

## 9. statisztikus fizika gyakorlat

### 1. Bose–Einstein-kondenzáció

Ahogy az előadáson tanultuk, illetve az előző gyakorlathoz készült jegyzetben is részletesen taglaltuk, tetszőleges fizikai mennyiség átlagos értéke kifejezhető egy Hilbert-téren vett bázis állapotaiban felvett értékek az adott állapotok átlagos betöltési számaival súlyozott összegeként, vagyis

$$\langle F \rangle = \sum_{\mathbf{p}} F(\mathbf{p}) \langle n(\mathbf{p}) \rangle, \quad (1)$$

ahol most ismét az impulzus sajátállapotokra végeztük el az összegzést. A szokásos módon áttérhetünk ekkor az energiaállapotok szerinti integrálásra  $\sum_{\mathbf{p}} \rightarrow \int_0^\infty d\varepsilon \varrho(\varepsilon)$ . Továbbá ahol az átlagos betöltési szám a megszokott módon:

$$\langle n(\varepsilon) \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + \Theta}, \quad (2)$$

ahol  $\Theta = 1$  fermionok esetén és  $\Theta = -1$  bozonok esetén. Most tekintsük az átlagos részecskeszámot bozonok esetén, 3 dimenzióban nem-relativisztikus, kvadratikusan diszperziós reláció esetén,  $\varepsilon = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ . Ekkor az energia állapotok sűrűsége  $\varrho(\varepsilon) = A_3 \sqrt{\varepsilon}$ ,  $A_3 \equiv \frac{Vg}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}$ , illetve a definiáló integrál:

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= A_3 \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\sqrt{\varepsilon}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} \dots \\ &\dots = A_3 (k_B T)^{3/2} \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{z^{-1} e^x - 1} \equiv A_3 (k_B T)^{3/2} I_{1/2}(z), \end{aligned} \quad (3)$$

ahol elvégeztük a  $\varepsilon \rightarrow \varepsilon\beta$  változócsere és bevezettük az  $z = e^{\beta\mu}$  új változót, aminek függvényében vizsgáljuk a részecskeszámot.

Egyrészt tudjuk, hogy csak  $\mu \leq 0$  értékek esetén jól definiált a részecskeszámot megadó integrál, illetve ekkor a kapott kifejezés  $\mu$ -nek, vagyis  $z$ -nek monoton növekvő függvénye, ami miatt az integrál  $\mu = 0$ -nál éri el maximális értékét. Mivel a részecskeszám fix (az  $N \rightarrow \infty$  termodinamikai limeszben), független a hőmérséklettől, csökkentve a hőmérsékletet, az integrál értékét, vagyis  $z$ -t (azaz  $\mu$ -t) kell növelnünk. Azonban ekkor, ha az integrál korlátos, azaz  $\max\{I_{1/2}(z)\} \equiv I_{1/2}(1) < \infty$ , lesz egy  $T_0$  kritikus hőmérséklet, ami alatt már nem tudjuk fixen tartani a részecskeszámot, mivel  $I_{1/2}(z)$  már elérte a véges értékű maximumát, azaz  $z = 1 \rightarrow \mu = 0$ :

$$\langle N \rangle = A_3 (k_B T_0)^{3/2} I_{1/2}(1). \quad (4)$$

Látható, hogy ha  $T > T_0$ , akkor létezik olyan  $\mu < 0$ , hogy (3) teljesül. Azonban, ha  $T < T_0$  egyrészt nem teljesül a részecskeszámra felírt összegzés, illetve az alapállapot betöltése szingulárisává válik, mivel  $\varepsilon = 0 \rightarrow \langle n(0) \rangle = \frac{1}{e^{\beta|\mu|-1}} \rightarrow \infty$ , mivel  $|\mu| \rightarrow 0$

