

KVANTNA STATISTIČKA FIZIKA

1. MIKROSKOPSKI MODEL OPISIVANJA STANJA KVANTNIH SISTEMA



Unapređenje nastave iz fizike, podržano od strane
Ministarstva prosvete nauke i tehnološkog razvoja
kroz projekat **ETFizika**

Mikro stanje kvantnih sistema

- U kvantnoj mehanici stanje sistema mnoštva čestica opisano je talasnom funkcijom $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t)$, gde su: $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$ koordinate pojedinih čestica sistema:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t). \quad (10)$$

Operator Hamiltona za ceo sistem je:

$$\hat{H} = \sum_{1 \leq i \leq N} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_i^2} + U_0(\mathbf{r}_i) \right) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|). \quad (11)$$

- Rešenje jednačine (10) određuje talasnu funkciju čiji kvadrat modula $|\psi|^2$ predstavlja funkciju gustine verovatnoće da u trenutku vremena t , koordinate pojedinih čestica budu u

elementarnim zapreminama $d\mathbf{r}_1, d\mathbf{r}_2, \dots, d\mathbf{r}_N$ oko odgovarajućih vrednosti vektora položaja $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$. Uslov normiranja talasne funkcije je:

$$\int |\psi|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N = 1.$$

Stanje kvantnog sistema smatra se poznatim ako je poznata talasna funkcija sistema.

- Egzaktno izračunavanje svih mogućih stanja sistema, rešavanjem jednačine (10), praktično je nemoguće, kako usled složenosti tako i zbog nemogućnosti poznavanja neophodnih početnih i graničnih uslova.
- Za stanja statističke ravnoteže, kada nema promena u vremenu, formiranje prostora u kome se može prikazati skup svih kvantnih stanja sistema je mnogo jednostavniji.

- Posmatračemo zato slučaj zatvorenih sistema u ravnoteži. To su sistemi kod kojih se ne menja unutrašnja energija, a ni broj čestica.

Pojam zatvoreni sistem je širi od pojma izolovanog sistema i obuhvata i sistem u termostatu. Za razliku od njih oni se mogu nalaziti u konzervativnom spoljašnjem polju.

Šredingerova jednačina (10) prelazi u stacionarnu formu:

$$\hat{H}\psi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = E_n \psi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (12)$$

- Energetsko stanje sistema E_n predstavlja njegovo kvantno stanje. Tom kvantnom stanju odgovara talasna funkcija $\psi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$.

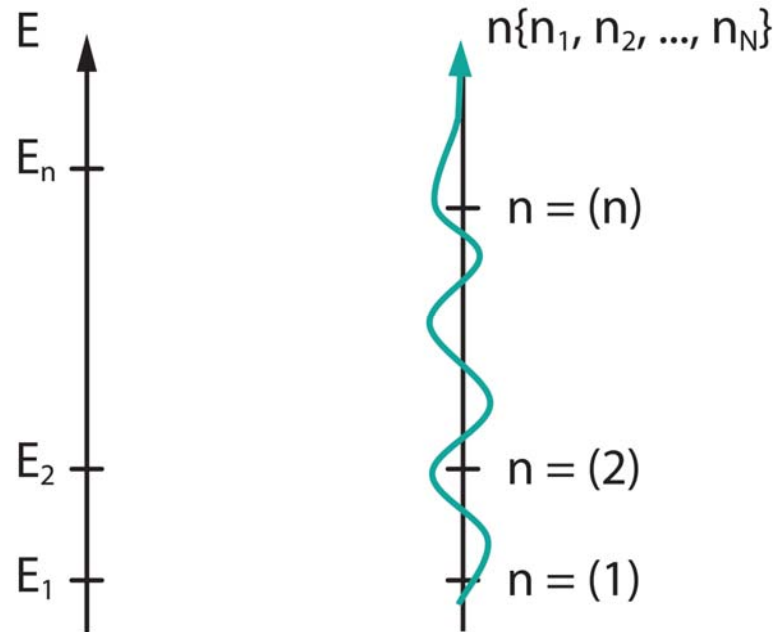
- U slučaju idealnog gasa interakcija između čestica se može zanemariti, dok se talasna funkcija sistema može napisati kao proizvod talasnih funkcija pojedine čestice.
- Ako se pretpostavi da se čestice nalaze unutar nekonačno duboke trodimenzionalne potencijalne jame, stanje čestica može biti određeno skupom od tri, odnosno četiri kvantna broja $n_i = \{n_x, n_y, n_z, n_s\}$, gde je poslednji broj spinski kvantni broj n_s .
- Talasna funkcija nije neophodna: dovoljno je poznavati skup svih kvantnih brojeva pojedinih čestica $n\{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_N\}$, čime je definisano *kvantno stanje sistema*.
- Energija sistema u tom kvantnom stanju određena je sumom energija pojedinih kvantnih stanja po svim česticama:

$$E_n = \sum_{i=1}^N E_{n_i} . \quad (13)$$

Na taj način opisivanje mikro stanja sistema sveli smo na poznavanje stanja pojedine čestice.

Kvantni prostori

- Stanje zatvorenog sistema u ravnoteži određeno je skupom stanja pojedinih čestica $n\{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_N\}$, što predstavlja diskretan zapis dimenzije reda $4N$ i naziva se *n-prostor*.
- Evoluciju kvantnih sistema možemo pratiti u n-prostoru. U njemu svaka tačka opisuje neko od kvantnih stanja sistema. Ovaj prostor analogan je Γ -faznom prostoru korišćenom u slučaju klasične statistike.



Šematski prikaz n -prostora

- n -prostor je diskretan 4ND prostor pa se stanje sistema karakteriše verovatnoćom f_n , da se desi kvantno stanje sa energijom E_n . Kako se sistem svakako nalazi u nekom od

ponuđenih kvantnih stanja, to je uslov normiranja verovatnoće, u ovom diskretnom prostoru:

$$\sum_n f_n = 1. \quad (14)$$

- Sada je srednja vrednost neke fizičke veličine, kada je poznata verovatnoća za pojavu željenog kvantnog stanja sistema, određena relacijom:

