9. statisztikus fizika gyakorlat

2. **Kvantumgáz entrópiája:** Kvantumgázok nagykanonikus állapotösszege is felírható úgy, mint az egyes nívókra vonatkoztatott nagykanonikus állapotösszegek szorzata:

$$\mathcal{Z} = \prod_m \mathcal{Z}_m, \tag{1}$$

$$\mathcal{Z}_m = \sum_{n=0}^{n_{\max}} \mathrm{e}^{-\beta n(\varepsilon_m - \mu)}, \tag{2}$$

ahol az m indexű kvantumállapot sajátenergiája ε_m. Fermionokra $n_{\max} = 1$, bozonokra $n_{\max} = \infty$. Adott hőmérsékleten és kémiai potenciálon az egyes betöltések összegeként áll elő a teljes rendszer átlagos energiája és részecskeszáma:

$$\overline{N} = \sum_m \overline{n}_m, \tag{3}$$

$$\overline{E} = \sum_m \varepsilon_m \overline{n}_m. \tag{4}$$

Fermionokra tehát

$$\mathcal{Z}_m = \sum_{n=0}^{1} \mathrm{e}^{-\beta n(\varepsilon_m - \mu)} = 1 + \mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_m - \mu)}, \tag{5}$$

míg bozonokra

$$\mathcal{Z}_m = \sum_{n=0}^{\infty} \mathrm{e}^{-\beta n(\varepsilon_m - \mu)} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_m - \mu)}\right)^n = \frac{1}{1 - \mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_m - \mu)}}. \tag{6}$$

Megjegyzés: bozongázra $\mu < \varepsilon_0$ (amennyiben ε_0 az alapállapoti egyrészecske-energia).

A nagykanonikus potenciál fermionokra

$$\Phi = -k_\mathrm{B}T \ln \mathcal{Z} = -k_\mathrm{B}T \sum_m \ln \mathcal{Z}_m = -k_\mathrm{B}T \sum_m \ln \left[1 + \mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_m - \mu)}\right], \tag{7}$$

bozonokra pedig

$$\Phi = -k_\mathrm{B}T \ln \mathcal{Z} = -k_\mathrm{B}T \sum_m \ln \mathcal{Z}_m = k_\mathrm{B}T \sum_m \ln \left[1 - \mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_m - \mu)}\right], \tag{8}$$

vagyis általánosan

$$\Phi = -g k_\mathrm{B}T \sum_m \ln \left[1 + g\, \mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_m - \mu)}\right], \tag{9}$$

ahol $g = 1$ fermionokra és $g = -1$ bozonokra.

A nívónkénti átlagos betöltési számról

$$\overline{n}_m = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln \mathcal{Z}_m}{\partial \mu} \tag{10}$$

alapján tudjuk, hogy a Fermi- illetve a Bose-függvény írja le:

$$\overline{n}_m = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_m - \mu)} + g}, \tag{11}$$

ami fermionokra az

$$n_{\mathrm{F}} = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_m - \mu)} + 1}, \tag{12}$$

Fermi-függvény, bozonokra pedig a

$$n_{\mathrm{B}} = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_m - \mu)} - 1}, \tag{13}$$

Bose-függvény.

A nagykanonikus potenciál teljes differenciálja

$$\mathrm{d}\Phi = -S\mathrm{d}T - p\mathrm{d}V - N\mathrm{d}\mu, \tag{14}$$

amiből az entrópia

$$\begin{aligned}
S &= -\left(\frac{\partial \Phi}{\partial T}\right)_{V,\mu} && (15)\\
&= g k_{\mathrm{B}} \sum_m \ln\left[1 + g\,\mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_m-\mu)}\right] - k_{\mathrm{B}}\beta^2 g k_{\mathrm{B}} T \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_m \ln\left[1 + g\,\mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_m-\mu)}\right]\right)_{V,\mu} && (16)\\
&= g k_{\mathrm{B}} \sum_m \ln\left[1 + g\,\mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_m-\mu)}\right] - k_{\mathrm{B}}\beta g \sum_m \frac{-g\left(\varepsilon_m - \mu\right)\mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_m-\mu)}}{1 + g\,\mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_m-\mu)}} && (17)\\
&= -k_{\mathrm{B}} \sum_m \left\{ g \ln \frac{1}{1 + g\,\mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_m-\mu)}} - \frac{\beta\left(\varepsilon_m - \mu\right)\mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_m-\mu)}}{1 + g\,\mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_m-\mu)}} \right\} && (18)\\
&= -k_{\mathrm{B}} \sum_m \left\{ g \ln \frac{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_m-\mu)}}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_m-\mu)} + g} - \ln \mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_m-\mu)} \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_m-\mu)} + g} \right\} && (19)\\
&= -k_{\mathrm{B}} \sum_m \left\{ g \ln\left[1 - g\overline{n}_m\right] - \overline{n}_m \ln \mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_m-\mu)} \right\} && (20)\\
&= -k_{\mathrm{B}} \sum_m \left\{ g \ln\left[1 - g\overline{n}_m\right] - \overline{n}_m \ln \frac{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_m-\mu)}\left[\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_m-\mu)} + g\right]}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_m-\mu)} + g} \right\} && (21)\\
&= -k_{\mathrm{B}} \sum_m \left\{ g \ln\left[1 - g\overline{n}_m\right] - \overline{n}_m \ln \frac{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_m-\mu)}}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_m-\mu)} + g} - \overline{n}_m \ln\left[\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_m-\mu)} + g\right] \right\} && (22)\\
&= -k_{\mathrm{B}} \sum_m \left\{ g \ln\left[1 - g\overline{n}_m\right] - \overline{n}_m \ln\left[1 - g\overline{n}_m\right] + \overline{n}_m \ln \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_m-\mu)} + g} \right\} && (23)\\
&= -k_{\mathrm{B}} \sum_m \left\{ \overline{n}_m \ln \overline{n}_m + \left[g - \overline{n}_m\right] \ln\left[1 - g\overline{n}_m\right] \right\} && (24)\\
&= -k_{\mathrm{B}} \sum_m \left\{ \overline{n}_m \ln \overline{n}_m + g\left[1 - g\overline{n}_m\right] \ln\left[1 - g\overline{n}_m\right] \right\} && (25)
\end{aligned}$$