A megoldás, hogy ekkor az alapállapot, azaz az  $\varepsilon = 0$  energiájú állapot, makroszkópicusan betöltötté válik, amit a mikroszkópikus súly szingularitása is jelez, a részecskék *bekondenzálódnak* az alapállapotba. Vagyis ekkor hibát követünk el, ha áttérünk integrál közelítésre, mivel nem minden mikroszkópikus állapot betöltése véges, külön kell választanunk a *makroszkópikus* járulékot adó alapállapoti betöltést a többi-től, amikre már ugyanúgy alkalmazható az integrál közelítés. Összefoglalva a Bose–Einstein-kondenzáció tisztán abból ered, hogy a részecskeszámot megadó integrál  $\mu = 0$  esetén *véges* értéket ad, vagyis a hőmérsékletet kellően lecsökkentve még a  $\mu = 0$  érték mellett sem tudjuk fixen tartani a részecskeszámot, amely ellentmondásból a szinguláris/*makroszkópikus* alapállapoti betöltéssel értelmezett kondenzáció jelensége vezet ki! A technikai részleteket tömören összegezve, ahogyan az előadáson is szerepelt, ekkor úgy írjuk fel a részecskeszámot,  $T < T_0$  kritikus hőmérséklet alatt, mint az alapállapot makroszkópikus járuléka, illetve a véges integrál kifejezés összege  $\mu = 0$  esetén, ahol feltesszük, hogy közel vagyunk a kondenzációs hőmérséklethez,  $T \gtrsim T_0$ ,  $|T - T_0| \ll 1$ , így jó közelítéssel a következő adódik,  $\langle N \rangle = A_3 (k_B T_0)^{3/2} I_{1/2}(1)$ , mindezek összességében a következő összefüggésre vezetnek:

$$\langle N \rangle = \langle N_0 \rangle + \langle N_{\varepsilon>0} \rangle = \langle N_0 \rangle + A_3 (k_B T)^{3/2} I_{1/2}(1) = \langle N_0 \rangle + \langle N \rangle \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}, \quad (5)$$

ahonnan az alapállapotba kondenzálódott részecskék száma:

$$\langle N_0 \rangle = \langle N \rangle \left( 1 - \left( \frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \right), \quad (6)$$

ahol  $\langle N \rangle$  a teljes részecskeszám.

## 2. Van-e Bose–Einstein-kondenzáció alacsonyabb dimenzióban?

Mint részletesen taglaltuk az előző részben, a kondenzáció oka, hogy  $\mu = 0$  esetén a részecskeszámot megadó integrál véges, ezért az integrandus szinguláris része szükségszerűen hasonló, makroszkópikus nagyságrendű járulékot kell hogy adjon, annak ellenére, hogy egyetlen mikroállapotról van szó! Mi történik azonban alacsonyabb dimenzióban,  $d = 1, 2$ , illetve most szintén kvadratikusan diszperzió esetén,  $\varepsilon = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ ? Először vizsgáljuk meg a  $d = 2$  esetet. Ekkor az állapotsűrűség nem függ az energiától, ezt alább röviden megindokoljuk:

$$\begin{aligned} d\varepsilon \varrho(\varepsilon) &= \frac{gL^2}{h^2} d^2\mathbf{p} = \frac{gL^2}{h^2} 2\pi p dp = \frac{2\pi gL^2}{h^2} \sqrt{2m\varepsilon} d(\sqrt{2m\varepsilon}) = \frac{2\pi gL^2}{h^2} \sqrt{2m\varepsilon} \sqrt{\frac{m}{2\varepsilon}} d\varepsilon = \frac{2\pi mgL^2}{h^2} d\varepsilon \rightarrow \\ &\rightarrow \varrho(\varepsilon) = \frac{2\pi gmL^2}{h^2} \equiv \text{const.} \equiv A_2. \end{aligned} \quad (7)$$

Most megvizsgáljuk, hogy mi a maximális értéke a részecskeszámban megjelenő integrál kifejezésnek:

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= A_2 k_B T \int_0^\infty dx \frac{1}{z^{-1}e^x - 1} = A_2 k_B T I_0(z) \rightarrow \max \{I_0(z)\} = I_0(1) = \dots \\ \dots &= \int_0^\infty dx \frac{1}{e^x - 1} = [-\ln(1 - e^{-x})]_0^\infty = \infty, \end{aligned} \quad (8)$$

