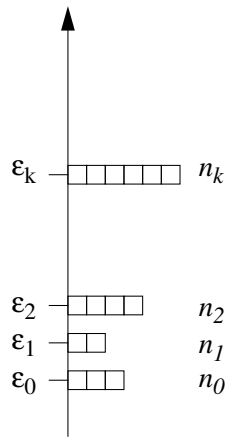
VII. Bose-Einstein-statistik

Hittills har vi under kursen behandlat statistik för klassiska partiklar. Nu börjar vi se på s.k. kvantstatistik, dvs. statistisk mekanik för partiklar som beter sig kvantmekaniskt.

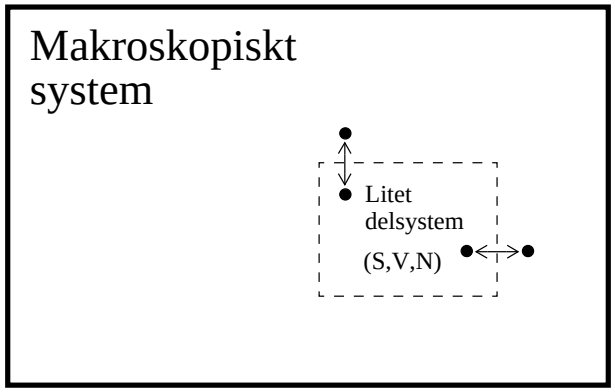
Den första kvantstatistiska distribution vi ser på, Bose-Einstein-distributionen, kan i själva verket härledas utan att explicit behöva anta något kvantmekaniskt beteende; det räcker att anta att flera partiklar kan befinna sig i samma tillstånd. Men just detta beteende är karakteriskt för bosoner i kvantmekaniken, och därmed brukar distributionen betraktas som kvantstatistisk.

VII.1. Bose-Einstein distributionen

Betrakta en gas av partiklar som inte växelverkar med varandra. Partiklarna har ett visst antal energinivåer $\{\epsilon_k\}$. I motsats till vad fallet var vid härledningen av- Boltzmann's fördelningsfunktion antar vi inte att gasen är tunn.



n_k: partiklar eller molekyler i det k:te molekylära tillståndet.



Vi betraktar partiklarna i det k:te tillståndet som ett subsystem och använd den makrokanoniska fördelningen:

$P_{n_k,k}$ = sannolikhet för att det finns partiklar i det betraktade subsystemet.

Nu gäller enligt den makrokanoniska distributionsfunktionen

$$P_{n_k,k} = e^{(\Omega_k + \mu n_k - n_k \epsilon_k)/kT} \tag{1}$$

där

$$e^{\Omega_k/kT} = \frac{1}{Z_{N,k}} \tag{2}$$

$Z_{N,k}$ är den stora partitionsfunktionen för det k:te subsystemet.

Normaliseringsvillkoret är

$$\sum_{n_k} P_{n_k,k} = 1 = e^{\Omega_k/k_BT} \sum_{n_k} e^{n_k(\mu - \epsilon_k)/k_BT} \tag{3}$$

så vi får

$$\Omega_k = -k_B T \ln \underbrace{\sum_{n_k=0}^{\infty} e^{(\mu-\epsilon_k)n_k/k_B T}}_{\equiv \mathcal{S}} \tag{4}$$

Vid härledningen av Boltzmann-fördelningen medtogs blott de två första termerna i serien $\mathcal{S}$, med motivationen att sannolikheten att en viss nivå är ockuperad är liten. Nu tar vi istället med alla termer!

$$\sum_{n_k} e^{(\mu-\epsilon_k)n_k/k_B T} = \sum_{n_k} [e^{(\mu-\epsilon_k)/k_B T}]^{n_k} \tag{5}$$

Serien i högra membrum är en geometrisk serie som konvergerar om $e^{(\mu-\epsilon_k)/k_B T} < 1$ till

$$= \frac{1}{1 - e^{(\mu-\epsilon_k)/k_B T}} \tag{6}$$

För att serien skulle konvergera bör alltså

$$e^{(\mu-\epsilon_k)/k_B T} < 1 \tag{7}$$

vilket är ekvivalent med kravet

$$\mu < \epsilon_k \tag{8}$$

vilket bör gälla för alla tillstånd k. Ifall energiskalan är sådan att grundtillståndet $= \epsilon_0 = 0$ gäller det ännu enklare kravet att

$$e^{\mu/k_BT} < 1 \Longrightarrow \mu < 0 \tag{9}$$

Den kemiska potentialen för en "Bose-Einstein gas" måste vara negativ.

För sådana gaser får vi alltså

$$\Omega_k = k_BT \ln\{1 - e^{(\mu-\epsilon_k)/k_BT}\} \tag{10}$$

och

$$< n_k >= -\frac{\partial\Omega}{\partial\mu} = -k_BT\frac{1}{1 - e^{(\mu-\epsilon_k)/k_BT}}(-)e^{(\mu-\epsilon_k)/k_BT}\frac{1}{k_BT} \tag{11}$$

$$= \frac{1}{e^{(\epsilon_k-\mu)/k_BT} - 1} \tag{12}$$

Därmed får vi **Bose-Einstein distributionen:**

$$\boxed{< n_k >= \frac{1}{e^{(\epsilon_k - \mu)/k_B T} - 1}} \tag{13}$$

Om det gäller

$$e^{(\epsilon_k - \mu)/k_B T} >> 1 \Rightarrow < n_k > \Rightarrow e^{(\mu - \epsilon_k)/k_B T} \tag{14}$$

dvs. i denna gräns får vi tillbaks Boltzmann-distributionen.

Boltzmanndistributionen uppnås vid stora negativa μ-värden.

Vi kan nu beräkna vidare

$$N = \sum_k < n_k >= \sum_k \frac{1}{e^{(\epsilon_k - \mu)/k_B T} - 1} \tag{15}$$

$$\Omega = \sum_k \Omega_k = k_B T \sum_k \ln(1 - e^{(\mu - \epsilon_k)/k_B T}) \tag{16}$$

$\Omega = -PV$ ger tillståndsekvationen:

$$P = -\frac{k_B T}{V} \sum_k \ln\{1 - e^{(\mu - \epsilon_k)/k_B T}\} \tag{17}$$

μ bestämmes av

$$N = \sum_k \frac{1}{e^{(\epsilon_k - \mu)/k_B T} - 1} \tag{18}$$

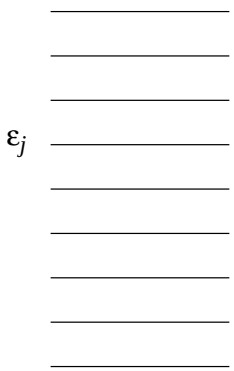
VII.1.1. Alternativ härledning av Bose-Einstein distibutionen

[Mandl 11.2; Landau-Lifshitz § 55]

Härledningen ovan var helt klassisk. Men orsaken att Bose-Einstein distributionen är mycket viktig inom fysiken kommer från dess kvantmekaniska motivation.

De elementarpartiklar, eller partiklar i allmänhet, vars spinn eller inre impulsmomentkvanttal antar heltalsvärden kallas bosoner. I ett bosonsystem kan ett obegränsat antal partiklar placeras i varje kvanttillstånd.

Sannolikhetsfördelningen för ett bosonsystem kan härledas alternativt genom att söka den fördelning som leder till den största entropin. Denna härledning gäller också i ojämviktssystem.

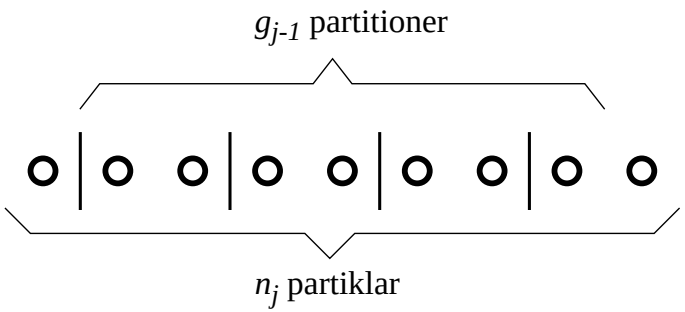


g_j kvanttillstånd med energin ϵ_j.

g_j är energitillståndets degenerationsfaktor.

n_j: antalet partiklar med energin ϵ_j.

Vi bestämmer först antalet möjligheter att fördela n_j partiklar i de g_j tillståndena som har energin ϵ_j.



Antal fördelningsmöjligheter = antal permutationer av $g_j - 1$ partitioner av n_j partiklar

$$= (n_j + g_j - 1)! \tag{19}$$

Permutationer av de n_j partiklarna och de $g_j - 1$ partitionerna leder inte till nya makrotillstånd. Den statistiska vikten är m.a.o.

$$\frac{(n_j + g_j - 1)!}{n_j!(g_j - 1)!} \tag{20}$$

Den statistiska vikten för en fördelning av partikelantal $\{n_j\}$ i de olika tillståndena j är då

$$\Omega = \Pi_j \frac{(n_j + g_j - 1)!}{n_j!(g_j - 1)!} \tag{21}$$

Vi söker nu $S = k_B \ln \Omega$:s maximum under villkoren

$$\begin{cases} \sum n_i = N \\ \sum n_i \epsilon_i = E \end{cases} \tag{22}$$

Variationen är, som tidigare under kursen:

$$\delta[S + \alpha N + \beta E] = 0, \tag{23}$$

I detta fall blir det

$$\frac{\partial}{\partial n_k} \sum_i \{k_B \ln \frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i!(g_i - 1)!} + \alpha n_i + \beta \epsilon_i n_i\} = 0, \tag{24}$$

Vi använder Stirlings approximation $\ln x! \approx x \ln x - x$ på logaritmtermen:

$$\ln \frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i!(g_i - 1)!} = \ln(n_i + g_i - 1)! - \ln n_i! - \ln(g_i - 1)! \tag{25}$$

$$\simeq (n_i + g_i - 1) \ln(n_i + g_i - 1) - n_i \ln n_i - (g_i - 1) \ln(g_i - 1) \tag{26}$$

$$- (n_i + g_i - 1) + n_i + (g_i - 1). \tag{27}$$

Nu då vi utför derivatan med avseende på n_k faller alla termer i summan över i utom de som har

$i = k$ bort! Alltså fås

$$k_B \left(\frac{\partial}{\partial n_k}(n_k + g_k - 1) \right) \ln(n_k + g_k - 1) + k_B \frac{n_k + g_k - 1}{n_k + g_k - 1} \left(\frac{\partial}{\partial n_k}(n_k + g_k - 1) \right) \quad (28)$$

$$- k_B \left(\frac{\partial}{\partial n_k} n_k \right) \ln n_k - k_B \frac{n_k}{n_k} \left(\frac{\partial}{\partial n_k} n_k \right) - k_B \cdot 1 + k_B \cdot 1 + \alpha + \beta \epsilon_i = 0 \quad (29)$$

Efter att divisionerna och derivatorna utförs blir det kvar

$$k_B \ln(n_k + g_k - 1) + k_B - k_B \ln n_k - k_B + \alpha + \beta \epsilon_k = 0 \quad (30)$$

och vidare om vi antar att $n_k >> 1$ approximativt

$$k_B \left[\ln(n_k + g_k) - \ln n_k \right] = -\alpha - \beta \epsilon_k \quad (31)$$

varur fås

$$\ln \frac{n_k + g_k}{n_k} = -\frac{\alpha}{k_B} - \frac{\beta \epsilon_k}{k_B} \quad (32)$$

$$\frac{n_k + g_k}{n_k} = e^{-(\alpha + \beta \epsilon_k)/k_B} \quad (33)$$

$$n_k + g_k = n_k e^{-(\alpha + \beta \epsilon_k)/k_B} \quad (34)$$

$$n_k[1 - e^{-(\alpha+\beta\epsilon_k)/k_B}] = -g_k \tag{35}$$

$$n_k = \frac{g_k}{e^{(-\alpha-\beta\epsilon_k)/k_B} - 1} \tag{36}$$

Med att som tidigare känna igen $\alpha = \mu/T$, $\beta = 1/T$ fås

$$n_k = \frac{g_k}{e^{(\epsilon_k-\mu)/k_B T} - 1} \tag{37}$$

vilket är igen Bose-Einstein-distributionen!

