

## Гл. Ансамбли квантовых частиц. Ферми- и бозе- частицы

Рассмотрим системы, состоящие из большого ( $N \gg 1$ ) числа независимых (не взаимодействующих) идентичных микрочастиц. В таких системах проявляются определенные статистические закономерности распределения частиц, входящих в систему, по энергетическим состояниям. Практически все свойства веществ в конденсированном состоянии (электрические и магнитные, теплоемкость и теплопроводность) определяются статистикой ансамблей частиц, составляющих вещество.

Все известные частицы делятся на два класса в зависимости от величины собственного механического момента количества движения частиц. Собственный механический момент количества движения является внутренним свойством частиц и называется **спином** (от английского слова spin — «веретено»). Проекцию спина электрона на выделенное направление (например, направление напряженности магнитного поля — ось  $z$ )  $s_z$  обычно измеряют в единицах, равных постоянной Планка  $\hbar$ :  $s_z = \hbar s$ .

Частицы, у которых проекция спина  $s_z$  может принимать только полные значения, равные  $s_z = \pm \frac{1}{2}\hbar, \pm \frac{3}{2}\hbar, \pm \frac{5}{2}\hbar, \dots$  (**ферми-частицы**) подчиняются принципу запрета Паули и статистике Ферми–Дирака. Для электрона, например, спин может принимать два значения

$$s = \frac{s_z}{\hbar} = \pm \frac{1}{2}. \quad (1.27)$$

Частицы с целым спином, называемые **бозе-частицами** или **бозонами**, подчиняются статистике Бозе–Эйнштейна.

Ферми- и бозе-частицы различаются симметрией полных волновых функций. Симметрия волновых функций определяется при перестановке двух частиц. Поскольку частицы идентичны, то обмен пары частиц не меняет физических параметров системы. Однако тип симметрии волновых функций определяет принцип заполнения частицами квантовых состояний.

Для примера рассмотрим систему из двух одинаковых частиц. Пусть первая частица находится в состоянии  $\Psi_a(1)$ , а вторая — в состоянии  $\Psi_b(2)$ , причем обе волновые функции учитывают все параметры (как координатные, так и спиновые). При отсутствии взаимодействия между частицами состояние всей системы может быть представлено как

$$\Psi_a(1)\Psi_b(2) \quad (1.28)$$

или, учитывая возможность перестановки идентичных частиц, как

$$\Psi_a(2)\Psi_b(1). \quad (1.29)$$

Таким образом, полная волновая функция системы, как линейная комбинация (1.28) и (1.29), может быть записана в виде симметричной волновой функции:

$$\Psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_a(1)\Psi_b(2) + \Psi_a(2)\Psi_b(1) \}, \quad (1.30)$$

или в виде асимметричной волновой функции:

$$\Psi_{as} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_a(1)\Psi_b(2) - \Psi_a(2)\Psi_b(1) \} \quad (1.31)$$

Множитель  $1/\sqrt{2}$  соответствует условию нормировки (1.8).

Если состояния  $a$  и  $b$  являются одним и тем же состоянием, то  $\Psi_s = \sqrt{2}\Psi_a(1)\Psi_a(2)$ , а  $\Psi_{as} = 0$ . Это означает, что если две идентичные частицы находятся в одном и том же состоянии, то они могут описываться только симметричной полной волновой функцией. Это бозе-частицы. Ферми-частицы описываются антисимметричными волновыми функциями, так что две ферми-частицы не могут находиться в одном и том же состоянии. В этом заключается сущность принципа Паули.

**Принцип Паули (принцип запрета)**, вводимый для ферми-частиц, запрещает двум (и более) тождественным частицам с полуцелым спином одновременно находиться в одном состоянии. Для свободного электрона состояние задается значением волнового вектора  $\mathbf{k}$ . Поэтому в состоянии с заданным вектором  $\mathbf{k}$  могут находиться только два электрона с разной ориентацией спина. Таким образом, принцип Паули вносит корреляцию между частицами. Вероятность какой-либо частице занять то или иное состояние зависит от степени заполнения состояний остальными частицами.

Следует отметить, что квантовые свойства и статистические закономерности для ансамблей тождественных частиц начинают проявляться ниже определенной температуры  $T_0$ , называемой **температурой вырождения**. При этой температуре длина волны де Бройля, соответствующая энергии теплового движения частиц, становится сравнимой со средним расстоянием между частицами. При  $T \gg T_0$  длина волны де Бройля частиц значительно меньше среднего расстояния между ними и квантовые свойства не оказывают заметного влияния.