ahol ismét bevezettük új változóként az  $x = \beta\varepsilon$ -t és a  $z = e^{\beta\mu}$ -t, illetve precízebben a következőképp írható fel a fenti divergencia,  $\lim_{z \rightarrow 1} \int_0^\infty dx \frac{1}{z^{-1}e^x - 1} = \infty$ . Azaz a részecskeszám divergál  $\mu = 0$  esetén, avagy más szavakkal kifejezve, fix  $\langle N \rangle$  részecskeszám esetén tetszőlegesen kicsi hőmérséklet esetén is létezik olyan  $\mu < 0$ , amely által az integrál kellően nagy ahhoz, hogy kompenzálja a hőmérséklet csökkenését fixen tartva a részecskeszámot. Vagyis mivel a kémiai potenciál nem éri el ez esetben a maximális,  $\mu = 0$  értékét, nincsen probléma a diszkrét összegben az átlagos betöltésekkel, mindegyik, még a  $\mathbf{p} = 0$  alapállapotú betöltés is jól definiált, véges értéket vesz fel  $\sim \frac{1}{e^{\beta|\mu|} - 1} < \infty$ , azaz *mikroszkópikus* járulékot ad a teljes összrészecskeszámhoz, így alkalmazható az integrállal való közelítés! A divergencia meghatározásához egy egyszerűbb trükk is alkalmazható, mely során megnézzük, hogy az integrandus hol szinguláris, láthatóan ez csak  $x = 0$  körül lehetséges, ezt követően  $x = 0$  kis környezetében vizsgáljuk az integrál értékét, de most csak az integrandus aszimptotikus, legszingulárisabb tagját vesszük figyelembe:

$$\int_0^\delta dx \frac{1}{e^x - 1} = \int_0^\delta dx \frac{1}{x} + o(1) = \infty, \quad (9)$$

ahol  $\delta$  indikálja, hogy csak a 0 kis környezetében vizsgálódunk, illetve ahol az  $\frac{1}{e^x - 1}$  kifejezésből csak a legszingulárisabb  $\frac{1}{x}$  tagot hagytuk meg, hogy lássuk divergens integrállal van-e dolgunk, minden más további korrekciós tag vagy kevésbé lett volna szinguláris vagy véges járulékokat adott volna, ezesetben a további tagok véges értéket adtak volna, mivel a legszingulárisabb rész is csak  $\sim -\lim_{x \rightarrow 0} \ln x$  típusú divergenciát adott.

Hasonlóan járunk el  $d = 1$  dimenzió esetén is. Ekkor az állapotsűrűség:

$$d\varepsilon \varrho(\varepsilon) = 2 \frac{gL}{h} dp = 2 \frac{gL}{h} d(\sqrt{2m\varepsilon}) = 2 \frac{gL}{h} \sqrt{\frac{m}{2\varepsilon}} \rightarrow \varrho(\varepsilon) = \frac{gL}{h} \sqrt{2m\varepsilon}^{-1/2} \equiv A_1 \varepsilon^{-1/2}. \quad (10)$$

Innen pedig a részecskeszámban megjelenő integrál:

$$\langle N \rangle = A_1 (k_B T)^{1/2} \int_0^\infty dx \frac{x^{-1/2}}{z^{-1}e^x - 1} \rightarrow \lim_{z \rightarrow 1} \int_0^\infty dx \frac{z^{-1}x^{-1/2}}{e^x - 1} \rightarrow \infty, \quad (11)$$

ahol most a legegyszerűbben a fentebb ismert aszimptotikus módszerrel tudtuk megmondani, hogy az integrál nem korlátos, azaz  $z = 1$ -ben divergens, ismét vegyük az  $x = 0$  körüli kis környezet és nézzük meg, hogyan viselkedik az integrandus legszingulárisabb része ebben a tartományban:

$$\int_0^\delta \frac{x^{-1/2}}{e^x - 1} dx = \int_0^\delta \frac{x^{-1/2}}{x} dx + o(x^{-1/2}) dx \rightarrow \infty, \quad (12)$$

látható, hogy ez egy  $\sim \lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{x^{3/2}}$  típusú divergencia!

Ismét azt kaptuk, hogy amint a kémiai potenciál eltűnik, divergenssé válik a részecskeszám. Ez ismét abból kifolyólag, hogy a részecskeszámot megadó integrál  $\mu$ -nek monoton növekvő függvénye és a maximumát  $\mu = 0$ -nál éri el, ahol nevezetesen divergens, vagyis minden határon túl nőhet, tetszőlegesen alacsony hőmérséklet esetén  $\langle N \rangle$  kifejezhető  $\mu < 0$  véges, negatív kémiai potenciállal paraméterezett, *véges* integrállal, vagyis ismét nem válik szingulárisá az alapállapotú betöltöttség és helyes eredményt ad az integrál formula!