VII.2. Svartkroppsstrålning

[Mandl kap. 10, Landau-Lifshitz §63]

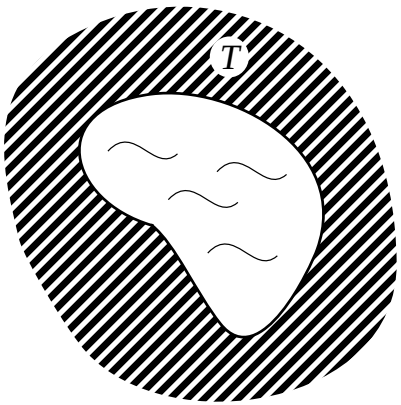
Elektromagnetiska strålningskvanta - fotoner - har spinn 1 och är därför bosoner. Vi betraktar den gas av fotoner som existerar utanför och i jämvikt med en fast kropp med temperaturen T. Denna gas kallas svartkroppsstrålning om kroppen är fullständigt absorberande.

Denna s.k. svartkroppsstrålning existerar t.ex. i ett tomrum inne i en fast kropp som hålles vid jämn temperatur. I en sådan kan man väl anta att all inkommande strålning absorberas praktiskt taget säkert förrän det eventuellt kommer ut genom ett litet hål från vilket man mäter det.

Vidare visar det sig att svartkroppsstrålningsbegreppet är mycket viktigt för att många verkliga kroppar är nära "svarta", och också sådana som är långt ifrån behandlas ofta med en emissivitet som ges relativt till en perfekt svartkropp.

Då fotoner både absorberas och emitteras vid kroppens yta är det totala antalet fotoner N inte konstant!

För att "fotongasen" ändå är ett jämviktssystem, bör för det gälla att F är ett minimum med avseende på N Detta kan tas i beaktande genom att kräva att



$$\frac{\partial F}{\partial N} = 0 \tag{38}$$

Då $dF = -SdT - PdV + \mu dN$ är

$$\mu = \frac{\partial F}{\partial N}_{V,T} \tag{39}$$

varur vi ser att kemiska potentialen $\mu = 0$ för en fotongas.

Fotondistributionen blir då, om fotonerna inte växelverkar med varandra

$$n_k = \frac{g_k}{e^{\epsilon_k/k_B T} - 1} \tag{40}$$

där $g =$ antalet fotontillstånd med given energi. g = 2 då fotonen har två polarisationsriktningar!

VII.2.1. Bakgrund

VII.2.1.1. Fotonenergierna

Vi påminner oss nu om fotonernas grundläggande egenskaper:

$$\epsilon = h\nu = (2\pi\hbar)\frac{\omega}{2\pi} = \hbar\omega, \quad \omega = \text{ vinkelfrekvens} = 2\pi\nu \tag{41}$$

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \text{ frekvens}(\lambda = \text{våglängd}) \tag{42}$$

$$\epsilon = \frac{hc}{\lambda}, \quad k = \text{ vågtal } = \frac{2\pi}{\lambda} \tag{43}$$

Enligt den relativistiska mekaniken kan man dessutom skriva

$$\epsilon = \frac{h}{2\pi}ck = \hbar ck = cp \tag{44}$$

där vi använt oss av rörelsemängden $p = \hbar k$

Den s.k. dispersionsrelationen (sambandet mellan frekvens och vågtal) är

$$\omega = ck \tag{45}$$

VII.2.2. Tätheten av fotontillstånd

Tidigare under kursen härleddes tillståndstätheten i tre dimensioner, dvs. antalet kvanttillstånd i ett volymelement d^3k

$$\frac{d^3k}{(\frac{2\pi}{L})^3} = L^3 \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = V \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tag{46}$$

Genom att kombinera Bose-Einstein-distributionen med tillståndstätheten får vi antalet fotoner med vågvektor i intervallet $(\mathbf{k},\ \mathbf{k} + d\mathbf{k})$:

$$dN_{\mathbf{k}} = \frac{V}{(2\pi)^3} d^3k \frac{2}{e^{\epsilon_k/k_B T} - 1} \tag{47}$$

Å andra sidan vet vi att

$$\epsilon_k = \hbar c k \tag{48}$$

och givetvis är

$$d^3k = d\Omega_k k^2 dk \tag{49}$$

där Ω_k är vinkelelementet $\sin\theta d\theta d\phi$ i k-rymden.

$$dN_k = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta dN_{\mathrm{k}} = \frac{V}{(2\pi)^3}\frac{2k^2dk}{e^{\hbar ck/k_BT}-1}\underbrace{\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta}_{4\pi} \tag{50}$$

$$= \frac{V}{\pi^2}\frac{k^2dk}{e^{\hbar ck/k_BT}-1} \tag{51}$$

Nu kan vi använda oss av fotonernas kända egenskaper för att skriva om detta som funktion av frekvensen ν:

$$\nu = \frac{c}{\lambda}, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \tag{52}$$

$$ck = 2\pi\nu \Leftrightarrow k = \frac{2\pi\nu}{c} \Rightarrow dk = \frac{2\pi d\nu}{c} \tag{53}$$

$$\hbar ck = h\nu \tag{54}$$

Alltså är

$$k^2dk = 8\pi^3\frac{1}{c^3}\nu^2 d\nu \tag{55}$$

och

$$dN_\nu = \frac{8\pi V}{c^3}\frac{\nu^2 d\nu}{e^{h\nu/k_BT}-1}; \tag{56}$$

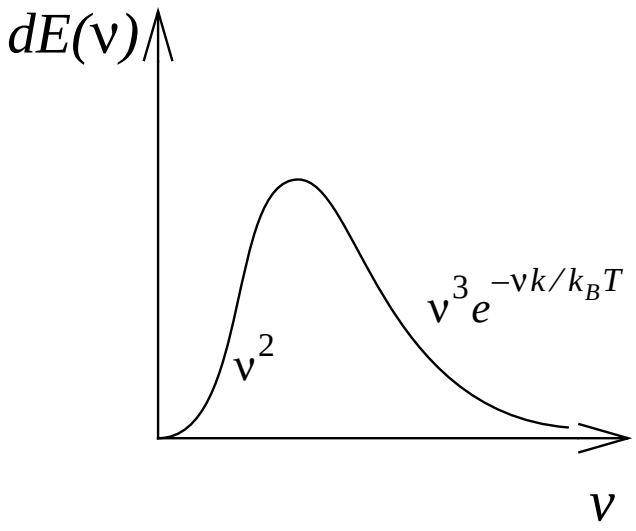
$dE(\nu) = h\nu dN(\nu) =$ energin i intervallet $(\nu, \nu + d\nu)$:

$$\boxed{dE(\nu) = \frac{8\pi hV}{c^3} \frac{\nu^3 d\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1}} \tag{57}$$

Alternativt som funktion av våglängden blir den med en liknande härledning

$$\boxed{dE(\lambda) = \frac{8\pi hcV}{\lambda^5} \frac{d\lambda}{e^{hc/\lambda k_B T} - 1}} \tag{58}$$

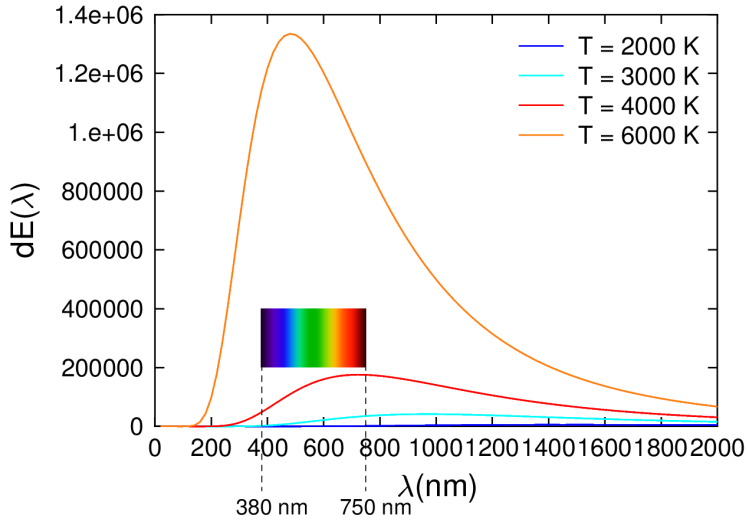
Detta är Plancks fördelningslag (1900). Dess form är följande:



VII.2.2.1. Exempel på Plancks lags effekter

Plancks lag är av stor betydelse, för väsentligen ger den ju frekvensberoendet hos värmestrålning.

Detta kan illustreras väl med att plotta fördelningslagen mot synliga ljusets spektrum. Här är det gjort för några olika temperaturer:



Detta förklarar t.ex. varför metaller börjar glöda då de värms upp. Som känt blir det först rödglödande, vilket förklaras av att distributionen skiftar neråt i våglängd med ökande temperatur och når därmed först det röda området. På liknande sätt kan man förstå varför den sedan blir orange och till slut vitglödande.

De flesta metaller smälter dock före de blir vitglödande. (t.ex. järn har smältpunkt 1809 K och kokpunkt 3135 K).

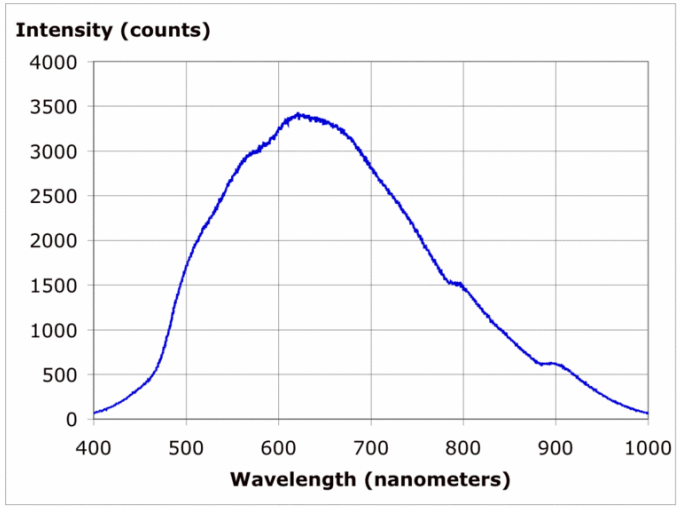
Från bilden ser man också att för att få alla synliga våglängder med märkbara intensiteter, krävs

temperaturer kring 3000 K eller mer. Detta är grundorsaken till att vanliga glödlampor har en wolfram-tråd som ljuskälla: wolfram har den högsta smältpunkten (3680 K) av alla vanliga metaller, och därmed kan man med den komma närmast vitt ljus.

Men fortfarande ser man ur bilden att en stor del av svartkroppsemission är alltid utanför det synliga området. Alltså är deras effektivitet som ljuskälla relativt låg.

Egentligen följer en glödlampa nog inte exakt svartkroppsstrålning, men ganska nära är den nog.

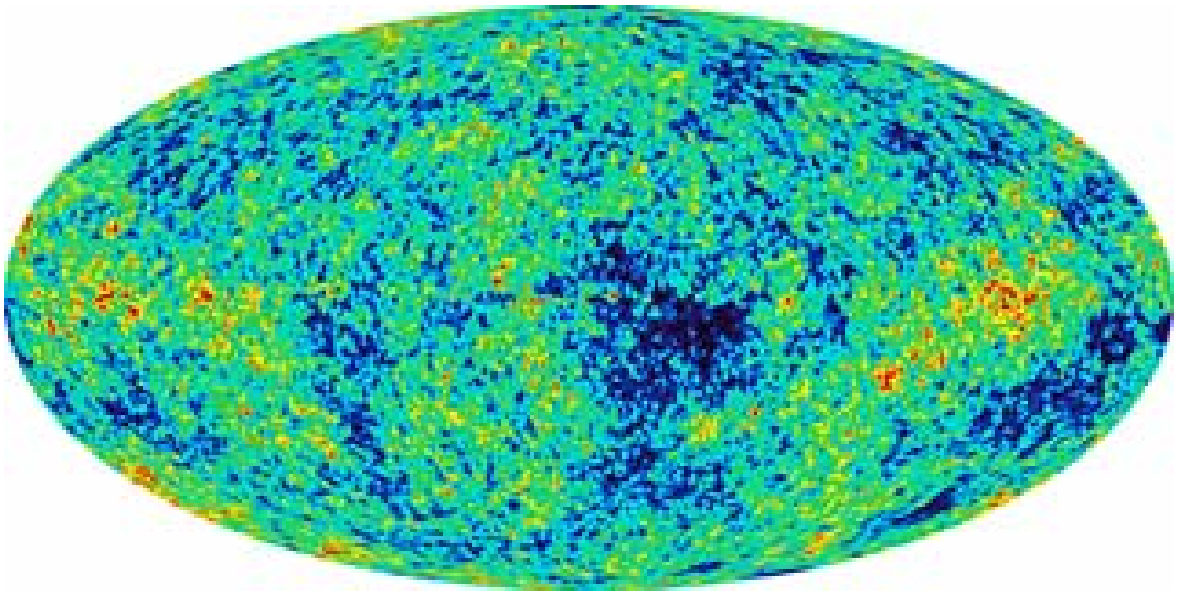
Här är ett uppmätt exempel för en vanlig ficklampa [Wikipedia: Black body]:



där maximet motsvarar ungefär 4600 K, alltså mer än wolframs smältpunkt vilket visar att beteendet faktiskt inte exakt är samma som i svartkroppsstrålningen.