## **Ферми-частицы. Функция распределения Ферми–Дирака**

**Задача 1.** Пусть ферми-частицы могут находиться на одном из двух уровней энергии:  $W_1$  со степенью вырождения  $g_1$  ( $g_1$  — число различных состояний частиц с одной и той же энергией  $W_1$ ) и  $W_2$  со степенью вырождения  $g_2$ . Число ферми-частиц велико  $n = n_1 + n_2 \gg 1$ , где  $n_1$  — число частиц в состояниях с энергией  $W_1$  и  $n_2$  — число частиц в состояниях с энергией  $W_2$ . Ферми-частицы находятся в термодинамическом равновесии при температуре  $T$ : Напомним, что абсолютная температура, как параметр термодинамического равновесия в статистической термодинамике определяется соотношением

$$\frac{d \ln \Gamma}{dW} = \frac{1}{k_B T}, \quad (2)$$

где  $\Gamma$  - термодинамическая вероятность состояния системы с энергией  $W$ .

Определите наиболее вероятное распределение  $n$  частиц по двум энергетическим уровням. Получите функцию распределения ферми-частиц – вероятность, с которой частица может находиться в состоянии с энергией  $W$ .

**Решение.** Термодинамическая вероятность  $\Gamma_1$  заполнения уровня энергии  $W_1$ , то есть число различных вариантов заполнения, при которых из  $g_1$  состояний  $n_1$  заняты, а  $p_1 = g_1 - n_1$  состояний свободны, равно числу сочетаний  $C_{g_1}^{n_1}$ :

$$\Gamma_1 = C_{g_1}^{n_1} = \frac{g_1!}{(g_1 - n_1)! n_1!} = \frac{g_1!}{p_1! n_1!}.$$

Аналогично, число  $\Gamma_2$  возможных состояний системы, когда из  $g_2$  состояний с энергией  $W_2$  частицами занято  $n_2$  состояний, а  $p_2 = g_2 - n_2$  состояний свободны, равно

$$\Gamma_2 = C_{g_2}^{n_2} = \frac{g_2!}{(g_2 - n_2)! n_2!} = \frac{g_2!}{p_2! n_2!}.$$

При этом учитывается, что в каждом состоянии может находиться только одна ферми-частица с заданным направлением спина.

Число способов, которыми осуществляется такое распределение всей системы частиц по состояниям (термодинамическая вероятность данного распределения частиц), когда одновременно из  $g_1$  и  $g_2$  состояний с энергиями  $W_1$  и  $W_2$  заполнено частицами соответственно  $n_1$  и  $n_2$  состояний, определяется как произведение термодинамических вероятностей  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_2$ :

$$\Gamma = \Gamma_1 \Gamma_2 = \frac{g_1! g_2!}{n_1! p_1! n_2! p_2!}. \quad (1)$$

Термодинамически равновесное состояние соответствует наиболее вероятному распределению  $n_1$  и  $n_2$ , при котором функция  $\Gamma$  (1) имеет максимум. Считая заданной температуру  $T$ , для определения равновесного распределения  $n_1$  и  $n_2$  воспользуемся соотношением (2). Для этого зададим изменение энергии системы  $dW$ , т.е. рассмотрим некоторое возмущение, которое вызывает переход частиц с одного уровня энергии на другой. При этом увеличение числа заполненных состояний на уровне  $E_1$  происходит за счет уменьшения такого же числа состояний на уровне  $W_2$ , то есть  $dn_1 = -dn_2$ , так как полное число заполненных состояний (полное число частиц) остается постоянным. В результате энергия системы  $W = n_1 W_1 + n_2 W_2$  изменится на величину

$$dW = (W_1 - W_2) dn_1. \quad (3)$$

При таком переходе становится другой и величина термодинамической вероятности  $\Gamma$  распределения энергии. Найдем изменение ее логарифма  $d(\ln \Gamma)$ , учитывая, что

1) для больших чисел  $n$  справедлива формула Стирлинга

$$\ln n! = n \ln n - n;$$

2) степени вырождения  $g_1$  и  $g_2$  в результате перехода не изменяются и потому  $dg_1 = dg_2 = 0$ ;

3) полное число электронов в системе постоянно, т.е.  $dn_1 = -dn_2$ .

Логарифмируя и дифференцируя соотношение (1) и используя записанные выше условия, получаем:

$$d(\ln \Gamma) = d(\ln(g_1!) + \ln(g_2!)) - d(\ln(n_2!) + \ln(n_2!)) - d(\ln(p_1!) + \ln(p_2!)) = \ln\left(\frac{n_2 p_1}{n_1 p_2}\right) dn_1.$$

Это выражение с учетом (3) можно переписать в виде:

$$\frac{d \ln \Gamma}{dW} = \frac{1}{W_1 - W_2} \ln \frac{n_2 p_1}{n_1 p_2}. \quad (4)$$

Учитывая (2) и разделяя параметры первого и второго энергетических уровней, запишем (4) в виде:

$$W_1 + k_B T \ln \frac{n_1}{p_1} = W_2 + k_B T \ln \frac{n_2}{p_2}.$$

Отсюда следует, что в термодинамическом равновесии при температуре  $T$  выражение  $(W + k_B T \ln(n/p))$ , определяющее степень занятости  $n/p$  любого энергетического уровня  $W$ , для данного ферми-газа является величиной постоянной.

