

## Дәріс №12 Бірдей бөлшектердің идеал кванттық газдары

**Дәріс жоспары:** 1) Фермиондардың толқындық функциясы.  
2) Бозондардың толқындық функциясы.

Классикалық механикада толық жүйенің күйін оны құрайтын жекелеген бөлшектерге күйлер телу арқылы сипаттауға болады және бұл әдіс бөлшектердің өзара әсерлесу немесе әсерлеспеуіне назар аудармайды. Ал кванттық механикада жағдай мүлдем басқаша. Егер бөлшектер бір-бірімен әсерлесетін болса, онда жекелеген бөлшектердің күйлері туралы айтуға болмайды. Барлық бөлшектің координаталарына тәуелді **толқындық функция** жүйенің толық күйін сипаттайды. Дегенмен, егер бөлшектер бір-бірімен әсерлеспейтін болса, онда жеке бөлшектердің күйі жайлы айтуға болады. Бұл жағдайда толқындық функция жеке бөлшектердің толқындық функцияларының көбейтіндісі ретінде қарастырылады, олардың әрқайсысы тек бір бөлшектің координаталарына тәуелді. Ал жүйенің энергиясы жеке бөлшектердің энергияларының қосындысына тең болады:

$$\varepsilon_{\{l_i\}} = \varepsilon_{l_1} + \varepsilon_{l_2} + \dots + \varepsilon_{l_N}.$$

$\varepsilon_{l_i}$  – бір бөлшектің энергиясы, ал  $l_i - i$  – бөлшектің бірбөлшектік күйінің индексі. Алайда, кванттық механикада бөлшектердің теңбе-теңдігінің классикалық механикамен салыстырғанда өте маңызды салдарлары болады. Классикалық механикада бөлшектер теңбе-тең болса да (масса, заряд және т.б. сипаттамалары бірдей) барлық қозғалыс уақыты кезінде әрбір бөлшектің күйін бақылауға болады. Кванттық механикада мұндай бақылау жүргізуге болмайды. Онда қозғалыс траекториясы деген ұғым жоқ. Егер бастапқы уақыт мезетінде бөлшектер кеңістіктің әр түрлі аймақтарында болсын делік, онда қозғалыс процесінде қандай-да бір уақыттан соң олар бір аймаққа келіп орналассын (мысалы, бөлшектер соқтығысуы), содан кейін осы екі бөлшектің әр қайсысының қайда орналасқанын анықтай алмаймыз. Бөлшектің кеңістіктің берілген көлем элементінде болу ықтималдығы жайлы ғана айта аламыз. Толқындық функциядағы бірдей екі бөлшектің координаталарының (спиндік координатаны қоса) орнын алмастырып қойғанда шыққан жаңа толқындық функция бұрынғы толқындық функция сипаттайтын квант-механикалық күйді сипаттайтын болады. Яғни жаңа кванттық күй пайда болмайды. Кванттық механикада толқындық функция еркін **фазалық көбейткішке**  $\lambda = \exp(i\alpha)$  дейінгі дәлдікпен анықталады:

$$(q_2, q_1, q_3, \dots, q_N) = \lambda (q_1, q_2, q_3, \dots, q_N)$$

Тағы бір рет орын алмастырайық:

$$(q_1, q_2, q_3, \dots, q_N) = \lambda (q_2, q_1, q_3, \dots, q_N) = \lambda^2 (q_1, q_2, q_3, \dots, q_N),$$

яғни  $\lambda^2 = 1$  және  $\lambda = \pm 1$ .

Табиғатта барлық бөлшектер екі топқа бөлінетіні белгілі болды:

1. Бірдей бөлшектер жүйесінің толқындық функциясы кез келген екі бөлшектің орнын ауыстыруға қатысты антисимметриялы ( $\lambda = -1$ ). Мұндай бөлшектер **Ферми-бөлшектер** немесе **фермиондар** деп аталады. Фермиондарға электрондар, протондар, нейтрондар жатады.

2. Бірдей бөлшектер жүйесінің толқындық функциясы кез келген екі бөлшектің орнын ауыстыруға қатысты симметриялы ( $\lambda = 1$ ). Бұл **Бозе-бөлшектер** немесе **бозондар** (мысалы, фотондар).

Сонымен қатар, фермиондар спині жартылай бүтін, ал бозондар спині бүтін бөлшектер

екені белгілі болды.