Plancks lag har däremot visat sig gälla till otroligt stor noggrannhet för kosmisk bakgrundsstrålning. Denna bakgrundstrålning följer Plancks lag till ung. 5 siffrors noggranhet för en temperatur på ung. 2.73 K. Att överenstämmelsen är så bra är att av de främsta bevisen för Big Bang.

Den mycket lilla avvikelsen som mätts t.ex. med Cobe- och WMAP-satelliterna ger en bild av Universums början, 379000 år efter Big Bang eller ungefär 14 miljarder år sedan. Här är en bild från WMAP-mätningen (http://map.gsfc.nasa.gov/m_mm.html):



Analys av datat i denna bild har visat sig vara extremt nyttig i kosmologin, bland annat har den gett den hittills noggranaste bestämningen av Universums ålder, 13.7$\pm$0.2 miljarder år [http://map.gsfc.nasa.gov/m_mm/mr_age.html], och indikerar att universums massa består av ung. 4% atomer, 22 % s.k. mörk materia och 74 % s.k. mörk energi. Vad de två sistnämnde egentligen är vet man s.g.s. ingenting om!

VII.2.3. Historisk överblick

Konceptet svartkropp introducerades av Kirchhoff år 1862, och svartkroppsstrålningens spektrum kunde mätas under senare halvan av 1800-talet. Men att härleda och förklara spektrets funktionsform var en stor utmaning för den klassiska fysiken.

Före Planck upptäckte sin lag härleddes låg- och högfrekvensgränserna.

Vid höga frekvenser gäller $e^{h\nu/k_BT} >> 1$ och därmed

$$dE(\nu) \approx \nu^3 e^{-h\nu/k_BT} \tag{59}$$

vilker är känt som Wien's strålningslag (1896)

(Det finns egentligen två lagar som kallas Wiens lag. Den andra ger maximet i distributionen ovan, vilket visar sig vara helt enkelt inverst proportionellt mot temperaturen.)

Denna används allmänt i astronomin för att bestämma stjärnors temperatur (joodå, stjärnor är mycket nära en svartkropp!)

Vid låga frekvenser gäller för Plancks lag att

$$e^{h\nu/k_BT} \simeq 1 + \frac{h\nu}{k_BT} \tag{60}$$

och därmed

$$dE(\nu) \longrightarrow \frac{8\pi V h}{c^3}\frac{\nu^3 d\nu}{h\nu}(k_BT) \tag{61}$$

$$= \frac{8\pi V}{c^3}\nu^2(k_BT)d\nu \tag{62}$$

som är känt som Rayleigh-Jeans strålningslag (1900). Notera att konstanten h inte förekommer alls i denna!

Denna lag kan även härledas helt klassiskt.

Betrakta fotoner som vibrationer i ett medium = "etern".

Antalet vibrationsmoder med vågvektorer mellan $|\mathbf{k}|$ och $|\mathbf{k} + d\mathbf{k}|$ är då

$$2(4\pi)\frac{V}{(2\pi)^3}k^2 dk. \tag{63}$$

Enligt ekvipartitionsprincipen bidrar varje mod med

$$(\frac{1}{2}+\frac{1}{2})k_BT \text{ till energin.} \tag{64}$$

Energin för moderna mellan k och $k+dk$ blir

$$dE = k_BT(2)4\pi\frac{V}{(2\pi)^3}(\frac{2\pi}{c})^3\nu^2 d\nu = \frac{8\pi V}{c^3}\nu^2 k_BT d\nu \tag{65}$$

vilket är igen Rayleigh-Jeans lag.

Denna lag har dock ett uppenbart problem: den förutspår ju att strålningen skulle öka mot oändligt med frekvensen. Detta är uppenbart galet (en kropp kan ju inte förlora oändligt med energi) och ledde till att lagen kallades i tiden "den ultravioletta katastrofen".

Kvantmekaniken gav en elegant lösning på detta: i.o.m. att fotonenergierna är kvantiserade med $E = h\nu$, kan bara mycket få fotoner skapas för höga frekvenser, och ekvipartitionsteoremet som används i Rayleigh-Jeans härledning gäller inte längre.

Historiskt sett är härledningen av Plancks lag mycket viktig för fysiken. Ungefär år 1900 hade man härlett klassiskt både Wiens och Rayleigh-Jeans lag, men visste experimentellt att den förra misslyckas vid låga ν, den senare vid höga ν (ultravioletta katastrofen).

Planck var desperat att hitta en förklaring till detta, men det enda sättet han kunde göra det med var genom att anta kvantiseringen som förekommer i tillståndstäthetsdelen i härledningen. Han tyckte inte alls om detta antagande, och försökte senare hitta alternativa förklaringar. Men det visade sig att kvantiseringen var helt rätt, och detta resultat banade sedan väg för kvantfysiken.

VII.2.4. Den totala energin i svartkroppsstrålningen

Vi räknar nu den totala energin för svartkroppsstrålningen:

$$dE(\nu) = \frac{8\pi hV}{c^3}\frac{\nu^3 d\nu}{e^{h\nu/k_BT}-1} \tag{66}$$

$$E = \int dE(\nu) = \int_0^\infty d\nu \frac{8\pi hV}{c^3}\frac{\nu^3}{e^{h\nu/k_BT}-1} \tag{67}$$

Vi gör variabelbyte:

$$h\nu/k_BT = x \Rightarrow d\nu = \frac{k_BT}{h}dx \tag{68}$$

och får

$$E = \frac{8\pi hV}{c^3}(\frac{k_BT}{h})^4 \underbrace{\int_0^\infty dx \frac{x^3}{e^x-1}}_{\frac{\pi^4}{15}} \tag{69}$$

(Beräkningen av denna typ av bestämda integraler beskrivs i Mandl)

Alltså fås

$$E = \frac{8\pi^5}{15}\frac{k_B^4 V}{(hc)^3}T^4 = 4\sigma VT^4/c \tag{70}$$

där vi definierat

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k_B^5}{15(h^3c^2)} = 5.67 \cdot 10^{-5}\mathrm{g/s^3K^4} = 5.67 \cdot 10^{-8}\mathrm{J/m^2sK^4} \tag{71}$$

Resultatet

$$\boxed{E = 4\sigma V T^4/c} \tag{72}$$

kallas Stefan-Boltzmann-lagen. Den erhölls först experimentellt av Stefan år 1879, och Boltzmann kunde 1884 härleda proportionaliteten mot T^4, men givetvis inte värdet på konstanten σ som innehåller Plancks konstant h.

VII.2.4.1. Strålningsintensiteten

[Landay-Lifshitz §63, s. 187-189]

Ett ofta mera praktiskt sätt att ge Stefan-Boltzmann-lagen är med strålningsintensiteten. Ener-

gitätheten i ihåligheten per enhets-rymdvinkel är

$$\text{E} = \frac{1}{4\pi} 4\sigma V T^4/c \tag{73}$$

Vi betrakta nu hur mycket energi som faller på en ytarea A som upptar en rymdvinkel $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$. Vi tar som hjälpvariabel en infinitesimal cylinder med bottnen A och tjockleken dx. Då partiklarnas hastighet är $c = dx/dt$, betyder det att tätheten av partiklar som rör sig genom cylindern per tidsenhet är

$$\text{N} = \frac{1}{Adt} = \frac{1}{Adxdt/dx} = \frac{c}{Adx} \tag{74}$$

Fotonerna som faller på arean A kan givetvis röra sig i godtycklig riktning, så "arean" som strålningen ser bör korrigeras med $\cos\theta$. För att erhålla energiintensiteten I som strålas på en area bör vi alltså betrakta

$$dI = \text{EN}\cos\theta\sin\theta d\theta d\phi = \frac{4}{4\pi}\sigma A dx T^4/c \frac{c}{Adx}\cos\theta\sin\theta d\theta d\phi = \frac{1}{\pi}\sigma T^4\cos\theta\sin\theta d\theta d\phi \tag{75}$$

och integrera detta över en *half-sfär* för att få reda på hur mycket som strålar *mot* arean. Alltså är

vår intensitetet

$$I = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \frac{1}{\pi}\sigma T^4 \underbrace{\cos\theta \sin\theta}_{=\frac{1}{2}\sin(2\theta)} = \frac{2\pi}{\pi}\sigma T^4 \frac{1}{2} \underbrace{\Big/_0^{\frac{\pi}{2}} -\cos(2\theta)}_{=--1--1} \frac{1}{2} \tag{76}$$

och alltså efter att vi dividerar bort alla 2:or och π:

$$\boxed{I = \sigma T^4} \tag{77}$$

Denna lag gäller helt allmänt för alla perfekta svartkroppars strålning.

VII.2.5. Icke-perfekta svartkroppar

[Wannier s. 196-, webben]

För icke-perfekta svartkroppar kan man generalisera alla dessa härledningar i princip genom att introducera en emissivitet $e(\nu)$ som helt enkelt är för ett visst material förhållandet mellan den verkliga emissionen och svartkroppsemissionen:

$$e(\nu) = \frac{E_{\text{verklig}}(\nu, T)}{E_{\text{svartkropp}}(\nu, T)} \tag{78}$$

För en perfekt svartkropp är alltså $e(\nu) \equiv 1$.

Kirchhoffs lag säger att vid termisk jämvikt och efter att man integrerar över alla emissionsvinklar, är förmågan att absorbera strånlning, absorptiviteten $a(\nu)$, lika med emissiviteten $e(\nu)$.

Annars skulle det vara lätt att konstruera en maskin där energin inte bevaras. Likaså följer härav att för att absorptiviteten uppenbart inte kan vara > 1, kan inte heller emissiviteten inte vara det.

> Alltså är den perfekta svartkroppen den mest effektiva möjliga källan för termisk strålning!

Om man känner till emissivitetsfunktionen, kan man ta med den i beräkningar av samma typ som ovan för svartkroppen.

VII.2.5.1. Exempel

För att ta ett enkelt exempel av följderna av svartkroppsstrålning, låt oss beräkna medeltemperaturen på jordytan om man antar att atmosfären skulle jämna ut alla temperaturskillnader, och att jorden skulle vara en svartkropp.

Solarkonstanten I_S (solens strålningsintensitet vid jorden) är

$$I_S = 1373\mathrm{W/m}^2 \tag{79}$$

Om jorden är en svartkropp kommer den att bestråla ut energi med intensiteten

$$I = \sigma T^4 \tag{80}$$

Den totala inkommande strålningen är I_S gånger areas som solen ser av jorden, πR^2 där R är

jordens radie är 6378 km. Jorden strålar iväg energi med hela sin ytarea $4\pi R^2$. Alltså fås villkoret

$$I_S \pi R^2 = \sigma T^4 4\pi R^2 \tag{81}$$

$$\Longrightarrow T = \left(\frac{I_S}{4\sigma}\right)^{1/4} = 279K = 6^\circ C \tag{82}$$

Den verkliga medel-yttemperaturen är 288 K = 16 °C. Detta illustrerar betydelsen av växthuseffekten: utan den skulle det vara ganska otrevligt kallt på jorden!