$$\bar{A} = \sum_n A f_n. \quad (15)$$

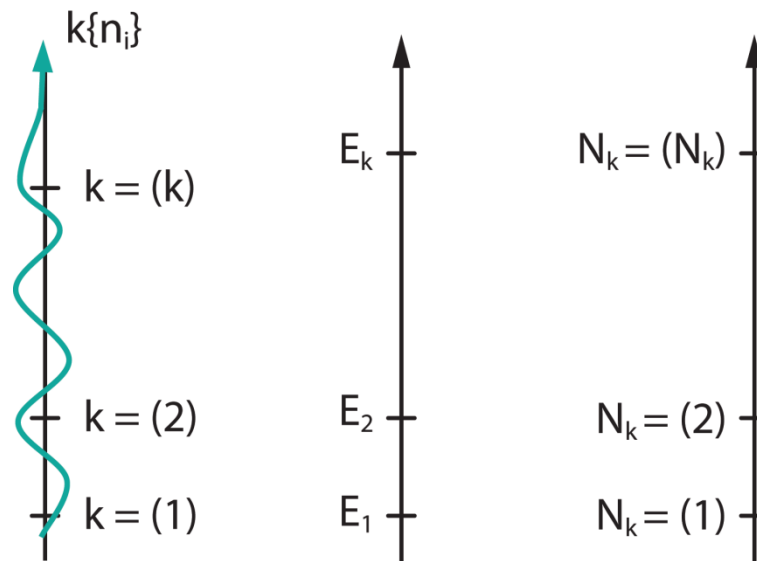
- Prema Hajzenbergovoj relaciji neodređenosti, za jednu česticu mora biti zadovoljen uslov $\Delta r \Delta p \geq h^3$. U slučaju sistema od N čestica Hajzenbergova relacija neodređenosti glasi:

$$\prod_{i=1}^N d\mathbf{p}_i d\mathbf{r}_i = dX \geq h^{3N}, \quad (16)$$

što ukazuje da je zapremina kvantnog stanja sistema, u Γ - faznom prostoru reda h^{3N} . Odavde sledi da je, u elementarnoj zapremini dX , broj kvantnih stanja sistema određen odnosom: dX/h^{3N} .

- Kvantna mehanika ne razlikuje čestice, tako da zamenom čestica po stanjima, ukupno stanje sistema ostaje nepromenjeno.
- Broj mogućih permutacija, koje predstavljaju isto stanje je $N!$. Odavde sledi da je broj kvantnih stanja u elementarnoj zapremini dX , određen izrazom: $dX/(N!h^{3N})$.

- Analogno μ -faznom prostoru za klasične sisteme, za opisivanje evolucije sistema može se uvesti takozvani *k-prostor*.
- Ovaj prostor čini skup svih mogućih, ali različitih kvantnih stanja pojedinih čestica, koje se nalaze u kvantnom sistemu: $k\{n_i\}$.
- To je diskretan prostor, čiji je stepen dimenzionalnosti određen brojem podataka za opisivanje kvantnog stanja jedne čestice, u našem slučaju 4D.
- U odnosu na n-prostor njegova dimenzionalnost je N puta niža.



Karikatura k -prostora

- U nekom kvantnom stanju k , kojem odgovara energija E_k nalazi se N_k čestica.

Neka je f_{N_k} verovatnoća da se na energetsom nivou E_k nađe N_k čestica. Kako će se na nekom kvantnom stanju čestice svakako naći neki broj čestica ili nijedna, to se ova verovatnoća normira na sledeći način:

$$\sum_{N_k} f_{N_k} = 1. \quad (17)$$

gde suma ide po svim mogućim vrednostima za broj čestica na tom nivou. Srednja vrednost neke fizičke veličine koja zavisi od ove raspodele, određena je relacijom:

$$\bar{A} = \sum_{N_k} A f_{N_k}. \quad (18)$$

- U elementarnoj zapremini $drdp$ μ -faznog prostora nalazi $drdp/h^3$ kvantnih stanja čestice.

2. KVANTNI SISTEMI U RAVNOTEŽI

Analiza stanja sistema primenom n -prostora

- U slučaju kvantnih sistema koji su izolovani i nalaze se u TDR, analizu stanja možemo izvršiti koristeći n -prostor.
- U ovom 4ND prostoru kvantno stanje sistema je zapis koji predstavlja tačku.
- Verovatnoća da se sistem nađe u nekom kvantnom stanju n , sa energijom E_n je f_n .
- Poznavanje verovatnoće za pojavu mikrostanja sistema omogućuje nam izračunavanje srednje vrednosti željene makroskopske veličine korišćenjem relacije (15).

- Za izolovane sisteme nema razmene energije sa okolinom tako da se njegova ukupna energija E_n ne menja, i jednaka je konstantnoj vrednosti E .
- Umesto δ funkcije uvodi se Kronekerov simbol, definisan na sledeći način:

$$\delta_{E_n, E} = \begin{cases} 1 & E_n = E \\ 0 & E_n \neq E \end{cases} .$$

Sada je verovatnoća za pojavu mikrostanja izolovanog kvantnog sistema određena izrazom:

$$f_n = C\delta_{E_n, E},$$

gde je C konstanta normiranja, a dobija se korišćenjem uslova normiranja (14), i iznosi:

$$C = \frac{1}{\sum_n \delta_{E_n, E}}.$$

- Kod sistema koji se nalaze u termostatu, primeniće se analogija sa rešenjem koje je dobijeno za klasične sisteme u kojoj je pored temperature jedina promenljiva ukupna energija sistema (kanonska raspodela Gibbsa). Izraz za verovatnoću za pojavu mikrostanja kvantnog sistema postaje:

$$f_n = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_n}{kT}}, \quad (19)$$

gde je Z statistička suma određena iz uslova normiranja (14) i iznosi:

$$Z = \sum_n e^{-\frac{E_n}{kT}}. \quad (20)$$

- Srednja vrednost makroskopske fizičke veličine kvantnih sistema određuje se izrazom:

$$\bar{A} = \sum_n A f_n.$$

- Relacije za veličine stanja, koje su izvedene za idealan gas klasičnih sistema, mogu biti popravljene ukoliko je potrebno, tako da uzmu u obzir kvantnu prirodu čestica.
- Naime, statistička suma Z u slučaju klasičnih sistema određena je relacijom:

$$Z = \int e^{-\frac{H}{kT}} dX.$$

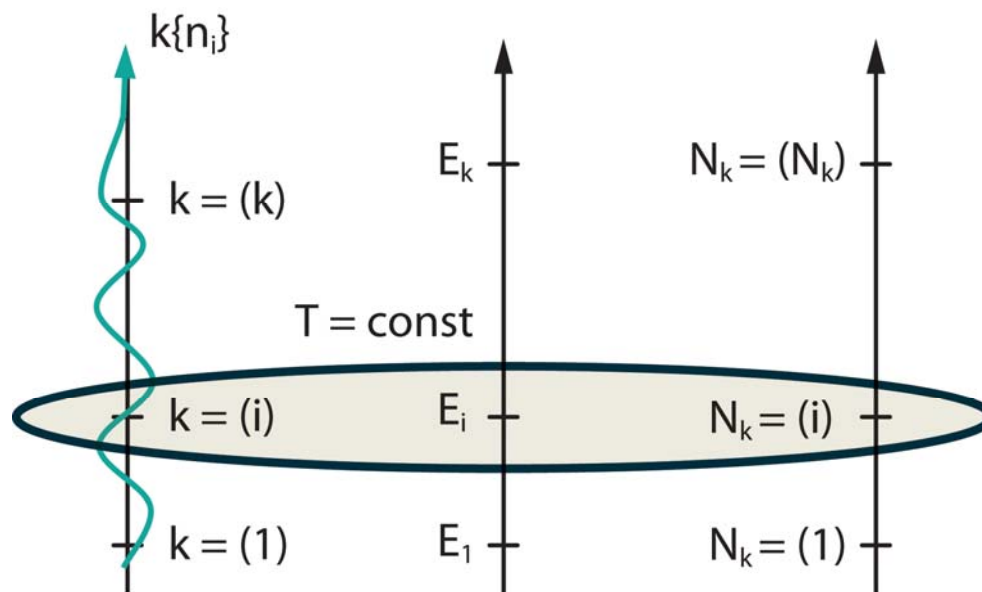
U kvantnim sistemima stanja su diskretna, a ne kontinualna, pa zato postoje zabranjeni delovi ovog prostora. Za korigovanu vrednost statističke sume dobijamo:

$$Z_{\text{kor.}} = \frac{1}{N!h^{3N}} \int e^{-\frac{H}{kT}} dX. \quad (21)$$

Analiza stanja sistema primenom k-prostora

- Analiza kvantnih sistema primenom k -prostora podrazumeva da se radi o zatvorenom sistemu, ali takvom kod koga se interakcija između čestica može zanemariti.
- To je 4D diskretan prostor.

- Praćenje stanja sistema vrši se na skupu mogućih stanja jedne čestice ovog sistema $\{n_i\}$. Od interesa je odrediti verovatnoću f_{N_k} nalaženja nekog broja čestica, recimo N_k , na nekom kvantnom stanju čestice k , kome odgovara energija čestice E_k .



Prikaz i -tog kvantnog stanja koje se nalazi u termostatu, a koji čine ostala kvantna stanja.

- Uticaj ostalih kvantnih stanja na uočeno stanje uzima se u obzir pretpostavkom da se uočeno stanje nalazi okruženo termostatom na temperaturi T.
- Verovatnoća da se desi željeno mikro stanje, a to je da se na k-tom kvantnom stanju, kome odgovara energija E_k , nađe N_k čestica biće određena relacijom (19), odnosno:

$$f_{N_k} = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_k N_k}{kT}} = e^{\frac{F - E_k N_k}{kT}}, \text{ gde je: } F = -kT \ln Z = \Omega + \mu N_k.$$

- Ovde je Ω deo energije koji je sposoban da izvrši mehanički rad, a μ je energija koja može biti uložena u pobuđivanje pojedine čestice ili u elektrohemijsku vezu čestice sa okolinom, tzv. *elektrohemijski potencijal*. Odavde dobijamo:

$$f_{N_k} = e^{\Omega} e^{\frac{(\mu - E_k)N_k}{kT}} = C e^{-\frac{(E_k - \mu)N_k}{kT}}.$$

- Koristeći uslov normiranja $\sum_{N_k} f_{N_k} = 1$, konstantu C postaje:

$$C = \frac{1}{\sum_{N_k} e^{-\frac{(E_k - \mu)N_k}{kT}}}.$$

Sada možemo odrediti srednji broj čestica koji se našao na kvantnom stanju k sa energijom E_k . Dobijamo da je $\overline{N_k}$ određen relacijom (18):

$$\bar{N}_k = \sum_{N_k} N_k f_{N_k} = \frac{\sum_{N_k} N_k e^{-\frac{(E_k - \mu)N_k}{kT}}}{\sum_{N_k} e^{-\frac{(E_k - \mu)N_k}{kT}}}. \quad (22)$$

Uvođenjem smene:

$$S = \sum_{N_k} e^{-\frac{(E_k - \mu)N_k}{kT}}, \quad (23)$$

dobijamo da je:

$$\bar{N}_k = - \frac{\frac{\partial S}{\partial \left(\frac{E_k - \mu}{kT} \right)}}{S}. \quad (24)$$

- Podsetimo se da je suma čestica po kvantnim stanjima jednaka ukupnom broju čestica, odnosno:

$$\sum_k N_k = N.$$

Suma srednjih vrednosti čestica po svim mogućim kvantnim stanjima čestice, takođe je jednaka ukupnom broju čestica N , odnosno imamo da je:

$$\sum_k \overline{N_k} = \sum_k \sum_{N_k} N_k f_{Nk} = \sum_{N_k} \sum_k N_k f_{Nk} = \sum_{N_k} f_{Nk} \sum_k N_k = N. (25)$$

Fermi-Dirakova funkcija raspodele

- Fermioni su kvantne čestice koje podležu Fermi-Dirakovoj statistici.

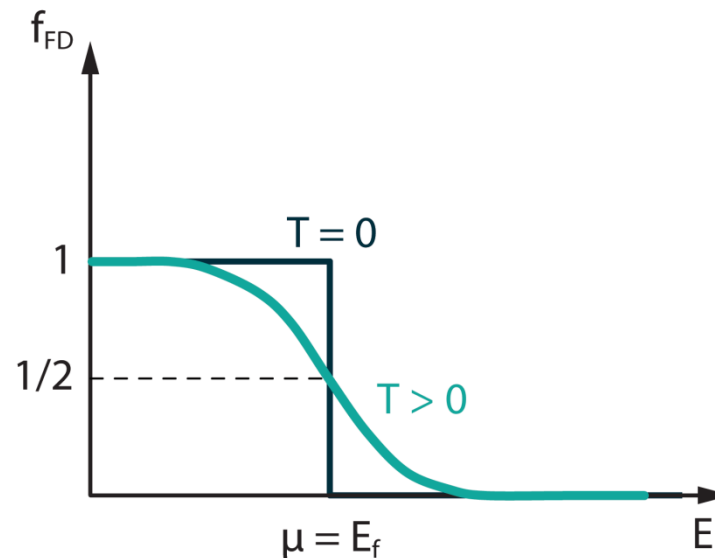
- U ove čestice spadaju elementarne čestice sa polovičnim spinom: elektroni, protoni, neutroni i kvarkovi.
- Za ove kvantne čestice važi Paulijev princip tako da se u jednom kvantnom stanju može naći nijedna ili samo jedna čestica, odnosno $N_k = 0,1$.
- Koristeći relaciju (22) dobijamo za srednji broj fermiona:

$$\bar{N}_k = \frac{e^{-\frac{E_k - \mu}{kT}}}{1 + e^{-\frac{E_k - \mu}{kT}}} = \frac{1}{1 + e^{\frac{E_k - \mu}{kT}}}.$$

- Kako je verovatnoća da neko kvantno stanje bude zauzeto $f_{\text{FD}}(E_k) = \frac{\bar{N}_k}{1}$, Fermi Dirakova funkcija raspodele određena je izrazom:

$$f_{\text{FD}}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_f}{kT}} + 1}, \quad (26)$$

gde je energija kvantnog stanja označena sa E , a elektrohemijski rad, koji kod fermionskog gasa predstavlja karakterističnu energiju označen je sa E_f . Ova energija zove se *Fermijeva energija*.