### 3. Bose–Einstein-kondenzáció kémiai potenciáljának vizsgálata $T_0$ kondenzációs hőmérséklet felett, annak közelében, *háromdimenzióban, nem-relativisztikus esetben*

Vizsgáljuk meg a háromdimenziós nemrelativisztikus Bose-gáz kémiai potenciáljának hőmérsékletfüggését a  $T_0$  kondenzációs hőmérséklet felett, annak közelében!

- (a) Írjuk fel a  $\rho(\varepsilon)$  állapotssűrűséget!
  - (b) Írjuk fel  $T > T_0$  hőmérsékleten,  $0 < \beta|\mu| \ll 1$  kémiai potenciál mellett a részecskeszámot mint energiaintegrált! Segítség:  $0 \leq y \ll 1$  esetén  $\int \frac{t^{s-1}}{e^{t+x}-1} dt \approx \Gamma(s) \zeta(s) + \Gamma(s) \Gamma(1-s) x^{s-1}$  félegész  $s > 1$ -re. Figyelem:  $\mu < 0$ .
  - (c) Írjuk fel  $T_0$  hőmérsékleten is a részecskeszámot, ahol már épp  $\mu = 0$ !
  - (d) A két részecskeszám egyenlőségéből fejezzük ki  $\mu$ -t  $\frac{T}{T_0}$ -lal (előjelhelyesen!).
  - (e) Hogy változik a kémiai potenciál, ha  $T < T_0$ ?
- Állapotsűrűség:  
Ahogyan korábban is taglaltuk  $d = 3$  dimenzióban felírjuk az impulzus- és energiatérbeli infinitezimális integrálási mértékek közötti egyenlőséget, ahol a diszperziós reláció:  $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$  és áttérünk impulzustérbeli gömbi-koordinátákra:

$$d\varepsilon \varrho(\varepsilon) = \frac{gV}{h^3} d^3\mathbf{p} = 4\pi \frac{gV}{h^3} dp p^2, \quad (13)$$

Átosztva  $d\varepsilon$ -al és használva a diszperziós relációt a következő adódik:

$$\varrho(\varepsilon) = \frac{Vg}{4\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon} \equiv A_3 \sqrt{\varepsilon}. \quad (14)$$

- Most vizsgáljuk meg azt a hőmérsékleti tartományt, ahol  $T_0 \lesssim T$ ,  $T - T_0 \ll 1$ , érezzük (és utólag igazoljuk is), hogy  $0 < \beta|\mu| \ll 1$ , mivel ha közel vagyunk a kritikus hőmérséklethez, a kémiai potenciálnak is közel kell lennie 0-hoz. Ekkor felírjuk  $T_0 \lesssim T$  hőmérsékleten a részecskeszámot és alkalmazzuk a Bose-függvény integráljaira vonatkozó közelítő formulát,  $\int_0^\infty dt \frac{t^{s-1}}{e^{t+x}-1} \approx \Gamma(s) \zeta(s) + \Gamma(s) \Gamma(1-s) x^{s-1}$ :

$$\langle N \rangle = A_3 \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\sqrt{\varepsilon}}{e^{\beta\varepsilon + \beta|\mu|} - 1} \approx A_3 (k_B T)^{3/2} \Gamma(3/2) \zeta(3/2) + A_3 (k_B T)^{3/2} \Gamma(3/2) \Gamma(-1/2) (\beta|\mu|)^{1/2}, \quad (15)$$

ahol  $\Gamma(3/2) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ , illetve a  $\Gamma(-1/2) = -2\Gamma(1/2) = -2\sqrt{\pi}$ , továbbá  $\zeta(3/2) \approx 2.6123$  (ahol a Riemann féle zéta-függvény:  $\zeta(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt \frac{t^{s-1}}{e^t-1} = \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^s}$ ).