VII.2.6. Strålningstrycket

Vi kan nu också beräkna trycket som orsakas av den elektromagnetiska strålningen:

$$E \equiv F + TS = F - T\frac{\partial F}{\partial T} = -T^2\frac{\partial}{\partial T}(\frac{F}{T}) \tag{83}$$

Alltså är

$$-\frac{E(T)}{T^2} = \frac{d}{dT}(\frac{F}{T}) \tag{84}$$

Vi tillämpar detta på Stefan-Boltzmann-lagen och integrerar

$$-\int_{T_0}^{T} dT' \underbrace{\frac{E(T')}{T'^2}}_{\frac{4\sigma V T'^2}{c}} = \frac{F(T)}{T} - \frac{F(T_0)}{T_0} \tag{85}$$

$$-\frac{4\sigma V}{3c}(T^3 - T_0^3) = \frac{F(T)}{T} - \frac{F(T_0)}{T_0} \tag{86}$$

och om man låter $T_0 \to 0$:

$$F(T) = -\frac{4\sigma V}{3c}T^4 \tag{87}$$

och därmed

$$P(T) = -(\frac{\partial F}{\partial V})_T = \frac{4\sigma}{3c}T^4 \tag{88}$$

Om man jämför med energins definition ser man att

$$PV = \frac{4}{3}\frac{\sigma V}{c}T^4 = \frac{1}{3}E \tag{89}$$

$$\boxed{PV = \frac{1}{3}E} \tag{90}$$

och

$$C_V = \frac{dE}{dT} = \frac{16\sigma V}{c}T^3 \tag{91}$$

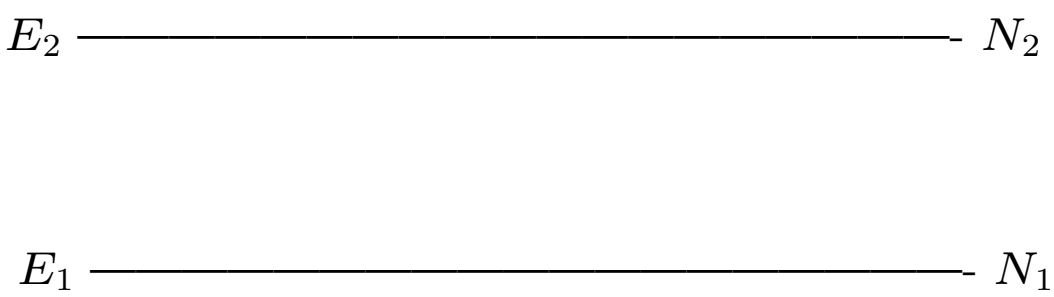
Trycket från elektromagnetisk strålning kan användas för drift av rymdfarkoster!

VII.3. Stimulerad och spontan emission

[Främst ur Alonso-Finn III sid 532]

Vi betraktar nu ett system av atomer med två energinivåer E_1 och E_2 ($> E_1$) och ett omgivande fotonsystem med energin $\hbar\omega = h\nu = E_2 - E_1$.

Antalet atomer i grundtillståndet är N_1 och antalet atomer i det exciterade tillståndet är N_2:



Atomerna i tillståndet E_2 deexciteras med tiden om tillståndet inte är fullständigt stabilt. Beteckna sannolikheten per tidsenhet för att en atom i E_2 deexciteras spontant A_{21}.

Då gäller naturligtvis

$$\frac{dN_2}{dt} = -A_{21}N_2 \tag{92}$$

Närvaron av ett fotonfält med energin $= E_2 - E_1$ gör det möjligt för atomer i grundtillståndet att exciteras till E_2. Det är naturligt att anta att excitationssannolikheten per tidsenhet är proportionell mot antalet fotoner med frekvensen ν:

$$\text{antalet excitationer/tidsenhet} = b_{12}\mathrm{E}(\nu)N_1 \tag{93}$$

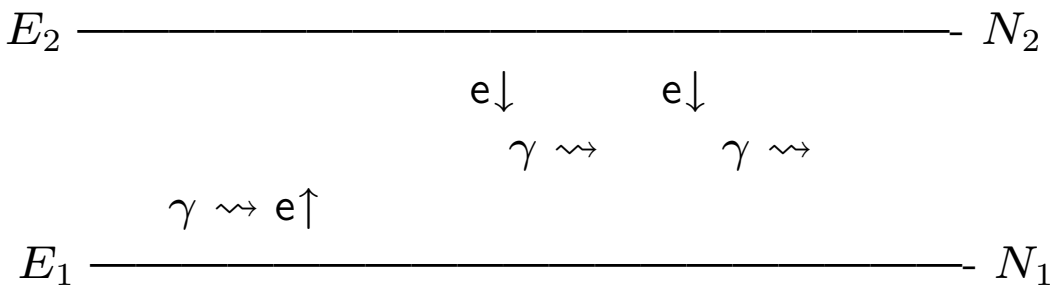
Funktionen $\mathrm{E}(\nu)$ betecknar energidensiteten av tillstånd med frekvensen ν (så för att vara exakt ger ekvationen ovan energin $\times$ excitationssannolikhet).

Excitationssannolikheten per tidsenhet är då

$$B_{12} = \int d\nu b_{12}\mathrm{E}(\nu) \tag{94}$$

$$\frac{dN_1}{dt} = -b_{12}\mathrm{E}(\nu)N_1 \tag{95}$$

Dessutom kan det närvarande fotonsystemet stimulera de-excitation av elektroner i E_2 (en foton absorberas, två emitteras).



Sannolikheten per tidsenhet för stimulerad emission är då naturligt av formen

$$B_{12} = \int d\nu b_{21\mathrm{E}}(\nu). \tag{96}$$

$$\frac{dN_2}{dt} = -b_{21\mathrm{E}}(\nu) N_2 \tag{97}$$

De fullständiga dynamiska ekvationerna är

$$\begin{cases} \dfrac{dN_1}{dt} = -b_{12}\mathrm{E}(\nu)N_1 + [A_{21}N_2 + b_{21}\mathrm{E}(\nu)N_2] \\ \dfrac{dN_2}{dt} = \underbrace{b_{12}\mathrm{E}(\nu)N_1}_{\text{absorption}} - [\underbrace{A_{21}N_2}_{\text{spontan em.}} + \underbrace{b_{21}\mathrm{E}(\nu)N_2}_{\text{stimulerad em.}}] \end{cases} \tag{98}$$

I (statisk eller dynamisk) jämvikt gäller

$$\frac{dN_2}{dt} = 0 \tag{99}$$

så

$$b_{12}\mathrm{E}(\nu)N_1 = [A_{21} + b_{21}\mathrm{E}(\nu)]N_2 \tag{100}$$

Om man vidare antar att nivåerna fylls med termisk excitation enligt vanlig Boltzmannstatistik gäller

$$N_1 \sim e^{-E_1/k_BT} \tag{101}$$

$$N_2 \sim e^{-E_2/k_BT} \tag{102}$$

och därmed

$$\frac{N_1}{N_2} = e^{(E_2-E_1)/k_BT} = e^{h\nu/k_BT} \tag{103}$$

Genom att sätta in detta i ekv. 100 fås

$$b_{12}\mathrm{E}(\nu)e^{h\nu/k_BT} = A_{21} + b_{21}\mathrm{E}(\nu) \tag{104}$$

Vi löser nu ut $\mathrm{E}(\nu)$ ur detta:

$$\left(b_{12}e^{h\nu/k_BT} - b_{21}\right)\mathrm{E}(\nu) = A_{21} \tag{105}$$

$$b_{12}\left(e^{h\nu/k_BT} - b_{21}/b_{12}\right)\mathrm{E}(\nu) = A_{21} \tag{106}$$

$$\Longrightarrow \mathrm{E}(\nu) = \frac{A_{12}/b_{12}}{e^{h\nu/k_BT} - b_{21}/b_{12}}; \tag{107}$$

Men vi vet från förra kapitlet att för fotongasen gäller också

$$\mathrm{E}(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{1}{e^{h\nu/k_BT} - 1} \tag{108}$$

För att dessa två ekvationer skulle vara konsistenta med varann krävs det uppenbart att

$$\frac{A_{21}}{b_{12}} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \quad \& \quad \boxed{b_{21} = b_{12}} \tag{109}$$

Från den spontana emissionssannolikheten A_{21} kan alltså de stimulerade emissionssannolikheterna b_{21}, b_{12} beräknas! (Einstein, 1917):

$A_{21} =$ spontan emissionssannolikhet

$b_{12\mathrm{E}}(\nu) = b_{21\mathrm{E}}(\nu) =$ stimulerad emissionssannolikhet

---

Från ekvation 107 erhåller man dessutom också direkt

$$\frac{A_{21}}{b_{12\mathrm{E}}(\nu)} = e^{h\nu/k_BT} - 1 \approx e^{h\nu/k_BT}, \quad \text{om } h\nu >> k_BT \tag{110}$$

och därmed

$$A_{21} >> b_{12\mathrm{E}}(\nu) \quad \text{om } h\nu >> k_BT \tag{111}$$

För höga frekvenser och låga temperaturer är alltså den spontant emitterade strålningen dominerande.

Den spontana strålningen har stokastiskt fördelade faser eftersom atomerna emitterar spontant oberoende av varandra.

Den stimulerade strålningen av däremot koherent eftersom varje atom stimulerats av samma foton med konstant fas.

Antalet emitterade fotoner från E_2 per tidsenhet är

$$(A_{21} + b_{21}\mathrm{E}(\nu))N_2 \tag{112}$$

medan antalet absorberade fotoner i E_2 av är

$$b_{12}\mathrm{E}(\nu)N_1 \tag{113}$$

$$\frac{A_{21} + b_{21}\mathrm{E}(\nu)}{b_{12}\mathrm{E}(\nu)}\frac{N_2}{N_1} = (\frac{A_{21}}{b_{12}\mathrm{E}(\nu)} + 1)\frac{N_2}{N_1} \approx \frac{N_2}{N_1}, \quad \text{om} h\nu << k_B T \tag{114}$$

$h\nu << k_B T$ är möjligt för mikrovågor vid rumstemperatur, däremot inte för synligt ljus som har fotonenergier $\sim$ 1 eV.

Emissionsraten $>$ absorptionsraten om

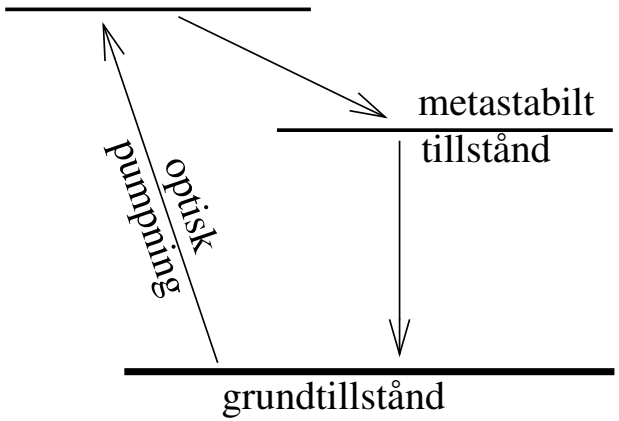
$$N_2 > N_1 \tag{115}$$

$N_2 > N_1$ är omöjligt i jämvikt då

$$\frac{N_2}{N_1} \sim e^{-(E_2-E_1)/k_B T} \tag{116}$$

Men ifrån jämvikt kan $N_2 > N_1$ och då uppstår en laser eller maser. För att uppnå $N_2 > N_1$ måste man "pumpa" in elektroner till det högre tillståndet. Lasrar kräver alltså **populationsinversion**!

Detta kan göras t.ex. med ett tre-nivå-energischema, som i ett möjligast enkelt system skulle fungera på följande sätt:


metastabilt
tillstånd
optisk
pumpning
grundtillstånd

VII.4. Fasta ämnens specifika värme

[Alonso-Finn III s. 536-, Mandl ch 6]

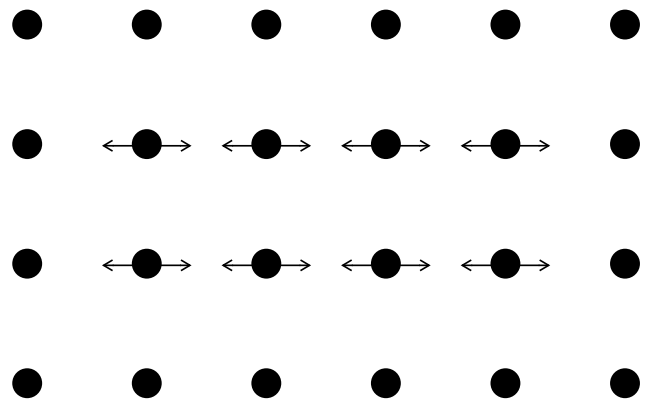
För det mesta behandlar vi under denna kurs gaser. Men det visar sig att man även kan beräkna fasta ämnens värmekapacitet utgående från gasekvationer!

