10. statisztikus fizika gyakorlat

3. **Nemrelativisztikus ideális gáz kémiai potenciáljának kvantumkorrekciója:** Kelleni fog, úgyhogy $d = 3$ dimenzió és parabolikus diszperzió ($\gamma = 2$) és $g = 2S + 1$ degenerancia esetén az állapotsűrűséghez

$$\rho(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon = g\frac{V}{h^3}4\pi p^2\mathrm{d}p, \tag{1}$$

$$p = \sqrt{2m\varepsilon}$$

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}\varepsilon} = \frac{\sqrt{2m}}{2\sqrt{\varepsilon}}$$

$$\rho(\varepsilon) = g\frac{V}{h^3}4\pi p^2\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}\varepsilon} = g\frac{V}{h^3}4\pi 2m\varepsilon\frac{\sqrt{2m}}{2\sqrt{\varepsilon}} = 2\pi g\frac{V}{h^3}\left(2m\right)^{\frac{2}{3}}\sqrt{\varepsilon}, \tag{2}$$

és persze $\rho(\varepsilon) = 0$ ha $\varepsilon < 0$.

A klasszikus határesetben

$$\overline{n}(\varepsilon_m) = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_m-\mu)}+\Theta} \approx \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_m-\mu)}} = \mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_m-\mu)}, \tag{3}$$

ahol $\Theta = 1$ fermionokra és $\Theta = -1$ bozonokra. A klasszikus határeset alatt tehát az $\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_m-\mu)} \gg 1$ határesetet értjük adott ε_m nívó esetén, ami akkor teljesülhet minden nívóra egyszerre (figyelembe véve, hogy az ideális gáz sajátenergiái nemnegatívak), ha $\mathrm{e}^{-\beta\mu} \gg 1 \Leftrightarrow \mathrm{e}^{\beta\mu} \ll 1$. A klasszikus eredményekhez adódó kvantumkorrekciókat tehát $\mathrm{e}^{\beta\mu}$ mint kis paraméter szerint vizsgáljuk.

Hatványsorba fejtve

$$\overline{n}(\varepsilon) = \frac{\mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon-\mu)}}{1+\Theta\,\mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon-\mu)}} \approx \mathrm{e}^{-\beta\varepsilon}\,\mathrm{e}^{\beta\mu}\left(1-\Theta\,\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon}\,\mathrm{e}^{\beta\mu}\right), \tag{4}$$

amiből az átlagos részecskeszám

$$\overline{N} = \int_0^\infty \rho(\varepsilon)\,\overline{n}(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon \approx 2\pi g\frac{V}{h^3}\left(2m\right)^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty \sqrt{\varepsilon}\left(\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon}\,\mathrm{e}^{\beta\mu} - \Theta\,\mathrm{e}^{-2\beta\varepsilon}\,\mathrm{e}^{2\beta\mu}\right)\mathrm{d}\varepsilon. \tag{5}$$

Ilyen típusú integrálokhoz elég belátnunk az

$$\int_0^\infty \varepsilon^{\frac{n}{2}}\,\mathrm{e}^{-a\beta\varepsilon}\,\mathrm{d}\varepsilon = \left(a\beta\right)^{-\frac{n+2}{2}}\,\Gamma\left(\frac{n+2}{2}\right) \tag{6}$$

összefüggést, ami helyettesítéses integrállal triviálisan megy. Ezzel

$$\overline{N} \approx 2\pi g\frac{V}{h^3}\left(2m\right)^{\frac{3}{2}}\left(\mathrm{e}^{\beta\mu}\,\beta^{-\frac{3}{2}}\underbrace{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}_{\frac{\sqrt{\pi}}{2}} - \Theta e^{2\beta\mu}\left(2\beta\right)^{-\frac{3}{2}}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\right)$$

$$= gV\left(\frac{2m\pi k_\mathrm{B}T}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}\mathrm{e}^{\beta\mu}\left(1-\Theta 2^{-\frac{3}{2}}\,\mathrm{e}^{\beta\mu}\right) = \frac{gV}{\lambda_T^3}\,\mathrm{e}^{\beta\mu}\left(1-\Theta 2^{-\frac{3}{2}}\,\mathrm{e}^{\beta\mu}\right), \tag{7}$$

ahol megjelent a $\lambda_T = \frac{h^2}{2m\pi k_\mathrm{B}T}$ termikus de Broglie-hullámhossz. Átrendezve és ismét elsőrendig sorba fejtve implicit egyenletet kapunk a kémiai potenciálra:

$$\mathrm{e}^{\beta\mu} \approx \frac{1}{g}\frac{\overline{N}}{V}\lambda_T^3\left(1+\Theta 2^{-\frac{3}{2}}\,\mathrm{e}^{\beta\mu}\right). \tag{8}$$

