II. A STATISZTIKUS FIZIKA ÉS A MIKROVILÁG KVANTUMMECHANIKAI MODELLJE

Contents

6 KVANTUMSOKASÁGOK

Ebben a fejezetben megmutatjuk, hogy a fizikai rendszerek kvantummechanikai leírása automatikusan elvezet a statisztikus tárgyaláshoz és kézenfekvővé teszi a statisztikus sokaság fogalmának bevezetését. Megismerkedünk a nyílt rendszereket leíró vegyes sokasággal és a zárt rendszereket leíró tiszta sokasággal. Rámutatunk, hogy csak a zárt fizikai rendszerek írhatók le hullámfüggvénnyel.

6.1 A kvantummechanika hamiltoni megfogalmazása

6.1.1 Az alapelvek

A kvantummechanika két alapelvre épül, a Heisenberg-féle határozatlansági elvre és az állapotok lineáris szuperpoziciójának elvére:

1. **A határozatlansági elv értelmében az egymáshoz (klasszikus értelemben) kanonikusan konjugált mennyiségek nem mérhetők egyidejűleg tetszőleges pontossággal.** Például egy részecske koordinátája és impulzusa között fennáll a

$$\Delta q \cdot \Delta p \gtrsim \hbar \tag{6.1}$$

egyenlőtlenség, ahol Δq és Δp a koordináta és az impulzus szórása és $\hbar = h/2\pi$ ($h = 6.63 \cdot 10^{-34}$Js).

2. A lineáris szuperpozíció elvének megfogalmazásához azon tapasztalat vezetett el, hogy egy kvantummechanikai rendszer, pl. egy elektron, képes önmagával interferálni. Pl. ha egy elektron egy kettős résen keresztül juthat el a detektorba, akkor a kísérlet sokszori megismétlése és a detektor mozgatása révén olyan interferenciaképet kapunk, amely rendkívül hasonlít az elektromágneses hullámokkal végzett kísérletben észlelhetőhöz. Ebből arra következtethetünk, hogy az elektron állapotát az elektromágneses hullámmennyiséggel analóg matematikai objektummal kell leírni, míg a detektorban észlelt időegység alatti beütésszámot az elektromágneses hullám energiaáramával analóg mennyiséggel. Ezek szerint, ha a részecske állapotát a ψ komplex amplitudó, a hullámfüggvény írja le, akkor a beütésszám arányos $\mid \psi \mid^2$-tel. **A szuperpozíció elve azt mondja, hogy bármely két ψ_1 és ψ_2 állapot lineáris kombinációja is egy lehetséges állapot,** azaz

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \tag{6.2}$$

is egy lehetséges állapot, ahol c_1 és c_2 tetszőleges komplex állandók.

6.1.2 Állapotok és fizikai mennyiségek

A fenti elvek maradéktalanul kielégíthetők, ha a kvantummechanika matematikai megfogalmazása az alábbiak szerint történik:

1. **A zárt kvantummechanikai rendszer állapotainak egy Hilbert-tér vektorait feleltetjük meg.** Azon $\mid \psi\rangle$ vektorok, amelyek csak normájukban különböznek, azonos fizikai állapotot jellemeznek. Így a fizikai állapotokat az egységnyi normájú vektorokkal lehet leírni.

2. **A rendszert jellemző fizikai mennyiségeknek önadjungált operátorokat feleltetünk meg.** Ez a megfeleltetés úgy történik, hogy az egymáshoz kanonikusan konjugált q_i általános koordináták és a p_i kanonikus impulzusok Poisson-zárójelét a Heisenberg-féle csererelációkra változtatjuk:

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \quad \Rightarrow \quad [\hat{q}_i, \hat{p}_j] = \mathrm{i}\hbar\delta_{ij}. \tag{6.3}$$

(Feles spinű részecskék esetén a kommutátorreláció helyett antikommutátorrelációt kell előírni.)

Egy fizikai mennyiség mérésének eredménye adott $\mid \psi\rangle$ állapotú rendszeren különböző lehet. Minden egyes eredmény bekövetkeztének jól definiált valószínűsége van. Ez azt jelenti, hogy ha ugyanazon állapotú rendszeren ugyanazt a mérést nagyon sokszor elvégezzük, akkor az egyes lehetséges eredmények meghatározott gyakorisággal következhetnek be. Az eredmény eloszlását a lehetséges $\mid m_1\rangle$, $\mid m_2\,\rangle \ldots$ állapotokon a mért b mennyiség $\bar{b}$ várható értékével és Δb szórásával jellemezhetjük. Ha $\hat{b}$ jelöli a b fizikai mennyiség operátorát, akkor

$$\bar{b} = \langle\psi \mid \hat{b} \mid \psi\rangle, \qquad \Delta b = \langle\psi \mid \hat{b}^2 - \bar{b}^2 \mid \psi\rangle^{1/2}, \tag{6.4}$$

ahol $\hat{b} \mid \psi\rangle$ a $\mid \psi\rangle$-ből a $\hat{b}$ operátor hatására előálló állapotvektor és $\langle \ldots \mid \ldots\rangle$ a Hilbert-tér skalárszorzata.

A b mérése révén beálló valamely $\mid m\rangle$ állapot, amelyben b-nek jól definiált b_m értéke van,

$$\hat{b} \mid m\rangle = b_m \mid m\rangle \tag{6.5}$$

a $\hat{b}$ operátor sajátállapota, és fennállnak a

$$b_m = \langle m \mid \hat{b} \mid m\rangle, \qquad (\Delta b)_m = \langle m \mid \hat{b}^2 - \bar{b}^2 \mid m\rangle^{1/2} = 0 \tag{6.6}$$

összefüggések. Az önadjungált $\hat{b}$ operátor $\mid m\rangle$ sajátállapotai ortonormált teljes rendszert alkotnak. Ez azt jelenti, hogy bármely $\mid \psi\rangle$ állapot előállítható

$$\mid \psi\rangle = \sum_m c_m \mid m\rangle \tag{6.7}$$

alakban. Itt $\langle m \mid \psi\rangle = c_m$ és $\mid c_m \mid^2$ a valószínűsége, hogy a ψ állapotban jelen van az $\mid m\rangle$ állapot, hiszen $1 = \langle\psi \mid \psi\rangle = \sum_m \mid c_m \mid^2$. Az (6.7) összefüggés a szuperpozíció elvének egyik megnyilvánulása.

6.1.3 Egyidejű mérhetőség

Jelölje $\hat{a}$ és $\hat{b}$ két fizikai mennyiség operátorát. Ha ezek felcserélhetők , azaz $\hat{a}\hat{b} = \hat{b}\hat{a}$, akkor létezik közös $\{\mid m\rangle\}$ sajátvektor-rendszerük. Ez olyan állapotok ortonormált teljes rendszere, amelyekben mind $\hat{a}-$nak, mind $\hat{b}-$nek jól definiált értéke van, a_m ill. b_m:

$$\hat{a} \mid m\rangle = a_m \mid m\rangle, \quad \hat{b} \mid m\rangle = b_m \mid m\rangle. \tag{6.8}$$

Ilyenkor mindkét mennyiség tetszőleges pontossággal mérhető egyidejűleg. A felcserélhető operátorokkal leírt mennyiségek tehát egyidejűleg mérhetők. A felcserélhetőség úgy is megfogalmazható, hogy az $\hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a} = [\hat{a}, \hat{b}] = 0$ kommutátor zérus.

6.1.4 A határozatlansági reláció

Általában két tetszőleges fizikai mennyiség operátora nem felcserélhető, vagyis $[\hat{a}, \hat{b}] \neq 0$. Ilyenkor a két mennyiség nem mérhető egyidejűleg tetszőleges pontossággal. Pl. ha $\hat{q}$ és $\hat{p}$ kanonikusan konjugált mennyiségek (mint például az x helykoordináta és a p_x impulzuskomponens), akkor

$$[\hat{q}, \hat{p}] = \hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q} = i\hbar\hat{1}. \tag{6.9}$$

Ilyenkor belátható, hogy tetszőleges állapotban a q és p mennyiségek Δq és Δp szórására fennáll a

$$\Delta q \cdot \Delta p \gtrsim \hbar \tag{6.10}$$

egyenlőtlenség. Így jut a kvantummechanika matematikai megfogalmazásában kifejeződésre a határozatlansági elv.

6.1.5 Dinamika

Miután láttuk, hogyan írjuk le a kvantummechanikában az állapotokat és a fizikai mennyiségeket, most már a dinamikai leírás lényegét jelentő mozgásegyenletekre vagyunk kíváncsiak. Ahogy a klasszikus mechanikában, úgy a kvantummechanikában is két módszer kínálkozik a dinamikai leírásra.

1. Az egyik esetben az időbeli fejlődést úgy írjuk le, mint az állapottérnek önmagára való leképezését. Ilyenkor a rendszer állapotvektora mintegy ,,végigsétál"

a Hilbert-tér bizonyos vektorain, miközben a fizikai mennyiségek operátorait változatlanoknak tekintjük. A fizikai mennyiségek várható értéke azért változik időben, mert az állapot változik, amelyben a várható értéket képezzük. Ez a dinamikai leírás az ún. **Schrödinger-kép**. Az állapotvektor időfejlődését a

$$i\hbar\partial_t \mid \psi(t)\rangle = \hat{H} \mid \psi(t)\rangle \tag{6.11}$$

Schrödinger-egyenlet írja le, ahol $\hat{H}$ az időfejlődést megszabó önadjungált operátor, a Hamilton-operátor. A $\hat{H}$ Hamilton-operátor a Hamilton-függvény kvantummechanikai általánosítása, az energia operátora. Sajátértékei az energiasajátértékek és sajátvektorai a rendszer energiasajátállapotai. A Schrödinger-egyenlet formális megoldása:

$$\mid \psi(t)\rangle = \exp\left\{-i\hat{H}t/\hbar\right\} \mid \psi(0)\rangle = \hat{u}(t) \mid \psi(0)\rangle, \tag{6.12}$$

ahol $\hat{u}(t) = \exp\{-i\hat{H}t/\hbar\}$ a rendszer időfejlesztő operátora. Az $\hat{u}(t)$ időfejlesztő operátor unitér. A b fizikai mennyiség várható értéke

$$\bar{b}(t) = \langle\psi(t) \mid \hat{b} \mid \psi(t)\rangle, \tag{6.13}$$

amelyet deriválva

$$\frac{d\bar{b}(t)}{dt} = \langle\psi(t) \mid \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{b} - \hat{b}\hat{H}\right) \mid \psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t) \mid [\hat{b}, \hat{H}] \mid \psi(t)\rangle \tag{6.14}$$

adódik.

2. A másik lehetőség a dinamika leírására, hogy a fizikai mennyiségek operátorait időtől függőnek tekintjük és az állapotot pedig időtől függetlennek. Az időfejlesztő operátor segítségével bevezethetjük a

$$\hat{b}(t) = \hat{u}^{-1}(t)\hat{b}\hat{u}(t) \tag{6.15}$$

időfüggő operátort. Segítségével a fizikai mennyiség várható értéke

$$\bar{b}(t) = \langle\psi(0) \mid \hat{b}(t) \mid \psi(0)\rangle \tag{6.16}$$

alakot ölt. Könnyen meggyőződhetünk deriválással arról, hogy az időfüggő $\hat{b}(t)$ operátor a

$$\partial_t\hat{b}(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{b}(t), \hat{H}] \tag{6.17}$$

mozgásegyenletnek tesz eleget. A dinamika ezen leírása az ún. **Heisenberg-kép.** Ekkor a rendszer állapotát időben változatlannak tekintjük és a fizikai mennyiségek operátorának időbeli változásával írjuk le az időfejlődést.

6.1.6 Mozgásállandók

Az időtől explicit módon nem függő b fizikai mennyiség mozgásállandó, ha operátora felcserélhető a Hamilton-operátorral.

$$\begin{aligned} [\hat{b}, \hat{H}] &= 0 && \text{a Schrödinger-képben,} \\ [\hat{b}(t), \hat{H}] &= 0 \quad (\forall t) && \text{a Heisenberg-képben.} \end{aligned}$$

Ekkor ugyanis a fizikai mennyiség várható értéke állandó:

$$\frac{d\bar{b}}{dt} = 0. \tag{6.18}$$

6.1.7 Stacionárius állapot

Ha a rendszer a $t = 0$ pillanatban energia-sajátállapotban van, vagyis

$$\hat{H} \mid \psi(0)\rangle = E \mid \psi(0)\rangle, \tag{6.19}$$

és a Hamilton-operátor nem függ az időtől, azaz az energia mozgásállandó, akkor a Schrödinger-képben az állapotvektornak csak a fázisa függ az időtől:

$$\mid \psi(t)\rangle = \exp\{-i\hat{H}t/\hbar\} \mid \psi(0)\rangle = \exp\{-iEt/\hbar\} \mid \psi(0)\rangle. \tag{6.20}$$

Az ilyen állapotokat **stacionárius állapot**oknak nevezzük.

6.2 Tiszta és vegyes sokaság. Neumann-féle sűrűségoperátor

6.2.1 Tiszta sokaság

Az előző fejezetből már kitűnik, hogy a kvantummechanikai rendszer még akkor is statisztikus természetű, ha zárt, vagyis jól definiált állapotvektorral jellemezhető. Ilyenkor az állapotvektor az állapotra vonatkozó teljes információt tartalmazza. Azonban valamely mérés eredményére nézve még ekkor is csak valószínűségi kijelentéseket lehet tenni.