Empiriskt gäller att C_V för fasta ämnen vid höga temperaturer är $3Nk_B = 3R$ (Dulong-Petit) medan vid låga temperaturer

$$C_V = \alpha T^3 + \gamma T \longrightarrow 0 \text{ då } T \to 0 \tag{117}$$

Den huvudsakliga rörelsen i fasta ämnen utgörs av vibrationer omkring atomernas jämviktslägen. Om antalet atomer är N kan denna rörelse beskrivas som rörelser hos $3N$ harmoniska oskillatorer.

Om atomerna vibrerar i fas kan denna vibrationsrörelse iakttas som ljudvågor. Enligt ekvipartitionsprincipen blir då $C_V = 3Nk_B$.



Om oskillatorernas vibrationsfrekvenser är $\{\omega_k\}$ och vibrationsrörelsen beskrives kvantmekaniskt är den totala energin i vibrationsrörelsen

$$E = V_0 + \sum_{k=1}^{3N} \hbar\omega_k (n_k + \frac{1}{2}) \tag{118}$$

$$= \underbrace{V_0 + \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{3N} \hbar\omega_k}_{\text{konstant}\equiv\text{A}} + \sum_{k=1}^{3N} \hbar\omega_k n_k \tag{119}$$

Här är $A =$ grundtillståndets energi.

Dessa vibrationskvanta kallas **fononer**. De är analoga med fotoner i att deras antal inte bevaras, och kan i likhet med fotoner tänkas bilda en gas (dock växelverkar de med varandra betydligt mer än fotoner).

Fononerna kan beskrivas med Bose-Einstein statistik så att det sannolika antalet vibrationskvanta med frekvensen ω_k är

$$< n_k >= \frac{1}{e^{\hbar\omega_k/k_BT} - 1} \quad (\mu = 0 \text{ då antalet kvanta är obestämt}). \tag{120}$$

Därmed fås för energin

$$\bar{E} = \underbrace{V_0 + \frac{1}{2}\sum_k \hbar\omega_k}_{\text{konstant}} + \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{e^{\hbar\omega_k/k_BT} - 1} \tag{121}$$

VII.4.0.1. Fonongasens specifika värme

Vi beräknar nu värmekapaciteten för fononsystemet:

$$C_V = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{\left(e^{\hbar\omega_k/k_BT} - 1\right)^2}(-1)e^{\hbar\omega_B/k_BT}\left(-\frac{\hbar\omega_k}{k_BT^2}\right) \tag{122}$$

$$= k_B \sum_{k=1}^{3N} \left(\frac{\hbar\omega_k}{k_BT}\right)^2 \frac{e^{\hbar\omega_k/k_BT}}{[e^{\hbar\omega_k/k_BT} - 1]^2} \tag{123}$$

Vid höga temperaturer $k_B T >> \hbar\omega_k$ gäller

$$e^{\hbar\omega_k/k_B T} \simeq 1 + \frac{\hbar\omega_k}{k_B T}; \tag{124}$$

och man får

$$C_V \approx k_B \sum_{k=1}^{3N} \left(\frac{\hbar\omega_k}{k_B T}\right)^2 \frac{1 + \frac{\hbar\omega_k}{k_B T}}{[1 + \frac{\hbar\omega_k}{k_B T} - 1]^2} = k_B \sum_{k=1}^{3N} 1 + \frac{\hbar\omega_k}{k_B T} \tag{125}$$

och om man ännu approximerar bort den senare termen får man gränsvärdet för höga temperaturer:

$$C_V = k_B \sum_{k=1}^{3N} 1 = 3N k_B \tag{126}$$

Detta är Dulong-Petit lagen.

Å andra sidan vid låga temperaturer $\hbar\omega_k >> k_B T \rightarrow$ är

$$e^{\hbar\omega_k/k_B T} >> 1 \tag{127}$$

$$C_V \approx k_B \sum_k (\frac{\hbar\omega_k}{k_B T})^2 e^{-\hbar\omega_k/k_B T} \longrightarrow 0 \text{ då } \; T \to 0 \tag{128}$$

vilket visar att fononongasen uppfyller den III grundlagen!

En mer detaljerad beskrivning av C_V kräver information om fononernas dispersionsrelation, alltså vad som är $\omega = \omega(k)$.

(För jämförelses skull gäller för ljusvågor den enkla dispersionsrelationen $\omega = ck$)

Dulong-Petit-lagen $C_V = 3R$ gäller för de flesta ämnen vid rumstemperatur, men i slutet av 1800-talet upptäckte Weber att diamants specifika värme redan vid rumstemperatur är mycket mindre än $3R$, eller $c_V << 3k_B$.

VII.4.1. Einstens modell för det specifika värmet

Einstein försökte förklara avvikelsen från Dulong-Petit-lagen med ansatsen att alla fononfrekvenser är lika

$$\omega_k = \omega_E \tag{129}$$

Detta leder till att summan över k i uttrycket för C_V ger en faktor $3N$:

$$C_V = k_B 3N \left(\frac{\hbar\omega_E}{k_B T}\right)^2 \frac{e^{\hbar\omega_E/k_B T}}{[e^{\hbar\omega_E/k_B T} - 1]^2} \tag{130}$$

som man kan skriva enklare som

$$C_V = 3Nk_B E(\frac{\hbar\omega_E}{k_B T}) \tag{131}$$

där vi definierat funktionen

$$E(x) = \frac{e^x x^2}{(e^x - 1)^2} \tag{132}$$

Denna funktion beteer sig på följande sätt:

$$x \to 0 : E(x) \to \frac{(1+x)x^2}{(1+x-1)^2} = 1 + x \to 1 \tag{133}$$

$$x \to \infty : E(x) \to x^2 e^{-x} \tag{134}$$

Alltså leder detta helt korrekt till Dulong-Petit-lagen vid höga T (låga x), medan för låga T (höga x) erhålls

$$C_V \sim 3Nk_B \frac{1}{T^2} e^{-\hbar\omega_E/k_B T} \tag{135}$$

vilket inte överensstämmer med data: $C_V = \alpha T^3 + \gamma T$.

Alltså hade Einstein fel i denna härledning!

VII.4.2. Debye's modell

För att komma vidare måste vi veta (eller anta) något mera om fononernas egenskaper. I Debyes modell betraktar man inte kvantiserade fononer, utan antar att gittervibrationerna är klassiska vågor.

Temperatur i fasta ämnen representeras av atomernas vibrationer omkring sina jämviktslägen. Kollektiva atomära vibrationer uppträder som elastiska vågor: ljudvågor.

Ljudvågorna är täthetsvågor av formen

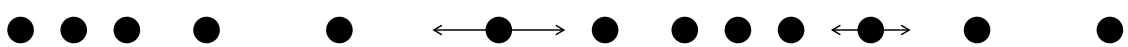
$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega t} \tag{136}$$

som satisfierar dispersionsrelatonen

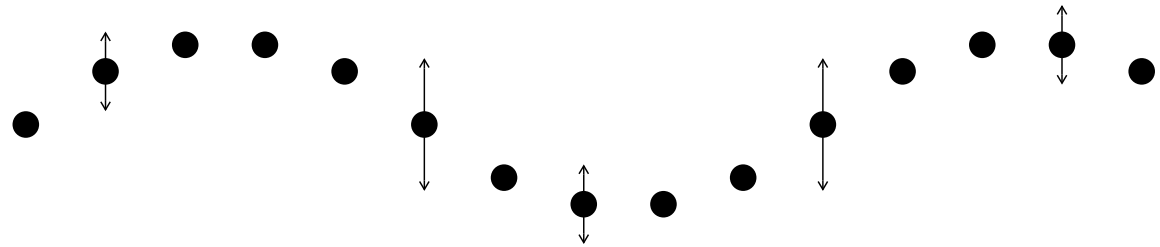
$$\omega = ck = c2\pi/\lambda \tag{137}$$

där $c =$ **ljudets** hastighet (i hårda fasta ämnen typiskt av storleksordningen 1000 m/s).

Det finns en longitudinell och två transversa vågor:

<u>longitudinell</u>: 

<u>transversell</u>:



Den longitudinella ljudhastigheten är c_L och den transversella c_T.

Antalet moder i ett vågvektorintervall d^3k är (av samma orsak som för fotoner):

$$\sum_{\mathbf{k}\epsilon d^3k} = \frac{d^3k}{(\frac{2\pi}{L})^3} = \frac{V d^3k}{(2\pi)^3} \tag{138}$$

Inom $(dk + k, k)$ finns alltså $\frac{V}{(2\pi)^3}k^2 dk 4\pi$ moder.

Då

$$\omega = ck \Rightarrow \frac{d\omega}{c} = dk \tag{139}$$

så vi kan skriva om tillståndstätheten som en funktion av ω som

$$\frac{V}{2\pi^2}\omega^2 d\omega \frac{1}{c^3} \tag{140}$$

Det totala antalet ljudvågsmoder är med beaktande av att två vågor är transversella och en longitudinell:

$$dN_\omega = \frac{V}{2\pi^2}\omega^2 d\omega[\frac{2}{c_T^3} + \frac{1}{c_L^3}] \tag{141}$$

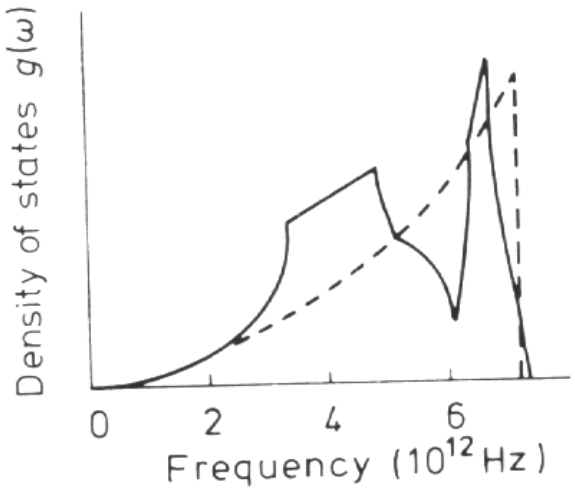
Det totala antalet vibrationsmoder i ett fast ämne är $3N$, ty man kan inte ha fler oberoende vibrationer en rörelsefrihetsgrader för atomerna i ämnet. Därigenom bör

$$3N = \int dN_\omega \tag{142}$$

Men uttrycket för $dN_\omega \propto \omega^2$. Detta innebär ju att om man integrarar detta över alla ω går svaret mot oändligt.

För att lösa detta dilemma gjorde Debye ett enkelt antagande: att det finns en maximumfrekvens ω_D (Debyefrekvensen) för vibrationer i kristallen. Detta antagande kan kvalitativt motiveras med att vid låga temperaturer (som nu alltså intresserar oss) är det osannolikt att moder med hög energi (och därmed hög frekvens) är aktiverade.

Den viktigare motivationen kommer dock från att experimentella mätningar ofta visar att beteende där antalet vibrationsmoder sjunker kraftigt vid någon frekvens:



Den streckade linjen är Debye-modellens approximation.

Trots att överenstämmelsen uppenbart inte är perfekt, kan Debye-modellenas integral upp till en lämpligt vald Debye-frekvens ändå anses ge ett någorlunda bra medeltal av den verkliga integralen över ett mer komplicerat beteende. Därför används Debye-modellen fortfarande brett inom många olika branscher av fysiken.

Med Debyes antagande får vi alltså

$$3N = \int_0^{\omega_D} dN_\omega = \frac{V}{2\pi^2}[\frac{2}{C_T^3} + \frac{1}{C_L^3}] \underbrace{\int_0^{\omega_D} d\omega\omega^2}_{\omega_D^3/3} \tag{143}$$

Denna ekvation bestämmer Debye-frekvensen ω_D:

$$\omega_D^3 = \frac{18N\pi^2}{V(\frac{1}{C_T^3} + \frac{1}{2C_L^3})} \tag{144}$$

Vi kan också skriva

$$dN_\omega = g(\omega)d\omega \tag{145}$$

där vi introducerat funktionen

$$g(\omega) = \frac{V\omega^2}{2\pi^2}[\underbrace{\frac{2}{C_T^3} + \frac{1}{C_L^3}}_{\frac{18N\pi^2}{V\omega_D^3}}]\theta(\omega_D - \omega) \tag{146}$$

$$g(\omega) = 9N\frac{\omega^2}{\omega_D^3}\theta(\omega_D - \omega) \tag{147}$$

där $\theta(x)$ är stegfunktionen:

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{då } x > 0 \\ 0 & \text{då } x \leq 0 \end{cases} \tag{148}$$

$g(\omega)$ ger alltså vibrationernas spektralfördelning.