Обозначая эту константу как  $\mu$ , имеем:

$$W + k_B T \ln \frac{n}{p} = \mu. \quad (5)$$

Теперь учтем, что по определению функции распределения  $f(W)$  число заполненных состояний  $n$  и число свободных состояний  $p$  можно представить в виде:  $n = g f(W)$ ;  $p = g - g f(W) = g(1 - f(W))$ .

Тогда (5) принимает вид:

$$W + k_B T \ln \frac{f(W)}{1 - f(W)} = \mu. \quad (6)$$

Из (6) следует выражение для  $f(W)$  распределения ферми-частиц по энергии, которое носит наименование **функции Ферми–Дирака** при температуре  $T$ :

$$f(W) = \frac{1}{\exp\left(\frac{W - \mu}{k_B T}\right) + 1}. \quad (7)$$

Функция  $f(W)$  равна вероятности того, что в системе идеального газа ферми-частиц, находящихся в тепловом равновесии при температуре  $T$ , одно из состояний с энергией  $W$  занято частицей. Вид функции (7) представлен на рис. 1–4 а.

**Ответ.** Наиболее вероятное распределение  $n$  частиц по двум энергетическим состояниям:  $W_1 + k_B T \ln \frac{n_1}{g_1 - n_1} = W_2 + k_B T \ln \frac{n_2}{g_2 - n_2}$ . Функция распре-

деления  $f(W) = \left(\exp\left(\frac{W - \mu}{k_B T}\right) + 1\right)^{-1}$ .

### Замечания.

1. Величина энергии  $\mu$  в (5) называется **химическим потенциалом**. Вероятность  $f(W)$  заполнения электроном состояния с энергией  $W = \mu$  при любых температурах (рис. 1–4 б) равна  $f(W=\mu) = 1/2$ . Введенное определение химического потенциала совпадает с термодинамическим определением химического потенциала, равного изменению любого потенциала (внутренней энергии, энтальпии, свободной энергии Гиббса или Гельмгольца) при изменении числа частиц системы на единицу.

2. При  $T = 0$  функция распределения Ферми–Дирака имеет вид ступеньки. Значение химического потенциала при  $T = 0$  носит специальное название — **энергия Ферми**  $W_F$  (подробнее об энергии Ферми будет говориться ниже). Все состояния с  $W < W_F$  при  $T = 0$  заняты с вероятностью 1, а с  $W > W_F$  свободны, так как вероятность их заполнения равна нулю.

При  $T > 0$ , благодаря хаотическому тепловому движению частиц, функция распределения Ферми–Дирака размывается в окрестности энергии Ферми.

При низких температурах ( $k_B T \ll \mu$ ) функцию  $f(W)$  в области значений  $W$ , близких к  $\mu$ , можно описать линейной зависимостью, если воспользоваться разложением  $f(W)$  в ряд Тейлора, ограничиваясь только нулевым и первым членами разложения:  $f_{\text{lin}}(W) = f(\mu) + \left. \frac{\partial f}{\partial W} \right|_{\mu} (W - \mu)$ .

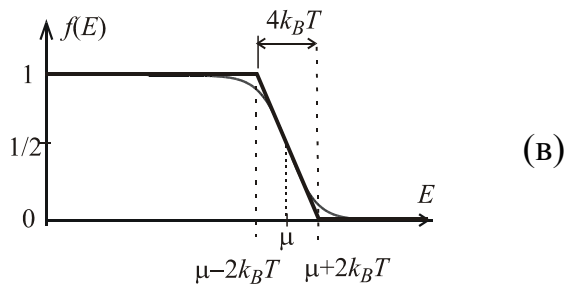
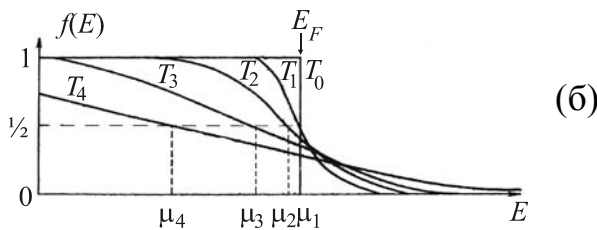
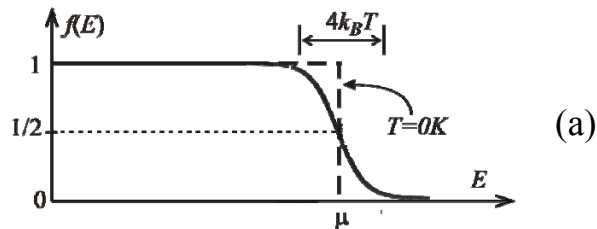


Рис. 1–4. Функция распределения Ферми–Дирака для различных температур при ус-

ловии, что полное число частиц постоянно и не зависит от температуры:  $k_B T \ll \mu = W_F$  (а);  $T_4 > T_3 > T_2 > T_1 > T_0 = 0$  (б), линейная экстраполяция (7) при низких температурах (в)

Линейная зависимость для  $W$ , вблизи  $\mu$  (рис. 1–4 в) определяет касательную в точке  $W = \mu$ :

$$f_{\text{lin}}(W) = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{1}{2k_B T} (W - \mu) \right]. \quad (8)$$

В таком приближении функция распределения достигает единицы при  $W_1 = \mu - 2k_B T$  и нуля — при  $W_2 = \mu + 2k_B T$ . Таким образом, можно считать, что «размытие» распределения Ферми–Дирака при низких температурах составляет  $\approx 4k_B T$ .

