Skammtadreifingar

Aðferðafræðin fyrir skammtakjörgasið var ekki í lagi fyrir þann gös (sætni mögulegra ástanda er stórt).
→ hlýtur að bregðast fyrir lágt T

↑ er títt að meta bregst t.d. fyrir rafeindir í málmum við herbergishita

Föllum frá þessari kröfu og leiðum út "Skammtadreifingar sem gilda fyrir öll T

Fjöleindakerfi ⟷ samhverfa ástanda, aðgreinanlegar eindir

Fyrir hreintóna sveifilinn hafið þið séð Hilbert rúm einnar einda ástanda

$\{|n\rangle\}$, $H_0|n\rangle = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})|n\rangle$, $\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$, $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$

$[\hat{a},\hat{a}^+] = 1$, $H_0 = \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a}+\frac{1}{2})$

fyrir óvíxlverkandi eindir útbúum við Fock-rúm með ástanda vigrum

$$|n_1, n_2, n_3, n_4, \ldots\rangle$$

Á þá virka sviðsvirkjar

$$\hat{\Phi}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{\infty} \hat{a}_i \phi_i(\vec{r})$$

og í 3D uppfylla þeir

$$[\hat{\Phi}(\vec{r}), \hat{\Phi}^{+}(\vec{r}')]_{\mp} = \delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

með + fyrir fermi eindir og − fyrir bóseindir

Í ljós kemur að fyrir Fermi eindir eru $n_i = 0$ eða 1

og fyrir bóseindir

$n_i = 0, 1, 2, \ldots$

Fyrir fermi eindir fæst t.d.

$$\hat{a}_s|\ldots n_s \ldots\rangle = \begin{cases} (-1)^{S_s}\sqrt{n_s}\,|\ldots n_s - 1 \ldots\rangle & \text{ef } n_s = 1 \\ 0 & \text{annars} \end{cases}$$

$$S_s = \sum_{i=1}^{s-1} n_i$$

$$\hat{a}_s^{+}|\ldots n_s \ldots\rangle = \begin{cases} (-1)^{S_s}\sqrt{n_s+1}\,|\ldots n_s + 1 \ldots\rangle & \text{ef } n_s = 0 \\ 0 & \text{annars} \end{cases}$$

vegna mismunandi samhverfu ástandanna, skipta sam- ~~eða~~ andhverfu

Notum stóru kórsummuna

Eindafjöldann má festa eftir ā

n_i eindir í ástand i með orku E_i

Viss uppsetning væri þá

$$\left\{e^{\beta(\mu-E_1)}\right\}^{n_1} \times \left\{e^{\beta(\mu-E_2)}\right\}^{n_2} \times \cdots$$

$$= \prod_i e^{n_i\beta(\mu-E_i)}$$

Til að búa til $\mathcal{Z}$ þurfum við að summa yfir allar mögulegar uppraðanir $\{n_i\}$

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{n_i\}} \prod_i \exp\left\{n_i\beta(\mu-E_i)\right\}$$

fyrir fermieindir $\{n_i\} = \{0,1\}$ óháð i

fyrir bóseindir $\{n_i\} = \{0,1,2,\dots\}$ óháð i

$$\mathcal{Z} = \prod_i \sum_{\{n_i\}} \exp\left\{n_i\beta(\mu-E_i)\right\}$$

Fermieindir

$$\mathcal{Z} = \prod_i \left\{1 + \exp\left(\beta\left[\mu - E_i\right]\right)\right\}$$

$$\rightarrow \ln\mathcal{Z} = \sum_i \ln\left\{1 + e^{\beta(\mu-E_i)}\right\}$$

Bóseindir

$$\mathcal{Z} = \prod_i \left\{ 1 + e^{\beta(\mu - E_i)} + e^{2\beta(\mu - E_i)} + \cdots \right\}$$

$$= \prod_i \left\{ \frac{1}{1 - e^{\beta(\mu - E_i)}} \right\}$$

$$\rightarrow \ln \mathcal{Z} = - \sum_i \ln \left\{ 1 - e^{\beta(\mu - E_i)} \right\}$$

