# גזים קוונטיים

11.6.15

## 1 הקדמה

המכניקה הסטטיסטית נותנת לנו כלים שמאפשרים להתחיל מתכונות מיקרוסקופיות של מערכת, ולקבל מהם את התכונות התרמודינמיות המקרוסקופיות שלה. בחלק זה של הקורס נעסוק במערכות שבהן החוקים המיקרוסקופיים נקבעים על ידי תורת הקוונטים. ספציפית, נעסוק במערכות של גז אידיאלי (ללא אינטראקציות) שבהן אפקטים קוונטיים חשובים ($\frac{V}{N} \leq \lambda_T^d$).

### 1.1 תכונות מערכת קוונטית

נעסוק במערכות ללא אינטראקציות: $\mathcal{H} = \sum\limits_i \mathcal{H}_i$. לכן התכונות המיקרוסקופיות של המערכת נקבעים על ידי פתרון הבעיה הקוונטית החד חלקיקית, כלומר על ידי פתרון משוואת שרדינגר הלא תלויה בזמן $\hat{\mathcal{H}}\psi = E\psi$. פתרונות המשוואה הם סט הערכים העצמיים $E_n$ שהם האנרגיות האפשריות במערכת, וסט של פונקציות עצמיות $\psi_n$.

### 1.2 סטטיסטיקה של חלקיקים בלתי ניתנים להבחנה

עתה נחשוב על שני חלקיקים בלתי ניתנים להבחנה. פונקצית הגל המתארת את מצב המערכת היא $\psi(x_1, x_2)$. המשמעות של פונקצית הגל היא, שצפיפות ההסתברות למצוא את החלקיק הראשון בנקודה $x_1$ ואת השני בנקודה $x_2$ היא $|\psi(x_1, x_2)|^2$. שימו לב שלצורך פשטות נחשוב כאן על $x_1, x_2$ כמיקום, אך ניתן להחליפם בתכונה אחרת של החלקיק, למשל תנע. מכיוון שהחלקיקים זהים, ברור ש־$|\psi(x_1, x_2)|^2 = |\psi(x_2, x_1)|^2$. מכאן, ש־$\psi(x_1, x_2) = e^{i\varphi}\psi(x_2, x_1)$. ניתן להראות שעבור חלקיקים בשלושה מימדים, הפאזה $\varphi$ יכול לקבל אחד משני ערכים בלבד: 0 או $\pi$. כלומר, חלקיקים זהים בשלושה מימדים ניתנים לסיווג לשני סוגים אפשריים:

1. **בוזונים**, המקיימים ש־$\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1)$. חלקיקים כאלה מאופיינים על ידי ספין שלם: $0, 1, 2, ...$. דוגמאות לבוזונים: פוטונים, פונונים.
2. **פרמיונים**, המקיימים ש־$\psi(x_1, x_2) = -\psi(x_2, x_1)$. חלקיקים כאלה מאופיינים על ידי ספין חצי־שלם: $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, ...$. דוגמאות לפרמיונים: אלקטרונים, ניוטרונים, פרוטונים.

נשים לב שהפרמיונים מקיימים את התכונה הבאה: אם נשאל מה ההסתברות למצוא שני פרמיונים באותו מצב, למשל את שניהם במיקום $x_1$, נקבל שההסתברות היא אפס: $\psi(x_1, x_1) = -\psi(x_1, x_1) \;\; \Rightarrow \;\; \psi(x_1, x_1) = 0$. התכונה הזו נקראת **עקרון האיסור של פאולי**, ומשמעותה היא ששני פרמיונים לא יכולים להיות באותו מצב קוונטי. סיווג חלקיק לבוזון או פרמיון נקרא גם הסטטיסטיקה של החלקיק, מיד נבין מדוע.

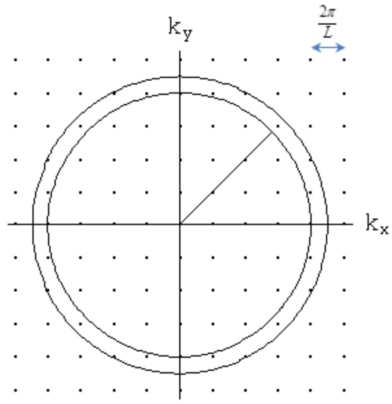
## 2 פיסיקה סטטיסטית של מערכת בוזונים \ פרמיונים

נרצה לחשב תכונות תרמודינמיות של מערכת קוונטית. נסמן ב־$\epsilon_i$ את רמות האנרגיה של המערכת, אותן קיבלנו מפתרון משוואת שרדינגר. נוח לעבוד בצבר הגרנד קנוני, כך ניתן להתיחס לכל רמת אנרגיה לחוד, כמערכת נפרדת שיכולה להחליף חלקיקים עם הרמות האחרות. נסמן ב־$n_i$ את האכלוס של רמת האנרגיה $\epsilon_i$. עבור פרמיונים, הערכים האפשריים הם $n_i = 0, 1$ מכיוון שלא ניתן לאכלס יותר מפרמיון אחד באותו מצב קוונטי $i$. עבור בוזונים, אין את המגבלה הזו ולכן ברמת אנרגיה יחידה $\epsilon_i$ יכול להתאכלס כל מספר חלקיקים: $n_i = 0, 1, 2, ...$.