С ростом температуры ступенька Ферми размывается еще больше (рис. 1–4 б). Значение химического потенциала уменьшается и может стать отрицательным.

Значение  $W_F$  ( $\mu$  при  $T = 0$ ) определяет температуру вырождения ферми-газа:

$$T_0 = \frac{W_F}{k_B}. \quad (9)$$

При  $T < T_0$  газ вырожден, при  $T > T_0$  — не вырожден.

## Бозе-частицы. Функция распределения Бозе-Эйнштейна

Рассмотрим один квантовый осциллятор, имеющий частоту  $\omega$ . Энергетический спектр осциллятора (см.)

$$W_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad (10)$$

Энергия, которую имеет квантовый осциллятор, то есть значение квантового числа  $n$ , определяется только температурой той термодинамической системы, в которой он находится. При  $T = 0\text{K}$  квантовый номер  $n = 0$ , но при  $T \neq 0\text{K}$  осциллятор может находиться в любом возбужденном состоянии (при любом  $n$ ). Вероятность нахождения осциллятора на  $n$ -ом уровне возбуждения описывается законом Гиббса

$$w_n = A \exp\left(-\frac{W_n}{k_B T}\right) = A \exp\left(-\frac{(n+1/2) \cdot \hbar\omega}{k_B T}\right), \quad (11)$$

где  $k_B$  — константа Больцмана.

Квантовый осциллятор обладает удивительной особенностью: его энергетический спектр эквидистантный. Этот факт позволяет описать возбуждение осциллятора, как рождение квантов возбуждения (рис.). Причем все кванты возбуждения осциллятора идентичны и имеют энергию  $\hbar\omega$ . Если осциллятор находится на  $n$ -ом уровне возбуждения, то можно говорить о рождении  $n$  квантов возбуждения (см. рис. при  $n = 3$ ). Поскольку энергии квантов одинаковы, то все  $n$  квантов находятся в одном энергетическом состоянии с одной энергией  $\hbar\omega$ . Так как принципиально возможно  $n \rightarrow \infty$ , то число квантов возбуждения в одном состоянии не лимитировано, в отличие от фер-

ми-частиц. Такие частицы (как кванты возбуждения осциллятора) называются **бозе-частицами**.

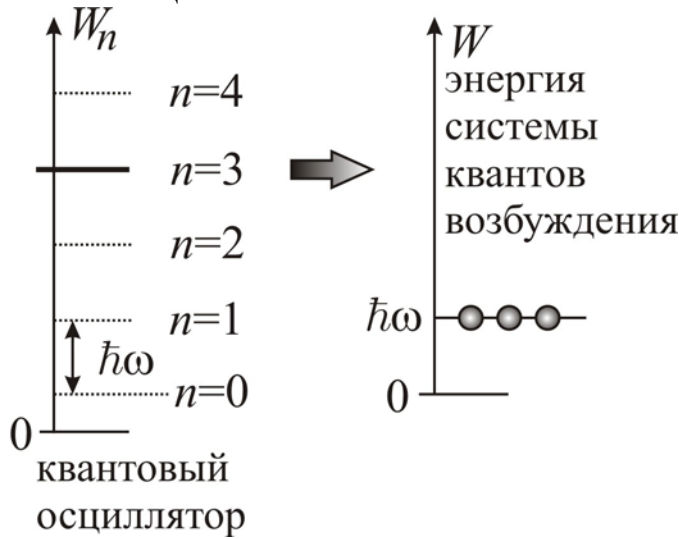


Рис.

**Задача 2.** Найдите функцию распределения бозе-частиц, определяющую среднее число квантов возбуждения  $\langle n \rangle$  квантового осциллятора, находящегося в термодинамической системе при температуре  $T$ . Циклическая частота осциллятора  $\omega$ . Рассмотрите предельные случаи низких  $k_B T \ll \hbar\omega$  и высоких  $k_B T \gg \hbar\omega$  температур и оцените энергию осциллятора в этих случаях.

