Rozwiązanie zadania 3 z drugiego kolokwium

Zadanie 3.

a) Znaleźć prawo potęgowe, według którego dla $T \to 0$ zanika ciepło właściwe doskonałego gazu N fermionów o gęstości stanów jednocząstkowych $\gamma(\epsilon) = D$, gdzie D jest stałe, a ϵ jest energią stanu jednocząstkowego.

b) Znaleźć potencjał chemiczny tego gazu w T=0.

Uwagi:

1) Gęstość stanów jednocząstkowych $\gamma(\epsilon)$ oznacza, że dla dowolnej funkcji f

$$\frac{1}{V}\sum_i f(\epsilon_i) = \int d\epsilon \gamma(\epsilon) f(\epsilon),$$

gdzie sumujemy po wszystkich stanach jednocząstkowych.

2) W naszym przypadku ciepło właściwe $c_v = \frac{1}{N}\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$.

Rozwiązanie zadania 3. Korzystając z uwagi 1) można zapisać równania na objętościową gęstość energii i liczby cząstek:

$$\frac{U}{V} = \frac{1}{V}\sum_i \epsilon_i < n_i >= \int d\epsilon D\epsilon \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1}, \tag{1}$$

$$\frac{< N >}{V} = \frac{1}{V}\sum_i < n_i >= \int d\epsilon D \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1}, \tag{2}$$

gdzie wykorzystano wzór na średnią liczbę obsadzeń $< n_i >= \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i-\mu)}+1}$ „i”- tego stanu dla fermionów. W ogólnym przypadku z równania (1) otrzymuje się w granicy niskich temperatur zależność $\frac{U}{V}(T,\mu)$, z (2) zaś otrzymuje się $n(T,\mu) = \frac{<N>}{V}(T,\mu)$. Po wyrugowaniu z tych równań potencjału chemicznego otrzymuje się zależność $\frac{U}{V}(T,n)$ która po zróżniczkowaniu daje ciepło właściwe. Dlatego zacznijmy od drugiego z równań:

$$\begin{aligned} n &= D\int d\epsilon \frac{e^{-\beta(\epsilon-\mu)}}{1+e^{-\beta(\epsilon-\mu)}} = \\ &= D\int d\epsilon \left(\frac{-1}{\beta}\right)\frac{\partial}{\partial\epsilon}\log[1+e^{-\beta(\epsilon-\mu)}] = \\ &= \frac{-D}{\beta}[\log[1+e^{-\beta(\epsilon-\mu)}]]_0^\infty = \\ &= \frac{D}{\beta}\log[1+e^{\beta\mu}] \end{aligned}$$

Stąd znajdujemy:

$$\mu(T,n) = k_BT\log(e^{\frac{n}{Dk_BT}}-1) = k_BT\log[e^{\frac{n}{Dk_BT}}(1-e^{-\frac{n}{Dk_BT}})].$$

Dla $T \to 0$

$$\mu \approx \frac{n}{D} - k_BTe^{-\frac{n}{Dk_BT}} = .\frac{n}{D}(1-\frac{Dk_BT}{n}e^{-\frac{n}{Dk_BT}})$$

Czyli mamy poprawki do $\mu(T=0,n)=\frac{n}{D}$, co jednocześnie jest odpowiedzią na punkt b), zanikające jak $\frac{Dk_BT}{n}e^{-\frac{n}{Dk_BT}}$. Naturalnie można otrzymać $\mu(T=0)$, stąd że:

$$n = D\int_0^{\epsilon_F} d\epsilon = D\epsilon_F = D\mu(T=0),$$

ale to nie wystarcza, by wykonać punkt a). Znalezione poprawki normalnie pojawiają się w rozwinięciu Sommerfelda co oznacza, że tutaj karykaturalnie proste rozwinięcie dla potencjalu chemicznego równe jest $\frac{n}{D}$.

Zajmijmy się teraz wyrażeniem (1):

$$\frac{U}{V} = D\int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1}$$

po jednokrotnym przecałkowaniu przez części otrzymujemy:

$$\begin{aligned}\frac{U}{V} &= \frac{1}{2}D\left(\left[\frac{\epsilon^2}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1}\right]_0^\infty - \int_0^\infty d\epsilon\epsilon^2\frac{-\beta e^{\beta(\epsilon-\mu)}}{(e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1)^2}\right) = \\ &= \frac{1}{2}D\left(0+\beta\int_{-\mu}^\infty dx(x+\mu)^2\frac{e^{\beta x}}{(e^{\beta x}+1)^2}\right) =\end{aligned} \tag{3}$$

ponieważ funkcja $\frac{e^{\beta x}}{(e^{\beta x}+1)^2}$ jest silnie zlokalizowana wokół 0, to rozciągamy dolną granicę całkowania do $-\infty$ zaniedbując przy tym wyrazy $O(e^{-\frac{\mu}{k_BT}})$. Ma to sens dla temperatur małych w porównaniu z $T_F=\epsilon_F/k_B$.

$$\begin{aligned}\frac{U}{V} &= \frac{1}{2}D\beta\left(\int_{-\infty}^\infty dx(\mu^2+2\mu x+x^2)\frac{e^{\beta x}}{(e^{\beta x}+1)^2}\right) = \\ &= \frac{1}{2}D\beta\left(\mu^2\int_{-\infty}^\infty dx\frac{e^{\beta x}}{(e^{\beta x}+1)^2} + 2\mu\int_{-\infty}^\infty dxx\underbrace{\frac{1}{(e^{\beta x/2}+e^{-\beta x/2})^2}}_{\text{funkcja parzysta}} + \int_{-\infty}^\infty dxx^2\frac{e^{\beta x}}{(e^{\beta x}+1)^2}\right) = \\ &= \frac{1}{2}D\left(\mu^2\int_{-\infty}^\infty dy\frac{e^y}{(e^y+1)^2} + 0 + \frac{1}{\beta^2}\int_{-\infty}^\infty dyy^2\frac{e^y}{(e^y+1)^2}\right)\end{aligned} \tag{4}$$

Całki można wykonać (wyniki podano) - dają stałe czynniki, nie mające wpływu na odpowiedź na pytanie o prawo potęgowe:

$$\frac{U}{V} = \frac{1}{2}D\mu^2 + D(k_BT)^2\frac{\pi^2}{6}$$

Wykorzystując teraz uwagę 2) i wiedzę o potencjale chemicznym z poprzedniego rachunku otrzymujemy:

$$c_v = \frac{1}{n}\frac{Dk_B^2T\pi^2}{3} \propto T$$

Czyli odpowiedzią na pytanie zawarte w punkcie a) jest: ciepło właściwe dla $T\to 0$ zanika liniowo z temperaturą.

przygotował Adam Wójtowicz