Tehát összességében az eredmény a kondenzációs hőmérséklethez közel:

$$\langle N_{T>T_0} \rangle \approx \tilde{A}_3 (k_B T)^{3/2} - \pi A_3 k_B T |\mu|^{1/2}, \quad (16)$$

ahol  $\tilde{A}_3 = A_3 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \zeta(3/2)$ .

- Részecskeszám  $T = T_0$  esetén:  
Most a korábban levezetett módszer helyett az előző részfeladatban kapott eredményt használjuk. Ezszerint a kondenzációs hőmérsékletnél a részecskeszám nem más mint az előző eredmény első tagja (hiszen ez egy  $|\mu|$  szerinti sorfejtés, tehát az első tagnak szükségszerűen a  $|\mu| = 0$  eredményt kell adnia!):

$$\langle N \rangle = \tilde{A}_3 (k_B T_0)^{3/2}. \quad (17)$$

- Kémiai potenciál vezetőrendbeli viselkedése:  
Mivel a két részecskeszámnak szükségszerűen meg kell egyeznie a következő egyenlőséget kapjuk:

$$\tilde{A}_3(k_B T_0)^{3/2} = \tilde{A}_3(k_B T)^{3/2} - 2\pi A_3 k_B T |\mu|^{1/2} \rightarrow \dots \quad (18)$$

$$\dots \rightarrow |\mu| = \frac{\zeta^2(3/2)}{8\pi} \beta^2 \left( (k_B T)^{3/2} - (k_B T_0)^{3/2} \right)^2. \quad (19)$$

Mivel azonban tudjuk, hogy  $T_0 \lesssim T$ ,  $T - T_0 \ll 1$  meg kell még vizsgálnunk a  $\frac{(T^{3/2} - T_0^{3/2})^2}{T^2}$  kifejezés vezetőrendbeli viselkedését a  $T - T_0$  kicsi paraméter szerint! Triviálisan  $T^{3/2} - T_0^{3/2} = \frac{T - T_0}{\sqrt{T} + \sqrt{T_0}} (T + T_0 + \sqrt{TT_0})$  (Felhasználtuk, hogy  $a^3 - b^3 = (a - b)(a^2 + b^2 + ab)$ ). Ha a vezetőrendre vagyunk kíváncsiak az első tag számolóján kívül minden tagban élhetünk a  $T = T_0$  helyettesítéssel, ugyanis ha  $T = T_0 + T - T_0$ -ként fejezzük ki a hőmérsékletet minden említett tagban és  $T - T_0$  szerint  $T = T_0$  körül sorba fejtjük a kifejezést csak  $\sim (T - T_0)^2$  másodrendű kifejezéseket fogunk nyerni. Vagyis a következő adódik:

$$T^{3/2} - T_0^{3/2} = \frac{3\sqrt{T_0}}{2} (T - T_0) + o\left((T - T_0)^2\right). \quad (20)$$

Négyzetre emelve a fenti kifejezést és figyelmebe véve még a további  $\frac{1}{T^2}$  tagot, illetve ez utóbbi esetében ismét  $T = T_0$  közelítéssel élve (ismét  $\frac{1}{T} = \frac{1}{T_0 + T - T_0} = \frac{1}{T_0} + o(T - T_0)$  alapján látható, hogy a vezetőrendről már gondoskodott számunkra a számláló és így nyugodtan élhetünk a  $T = T_0$  helyettesítéssel, mivel minden egyéb korrekció csak magasabb rendet adna), a következő adódik:

$$|\mu| = \frac{9}{4} \frac{\zeta^2(3/2)}{8\pi} k_B T_0 \left(1 - \frac{T_0}{T}\right)^2 + o\left(\left(1 - \frac{T_0}{T}\right)^3\right), \quad (21)$$

- Kémiai potenciál  $T < T_0$  hőmérsékleten:  
Ahogyan korábban részletesen tárgyaltuk, amint a hőmérséklet eléri a kondenzációs  $T_0$  értéket az alapállapot makroszkópicusan betöltött lesz, ugyanolyan nagyságrendű, mint az összes többi tag együttesen, melyet a jól definiált integrál ad meg (4), illetve az integrandus szingularitása gondoskodik a makroszkópikus járulékról. Ahogyan a hőmérsékletet tovább csökkentjük, az alapállapot a teljes makroszkópikus részecskeszám egyre nagyobb hányadát tartalmazza, míg  $T = 0$  esetén  $\langle N \rangle = \langle N_0 \rangle$ . Ezt úgy értelmezzük, hogy  $\mu = 0$  kémiai potenciál mellett az alapállapot fölötti állapotok véges részecskeszám járulékát csak a hőmérséklet kontrollálja, ami zérussá válik, ahogyan a hőmérséklet nullába tart. Vagyis a kémiai potenciál állandó  $\mu = 0$  értékű, ha  $T < T_0$ !