**Решение.** Вероятность  $w_n$ , с которой квантовый осциллятор с частотой  $\omega$  находится на  $n$ -м энергетическом уровне, то есть вероятность возбуждения  $n$  квантов, согласно статистической термодинамике описывается распределением Гиббса (11). Постоянная  $A$  находится из условия нормировки  $\sum_{n=0}^{\infty} w_n = 1$ . Вычисляя сумму  $\sum_{n=0}^{\infty} w_n$ , как сумму геометрической прогрессии, получаем:

$$A = \exp\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \cdot \left[1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)\right]$$

и

$$w_n = \left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}\right) e^{-\frac{n\hbar\omega}{k_B T}}. \quad (12)$$

Для среднего (равновесного при температуре  $T$ ) числа возбужденных квантов с энергией  $\hbar\omega$  по формуле средних значений

$$\langle n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} n \cdot w_{n,\omega} = \left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}\right) \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-\frac{n\hbar\omega}{k_B T}}.$$

При вычислении суммы используем математический прием:

$$\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-\frac{n\hbar\omega}{k_B T}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{-d}{d[\hbar\omega/(k_B T)]} e^{-\frac{n\hbar\omega}{k_B T}} = \frac{-d}{d[\hbar\omega/(k_B T)]} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n\hbar\omega}{k_B T}}$$

После вычисления суммы и взятия производной получаем

$$\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-\frac{n \cdot \hbar \omega}{k_B T}} = \frac{\exp\left[-\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right]}{\left[1 - \exp\left[-\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right]\right]^2}$$

Окончательно для  $\langle n \rangle$  находим:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\exp\frac{\hbar \omega}{k_B T} - 1}. \quad (13)$$

Зависимость (13) среднего числа квантов возбуждения от температуры и энергии кванта определяет **функцию распределения (статистику) Бозе–Эйнштейна** для частиц, число которых в любом квантовом состоянии ничем не ограничено.

Ответ:  $\langle n \rangle = \left( \exp\frac{\hbar \omega}{k_B T} - 1 \right)^{-1}$ .

**Замечание 1.** В общем случае функция распределения Бозе–Эйнштейна имеет вид:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\exp\frac{W - \mu}{k_B T} - 1}, \quad (14)$$

где  $\langle n \rangle$  — среднее число частиц при температуре  $T$  в состоянии с энергией  $W$ ,  $\mu$  — термодинамический химический потенциал, определяемый величиной изменения полной энергии системы  $U$  при изменении числа частиц  $N$  в системе:  $\mu = \partial U / \partial N$ .

**В области низких температур**  $T \ll \hbar \omega / k_B$  среднее число возбужденных квантов  $\langle n \rangle$  и энергия квантового осциллятора  $W$  экспоненциально малы:

$$\langle n \rangle \approx e^{-\frac{\hbar \omega}{k_B T}}. \quad (15)$$

$$W = \langle n \rangle \hbar \omega \approx \hbar \omega \cdot e^{-\frac{\hbar \omega}{k_B T}} \quad (15-1)$$

**При высоких температурах**  $T \gg \hbar \omega / k_B$  среднее число возбужденных квантов пропорционально температуре:

$$\langle n \rangle \approx \frac{k_B T}{\hbar \omega}, \quad (16)$$

а энергия квантового осциллятора

$$W = \langle n \rangle \cdot \hbar \omega \approx k_B T. \quad (16\_1)$$

Таким образом, при температурах меньше энергии кванта возбуждения можно считать, что осциллятор находится на нулевом уровне (возбуждения отсутствуют). При  $k_B T > \hbar \omega$  можно полагать энергию квантового осциллятора приблизительно равной  $k_B T$ .

К интересным свойствам бозе-системы можно отнести явление бозе-конденсации (**см. приложение**)



**Задача 3.** Доказать, что в системе ферми-частиц вероятность того, что состояние с энергией  $W_F + \delta$  занято равна вероятности того, что состояние с энергией  $W_F - \delta$  свободно.

**Решение.** Запишем доказываемое соотношение  $f(W_F + \delta) = 1 - f(W_F - \delta)$  используя явный вид функции распределения Ферми-Дирака:

$$\frac{1}{\exp\left(\frac{W_F + \delta - \mu}{k_B T}\right) + 1} = 1 - \frac{1}{\exp\left(\frac{W_F - \delta - \mu}{k_B T}\right) + 1}.$$

Поскольку газ предполагается вырожденным, то химический потенциал можно считать равным энергии Ферми:  $\mu = W_F$ , тогда  $W_F - \mu = 0$ :

$$\left[ \exp\left(\frac{\delta}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1} = 1 - \left[ \exp\left(-\frac{\delta}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1}.$$

Приведем правую часть последнего выражения к общему знаменателю:

$$\left[ \exp\left(\frac{\delta}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1} = \exp\left(-\frac{\delta}{k_B T}\right) / \left[ \exp\left(-\frac{\delta}{k_B T}\right) + 1 \right]$$

Умножив числитель и знаменатель правой части на  $\exp[\delta/k_B T]$ , получим верное тождество:

$$\left[ \exp\left(\frac{\delta}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1} = \left[ 1 + \exp\left(\frac{\delta}{k_B T}\right) \right]^{-1}.$$

**Задача 4.** Вычислить функцию распределения Ферми-Дирака  $f(W)$  для вырожденного Ферми-газа в случае  $W - W_F = \delta_i$ . Рассмотреть случаи, когда  $\delta_1 = k_B T$ ,  $\delta_2 = 2k_B T$ ,  $\delta_3 = 4k_B T$ ,  $\delta_4 = 10k_B T$ . Для  $\delta_1$  оценить погрешность, допускаемую при линейаризации ступеньки в виде  $f_{lin}(W) = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{W - \mu}{2k_B T} \right)$ .