Әсерлеспейтін бөлшектер жүйесінің толқындық функциясының көбейтінді ретінде алынуы дұрыс емес, себебі ол кез келген екі бірдей бөлшектің орнын алмастыруға қатысты симметрия қасиетін қанағаттандырмайды. Бұл жағдайда **фермиондар үшін дұрыс функция-**

$$^{(A)} = \sum_p \epsilon_p P^{\wedge} \quad l_1(q_1) \quad l_2(q_2) \dots \quad l_N(q_N)$$

(сумма барлық р орын ауыстырулар бойынша,  $P$  – р орын ауыстырудың операторы, ал р орын ауыстырудың жұптығына байланысты  $\epsilon_p = \pm 1$ ), ал **бозондар үшін-**

$$^{(S)} = \sum_p P^{\wedge} \quad l_1(q_1) \quad l_2(q_2) \dots \quad l_N(q_N)$$

$^{(A)}$  толқындық функцияны келесі түрде жазуға болады:

$$^{(A)} = \begin{bmatrix} l_1(q_1) & l_1(q_2) & \dots & l_1(q_N) \\ l_2(q_1) & l_2(q_2) & \dots & l_2(q_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ l_N(q_1) & l_N(q_2) & \dots & l_N(q_N) \end{bmatrix}$$

Егер кемінде екі кез келген бірбөлшектік толқындық функция бірдей болатын болса, онда бұл функция нөлге айналады. Мысалы, егер  $l_1 = l_2$  ( $l_1 = l_2$ ), онда анықтауыштағы екі жол бірдей болады және  $^{(A)} = 0$ . Осы нәтиже әдетте **Паули принципі** ретінде қорытындыланады: бірдей бірбөлшектік күйде екі немесе одан да көп теңбе-тең Ферми-бөлшек бола алмайды. Бозе-бөлшек үшін мұндай шектеу жоқ. Кез келген бірбөлшектік күйде бір, екі немесе одан да көп теңбе-тең Бозе-бөлшек бола алады. Мысалы, егер  $l_1 = l_2 = l_3$ , онда  $^{(S)} \neq 0$ , және мұндай күй табиғатта жүзеге аса алады.

Бірдей кванттық бөлшектер жүйесінің статистикалық қасиеттерін қарастыру үшін кванттық үлкен канондық таралуды қолданамыз.  $l$  индексі бірбөлшектік күйлерді нөмірлейтін болсын,  $\varepsilon_l$  –  $l$  күйдің энергиясы, ал  $n_l$  – осы күйдегі бөлшектер саны. Сонда

$$\rho = \exp \left( \frac{\Omega + \mu N - E_{\{l\},N}}{kT} \right);$$

$$N = \sum_l n_l \quad E_{\{l\},N} = \sum_l \varepsilon_l n_l \quad \Omega = \sum_l \Omega_l$$

яғни

$$\sum_l \Omega_l + (\mu - \varepsilon_l) n_l$$

$$\rho = \exp \left( \frac{\sum_l \Omega_l + (\mu - \varepsilon_l) n_l}{kT} \right) = \prod_l \rho_{l,n_l}$$

$$\rho_{l,n_l} = \exp \left( \frac{\Omega_l + (\mu - \varepsilon_l) n_l}{kT} \right)$$

Функциясы  $l$  бірбөлшектік күйде  $n_l$  бөлшектің болу ықтималдығын көрсетеді.  $\rho$  функциясы  $\rho_{l,n_l}$  функцияларының көбейтіндісі болғандықтан барлық бірдей бөлшектер жүйесін  $l$  статистикалық тәуелсіз жүйешелерден құралған жүйе ретінде қарастыруға болады.  $l$  жүйеше  $l$  – бірбөлшектің күйде орналасқан бөлшектерден тұрады. Осы жүйешедегі бөлшектер саны өзгеруі мүмкін (бөлшектердің басқа жүйешелерге өтуі немесе

келуі, бөлшектер көзімен алмасу), сондықтан жүйешенің энергиясы да өзгереді  $\varepsilon_l n_l$ . Таралу функциясынан әрбір жүйешеге үлкен канондық таралуды қолдануға болатындығы көрінеді. Осыған дейін үлкен канондық таралуды өте көп бөлшектерден тұратын макрожүйеге қолдандық. Бірақ оны қорытып шығаруда жүйенің келесі қасиеттерін пайдаландық:

а) Оның энергиясы жүйенің басқа бөліктерінің энергиясынан өте аз болуы тиіс (термостат және бөлшек көздері рөлін атқарушы).