#### 4. Fononok, Debye-modell

Vizsgáljuk meg a szilárdtestekben a fononok termodinamikai tulajdonságait Debye közelítésben ideális bozongázként, diszkutáljuk mind az alacsony, mind a magas hőmérsékletű határesetet!

- Hogyan értelmezhetjük a fononok rezgéseit lineáris közelítésben?
- Adjuk meg az állapotsűrűséget!
- Vizsgáljuk meg az átlagos energiát és a hőkapacitást!
- Diszkutáljuk a magas és alacsony hőmérsékletű határesetet!
- Mekkora a fonongáz nyomása és izoterm kompresszibilitása?
- Miért nincs a fonongázban Bose-kondenzáció?

Mint szilárdtestfizikából tanultuk, egy szilárdtest atomjai kristalyrácsba rendeződve vannak jelen, ugyanakkor azok rácspontoktól való kitéréseit, vibrációit, amiket az ún. *fononokkal*, mint kvázi-részecskékkel azonosítunk, ugyanolyan módon kezelhetjük mint az ideális bozongázokat, vagyis rendelkeznek valamilyen, a rezgést leíró Hamilton operátorral, melyek energia sajátértékeit a fotonokhoz hasonló módon jellemezhetünk

$$E = \hbar\omega, \text{ harmonikus közelítés.} \quad (22)$$

Ezt közelítjük alacsony hőmérsékleten lineáris frekvencia-hullámszám disperzióval,  $\omega = c_s k$ , ahol  $c_s$  a hangsebesség, melyet most izotrópnak tételeztünk fel, vagyis minden irányban ugyanakkora, illetve bevezetjük az  $\omega$  frekvencia szerinti állapotsűrűséget az energia helyett, ami csak egy  $\hbar$  szorzó faktorbeli eltérést okoz.

Két fontos különbség a fotonokhoz képest:

$$\omega < \omega_D \Leftrightarrow \text{a hullámszámnak az 1. Brillouin zónán belül kell lennie} \quad (23)$$

$$g(\omega) d\omega = \frac{3V}{2\pi^2 c_s^3} \omega^2 d\omega, \quad (24)$$

ahol a második egyenlőségben kihasználtuk, hogy a fononok a fotonok 2 polarizációs irányával ellentétben 3-al rendelkeznek. A fonon gerjesztésekhez asszociált hangsebességre egy jó becslés adható a következőképp: Az összes rezgési állapot,  $N$  atom esetén  $3N$ :

$$\int_0^{\omega_D} d\omega \frac{3V}{2\pi^2 c_s^3} d\omega = 3N \rightarrow c_s = \left( \frac{V}{6\pi^2 N} \right)^{1/3} \omega_D. \quad (25)$$

Vagyis egyszerűen csak leszámoltuk, hogy összesen annyi fonon tartózkodhat a vizsgált rendszerben, mint ahány rezgési állapot lehetséges az  $\omega_D$  Debye-frekvenciáig, viszont tudjuk, hogy összesen  $N$  rácspont, rácspontonként *háromdimenziós* szabadsági fokkal  $3N$  rezgési módust ad, aminek gerjesztései a fononok. Ezen felül hasonlóan a fotonokhoz részecskeszámuk nem rögzített, így a kémiai potenciál mindig vehető  $\mu = 0$ -nak. Vagyis megfelelő lineáris közelítés esetén adott egy  $\mu = 0$  kémiai potenciálú,  $g(\omega) d\omega = \frac{3V}{2\pi^2 c_s^3} \omega^2 d\omega$  állapotsűrűségű bozongázunk, ahol  $\omega \geq 0$ , annyi megkötéssel, hogy a frekvencia csak  $\omega_D$ -ig vehet fel értékeket. Fontos kiemelni, hogy lineáris közelítés, csak a fononok  $\Gamma$  pontja körüli kis környezetben érvényesek, nem túl magas hőmérsékleten, amikor is nincsenek a lineáris tartományon kívülre eső gerjesztések!