**Решение.** Учитывая, что для вырожденного Ферми-газа  $\mu = W_F$ , функцию распределения Ферми-Дирака можно представить в виде:

$$f(W) = \frac{1}{\exp\left(\frac{W - \mu}{k_B T}\right) + 1} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\delta_i}{k_B T}\right) + 1};$$

получим следующие численные значений функций Ферми-Дирака:

$$f_1 = (1 - e)^{-1} \approx 0.27; f_2 = (1 - e^2)^{-1} \approx 0.12; f_3 = (1 - e^4)^{-1} \approx 0.018; f_4 = (1 - e^{10})^{-1} \approx 4.5 \cdot 10^{-5};$$

Погрешность, допускаемую при линейаризации, можно вычислить с помощью соотношения:

$$\frac{f(\delta_1) - f_{lin}(\delta_1)}{f(\delta_1)} \approx 0.067.$$

**Ответ.**  $f_1 = (1 - e)^{-1} \approx 0,27$ ;  $f_2 = (1 - e^2)^{-1} \approx 0,12$ ;  $f_3 = (1 - e^4)^{-1} \approx 0,018$ ;

$$f_4 = (1 - e^{10})^{-1} \approx 4.5 \cdot 10^{-5}; [f(\delta_1) - f_{lin}(\delta_1)] / f(\delta_1) \approx 0,067.$$

**Задача 5.** Рассчитать значение энергии Ферми и температуру вырожденного гелия  ${}^3\text{He}$  в жидком состоянии при атмосферном давлении  $T \approx 300\text{K}$ . Плотность жидкого  ${}^3\text{He}$  принять равной  $\rho = 0.081\text{ г/см}^3$ .

**Замечание к постановке задачи.** Атомы гелия существуют в двух стабильных изотопных состояниях  ${}^3\text{He}$  и  ${}^4\text{He}$  с массами 4 и 3 в атомных единицах. Структура электронных оболочек:  $1s^2$ . Атомы гелия имеют малый радиус и очень маленький дипольный момент. Поэтому Ван-дер-Вальсовское взаимодействие между атомами очень мало и газообразный гелий является практически идеальным газом с очень низкой температурой конденсации. Температура кипения жидкого  ${}^3\text{He}$  при атмосферном давлении – 3.34К ( ${}^4\text{He}$  – 4.2К).

Ядерный спин у  ${}^4\text{He}$  равен нулю, так что атомы  ${}^4\text{He}$  образуют либо Бозе-газ, либо Бозе-жидкость. Спин ядра у  ${}^3\text{He}$  равен 1/2 и атомы  ${}^3\text{He}$  являются фермионами, и подчиняются статистике Ферми-Дирака, также как и электроны. Благодаря малости массы атомов и слабости их взаимодействия, длина волны де-Бройля  $\lambda = h/mv$  при температурах порядка 1К сравнима с межатомным расстоянием атомов в жидкости. Поэтому жидкие  ${}^4\text{He}$  и  ${}^3\text{He}$  являются чисто квантовыми объектами – квантовыми жидкостями, которые не замерзают при охлаждении до самых низких температур.

**Решение.** Используя уравнение идеального газа  $P = nk_B T$  для определения концентрации  $n$  газообразного гелия и зависимость энергии Ферми от концентрации Ферми-частиц  $W_F(0) = \hbar^2 (3\pi^2 n)^{2/3} / 2m_0$ , получим:

$$W_F(0) = \frac{\hbar^2}{2m_0} (3\pi^2 n)^{2/3} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( 3\pi^2 \frac{P}{k_B T} \right)^{2/3} \approx 8 \cdot 10^{-25} \text{ Дж.}$$

Численное значение получено для атмосферного давления и комнатной температуры  $T \approx 300\text{K}$ . Столь низкая температура вырожденного гелия  $T^* = W_F / k \approx 6 \cdot 10^{-2} \text{ K}$  означает, что гелий при комнатных условиях является чисто классическим газом, подчиняющегося распределению Максвелла-Больцмана.

Для жидкого гелия, концентрация которого равна  $n = \rho / m_{\text{He}} = 1.62 \cdot 10^{26} \text{ кг/м}^3$ , энергия Ферми имеет значение:

$$W_F(0) = \frac{\hbar^2}{2m_0} (3\pi^2 n)^{2/3} \approx 6 \cdot 10^{-23} \text{ Дж,}$$

а температура вырождения  $T^* = W_F / k \approx 4\text{K}$  составляет несколько единиц градусов Кельвина, что означает, что жидкий гелий является вырожденным.

