} \hat{P} - \mu \hat{N}) \right\}, \quad (3)$$

де  $\Omega$  - великий термодинамічний потенціал, який визначається з умови

$$Spw = 1, \quad (4)$$

а величини  $T$  (температура в енергетичних одиницях),  $\mathbf{u}$  (середня швидкість системи як цілого) і  $\mu$  (хімічний потенціал) повинні знаходитись із рівнянь:

$$Spw\hat{H} = W, Spw\hat{\mathbf{P}} = \mathbf{P}, Spw\hat{N} = N, \quad (5)$$

де  $W$  - повна енергія системи,  $\mathbf{P}$  - середній імпульс системи як цілого і  $N$  - повне число частинок в системі. Оператори відповідних фізичних величин також уведено нами в попередній лекції. Рівняння (3) - (5) повністю визначають термодинаміку системи.

Але розв'язок цих рівнянь для конкретних систем часто пов'язане з непереборними математичними труднощами. Уникнути їх вдасться тільки в разі ідеальних газів. Рівняння (5) дозволяє знайти термодинамічний потенціал  $\Omega$  для ідеальних газів в явному вигляді. Справді, з формули (4) маємо:

$$\Omega = -\ln Sp \exp\{\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})\}, \quad (6)$$

де  $\beta = 1/T$  - обернена температура в енергетичних одиницях. У числі операторів, що характеризують рівноважний стан, ми не написали операторів імпульсу  $\hat{\mathbf{P}}$  та моменту  $\hat{\mathbf{M}}$ . Це можна робити в тому випадку, якщо вважати для простоти, що система як ціле перебуває у стані спокою,  $\mathbf{u} = 0$ , і не крутиться,  $\boldsymbol{\omega} = 0$ , де  $\boldsymbol{\omega}$  - кутова швидкість.

Бачимо, що рівноважний стан системи, що покоїться, характеризується тільки двома незалежними змінними  $\beta$  і  $\mu$ . Повторимося, що розподіл Гіббса є основою термодинаміки. У даній лекції обмежимося вивченням розподілу тільки вільних частинок, і з'ясуємо в рамках теорії збурення, ролі взаємодії між частинками.

Для вільних (невзаємодійних) частинок оператор їх числа у вторинному квантуванні дається виразом:

$$\hat{N} = \sum_i \hat{n}_i, \quad \hat{n}_i = a_i^+ a_i, \quad (7)$$

а гамільтоніан запишеться в вигляді:

$$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i \hat{n}_i, \quad (8)$$

де  $\varepsilon_i$  - енергія частинки в індивідуальному квантовому стані з набором квантових чисел  $i$ . Відповідно до цих формул розподіл Гіббса для вільних частинок має вигляд:

$$w_0 = \exp\left\{\Omega_0 - \beta \sum_i (\varepsilon_i - \mu) \hat{n}_i\right\}, \quad (9)$$

Завдання полягає в обчисленні термодинамічного потенціалу  $\Omega_0$  та середніх значень оператора  $\hat{n}_i$ . Запровадимо з цією метою позначення

$$Y_i \equiv \beta(\varepsilon_i - \mu). \quad (10)$$

Відзначимо, що подальші обчислення не пов'язані з конкретним видом функцій  $Y_i$  і з цієї причини годяться для довільних таких функцій. Оскільки  $Spw_0 = 1$ , маємо

$$e^{-\Omega_0} = Spe^{-\sum_i Y_i \hat{n}_i}.$$

Згадуючи визначення операції  $Sp$

$$Spe^{-\sum_i Y_i \hat{n}_i} = \dots \sum_{n_{i_1}} \dots \sum_{n_{i_2}} \left\langle \dots n_{i_1}, \dots, n_{i_2}, \dots \left| e^{-\sum_i Y_i \hat{n}_i} \right| \dots n_{i_2}, \dots, n_{i_1}, \dots \right\rangle,$$

де  $n_{i_1}, n_{i_2}, \dots$  - числа заповнення конкретних станів, і використовуючи ту обставину, що

$$e^{-Y_i \hat{n}_i} \left| \dots n_{i_1}, \dots \right\rangle = e^{-Y_i n_{i_1}} \left| \dots n_{i_1}, \dots \right\rangle \delta_{n_i n_{i_1}},$$

маємо

$$e^{-\Omega_0} = Spe^{-\sum_i Y_i \hat{n}_i} = \dots \sum_{n_{i_1}} e^{-Y_{i_1} n_{i_1}} \dots \sum_{n_{i_2}} e^{-Y_{i_2} n_{i_2}} \dots = \prod_i \sum_n e^{-Y_i n},$$

де  $n_i$  і  $n$  пробігають всі цілочисельні невід'ємні значення для статистики Бозе-Ейнштейна і значення 0 і 1 для статистики Фермі-Дірака. Для Ф.-Д. отримаємо

$$\sum_{n=0}^1 e^{-Y_i n} = 1 + e^{-Y_i},$$

а для Б.-Е.