Tekintsünk egy zárt N-részecskés rendszert. Ennek Hilbert-terét ábrázolhatjuk négyzetesen integrálható koordináta-hullámfüggvényekkel, $\psi(x) \equiv \psi(x_1 \dots x_N)$. Legyen $\psi^{(i)}(x)$ ortonormált bázisfüggvények egy teljes rendszere. Ekkor

$$\psi(x) = \sum_i c_i \psi^{(i)}(x) \tag{6.21}$$

alakban írható a tetszőleges $\psi(x)$ állapot. Valamely b mennyiség várható értéke:

$$\bar{b} = \int dx \psi^*(x) \hat{b} \psi(x) = \sum_{ij} c_i^* c_j \langle i \mid \hat{b} \mid j \rangle, \tag{6.22}$$

ahol

$$\langle i \mid \hat{b} \mid j \rangle = \int dx \psi^{(i)*}(x) \hat{b} \psi^{(j)}(x).$$

Mindez addig igaz így, amíg a rendszer zárt, azaz rendelkezésre áll a rendszerre vonatkozó teljes információ a rendszer hullámfüggvényében, vagyis amíg $\psi(x)$ teljes bizonyossággal ismert. Ebben az esetben a kvantummechanikai rendszer mikroállapota egyértelműen meghatározott. A rendszerhez rendelhetünk egy statisztikus sokaságot, amelynek minden eleme a szóbanforgó rendszernek pontosan ugyanabban a $\psi(x)$ mikroállapotban lévő példánya. Az ilyen sokaságot **tiszta sokaság**nak nevezzük. Tiszta sokaságban nyilvánvalóan bármely b fizikai mennyiség $\langle b \rangle$ sokaságátlaga pontosan megegyezik a b mennyiség $\psi(x)$ állapotban vett kvantummechanikai várható értékével:

$$\langle b \rangle = \int dx \psi^*(x) \hat{b} \psi(x) = \bar{b}. \tag{6.23}$$

6.2.2 Vegyes sokaság

Ha a kvantummechanikai rendszer nyílt, akkor általában nem beszélhetünk a hullámfüggvényéről. Ilyenkor elvileg is csak azok a w_i valószínűségek lehetnek ismeretesek, amelyekkel a rendszer az egyes $\psi^{(i)}$ állapotait felveszi, ahol $\psi^{(i)}$ ortonormált bázis a Hilbert-térben. Ezek az állapotok akkor lennének a rendszer lehetséges hullámfüggvényei, ha a rendszer zárt lenne. Miután a rendszer a környezettel állandóan kölcsönhatásban van, ez a kölcsönhatás állandóan átmeneteket generál a $\psi^{(i)}$ állapotok között. Természetesen a w_i valószínűségek összege: $\sum_i w_i = 1$.

Ha a nyílt rendszer w_i valószínűséggel fordul elő a $\psi^{(i)}$ állapotban és ebben az állapotban a b mennyiség várható értéke $b_{ii} = \int dx \psi^{(i)*}(x) \hat{b} \psi^{(i)}(x)$, akkor a fizikai mennyiség várható értéke a nyílt rendszerben:

$$\bar{b} \;=\; \sum_i w_i b_{ii}. \tag{6.24}$$

A várható érték képzésének szabálya lehetővé teszi, hogy a rendszernek megfeleltessünk egy sokaságot, amely a rendszer nagyon nagy számú másolatából áll. Ezek között a $\psi^{(i)}$ mikroállapotú példányok w_i valószínűséggel vannak jelen. Ekkor a kvantummechanikai várható érték egyenértékű a sokaságátlaggal: $\langle b \rangle = \bar{b}$. Ez azt jelenti, hogy **a kvantummechanika természetes módon elvezet a fizikai mennyiségek várható értékének statisztikus sokaságátlagként való értelmezéséhez**. A szóbanforgó sokaságot, amelyben a $\psi^{(i)}$ állapotú példányok w_i valószínűséggel fordulnak elő, **vegyes sokaság**nak nevezzük.

A várható érték képzési szabályát úgy is át lehet fogalmazni, hogy a w_i valószínűségeket egy ρ_{ij} diagonális mátrix diagonálisában álló elemeknek tekintjük:

$$\rho_{ij} = w_i \delta_{ij}. \tag{6.25}$$

Ekkor tetszőleges fizikai mennyiség várható értéke

$$\langle b \rangle = \sum_i w_i b_{ii} = \sum_{ij} \rho_{ij} b_{ji} \tag{6.26}$$

alakban írható.

A várható érték kiszámolásának ez a módja független a bázisválasztástól. Tegyük fel ugyanis, hogy a tetszőleges $\varphi_n(x)$ bázist választjuk. Ekkor

$$\psi^{(i)}(x) = \sum_m c_m^{(i)} \varphi_m(x) \tag{6.27}$$

és a várható érték kifejezése

$$\begin{aligned} \langle b \rangle &= \sum_i w_i \int dx \psi^{(i)*}(x) \hat{b} \psi^{(i)}(x) = \sum_{mn} \sum_i w_i c_m^{(i)*} c_n^{(i)} \int dx \varphi_m^*(x) \hat{b} \varphi_n(x) \\ &= \sum_{mn} \rho_{nm} b_{mn} \end{aligned} \tag{6.28}$$

alakot ölt, ahol

$$b_{mn} = \int dx \varphi_m^*(x) \hat{b} \varphi_n(x) \tag{6.29}$$

a fizikai mennyiség mátrixeleme két bázisállapot között és a várható értéket a

$$\rho_{nm} = \sum_i w_i c_m^{(i)*} c_n^{(i)} \tag{6.30}$$

mátrix segítségével kell a tetszőleges új bázisban képezni.

A nyílt rendszer kimerítően jellemezhető a ρ_{mn} **sűrűségmátrix** segítségével. Létezik olyan bázis, amelyben a sűrűségmátrix diagonális. Ebben a bázisban a sűrűségmátrix diagonálisában álló elemek annak a w_i valószínűségei, hogy a rendszer az egyes $\psi^{(i)}$ mikroállapotokat felveszi. A sűrűségmátrix definíció szerint önadjungált, pozitív szemidefinit.

Értelmezzük a sűrűségmátrixot úgy mint a $\hat{\rho}$ önadjungált operátor mátrixát. Ekkor a várható érték

$$\langle b \rangle = \mathrm{Tr} \left(\hat{\rho} \hat{b} \right) \tag{6.31}$$

alakot ölt. A sűrűségoperátor teljesíti a

$$\mathrm{Tr}\, \hat{\rho} = 1 \tag{6.32}$$

feltételt.

6.2.3 Tiszta sokaság sűrűségmátrixa

Vegyük észre, hogy a tiszta sokaság is megadható sűrűségmátrix segítségével. A tiszta sokaság minden eleme ugyanabban a $\psi_0(x)$ állapotban van. Ha olyan bázist választunk, amelynek egyik eleme ez az állapot, akkor a sűrűségmátrix diagonális. A szóbanforgó állapot előfordulási valószínűsége $\rho_{00} = 1$, míg a sűrűségmátrix összes többi eleme zérus, $\rho_{ij} = 0$, ha $(i, j) \neq (0, 0)$.

Érdemes felfigyelni arra, hogy lényeges különbség van a

$$\rho_{ij} = w_i \delta_{ij} \tag{6.33}$$

sűrűségmátrixszal leírt nyílt rendszer és egy olyan zárt rendszer között, amelynek hullámfüggvénye

$$\psi(x) = \sum_i c_i \psi^{(i)}(x), \tag{6.34}$$

ahol $\mid c_i \mid^2 = w_i$. Az utóbbi esetben a sűrűségmátrix a $\psi^{(i)}(x)$ bázisban nem diagonális, hanem, mint az a várható érték (6.22) kifejezéséből leolvasható, $\rho_{ji} = c_i^* c_j$ alakú. A fizikai különbség abból ered, hogy az utóbbi esetben a c_i komplex számoknak nemcsak az abszolút értékei, hanem a fázisaik is jellemzik a rendszert.

6.2.4 Neumann-egyenlet

Meg lehet mutatni, hogy a sűrűségoperátor időbeli változását olyan egyenlet írja le, amely a Liouville-egyenlet,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{H, \rho\}_P \tag{6.35}$$

kvantummechanikai megfelelője. A megfeleltetési elv értelmében egy klasszikus mechanikai rendszer kvantummechanikai általánosítását úgy kapjuk, hogy a fizikai mennyiségeket operátoraikkal helyettesítjük és az $\{\ldots, \ldots\}_P \to (i\hbar)^{-1}[\ldots, \ldots]$ helyettesítéssel élünk. Ennek szellemében a sűrűségoperátorra vonatkozó egyenlet:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \left[\hat{H}, \hat{\rho}\right]. \tag{6.36}$$

Ez a zárt rendszer sűrűségoperátorának időbeli fejlődését leíró Neumann-egyenlet.

6.2.5 Az elektronnyaláb sűrűségmátrixa

Válasszunk a $z-$tengelyt tetszőlegesen. Az elektronoknak két lehetséges állapotuk van. Az egyikben a spin a $z-$tengellyel párhuzamos, a másikban azzal ellentétes irányú. Jelöljük ezeket egy kétdimenziós Hilbert-tér bázisvektoraival:

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

bázisvektoraival. Az elektron egy tetszőleges állapota

$$|\,\theta\rangle = |\uparrow\rangle \cos\theta + |\downarrow\rangle \sin\theta \tag{6.37}$$

alakú, ahol $0 \leq \theta \leq \pi$. A $|\,\theta\rangle$ állapotú elektronhoz tiszta sokaságot kell rendelni, amelynek a sűrűségmátrixa

$$\rho_\theta = \begin{pmatrix} \cos^2\theta & \cos\theta\sin\theta \\ \sin\theta\cos\theta & \sin^2\theta \end{pmatrix}.$$

Az az elektronnyaláb, amelyben elhanyagolható az elektronok közötti kölcsönhatás és amelyben minden elektron a $|\,\theta\rangle$ állapotban van, jó közelítéssel megvalósítja a $\hat{\rho}_\theta$ sűrűségoperátorral adott tiszta sokaságot. Ha az elektronnyaláb teljesen polarizált és minden elektron spinje a $z-$tengely irányába mutat, akkor $\theta = 0$ és

$$\rho_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ellentétes irányban, teljesen polarizált nyaláb ($\theta = \pi/2$) esetén:

$$\rho_{\pi/2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ha az elektronnyaláb $w_\uparrow$ valószínűséggel tartalmaz $|\uparrow\rangle$ és $w_\downarrow$ valószínűséggel pedig $|\downarrow\rangle$ állapotú elektronokat, akkor a nyalábot vegyes sokasággal kell leírni, amelynek sűrűségmátrixa

$$\rho_v = \begin{pmatrix} w_\uparrow & 0 \\ 0 & w_\downarrow \end{pmatrix}.$$

alakú a $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ bázisban. Ez egy részlegesen polarizált nyalábot ír le.

Ha a nyaláb minden elektronja olyan állapotban van, amely egyenlő arányban van lineárisan kombinálva a $|\uparrow\rangle$ és a $|\downarrow\rangle$ állapotokból, akkor a nyalábot tiszta sokaság írja le, amelynek sűrűségmátrixa

$$\rho_{\pi/4} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \qquad \text{vagy} \quad \rho_{3\pi/4} = \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

Ezzel szemben, ha a nyaláb 50-50 %$-$ban tartalmaz $|\uparrow\rangle$ és $|\downarrow\rangle$ állapotú elektronokat, akkor a nyalábot vegyes sokaság írja le, amelynek sűrűségmátrixa:

$$\rho_v = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

Az elektronnyaláb $\vec{P}$ polarizációvektorát úgy szokás definiálni, mint az $\vec{\hat{s}}$ spin irányába mutató "egységvektor", $\vec{\hat{s}}/s$ $(s = 1/2)$ várható értékét:

$$\vec{P} = \frac{1}{s}\mathrm{Sp}\left(\hat{\rho}\vec{\hat{s}}\right). \tag{6.38}$$

Az elektron spinoperátorának komponensei

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{S}_y = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{6.39}$$

Az elektronnyaláb polarizációja tehát

$$\vec{P} = \mathrm{Sp}\left(\hat{\rho}\vec{\hat{\sigma}}\right). \tag{6.40}$$

Számoljuk ki a polarizáció vektorát a $\hat{\rho}_\theta$ sűrűségoperátorral adott tiszta sokaságban:

$$\vec{P}_\theta = \mathrm{Sp}\left(\hat{\rho}_\theta\vec{\hat{\sigma}}\right), \tag{6.41}$$

ahonnan a polarizáció komponensei:

$$(P_\theta)_x = \sin 2\theta, \quad (P_\theta)_y = 0, \quad (P_\theta)_z = \cos 2\theta. \tag{6.42}$$

Tiszta sokaságban a polarizáció vektora egységnyi hosszúságú, $\mid \vec{P}_\theta \mid = 1$. A ρ_θ sűrűségmátrix az $(xz)-$síkban polarizált nyalábot ír le, amelynek polarizációvektora a z-tengellyel 2θ szöget zár be.

Nézzük most azt a nyalábot, amely a $|\uparrow\rangle$ és a $|\downarrow\rangle$ állapotú elektronok ρ_v sűrűségmátrixszal leírt keveréke. Ebben a vegyes sokaságban

$$P_x = 0 \qquad P_y = 0 \qquad P_z = w_\uparrow - w_\downarrow \tag{6.43}$$

adódik a polarizáció vektorára. Példánkban tehát a polarizáció párhuzamos a $z-$tengellyel, de nagysága $0 \leq\mid P_z \mid\leq 1$. A $\mid \vec{P} \mid= 0$ esetben a nyalábot polarizálatlannak nevezzük. A $\mid \vec{P} \mid= 1$ esetek tökéletesen polarizált nyalábot, vagyis tiszta sokaságot jelentenek ($w_\uparrow = 1$, $w_\downarrow = 0$, $P_z = 1$ vagy $w_\uparrow = 0$, $w_\downarrow = 1$, $P_z = -1$).

6.3 Egyensúlyi vegyes sokaságok

A statisztikus fizikai rendszer egyensúlyát az jelenti, hogy minden (időtől explicit módon nem függő) mikroszkopikus fizikai mennyiség várható értéke állandó, azaz a

Neumann-egyenletet megoldó sűrűségoperátor nem függ explicit módon az időtől. Ekkor a Neumann-egyenlet a

$$\left[\hat{H}, \hat{\rho}\right] = 0 \tag{6.44}$$

alakot ölti. **Egyensúlyi állapotban lévő zárt rendszer sűrűségoperátora tehát mozgásállandó,** hiszen felcserélhető a Hamilton-operátorral. Az egyensúlyi zárt rendszer sűrűségmátrixa az energiasajátállapotok által definiált bázisban diagonális.

6.3.1 Mikrokanonikus sokaság

Az egyensúlyi zárt rendszer energiasajátállapotai által definiált bázisban a sűrűségoperátor mátrixa diagonális. Írjuk ezt

$$\rho_{rs} = w_r \delta_{rs} \tag{6.45}$$

alakban. $0 \leq w_r \leq 1$ valós számok, megadják annak a valószínűségét, hogy a rendszer az r kvantumállapotban található. Ha a rendszer energiája az $(E, E + \Delta E)$ intervallumba esik, ahol $\Delta E \ll E$, akkor általában nagyon sok mikroállapot lehetséges. Az $(E, E + \Delta E)$ intervallumba eső energiával rendelkező mikroállapotok száma

$$\Gamma\left(E, X_i, \xi_j\right) = \sum_r \left[\Theta\left(E + \Delta E - E_r(X_i, \xi_j)\right) - \Theta\left(E - E_r(X_i, \xi_j)\right)\right]. \tag{6.46}$$

Itt $E_r(X_i, \xi_j)$ jelöli az r mikroállapot energiáját az X_i additív megmaradó mennyiségek és a ξ_j külső terek rögzített értékei esetén. Következésképpen

$$w_r = \frac{1}{\Gamma\left(E, X_i, \xi_j\right)} \left[\Theta\left(E + \Delta E - E_r(X_i, \xi_j)\right) - \Theta\left(E - E_r(X_i, \xi_j)\right)\right] \equiv w. \tag{6.47}$$

Az $\Gamma\left(E, X_i, \xi_j\right)$ mennyiséget mikrokanonikus állapotösszegnek nevezzük.