VII.4.2.1. Debyemodellens värmekapacitet

Vi beräknar först modellens energi

$$E = \int_0^{\omega_D} d\omega g(\omega)\frac{1}{2}\hbar\omega[n(\omega) + \frac{1}{2}] \tag{149}$$

$$= \text{ konstant med avseende på } T \; + \; \underbrace{\int_0^{\omega_D} d\omega \frac{\hbar\omega g(\omega)}{e^{\hbar\omega/k_BT}-1}}_{\frac{9N}{\omega_D^3}\int_0^{\omega_D} d\omega \frac{\hbar\omega\omega^2}{e^{\hbar\omega/k_BT}-1}} \tag{150}$$

och därur värmakapaciteten

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{9N}{\omega_D^3}\int_0^{\omega_D} d\omega \frac{\hbar\omega\omega^2}{(e^{\hbar\omega/k_BT}-1)^2}(-1)e^{\hbar\omega/k_BT}(-)\frac{\hbar\omega}{k_BT^2} \tag{151}$$

$$= \frac{9\hbar^2 N}{(kT_B)^2}\frac{k_B}{\omega_D^3}\int_0^{\omega_D} d\omega \frac{\omega^4 e^{\hbar\omega/k_BT}}{(e^{\hbar\omega/k_BT}-1)^2} \tag{152}$$

Vi definierar nu vidare

$$\frac{\hbar\omega}{k_BT} = x \Leftrightarrow \omega = \frac{k_BT}{\hbar}x \quad \text{samt } \frac{\hbar\omega_D}{k_B} \equiv \theta_D \tag{153}$$

där θ_D är den s.k. **Debye-temperaturen.**

Med detta variabelbyte får man

$$C_V = \frac{9\hbar^2 N}{(k_B T)^2} \frac{k_B}{\omega_D^3} \frac{(k_B T)^5}{\hbar^5} \int_0^{\theta_D/T} dx \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} \tag{154}$$

$$C_V = 9 N k_B (\frac{T}{\theta_D})^3 \int_0^{\theta_D/T} dx \underbrace{\frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2}}_{x^4 \frac{d}{dx} \frac{-1}{e^x - 1}} \tag{155}$$

$$= \Big/_0^{\theta_D/T} \frac{-x^4}{e^x - 1} + 4 \int_0^{\theta_D/T} dx \frac{x^3}{e^x - 1} \tag{156}$$

$$C_V = 9 N k (\frac{T}{\theta_D})^3 \left\{ -\frac{(\theta_D/T)^4}{e^{\theta_D/T} - 1} + 4 \int_0^{\theta_D/T} dx \frac{x^3}{e^x - 1} \right\} \tag{157}$$

Längre än däthär kommer vi tyvärr inte i analytisk form, men vi kan igen se på hög- och lågtemperatursgränsvärden:

Vid höga temperaturer är

$$\frac{\theta_D}{T} << 1 \quad \text{och} \tag{158}$$

$$e^x - 1 \simeq x \tag{159}$$

så man får

$$\int_0^{\theta_D/T} dx \frac{x^3}{e^x - 1} \approx \int_0^{\theta_D/T} dx x^2 = \frac{1}{3}\left(\frac{\theta_D}{T}\right)^3 \tag{160}$$

så man får

$$C_V \longrightarrow 9N(\frac{T}{\theta_D})^3 k_B[\frac{1}{3}(\frac{\theta_D}{T})^3] = 3Nk_B \text{ då } T >> \theta_D \tag{161}$$

vilket ju igen är Dulong-Petits lag. Så vi får rätt gränsvärde vid höga T.

För låga T, $T << \theta_D$:

$$\int_0^{\theta_D/T} dx \frac{x^3}{e^x - 1} \approx \underbrace{\int_0^{\infty} dx \frac{x^3}{e^x - 1}}_{=\frac{\pi^4}{15}} \tag{162}$$

och man får

$$C_V \to 9N(\frac{T}{\theta_D})^3 k_B \left[-(\frac{\theta_D}{T})^4 e^{-\theta_D/T} + \frac{4\pi^4}{15} \right] \tag{163}$$

Den första termen inom klammern går mot 0 då $T \to 0$, så kvar blir

$$C_V \approx \frac{9N\pi^4 4}{15} Nk(\frac{T}{\theta_D})^3 = \frac{12\pi^4 N k_B}{5}(\frac{T}{\theta_D})^3 \tag{164}$$

Så kontentan av detta är att för låga temperaturer förutspår Debyemodellen att $C_V \propto T^3$

Detta förklarar det experimentellt observerade T^3-beteendet!

(Vi får senare på kursen en förklaring till den sista experimentella termen, T^1-beroendet).

Alternativt till att räkna de nedre och övre gränserna av

$$\int_0^{\theta_D/T} dx \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} \tag{165}$$

approximativt för små och stora x kunde man givetvis ha gjort integralen numeriskt. Detta

kan man göra snabbt med en "brute force" numerisk integrering där elegans ersätts med tätt integrerings-intervall.

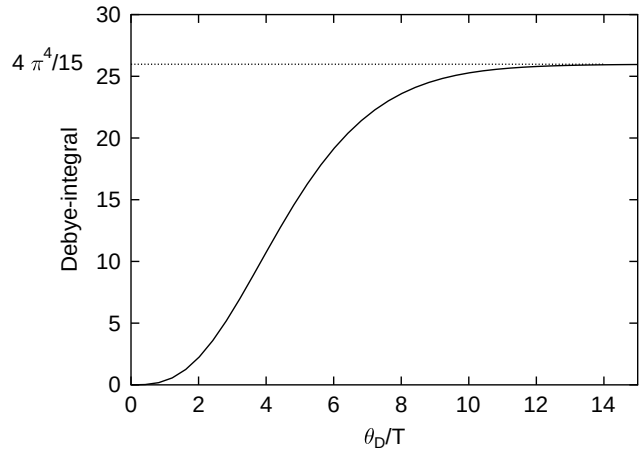
I koden motsvaras variabeln y av θ_D/T.

```
{\tt

 awk 'BEGIN { dy=0.02; for(y=dy;y<500;y+=(dy>1?dy:(dy>40?dy*5:dy*20))) { \
                         dx=y/10000; \
                         I=0; \
                         for (x=dx;x<=y;x+=dx) I+=dx*x^4*exp(x)/(exp(x)-1)^2; \
                         print y,I \
} }' > out.debyeint
```

(awk är ett kommando i Unix/Linux-system som har en enkel variant av programmeringspråket C inbyggt).

Detta ger gränsvärdet 25.975... som överensttämmer med det exakta resultatet $4\pi^4/15 = 25.975\ldots$ och har formen:

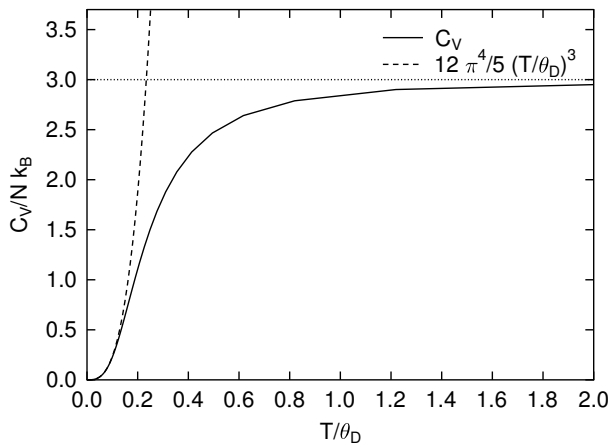


För att få C_V som funktion av T/θ_D ur detta bör man invertera x-axeln (för att integralen är till θ_D/T

```
{\tt

cat out.debyeint | awk '{ print 1/$1,$2 }' > out.debyeint.inv
}
```

Varefter C_V/Nk_B fås med att multiplicera datat med $(T/\theta_D)^3$, vilket blir:


C_V
$12\,\pi^4/5\,(T/\theta_D)^3$
$C_V/N\,k_B$
T/θ_D
0.0
0.5
1.0
1.5
2.0
2.5
3.0
3.5
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
1.2
1.4
1.6
1.8
2.0

VII.5. Boseidealgasen

Vi betraktar ett idealgassystem av partiklar med massan m som beskrivs av Bose-Einstein-fördelningen.

$$n_k = \frac{g_k}{e^{(\epsilon_k - \mu)/k_B T} - 1} \tag{166}$$

$$N = \sum_k n_k = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \tag{167}$$

$$\Omega = k_B T \sum_k \ln[1 - e^{(\mu - \epsilon_k)/k_B T}] \tag{168}$$

För fria partiklar gäller $\epsilon = \mathbf{p}^2/2m$

För att utföra summan över kvantiserade energitillstånd

$$\sum_{\mathbf{k}} \tag{169}$$

är det fördelaktigt att ersätta summan med en integral över klassiska positions och impulsvariabler:

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int \frac{d^3r d^3p}{h^3} = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r \tag{170}$$

Då energin för en idealgaspartikel är $\epsilon = \mathbf{p}^2/2m$ och inte beror av $\mathbf{r}$ kan volymintegralen omedelbart utföras:

$$\int d^3r = V \tag{171}$$

så kvar av summan över $\mathbf{k}$ blir

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \tag{172}$$

Alltså blir

$$\Omega = k_B T \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \underbrace{\int d^3p}_{4\pi \int dp p^2} \ln[1 - e^{(\mu - \epsilon_{\mathbf{p}})/k_B T}] \tag{173}$$

Vi gör variabelbytet

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \epsilon \Rightarrow \frac{pdp}{m} = d\epsilon \tag{174}$$

så man får

$$p^2 dp = m d\epsilon \sqrt{2m\epsilon} \tag{175}$$

I steget $\sum_k \rightarrow \int \frac{d^3p d^3r}{h^3}$ görs ett fel i att bidraget från grundtillståndet $\epsilon_k = 0$ automatiskt kommer att bortlämnas: integralen får inget bidrag från $= 0$ då integranden är 0 där.

Grundtillståndets bidrag till Ω är

$$k_B T \ \ln[1 - e^{\mu/k_B T}] \tag{176}$$

Storheten $e^{\mu/k_B T} = z$ kallas systemets fugacitet".

$$\Omega = kT \ \ln(1-z) + \frac{V m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}(kT)\int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{1/2} \ln[1 - z e^{-\epsilon/k_B T}] \tag{177}$$

I.o.m. att

$$\epsilon^{1/2} = \frac{2}{3}\frac{d}{d\epsilon}\epsilon^{3/2} \tag{178}$$

kan vi använda kedjeregeln för integrering ($Duv = vu' + uv' \Rightarrow \int u'v = /uv - \int uv'$) och får

för integralen

$$\Big/_{0}^{\infty} \frac{2}{3}\epsilon^{3/2}\ln[1-ze^{-\epsilon/k_BT}] - \frac{2}{3}\int_0^\infty d\epsilon\epsilon^{3/2} \underbrace{\frac{d}{d\epsilon}\ln[1-ze^{-\epsilon/k_BT}]}_{\frac{1}{1-ze^{-\epsilon/k_BT}}(-z)e^{-\epsilon/kT}(\frac{-1}{k_BT})} \tag{179}$$

Den första termen blir 0 och kvar blir

$$= -\frac{2}{3kT}\int d\epsilon\epsilon^{3/2}\frac{ze^{-\epsilon/k_BT}}{1-ze^{-\epsilon/k_BT}} \tag{180}$$

Nu ser man att den senare delen av integranden är ju summan av den geometriska serien:

$$\sum_{n=1}^{\infty}(ze^{-\epsilon/k_BT})^n = \sum_{n=1}^{\infty} z^n e^{-n\epsilon/k_BT} \tag{181}$$

så man får

$$\Omega = kT\ \ln(1-z) - V\frac{2}{3\sqrt{2}}\frac{m^{3/2}}{\pi^2\hbar^2}\sum_{n=1}^{\infty} z^n\left[\int d\epsilon\epsilon^{3/2}e^{-n\epsilon/k_BT}\right] \tag{182}$$

Kvar är att räkna integralen

$$I = \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{3/2} e^{n\epsilon/k_B T} \tag{183}$$