þetta má taka saman sem

$$\ln \mathcal{Z} = \pm \sum_i \ln \left\{ 1 \pm e^{\beta(\mu - E_i)} \right\}$$

$+$: fermíeindir

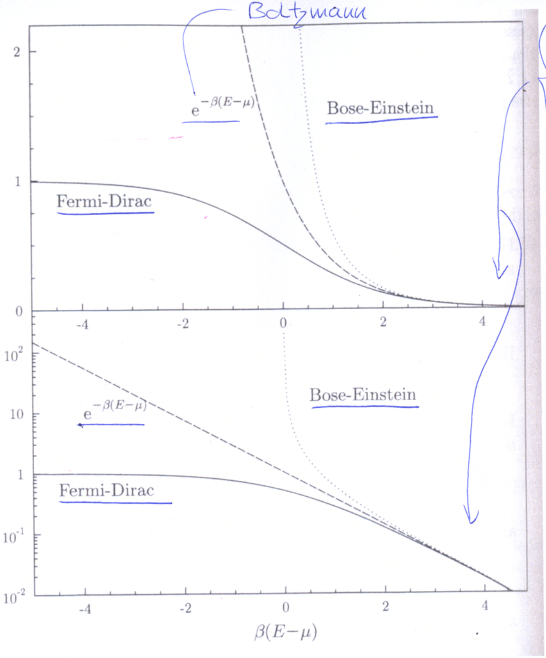
$-$: bóseindir

$$\rightarrow \boxed{\langle n_i \rangle = -\frac{1}{\beta} \left\{ \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial E_i} \right\} = \frac{e^{\beta(\mu - E_i)}}{1 \pm e^{\beta(\mu - E_i)}} = \frac{1}{e^{\beta(E_i - \mu)} \pm 1}}$$

Fyrir stór kerfi er heppilegt að nota dreifingarnar

$$f_{FD}(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)}+1}$$

$$f_{BE}(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)}-1}$$



þegar $\beta(E-\mu) >> 1$ falla dreifingarnar saman

$\beta\mu$ er þá lítið

→ T hátt og þéttleiki einda lítill

Fyrir bóseindir er $E = \mu$ sérstæður punktur →

μ er alltaf aðeins fyrir neðan orkuróf bóseindakerfis

Gös og vökvar óvíxlverkandi skammta einda

Munum sjá að samhverfa og skiptakraftar hafa mikil áhrif við háan þettleika

Spuni $S \;\longrightarrow\; 2S+1$ margfeldni (án ytra segulsviðs)

$$\mathcal{Z} = \prod_k \mathcal{Z}_k^{2S+1} \;, \qquad \mathcal{Z}_k = \left\{ 1 \underset{\text{bós}\dots}{\overset{\text{fermi}\dots}{\pm}} e^{-\beta(E_k-\mu)} \right\}^{\pm 1}$$

Finnum

$$\Phi_G = -k_B T \ln \mathcal{Z}$$

$$= \mp k_B T (2S+1) \sum_k \ln\left\{ 1 \pm e^{-\beta(E_k-\mu)} \right\}$$

$$= \mp k_B T \int_0^\infty dE\, g(E) \ln\left\{ 1 \pm e^{-\beta(E-\mu)} \right\}$$

(7)

Þar sem $g(E)$ er ástandaþéttleikinn í orku:

$$g(k)dk = (2s+1) \times \frac{4\pi k^2 dk}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{(2s+1)Vk^2dk}{2\pi^2}, \quad V = L^3$$

og þar sem $E = \frac{\hbar^2k^2}{2m} \leftrightarrow dE = \frac{\hbar^2 k}{m}dk$

$$\rightarrow \frac{m}{\hbar^2} k dE = k^2 dk$$

$$\rightarrow \frac{1}{2}\frac{2m}{\hbar^2}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}\, dE = k^2 dk$$

$$\rightarrow \frac{1}{2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{E}\, dE = k^2 dk$$

skrifum við

$$g(E)dE = (2s+1)\frac{V}{(2\pi)^2}\sqrt{E}\, dE \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}$$

því fæst

$$\Phi_G = \mp k_BT \frac{(2s+1)V}{(2\pi)^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty dE\sqrt{E}\ln\left\{1 \pm e^{-\beta(E-\mu)}\right\}$$

og hlutheildun leiðir til

$$\boxed{\Phi_G = -\frac{2}{3}\frac{(2s+1)V}{(2\pi)^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty dE\,\frac{E^{3/2}}{e^{\beta(E-\mu)}\pm 1}}$$

Eins má nálgast N og U beint með

$$n_k = k_BT\frac{\partial}{\partial\mu}\ln \mathcal{Z}_k = \frac{1}{e^{\beta(E_k-\mu)}\pm 1}$$

setni ástands k

og

$$N = \sum_k n_k = \int_0^\infty dE\,\frac{g(E)}{e^{\beta(E-\mu)}\pm 1}$$

$$U = \sum_k n_k E_k = \int_0^\infty dE\,\frac{g(E)\,E}{e^{\beta(E-\mu)}\pm 1}$$

Skilgreinum
$$\boxed{z = e^{\beta\mu}}$$
fugacity

på fast i 3D

$$N = \left[\frac{(2s+1)V}{(2\pi)^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\right]\int_0^\infty \frac{dE\sqrt{E}}{z^{-1}e^{\beta E}\pm 1}$$

$$U = \left[\frac{(2s+1)V}{(2\pi)^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\right]\int_0^\infty \frac{dE\, E^{3/2}}{z^{-1}e^{\beta E}\pm 1}$$

Notum skilgreiningu á fjöllogra

$$\int_0^\infty \frac{dE\, E^{n-1}}{z^{-1}e^{\beta E}\pm 1} = (k_BT)^n \underbrace{\Gamma(n)}_{\text{Gamma fallið}}\left\{\mp \mathrm{Li}_n(\mp z)\right\}$$