**Ответ:** Для газообразного гелия энергия Ферми равна

$$W_F = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( 3\pi^2 \frac{P}{k_B T} \right)^{2/3} \approx 8 \cdot 10^{-25} \text{ Дж; температура вырождения } T^* = W_F / k \approx 6 \cdot 10^{-2} \text{ K;}$$

для жидкого гелия:  $W_F(0) = \frac{\hbar^2}{2m_0} (3\pi^2 n)^{2/3} \approx 6 \cdot 10^{-23} \text{ Дж, } T^* = W_F / k \approx 4\text{K}.$

**Задача 6.** Показать, что средняя энергия  $N$  валентных электронов металла при  $T = 0\text{K}$  равна  $\langle W \rangle = 3W_F / 5$ .

**Решение.** Число электронов  $dN(p)$  и импульсом  $p$  равно удвоенному за счет спина числу электронных состояний в сферическом слое толщины  $dp$ :

$$dN(p) = 2 \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3 / V_K},$$

где  $V_K$  - объем кристалл,  $(2\pi\hbar)^3 / V_K$  - величина элементарного квантового объема одного состояния.

Таким образом, суммарная энергия всех  $N$  электронов, заполняющих при  $T=0$  сферу радиуса  $p_F$  равна:

$$W_N = \int \frac{p^2}{2m} dN(p) = \int_0^{p_F} \frac{p^2}{2m} 2 \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3 / V_K} = \frac{3}{5} N W_F(0),$$

$$\text{где } W_F(0) = \frac{p_F^2}{2m}, \quad N = 2 \frac{4/3 \pi p_F^3 dp}{(2\pi\hbar)^3 / V_K}.$$

В отличие от классической механики, когда средняя энергия одной частицы определяется температурой  $W_1 = 3k_B T / 2$ , и при  $T=0$  равна нулю  $W_1(0) = 0$ , средняя энергия электронного Ферми-газа даже при нуле температуры отлична от нуля и равна  $3W_F / 5$ .

**Ответ.**  $\langle W \rangle = 3W_F / 5$

**Задача 7.** Вычислить энергию Ферми и максимальную скорость электронов в предположении, что на один атом приходится один свободный электрон. Плотность меди  $\rho = 8.9 \text{ г/см}^3$ .

**Решение.** Энергия Ферми  $W_F$  – максимально возможное значение энергии электронов при  $T=0$ , соответствующее ей значение импульса называется импульсом Ферми  $p_F$ . При  $T=0$  электроны заполняют в пространстве импульсов сферу радиусом  $p_F = \hbar k_F$ , который определяется из равенства числа электронов удвоенному числу элементарных квантовых ячеек в объеме сферы. Указанное удвоение является следствием принципа Паули для ферми-частиц, согласно которому в каждом состоянии, занимающем в пространстве импульсов объем  $(2\pi\hbar)^3$ , может находиться только два электрона с противоположно направленными спинами. Таким образом, справедливо соотношение:

$$2 \frac{V_p}{V_h} = 2 \frac{4\pi p_F^3 / 3}{(2\pi\hbar)^3} = n,$$

где  $V_p = 4\pi p_F^3 / 3$  - объем сферы в пространстве импульсов,  $V_h = (2\pi\hbar)^3$  - объем квантового состояния,  $n$  - концентрация электронов. Из приведенного соотношения можно выразить значение импульса Ферми:

$$p_F = \hbar (3\pi^2 n)^{1/3}$$

Выражение для энергии Ферми будет иметь следующий вид:

$$W_F = \frac{p_F^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2}{2m_0} (3\pi^2 n)^{2/3}.$$

Концентрация электронов  $n$  определяется выражением:

$$n = \frac{zN}{V_K} = z \frac{N_A \rho}{M} = \frac{z\rho}{\mu},$$

где  $N$  – число атомов,  $z$  – их валентность,  $V_K$  – объем кристалла,  $M$  – молярная масса,  $N_A$  – число Авогадро,  $\rho$  – плотность,  $\mu = M / N_A$ . Следовательно, учитывая численные значения мировых констант, в единицах системах СИ, энергия Ферми будет равна:

$$W_F \approx 4.15 \cdot 10^{-21} \left( \frac{z\rho}{\mu} \right)^{2/3}.$$

В частности, для меди  $W_F(\text{Cu}) \approx 7$  эВ, а максимальная скорость

$$V_{\max} = \sqrt{2W_F / m_0} \approx 1.6 \cdot 10^6 \text{ м/с}.$$

**Ответ:**  $W_F(\text{Cu}) \approx 7$  эВ,  $V_{\max} = \sqrt{2W_F / m_0} \approx 1.6 \cdot 10^6$  м/с.

**Приложение.** Интересной особенностью распределения Бозе–Эйнштейна является то, что если одна бозе-частица в результате какого-либо взаимодействия рассеивается в некоторое состояние, то вероятность рассеяния второй бозе-частицы, идентичной первой, на другом рассеивателе в то же самое состояние в два раза больше по сравнению с вероятностью рассеяния не идентичных частиц.