### 2.1 חישוב האכלוס הממוצע $\langle n_i \rangle$

1. עבור **פרמיונים**: פונקצית החלוקה הגרנד קנונית של המצב ה־$i$: $\mathcal{L} = \sum\limits_{n_i=0,1} e^{\beta(\mu-\epsilon_i)n_i} = 1 + e^{\beta(\mu-\epsilon_i)}$

   מכאן שהאכלוס הממוצע של מצב זה הוא: $\langle n_i \rangle = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu}\log\mathcal{L} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i-\mu)}+1}$. התפלגות זו נקראת התפלגות פרמי־דיראק ומסומנת $n_{FD}(\epsilon_i)$.




איור 1: המצבים המותרים עבור מערכת דו מימדית

2. עבור **בוזונים**: פונקצית החלוקה הגרנד קנונית של המצב ה־$i$: $\mathcal{L}=\sum_{n_i=0}^{\infty} e^{\beta(\mu-\epsilon_i)n_i}=\frac{1}{1-e^{\beta(\mu-\epsilon_i)}}$. שימו לב שכדי שהטור יתכנס, צריך ש־$e^{\beta(\mu-\epsilon_i)}<1$, כלומר ש־$\mu<\epsilon_i$. תנאי זה צריך להתקיים לכל רמות האנרגיה ובפרט לרמת היסוד $\epsilon_0$ שאותה נהוג לבחור להיות אפס, כלומר הפוטנציאל הכימי של בוזונים שלילי.
מכאן שהאכלוס הממוצע של מצב זה הוא: $\frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i-\mu)}-1}=\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu}\log\mathcal{L}=\langle n_i\rangle$. התפלגות זו נקראת התפלגות בוזה־איינשטיין ומסומנת $n_{BE}(\epsilon_i)$.

### 2.2 חישוב צפיפות המצבים $g(\epsilon)$

בשביל לפתור בעיות בפיסיקה סטטיסטית קוונטית נצטרך להגדיר גודל נוסף, הנקרא צפיפות המצבים ומסומן $g(\epsilon)$. משמעותו היא ש־$g(\epsilon)d\epsilon$ הוא מספר המצבים עם אנרגיה בקטע $[\epsilon,\epsilon+d\epsilon]$. ככל שהמערכת גדולה יותר, המרווח בין רמות האנרגיה קטן יותר. כמו כן למערכות עם הרבה חלקיקים, המרווח בין רמות האנרגיה קטן ביחס לאנרגית המערכת הכוללת. לכן נתיחס ל־$g(\epsilon)$ כפונקציה רציפה.
כיצד מחשבים את $g(\epsilon)$? נדגים זאת עבור גז אידיאלי ב־$d$ מימדים הכלוא בקוביה בנפח $V=L^d$ עם תנאי שפה מחזוריים.
נפתור את הבעיה הקוונטית החד חלקיקית. ההמילטוניאן של המערכת הוא $\hat{\mathcal{H}}=\frac{\hat{p}^2}{2m}$ (תזכורת: אופרטור התנע בבסיס המקום: $\hat{p}=-i\hbar\nabla$). כדי למצוא את רמות האנרגיה יש לפתור את משוואת שרדינגר $\hat{\mathcal{H}}\psi=E\psi$. תנאי שפה מחזוריים: $\psi(0)=\psi(L)$ (בכל אחת מהקואורדינטות). המצבים העצמיים של המערכת ($\psi_{\mathbf{k}}\sim e^{i\mathbf{kr}}$) מאופיינים על ידי וקטור גל $\mathbf{k}$, והערכים העצמיים המתאימים הם $E_k=\frac{\hbar^2|\mathbf{k}|^2}{2m}$. הערכים האפשריים ל־$\mathbf{k}$ (נקבעים ע"י תנאי השפה): $\mathbf{k}=\frac{2\pi}{L}(n_1,n_2,,...,n_d)$.
כמה מצבים יש עם $|\mathbf{k}|^2\leq K^2$?

נסמן את מספר המצבים עם $|\mathbf{k}|^2\leq K^2$ ב־$\Sigma(K)$. המשוואה $|\mathbf{k}|^2\leq K^2$ מגדירה את הפנים של כדור $d$ מימדי ברדיוס $K$. כמו שניתן לראות בציור, המרווח בין מצבים סמוכים הוא $\frac{2\pi}{L}$, לכן ניתן לייחס לכל מצב נפח של $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^d$. לכן:

$$\Sigma(K)=\frac{\Omega_d K^d}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^d}=V\frac{\Omega_d K^d}{(2\pi)^d}$$

כאשר $\Omega_d=\frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2}+1)}$.