- Na temperaturi apsolutne nule $T = 0 \text{ K}$ svi energetske nivoi ispod E_f su prazni a svi iznad su popunjeni. Za sve vrednosti temperature, verovatnoća zauzetosti stanja određenog Fermijevom energijom jednaka je $1/2$.

Boze-Ajnštajnova funkcija raspodele

- Čestice koje podležu Boze-Ajnštajnovoj statistici nazivaju se *bozonima*. U ovu grupu čestica spadaju fotoni, fononi, W i Z bozoni i gluoni (Higsovi bozoni i gravitoni).
- Kod njih se javlja degeneracija stanja, odnosno moguće je da se na jednom energetskom stanju nađe: nijedna, više čestica, ili čak sve čestice, odnosno $N_k = 0, 1, \dots, \infty$.
- Izračunavanje srednje vrednosti broja čestica $\overline{N_k}$ izvršićemo primenom relacija (23) i (24). Dakle imamo:

$$S = \sum_{N_k} e^{-\frac{(E_k - \mu) N_k}{kT}} = 1 + e^{-\frac{E_k - \mu}{kT}} + (\dots)^2 + \dots$$

- Sumiranje se obavlja po svim mogućim vrednostima za broj čestica na nekom kvantnom stanju, dakle $N_k = 0, 1, \dots, \infty$. Suma odgovara sumi geometrijske progresije.
- Kako je za ovu raspodelu $E_k > \mu$, suma se obavlja po članovima koji su manji od jedinice, što daje:

$$S = \frac{1}{1 - e^{-\frac{E_k - \mu}{kT}}}.$$

Odnosno:

$$\bar{N}_k = - \frac{\partial S}{\partial \left(\frac{E_k - \mu}{kT} \right)} = \frac{1}{e^{\frac{E - \mu}{kT}} - 1} = \bar{N}_{BE}(E). \quad (27)$$

Ovako dobijena raspodela srednjeg broja bozona $\bar{N}_{BE}(E)$ po energijama naziva se *Boze-Ajnštajnova raspodela*.

- Pretpostavljeni uslov $E_k > \mu$, proističe iz fizičkog ograničenja da je $\bar{N}_{BE} \geq 0$. Kod fotonskog gasa $\mu = 0$.

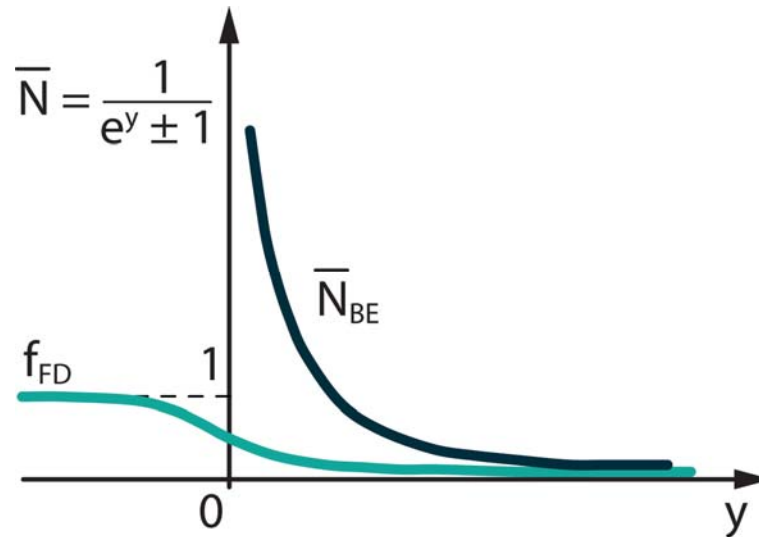
Poređenje kvantnih raspodela

- Uvodimo novu nezavisnu promenljivu: $y = (E - \mu)/kT$.
- Fizička ograničenja:

1. energija čestice $E \geq 0$,
2. srednji broj čestica $\bar{N} \geq 0$.

- Zavisnost srednjeg broja čestica, u funkciji od y ima sledeću

formu: $\bar{N}(y) = \frac{1}{e^y \pm 1}$.



Poređenje kvantnih raspodela

- Fermi-Dirakova raspodela ima fizički smisao verovatnoće zauzetosti kvantnih stanja, dok Boze-Ajnštajnova predstavlja raspodelu srednjih vrednosti broja čestica po kvantnim stanjima.
- Kada je $y \gg 0$ funkcije raspodele postaju slične, jer je vrednost jedinice zanemarljiva u odnosu na vrednost eksponenta u imeniocu.
- Za jako velike vrednosti y , odnosno energije, kvantna priroda čestica postaje irelevantna, tako da zavisnost ovih raspodela postaje slična kanonskoj raspodeli Gibbsa, gde raspodela zavisi eksponencijalno od energije:

$$\bar{N}(y) \approx e^{-y}. \quad (28)$$

Kvazi-kvantna Bolcmanova statistika za atomski gas

- Posmatra se sistem atoma koji se kreću pod dejstvom spoljašnjeg polja, pri čemu atomi mogu da budu pobuđeni u neko više energetska stanje.
- Stanje pojedinih atoma i celog sistema se opisuje pomoću kvantne statistike.
- Pitanje je da li postoji prostiji pristup koji je istovremeno fizički opravdan i to takav da se njegovo kretanje opisuje klasično, poznavanjem koordinate i impulsa atoma, ali istovremeno i stepenom njegove pobuđenosti, odnosno nivoom na kome se našao elektron (slika 27). Ovakav pristup zove se *kvazi-kvantna Bolcmanova statistika*.

- Potrebno je odrediti uslove koji moraju da budu zadovoljeni da bi ovakav pristup bio opravdan.
- Posmatraju se atomi, koji su okruženi drugim atomima, i koji sa nalaze u 3D beskonačno dubokoj potencijalnoj jami koju ovi ostali atomi stvaraju.

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2),$$

gde je E_n energija kvantnog stanja, a - je dimenzija trodimenzionalne jame, n_x , n_y , n_z kvantni brojevi koji odgovaraju tom kvantnom stanju.