б) Жүйенің энергиясын қарастырылатын жүйеше мен жүйенің қалған бөлігінің энергияларының қосындысы ретінде жазу үшін берілген жүйешенің жүйенің басқа бөліктерімен әсерлесу энергиясы сол жүйешенің энергиясымен (дәл осы пунктте жүйешенің макроскопиялығын пайдаландық) салыстырғанда ескерілмейтіндей аз болуы тиіс. Осы екі талапты  $l$  бірбөлшектік күйде орналасқан бөлшектер жиыны қанағаттандырады. Газды идеал деп есептегендіктен аталған бөлшектер жиынының басқа жүйеше бөлшектерімен әсерлесу энергиясы нөлге тең. Жүйе бірбөлшектік күйге орнатылғандықтан **нормалау шартында** күйлер бойынша суммалау болмауы керек:

$$\sum_{n_l} \rho_{l,n_l} = 1, \quad \exp\left(\frac{\Omega_l}{kT}\right) \sum_{n_l} \exp\left(\frac{\mu - \varepsilon_l}{kT} n_l\right) = 1,$$

$$\Omega_l = -kT \ln \sum_{n_l} \exp\left(\frac{\mu - \varepsilon_l}{kT} n_l\right).$$

$l$  күйдегі бөлшектердің орташа саны тең:

$$\frac{\partial \Omega_l}{\partial (\mu - \varepsilon_l)} = \langle n_l \rangle$$

Бірдей бөлшектердің барлық жүйесінің  $\Omega$  –потенциалы үшін

$$\Omega = \sum_l \Omega_l = -kT \sum_l \ln \sum_{n_l} \exp \left( \frac{\mu - \varepsilon_l}{kT} n_l \right).$$

Оның  $T, V, \mu$  айнымалыларының функциясы ретінде дифференциалы кәдімгі түрге келеді (39). Теңбе-тең фермиондар мен бозондардың идеал газын жеке қарастырамыз.

Классикалық статистикалық физикада бөлшектерді бір-бірінен ажыратуға болады деп қарастырылады. Мысалы, газдағы бірінші бөлшек пен екінші бөлшектің координаталары мен импульстері әртүрлі болғандықтан, оларды жеке-жеке белгілеуге болады. Алайда кванттық механикада бірдей бөлшектер үшін мұндай түсінік әрқашан дұрыс емес.

Массасы, заряды және басқа да ішкі сипаттамалары бірдей бөлшектерді кванттық механикада ажыратылмайтын бөлшектер деп атайды. Электрондар, протондар, нейтрондар сияқты бөлшектердің бір түрге жататындары бір-бірінен принципті түрде ажыратылмайды. Бұл қасиет кванттық статистиканың негізгі ерекшеліктерінің бірін анықтайды.

Бірдей бөлшектердің қасиеттерін сипаттауда олардың толқындық функциясының бөлшектердің орындарын ауыстырған кездегі өзгерісі маңызды рөл атқарады. Осы қасиетке байланысты барлық бірдей бөлшектер екі үлкен топқа бөлінеді: фермиондар және бозондар.

Фермиондардың спині жартылай бүтін мәндерге ие болады:  $1/2, 3/2, 5/2$  және т.б. Электрон, протон және нейтрон фермиондарға жатады. Бозондардың спині бүтін санмен сипатталады:  $0, 1, 2$  және т.б. Фотон, кейбір атомдар және бүтін спині бар басқа кванттық бөлшектер бозондарға жатады.

Бірдей бөлшектердің бұл екі тобының статистикалық қасиеттері бір-бірінен түбегейлі ерекшеленеді. Фермиондар Ферми–Дирак статистикасына, ал бозондар Бозе–Эйнштейн статистикасына бағынады.

Фермиондардың толқындық функциясы. Кванттық механикада бөлшектің күйі толқындық функция арқылы сипатталады. Егер жүйеде  $N$  бірдей бөлшек болса, онда олардың толық күйін көпбөлшекті толқындық функция арқылы көрсетуге болады:

$$\Psi = \Psi(q_1, q_2, \dots, q_N)$$

Мұндағы  $q_i$  шамасы  $i$ -бөлшектің кеңістіктік координаталарын ғана емес, қажет болған жағдайда оның спиндік күйін де қамтуы мүмкін.

Бірдей бөлшектердің маңызды қасиеті — бөлшектердің нөмірлері физикалық мағынаға ие емес. Мысалы, екі бірдей бөлшектің орындарын ауыстырсақ, жүйенің физикалық күйі өзгермеуі керек. Бірақ толқындық функцияның математикалық түрі белгілі бір заң бойынша өзгеруі мүмкін.

Екі бөлшекті қарастырайық. Бастапқы күй:

$$\Psi(q_1, q_2)$$

Бөлшектердің орындарын ауыстырғаннан кейін:

$$\Psi(q_2, q_1)$$

Бірдей бөлшектер үшін толқындық функцияның симметриясына байланысты екі жағдай болуы мүмкін:

$$\Psi(q_2, q_1) = +\Psi(q_1, q_2) \text{ немесе}$$

$$\Psi(q_2, q_1) = -\Psi(q_1, q_2)$$

Бірінші жағдайда толқындық функция симметриялы деп аталады, ал екінші жағдайда антисимметриялы деп аталады.