- Állapotösszeg és nagykanonikus potenciál, ahol az előadáson tanultakhoz hasonlóan először egy-egy  $\omega$  frekvenciájú állapotra írjuk fel a bozonikus nagykanonikus állapotösszeget:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_\omega &= \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \rightarrow \mathcal{Z}_{\text{fonon}} = \prod_{\omega < \omega_D} \mathcal{Z}_\omega \\ \Phi &= -k_B T \ln(\mathcal{Z}_{\text{fonon}}) = k_B T \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{3V}{2\pi^2 c_s^3} \omega^2 \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega}) = \\ &= -\frac{V\hbar}{2\pi^2 c_s^3} \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{\omega^3}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} - k_B T \frac{3V}{6\pi^2 c_s^3} \omega_D^3 \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega_D}) = -PV, \end{aligned} \quad (26)$$

ahol a második tag a parciális integrálás során megmaradó peremtagból ered, míg az első tag pontosan megegyezik  $\langle E \rangle_{\text{fonon}}/3$ -al.

- Energia és hőkapacitás összehasonlítása a fotongázzal:

Fenti kifejezés az általános kvantumgázokra érvényes állapotegyenlet alapján (előadáson említve volt levezetés nélkül, ezen felül ez az összefüggés már szerepelt ultrarelativisztikus esetben),  $\langle E \rangle = 3PV$ :

$$\langle E \rangle_{\text{fonon}} = \frac{3V}{2\pi^2 c_s^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega^3}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} = \frac{3V}{2\pi^2 (\hbar c_s)^3} (k_B T)^4 \int_0^{T_D/T} dx \frac{x^3}{e^x - 1}, \quad (27)$$

ahol  $T_D \equiv \frac{\hbar\omega}{k_B}$  a Debye-frekvenciához asszociált hőmérséklet skála. A fentebbi függvény nem adható meg egyszerű alakban az általunk ismert standard függvények segítségével, ennek oka, hogy a hőmérséklet az integrálási határban is megjelenik! Azonban az alacsony hőmérsékletű limeszben,  $T_D \gg T$  at integrál felső határa végtelennek vehető,  $T_D/T \gg 1$ , ekkor

$$\langle E \rangle_{\text{fonon}} \approx \frac{3V}{2\pi^2 (\hbar c_s)^3} (k_B T)^4 \frac{\pi^4}{15}. \quad (28)$$

Látható, hogy a két kifejezés a polarizációs ágak számbeli eltéréseinek, illetve a különböző hangsebesség (fotonok esetében természetesen ez a fénysebesség) erejéig megegyezik a fotongázra kapott eredménnyel, de csak az alacsony hőmérsékletű limeszben. Ugyanebben a limeszben a hőkapacitás:

$$(C_V)_{\text{fonon}} \approx \frac{2\pi^2 V k_B^4}{5 (\hbar c_s)^3} T^3, \text{ ha } T_D/T \gg 1, \quad (29)$$

mely ismét a hangsebesség és a polarizációs ágak számbeli eltérésén felül megegyezik a fotongázéval. Fontos kiemelni, hogy míg itt ez egy közelítés, mind az alacsony hőmérséklet, mind a lineáris diszperzió szempontjából, addig a fotongázra kapott eredmények egzaktak!

