



AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA
IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

Statystyki klasyczne i kwantowe

Fizyka II dla Elektroniki, lato 2011

1



Problem wielu cząstek

Ze wzrostem liczby elementów układu fizycznego, przechodząc od atomów jednoelektronowych, poprzez wieloelektronowe, aż do cząsteczek i ciał stałych, szczegółowy opis zachowania układu staje się coraz bardziej złożony.

Jeden mol zawiera liczbę Avogadro $N_A = 6 \cdot 10^{23}$ cząsteczek.

Jeżeli dodatkowo cząsteczki oddziałują ze sobą, to opis zachowania takiego układu zarówno klasycznie poprzez korzystanie z zasad mechaniki Newtona jak i kwantowo rozwiązując równanie Schrödingera aby znaleźć funkcje falowe dla każdej cząsteczki **nie jest możliwy**.

W takim przypadku stosuje się podejście **statystyczne**.

Fizyka II dla Elektroniki, lato 2011

2



Elementy fizyki statystycznej

Klasyczne rozkłady prawdopodobieństwa to:

- rozkład Maxwella dla prędkości cząsteczek w gazie doskonałym
- rozkład Boltzmanna dla energii

Kwantowe rozkłady prawdopodobieństwa to:

- rozkład Bosego-Einsteina dla cząstek o spinie całkowitym
- rozkład Fermiego-Diraca dla cząstek o spinie półkowyim

Efekty kwantowe dominują w układach wielu cząstek, w tym ciał stałych w temperaturze pokojowej.

Klasyczna i kwantowa fizyka statystyczna zблиżają się do siebie gdy temperatura układu rośnie.



Rozkład Maxwella

W 1860 **James Clerk Maxwell** wyprowadził wzór na gęstość prawdopodobieństwa dla klasycznego gazu cząsteczek nie oddziaływujących ze sobą, traktowanych jako punktowe.

Założenie: funkcja rozkładu f zależy tylko od wartości prędkości v :

$$f(v_x, v_y, v_z) = f(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)$$

Żaden kierunek nie jest uprzywilejowany, ruch w każdym z kierunków x, y i z odbywa się niezależnie co oznacza, że prawdopodobieństwo znalezienia cząsteczki o składowej prędkości w kierunku x w przedziale od v_x do $v_x + dv_x$ jest niezależne od prawdopodobieństwa znalezienia składowej prędkości w kierunku y w przedziale od v_y do $v_y + dv_y$, itd.

$$f(v_x, v_y, v_z) = h(v_x)h(v_y)h(v_z)$$



Rozkład Maxwella

$$h(v_x)h(v_y)h(v_z) = f(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)$$

Funkcja rozkładu h jest taka sama dla każdego kierunku co wynika z symetrii.

$$\ln h(v_x) + \ln h(v_y) + \ln h(v_z) = \ln f(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)$$

stad:
$$h(v_x) = \text{const} \times \exp(-Bv_x^2)$$

$$f(v) = C \exp[-B(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)] = C \exp(-Bv^2)$$

Stałe C i B znajdujemy z warunku normalizacji



Rozkład Maxwella

Ostateczna forma rozkładu Maxwella:

$$f(v) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right)$$

- Funkcja rozkładu zależy tylko od wartości prędkości, a nie od jej kierunku
- Dla ustalonej temperatury, funkcja rozkładu maleje eksponencjalnie gdy energia kinetyczna cząsteczki $K = mv^2/2$ rośnie, maleje e razy gdy K rośnie $k_B T$ -razy



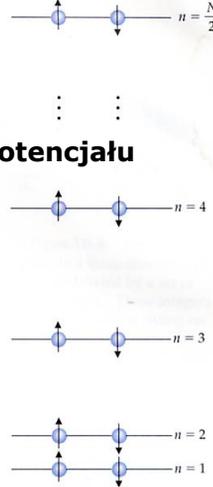
Energia Fermiego

Energia Fermiego E_F jest ważnym parametrem struktury elektronowej półprzewodników i metali. Jest zdefiniowana jako energia najwyższego poziomu energetycznego wypełnionego elektronami w stanie podstawowym .

Przypadek 1D dla nieskończonej studni potencjału

Z powodu zakazu Pauliego nie można umieścić wszystkich N -fermionów (elektronów) w jednym stanie. Wszystkie poziomy do $n=N/2$ są obsadzone w stanie podstawowym. Biorąc pod uwagę fakt, że energie pojedynczych elektronów $E_n = n^2 E_1$, energia N -cząstek w stanie podstawowym wynosi:

$$E_g = E_1 \left[2 \left(\frac{1}{2} \right)^2 + 2 \left(\frac{2}{2} \right)^2 + \dots + 2 \left(\frac{N}{2} \right)^2 \right] = 2E_1 \sum_{j=1}^{N/2} j^2$$



Fizyka II dla Elektroniki, lato 2011

21



Energia Fermiego

Suma może zostać obliczona jako $\sum_{j=1}^n j^2 = \frac{1}{6}n(n+1)(2n+1)$

dla dużych n przybliżamy jako $n^3/3$

Gdy n jest duże i równe $N/2$: $E_g \approx \frac{N^3}{24}$

Średnia energia na cząstkę w stanie podstawowym: $\frac{E_g}{N} \approx \frac{N^2}{12} E_1$