Фермиондардың толқындық функциясы бөлшектердің орындарын ауыстырғанда таңбасын өзгертеді. Сондықтан фермиондар үшін

$$\Psi(q_2, q_1) = -\Psi(q_1, q_2)$$

қатынасы орындалады.

N фермионнан тұратын жүйеде кез келген екі бөлшектің орындарын ауыстырған кезде толық толқындық функцияның таңбасы өзгереді. Бұл қасиет фермиондардың антисимметрия принципі деп аталады.

Фермиондардың толқындық функциясының антисимметриялы болуы Паули принципімен тікелей байланысты. Паули принципі бойынша бір кванттық жүйеде екі бірдей фермион бір мезгілде дәл бірдей кванттық күйде бола алмайды.

Бұл принциптің маңызын қарапайым мысал арқылы түсіндіруге болады. Екі фермион бірдей кванттық күйде орналассын деп алайық. Олардың кеңістіктік және спиндік кванттық күйлері де бірдей болса, екі бөлшектің күйін сипаттайтын толқындық функцияның антисимметриялы комбинациясы

$$\Psi = (1/\sqrt{2}) [\psi_1(q_1)\psi_2(q_2) - \psi_2(q_1)\psi_1(q_2)]$$

түрінде жазылады.

Егер екі бөлшек бірдей күйде болса, онда  $\psi_1 = \psi_2$  болады. Бұл жағдайда жақша ішіндегі екі мүше бір-біріне тең болғандықтан, олардың айырмасы нөлге айналады. Демек,  $\Psi = 0$ .

Толқындық функцияның нөлге тең болуы мұндай күйдің физикалық тұрғыдан жүзеге аспайтынын көрсетеді. Осыдан екі бірдей фермионның бір кванттық күйде бола алмайтыны шығады.

Фермиондардың көпбөлшекті толқындық функциясын сипаттаудың ыңғайлы математикалық әдістерінің бірі — анықтауыштарды пайдалану. N фермион үшін толқындық функция Слейтер анықтауышы түрінде жазылады:

$$\Psi(q_1, q_2, \dots, q_N) = (1/\sqrt{N!}) \det[\psi_i(q_j)]$$

Бұл өрнек толқындық функцияның антисимметриялы қасиетін автоматты түрде қамтамасыз етеді. Кез келген екі бөлшектің орындарын ауыстырғанда анықтауыштың екі жолы немесе бағаны ауысатындықтан, оның таңбасы өзгереді.

Фермиондардың антисимметриялы толқындық функциясы олардың статистикалық қасиеттерін анықтайды. Мұндай бөлшектер үшін бір кванттық күйдің толу саны шектеулі болады. Әрбір кванттық күйді спиндік күйді есептегенде сәйкес фермиондар ғана толтыра алады.

Фермиондық жүйелерге электрондық газ жақсы мысал болады. Металдардағы электрондар бірдей фермиондар болғандықтан, олардың энергетикалық деңгейлерге орналасуы Ферми–Дирак статистикасымен сипатталады.

Ферми–Дирак таралуы бөлшектің энергиясы E болатын кванттық күйді толтыру ықтималдығын сипаттайды:

$$f(E) = 1 / [\exp((E - \mu)/(k_B T)) + 1]$$

Мұнда  $\mu$  — химиялық потенциал, T — абсолют температура,  $k_B$  — Больцман тұрақтысы. Формуладағы «+1» таңбасы фермиондарға тән және олардың Паули принципіне бағынатынын көрсетеді.

Абсолют нөл температурада фермиондар мүмкін болатын ең төменгі энергетикалық күйлерден бастап орналасады. Энергиясы белгілі бір шектен төмен күйлер толтырылады, ал одан жоғары күйлер бос қалады. Бұл шек Ферми энергиясы деп аталады.

Температура жоғарылаған кезде бөлшектердің бір бөлігі жоғары энергетикалық күйлерге ауыса алады. Бірақ Паули принципі сақталады, яғни бір кванттық күйге рұқсат етілгеннен артық фермион орналаса алмайды.

Бозондардың толқындық функциясы  
Бозондар — бүтін спинге ие бірдей бөлшектер. Оларға фотондар, глюондар және бүтін спині бар көптеген құрама бөлшектер жатады.