Emlékeztetőül, a zárójelben szereplő második tag a klasszikus limesz közelében jóval kisebb, mint a vezető rend. Nem meglepő tehát, hogy a zárójel első tagja épp a klasszikus gázoknál kapott eredményt adja,

$$e^{\beta\mu_{\mathrm{kl}}} = \frac{1}{g}\frac{\overline{N}}{V}\lambda_T^3. \tag{9}$$

A (8) egyenlet jobb oldalán a közelítés nulladrendjét beírva megkapjuk $e^{\beta\mu}$ korrekt elsőrendű közelítését:

$$e^{\beta\mu} \approx \frac{1}{g}\frac{\overline{N}}{V}\lambda_T^3 \Theta 2^{-\frac{3}{2}}\left(\frac{1}{g}\frac{\overline{N}}{V}\lambda_T^3\right)^2, \tag{10}$$

aminek logaritmusát sorba fejtve

$$\mu \approx \mu_{\mathrm{kl}} + \Theta\frac{k_B T}{g\,2^{\frac{3}{2}}}\,\lambda_T^3\frac{\overline{N}}{V}, \tag{11}$$

ahol $\mu_{\mathrm{kl}} = k_B T\ln\left(\frac{\overline{N}}{V}\lambda_T^3/g\right)$ a klasszikus limeszben számított kémiai potenciált jelöli. Fermionokra tehát a kémiai potenciál emelkedik a kvantum korrekciók hatására, míg bozonokra csökken, amennyiben elkezdünk távolodni a klasszikus limesztől (pl. a hőmérséklet csökkentésével).

4. **Ultrarelativisztikus ideális gáz állapotegyenletének kvantumkorrekciója:** Most $d = 3$, $\varepsilon = c\,|\mathbf{p}|$ ($\gamma = 1$), az állapotsűrűség pedig nemnegatív energiákra

$$\rho(\varepsilon) = g\frac{V}{h^3}4\pi p^2\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}\varepsilon} = g\frac{V}{h^3}4\pi\left(\frac{\varepsilon}{c}\right)^2\frac{1}{c} = g\frac{V}{(hc)^3}4\pi\varepsilon^2. \tag{12}$$

Az átlagos részecskeszám a korábbiakkal (ld. (5)) analóg módon

$$\begin{aligned}\overline{N} &= \int_0^\infty \rho(\varepsilon)\,\overline{n}(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon \approx g\frac{V}{(hc)^3}4\pi\int_0^\infty \varepsilon^2\left(e^{-\beta\varepsilon}\,e^{\beta\mu} - \Theta\,e^{-2\beta\varepsilon}\,e^{2\beta\mu}\right)\mathrm{d}\varepsilon \\ &= g\frac{V}{(hc)^3}4\pi\left(e^{\beta\mu}\,\beta^{-3}\underbrace{\Gamma(3)}_{2!} - \Theta\,e^{2\beta\mu}\left(2\beta^{-3}\right)\Gamma(3)\right) \\ &= gV\frac{8\pi\,(k_B T)^3}{(hc)^3}\,e^{\beta\mu}\left(1 - \Theta\frac{1}{8}\,e^{\beta\mu}\right),\end{aligned} \tag{13}$$

ahol akár be is vezethetjük az ultrarelativisztikus részecskékre érvényes $\lambda_T^{\mathrm{ultra}} = \frac{hc}{(8\pi)^{\frac{1}{3}}\,k_B T}$ termikus hullámhosszot. Ennek a mennyiségnek a függvényében

$$e^{\beta\mu_{\mathrm{kl}}} = \frac{\left(\lambda_T^{\mathrm{ultra}}\right)^3}{g}\frac{\overline{N}}{V} \tag{14}$$

ami formálisan egyezik a nemrelativisztikus esettel, de ügyeljünk, hogy a termikus hullámhossz kifejezése most eltér a korábbitól!