Vi gör variabelbytet

$$\epsilon = x^2 \Rightarrow d\epsilon = 2xdx = 2\epsilon^{1/2} dx \tag{184}$$

och får

$$I = \int_0^\infty 2x^4 dx e^{-nx^2/k_B T} \tag{185}$$

För att beräkna denna integral av formen

$$\int_0^\infty dx x^4 e^{-\alpha x^2} \tag{186}$$

noterar vi att detta

$$= \frac{d^2}{d\alpha^2} \int_0^\infty dx e^{-\alpha x^2} \tag{187}$$

och den senare delen är ju bara en Gaussisk integral $= \frac{1}{2}\sqrt{\pi}\alpha^{-1/2}$ så man får

$$= \frac{d^2}{d\alpha^2}\frac{1}{2}\sqrt{\pi}\alpha^{-1/2} = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}(-\frac{3}{2})(-\frac{1}{2})\frac{1}{\alpha^{5/2}} \tag{188}$$

och med att sätta in $\alpha = n/k_BT$ fås med detta

$$I = 2\int_0^\infty x^4 dx e^{-nx^2/k_BT} = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}(\frac{k_BT}{n})^{5/2} \tag{189}$$

Därmed är

$$\Omega = kT\ \ln(1-z) - \underbrace{V\frac{2}{3\sqrt{2}}\frac{m^{3/2}}{\pi^2\hbar^2}\frac{3\sqrt{\pi}}{4}(k_BT)^{5/2}}_{V(k_BT)(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2})^{3/2}}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{z^n}{n^{5/2}} \tag{190}$$

Här är alltså

$$z = e^{\mu/k_BT} \tag{191}$$

och vi definierar $n_c \equiv (\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2})^{3/2}$ och får slutresultatet

$$\boxed{\Omega = kT\ \ln(1-z) - VkTn_c \sum_{n=1}^{\infty}(\frac{z^n}{n^{5/2}})} \tag{192}$$

Partikelantalet är $N = -\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}$ och

$$z^n = e^{n\mu/k_BT} \tag{193}$$

så

$$\frac{\partial}{\partial\mu}z^n = \frac{n}{k_BT}z^n \text{ och specifikt för } n=1: \quad \frac{\partial}{\partial\mu}z = \frac{1}{k_BT}z \tag{194}$$

Med hjälp av detta får vi

$$N = -kT\frac{1}{1-z}(-)\frac{z}{k_BT} + Vk_BTn_c\sum_{n=1}^{\infty}\frac{n}{k_BT}\frac{z^n}{n^{5/2}} \tag{195}$$

så sammanfattningsvis

$$\begin{cases} N = \dfrac{z}{1-z} + V n_c \displaystyle\sum_{n=1} \frac{z^n}{n^{3/2}} \\ \Omega = k_B T \, \ln(1-z) - V k_B T n_c \displaystyle\sum_{n=1} \frac{z^n}{n^{5/2}} \end{cases} \tag{196}$$

Detta är en implicit form för Bose-systemets tillståndsekvation

$$\Omega = -PV; \tag{197}$$

VII.5.1. Den inre energin

För energin gäller

$$E = \sum_k n_k \epsilon_k = \sum_k \frac{\epsilon_k}{e^{(\epsilon_k - \mu)/k_B T} - 1} \tag{198}$$

Då $\epsilon_0 = 0$ faller grundtillståndets term bort ur uttrycken för energin.

Nu ersätter vi igen

$$\sum_k \to \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int \underbrace{d^3p}_{4\pi \underbrace{p^2 dp}_{m\sqrt{2m\epsilon}d\epsilon}} \tag{199}$$

$$= \frac{V m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \int \sqrt{\epsilon} d\epsilon; \tag{200}$$

Alltså är

$$E = \frac{V m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \underbrace{\int \frac{\sqrt{\epsilon}\epsilon d\epsilon}{e^{(\epsilon-\mu)/k_B T} - 1}}_{\frac{2\sqrt{\pi}}{4}(k_B T)^{5/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^{5/2}}} \tag{201}$$

Orsaken att vi kunde skriva ner svaret direkt är att detta är samma integral som uppträder i utrycket för Ω, integralen i ekvation 180!

$$\boxed{E = \frac{3}{2} V (k_B T) n_c \sum_{n=1} \frac{z^n}{n^{5/2}}} \tag{202}$$

Alltså om man bortser från noll-energitermen visar jämförelse av resultaten för E och Ω att

$$E = -\frac{3}{2}\Omega = \frac{3}{2} PV \tag{203}$$

VII.5.2. Tillståndsekvationen vid höga temperaturer:

Vi ser på fallet där fugaciteten $z = e^{\mu/k_BT}$ är litet, d.v.s. μ negativt och T stort eller alternativt μ stort och negativt.

Då blir

$$N = \underbrace{\frac{z}{1-z}}_{\to 0} + V n_c \sum_{n=1} \frac{z^n}{n^{3/2}} \approx V n_c \left[z + \frac{z^2}{2\sqrt{2}} + \ldots \right] \tag{204}$$

och

$$\Omega = k_BT \underbrace{\ln(1-z)}_{\to 0} - V k_BT n_c \sum_{n=1} \frac{z^n}{n^{5/2}} \approx -V k T n_c \left[z + \frac{z^2}{4\sqrt{2}} + \ldots \right] \tag{205}$$

där vi tagit med termerna $n = 1$ och $n = 2$ i summorna.

Om vi nu använder oss av partikeltätheten

$$n \equiv \frac{N}{V} \tag{206}$$

kan man skriva ekvationen för N enkelt som

$$\frac{n}{n_c} = z + \frac{z^2}{2\sqrt{2}} + \ldots \tag{207}$$

Vi vill nu vända på denna serie och istället få en serie av z som funktion av n/n_c:

$$\Rightarrow z = \alpha_1(\frac{n}{n_c}) + \alpha_2(\frac{n}{n_c})^2 + \ldots \tag{208}$$

För att bestämma konstanterna α_1 sätter vi nu in denna serie för z i uttrycket för n/n_c, men behåller bara termerna av ordningen n/n_c samt $(n/n_c)^2$:

$$\frac{n}{n_c} = \alpha_1\frac{n}{n_c} + \alpha_2(\frac{n}{n_c})^2 + \frac{1}{2\sqrt{2}}\alpha_1^2(\frac{n}{n_c})^2 \tag{209}$$

För att detta skall stämma ser man genast att man bör ha

$$\alpha_1 = 1 \text{ samt } \alpha_2 = -\frac{1}{2\sqrt{2}} \tag{210}$$

Alltså är vår serieuteveckling för z:

$$z \simeq (\frac{n}{n_c}) - \frac{1}{2\sqrt{2}}(\frac{n}{n_c})^2 \tag{211}$$

Insättning av detta z i uttrycket för Ω, ekv. 205, ger

$$\Omega = -VkT_B n_c \left\{ \frac{n}{n_c} - \frac{1}{2\sqrt{2}}(\frac{n}{n_c})^2 + \frac{1}{4\sqrt{2}}(\frac{n}{n_c})^2 + \dots \right\} \tag{212}$$

$$= -Vk_B T n_c \left\{ \frac{n}{n_c} - \frac{1}{4\sqrt{2}}(\frac{n}{n_c})^2 \dots \right\} \tag{213}$$

Men det gäller fortfarande också att

$$\Omega = -PV \tag{214}$$

så man får

$$PV = Vk_B T n_c \frac{\overbrace{n}^{N/V}}{n_c}\{1 - \frac{1}{4\sqrt{2}}(\frac{n}{n_c}) - \dots\} \tag{215}$$

$$= Nk_BT[1 - \frac{1}{4\sqrt{2}}(\frac{n}{n_c}) - ...] \tag{216}$$

Nu ser man att för $n << n_c$ övergår Bose-gasens tillståndsekvation i den klassiska idealgaslagen. Alltså är

$$n_c = (\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2})^{3/2} : \tag{217}$$

en kritisk täthetsparameter för giltighet av klassisk statistisk mekanik.

Vidare ser man ur

$$PV = Nk_BT[1 - \frac{1}{4\sqrt{2}}(\frac{n}{n_c}) - ...] \tag{218}$$

att Bose-gasens tryck är mindre än den klassiska idealgasens tryck!

VII.6. Bosegasen vid låga temperaturer

[Mandl 11.6]

Mest intressant är Bose-Einstein-gasen dock vid låga temperaturer.

Vi skriver

$$N = \frac{z}{1-z} + V n_c \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^{3/2}} \tag{219}$$

$$\equiv N_0 \quad + \quad N_e \tag{220}$$

där vi definierat

$$N_0 \quad = \quad \text{antalet partiklar i grundtillståndet} \tag{221}$$

$$N_e \quad = \quad \text{antalet partiklar i de exciterade tillståndena} \tag{222}$$

$$\tag{223}$$

Vi påminner oss om att μ alltid är < 0 för en Bose-Einstein-gas (jämför kapitel 26). Vi betraktar nu uttrycket ovan för exciterade tillstånd N_e, alltså

$$\frac{N_e}{V} = n_c \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^{3/2}} = (\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2})^{3/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{\mu n/k_BT}}{n^{3/2}} \tag{224}$$

Vi tänker oss nu att man skulle kyla ner en dylik gas vid konstant N_e, V (kom ihåg att om man bara använder integralen är $N_0 = 0$). Detta innebär att N_e/V måste vara konstant, och alltså också det högra ledet konstant. För att T sjunker, måste summan i ekvationen ovan öka. För att summan skulle öka, måste $e^{\mu n/k_BT}$ öka, och då $\mu < 0$ därmed μ/T öka. Alltså måste μ öka. Men μ måste ju hela tiden vara negativ. Alltså betyder detta att $\mu \longrightarrow 0$. [Paakkari 12.2, Mandl 11.6, Landau-Lifshitz s. 180 och ekv. 56.5]

Då $\mu \longrightarrow 0$ leder detta till att $z \longrightarrow 1$.

Alltså innebär detta att då $T \to 0$ gäller

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^{3/2}} \lesssim \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{3/2}} \equiv \zeta(\frac{3}{2}) \tag{225}$$

där vi känt igen att summan är definitionen på Riemanns zeta-funktion:

$$\zeta(x) \equiv \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^x} \tag{226}$$

Från tabeller (eller ett simpelt dataprogram) får man lätt att

$$\zeta(\frac{3}{2}) \simeq 2.612 \tag{227}$$

Antalet partiklar i de exciterade tillstånden blir begränsat av

$$N_e < V n_c \zeta(\frac{3}{2}) \equiv N_{max} \tag{228}$$

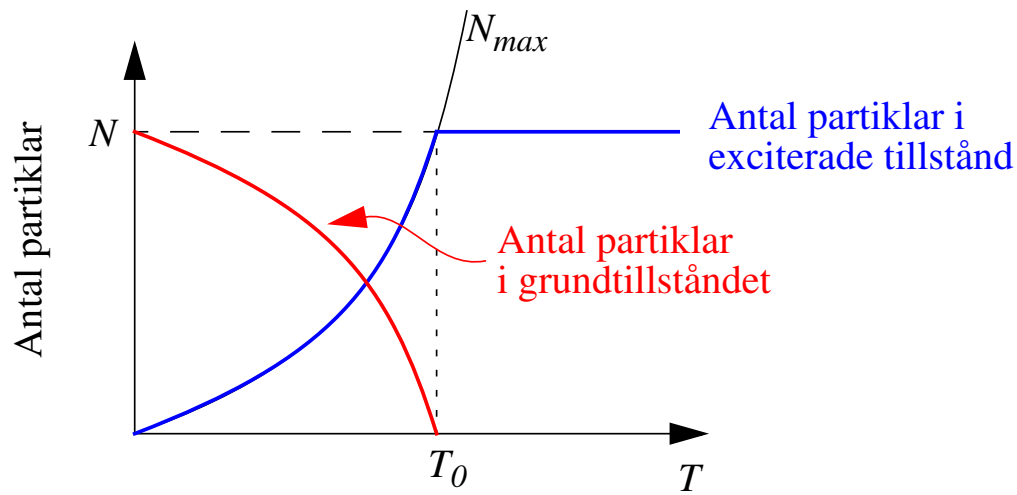
Tänk oss nu att vi skulle ha ignorerat N_0 hela vägen. Då skulle $N = N_e$ och villkoret ovan skulle vara $N < N_{max}$. Men N_{max} sjunker ju med temperaturen, så detta skulle säga att vid någon kritisk temperatur borde partiklar börja försvinna från systemet. Detta skulle vara en renodlad *paradox!*

Lösningen är givetvis den explicit utsatta termen N_0, som förklarar vad som sker: om partikeltalet i gasen N överstiger N_{max} måste $N - N_{max}$ partiklar vara i grundtillståndet!

