

Antalet tillstånd i en ideal kvantgas med N partiklar

Detta appendix är överkurs.

Innan du går vidare bör du repetera sidorna 90 - 91 i Kvantvärldens fenomen eftersom vi kommer att utvidga resonemanget gällande för en partikel till N partiklar där N är av storleksordning Avogadros tal.

Vi utgår från att vi har N stycken partiklar i en kubisk kvantbiljard. Varje partikel har tre kvanttal. För partikel nr k gäller att kvanttalen är (n_{kx}, n_{ky}, n_{kz}) och att energin är

$$E_k = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_{kx}^2 + n_{ky}^2 + n_{kz}^2) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n_k^2,$$

Där vi infört beteckningen $n_k^2 = (n_{kx}^2 + n_{ky}^2 + n_{kz}^2)$. För att fullständigt beskriva tillståndet hos de N partiklarna krävs alltså $3N$ kvanttal. Man inser snabbt att detta är en orimlighet att ange alla dessa kvanttal – det vi ska göra och som behövs i den statistiska fysiken är att ange hur många tillstånd som finns vid en viss energi.

I den ideala gasen växelverkar inte partiklarna med varandra. Alltså är den totala energin i gasen med N stycken partiklar:

$$E_{n_{1x}, n_{1y}, n_{1z}, n_{2x}, n_{2y}, \dots} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \sum_{k=1}^N n_k^2.$$

Varje tillstånd är en gitterpunkt (= heltalspunkt) i det $3N$ -dimensionella kvanttalrummet. Frågan vi ställer oss är: Hur många tillstånd finns det med energi mindre än U ? Låt $\Gamma(U)$ vara detta antal tillstånd.

Antalet tillstånd = volymen av kvanttalrummet med en radie mindre än

$$n = \sqrt{\sum_{k=1}^N n_k^2} = \sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2 \pi^2} U}.$$

Eftersom kvanttalrummet är $3N$ -dimensionellt ska vi beräkna volymen av en sfär i $3N$ -dimensioner. Volymen av en sfär i k dimensioner ges av

$$V_k(R) = \frac{\pi^{k/2}}{(k/2)!} R^k. \text{ (se } \text{http://en.wikipedia.org/wiki/Volume_of_an_n-ball})$$

Med samma metod som i tre dimensioner finner vi att

$$\Gamma(n) = \frac{\pi^{3N/2}}{(3N/2)!} n^{3N} \cdot \frac{1}{2^{3N}}.$$

Faktorn $\frac{1}{2^{3N}}$ beror på att vi enbart ska integrera över området med positiva kvanttal. Vi ersätter n med U och får:

$$\Gamma(U) = \frac{\pi^{3N/2}}{(3N/2)!} \sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2 \pi^2} U}^{3N} \cdot \frac{1}{2^{3N}}.$$

Med $V = a^3$ (gasens volym) får vi slutligen

$$\Gamma(U) = \frac{\sqrt{\pi}V^N}{(3N/2)!} \left(\frac{mU}{2\pi\hbar^2} \right)^{3N/2}.$$

I den statistiska fysiken är vi intresserade av antalet möjliga kvanttillstånd, Ω om den inre energin U är given. Om vi betraktar antal tillstånd i ett intervall $(U - \Delta U, U)$ med bredden ΔU så gäller att

$$\Omega(U, \Delta U) = \Gamma(U) - \Gamma(U - \Delta U) = CU^{3N/2}.$$

Kom ihåg att N är ett mycket stort tal, vilket innebär att funktionen $U^{3N/2}$ växer oerhört snabbt. Detta innebär att

$$\Gamma(U) - \Gamma(U - \Delta U) = CU^{3N/2} \left(1 - \left(1 - \frac{\Delta u}{u} \right)^{3n/2} \right).$$

Termen $\left(1 - \frac{\Delta u}{u} \right)^{3n/2}$ är i de fall vi betraktar alltid liten. T ex anta att energin given med 5 siffrors noggrannhet då är $0.9999^{(10^{23})} = 0$ med all rimlig noggrannhet. I ord innebär detta att funktionen $\Gamma(U)$ växer så oerhört snabbt att väsentligen alla tillstånd finns i ett mycket smalt intervall precis vid U . Alltså är funktionen Ω oberoende av ΔU . Vi har hittills inte tagit hänsyn till att kvantmekaniska partiklar är identiska. Därför måste formeln för Ω kompletteras med att vi dividerar med $N!$. Slutligen får vi

$$\Omega(U) = \frac{\sqrt{\pi}V^N}{N!(3N/2)!} \left(\frac{mU}{2\pi\hbar^2} \right)^{3N/2}.$$

Med detta uttryck får vi enkelt hur entropin beror av U , V , N .

Sedan tillkommer en faktor som beror av spinnet. För t ex spinn-1/2 partiklar blir denna faktor 2.