W przypadku bozonów średnia energia przypadająca na cząsteczkę była stała, dla fermionów rośnie ona z liczbą cząstek jak N^2

Przy konstrukcji stanu podstawowego o N fermionach, najwyższy zapełniony poziom energetyczny, czyli energia Fermiego E_F odpowiada $n=N/2$ i w przypadku jednowymiarowym wynosi:

$$E_F = \frac{\pi^2 \hbar^2 N^2}{8mL^2}$$

Fizyka II dla Elektroniki, lato 2011

22



Energia Fermiego Przypadek trójwymiarowy

Wielkość momentu pędu elektronu dla energii Fermiego (pęd Fermiego)

$$p_F = \sqrt{2mE_F} = \hbar \left(\frac{2}{3} \pi^2 n_f \right)^{1/3}$$

Długość fali de Broglie odpowiadająca pędowi Fermiego wynosi:

$$\lambda_F = \frac{h}{p_F} = 2 \left(\frac{\pi}{3} \right)^{1/3} n_f^{-1/3}$$

średnia odległość między fermionami a

Najmniejsza odległość na jaką mogą się zbliżyć dwa fermiony jest w przybliżeniu równa połowie długości fali de Broglie'a odpowiadającej energii Fermiego:

$$a \cong \frac{\lambda_F}{2}$$



Rozkład Fermiego-Diraca

Założenia:

- cząstki są nierozróżnialne
- cząstki nie oddziałują ze sobą
- spełniony jest zakaz Pauliego

w jednym stanie energetycznym opisanym przez zespół liczb kwantowych może znajdować się jedna cząstka (dwie ze względu na spinową liczbę kwantową)

$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$



Rozkład Fermiego-Diraca

Średnia liczba $N(E)$ cząstek o spinie $1/2$ o danej energii E jest dana wzorem:

$$N(E) = 2n(E) = \frac{2}{\exp[\beta(E - \mu)] + 1}$$

Aby wyjaśnić znaczenie fizyczne stałych β i μ trzeba rozważyć znane przypadki szczególne.

W granicy dużych energii, rozkład musi przechodzić w rozkład klasyczny Boltzmanna. Dla bardzo dużych energii E , średnie obsadzenie poziomów jest tak małe, że wpływ drugiej cząstki a zatem i zakaz Pauliego nie odgrywają dużego znaczenia. Zatem:

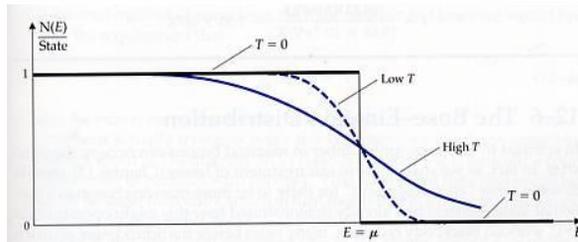
$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$



Rozkład Fermiego-Diraca

dla różnych temperatur T

$$N(E) = \frac{2}{\exp[\beta(E - \mu)] + 1}$$
$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$



W niskich temperaturach czyli dla $\beta \rightarrow \infty$, $N(E)$ może przyjąć tylko dwie wartości. Jeżeli $E > \mu$ to $N(E) = 0$, jeżeli $E < \mu$ to $N(E) = 2$.

Jest to zgodne z oczekiwaniami dla dużej liczby fermionów w stanie podstawowym: dwa elektrony dla każdej energii do poziomu Fermiego i zero elektronów powyżej energii Fermiego E_F . Dlatego utożsamiamy μ z E_F :

$$\mu = E_F$$



Rozkład Fermiego-Diraca

$$N(E) = \frac{2}{\exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) + 1}$$

Przyjmując: i – liczba poziomów (przedziałów energii),

n_i – liczba cząstek na i -tym poziomie, g_i – liczba dostępnych stanów, E_i – energia i -tego stanu, N – całkowita liczba cząstek, E – całkowita energia układu N cząstek w danej temperaturze T

$$f_i(E) = \frac{n_i}{g_i} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_i - E_F}{k_B T}\right)}$$

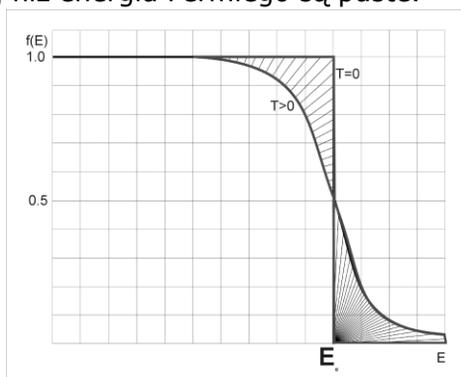
funkcja rozkładu Fermiego-Diraca



Rozkład Fermiego-Diraca

Interpretacja energii Fermiego:

W temperaturze $T=0\text{K}$ poziom energii Fermiego jest to poziom **odcięcia**. Oznacza to, że wszystkie poziomy o energii mniejszej od energii Fermiego są na pewno obsadzone; natomiast poziomy o energii większej niż energia Fermiego są puste.