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-Y_i n} = \frac{1}{1 - e^{-Y_i}}.$$

Оскільки

$$\Omega_0 = -\ln \prod_i \sum_n e^{-Y_i n} = -\sum_i \ln \sum_n e^{-Y_i n},$$

маємо

$$\Omega_0 = \sum_i \ln(1 - e^{-Y_i})$$

для Б.-Е. і

$$\Omega_0 = -\sum_i \ln(1 + e^{-Y_i})$$

для Ф.-Д.

Тому числа заповнення, тобто, середні значення чисел частинок у різних станах  $i$  визначаються формулами

$$f_i = Spw_0 \hat{n}_i = \frac{\partial \Omega_0}{\partial Y_i} = \begin{cases} (e^{Y_i} - 1)^{-1} & (Б-Э) \\ (e^{Y_i} + 1)^{-1} & (Ф-Д) \end{cases} . \quad (11)$$

а потенціал  $\Omega_0$  - виразом

$$\Omega_0 = \begin{cases} -\ln(1 + f_i) & (Б-Э) \\ \ln(1 - f) & (Ф-Д) \end{cases} . \quad (12)$$

Згадуючи введені раніше позначення  $Y_i \equiv \beta(\varepsilon_i - \mu)$  для чисел заповнення  $f_i \equiv n_i$  отримаємо добре відомі вирази

$$n_i = Spw_0 \hat{n}_i = \begin{cases} (e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} - 1)^{-1} & (Б-Э) \\ (e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} + 1)^{-1} & (Ф-Д) \end{cases} , \quad (13)$$

де  $\beta = 1/T$  - обернена температура.

Хімічний потенціал  $\mu$ , що входить до (13), може бути виражений через густину частинок  $\nu$  й обернену температуру  $\beta$

$$\nu = \frac{1}{V} \sum_i n_i = \begin{cases} \frac{1}{V} \sum_i (e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} - 1)^{-1} & (Б-Э) \\ \frac{1}{V} \sum_i (e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} + 1)^{-1} & (Ф-Д) \end{cases} . \quad (14)$$

В імпульсному представленні останні формули виглядають наступним чином

$$\nu = \frac{1}{V} \sum_p n_p = \begin{cases} \frac{1}{V} \sum_p (e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} - 1)^{-1} & (Б-Э) \\ \frac{1}{V} \sum_p (e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} + 1)^{-1} & (Ф-Д) \end{cases} , \quad (15)$$

де  $\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m}$  (ідеальний газ!). Нагадаємо, що за великих об'ємів,  $V \rightarrow \infty$ , сумування по  $\mathbf{p}$  може бути замінено інтегруванням:

$$\sum_{\mathbf{p}} \dots \rightarrow \frac{Vg}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \dots, \quad g \equiv (2S+1).$$

де  $g$  є параметром виродження енергетичного спектру частинок. Наприклад, якщо мова йде про спин, то  $g = 2S + 1$ .

Для газу ферміонів після граничного переходу  $V \rightarrow \infty$  в якості незалежних термодинамічних змінних можна вибрати будь-яку пару величин: або  $(\mu, \beta)$ , або  $(\nu, \beta)$ . Для газу ж бозонів в області досить низьких температур незалежними термодинамічними змінними можуть служити тільки  $(\nu, \beta)$ , оскільки доводиться в цій області вважати хімічний потенціал рівним нулю. Справді, для ідеального газу бозонів хімічний потенціал  $\mu$  не може бути позитивним, оскільки інакше число бозонів з імпульсом  $p < (2m\mu)^{1/2}$  було б негативним. Припустимо тому, що  $\mu < 0$ . Функція  $n_p$  при цьому не має особливостей, і умова (15) може бути записана у вигляді:

$$\nu = \frac{g}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \int_0^\infty dp \frac{p^2}{e^{\beta\left(\frac{p^2}{2m} - \mu\right)} - 1},$$

або

$$g \int_0^\infty dx \frac{x^2}{e^{x^2 - \beta\mu} - 1} = \frac{2\pi^2 \nu \hbar^3}{(2mT)^{3/2}}. \quad (16)$$

При  $\mu < 0$  права частина цієї рівності завжди менша, ніж

$$g \int_0^\infty dx \frac{x^2}{e^{x^2} - 1} = \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \zeta\left(\frac{3}{2}\right),$$