E_n je energija veze u tom zatečenom stanju.

- Dimenzija 3D potencijalne jame je jednaka srednjem rastojanju r_s između atoma u sistemu u sva tri pravca. Usvojicemo i da su vrednosti kvantnih brojeva jednaki i iznose n . Tada se za energiju veze atoma u tom stanju može proceniti:

$$E_{\text{veze}} \approx n^2 \frac{h^2}{mr_s^2}.$$

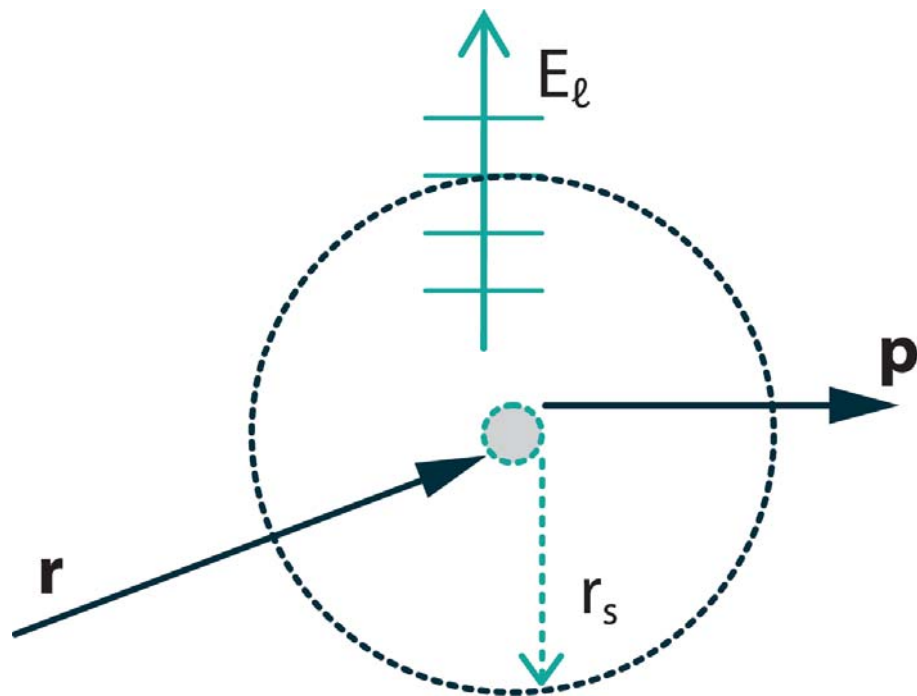
- Kako je srednja kinetička energija kod klasičnog gasa reda kT , to dobijamo da uslov koji označava da se kretanje atoma može tretirati klasično u stvari slučaj kada je kinetička energija atoma mnogo veća od njegove energije veze:

$$E_{\text{kin}} = kT \gg E_{\text{veze}} \approx \frac{h^2}{mr_s^2}.$$

Kod ovakvih nejednakosti opravdano je da brojčane konstante, a time i vrednost za kvantni broj n možemo svesti na jedinicu.

- Dobijamo da upravo temperatura termostata T određuje uslov kada je moguće primeniti kvazi klasičnu Bolcmanovu statistiku. Ta temperatura zove se *temperatura degeneracije* i iznosi: $T_{\text{deg}} = h^2 / (k m r_s^2)$. Kako je srednje rastojanje između čestica r_s vezano sa koncentracijom n relacijom: $r_s = n^{-1/3}$ to je:

$$T_{\text{deg}} = \frac{h^2 n^{2/3}}{mk}. \quad (29)$$



Sl. 27. Prikaz stanja atoma u kvazi kvantnoj statistici

- Kvazi-kvantnu Bolcmanovu statistiku je moguće primeniti kada je

$$T \gg T_{\text{deg}}, \quad (30)$$

Tada stanje atoma možemo opisati tako da je njegovo kretanje određeno položajem i impulsom, a pobuđeno stanje kvantnim brojem koji definiše stanje elektrona na njemu.

- Kada je gornji uslov zadovoljen moguće je stanje pojedinog atoma opisati poznavanjem njegove koordinate \mathbf{r} , impulsa \mathbf{p} , i rednog broja kvantnog stanja ℓ , odnosno sedmo dimenzionog zapisa $(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \ell)$. Energija atoma E tada je određena sumom kinetičke i potencijalne energije atoma i energije elektrona koji se nalazi na kvantnom stanju označenim rednim brojem ℓ :

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U_0(\mathbf{r}) + E_\ell. \quad (31)$$

- Odavde, srednji broj atoma koji se nalazi u tom posmatranom stanju može se odrediti kombinovanjem rezultata koji smo dobili u klasičnoj i kvantnoj statistici.
- Statistika kvantnih sistema pri dovoljno velikim energijama gubi kvantnu prirodu pa tada podseća na Gibsovu statistiku.
- Srednji broj atoma u nekom stanju \bar{N}_k , bolje rečeno u nekom kvazi kvantnom stanju, koje je opisano sa energijom atoma datim izrazom (31), može biti iskazana relacijom (28):

$$\bar{N}_k \approx e^{-\frac{E-\mu}{kT}} . \quad (32)$$

- Polazeći od ovog izraza, sumiranjem je moguće dobiti ukupan broj čestica u sistemu N.
- To znači da je potrebno izvršiti integraciju po koordinatama i impulsima čestice, a rezultat podeliti sa zapreminom kvantnog

stanja h^3 i istovremeno obaviti klasično sumiranje po kvantnim stanjima koje se nude pojedinom elektronu u atomu:

$$\sum_{\mathbf{r}, \mathbf{p}, \ell} e^{-\frac{E - \mu}{kT}} = \int \sum_{\ell} \frac{d\mathbf{r} d\mathbf{p}}{h^3} e^{-\frac{\frac{p^2}{2m} + U_0(\mathbf{r}) + E_{\ell} - \mu}{kT}} = N.$$

- Koristeći ovu relaciju moguće je odrediti elektrohemijski potencijal μ . Usvojićemo da je potencijalna energija spoljašnjeg polja jednak nuli, tako da dobijamo da je:

$$e^{\frac{\mu}{kT}} \frac{1}{h^3} \int e^{-\frac{p^2}{2mkT}} d\mathbf{p} \int d\mathbf{r} \left[\sum_{\ell} e^{-\frac{E_{\ell}}{kT}} \right] = N,$$

odakle je:

$$e^{\frac{\mu}{kT}} = \frac{Nh^3}{(2\pi mkT)^{3/2} V \sum_{\ell} e^{-\frac{E_{\ell}}{kT}}}. \quad (33)$$