Érdekes még ennek ismeretében megvizsgálni, mit kapunk a fononok esetén a magas hőmérsékletű limeszben,  $T_D/T \ll 1$ . Vigyázni kell azonban a 'magas' hőmérséklet pontos értelmével, mivel egyrészt, ha a hőmérsékleti energiaskála jóval nagyobb mint a Debye frekvencia által definiált energia tartomány,  $\hbar\omega_D \ll k_B T$ , kisebb eltérések adódhatnak a lineáris diszperzióval számolt eredményekhez, nagyobb gond akkor adódik, ha a  $k_B T$  energiaskála nagyobb lesz mint maga az első Brillouin zóna mindazzal együtt, hogy kellően nagy hőmérsékleten azt várjuk, hogy mindig a klasszikus Dulong–Petit elvet kapjuk vissza. Ha elfogadjuk a  $T_D/T \ll 1$  határesetet, a következő matematikai közelítésekkel élhetünk:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_{\text{fonon}} &= \frac{3V}{2\pi^2 (\hbar c_s)^3} (k_B T)^4 \int_0^{T_D/T} dx \frac{x^3}{e^x - 1} = \frac{3V}{2\pi^2 (\hbar c_s)^3} (k_B T)^4 \int_0^{T_D/T} dx (x^2 + \dots) = \\ &= \frac{3V}{2\pi^2 (\hbar c_s)^3} (k_B T)^4 \frac{1}{3} \left( \frac{T_D}{T} \right)^3 + \dots = \frac{V}{2\pi^2 (\hbar c_s)^3} (k_B T_D)^3 k_B T + \dots, \end{aligned} \quad (30)$$

ahonnan a hőkapacitásra visszakapjuk a konstans viselkedést, ahogyan várjuk a Dulong–Petit elv alapján:

$$(C_V)_{\text{fonon}} = \frac{V}{2\pi^2 (\hbar c_s)^3} (k_B T_D)^3 \equiv 3Nk_B. \quad (31)$$

ahol az utolsó kifejezés a korábbi a  $c_s$  definíciójának visszaírásaából következik,  $c_s = \left( \frac{V}{6\pi^2 N} \right)^{1/3} \omega_D$ .

- **Nyomás:** Felhasználjuk hozzá, hogy tudjuk lineáris diszperziójú bozongázról, hogy

$$\langle E \rangle_{\text{fonon}} = 3pV = \frac{V\pi^2}{10(\hbar c_s)^3} (k_B T)^4 \quad (32)$$

ahol ismét a  $T \ll T_D$  határesetet vizsgáltuk! Innen a nyomás

$$p = \frac{\pi^2}{30(\hbar c_s)^3} (k_B T)^4 \quad (33)$$

ami láthatóan nem függ a térfogattól!

- **Izoterm kompresszibilitás:** Láthatóan  $\kappa = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial p} \right) \rightarrow \infty$ , mivel a nyomás nem függ a térfogattól. Ez nem jelent mást, mint hogy változtatva a gázrészecskék térfogatát nem változik meg a nyomás, ami a direkt következménye annak a kezdeti feltételünknek, hogy a fonongázban a részecskék száma nem állandó, hanem egyensúlyban azsszerint alakul, hogy a szabadenergia elérje a részecskeszám szerinti minimumát!

- Bose–Einstein kondenzáció vizsgálata fonongáz esetén:  
Abból a megfontolásból sejthető, hogy a jelenség nem lép fel fonongáz esetén, hogy a részecskeszám aszerint változik, hogy a szabadenergia a részecskeszám szerinti minimum értékét vegye fel. Ezenfelül, ha megvizsgáljuk az részecskeszámra kapott kifejezést, annak ellenére, hogy véges értéket kapunk, mégsem kell azt felételeznünk jelen esetben, hogy ennek következtében makroszkópikus járulékot kell kapnunk az alapállapotban. Mivel a fononok sajátos tulajdonsága (a részecskék száma külső forrás nélkül is változhat és mindig az egyensúlyi állapot megvalósítása szerint alakul) alapján „mesterségesen követeltük meg”, hogy legyen nulla a kémiai potenciál, emiatt nem érvényes az az érvelés, hogy a részecskeszámnak kémiai potenciál szerint monoton növőnek kell lennie. Ez a következőképpen is felfogható: fontos sajátossága fonongáznak, hogy **nem létezik**  $\mathbf{p} = 0$  energiájú állapota (analóg módon fotonnal, a fononnak sincs nyugalmi tömege, így nem létezhet zérus energiaállapotban), vagyis nem kapunk szinguláris, nem jól definiált betöltést a diszkrét impulzusállapotokra felírt összegzésben, amit így probléma nélkül átrhatunk folytonos integrál alakba. Vagyis nincs okunk feltételezni, hogy a részecskeszámnak makroszkópikus méreteket kellene öltenie valamilyen mikroállapotban, vagyis az a konklúzió, hogy nincs Bose–Einstein-kondenzáció fonongázban!