A kapott w_r valószínűségek mutatják, hogy minden enrgetikailag lehetséges mikroállapot egyenlően valószínű:

$$\begin{aligned} w_r &= w, \qquad \text{ha} \qquad E \leq E_r \leq E + \Delta E, \\ w_r &= 0, \qquad \text{egyébként.} \end{aligned} \tag{6.48}$$

A normálási feltétel

$$1 = \mathrm{Sp}\hat{\rho} = \sum_r w_r = w \sum_r 1 = w\Gamma(E, , X_i, \xi_j) \tag{6.49}$$

nyilvánvalóan teljesül. A sokaság entrópiája

$$S = -k \sum_r w_r \ln w_r = k \ln \Gamma\left(E, X_i, \xi_j\right). \tag{6.50}$$

6.3.2 Kanonikus sokaság

Felhasználva, hogy a kanonikus sokaságban minden E_r energiájú állapot w_r valószínűsége azonos,

$$w_r = Z^{-1}e^{-\beta E_r}, \tag{6.51}$$

a kanonikus sokaság sűrűségoperátora

$$\hat{\rho} = Z^{-1}\exp\{-\beta\hat{H}\} \tag{6.52}$$

és az állapotösszegre a $\mathrm{Sp}\hat{\rho} = 1$ egyenlőségből

$$Z = \mathrm{Sp}e^{-\beta\hat{H}} \tag{6.53}$$

adódik.

6.3.3 Makrokanonikus sokaság

Hasonlóan, a makrokanonikus sűrűségoperátor:

$$\hat{\rho} = \Xi^{-1}\exp\{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})\} \tag{6.54}$$

és a makrokanonikus állapotösszeg:

$$\Xi = \mathrm{Sp}\exp\{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})\}, \tag{6.55}$$

ahol $\hat{N}$ a rendszer részecskeszám-operátora.

6.3.4 Ideális elektrongáz polarizációja

Számoljuk ki egy T hőmérsékletű ideális elektrongáz polarizációját a $z-$tengely irányába mutató $\vec{\mathcal{H}}$ külső mágneses térben. Az elektron mágneses momentumának operátora $\hat{\vec{\mu}} = -g\hat{\vec{s}}$, ahol $g > 0$ állandó. Az elektron Hamilton-operátora

$$\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}}\vec{\mathcal{H}} = g\vec{\mathcal{H}}\hat{\vec{s}}. \tag{6.56}$$

Energiasajátállapotokat választva bázisnak, a sűrűségmátrix

$$\rho = \begin{pmatrix} w_\uparrow & 0 \\ 0 & w_\downarrow \end{pmatrix}$$

alakú, ahol

$$\begin{aligned} w_\uparrow &= \frac{1}{Z}\langle\uparrow|\exp\{-\beta\hat{H}\}|\uparrow\rangle = \frac{1}{Z}\exp\{-\frac{1}{2}\beta g\mathcal{H}\}, \\ w_\downarrow &= \frac{1}{Z}\langle\downarrow|\exp\{-\beta\hat{H}\}|\downarrow\rangle = \frac{1}{Z}\exp\{\frac{1}{2}\beta g\mathcal{H}\}, \end{aligned} \tag{6.57}$$

és az állapotösszeg

$$\begin{aligned} Z &= \mathrm{Sp}\exp\{-\beta\hat{H}\} = \langle\uparrow|\exp\{-\beta\hat{H}\}|\uparrow\rangle + \langle\downarrow|\exp\{-\beta\hat{H}\}|\downarrow\rangle \\ &= \exp\{-\frac{1}{2}\beta g\mathcal{H}\} + \exp\{\frac{1}{2}\beta g\mathcal{H}\} = 2\cosh\left(\frac{1}{2}\beta g\mathcal{H}\right). \end{aligned} \tag{6.58}$$

A 6.2.5. fejezetben tárgyalt példából tudjuk, hogy a polarizáció a $z-$tengely irányába mutat és

$$\begin{aligned} P_z &= w_\uparrow - w_\downarrow = \frac{1}{Z}\left(e^{-\frac{1}{2}\beta g\mathcal{H}} - e^{\frac{1}{2}\beta g\mathcal{H}}\right) = -\frac{2}{Z}\sinh\left(\frac{1}{2}\beta g\mathcal{H}\right) \\ &= -\tanh\left(\frac{1}{2}\beta g\mathcal{H}\right). \end{aligned} \tag{6.59}$$

Ez azt jelenti, hogy a polarizáció a külső mágneses térrel ellentétes irányba mutat ($P_z < 0$). Alacsony hőmérsékleten ($kT = \frac{1}{\beta} \ll \frac{1}{2}g\mathcal{H}$) $P_z \approx -1$; vagyis csaknem minden elektron spinje beáll a külső tér irányába. A hőmozgás azonban magas ($kT = \frac{1}{\beta} \gg \frac{1}{2}g\mathcal{H}$) hőmérsékleten szétzilálja a külső tér által a rendszerre rákényszerített rendezettséget és a polarizáció nagysága zérushoz tart.

6.4 Összefoglalás

Megmutattuk, hogy a fizikai rendszerek kvantummechanikai tárgyalása automatikusan elvezet általános esetben (nyílt rendszer esetén) a vegyes sokaság fogalmához és a statisztikus fizikai leíráshoz. A vegyes sokaságot úgy építjük fel, hogy megmondjuk, a sokaság hány eleme (a rendszer hány kópiája) van a megfelelő zárt rendszer egyes bázisállapotaiban. Utóbbiak hullámfüggvénnyel is leírhatók. Így a kvantummechanikai várható értékek kiszámolása úgy történik, hogy először az egyes bázisállapotok szerinti („kvantummechanikai") átlagokat számoljuk ki, majd pedig a különböző bázisállapotok statisztikus súlyaival képezett „sokaságátlagot".

7 IDEÁLIS GÁZOK

Az alábbiakban összehasonlítjuk a bozonok és a fermionok ideális gázának termodinamikai viselkedését magas és alacsony hőmérsékleten. Megmutatjuk, hogy magas hőmérsékleten az ideális Boltzmann-gáznak megfelelő viselkedést kapunk. A kvantumeffektusok okozta különbségek a bozonok és a fermionok ideális gáza között alacsony, $T < T_0$ hőmérsékleten jelentősek. Itt kT_0 egy olyan (elképzelt) részecske alapállapoti energiája, amely éppen akkora térfogatú dobozba van bezárva, mint amekkora térfogat jut átlagosan egy részecskére az ideális gázban.

7.1 Egyatomos Boltzmann-gáz

Boltzmann-gázon olyan ideális gázt értünk, amelynek részecskéi a klasszikus mechanika törvényei szerint mozognak. Az alábbiakban a makrokanonikus fázissűrűség felhasználásával kiszámoljuk az egyatomos ideális gáz

- állapotegyenletét és kémiai potenciálját,
- az atomok sebességeloszlását,
- az atomok kinetikus energia szerinti eloszlását.

7.1.1 Állapotegyenlet

A makrokanonikus fázissűrűség

$$\rho(p,q) = \Xi^{-1} \exp\{-\beta(H(p,q) - \mu N)\} \tag{7.1}$$

alakú, ahol a gáz Hamilton-függvénye

$$H(p,q) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_i^2}{2m} \tag{7.2}$$

és a makrokanonikus állapotösszeg

$$\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} \exp\{\beta\mu N\} Z_N(\beta), \tag{7.3}$$

ahol az N-részecskés partíciós függvény

$$Z_N(\beta) \;=\; \frac{1}{N!} \int \prod_{i=1}^{N} \frac{d^3q_i d^3p_i}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left\{-\beta \sum_{j=1}^{N} \frac{\vec{p}_j^2}{2m}\right\}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{N!}\left[\int \frac{d^3q d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left\{-\beta\frac{\vec{p}^2}{2m}\right\}\right]^N \\
&= \frac{1}{N!}\left[V\frac{(2\pi mkT)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}\right]^N .
\end{aligned} \tag{7.4}
$$

A makrokanonikus állapotösszeg értéke a sor összegzése után:

$$
\Xi = \exp\left[e^{\beta\mu} V \frac{(2\pi mkT)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}\right]. \tag{7.5}
$$

A termodinamikai potenciál:

$$
\Omega(T,V,\mu) = -kT\ln\Xi = -e^{\beta\mu}\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}(2\pi m)^{3/2}(kT)^{5/2}. \tag{7.6}
$$

Ebből deriválással nyerjük a nyomást,

$$
p = -\frac{\partial\Omega}{\partial V} = e^{\beta\mu}\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}(2\pi m)^{3/2}(kT)^{5/2} = -\frac{\Omega}{V}, \tag{7.7}
$$

az entrópiát,

$$
S = -\frac{\partial\Omega}{\partial T} \;=\; e^{\beta\mu}\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}(2\pi m)^{3/2}\frac{5}{2}k^{5/2}T^{3/2} + \frac{\mu}{kT^2}\Omega = \left(\frac{5}{2} - \frac{\mu}{kT}\right)\frac{pV}{T}, \tag{7.8}
$$

és a részecskeszámot,

$$
N = -\frac{\partial\Omega}{\partial\mu} = \beta e^{\beta\mu}\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}(2\pi m)^{3/2}(kT)^{5/2} = \frac{pV}{kT}. \tag{7.9}
$$

Így átrendezés után az állapotegyenlet a

$$
pV = NkT \tag{7.10}
$$

alakot ölti. Az ideális gáz entrópiáját átírhatjuk

$$
S = \left(\frac{5}{2} - \frac{\mu}{kT}\right)Nk = \frac{5}{2}Nk - \frac{\mu N}{T} \tag{7.11}
$$

alakba. Ezt felhasználva, az ideális gáz belső energiájára az

$$
U = TS - pV + \mu N = \frac{5}{2}NkT - \mu N - NkT + \mu N = \frac{3}{2}NkT \tag{7.12}
$$

kifejezést nyerjük. Az egyatomos ideális gáz entalpiája pedig:

$$
H = U + pV = \frac{3}{2}NkT + NkT = \frac{5}{2}NkT. \tag{7.13}
$$

Az állandó térfogathoz tartozó fajhő,

$$c_v = \frac{1}{N}\frac{\partial U}{\partial T} = \frac{3}{2}k, \tag{7.14}$$

és az állandó nyomáshoz tartozó fajhő,

$$c_p = \frac{1}{N}\frac{\partial H}{\partial T} = \frac{5}{2}k, \tag{7.15}$$

állandó és a

$$c_p - c_V = k \tag{7.16}$$

összefüggésnek tesz eleget.

A részecskeszám (7.9) kifejezéséből kapjuk meg a kémiai potenciált:

$$\mu \;=\; kT\ln\left\{\frac{NkT}{V}\frac{(2\pi\hbar)^3}{(2\pi m)^{3/2}}(kT)^{-5/2}\right\} = kT\ln\left\{\frac{(2\pi\hbar)^3}{(2\pi m)^{3/2}}\frac{\rho}{(kT)^{5/2}}\right\}. \tag{7.17}$$

A kémiai potenciál a következő tulajdonságokkal rendelkezik:

1.

$$\mu(T\to 0)\to 0, \tag{7.18}$$

2.

$$\begin{aligned} \mu = 0, \quad \text{ha} \qquad p \;&=\; \frac{(2\pi m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}(kT)^{5/2}, \\ \text{azaz} \quad \rho \;&=\; \frac{N}{V} = \frac{(2\pi m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}(kT)^{3/2}, \end{aligned} \tag{7.19}$$

3.

$$\mu \sim -\frac{5}{2}kT\ln(kT) \to -\infty, \quad \text{ha} \quad T\to\infty. \tag{7.20}$$

7.1.2 Maxwell-eloszlás

Az atomok sebességeloszlását az $n_p(\vec{p})$ impulzus-eloszlásból számolhatjuk ki. Mikroszkopikusan a $(\vec{p}, \vec{p}+d^3p)$ impulzus-térfogatelemben lévő részecskék száma:

$$\nu_p(\vec{p})d^3p = \sum_{i=1}^{N}\delta(\vec{p}-\vec{p_i})d^3\vec{p} \tag{7.21}$$

Az impulzuseloszlást a $\nu_p(\vec{p})$ mennyiség sokaságátlagaként kapjuk meg:

$$\begin{aligned}
n_p(\vec{p}) &= \sum_{N=0}^{\infty}\frac{1}{N!}\int\left(\prod_{j=1}^{N}\frac{d^3q_jd^3p_j}{(2\pi\hbar)^3}\right)\Xi^{-1}\exp\{\beta\mu N\}\exp\left\{-\beta\sum_{i=1}^{N}\frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m}\right\}\sum_{k=1}^{N}\delta(\vec{p}-\vec{p}_k) \\
&= \Xi^{-1}\sum_{N=0}^{\infty}\frac{\exp\{\beta\mu N\}}{N!}\frac{V^N}{(2\pi\hbar)^{3N}}\left(\int d^3\vec{p}'\exp\left\{-\beta\frac{\vec{p}'^{\,2}}{2m}\right\}\right)^{N-1} \\
&\quad\cdot\left(\int d^3\vec{p}'\exp\left\{-\beta\frac{\vec{p}'^{\,2}}{2m}\right\}\delta(\vec{p}-\vec{p}')\right) \\
&= \Xi^{-1}\sum_{N=0}^{\infty}\left[\frac{V\exp\{\beta\mu\}}{(2\pi\hbar)^3}\right]^N\frac{1}{N!}\,(2\pi mkT)^{\frac{3}{2}(N-1)}\exp\left\{-\beta\frac{\vec{p}'^{\,2}}{2m}\right\} \\
&= \left(\frac{1}{2\pi mkT}\right)^{3/2}\exp\left\{-\frac{\vec{p}^{\,2}}{2mkT}\right\}. \qquad (7.22)
\end{aligned}$$

A sebességeloszlást az

$$n_v(\vec{v})d^3v = n_p(\vec{p})d^3p \qquad (7.23)$$

összefüggés definiálja. Mivel $\vec{p}=m\vec{v}$,

$$n_v(\vec{v}) = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2}\exp\left\{-\frac{m\vec{v}^2}{2kT}\right\} \qquad (7.24)$$

a sebességeloszlás kifejezése. **Ez az ún. Maxwell-eloszlás** (4. ábra). Könnyen kiszámolhatjuk, hogy

$$\langle\vec{v}^2\rangle = \int n_v(\vec{v})\vec{v}^2d^3v = \frac{3kT}{m} \qquad (7.25)$$