För att se vad detta betyder skriver vi ut n_c:

$$N_{max} = V\zeta(\frac{3}{2})(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2})^{3/2} \tag{229}$$

Man ser att N_{max} sjunker med $T^{3/2}$. Om man alltså kan kyla ner ett bosonsystem så att N bevaras, kommer förr eller senare partiklarna att tvingas i grundtillståndet. Denna effekt kallas **Bose-Einstein kondensation!**



Notera betydelsen av termen kondensation här: detta innebär att partiklarnas energi är 0, alltså att deras rörelsemängd "kondenseras" till 0. Detta är alltså inte samma sak som konventionell kondensering där gas övergår till vätska!

I.o.m. att alla eller de flesta atomer i ett BE-kondensat är i samma kvanttillstånd (grundtillståndet), kan de anses bilda ett enda kvantmekaniskt objekt, som kan anta makroskopiska dimensioner. Därmed har de många mycket exotiska egenskaper.

(En mycket bra mer allmännfattlig presentation av detta är vid

http://www.colorado.edu/physics/2000/bec/).

Kondensationstemperaturen T_0 fås ur

$$N = N_{max} = V\zeta(\frac{3}{2})(\frac{mk_BT_0}{2\pi\hbar^2})^{3/2} \tag{230}$$

$$\Longrightarrow T_0 = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B}\left(\frac{n}{\zeta(\frac{3}{2})}\right)^{2/3} \tag{231}$$

För $T > T_0$ är $N = N_e$

För $T < T_0$ är $N = N_0 + N_{max}(T)$

$$\begin{cases} N_{max} = V\zeta(\frac{3}{2})(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2})^{3/2} \\ N = V\zeta(\frac{3}{2})(\frac{mk_BT_0}{2\pi\hbar^2})^{3/2} \end{cases} \tag{232}$$

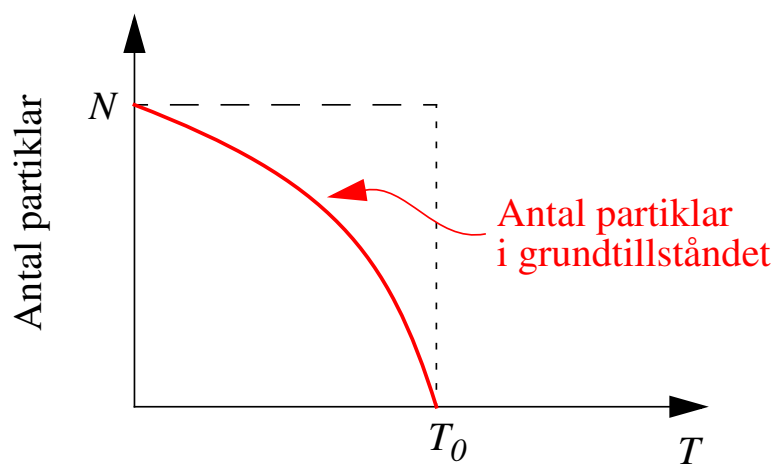
Alltså är

$$\frac{N_{max}}{N} = (\frac{T}{T_0})^{3/2} \tag{233}$$

och

$$N_0 = N - N_{max} = N[1 - (\frac{T}{T_0})^{3/2}] \tag{234}$$

Alltså ökar antalet partiklar i grundtillståndet snabbare än linjärt då $T \longrightarrow 0$.



Tillståndsekvationen för $T < T_0$:

$$E = \frac{3}{2} V n_c (k_B T) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^{5/2}} \tag{235}$$

VII.6.1. Bose-Einstein-gasens värmekapacitet

Nu räknar vi först värmekapaciteten för området

$$T < T_0 \text{ med approximationen } \quad : z \simeq 1 \tag{236}$$

Då är

$$E = \frac{3}{2} V n_c (k_B T) \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{5/2}}}_{= \zeta(\frac{5}{2}) \simeq 1.341} \tag{237}$$

$$E = \frac{3}{2} V (k_B T) \zeta(\frac{5}{2}) (\frac{m k_B T}{2\pi\hbar^2})^{3/2} = \frac{3}{2} V (k_B) \zeta(\frac{5}{2}) (\frac{m k_B}{2\pi\hbar^2})^{3/2} T^{5/2} \tag{238}$$

varur fås

$$C_V = \frac{dE}{dT} = \frac{3}{2} V (k_B) \zeta(\frac{5}{2}) (\frac{m k_B}{2\pi\hbar^2})^{3/2} \frac{5}{2} T^{3/2} = \frac{15}{4} V n_c k_B \zeta(\frac{5}{2}) \tag{239}$$

Alltså är

$$C_V \propto T^{3/2} \quad (T < T_0) \tag{240}$$

Ovanför T_0 är

$$U = \frac{3}{2}PV \simeq \frac{3}{2}k_B T N\{1 - \frac{n}{4\sqrt{2}n_c} + ...\} \tag{241}$$

$$C_V = \frac{3}{2}k_B N \frac{d}{dT}\{T - \frac{nT}{4\sqrt{2}n_c} + ...\} \tag{242}$$

För att göra derivatan måst vi komma ihåg att $n_c \propto T^{3/2}$:

Vi deriverar termen med T/n_c med kedjeregeln för en produkt $T \times 1/n_c$:

$$= \frac{3}{2}k_B N\{1 - \frac{n}{4\sqrt{2}n_c} - \frac{nT}{4\sqrt{2}}(-\frac{1}{n_c^2})\underbrace{\frac{dn_c}{dT}}_{\frac{3}{2}\frac{n_c}{T}} ...\} \tag{243}$$

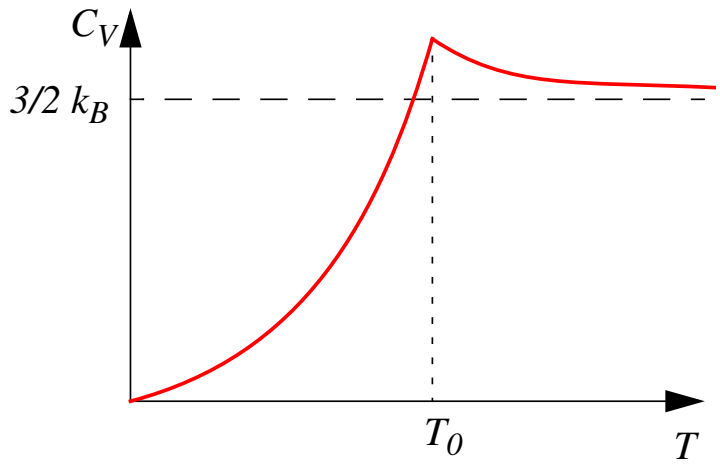
$$= \frac{3}{2}k_B N\{1 - \frac{n}{4\sqrt{2}n_c} + \frac{3}{8\sqrt{2}}\frac{n}{n_c} - ...\} \tag{244}$$

$$= \frac{3}{2}k_B N\{1 + \frac{1}{8\sqrt{2}}\frac{n}{n_c} + ...\} \tag{245}$$

Detta är uppenbart

$$> \frac{3}{2} k_B N \tag{246}$$

så vår beräkning förutspår en form kring T_0 på

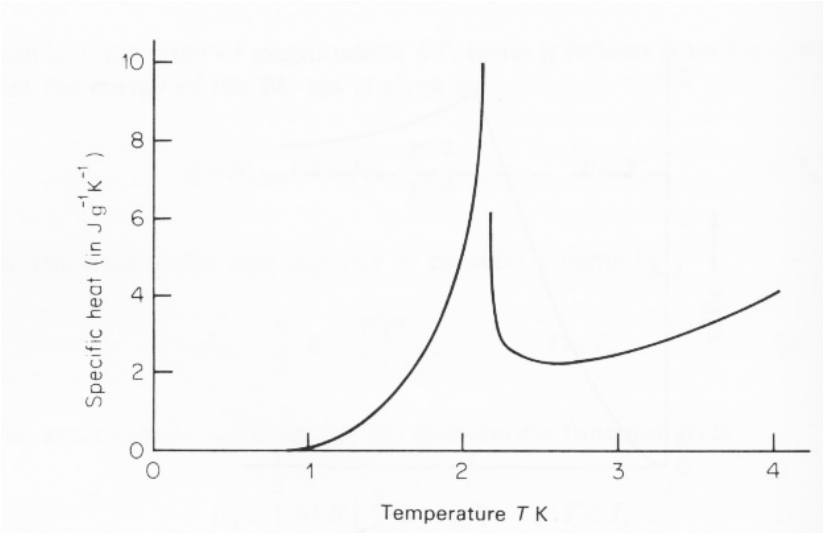


T.ex. Flytande He : $m =$ 6.65 10^{-24} g, $V =$ 27 cm^3/mol vid 1 atm.

Detta ger $T_0 = 3.18$ K.

Experimentellt har man observerat $T_{exp} = 2.19$ K vilket är tämligen nära vårt estimat om man tänker på att vi gjorde ganska grova approximationer längs med vägen.

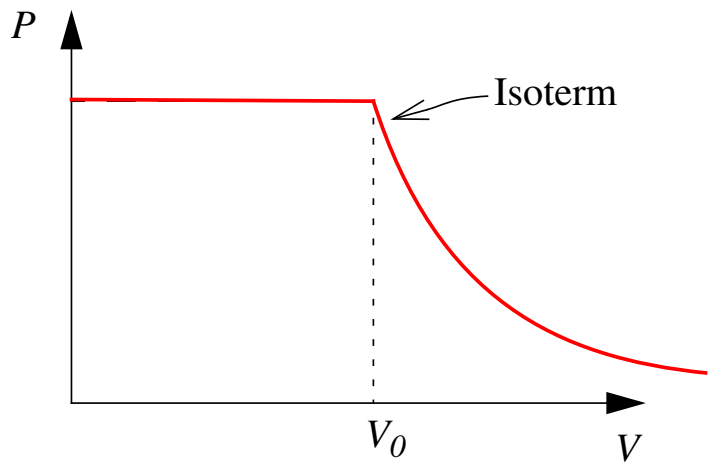
Experimentellt är också $C_V \sim \ln|T - T_\lambda|$ vilket är en liknande form som vad vi beräknade, men har en skarp singularitet vid T_λ.



Systemets $E = U = \frac{3}{2}PV$, så vi får för trycket:

$$P = \frac{2}{3V} \quad E = \begin{cases} k_B T n_c \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^{5/2}}, & T > T_0 \\ k_B T n_c \zeta(\frac{3}{2}), & T < T_0 \end{cases} \tag{247}$$

Notera att under T_0 är trycket oberoende av volymen! Detta är en drastisk avvikelse från klassiskt idealgas-beteende, och f.ö. också från beteendet i alla normala vätskor och fasta ämnen!



Här har den kritiska volymen V_0 bestämts genom att lösa definitionen på T_0 (ekvation 230) med avseende på V:

$$T_0 = \frac{2\pi\hbar^2}{m}\left(\frac{N/V}{\zeta(\frac{3}{2})}\right)^{3/2} \tag{248}$$

VII.6.2. Typer av Bose-Einstein-kondensat

Som ovan antyddes har BE-kondensation uppnåtts i flytande He (ett av de mest framstående labben att forska i detta i världen är köldlabbet i Otnäs). Detta gjordes redan för tiotals år sedan.

Mera nyligen har BE-kondensation uppnåtts i verkliga gaser som kyls ner av lasrar. Sådana gaser måsta ha låg densitet, annars skulle de helt enkelt övergå i fast form. Om t.ex. avståndet mellan atomer skulle vara $\sim$ 1000 Å, skulle $n = 1/10^{12}$ Å^{-3}. Då kan man uppskatta att den kritiska temperaturen är

$$T_0 = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B}\left(\frac{n}{\zeta(\frac{3}{2})}\right)^{2/3} = 0.4\mu\text{K} \tag{249}$$

Detta är rätt storleksordning, och orsaken till att det är så svårt att erhålla Bose-Einstein-kondensation i gaser: att kyla ner något till nanoKelvin är inte lätt precis...

Elektrisk supraledning förklaras med att det orsakas av elektronpar-bosoner, som bildar ett Bose-Einstein-kondensat.