מכאן אפשר למצוא את $\Sigma(\epsilon)$, שהוא מספר המצבים עם אנרגיה שקטנה או שווה ל־$\epsilon$. מכיוון ש־ $\epsilon=\frac{\hbar^2K^2}{2m}$, כלומר $K=\frac{\sqrt{2m\epsilon}}{\hbar}$:

$$\Sigma(\epsilon)=\Sigma\Big(K=\frac{\sqrt{2m\epsilon}}{\hbar}\Big)=V\frac{\Omega_d(2m)^{d/2}}{(2\pi\hbar)^d}\epsilon^{d/2}$$

נזכור ש־$g(\epsilon)d\epsilon$ הוא מספר המצבים באנרגיה בקטע $[\epsilon,\epsilon+d\epsilon]$. לכן

$$\begin{aligned} g(\epsilon)d\epsilon &= \Sigma(\epsilon+d\epsilon)-\Sigma(\epsilon)=\frac{\Sigma(\epsilon+d\epsilon)-\Sigma(\epsilon)}{d\epsilon}d\epsilon=\Sigma'(\epsilon)d\epsilon \\ \Rightarrow g(\epsilon) &= \Sigma'(\epsilon)=V\frac{\Omega_d(2m)^{d/2}}{(2\pi\hbar)^d}\frac{d}{2}\epsilon^{d/2-1} \end{aligned}$$

נשים לב ש:

- צפיפות המצבים $\sim V$, כלומר היא גודל אקסטנסיבי.
- עבור $d=1$: $g(\epsilon)\sim\epsilon^{-1/2}$, כלומר ככל שהאנרגיה גבוהה יותר, צפיפות המצבים יורדת.
  עבור $d=2$: $g(\epsilon)\sim\epsilon^{0}$, כלומר לא תלויה ב־$\epsilon$.
  עבור $d=3$: $g(\epsilon)\sim\epsilon^{1/2}$, כלומר צפיפות המצבים גדלה עם האנרגיה.
- באופן כללי, אם למצב קוונטי יש ניוון נוסף, יש להכפיל את צפיפות המצבים בניוון. למשל, אם לחלקיקים בהם דנו היה ספין $s$, אז כל מצב $\mathbf{k}$ היה מנוון $2s+1$ פעמים.

**מעבר מסכום לאינטגרל**
כעת נרצה לחשב גדלים במערכת באמצעות אינטגרלים על צפיפות המצבים במקום סכימה על המצבים הבדידים.
הסכימה על כל המצבים מתחלפת באינטגרציה על צפיפות המצבים: $\sum\limits_i f(i)\to\int d\epsilon f(\epsilon)g(\epsilon)$

מספר החלקיקים הכולל: $N=\sum\limits_i n_i\to\int\limits_0^\infty d\epsilon g(\epsilon)n(\epsilon)$

אנרגית המערכת: $E=\sum\limits_i\epsilon_i n_i\to\int\limits_0^\infty d\epsilon\epsilon g(\epsilon)n(\epsilon)$

כאשר $n(\epsilon)$ הוא התפלגות פרמי־דיראק או בוזה־איינשטיין, בהתאם לסטטיסטיקת החלקיקים.

## 2.3 סיכום ־ פתרון בעיות במכניקה סטטיסטית קוונטית:

1. פותרים את הבעיה הקוונטית החד חלקיקית, כלומר את משוואת שרדינגר הלא תלויה בזמן $\hat{H}\psi=E\psi$, כלומר מוצאים את הערכים העצמיים והמצבים העצמיים של ההמילטוניאן. מכאן מקבלים את $\epsilon_i$ ־ רמות האנרגיה של המערכת (שימו לב שעבור מערכת תחומה, הן בדידות).
2. עובדים בצבר הגרנד קנוני (מוצאים את $N$ כפונקציה של $\mu,T,V$). כך ניתן להתיחס לכל רמת אנרגיה לחוד, כמערכת נפרדת. חלקיקים יכולים לעבור בין הרמות ולכן הפוטנציאל הכימי שלהם שווה ־ הוא הפוטנציאל הכימי של המערכת כולה.
3. בהתאם לסוג החלקיקים במערכת, משתמשים ב:
   עבור פרמיונים ־ התפלגות פרמי־דיראק: $n_{FD}=\frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i-\mu)}+1}$
   עבור בוזונים ־ התפלגות בוזה־איינשטיין: $n_{BE}=\frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i-\mu)}-1}$
   נעזרים בזהויות:
   מספר החלקיקים הכולל $N=\sum\limits_i n_i$
   אנרגית המערכת $E=\sum\limits_i\epsilon_i n_i$
   הפוטנציאל הגרנד קנוני $-PV=\Omega=\mp k_BT\sum\limits_i\log\left(1\pm e^{\beta(\mu-\epsilon_i)}\right)$ (עבור פרמיונים / בוזונים)

4. אם אפשר לחשב את הסכומים ־ סיימנו. אחרת, במקום סכום מחשבים אינטגרל: $\sum_i \to \int d\epsilon g(\epsilon)$