és

$$\langle v_x^2\rangle = \int n_v(\vec{v})v_x^2d^3v = \frac{kT}{m}. \qquad (7.26)$$

7.1.3 Kinetikus energia eloszlás

A kinetikus energia eloszlást

$$n_\varepsilon(\varepsilon)d\varepsilon = \int_{(\Omega_{\vec{p}})} n_p(\vec{p})d^3p \qquad (7.27)$$

definiálja, ahol az integrálás az impulzustérben a 4π- térszögre történik. Mivel

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} \qquad \text{és} \qquad pdp = md\varepsilon, \qquad (7.28)$$

írhatjuk, hogy

$$n_\varepsilon(\varepsilon) = \frac{1}{(2\pi mkT)^{3/2}}e^{-\beta\varepsilon}(2m\varepsilon)^{1/2}m4\pi = \frac{2}{\sqrt{\pi(kT)^3}}\sqrt{\varepsilon}e^{-\beta\varepsilon}. \qquad (7.29)$$

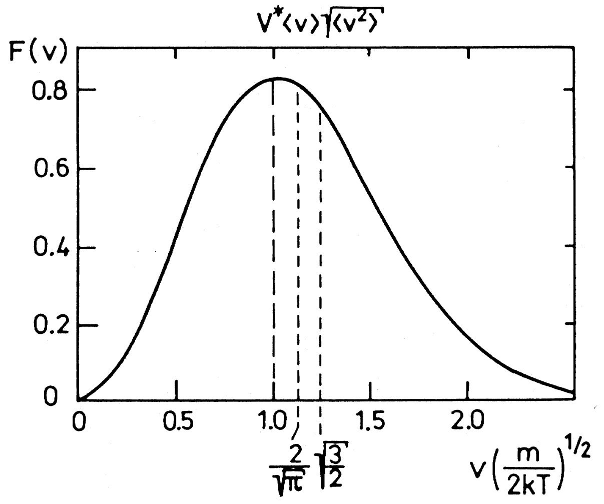

Figure 4: Az $F(v) = n_v(v)v^2$ Maxwell-eloszlás. Az ábrán fel van tüntetve a legvalószínűbb sebesség, v^*, a sebesség nagyságának várható értéke, $\langle|\vec{v}|\rangle$, és a sebesség négyzete várható értékének négyzetgyöke, $\langle\vec{v}^{\,2}\rangle^{1/2}$.

7.2 Részecskeazonosság a kvantummechanikában

A továbbiakban meg szeretnénk vizsgálni, hogyan viselkednek az ideális gázok, ha a kvantummechanika törvényei szerint mozognak a gázrészecskék. Kíváncsiak vagyunk, milyen körülmények között kapjuk vissza a klasszikus Boltzmann-gáznak megfelelő viselkedést és mikor tapasztalunk ahhoz képest lényeges eltérést. Mielőtt azonban rátérhetünk ezeknek a kérdéseknek a tisztázására, azzal kell foglalkoznunk, hogy hogyan írja le a kvantummechanika az azonos részecskék rendszerét. Így tulajdonképpeni célunkat a következő fejezetre halasztjuk és most ismét egy kis kvantummechanika következik.

A kvantummechanika szerint két részecske azonossága azt jelenti, hogy nincsen olyan fizikai mennyiség, amelynek segítségével a két részecskét meg lehetne különböztetni egymástól. Így, ha egy rendszeren belül azonos részecskék vannak, akkor nem lehet közöttük semmiféleképpen különbséget tenni. Megszámozni sem lehet őket, mert nincs olyan ismérv, amely alapján különbséget tudnánk köztük tenni.

7.2.1 A részecskeazonosság és a hullámfüggvény

A részecskeazonosság kvantummechanikai megfogalmazása azt jelenti, hogy a hullámfüggvény abszolútértékének négyzete invariáns bármely két részecske felcserélésével szemben:

$$| \Psi(x_1 \dots x_j \dots x_k \dots x_N) |^2 = | \Psi(x_1 \dots x_k \dots x_j \dots x_N) |^2 . \tag{7.30}$$

Ez úgy lehetséges, hogy

$$\Psi(x_1 \dots x_j \dots x_k \dots x_N) = \theta \Psi(x_1 \dots x_k \dots x_j \dots x_N), \tag{7.31}$$

ahol θ egységnyi abszolút értékű komplex szám. A j-edik és a k-adik részecske ismételt felcserélése visszavezet az eredeti hullámfüggvényhez. Másrészt a két egymásutáni felcserélés következtében a hullámfüggvény a θ^2 faktorral szorzódik. Ezért $\theta^2 = 1$ kell teljesüljön, azaz $\theta = \pm 1$ a lehetséges értékek. Az azonos részecskék rendszerének hullámfüggvénye vagy nem vált előjelet, vagy előjelet vált tetszőleges két részecske felcserélése esetén.

7.2.2 Részecskeazonosság és spin

A részecskék a spinjük tekintetében két nagy osztályba sorolhatók:

1. **Bozonok**, amelyeknek a spinje egész: $s = 0, 1\hbar, 2\hbar, \dots$
2. **Fermionok**, amelyeknek a spinje félegész: $s = \frac{1}{2}\hbar, \frac{3}{2}\hbar, \dots$

Az azonos részecskék rendszere hullámfüggvényének a részecskék felcserélésével szemben mutatott tulajdonságai és a részecskék spinje között az alábbi **természeti törvény** teremt szoros (egyértelmű) kapcsolatot: **Azonos bozonok rendszerének hullámfüggvénye bármely két részecske felcserélésével szemben szimmetrikus, az azonos fermionok rendszerének hullámfüggvénye bármely két részecske felcserélésével szemben antiszimmetrikus.** Bozonok esetén $\theta = 1$, fermionok esetén $\theta = -1$.

7.2.3 Sokrészecskés rendszer állapotainak betöltési számokkal történő jellemzése

Válasszunk egy $\{\varphi_m(x)\}$ egy-részecskés bázist. Ez állhat pl. egyetlen szabad részecske Hamilton-operátorának sajátfüggvényeiből. Ezekről az állapotokról mint egy-részecskés állapotokról beszélünk. Ekkor

$$\Psi(x_1 \dots x_N) = \sum_{m_1} \dots \sum_{m_N} c(m_1 \dots m_N) \varphi_{m_1}(x_1) \dots \varphi_{m_N}(x_N) \tag{7.32}$$

és

$$c(m_1 \dots m_j \dots m_k \dots m_N) = \theta c(m_1 \dots m_k \dots m_j \dots m_N). \tag{7.33}$$

Az utóbbi összefüggés mutatja, hogy az állapotnak a $c(m_1 \dots m_N)$ együtthatókkal való leírása fölösleges (nem fizikai) információt tartalmaz: arra a kérdésre válaszol, hogy melyik részecske melyik egy-részecskés állapotban van. Valójában a részecske-azonosság miatt csak annak a kérdésnek van értelme, hogy hány részecske van az egyes egy-részecskés állapotokban, vagyis melyek az egyes egy-részecskés állapotok n_i betöltési számai. Jelöljük $\varphi(n_1, n_2, \dots)$-vel az $n_1, n_2, \dots$ betöltési számokkal jellemzett állapotot, ahol

$$\sum_i n_i = N \tag{7.34}$$

a részecskeszám, amelynek értéke $N = 0, 1, 2, \dots$ lehet. A különböző N részecskeszámhoz tartozó állapotok teljes rendszerét a bozonok és a fermionok esetén különbözőképpen kell értelmezni.

7.2.4 Azonos bozonok rendszere

Részecskekeltő $\hat{a}_m^+$ és **részecskeeltüntető** $\hat{a}_m$ **operátorok**at definiálunk az alábbi **kommutációs szabályok**kal:

$$[\hat{a}_m, \hat{a}_{m'}] = 0, \quad [\hat{a}_m^+, \hat{a}_{m'}^+] = 0, \quad [\hat{a}_m, \hat{a}_{m'}^+] = \delta_{mm'}, \tag{7.35}$$

ahol m az egyrészecske-állapotok kvantumszámainak összességét jelöli. Ezekből megszerkesztjük az $\hat{n}_m = \hat{a}_m^+ \hat{a}_m$ **betöltési szám operátor**t, **amelynek a lehetséges sajátértékeire** $n_m = 0, 1, 2, \dots$ **nem negatív egész számok adódnak.** Értelmezzük továbbá a $\hat{N} = \sum_m \hat{n}_m$ **részecskeszám-operátor**t. Ennek sajátértéke $N = \sum_m n_m = 0, 1, \dots,$

Létezik egy **vákuumállapot**, amely nem tartalmaz részecskét, azaz amelyet az eltüntető operátorok zérusba visznek:

$$\hat{a}_m \mid 0\rangle = 0, \quad \forall m. \tag{7.36}$$

A vákuumállapot a betöltési számoperátoroknak zérus sajátértékeihez tartozó sajátállapota. Ez az az állapot, amely egyetlen részecskét sem tartalmaz.

Hattassuk a keltő operátorok valamelyikét a vákuumállapotra, akkor a

$$|n_m = 1\rangle \equiv \varphi(0, \dots, 0, n_m = 1, 0, \dots, 0) \quad = \quad \hat{a}_m^+ |0\rangle \tag{7.37}$$

egyrészecskés állapotot kapjuk, amely az $\hat{n}_m$ operátornak $n_m = 1$ betöltési számhoz tartozó sajátállapota és az $\hat{N}$ részecskeszám operátornak az $N = 1$ sajátértékhez tartozó sajátállapota. További keltő operátorok megfelelő számú alkalmazásával a vákuumállapotból tetszőleges N**-részecskés állapot**ot előállíthatunk:

$$|n_{m_1}, \dots, n_{m_s}\rangle \quad \equiv \quad \frac{1}{\sqrt{n_{m_1}! \dots n_{m_s}!}} \left(\hat{a}_{m_1}^+\right)^{n_{m_1}} \dots \left(\hat{a}_{m_s}^+\right)^{n_{m_s}} \mid 0\rangle, \tag{7.38}$$

amely állapotban az $m_1, m_2, \ldots, m_s$ egyrészecskés állapotok vannak betöltve, rendre n_{m_1}, n_{m_2}, …, n_{m_s} részecskével. A számfaktorok az állapotok ortonormáltságát biztosítják. Tetszőleges betöltési szám sajátállapotra a keltő és eltüntető operátorok hatása a következő:

$$\begin{aligned} \hat{a}_m\varphi(\ldots,n_m,\ldots) &= n_m^{1/2}\varphi(\ldots,n_m-1,\ldots), \\ \hat{a}_m^+\varphi(\ldots,n_m,\ldots) &= (n_m+1)^{1/2}\varphi(\ldots,n_m+1,\ldots). \end{aligned} \tag{7.39}$$

7.2.5 Azonos fermionok rendszere

Az azonos fermionok rendszerének részecskeszám sajátállapotait hasonlóan szerkesztjük meg mint az azonos bozonok rendszereit. A különbség abban van, hogy **a keltő és az eltüntető operátorok antikommutátor-relációknak tesznek eleget:**

$$\{\hat{a}_m,\hat{a}_{m'}\} = \{\hat{a}_m^+,\hat{a}_{m'}^+\} = 0 \qquad \{\hat{a}_m,\hat{a}_{m'}^+\} = \delta_{mm'}. \tag{7.40}$$

Ebből következően az $\hat{n}_m = \hat{a}_m^+\hat{a}_m$ **betöltési számoperátor sajátértékei** $n_m = 0$ **és** 1. **Ez azt jelenti, hogy minden egyrészecskés állapotban legfeljebb csak egy részecske tartózkodhat. Ez a Pauli-elv.**

A $|0\rangle$ vákuumállapot most is az az állapot, amelyik nem tartalmaz részecskét, azaz amelyre $\hat{a}_m|0\rangle = 0$ tetszőleges m esetén. Az N-részecskés állapot általános alakja:

$$\hat{a}_{m_1}^+\cdots\hat{a}_{m_N}^+|0\rangle, \tag{7.41}$$

ahol m_1, m_2, …, m_N páronként különböző egyrészecskés állapotok.

7.3 Ideális Fermi- és Bose-gáz

A gázok viselkedése alacsony hőmérsékleten általában lényegesen eltér a klasszikus részecskék gázának a viselkedésétől. Alacsony hőmérsékleten ugyanis a kvantummechanikai effektusok fontos szerepet játszanak.

Vizsgáljunk a V térfogatú ideális gázt. A gázrészecskék nem hatnak kölcsön egymással és energiájuk az $\varepsilon_k(k = 0,1,2,\ldots)$ diszkrét értékeket veheti fel. A gáz Hamilton-operátora

$$\hat{H} = \sum_{k=0}^{\infty}\varepsilon_k\hat{n}_k = \sum_{k=0}^{\infty}\varepsilon_k\hat{a}_k^+\hat{a}_k \tag{7.42}$$

és részecskeszám-operátora

$$\hat{N} = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{n}_k = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{a}_k^+ \hat{a}_k, \tag{7.43}$$

ahol $\hat{n}_k = \hat{a}_k^+ \hat{a}_k$ a k-adik egyrészecskés állapotban lévő részecskék számának operátora, az ún. betöltési szám operátor. Az $\hat{a}_k$ operátor és adjungáltja az azonos részecskék rendszerére vonatkozó általános megállapításaink szerint az alábbi csererelációkat elégítik ki:

1. bozonok, azaz $s = 0, 1, 2, \ldots$ egész spinű részecskék esetén

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}] = 0, \qquad \left[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^+\right] = \delta_{kk'}; \tag{7.44}$$

2. fermionok, azaz $s = 1/2, 3/2, \ldots$ feles spinű részecskék esetén

$$\{\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}\} = 0, \qquad \left\{\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^+\right\} = \delta_{kk'}. \tag{7.45}$$

Az $\hat{n}_k$ részecskeszám-operátor sajátértékei

1. bozonok esetén $n_k = 0, 1, 2, \ldots$;
2. fermionok esetén $n_k = 0, 1$.