Бозондардың толқындық функциясы фермиондардың толқындық функциясынан өзгеше. Екі бірдей бозонның орындарын ауыстырған кезде толқындық функция өзінің

таңбасын өзгертпейді:

$$\Psi(q_2, q_1) = +\Psi(q_1, q_2)$$

Яғни бозондардың толқындық функциясы симметриялы болады.

Бұл қасиетті  $N$  бозоннан тұратын жүйеге де жалпылауға болады. Кез келген екі бірдей бозонның орындарын ауыстырғанда жүйенің толқындық функциясы өзгермейді.

Бозондардың симметриялы толқындық функциясы олардың бір кванттық күйде көп мөлшерде орналасуына мүмкіндік береді. Яғни фермиондардан айырмашылығы, бозондар үшін Паули тыйымы жоқ.

Бір кванттық күйде көптеген бозондар орналасуы мүмкін. Бұл қасиет Бозе–Эйнштейн статистикасының негізін құрайды. Бозондар үшін энергетикалық күйдің орташа толу саны Бозе–Эйнштейн таралуымен анықталады:

$$f(E) = 1 / [\exp((E - \mu)/(k_B T)) - 1]$$

Мұнда  $\mu$  — химиялық потенциал,  $T$  — температура,  $k_B$  — Больцман тұрақтысы. Ферми–Дирак формуласынан негізгі айырмашылығы — бөлімінде « $-1$ » таңбасының болуы.

Бозондар үшін химиялық потенциалдың мәні жүйенің бөлшектер саны сақтала ма, әлде сақталмай ма деген мәселеге байланысты. Мысалы, фотондар үшін бөлшектер саны тұрақты емес, сондықтан тепе-теңдік жағдайында олардың химиялық потенциалы нөлге тең болады:

$$\mu = 0.$$

Бұл жағдайда фотондар үшін Бозе–Эйнштейн таралуы

$$f(E) = 1 / [\exp(E/(k_B T)) - 1]$$

түріне келеді.

Бозондардың кванттық статистикасының маңызды нәтижелерінің бірі — Бозе–Эйнштейн конденсациясы. Температура жеткілікті төмендеген кезде көптеген бозондар ең төменгі энергетикалық күйге жинақталуы мүмкін. Бұл жағдайда жүйенің бөлшектерінің едәуір бөлігі бір ғана кванттық күйде орналасады.

Бозе–Эйнштейн конденсациясы классикалық физика тұрғысынан түсіндіру қиын болатын құбылыстардың бірі болып табылады. Ол кванттық статистиканың макроскопиялық деңгейде байқалатын маңызды нәтижесін көрсетеді.

Фермиондар мен бозондардың негізгі айырмашылығы. Фермиондар мен бозондардың айырмашылығы ең алдымен олардың толқындық функциясының симметриясынан көрінеді. Фермиондар үшін:

$$\Psi(q_2, q_1) = -\Psi(q_1, q_2)$$

Сондықтан олардың толқындық функциясы антисимметриялы болады және Паули принципі орындалады. Бір кванттық күйді бірнеше бірдей фермионның бір мезгілде иеленуі шектеледі.

Бозондар үшін:

$$\Psi(q_2, q_1) = +\Psi(q_1, q_2)$$

Сондықтан олардың толқындық функциясы симметриялы болады. Бір кванттық күйде көптеген бірдей бозондар орналасуы мүмкін.

Осы айырмашылық олардың статистикалық таралу заңдарында да байқалады.

Фермиондар Ферми–Дирак таралуына:

$$f(E) = 1 / [\exp((E - \mu)/(k_B T)) + 1]$$

ал бозондар Бозе–Эйнштейн таралуына:

$$f(E) = 1 / [\exp((E - \mu)/(k_B T)) - 1]$$

бағынады.

Жоғары температурада немесе бөлшектердің концентрациясы аз болған жағдайда екі таралу да классикалық Максвелл–Больцман таралуына жақындайды. Бұл кезде кванттық айырмашылықтар әлсірейді және жүйені классикалық идеал газ ретінде қарастыруға болады.

**Бақылау сұрақтары:**

- 1) Фермиондардың толқындық функциясын жазып көрсет.
- 2) Бозондардың толқындық функциясын жазып көрсет.
- 3) Фермиондардың толқындық функциясы қандай қасиетке ие және бұл қасиет нені білдіреді?
- 4) Бозондардың толқындық функциясы фермиондардың толқындық функциясынан қандай айырмашылыққа ие?
- 5) Ферми–Дирак және Бозе–Эйнштейн статистикаларының негізгі айырмашылығы неде?

Пайдаланған әдебиеттер: негізгі әдебиет – [2-5], қосымша әдебиет [1,2].