- U slučaju da su svi atomi pobuđeni na isti način i da se na primer nalaze se na prvom energetsom stanju ($\ell = 1$), suma po ℓ postaje

$$\sum_{\ell} e^{-E_{\ell}/(kT)} = e^{-E_1/(kT)},$$

te za vrednost elektrohemijuskog potencijala u ovom slučaju dobijamo:

$$\mu = kT \ln \left[\frac{nh^3}{(2\pi mkT)^{3/2}} e^{\frac{E_1}{kT}} \right]$$

- Pokazaćemo da je aproksimacija (28) opravdana, odnosno da je ona zadovoljena ako je zadovoljen uslov (30):

$$T \gg T_{\text{deg}} \rightarrow \bar{N}(y) \approx e^{-y}.$$

Uslov za korišćenje relacije $\bar{N}(y) \approx e^{-y}$ glasi:

$$e^{\frac{E-\mu}{kT}} \gg 1.$$

Ako zanemarimo spoljašnju potencijalnu energiju, uvođenjem izraza za energiju čestice (31) dobijamo da je:

$$e^{\frac{p^2}{2mkT}} e^{\frac{E_\ell}{kT}} \gg e^{\frac{\mu}{kT}}.$$

- Pošto je srednja kinetička energija reda kT , to prvi eksponent u gornjem izrazu može da se uzme da je jednak jedinici pa

dobijamo da je $\exp(E_\ell / (kT)) \gg \exp(\mu / (kT))$. Korišćenjem izraza (33) za ovu nejednakost dobijamo:

$$e^{\frac{E_\ell}{kT}} \gg \frac{nh^3}{(2\pi mkT)^{3/2} \sum_{\ell} e^{-\frac{E_\ell}{kT}}},$$

- Vrednosti za E_ℓ date su na skupu: $E_1 > E_2 > \dots > E_{\ell_{\min}}$. Kada u eksponentu sa leve strane za vrednost E_ℓ uzimamo energiju koja je najmanja, ova relacija će i dalje biti zadovoljena. Dobijamo:

$$\frac{\sum_{\ell} e^{-\frac{E_\ell}{kT}}}{e^{-\frac{E_{\ell \min}}{kT}}} \gg \frac{nh^3}{(2\pi mkT)^{3/2}}.$$

- Razvijanjem sume, i izvlačenjem ispred nje izraza $\exp(-E_{\ell \min}/(kT))$, ovaj izraz postaje:

$$\frac{e^{-\frac{E_{\ell \min}}{kT}} \left(1 + e^{-\frac{E_1 - E_{\ell \min}}{kT}} + e^{-\frac{E_2 - E_{\ell \min}}{kT}} + \dots \right)}{e^{-\frac{E_{\ell \min}}{kT}}} \gg nh^3 (2\pi mkT)^{-3/2}.$$

- Kako su eksponencijalni izrazi u zagradi manji od jedinice, to se usvajanjem da je njihova najveća vrednost reda jedinice, može postaviti stroži uslov, takav da ako je on zadovoljen onda je sigurno zadovoljen i ovaj prethodni. Dobijamo:

$$1 \gg nh^3 (2\pi mkT)^{-3/2}.$$

- Odavde se može odrediti kritična vrednost za temperaturu kao uslov za primenu aproksimacije (28), odnosno:

$$T \gg h^2 n^{2/3} / (mk) = T_{\text{deg}}.$$

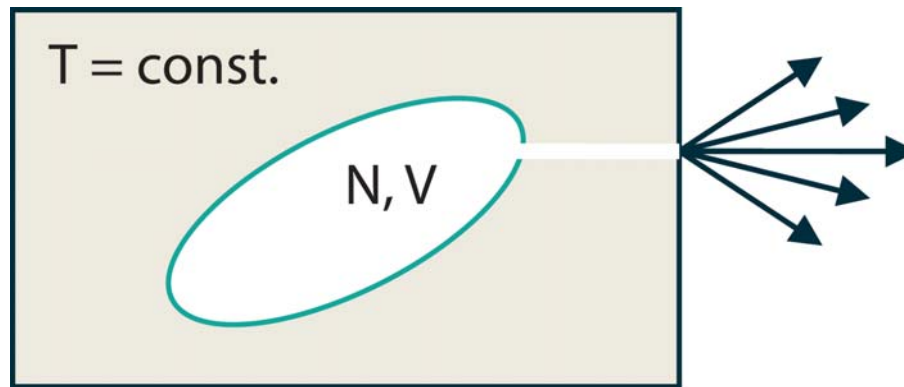
- Uslov, koji je potreban da bi primenili aproksimaciju izračunavanja srednjeg broja čestica prema relaciji (28), istovetan je uslovu o degeneraciji gasa, što je osnovni i jedini uslov koji mora biti ispunjen da bi se mogao primeniti model kvazi kvantne Boltzmanove statistike.

Primena kvantne statističke fizike

Fotonski gas – zračenje apsolutno crnog tela

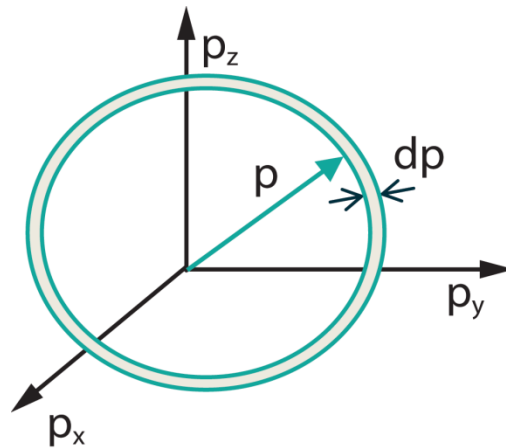
- Pod fotonskim gasom podrazumevamo skup fotona, koji se u skladu sa svojom kvantnom prirodom ponašaju kao čestice koje imaju intenzitet impulsa p , energiju prenose u kvantima $E = mc^2$, nemaju masu u stanju mirovanja, a kreću se brzinom svetlosti c .

- Gas se nalazi unutar šupljine zapremine V okružen termostatom temperature T .
- Gas se nalazi u stanju termodinamičke ravnoteže: broj fotona koji se emituje ili apsorbuje u jedinici vremena sa površine koja ga okružuje je isti pa je srednji broj čestica konstantan, odnosno $\bar{N} = \text{const.}$



Apsolutno crno telo u kome se nalazi fotonski gas.

- Postulati kvantne mehanike:
 - 1) $\lambda = h/p$
 - 2) $E = hv = cp = mc^2$ gde je $v = c/\lambda$.
- Potrebno je odrediti broj kvantnih stanja $dG(p)$ koja se nalaze u intervalu $(p, p+dp)$, odnosno u sferi poluprečnika p , debljine dp .