Mivel most nem a kémiai potenciál kvantumkorrekciója érdekel, hanem az állapotegyenleté, ezért továbbmegyünk az átlagos energiára:

$$\begin{aligned}\overline{E} &= \int_{-\infty}^\infty \varepsilon\rho(\varepsilon)\,\overline{n}(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon \approx g\frac{V}{(hc)^3}4\pi\int_0^\infty \varepsilon^3\left(e^{-\beta\varepsilon}\,e^{\beta\mu} - \Theta\,e^{-2\beta\varepsilon}\,e^{2\beta\mu}\right)\mathrm{d}\varepsilon \\ &= g\frac{V}{(hc)^3}4\pi\left(e^{\beta\mu}\,\beta^{-4}\underbrace{\Gamma(4)}_{3!} - \Theta\,e^{2\beta\mu}\,(2\beta)^{-4}\,\Gamma(4)\right) \\ &= gV\frac{8\pi\,(k_B T)^3}{(hc)^3}\,e^{\beta\mu}\,3k_B T\left(1 - \Theta\frac{1}{16}\,e^{\beta\mu}\right).\end{aligned} \tag{15}$$

A releváns közelítések hányadosából az egy részecskére jutó átlagos energia

$$\begin{aligned}\frac{\overline{E}}{\overline{N}} &\approx 3k_B T\frac{1 - \Theta\frac{1}{16}\,e^{\beta\mu}}{1 - \Theta\frac{1}{8}\,e^{\beta\mu}} \approx 3k_B T\left(1 - \Theta\frac{1}{16}\,e^{\beta\mu}\right)\left(1 + \Theta\frac{1}{8}\,e^{\beta\mu}\right) \approx 3k_B T\left[1 + \Theta\left(\frac{1}{8} - \frac{1}{16}\right)e^{\beta\mu}\right] \\ &= 3k_B T\left[1 + \Theta\frac{1}{16}\,e^{\beta\mu}\right],\end{aligned} \tag{16}$$

ahol az első tag ismét a klasszikus eredmény, így a második tag a vezető kvantumkorrekció. Ez utóbbi tag pedig ugyancsak vezető rendben $\mathrm{e}^{\beta\mu}$ *nulladrendű* közelítéséből következik, vagyis vezető rendben

$$\frac{\overline{E}}{\overline{N}} \approx 3k_\mathrm{B}T\left[1+\Theta\frac{1}{16}\,\mathrm{e}^{\beta\mu_\mathrm{kl}}\right] = 3k_\mathrm{B}T\left[1+\Theta\frac{1}{16}\frac{\left(\lambda_T^\mathrm{ultra}\right)^3}{g}\frac{\overline{N}}{V}\right]. \tag{17}$$

Az állapotegyenlet viszont a 2. feladat állításának értelmében

$$pV = \frac{\gamma}{d}\overline{E} = \frac{1}{3}\frac{\overline{E}}{\overline{N}}\overline{N} \approx \overline{N}k_\mathrm{B}T\left[1+\Theta\frac{1}{16}\frac{\left(\lambda_T^\mathrm{ultra}\right)^3}{g}\frac{\overline{N}}{V}\right]. \tag{18}$$

Az első tag a klasszikus állapotegyenletet adná, a második tag ehhez a vezető kvantumkorrekció.

Megjegyezzük, hogy ahogy nemrelativisztikus gáznál, úgy most is igaz, hogy a gyengén kvantumos gáz nyomása

$$p \approx \frac{\overline{N}}{V}k_\mathrm{B}T\left[1+\Theta\frac{1}{16}\frac{\left(\lambda_T^\mathrm{ultra}\right)^3}{g}\frac{\overline{N}}{V}\right] = p_\mathrm{kl} + \Theta\frac{k_\mathrm{B}T}{16}\frac{\left(\lambda_T^\mathrm{ultra}\right)^3}{g}\left(\frac{\overline{N}}{V}\right)^2, \tag{19}$$

vagyis azonos darabsűrűségű és hőmérsékletű ultrarelativisztikus fermion- illetve bozongázok esetén

$$p_\mathrm{B} < p_\mathrm{kl} < p_\mathrm{F}, \tag{20}$$

vagyis fermion-gázok nyomása nagyobb, bozon-gázok nyomása kisebb, mint az azonos sűrűségű klasszikus gázé. Ezt a tendenciát szokás a kvantumgázok által kifejtett effektív taszításnak illetve effektív vonzásnak tulajdonítani.