Az utóbbi azt jelenti, hogy egy kvantumállapot csak egy fermionnal tölthető be. Ez a Pauli-elv. Jelöljük a rendszer vákuumállapotát $\mid 0\rangle$-val. Ez az az állapot, amelyből nem lehet részecskét elvenni,

$$\hat{a}_k \mid 0\rangle = 0 \tag{7.46}$$

semmilyen k esetén. Az $\mid 1_k\rangle = \hat{a}_k^+ \mid 0\rangle$ állapot egyrészecskés, mert eleget tesz az alábbi összefüggéseknek:

$$\hat{H} \mid 1_k\rangle = \varepsilon_k \mid 1_k\rangle, \tag{7.47}$$
$$\hat{N} \mid 1_k\rangle = \mid 1_k\rangle, \tag{7.48}$$
$$\hat{n}_k \mid 1_k\rangle = \mid 1_k\rangle. \tag{7.49}$$

Az $\hat{a}_k^+$ operátor tehát egy ε_k energiájú részecskét kelt a vákuumból. Az $\hat{a}_k$ operátor pedig eltüntet egy ε_k energiájú részecskét bármely olyan állapotból, amelyben a k-adik egyrészecskés állapot be van töltve.

Az ideális gáz tetszőleges részecskeszám- és energia-sajátállapotát egyrészecske-állapotok szorzataként lehet előállítani, mert a részecskék nem hatnak kölcsön:

$$\mid n_0, n_1, \ldots\rangle = \mid n_0\rangle \mid n_1\rangle \ldots \tag{7.50}$$

Itt n_0, n_1, stb. az $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \ldots$ energiájú egyrészecskés állapotokban található részecskék száma.

7.3.1 Az ideális Bose-gáz makrokanonikus állapotösszege

A makrokanonikus partíciós függvény ideális bozongáz esetén az alábbi alakot ölti:

$$\begin{aligned}
\Xi &= \mathrm{Sp}\exp\left\{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})\right\} = \sum_{\{n_i\}}\langle n_0 n_1 \ldots \mid \exp\left\{-\beta\sum_{j=0}^{\infty}(\varepsilon_j-\mu)\hat{n}_j\right\} \mid n_0 n_1 \ldots\rangle \\
&= \sum_{n_0=0}^{\infty}\sum_{n_1=0}^{\infty}\ldots\langle n_0 \mid \langle n_1 \mid \ldots \mid \exp\left\{-\beta\sum_{j=0}^{\infty}(\varepsilon_j-\mu)\hat{n}_j\right\} \mid n_0\rangle \mid n_1\rangle \ldots \\
&= \prod_{j=0}^{\infty}\left\{\sum_{n_j=0}^{\infty}\langle n_j \mid \exp\{-\beta(\varepsilon_j-\mu)\hat{n}_j\} \mid n_j\rangle\right\} \\
&= \prod_{j=0}^{\infty}\left\{\sum_{n_j=0}^{\infty}\exp\{-\beta(\varepsilon_j-\mu)n_j\}\right\} = \prod_{j=0}^{\infty}\left[1-\exp\{-\beta(\varepsilon_j-\mu)\}\right]^{-1}. \qquad (7.51)
\end{aligned}$$

Vegyük észre, hogy a szorzat akkor és csak akkor nem divergál, ha valamennyi tényezője konvergens geometriai sor, vagyis

$$\varepsilon_j > \mu \qquad (7.52)$$

minden j-re. Ez azt jelenti, hogy a bozongáz kémiai potenciálja

$$\mu < \varepsilon_0. \qquad (7.53)$$

Ha a legalacsonyabban fekvő egyrészecske energiát zérusnak választjuk, akkor

$$\mu < 0. \qquad (7.54)$$

7.3.2 Az ideális Fermi-gáz makrokanonikus állapotösszege

Ideális Fermi-gáz állapotösszegét hasonlóan számolhatjuk ki, mint a Bose-gázét. A különbség csupán az, hogy a betöltési számokra történő összegzés csak az $n_j = 0, 1$ értékre való összegzést jelent a Pauli-elvnek megfelelően:

$$\begin{aligned}
\Xi &= \sum_{n_0=0,1}\sum_{n_1=0,1}\ldots\langle n_0 \mid \langle n_1 \mid \ldots \mid \exp\left\{-\beta\sum_{j=0}^{\infty}(\varepsilon_j-\mu)\hat{n}_j\right\} \mid n_0\rangle \mid n_1\rangle \ldots \\
&= \prod_{j=0}^{\infty}\left\{\sum_{n_j=0,1}\langle n_j \mid \exp\{-\beta(\varepsilon_j-\mu)\hat{n}_j\} \mid n_j\rangle\right\} = \prod_{j=0}^{\infty}\left(1+\exp\{-\beta(\varepsilon_j-\mu)\}\right). \qquad (7.55)
\end{aligned}$$

7.3.3 Termodinamikai potenciál

Az ideális Bose- és Fermi-gáz termodinamikai potenciálja

$$\Omega = -kT \ln \Xi = \pm kT \sum_{j=0}^{\infty} \ln \{1 \mp \exp\{-\beta(\varepsilon_j - \mu)\}\} \tag{7.56}$$

alakban írható, ahol a felső előjel Bose-gázra, az alsó előjel Fermi-gázra vonatkozik. Az összegzés kiterjed valamennyi egyrészecske állapotra.

Ha az ideális gáz térfogatát minden határon túl növeljük, $V \to \infty$, akkor az egyrészecske-állapotok energiái majdnem folytonosan változnak:

$$\varepsilon_p = \frac{\vec{p}^2}{2m}. \tag{7.57}$$

Az egyrészecske-állapotokra való összegzés integrálással helyettesíthető:

$$\sum_j \to g \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p, \tag{7.58}$$

itt g az impulzus-sajátállapotok spin és egyéb kvantumszámok szerinti elfajultságát veszi figyelembe. Az egyrészecske-állapotok energiasűrűsége

$$g(\varepsilon)d\varepsilon = g\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} 4\pi p^2 dp = g\frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \varepsilon^{1/2} d\varepsilon. \tag{7.59}$$

A termodinamikai potenciálban az összegzést integrálással helyettesítve kapjuk, hogy

$$\Omega = \pm kTg\frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon^{1/2} \ln\{1 \mp \exp\{-\beta(\varepsilon - \mu)\}\}. \tag{7.60}$$

Parciális integrálás után:

$$\Omega = -\frac{2}{3}g\frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{3/2}}{\exp\{\beta(\varepsilon-\mu)\} \mp 1}. \tag{7.61}$$

Innen parciális deriválással adódik a nyomás,

$$p = -\frac{\partial \Omega}{\partial V} = -\frac{\Omega}{V} = \frac{2}{3}g\frac{1}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} \mp 1}, \tag{7.62}$$

az entrópia

$$\begin{aligned} S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T} &= -\frac{\Omega}{T} \mp kTg\frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon^{1/2} \frac{\mp(\varepsilon-\mu)\frac{1}{kT^2}e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}}{1 \mp e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}} \\ &= -\frac{\Omega}{T} + \frac{1}{T}g\frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{1/2}(\varepsilon-\mu)}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} \mp 1}, \end{aligned} \tag{7.63}$$

és a részecskeszám,

$$N = -\frac{\partial\Omega}{\partial\mu} = g\frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty d\varepsilon\frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}\mp 1}. \tag{7.64}$$

A részecskeszámra vonatkozó egyenlet alapján meghatározható a μ kémiai potenciál mint a hőmérséklet függvénye.

Az ideális Bose- és Fermi-gáz belső energiája

$$U = TS - pV + \mu N = \int_0^\infty d\varepsilon\frac{g(\varepsilon)\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}\mp 1}. \tag{7.65}$$

Ezt összehasonlítva a nyomás kifejezésével, az

$$pV = \frac{2}{3}U \tag{7.66}$$

állapotegyenletet kapjuk.

Az állapotegyenlet segítségével az entrópiát

$$S = \frac{pV + U - \mu N}{T} = \frac{1}{T}\left(\frac{5}{3} - \mu N\right) \tag{7.67}$$

alakba írhatjuk.

7.3.4 Átlagos betöltési számok

Az egyrészecske-állapotok átlagos betöltési száma az $\hat{n}_k$ operátor várható értéke:

$$\begin{aligned}
\bar{n}_k &= \mathrm{Sp}(\hat{\rho}\hat{n}_k) \\
&= \Xi^{-1}\sum_{\{n_j\}}\langle n_0 \mid \langle n_1 \mid \ldots \mid \exp\{-\beta(\varepsilon_0-\mu)\hat{n}_0\}\exp\{-\beta(\varepsilon_1-\mu)\hat{n}_1\}\ldots \\
&\ldots\ \hat{n}_k\exp\{-\beta(\varepsilon_k-\mu)\hat{n}_k\}\ldots \mid n_0\rangle \mid n_1\rangle \ldots
\end{aligned} \tag{7.68}$$

Itt felhasználtuk, hogy $[\hat{n}_k, \hat{n}_{k'}] = 0$. Bozonok esetén az átlagos betöltési szám:

$$\begin{aligned}
\bar{n}_k &= \Xi^{-1}\left(\prod_{j\neq k}\sum_{n_j=0}^\infty \langle n_j \mid \exp\{-\beta(\varepsilon_j-\mu)\hat{n}_j\} \mid n_j\rangle\right) \\
&\cdot\ \sum_{n_k=0}^\infty \langle n_k \mid \hat{n}_k\exp\{-\beta(\varepsilon_k-\mu)\hat{n}_k\} \mid n_k\rangle \\
&= \frac{\sum_{n_k=0}^\infty n_k\exp\{-\beta(\varepsilon_k-\mu)n_k\}}{\sum_{n_k=0}^\infty \exp\{-\beta(\varepsilon_k-\mu)n_k\}} = \frac{\partial}{\partial(\beta\mu)}\ln\sum_{n_k=0}^\infty \exp\{-\beta(\varepsilon_k-\mu)n_k\} \\
&= \frac{\partial}{\partial(\beta\mu)}\ln\frac{1}{1-\exp\{-\beta(\varepsilon_k-\mu)\}} = -\frac{-\exp\{-\beta(\varepsilon_k-\mu)\}}{1-\exp\{-\beta(\varepsilon_k-\mu)\}} \\
&= \frac{1}{\exp\{\beta(\varepsilon_k-\mu)\}-1}.
\end{aligned} \tag{7.69}$$

Fermionok esetén az átlagos betöltési szám;

$$
\begin{aligned}
\bar{n}_k &= \Xi^{-1}\left(\prod_{j\neq k}\sum_{n_j=0,1}\langle n_j \mid \exp\{-\beta(\varepsilon_j-\mu)\hat{n}_j\} \mid n_j\rangle\right) \\
&\cdot \sum_{n_k=0,1}\langle n_k \mid \hat{n}_k \exp\{-\beta(\varepsilon_k-\mu)\hat{n}_k\} \mid n_k\rangle \\
&= \frac{\sum_{n_k=0,1} n_k \exp\{-\beta(\varepsilon_k-\mu)n_k\}}{\sum_{n_k=0,1} \exp\{-\beta(\varepsilon_k-\mu)n_k\}} \\
&= \frac{\exp\{-\beta(\varepsilon_k-\mu)\}}{1+\exp\{-\beta(\varepsilon_k-\mu)\}} = \frac{1}{\exp\{\beta(\varepsilon_k-\mu)\}+1}. \qquad (7.70)
\end{aligned}
$$

Az egyrészecske-állapotok átlagos betöltési számának és az állapotsűrűségnek a felhasználásával átírjuk a termodinamikai állapotfüggvényeket az alábbi alakba:

$$\Omega = -\frac{2}{3}\int_0^\infty d\varepsilon g(\varepsilon)\bar{n}(\varepsilon)\varepsilon \qquad (7.71)$$

$$U = \int_0^\infty d\varepsilon g(\varepsilon)\bar{n}(\varepsilon)\varepsilon \qquad (7.72)$$

$$N = \int_0^\infty d\varepsilon g(\varepsilon)\bar{n}(\varepsilon) \qquad (7.73)$$

$$S = \frac{1}{T}\int_0^\infty d\varepsilon g(\varepsilon)\bar{n}(\varepsilon)\left(\frac{5}{3}\varepsilon-\mu\right). \qquad (7.74)$$

Ezek szerint a részecskeszámot úgy kapjuk meg, hogy a $g(\varepsilon)d\varepsilon$ számú egyrészecske állapotban jelenlevő részecskék $g(\varepsilon)\bar{n}(\varepsilon)d\varepsilon$ átlagos számát összegezzük valamennyi infinitezimális energiaintervallumra. A gáz belső energiája az egyes részecskék energiáinak összege. Az entrópiához minden ε energiájú részecske $\frac{1}{T}(\frac{5}{3}\varepsilon-\mu)$ járulékot ad.

7.3.5 Bose- és Fermi-gáz magas hőmérsékleten

Az ideális Bose-gáz is és az ideális Fermi-gáz is az $\exp\{\mu/kT\} \ll 1$ határesetben hasonlóan viselkedik mint a klasszikus Boltzmann-gáz. Meg lehet mutatni, hogy ez éppen a magas hőmérsékletű gáz határesete.

Az állapotegyenlet az $e^{\mu/kT} \ll 1$ esetben az alábbi alakot ölti:

$$pV \approx NkT\left(1 \pm \frac{\pi^{3/2}}{2g}\frac{N\hbar^3}{V(mkT)^{3/2}}\right), \qquad (7.75)$$

ahol a felső előjel Bose-gázra; az alsó előjel Fermi-gázra vonatkozik. A kémiai potenciálra ugyanakkor a

$$\mu = kT\ln\left(\frac{N}{V}\frac{(2\pi\hbar)^3}{g(2\pi mkT)^{3/2}}\right) \qquad (7.76)$$

közelítő kifejezés adódik. Látjuk, hogy $T \to \infty$ esetén visszakapjuk az ideális Boltzmann-gáz állapotegyenletét és kémiai potenciálját. Ugyanakkor $V =$ áll. esetén a nyomás a Bose-gázban kisebb, a Fermi-gázban pedig nagyobb mint a klasszikus Boltzmann-gázban.