Prikaz sfere sa poluprečnikom p i debljinom dp u impulsnom prostoru.

- U μ -prostoru zapremina kvantnog stanja reda h^3 .
- Da bi odredili ovaj broj kvantnih stanja $dG(p)$ izračunaćemo zapreminu koju ima ova sfera u impulsnom prostoru i pomnožiti sa zapreminom prostora V u kome se mogu kretati fotoni. Ovako dobijena zapremina u μ -prostoru, kada se podeli sa zapreminom jednog kvantnog stanja, daje broj kvantnih stanja $dG(p)$, pa imamo:

$$dG(p) = \frac{V4\pi p^2 dp}{h^3}. \quad (34)$$

- Zbog polarizacije sledi da sa intenzitetom impulsa p mogu biti dva fotona koji imaju dve različite polarizacije. Zbog toga je stvarni broj kvantnih stanja dva puta veći.

- Broj fotona $dN(p)$, čiji se impulsi nalaze u intervalu $(p, p + dp)$, dobićemo množenjem relacije kojom je određen broj kvantnih stanja (34), uzimanjem u obzir i polarizaciju, sa srednjim brojem fotona koji se nalazi na nekom kvantnom stanju (27). Kako je $E = cp$, to dobijamo:

$$dN(p) = \frac{2V}{h^3} \frac{4\pi p^2 dp}{e^{\frac{cp}{kT}} - 1}.$$

- Odavde je moguće odrediti spektralnu gustinu zračenja za apsolutno crno telo, odnosno izvesti Planckov zakon zračenja.
- Spektralna gustina zračenja je energija izračena po jedinici zapremine i po jedinici učestanosti u intervalu učestanosti $(\nu, \nu + d\nu)$:

$$\omega(\nu) = \frac{dN(\nu)}{V d\nu} h\nu.$$

- Broj fotona čije se učestanosti nalaze u ovom intervalu jednak je broju fotona $dN(p)$, čiji se impulsi nalaze u intervalu $(p, p + dp)$, jer postoji jednoznačno preslikavanje vrednosti intenziteta impulsa u učestanost: $p = h\nu/c$ i $dp = h d\nu/c$.
- Za spektralnu gustinu zračenja $\omega(\nu)$ dobijamo:

$$\omega(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}. \quad (35)$$

- Plankov zakon zračenja crnog tela je izveden primenom kvantne statistike za ravnotežno stanje sistema fotonskog gasa.

- Originalno izvođenje Planka bazira se na hipotezi o kvantovanju energije oscilatora.
- Ova spektralna gustina zračenja ima svoje aproksimacije za male i za velike vrednosti učestanosti.
- Za male vrednosti ν imamo:

$$e^{\frac{h\nu}{kT}} = 1 + \frac{h\nu}{kT} + \dots,$$

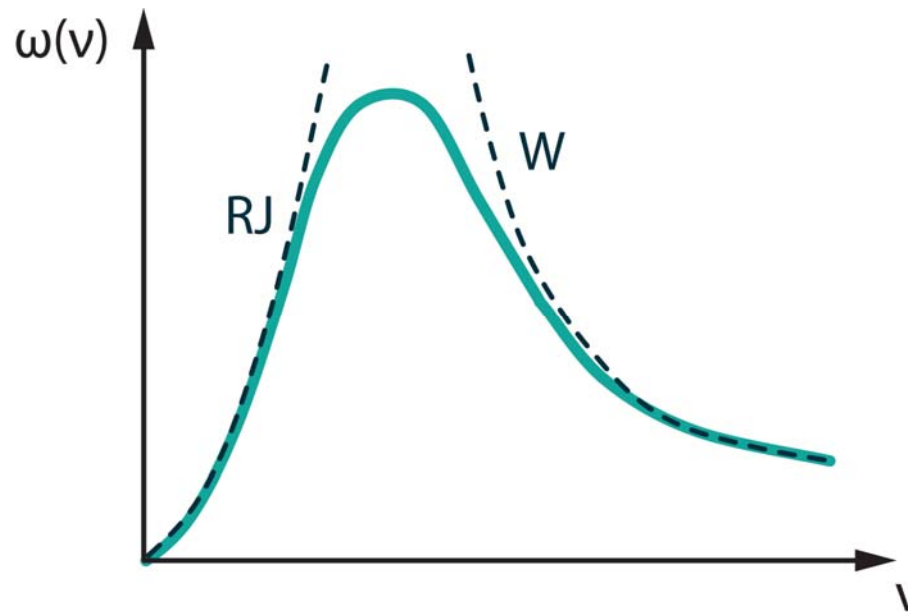
tako da sada izraz (35) postaje:

$$\omega(\nu) = \frac{8\pi\nu^2 kT}{c^3},$$

što predstavlja **Rejli-Džinsovu aproksimaciju**.

- U slučaju velikih vrednosti ν , odnosno kada $\nu \rightarrow \infty$, dobijamo Vinovu aproksimaciju za spektralnu gustinu zračenja:

$$\omega(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} e^{-\frac{h\nu}{kT}}.$$



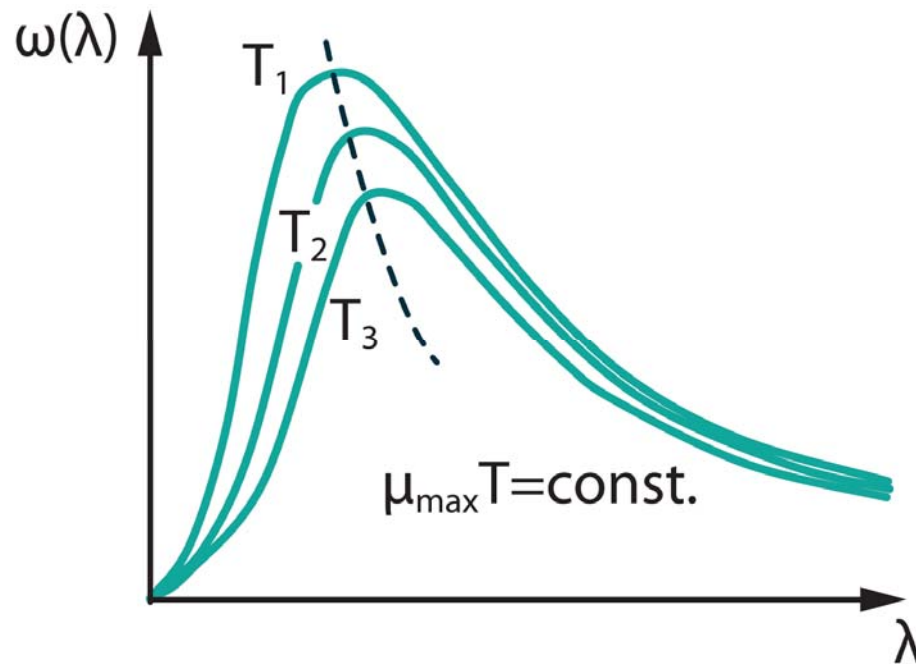
Spektralna gustina zračenja i njene aproksimacije

- Spektralna gustina zračenja crnog tela prikazana u funkciji od talasne dužine svetlosti λ .