Rozkład Fermiego-Diraca

$$f_i(E) = \frac{n_i}{g_i} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_i - E_F}{k_B T}\right)}$$

a) przypadek $E < E_F$
T=0K:

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp(-\infty)} \Rightarrow 1$$

b) przypadek $E > E_F$
T=0K:

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp(+\infty)} \Rightarrow 0$$

Dla $T > 0$ oraz dla $E=E_F$ funkcja rozkładu $f(E_F) = 1/2$.



Rozkład Fermiego-Diraca

$$f_i(E) = \frac{n_i}{g_i} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_i - E_F}{k_B T}\right)}$$

Funkcja rozkładu Fermiego-Diraca określa prawdopodobieństwo obsadzenia poziomu E_i w temperaturze T

Celem opisu jest znalezienie odpowiedzi na pytanie jaki jest rozkład cząstek między różnymi poziomami E_i , tak aby energia całkowita była stała, czyli aby spełnione były warunki:

$$N = \sum_i n_i = \text{const}$$

$$E = \sum_i n_i E_i = \text{const}$$



Określimy funkcje gęstości stanów ρ_i , określa ona liczbę stanów w jednostkowym przedziale energii:

$$\rho_i = \frac{g_i}{\Delta E_i} \quad n_i = f_i g_i = f_i(E_i) \rho_i \Delta E_i$$

$$N = \int_{-\infty}^{+\infty} f(E) \rho(E) dE$$

$$E = \int_{-\infty}^{+\infty} f(E) E \rho(E) dE$$



Rozkład Bosego-Einsteina

Założenia:

- cząstki są nierozróżnialne
- cząstki nie oddziałują ze sobą
- nie jest spełniony zakaz Pauliego

Funkcja rozkładu Bosego- Einsteina ma postać:

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right) - 1}$$



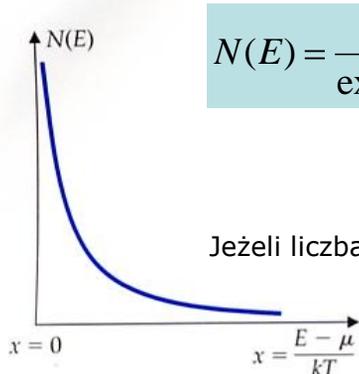
Rozkład Bosego-Einsteina

W przeciwieństwie do fermionów, dowolna liczba bozonów może znajdować się w tym samym stanie kwantowym. Występuje tendencja do gromadzenia się bozonów w danym stanie kwantowym.

Einstein przewidział to zjawisko w pracy o promieniowaniu ciała doskonale czarnego (1917), na wiele lat przed sformułowaniem równania Schrödingera i zanim pojawiła się koncepcja symetrycznych funkcji falowych. Einstein pokazał, że prawdopodobieństwo przejścia ze stanu zawierającego n fotonów do stanu zawierającego $n+1$ fotonów jest proporcjonalne do $n+1$.



Rozkład Bosego-Einsteina



$$N(E) = \frac{2s+1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{kT}\right) - 1}$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

$$N = \sum N(E)$$

Jeżeli liczba N bozonów ma być stała to:

$$\mu \leq 0$$

Dla fotonów $\mu=0$, bo ich liczba nie zawsze jest zachowana



Zastosowania

Kondensacja **Bosego-Einsteina**

Gdy temperatura spada poniżej temperatury krytycznej T_c coraz większa liczba bozonów „kondensuje” do stanu podstawowego. W temperaturze zera bezwzględnego wszystkie cząstki kondensują do stanu podstawowego. Ten efekt, który występuje nawet gdy nie występuje bezpośrednie oddziaływanie między bozonami, nazywa się kondensacją **Bosego-Einsteina**.



Cornell, Ketterle, Weiman



Zastosowania

Nadciekłość helu

W 1908, Heike Kamerlingh Onnes skroplił hel w temperaturze 4.2 K. W 1928 Willem Hendrik Keesom odkrył, że w $T_c=2.17$ K występuje przejście do nowej fazy helu.

Własności nowej fazy:

- Ciekły hel wrze gdy jest oziębiany powyżej T_c . Gdy temperatura spada poniżej T_c , wrzenie ustaje.
- Powyżej T_c ciekły hel zachowuje się jak każdy lepki płyn. Poniżej T_c przepływ przez wąskie kanały nie napotyka na przeszkody jakby lepkość ciekłego helu była zerowa.
- Poniżej T_c ciekły hel „wspina” się po ścianach naczynia; tworzy fontanny



Zastosowania Nadciekłość helu

W temperaturze T_c atomy helu zaczynają tworzyć kondensat. Dokładnie w temperaturze T_c udział atomów w kondensacie jest mały. Gdy T maleje do zera, udział ten wzrasta do jedności. Kondensat wykazuje **nadciekłość**.

Poniżej T_c można potraktować hel jako mieszaninę dwóch cieczy:

- normalnej
- nadciekłej

Względna gęstość zmienia się z temperaturą pomiędzy $T=0$ i $T=T_c$.