7.3.6 Elfajult Bose-gáz. Bose-kondenzáció

Vizsgáljuk $N =$ áll. számú részecskét tartalmazó Bose-gáz viselkedését alacsony hőmérsékleten. Az egyrészecske-állapotok átlagos betöltési száma nem lehet negatív. Ebből következik, hogy

$$\varepsilon_j > \mu. \tag{7.77}$$

Ha a legkisebb energiájú egyrészecske-állapot, az alapállapot energiáját zérusnak választjuk, akkor $\mu < 0$ adódik. Ha $\mu \to 0^-$, akkor az alapállapot betöltési száma $n_0 \to \infty$. Ez azt jelenti, hogy a bozonok mind az alapállapotot kezdik benépesíteni és a magasabb energiájú állapotok pedig kiürülnek. Ez a jelenség a **Bose-kondenzáció.**

A részecskeszámra vonatkozó egyenletből meghatározhatjuk azt a T_0 hőmérsékletet, amelynél a kémiai potenciál zérussá válik:

$$\mu(T_0) = 0. \tag{7.78}$$

A részecskeszám kifejezéséből az alábbi összefüggés adódik, ha bevezetjük az $x = \varepsilon/kT_0$ integrálási változót:

$$\frac{N}{V} = \frac{g}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\varepsilon/kT_0}-1} = \frac{g}{4\pi^2}\left(\frac{2mkT_0}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{e^x-1}. \tag{7.79}$$

Az itt szereplő határozott integrál számértéke:

$$\int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{e^x-1} = 2.612. \tag{7.80}$$

A kémiai potenciál tehát

$$T_0 = \frac{\hbar^2}{2mk}\left[\frac{4\pi^2}{g\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}\right]^{2/3}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} = \frac{3.31}{g^{2/3}}\frac{\hbar^2}{mk}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} \tag{7.81}$$

hőmérsékleten válik zérussá. Ennek van közvetlen fizikai jelentése. A kT_0 energia nagyságrendileg megegyezik egy V/N térfogatra lokalizált részecske zérusponti energiájával. Csakugyan egy $a = (V/N)^{1/3}$ oldalú dobozba zárt részecske alapállapoti energiája

$$E_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}. \tag{7.82}$$

Amikor a hőmérséklet összemérhetővé válik az alapállapot ε_0 energiájával, akkor az alapállapot betöltési száma nagy értékeket vesz fel. Ebből következik, hogy a termodinamikai potenciál kiszámításakor nem élhetünk azzal a közelítéssel, hogy a diszkrét egyrészecske-spektrumot folytonossal helyettesítjük. Az állapotsűrűség zérushoz tart $\varepsilon \to 0$ esetén, s így az energia szerinti integrálás során elveszítjük az alapállapot járulékát. Az integrál-kifejezést használhatjuk továbbra is azonban a gerjesztett állapotú részecskék járulékainak kiszámítására. Így például a gerjesztett állapotú részecskék száma $T \le T_0$ esetén

$$N_{gerj} = V\frac{g}{4\pi^2}\left(\frac{2mkT}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty dx\frac{x^{1/2}}{e^x-1} = N\left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}. \tag{7.83}$$

Az alapállapotban levő részecskék száma így

$$N_0 = N - N_{gerj} = N\left[1-\left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}\right]. \tag{7.84}$$

Ugyanakkor a gáz energiája teljes egészében a gerjesztett állapotokban lévő részecskéktől származik:

$$\begin{aligned} U &= V\frac{g}{4\pi^2}\left(\frac{2mkT}{\hbar^2}\right)^{3/2}kT\int_0^\infty dx\frac{x^{3/2}}{e^x-1} \\ &= 0.770NkT\left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2} = 0.770N_{gerj}kT. \end{aligned} \tag{7.85}$$

A gáz nyomása $T < T_0$ hőmérsékleten

$$p = \frac{2}{3}\frac{U}{V} = 0.513\frac{N}{V}kT\left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2} = 0.0851\frac{m^{3/2}}{V}(kT)^{5/2}\frac{g}{\hbar^3}, \tag{7.86}$$

és az állandó térfogati fajhő:

$$c_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{VN}\frac{1}{N} = \frac{5}{2}\left[0.770k\left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}\right]. \tag{7.87}$$

Látjuk, hogy mind a nyomás, mind az állandó térfogati fajhő zérushoz tart abszolút zérusfokon. Másrészt pedig

$$c_v(T_0) = \frac{3.85}{2}k. \tag{7.88}$$

A kémiai potenciál eltűnését $T = T_0$ hőmérsékleten azzal a közelítéssel élve kaptuk, hogy az egyrészecske-állapotokra való összegzést integrálással helyettesítettük. Ez azonban $T \approx T_0$ esetén már nem jó közelítés. Kicsit pontosabban határozhatjuk meg a kémiai potenciált, ha előző eredményeinket egy iteráció első lépésének tekintjük. Az iteráció következő lépésében azt mondhatjuk, hogy az alapállapot átlagos betöltési száma

$$n_0 = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1} = N\left[1 - \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}\right], \tag{7.89}$$

ahonnan a kémiai potenciálra

$$\mu \;=\; -kT \ln\left\{1 + \frac{1}{N}\left[1 - \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2}\right]^{-1}\right\} \sim -kT\frac{1}{N}, \qquad \text{ha} \quad T \to 0 \tag{7.90}$$

tulajdonság adódik. Makroszkopikus rendszer esetében tehát a kémiai potenciál $T \leq T_0$ hőmérsékleten $1/N$ rendben zérusnak tekinthető.

A kémiai potenciál és a nyomás hőmérséklet-függését $N/V =$ áll. esetén a 5. ábrán hasonlítjuk össze a klasszikus Boltzmann-gáz esetével.

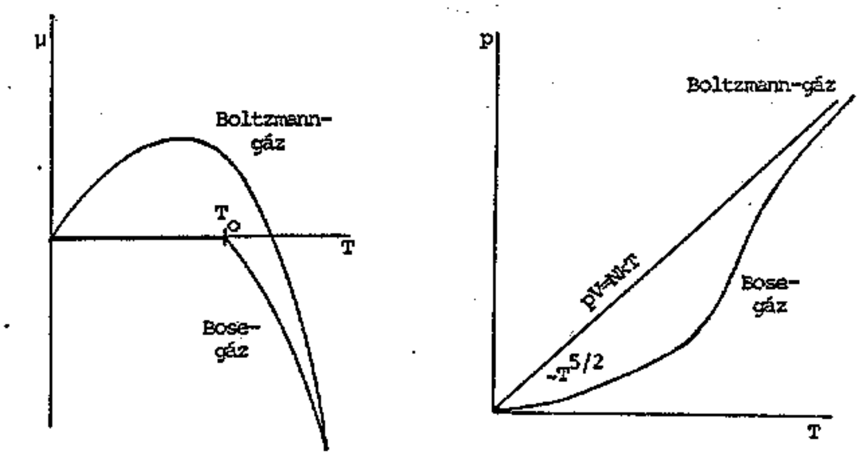

Figure 5: Az ideális Boltzmann-gáz és az ideális Bose-gáz állapotegyenletei: a μ kémiai potenciál és a p nyomás mint a T hőmérséklet függvénye adott sűrűség esetén.

A T_0 hőmérsékleten a Bose-gáz kémiai potenciáljának hőmérséklet szerinti deriváltja ugrást szenved. Az állandó térfogathoz tartozó fajhő hőmérséklet szerinti deriváltjának ugyancsak ugrása van a $T = T_0$ pontban. Az állandó térfogathoz tartozó fajhő hőmérsékletfüggését a 6. ábra szemlélteti. A fajhő $T \to \infty$ hőmérsékleten az ideális Boltzmann-gáznak megfelelő $c_v = \frac{3}{2}kT$ értéket veszi fel.

Azt szoktuk mondani, hogy a T_0 hőmérsékleten az ideális Bose-gáz fázisátalakulást szenved. Ezt a fázisátalakulást Bose-kondenzációnak nevezzük. A Bose-kondenzáció azt jelenti, hogy $T < T_0$ hőmérsékleten az alapállapot betöltési száma

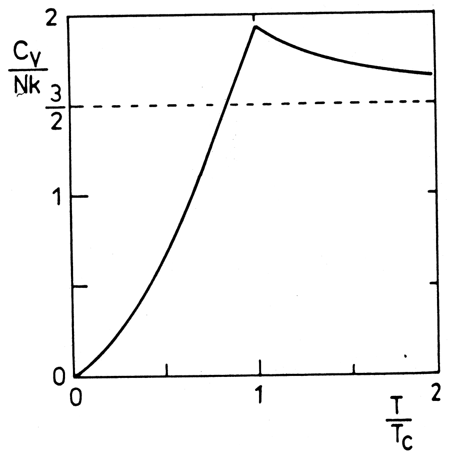

Figure 6: Az ideális Boltzmann-gáz és az ideális Bose-gáz állandó térfogati fajhője a T hőmérséklet függvényében.

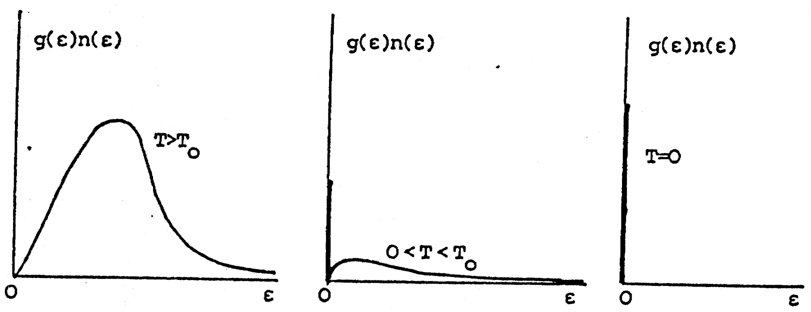

Figure 7: Az egységnyi energiaintervallumban található részecskék száma az ideális Bose-gázban különböző hőmérsékleteken.

$n_0 \sim \mathcal{O}(N)$. A rendszer az impulzustérben rendeződik át, nem pedig a konfigurációs térben. Abszolút zérus fokon valamennyi részecske az alapállapotot tölti be. Az egyes egyrészecske-energiákon található részecskék számát a 7. ábra szemlélteti. Az $(\epsilon, d\epsilon)$ energiaintervallumban található részecskék száma a $g(\epsilon)$ állapotsűrűség és az $n(\epsilon)$ átlagos betöltési szám (a betöltési valószínűség) szorzata. Ezt kell összehasonlítani a Boltzmann-gázra vonatkozó, (7.29) egyenletnek megfelelő energiaeloszlással. Boltzmann-gáz esetén az $\epsilon = 0$ energiájú állapotban zérus a részecskék átlagos száma, mert a betöltési valószínűség véges és az állapotsűrűség zérus ezen az energián.

Megemlítjük még, hogy a Bose-kondenzációt nem szabad téveszteni a szuperfolyékony fázis kialakulásával. Az utóbbihoz ugyanis még az is szükséges, hogy a kondenzált bozonok között egy gyenge vonzó kölcsönhatás legyen jelen.

7.3.7 Feketetest-sugárzás (avagy relativisztikus ideális Bose-gáz)

1. **A fotonállapotok leszámlálása**

   Egy vezető üregében, a környező anyaggal termikus egyensúlyban lévő elektromágneses tér található. Az elektromágneses tér a környezetétől $\varepsilon_k = \hbar\omega_k = \hbar k c$ energiaadagot és $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ impulzusadagot kaphat, ahol $\vec{k}$ tetszőleges hullámvektor, és ugyancsak ilyen összetartozó energia- és impulzusadagok egyidejű leadásával csökkentheti energiáját. Következésképp, az üregbe zárt elektromágneses térre úgy tekinthetünk, mint

   $$\varepsilon = \hbar k c \quad \text{energiájú}, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k} \quad \text{impulzusú} \tag{7.91}$$

   részecskék gázára. Ezeket a részecskéket, az elektromágneses tér elemi gerjesztéseit, fotonoknak nevezzük. A fotonok nyugalmi tömege zérus:

   $$m_0 c^2 = \sqrt{\varepsilon^2 - \vec{p}^2 c^2} = \sqrt{\hbar^2 k^2 c^2 - \hbar^2 k^2 c^2} = 0. \tag{7.92}$$

   A fotonok egyúttal $s = 1$ spinű részecskék, vagyis bozonok.

   A fotongázban az egyrészecske-állapotokat a $\vec{k}$ hullámvektor jellemzi. Egy üregben (egyszerűség kedvéért a oldalélű kockában) csak olyan egyrészecske-állapotok megengedettek a kvantummechanika törvényei szerint, amelyeknél az a élhossz a $\lambda/2 = \pi/k$ félhullámhossz egész számú többszöröse. Jelölje n_1, n_2, n_3 azt az egész számot, amely megmutatja, hogy a kocka három, egymásra páronként merőleges élének irányában a félhullámhossz hányszor fér rá az élhosszra. A megengedett hullámvektorok ekkor

   $$k_1 = n_1\frac{\pi}{a}, \qquad k_2 = n_2\frac{\pi}{a}, \qquad k_3 = n_3\frac{\pi}{a}. \\ (n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, \ldots). \tag{7.93}$$

A fotonenergiák:

$$\varepsilon_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar \pi c}{a} \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}. \tag{7.94}$$

A fázisteret azonosíthatjuk a páronként egymásra merőleges n_1, n_2, n_3 koordináták terével. Ebben a térben egy egységnyi rácsállandójú köbös rács rácspontjai ábrázolják a fotonállapotokat. Az $\varepsilon_{n_1 n_2 n_3} \leq \varepsilon$ energiájú állapotok száma ezért az

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = \left(\varepsilon \frac{a}{\hbar \pi c}\right)^2 \tag{7.95}$$

gömb térfogatának 1/8-ad része:

$$N_{<\varepsilon} = \frac{1}{8}\frac{4\pi}{3}\left(\varepsilon \frac{a}{\hbar \pi c}\right)^3 = \frac{1}{8}\frac{4\pi}{3} V \left(\frac{\varepsilon}{\hbar \pi c}\right)^3. \tag{7.96}$$

A fotonállapotok sűrűsége tehát

$$g(\varepsilon) = 2\frac{dN_{<\varepsilon}}{d\varepsilon} = \frac{V}{\hbar c}\left(\frac{\varepsilon}{\hbar \pi c}\right)^2, \tag{7.97}$$

ahol a 2 faktor azt veszi figyelembe, hogy a fotonoknak kétféle polarizációs állapota van.

2. **Az állapotegyenlet**

Az üregbe zárt fotongáz részecskéinek száma nem állandó, hanem a környezettel való kölcsőnhatás révén állítódik be az értéke a termodinamikai egyensúly feltétele szerint. Ha $F(T, V, N)$ a gáz szabadenergiája, akkor az egyensúlyi részecskeszámot a

$$\frac{\partial F}{\partial N} = 0 \tag{7.98}$$

egyenlet határozza meg. Másrészt viszont

$$\mu = \frac{\partial F}{\partial N}, \tag{7.99}$$

úgyhogy üregbe zárt fotongáz kémiai potenciálja zérus:

$$\mu = 0. \tag{7.100}$$

Mivel $\mu = 0$, a szabadenergia és a termodinamikai potenciál azonos:

$$\begin{aligned} F &= U - TS = -pV + \mu N = -pV = \Omega \\ &= kT \int_0^\infty d\varepsilon g(\varepsilon) \ln\left\{1 - e^{-\beta\varepsilon}\right\} \\ &= kT \frac{V\pi}{(\hbar \pi c)^3} \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon^2 \ln\left\{1 - e^{-\beta\varepsilon}\right\} \\ &= -\frac{V\pi}{3(\hbar\pi c)^3} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta\varepsilon} - 1}. \end{aligned} \tag{7.101}$$

A fotongáz belső energiája

$$U = F + TS, \tag{7.102}$$

ahol az entrópia

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{V\pi}{T(\hbar\pi c)^3}\int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta\varepsilon}-1} - \frac{F}{T}, \tag{7.103}$$

úgyhogy

$$U = \frac{V\pi}{(\hbar\pi c)^3}\int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta\varepsilon}-1} = -3\Omega = 3pV, \tag{7.104}$$

azaz

$$pV = \frac{1}{3}U. \tag{7.105}$$

Vegyük észre, hogy a relativisztikus Bose-gáz állapotegyenletében a jobboldalon 1/3 szerepel szemben a nem relativisztikus gáz esetén fellépő 2/3 tényezővel.