Kako je $dN(\nu) = dN(\lambda)$, jer je $\nu = c/\lambda$, kao i $d\nu = |-c/\lambda^2| d\lambda$ (ν i λ su pozitivne veličine), to za $\omega(\lambda)$ dobijamo

$$\omega(\lambda) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}, \quad (36)$$

koja predstavlja energiju izračenu po jedinici zapremine i po jedinici talasne dužine u intervalu $(\lambda, \lambda + d\lambda)$.



Spektralna gustina zračenja u funkciji od talasne dužine ($T_1 > T_2 > T_3$).

- Maksimumi krivih se pomeraju sa temperaturom u smeru manjih talasnih dužina. Ovo pomeranje poznato je kao **Vinov zakon pomeranja**.

Polazeći od izraza (36), traženjem prvog izvoda po λ , možemo odrediti vrednost talasne dužine λ_{\max} za koji imamo maksimalnu spektralnu gustinu na datoj temperaturi:

$$\lambda_{\max} T = \text{const.}$$

Elektronski gas u metalu

- Kod metala je $E_f > E_c$, tako da su zone ispod provodne potpuno popunjene i za slučaj kada je $T \gg 0$ K. To omogućuje da ponašanje elektrona u metalu možemo posmatrati na modelu jedne zone.
- Energija elektrona u metalu određena je relacijom:

$$E = E_c + \mathbf{p}^2 / 2m_c. \quad (37)$$

gde je \mathbf{p} impuls elektrona čija je efektivna masa m_c .

- Odredićemo prvo raspodelu kvantnih stanja po impulsima:

$$dG(p) = \frac{V4\pi p^2 dp}{h^3}. \quad (38)$$

- Elektron po svojoj kvantnoj prirodi poseduje i spin, tako da elektron sa istim impulsom može da ima dva stanja, te je potrebno ovaj izraz pomnožiti sa dva.
- Kako je energija elektrona sa njegovim impulsom jednoznačno vezana, sledi da je $dG(p) = dG(E)$, pri čemu je:

$$p = \sqrt{2m_c(E - E_c)} \quad \text{i} \quad dp = \frac{m_c dE}{\sqrt{2m_c(E - E_c)}},$$

a uvođenjem ovih relacija u (38) dobijamo:

$$dG(E) = \frac{8\pi V}{h^3} m_c \sqrt{2m_c(E - E_c)} dE,$$

što predstavlja broj kvantnih stanja elektrona koji se nalaze u energetsom intervalu $(E, E + dE)$.

- Da bi odredili broj elektrona koji se nalazi u intervalu energija $(E, E + dE)$, potrebno je da ovaj izraz pomnožimo sa verovatnoćom da ta stanja budu zauzeta odnosno Fermi-Dirakovom raspodelom:

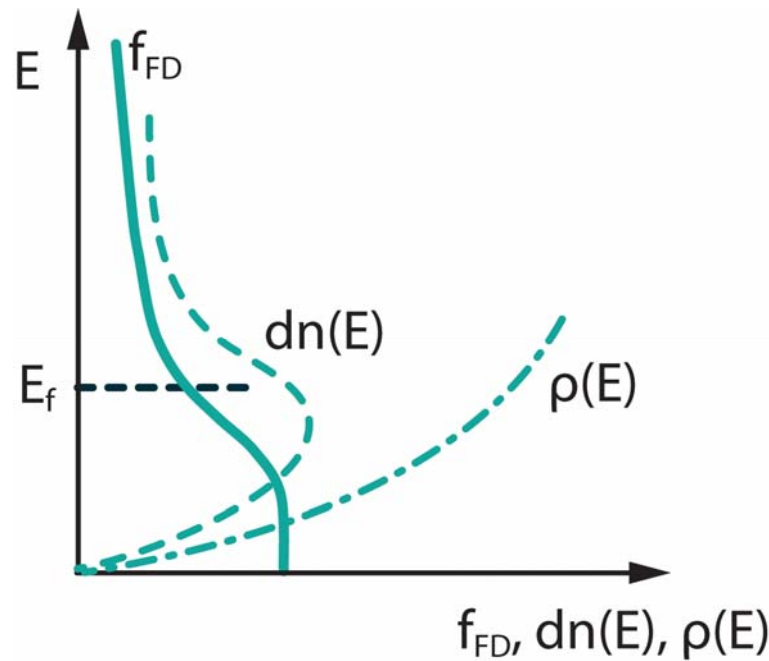
$$dN(E) = dG(E) f_{FD}(E).$$

- Elementarna koncentracija elektrona koja se nalazi u ovom intervalu je:

$$dn(E) = \rho(E) f_{FD}(E) dE = \frac{4\pi}{h^3} (2m_c)^{3/2} \frac{\sqrt{E - E_c}}{e^{\frac{E - E_f}{kT}} + 1} dE. \quad (39)$$

gde smo uveli pojam gustine kvantnih stanja definisane relacijom:

$$\rho(E) = \frac{dG(E)}{VdE} = \frac{8\pi}{h^3} m_c \sqrt{2m_c (E - E_c)}. \quad (40)$$



Zavisnost: $dn(E), f_{FD}(E)$ i $\rho(E)$.

- Odredimo sada koncentraciju elektrona u metalu. Da bi to uradili potrebno je izraz (39) integraliti po svim mogućim vrednostima za energiju koju elektroni mogu da imaju u metalu odnosno:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} dn(E).$$

- Za primer rešimo ovaj integral u jednostavnom slučaju kada se elektronski gas u metalu nalazi na 0 K. Tada imamo da je:

$$\frac{1}{e^{\frac{E-E_f}{kT}} + 1} = \begin{cases} 0, & E > E_f \\ 1, & E \leq E_f \end{cases}$$

pa za koncentraciju elektrona dobijamo

$$n = \int_{E_c}^{E_f} dn(E) + \int_{E_f}^{\infty} dn(E) = \int_{E_c}^{E_f} \frac{4\pi(2m_c)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E - E_c} dE$$

Kada je $E_c = 0$ dobijamo da je koncentracija elektrona u metalu određena izrazom

$$n = \frac{8\pi}{3h^3} (2m_c E_f)^{3/2}.$$