де  $\Gamma(x)$ ,  $\zeta(x)$  - гамма-функція і дзета-функція Рімана відповідно,  $\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$  і  $\zeta(3/2) = 2,612$ . Із цієї причини виконання цієї рівності при  $\mu < 0$  можливе тільки за умови, що

$$T \geq T_0, \quad T_0 = (2m)^{-1} \left( \frac{4\pi^2 \hbar^3}{\Gamma(3/2) \zeta(3/2) g} \right)^{2/3}. \quad (17)$$

Якщо  $T = T_0$ , то  $\mu = 0$ ; якщо ж  $T < T_0$ , то із умови (15) не можна знайти хімічний потенціал. У цій області температур ми повинні вважати хімічний потенціал ідеального газу бозонів рівним нулю.

Розглянемо докладніше умову для знаходження хімпотенціалу при  $\mu = 0$  і  $T < T_0$ . Функція розподілу і при  $\mu = 0$  визначається формулою

$$n_p = \frac{1}{e^{\beta \varepsilon_p} - 1}, \quad \varepsilon_p = \frac{p^2}{2m},$$

згадана умова може бути переписана в вигляді

$$\frac{1}{V} \sum_{p < \delta} n_p + \frac{1}{V} \sum_{p > \delta} n_p = \nu, \quad \text{или} \quad \frac{1}{V} \sum_{p < \delta} n_p = \nu - \frac{1}{V} \sum_{p > \delta} n_p,$$

де  $\delta$  деякий малий імпульс, що не залежить від  $V$ . Переходячи в цій формулі до границі  $V \rightarrow \infty$ , здобудемо

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \sum_{p < \delta} n_p = \nu - \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \sum_{p > \delta} n_p.$$

У цій формулі можна тепер перейти до границі  $\delta \rightarrow 0$ , після чого маємо

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \sum_{p < \delta} n_p = \nu - \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p \frac{1}{e^{\beta \varepsilon_p} - 1}. \quad (18)$$

Звідси видно, що в стані з імпульсом  $p = 0$  число бозонів в одиниці об'єму макроскопічно велике. Уводячи позначення

$$\nu_0 = \lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \sum_{p < \delta} n_p$$

та здійснюючи інтегрування в правій частині формули (18) з урахуванням визначення  $T_0$ , здобудемо

$$\nu_0 = \nu \left( 1 - \left( \frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \right). \quad (19)$$



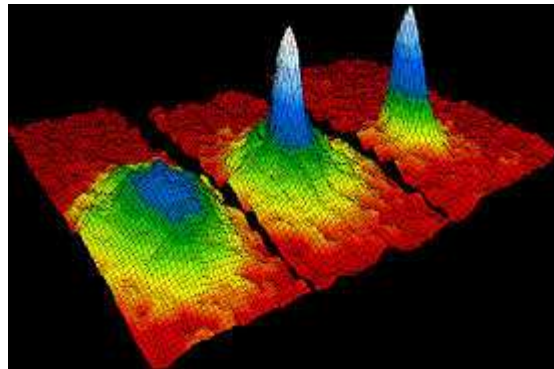
Видно, що при  $T \ll T_0$  у стані з  $p=0$  знаходиться макроскопічне число бозонів. Це явище носить назву бозе-ейнштейнівської конденсації.

Густину числа бозонів  $\nu_p$  з імпульсом  $\mathbf{p}$ ,

$$\nu = \int d^3 p \nu_p,$$

можна, таким чином, записати у вигляді

$$\nu_p = \nu \left( 1 - \left( \frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \right) \delta(\mathbf{p}) + \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{e^{\beta\epsilon_p} - 1}.$$



На відміну від бозонів, хімічний потенціал газу ферміонів може бути як позитивним, так і негативним, і може бути завжди обраний у якості незалежної термодинамічної характеристики. Якщо температура ферміонами газу значно менша за температуру виродження  $T_0$ ,

$$T \ll T_0, \quad T_0 = m^{-1} (\nu \hbar^3 / g)^{2/3},$$

то хімічний потенціал буде пов'язаний з густиною числа частинок співвідношенням

$$\mu = (2m)^{-1} (6\pi^2 \nu \hbar^3 / g)^{2/3}.$$

де  $g$ , як і вище, є параметром виродження енергетичного спектру частинок. Наприклад, якщо мова йде про спин, то  $g = 2S + 1$ .

Зауважимо, що при  $T \ll T_0$  функція розподілу ферміонів  $n_p$  буде дуже мало відрізнятися від ступінчастої функції,

$$n_p \approx \vartheta(\mu - \epsilon_p).$$