Felhasználjuk, hogy

$$\int_0^\infty \frac{dx x^3}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}. \tag{7.106}$$

Így a feketetest-sugárzás energiasűrűsége:

$$\frac{U}{V} = \frac{\pi^5}{(\hbar\pi c)^3}\frac{(kT)^4}{15} = \mathrm{const}\cdot T^4. \tag{7.107}$$

Ez a Stefan-Boltzmann-törvény.

3. **A feketetest-sugárzás spektrális eloszlása**

A sugárzás ν frekvencia szerinti eloszlása, vagyis a $(\nu, \nu + d\nu)$ frekvencia-intervallumban jelenlevő energiasűrűség arányos a

$$g(\varepsilon)\bar{n}(\varepsilon)\varepsilon d\varepsilon \sim \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta\varepsilon}-1}d\varepsilon \sim \frac{\nu^3 d\nu}{e^{\beta h\nu}-1} \tag{7.108}$$

kifejezéssel. **Ez a Planck-féle sugárzási törvény.** A sugárzás spektrális eloszlását a 8. ábra szemlélteti.

Adott T hőmérsékleten az $\varepsilon = h\nu \gg kT$ energiájú, ,,kemény" fotonok átlagosan

$$\bar{n}(\varepsilon)\varepsilon \sim \frac{\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon}-1} \approx \varepsilon e^{-\beta\varepsilon} = kT(\beta\varepsilon)e^{-\beta\varepsilon} < kT \tag{7.109}$$

energiával járulnak hozzá a belső energiához, míg a „lágy" $h\nu \ll kT$ energiájú fotonok

$$\bar{n}(\varepsilon)\varepsilon \sim \frac{\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon}-1} \approx \frac{\varepsilon}{1+\beta\varepsilon-1} = kT \tag{7.110}$$

átlagenergiát képviselnek. A lágy fotonokra tehát teljesül az ekvipartíció törvénye, a kemény fotonok azonban frekvenciájuk növekedtével egyre kevesebb átlagenergiát képviselnek. Ennek köszönhető, hogy a fotongáz teljes energiája véges. Ha minden foton kT átlagenergiát képviselne, akkor a sugárzás frekvenciasűrűsége az állapotsűrűséggel arányosan ν^2 rendben tartana végtelenhez $\nu \to \infty$ esetén (Rayleigh-Jeans törvény) és a fotongáz belső energiája divergálna (ultraibolya katasztrófa).

A sugárzás frekvencia szerinti eloszlásának annál a ν_{max} frekvenciánál van maximuma, amelyre

$$\frac{d}{d\varepsilon}\left(\frac{\varepsilon^3}{e^{\beta\varepsilon}-1}\right)|_{\varepsilon=h\nu_{max}}= 0, \tag{7.111}$$

azaz

$$\beta h\nu_{max} = \text{const.} \tag{7.112}$$

Ez az ún. **Wien-féle eltolódási törvény:** növekvő hőmérséklettel a sugárzás spektrális eloszlásának maximuma eltolódik a nagyobb frekvenciák felé. A maximum eltolódása jól látszik a 8. ábrán.

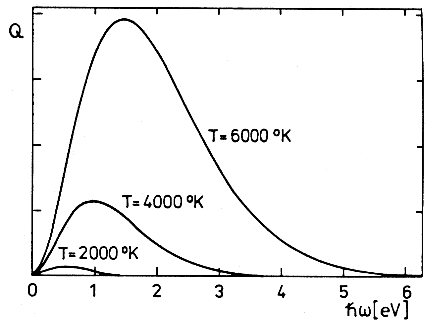

Figure 8: A feketetest sugárzás spektruma különböző hőmérsékleteken.

A sugárzás spektrális eloszlásából tehát következtethetünk a sugárforrás hőmérsékletére. Ennek egyik szép példája a kozmikus háttérsugárzás hőmérsékletének meghatározása. A tapasztalat igazolja, hogy bolygónkat a világűrből egy kb. $T = 3K$ hőmérsékletű, izotróp háttérsugárzás éri. Ebből arra következtethetünk, hogy a Világegyetem tágulása során bekövetkezett egy állapot, amikor az elektromágneses sugárzás megszünt kölcsönhatni a kondenzált anyaggal. Ez a sugárzás van ma is jelen izotrópan a világegyetemben és hőmérséklete a szóban forgó állapot hőmérséklete. Az elektromágneses tér lecsatolódása feltehetően akkor következett be, amikor a H és He atommagok befogták a szabad elektronokat. Amíg a fotonok szórási keresztmetszete szabad elektronokon nagy, addig semleges atomokkal a fotonok csak gyengén hatnak kölcsön. Ez okozhatja az elektromágneses sugárzás lecsatolódását.

7.3.8 Szilárdtestek fajhője

A szilárdtestek többnyire N darab, többé-kevésbé rögzített helyzetű atomtörzset tartalmaznak, amelyek egy kristályrács rácspontjaiban foglalnak helyet. Ezek a részecskék egyensúlyi állapotuk körül kis rezgéseket tudnak végezni. A rezgő rács Hamilton-operátora tehát közelítőleg $3N$ darab független lineáris harmonikus oszcillátor Hamilton-operátorának összege. Ezek a rács ún. sajátrezgései, amelyeknek klasszikusan állóhullámok felelnek meg.

Hasonlóan a fotonokhoz, a ráccsal közölt $\hbar\omega$ energiaadag egyúttal $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ ($|\vec{p}| = \varepsilon/c_s$) impulzusadag közlését is jelenti, (c_s a hangsebesség a $\vec{k}$ hullámvektor által jelölt irányban). A rács sajátrezgéseinek elemi gerjesztéseit tehát részecskéknek tekinthetjük, amelyeket fononoknak nevezünk. A hullámvektorra merőleges síkban két független irányban lehetségesek transzverzális rezgések. Ellentétben az elektromágneses állóhullámokkal, a szilárdtestben a rezgési állóhullámok longitudinálisak is lehetnek. A transzverzális és a longitudinális hullámok terjedési sebessége, a c_{st} transzverzális és c_{sl} longitudinális hangsebesség, általában különböző.

A szilárdtestek Einstein-féle modelljében feltesszük, hogy valamennyi sajátrezgés frekvenciája azonos, ω. Kvantummechanikából tudjuk, hogy egy ω frekvenciájú lineáris harmonikus oszcillátor energiállapotai:

$$\varepsilon_n = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + n\right), \tag{7.113}$$

ahol $n = 0, 1, 2, \ldots$ az oszcillátor betöltési száma $\hbar\omega$ nagyságú energiakvantumokkal. Termodinamikai egyensúlyban az ω frekvenciájú oszcillátor átlagos betöltési száma

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}. \tag{7.114}$$

Mivel a rácsrezgésekben tárolt $\hbar\omega$ energiakvantumok, azaz fononok száma nem állandó, azért a kémiai potenciál zérus, amit felhasználtunk $\bar{n}$ felírásakor. Egy oszcillátor átlagos energiája T hőmérsékletű szilárdtestben

$$\bar{\varepsilon} = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + \bar{n}\right). \tag{7.115}$$

Végül a rácsrezgések együttes energiája

$$U = 3N\hbar\omega\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}\right). \tag{7.116}$$

Az Einstein-modellben a szilárdtestek fajhője

$$c_v = \frac{1}{N}\frac{\partial U}{\partial T} = 3k(\beta\hbar\omega)^2 \frac{e^{\beta\hbar\omega}}{\left(e^{\beta\hbar\omega} - 1\right)^2}. \tag{7.117}$$

A $T \to 0$ határesetben a fajhő

$$c_v \sim 3k\left(\frac{\beta\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}}\right)^2 e^{\beta\hbar\omega} \sim 3k\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} \to 0 \tag{7.118}$$

szerint tart zérushoz, míg $T \to \infty$ esetben

$$c_v \sim 3k\frac{(\beta\hbar\omega)^2}{(1 + \beta\hbar\omega - 1)^2} \to 3k \tag{7.119}$$

értékhez tart. **Ez a Dulong-Petit szabály.** Kifejezi, hogy magas hőmérsékleten minden szabadsági fokra kT átlagenergia jut. A fajhőnek az Einstein-modellből adódó hőmérsékletfüggését a 9. ábrán tüntettük fel.

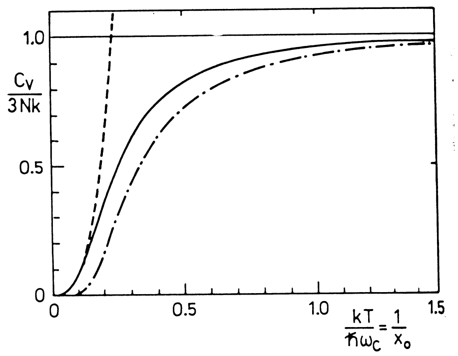

Figure 9: Szilárdtestek fajhőjének hőmérsékletfüggése a Debye-modellben (folytonos vonal), az Einstein-modellben (pontozott szagatott vonal) és a T^3-függés (szaggatott vonal).

A valóságos szilárdtestek rácsrezgéseinek az Einstein-modellnél jobb közelítését kapjuk, ha a fononok számára egy egész frekvenciaintervallumot megengedünk. Ilyen modell megfogalmazásában a fononok és a fotonok közti analógia fog minket vezetni.

A fononok energia-impulzus összefüggése analóg a fotonokéval, így az állapotsűrűséget megkapjuk a fotonokéból, ha tekintetbe vesszük a kétféle transzverzális és a longitudinális rezgési módust:

$$g_{foton}(\varepsilon) = 2\frac{4\pi V}{\hbar(2\pi c)^3}\varepsilon^2 \qquad \text{vagy} \qquad g_{foton}(\omega) = 2\frac{V}{2\pi^2 c^3}\omega^2; \tag{7.120}$$

$$g_{fonon}(\omega) \quad = \quad \frac{V}{2\pi^2}\omega^2\left(\frac{2}{c_{st}^3}+\frac{1}{c_{sl}^3}\right). \tag{7.121}$$

Amíg azonban az elektromágneses tér normál rezgéseinek száma végtelen, addig a szilárdtest normál rezgéseinek száma $3N$. Léteznie kell tehát egy olyan maximális ω_c frekvenciának, amelynél nagyobb frekvenciájú sajátrezgések nem lehetségesek. Ezt a levágási frekvenciát a

$$\int_0^{\omega_c} g_{fonon}(\omega)d\omega = 3N \tag{7.122}$$

feltétel határozza meg:

$$\omega_c^3 = 18\pi^2\frac{N}{V}\left(\frac{1}{c_{sl}^3}+\frac{2}{c_{st}^3}\right)^{-1}. \tag{7.123}$$

A levágási frekvenciának egy minimális hullámhossz felel meg, $\lambda_c \sim \omega_c^{-1}$. Ennek léte azzal magyarázható, hogy a szilárdtestben nem lehetségesek olyan sajátrezgések, amelyeknek hullámhossza kisebb lenne mint a rácsállandó. A most megfogalmazott modellt **a szilárdtestek Debye-féle modelljének** nevezik.

A $d\omega$ frekvencia-intervallumban az energiasűrűség

$$\frac{dU}{d\omega} = \bar{\varepsilon}\frac{g(\omega)}{V} = \hbar\omega\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}\right)9\frac{N}{V}\frac{\omega^2}{\omega_c^3}, \tag{7.124}$$

ha $\omega \leq \omega_c$. Itt az állapotsűrűséget kifejeztük ω_c-vel:

$$g(\omega) = \begin{cases} 9N\frac{\omega^2}{\omega_c^3}, & \omega \leq \omega_c \\ 0, & \omega > \omega_c. \end{cases} \tag{7.125}$$

A rács belső energiáját frekvencia szerinti integrálással kapjuk:

$$U = 9N\hbar\frac{1}{\omega_c^3}\int_0^{\omega_c} d\omega\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{(e^{\beta\hbar\omega}-1)^2}\right)\omega^3. \tag{7.126}$$

Innen a fajhő

$$\begin{aligned} c_v \quad &= \quad \frac{1}{N}\frac{\partial U}{\partial T} = 9\hbar^2\frac{1}{\omega_c^3 kT^2}\int_0^{\omega_c} d\omega\frac{\omega^4 e^{\beta\hbar\omega}}{(e^{\beta\hbar\omega}-1)^2} \\ &= \quad 9k\left(\frac{kT}{\hbar\omega_c}\right)^3\int_0^{x_c} dx\frac{x^4e^x}{(e^x-1)^2} = 3k\mathcal{D}(x_c), \end{aligned} \tag{7.127}$$

ahol $x_0 = \hbar\omega_c/kT$ és

$$\mathcal{D}(x_c) = \frac{3}{x_c^3}\int_0^{x_c} dx \frac{x^4 e^x}{(e^x-1)^2} \tag{7.128}$$

az ún. Debye-függvény. A fajhőnek a Debye-modellből adódó hőmérsékletfüggését is feltüntettük a 9. ábrán

Az Einstein-modellben a termodinamikai mennyiségek az oszcillátorok ω frekvenciájától függnek. Ennek szerepét a Debye-modellben az ω_c levágási frekvencia, illetve az ún. $\theta = \hbar\omega_c/k$ Debye-hőmérséklet veszi át. θ értékét általában a számolt fajhő-hőmérséklet függvénynek a kisérleti adatokhoz való illesztésével határozzák meg. Értéke erősen függ az anyagi minőségtől és általában $100K - 1000K$ nagyságrendű.

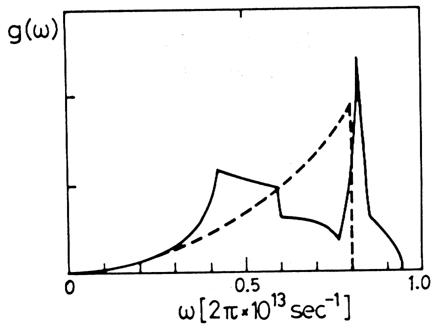

Figure 10: Szilárdtestek kísérleti (folytonos vonal) és a Debye-modell alapján számolt (szaggatott vonal) $g(\omega)$ fononspektruma.

