

10. 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, kvadratikus 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-t 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 μ -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 μ -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 mikroszkópicus súly szingularitása is jelez, a részecskék *bekondenzálódnak* az alapállapotba. Vagyis ekkor hibát követünk el, ha áttérünk integrál közelítésre, mivel nem minden mikroszkópicus állapot betöltése véges, külön kell választanunk a *makroszkópicus* járulékot adó alapállapoti betöltést a többitől, 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/*makroszkópicus* 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 makroszkópicus járuléka, illetve a véges integrál kifejezés összege $\mu = 0$ esetén, ahol feltesszük, hogy közel vagyunk a kondenzációs hőmérséklethez, $T \lesssim T_0$, $|T - T_0| \ll 1$, 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?

Van-e Bose–Einstein-fázisátalakulás alacsonyabb, 2 és 1 dimenzióban, nem relativisztikus ideális bozonikus kvantumgáz esetén?

- Írjuk fel a $\rho(\varepsilon)$ állapotsűrűséget!
- Írjuk fel a részecskeszámot mint energiaintegrált általánosan, T hőmérséklet és μ kémiai potenciál mellett!
- Vizsgáljuk meg az energiaintegrált μ -függés szerint! Adott hőmérsékleten milyen μ esetén lesz maximális az integrál értéke? Véges-e ez az érték? (Tipp: vizsgáljuk meg az energiaintegrált egy kicsi véges intervallumon, ahol esetleg divergenciát várunk, és itt fejtsük sorba az integrandust!)
- Ennek tükrében mit mondhatunk a Bose–Einstein-kondenzáció esetleges jelenlétéről? A választ indokoljuk!

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 részecskeszámokban 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 δ 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, ez esetben 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 környezetet 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 $\sim \lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{x^{1/2}}$ típusú divergencia!

Ismét azt kaptuk, hogy amint a kémiai potenciál eltűnik, divergenssé válik a részecskeszám. Ez ismét abból kifolyólag, hogy a részecskeszámot megadó integrál μ -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!

- Írjuk fel a $\rho(\varepsilon)$ állapotosűrűséget!
- 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 $\int \frac{t^{s-1}}{e^{t+y} - 1} dt \approx \Gamma(s) \zeta(s) + \Gamma(s) \Gamma(1-s) x^{s-1}$ félegész $s > 1$ -re. Figyelem: $\mu < 0$.
- Írjuk fel T_0 hőmérsékleten is a részecskeszámot, ahol már épp $\mu = 0$!
- A két részecskeszám egyenlőségéből fejezzük ki μ -t $\frac{T}{T_0}$ -lal (előjelhelyesen!).
- Hogy változik a kémiai potenciál, ha $T < T_0$?
- Határozzuk meg az izoterm kompresszibilitást! Tudván, hogy $\mu \sim (T - T_0)^2$ ha $T \approx T_0$, milyen a kompresszibilitás hőmérsékletfüggése? Mi történik, ha $T \rightarrow T_0$? (Nagykanonikus sokaságban ezt meghatározhatjuk a részecskeszám fluktuációiból: $\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_{N,T} = \frac{V}{N^2} \left(\frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{V,T}$.)

- Állapotsűrűség:
Ahogyan korábban is taglaltuk $d = 3$ dimenzióban felírjuk az impulzus- és energiatérbeli infinitezimális integrálási mértékek közötti egyenlőséget, ahol a diszperziós reláció: $\varepsilon = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ 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, $\int_0^\infty dt \frac{t^{s-1}}{e^{t+y} - 1} \approx \Gamma(s) \zeta(s) + \Gamma(s) \Gamma(1-s) x^{s-1}$:

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

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

- (c) 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!):

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

- (d) 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:

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

- (e) Kémiai potenciál $T < T_0$ hőmérsékleten:

Ahogy 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 makroszkópicus járulékról. Ahogy a hőmérsékletet tovább csökkentjük, az alapállapot a teljes makroszkópicus 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, ahogy a hőmérséklet nullába tart. Vagyis a kémiai potenciál állandó $\mu = 0$ értékű, ha $T < T_0$! Pontosabban tekintve a termodinamikai limeszt, azt mondhatjuk, hogy az alapállapot betöltésének divergenciája vezetőrendben

$$\lim_{\mu \rightarrow 0} \frac{1}{e^{e^{\beta|\mu|}} - 1} \approx \frac{k_B T}{|\mu|} \sim |\mu|^{-1} \quad (22)$$

módon írható le, ennek kell összemérhetőnek lenni a korábbi vizsgált $\langle N \rangle$ átlagos részecskeszámmal, vagyis a kémiai potenciál igazából $\mu \sim \langle N \rangle^{-1}$ módon tart a nullába, ahol például, közel a kritikus hőmérséklethez enen ka hőmérsékletfüggése $\mu \approx \langle N_0 \rangle^{-1} \sim \langle N \rangle^{-1} \left(1 - \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}\right)^{-1}$.

- (f) Inne már könnyedén meg tudjuk határozni a vezetőrendbeli viselkedést a kompresszibilitásnak:

$$\kappa_{T \gtrsim T_0} = \frac{V}{\langle N \rangle^2} \partial_\mu \langle N \rangle_{T \gtrsim T_0} \approx A_3 \pi k_B T |\mu|^{-1/2} = \frac{8\pi^2 A_3}{\zeta^2(3/2) T_0} (1 - T_0/T)^{-1}, \quad (23)$$

azaz divergál $T = T_0$ -ban, ha a hőmérsékletet csökkentjük, míg a kritikus hőmérséklet alatt hasonlóan divergens marad, mivel láthattuk, hogy $\mu \sim \langle N \rangle^{-1}$, azaz $\partial \langle N \rangle \sim \mu^{-2}$, ami T_0 alatt továbbra is végtelen nagy $\langle N \rangle^2$ járulékot ad!

Számoljuk ki a nyomást is és az alapján a kompresszibilitást, hogy igazoljuk a fenti eredményeket,