Если имеются  $N$  тождественных бозе-частиц в некотором состоянии, то *вероятность того, что еще одна частица придет в то же самое состояние, увеличивается в  $(N + 1)$  раз по сравнению с той вероятностью, которая имела бы место, если бы все рассматриваемые частицы были бы не идентичными.*

Это явление подобно интерференции  $N$  когерентных волн с одинаковой амплитудой и интенсивностью  $I_0$ , когда напряженность результирующего поля пропорциональна числу волн, а интенсивность  $N^2 I_0$  возрастает по сравнению с интенсивностью одной волны в  $N^2$  раз. Тогда добавление еще одной волны приводит к интенсивности  $(N + 1)^2 I_0$ . Если бы рассматриваемые волны были не когерентны, то интенсивность была бы  $(N + 1)I_0$ . Таким образом, как и в случае бозе-частиц, добавление одной волны к уже имеющимся  $N$  когерентным волнам приводит к росту интенсивности в  $(N + 1)$  раз в отличие от сложения некогерентных волн.

Этот эффект лежит в основе явления **бозе-конденсации**.

При  $T = 0$  среднее число возбужденных квантов осциллятора  $\langle n \rangle = 0$  (1.45) и все бозе-частицы скапливаются на наиболее низком энергетическом уровне (рис. 1–5 а). Для системы квантовых осцилляторов этот уровень соответствует нулевым колебаниям осциллятора ( $n = 0$ , энергия  $W_0 = \hbar\omega/2$  (1.41)). Заметим, что для других систем бозе-частиц расположение энергетических уровней может быть не эквидистантным, но это не меняет характера распределения частиц при  $T = 0$ . В любом случае частицы находятся на самом низком уровне и образуют, так называемый, **бозе-конденсат**.

С ростом температуры начинают заполняться более высокие энергетические состояния системы. Однако при температурах ниже темпера-

туры вырождения  $0 < T < T_0$  бóльшая часть частиц остается на низшем энергетическом уровне. Это связано с тем, что пока частиц в основном состоянии много больше, чем в возбужденных, вероятность перехода частиц в основное состояние намного превышает вероятность их перехода в возбужденное состояние и большинство частиц продолжает оставаться на низшем уровне, образуя бозе-конденсат. В отличие от конденсации паров при сжижении газа, бозе-конденсация происходит в импульсном пространстве. При этом переход в самое низкое энергетическое состояние (конденсацию) можно рассматривать как переход от беспорядка к порядку в импульсном пространстве. На рис. 1–5 б схематически показано заполнение энергетических уровней бозе-частицами при температурах ниже температуры вырождения  $0 < T < T_0$ .

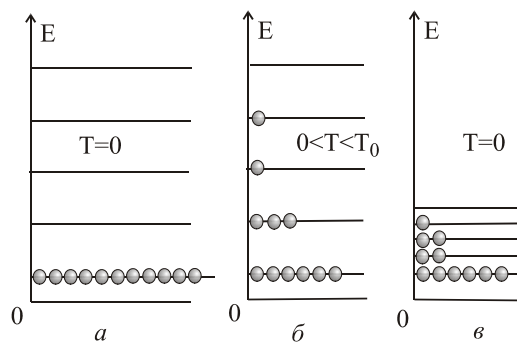


Рис. 1–5. Заполнение энергетических уровней в газе бозе-частиц (квантовых осцилляторов): *a* — все частицы находятся на самом низком энергетическом уровне при температуре  $T = 0$ ; *б* — при температурах ниже температуры вырождения  $T_0$  заполняются возбужденные состояния, хотя большая часть частиц все еще находится в низшем энергетическом состоянии; *в* — истощение конденсата при  $T = 0$  с переходом частиц на виртуальные уровни энергии

Выше температуры вырождения число частиц на низшем энергетическом уровне мало и частицы описываются классической статистикой Максвелла–Больцмана.

Для идеального бозе-газа температура вырождения может быть оценена по формуле

$$T_0 \approx \frac{3,31 \hbar^2}{m k_B} \left( \frac{n}{2s+1} \right)^{2/3}, \quad (17)$$

где  $m$  — масса бозе-частицы,  $s$  — ее спин, а  $n$  — концентрация бозе-частиц.

Наличие взаимодействия (сил отталкивания) в бозе-системах приводит к тому, что конденсация всех частиц на наинизшем энергетическом уровне может стать не выгодной даже при температуре  $T = 0$ . Большая плотность частиц в одном состоянии приводит к увеличению потенциальной энергии взаимодействия. В результате устанавливается равно-

весное распределение, когда часть частиц переходит в более высокие *виртуальные энергетические состояния*, происходит “**истощение конденсата**” (рис. I–5 в). При этом увеличение кинетической энергии компенсируется выигрышем в потенциальной энергии.