þá fæst

$$N = \frac{(2S+1)V}{\lambda_{th}^3}\left\{\mp Li_{3/2}(\mp z)\right\}, \qquad \lambda_{th} = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}} = n_Q^{-1/3}$$

$$U = \frac{3}{2}k_B T\,\frac{(2S+1)V}{\lambda_{th}^3}\left\{\mp Li_{5/2}(\mp z)\right\}$$

$$= \frac{3}{2}Nk_BT\,\frac{Li_{5/2}(\mp z)}{Li_{3/2}(\mp z)}$$

og

$$\Phi_G = -\frac{2}{3}U$$

því sést í kjörgas mörkgildinu

þegar $z = e^{\beta\mu} \ll 1$

þ.e. $\frac{N}{V}\lambda_{th}^3 \ll 1$

að $Li_n(z) \simeq z \quad , \quad z \ll 1$

$$N \simeq \frac{(2S+1)V}{\lambda_{th}^3}\, z$$ ← lítill þéttleiki

$$U \simeq \frac{3}{2}Nk_BT$$

$$\Phi_G \simeq -Nk_BT, \qquad \left(\Phi_G = -pV\right)$$

Fermigas

Skoðum fermigas fyrst við $T=0$, óvíxlverkandi sjáum síðar að það er nýtileg, en gróf nálgun fyrir rafeindagas í málmi! $\rightarrow E_{kin} \gg E_{pot}$

Fermieindir við $T=0$ í jafnvægi $(2s+1)$-setja öll ástönd upp að

$$E_F = \mu(T=0) \leftarrow \text{fermi orka}$$

$$\mu(T=0) = \frac{\partial E}{\partial N} \longrightarrow \mu(T=0) = E(N) - E(N-1) = E_F$$

$\beta \to \infty$

$$\hookrightarrow n_k = \frac{1}{e^{\beta(E_k-\mu)}+1} = \Theta(\mu - E_k) = \Theta(E_F - E_k)$$

Heaviside þrepafallið

$$N = \int_0^{k_F} d^3k \, g(k)$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

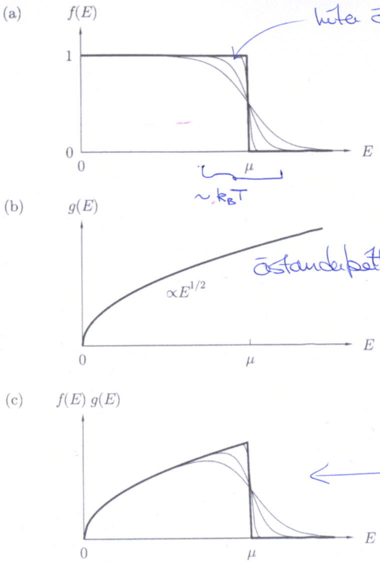
$$\Downarrow$$

$$N = \frac{(2s+1)V}{2\pi^2} \frac{k_F^3}{3}$$

ef $n = \frac{N}{V}$

$$\rightarrow k_F = \left(\frac{6\pi^2 n}{2s+1}\right)^{1/3}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{6\pi^2 n}{2s+1}\right)^{2/3}$$



hita áhrif

$\sim k_B T$

ástandaþéttleiki

Rafeindir í málmi eru kulgas (degenerate)

$E_F \sim 2 - 7$ eV

$\hookrightarrow T_F = \frac{E_F}{k_B}$

Jafngildir $\sim 10^4$ K

Athugum rafeindir í málmi

Einsleitt rafeinda kerfi, skilgreinum meðal geisla á rafeind

$$n = \frac{1}{\frac{4}{3}\pi r_0^2}$$

þéttleiki rafeinda

stöðum með geisla Bohr $\quad a_0 = \frac{4\pi\epsilon\hbar^2}{me^2} \approx 0{,}529 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}$

stærð vetnisatóms

Fyrir málma gildir að

$$r_s = \frac{r_0}{a_0}$$

$$2 \leq r_s \leq 5.5$$

$\langle E_{kin} \rangle$ vex hraðar með þéttleikanum en $\langle E_{coul} \rangle$

$$\langle E_{kin} \rangle = \frac{3}{5} E_F = \frac{2.21}{r_s^2}\ \text{Rydberg}$$

$\langle E_{coul,\,bein} \rangle \sim 0$ ← jákvæður bakgrunnur hleðsla, jónir í kristalli

$$\langle E_{coul,\,exchange} \rangle = -\frac{0.916}{r_s}\ \text{Rydberg}$$

fyrir $r_s << 1$ er hægt að horfa framhjá $\langle E_{pot} \rangle$
hár þéttleiki

fyrir $r_s >> 1$ fara víxlverkunarhrif að
skipta máli og verða ráðandi
lágur þéttleiki

$\downarrow$

Kristöllun rafeinda
í hálfleiðurum við lágt T
og hátt B $r_s \gtrsim 35$

og á yfirborði He-vökva