Megjegyezzük még, hogy a fononok spektruma Röntgen-sugárzás szóratása révén határozható meg kisérletileg. A kisérletileg megfigyelt fonon spektrum kvalitatíve hasonló a Debye-modell által feltételezetthez, de finomabb részleteiben eltér attól (10. ábra).

7.3.9 Elfajult szabadelektron-gáz

A fémek vezetési elektronjai, az ún. szabadelektronok jó közelítéssel ideális Fermi-gázt alkotnak. Az elektronok $s = 1/2$ spinű részecskék, úgyhogy minden $\vec{p}$ impulzusú egyrészecske-állapot a spin kétféle állása ("fel" és "le") szerint kétszeresen elfajult, azaz $g = 2$. Az állapotsűrűség

$$g(\varepsilon)d\varepsilon = 2\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}4\pi p^2 dp = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\varepsilon^{1/2}d\varepsilon. \tag{7.129}$$

Az elektronok megmaradó töltést hordoznak, így számuk is megmaradó a vezetőben:

$$N = \int_0^\infty g(\varepsilon)\bar{n}(\varepsilon)d\varepsilon = \int_0^\infty d\varepsilon \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}. \tag{7.130}$$

Ez az egyenlet definiálja az elektrongáz kémiai potenciálját. Már megvizsgáltuk, hogy $T \to \infty$ hőmérsékleten a Fermi-gáz úgy viselkedik, mint a Boltzmann-gáz, azaz kémiai potenciálja $\mu \sim -T \ln T$ szerint minusz végtelenhez tart.

Most is van olyan T_0 hőmérséklet, amelyen a kémiai potenciál zérussá válik, $\mu(T_0) = 0$:

$$N = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}(kT_0)^{3/2} I, \tag{7.131}$$

ahol

$$I = \int_0^\infty \frac{dz z^{1/2}}{e^z+1} = 0.678. \tag{7.132}$$

A kémiai potenciál

$$T_0 = \frac{\hbar^2}{2mk}\left(\frac{4\pi^2}{2\cdot 0.678}\right)^{2/3}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} = \frac{7.51}{2^{2/3}}\frac{\hbar^2}{mk}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} \tag{7.133}$$

hőmérsékleten tűnik el. Érdemes összehasonlítani ezt a hőmérsékletet azonos sűrűségű ideális Bose-, Boltzmann- és Fermi-gáz esetén:

$$T_{0Bose} < T_{0Boltzmann} < T_{0Fermi}. \tag{7.134}$$

A kT_0 energia fizikai jelentése mindig azonos: nagyságrendileg egy V/N térfogatba zárt részecske alapállapoti energiájával egyezik meg.

Vizsgáljuk most meg $T \to 0$ esetén a kémiai potenciált. Feltéve, hogy μ határozottan nagyobb marad zérusnál, – amit majd az eredmény utólag igazol –, $\mu/kT \gg 1$ ebben az esetben. Ekkor meg lehet mutatni (ld. A. Függelék), hogy a zérus hőmérséklet közelében:

$$\mu(T) \sim \mu(0)\left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{kT}{\mu(0)}\right)^2\right], \qquad \text{ha} \quad T \to 0. \tag{7.135}$$

A kémiai potenciál a $\mu(0) > 0$ értékről monoton csökken a növekvő hőmérséklettel.

A kémiai potenciál abszolút zérus fokon felvett értékének közvetlen fizikai jelentése van: megegyezik az ún. Fermi-szint ε_F energiájával. A Fermi-szint az az egyrészecske–energia, amely alatt $T = 0$ hőmérsékleten az összes egyrészecske-állapot be van töltve egy elektronnal és amely fölött minden egyrészecske-állapot üres. A Pauli-elv miatt egynél több részecske nem is tartózkodhat egy adott kvantumállapotban! Mindezt leolvashatjuk a Fermi-Dirac-eloszlás $T=0$ hőmérsékleten felvett alakjából:

$$\bar{n}(\varepsilon, T=0) = \lim_{T\to 0} \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu(0))/kT}+1} = \begin{cases} 1, & \text{ha } \ 0 \le \varepsilon \le \mu(0) \\ 0, & \text{ha } \ \mu(0) < \varepsilon \end{cases},$$

amelyet a 11. ábra szemléltet.

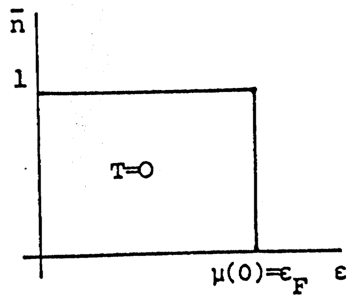

Figure 11: A Fermi-Dirac-eloszlás abszolút zérus hőmérsékleten.

Azok az egyrészecske-állapotok, amelyek energiája kisebb mint az ε_F Fermi-energia, az impulzustérben egy $p_F = \sqrt{2m\varepsilon_F}$ sugarú gömbön, a Fermi-gömbön belül foglalnak helyet. Ezen állapotok száma pontosan megegyezik az N részecskeszámmal, mert $T=0$ hőmérsékleten ezek és csak ezek az állapotok vannak betöltve. Ezt fejezi ki a már levezetett

$$\varepsilon_F = \mu(0) = \left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} \tag{7.136}$$

összefüggés. A Fermi-energia tehát a rendszer ρ sűrűségének 2/3-adik hatványával nő.

Ha a hőmérséklet növekedni kezd, akkor a betöltési számok a Fermi-szint közelében megváltoznak. A környezet kT nagyságrendű energiaadagokkal tudja gerjeszteni a részecskéket. A Pauli-elv miatt azonban csak a Fermi-szint közelében levő elektronok gerjeszthetők termikusan, mert a gerjesztési energia csak az ő számukra elegendő a Fermi-szint fölötti betöltetlen állapotok eléréséhez. Ezért a Fermi-szint körüli kT szélességű intervallumban az eloszlás módosul a $T=0$ esethez képest (ld. 12. ábra). A Fermi-szint alatti állapotokból részecskék kerülnek a Fermi-szint fölötti állapotokba. Így az átlagos betöltési szám 1 alá csökken a Fermi-szint alatt és zérus fölé nő a Fermi-szint fölött. Nyilvánvalóan $\bar{n}(\varepsilon_F) = 1/2$.

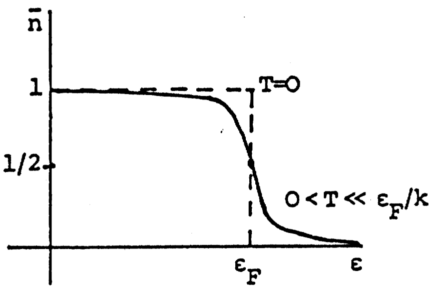

Figure 12: A Fermi-Dirac-eloszlás $T \neq 0$ hőmérsékleten.

A gáz alacsony hőmérsékletű, azaz elfajult mindaddig, amíg $T \ll T_0$. Azt a hőmérsékletet, amely fölött a Fermi-gáz kezdi megközelíteni a Boltzmann-gáz viselkedését, már meghatároztuk. Most azonban kifejezhetjük kT_0-t a Fermi-energiával:

$$kT_0 = \left(\frac{2}{3\cdot 0.678}\right)^{2/3} \varepsilon_F \approx \varepsilon_F. \tag{7.137}$$

Ez egyúttal azt is jelenti, hogy ideális Fermi-gázban a Fermi-energia kb. megegyezik egy V/N térfogatba zárt részecske alapállapoti energiájával.

Végezetül számoljuk ki abszolút zérus fokon a Fermi-gáz belső energiáját és nyomását:

$$U = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \varepsilon^{3/2} = \frac{V}{5\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \varepsilon_F^{5/2} \tag{7.138}$$

$$p = \frac{2}{3}\frac{U}{V} = \frac{2}{15\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \varepsilon_F^{5/2} \sim \left(\frac{N}{V}\right)^{5/3}. \tag{7.139}$$

A Fermi-gáz kémiai potenciáljának és nyomásának hőmérséklet-függését állandó N/V sűrűség esetén a 13. ábra szemlélteti.

7.4 Összefoglalás

Beláttuk, hogy az ideális gázok viselkedése lényegesen eltérő alacsony, $T < T_0$ és magas, $T > T_0$ hőmérsékleten. kT_0 az az energia, amellyel egy olyan részecske rendelkezik alapállapotban, amely egy akkora térfogatú dobozba van bezárva, mint amekkora térfogat jut átlagosan a gáz egy részecskéjére. Fermi-gáz esetén ez közelítőleg megegyezik a Fermi-energiával. Magas hőmérsékleten mind az ideális Bose-gáz,

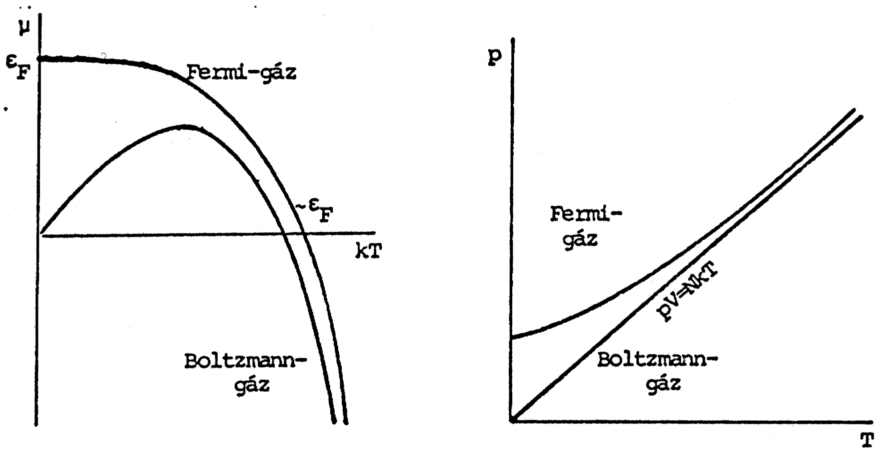

Figure 13: Az ideális Fermi-gáz és az ideális Boltzmann-gáz állapotegyenleteinek az összehasonlítása.

mind az ideális Fermi-gáz klasszikus részecskék ideális gázaként viselkedik. Alacsony hőmérsékleten az ideális Bose-gáz kémiai potenciálja zérus, míg a Fermi-gázé a Fermi-energiával egyezik meg. Azonos sűrűségű és hőmérsékletű ideális gázokat összehasonlítva, a Bose-gáz nyomása kisebb, a Fermi-gáz nyomása pedig nagyobb mint a klasszikus részecske-gázé. A bozonok esetében a nyomás csökkenést az magyarázza, hogy egy, már betöltött nívóra a következő részecske "szívesen" helyezkedik el. Ugyanakkor a fermionok esetében a Pauli-elv miatt lép fel nyomás növekedés. Sajátos jelenség a Bose-kondenzáció, amely olyan bozongázban lép fel, amelyben a részecskeszám megmaradó. A kondenzáció azt jelenti, hogy $T < T_0$ hőmérsékleten az egyrészecskés alapállapotot makroszkopikus számú részecske tölti be.

A Ideális Fermi-gáz kémiai potenciáljának hőmérsékletfüggése az abszolút zérus közelében

Vizsgáljuk most meg $T \to 0$ esetén a kémiai potenciált. Feltéve, hogy μ határozottan nagyobb marad zérusnál, – amit majd az eredmény utólag igazol –, $\mu/kT \gg 1$ ebben az esetben.

Az integrálok, amelyek a különböző termodinamikai mennyiségekben fellépnek,

$$I = \int_0^\infty \frac{f(\varepsilon)d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} \tag{A.1}$$

alakúak és $\mu/kT \gg 1$ esetén

$$I \approx \int_0^\mu f(\varepsilon)d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}(kT)^2 f'(\mu) + \frac{7\pi^4}{360}(kT)^4 f'''(\mu) + \dots. \tag{A.2}$$

alakkal közelíthetők. A részecskeszám alacsony hőmérsékleten a fenti közelítő képlet segítségével ($f = \varepsilon^{1/2}$)

$$N = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\left[\frac{2}{3}\mu^{3/2} + \frac{\pi^2}{12}(kT)^2\mu^{-1/2} + \dots\right]. \tag{A.3}$$

Innen

$$\mu(T=0) = \left(3\pi^2\frac{N}{V}\right)^{2/3}\frac{\hbar^2}{2m} \tag{A.4}$$

és

$$\mu(T) \sim \mu(T=0) + \delta\mu(T), \qquad \text{ha} \quad T \to 0. \tag{A.5}$$

A $\delta\mu(T)$ korrekciót az

$$N = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\left[\frac{2}{3}\mu(0)^{3/2} + \mu(0)^{1/2}\delta\mu(T) + \frac{\pi^2}{12}(kT)^2\mu(0)^{-1/2}\right] \tag{A.6}$$

közelítő képletből kapjuk:

$$\delta\mu(T) = -\frac{\pi^2}{12}(kT)^2\frac{1}{\mu(0)}. \tag{A.7}$$

Így a zérus hőmérséklet közelében

$$\mu(T) \sim \mu(0)\left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{kT}{\mu(0)}\right)^2\right], \qquad \text{ha} \quad T \to 0. \tag{A.8}$$

A kémiai potenciál a $\mu(0) > 0$ értékről monoton csökken a növekvő hőmérséklettel.

FELHASZNÁLT IRODALOM

[1] Amnon Katz, *Principles of Statistical Mechanics (The Information Theory Approach)* (London, Freeman, 1967)

[2] Neumann János, *A kvantummechanika matematikai alapjai* (Budapest, Akadémiai Kiadó, 1980)

[3] Rényi Alfréd, *Napló az információelméletről* (Budapest, Gondolat, 1976)

[4] Jochan Rau, *From Reversible Quantum Microdynamics to Irreversible Quantum Transport*, nucl-th/9505009

[5] Radu Balescu,*Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics* (New York, Wiley and Sons, 1975)

[6] Dede Miklós, Demény András, *Kísérleti fizika 2.* (Budapest, Tankönyvkiadó, 1979)

[7] Fényes Imre, *Termosztatika és termodinamika* (Budapest, Műszaki, 1968)

[8] Lev D. Landau, Jevgenyij M. Lifsic, *Sztatyisztyicseszkaja fizika I., Tyeoretyicseszkaja fizika V.* (Moszkva, Nauka, 1976)

[9] Federick Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics* (Singapore, McGrew-Hill, 1987)