

## V. Kölcsönható rendszerek

Az eddigiekben olyan rendszerekkel foglalkoztunk, melyek "részecskéi" egymástól függetlenek voltak, s ez annak volt a következménye, hogy a köztük lévő kölcsönhatás elhanyagolhatóan kicsi volt. A rendszerek nagyrésze azonban olyan, hogy a részecskék közötti kölcsönhatás jelentős szerepet játszik, s ez új és néha szokatlan jelenségekre vezet (pl. szuperfolyékonyság). A statisztikus fizika egyik legfontosabb és legérdekesebb feladata az ilyen rendszerek leírása. Ebben a fejezetben megismerkedünk a probléma megoldásának egy lehetséges módszerével, majd látni fogjuk, hogy a kondenzált anyagok alacsony hőmérsékletű viselkedése ekvivalens megfelelően választott és függetlennek tekinthető effektív részecskék, ún. kvázirészecskék rendszerének viselkedésével.

### V.1. A párkorrelációs függvény szerepe

A párkorrelációs függvény fontosságát jól mutatja, hogy abban az esetben, ha a kölcsönhatás páronként történik, a teljes potenciális energia kifejezhető a  $P(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  párkorrelációs függvény ismeretében. (A háromrészecskés, illetve magasabb rendű kölcsönhatás a legtöbb rendszerben elhanyagolható). A teljes energia így írható:

$$E = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + U. \quad (\text{V.1})$$

A kölcsönhatási energia

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \neq j)}}^N v(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j), \quad (\text{V.2})$$

ahol  $v(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$  az  $\mathbf{r}_i$  ill.  $\mathbf{r}_j$  helyen levő részecskék kölcsönhatásának potenciális energiája. Az  $1/2$  szorzó biztosítja, hogy ugyanannak a párnak a járulékát csak egyszer vegyük figyelembe. A részecskék önmagukkal történő kölcsönhatásának megfelelő tagot természetesen ki kell zárunk. Spintől függő kölcsönhatásokkal most nem foglalkozunk.  $U$  ekkor felírható a következő alakban is:

$$U = \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left( \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right) \left( \sum_{j=1}^N \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j) \right) - \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} v(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i).$$

A sűrűség operátora (II.122) szerint

$$\hat{n}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i).$$

Láttuk, hogy a kvantummechanikai leírásban  $\hat{n}(\mathbf{r})$ -nek a sűrűségoperátorral vett átlaga a rendszer sűrűsége. A klasszikus határesetben természetesen a szokásos eloszlásfüggvénnyel vett átlagot kapjuk vissza.  $\hat{n}(\mathbf{r})$ -et behelyettesítve:

$$U = \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{n}(\mathbf{r}) \hat{n}(\mathbf{r}') - \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{n}(\mathbf{r}).$$

(II.124) alapján

$$U = \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{P}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'),$$

ahol  $\hat{P}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  a párkorrelációs operátor.

Az egész rendszer adott hullámfüggvényű állapotában  $P(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \hat{P}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rangle$ , s ennek megfelelően a kölcsönhatási energia kvantummechanikai várható értéke

$$\langle U \rangle = \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') P(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (\text{V.3})$$

Ha a teljes rendszer nem írható le hullámfüggvénnyel, célszerűbb az átlagos mennyiségeket meghatározni, melyek úgy kaphatók, mint a kvantummechanikai várható értékek sokaságra vett átlagai. Az (V.3) kifejezés sokaságra vett átlagolásával megkapjuk az átlagos kölcsönhatási energiát:

$$\overline{\langle U \rangle} = \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') P(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (\text{V.3}')$$

Fölhasználtuk, hogy ebben az esetben a párkorrelációs függvény a  $\hat{P}$  operátorral így fejezhető ki:  $P(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \hat{P}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rangle$ .  $P(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  ismeretében tehát  $U$  átlaga kiszámítható. Az (V.3') kifejezés  $P$  valószínűségi jelentése alapján is értelmezhető, hiszen  $P(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  annak a valószínűsége, hogy ha egy részecske az  $\mathbf{r}$  helyen van, akkor egy másik az  $\mathbf{r}'$  helyen legyen. Az átlagos kölcsönhatási energiának ezért  $v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') P(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  integráljával kell egyenlőnek lennie, s az 1/2 tényező a kétszeres számlálás elkerülését biztosítja. Az (V.3) és (V.3') összefüggést a továbbiakban gyakran használjuk majd.

A legtöbb esetben  $v(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  csak a relatív koordináták függvénye, tehát  $v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = v(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ . Transzlációs invarianciával rendelkező rendszerben  $P$  is csak  $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ -től függ. (V.3)-ban ekkor elvégezhető az  $(\mathbf{r} + \mathbf{r}')/2$  szerinti integrálás, s  $\langle U \rangle$ , ill.  $\overline{\langle U \rangle}$  egyszerűbb alakban írható:

$$\langle U \rangle = \frac{1}{2} V \int d^3\mathbf{r} v(\mathbf{r}) P(\mathbf{r}), \quad (\text{V.4})$$

$$\overline{\langle U \rangle} = \frac{1}{2} V \int d^3\mathbf{r} v(\mathbf{r}) P(\mathbf{r}). \quad (\text{V.4}')$$

A már korábban is bevezetett

$$g(\mathbf{r}) = \frac{1}{n^2} P(\mathbf{r})$$

definíció alapján:

$$\langle U \rangle = \frac{1}{2} V \left( \frac{N}{V} \right)^2 \int d^3 \mathbf{r} v(\mathbf{r}) g(\mathbf{r}), \quad (\text{V.5})$$

$$\overline{\langle U \rangle} = \frac{1}{2} V \left( \frac{N}{V} \right)^2 \int d^3 \mathbf{r} v(\mathbf{r}) g(\mathbf{r}). \quad (\text{V.5}')$$

Határozzuk meg most klasszikus, kis sűrűségű gázra a  $g(\mathbf{r})$  függvényt. Ideális gáz esetén láttuk, hogy a klasszikus közelítés feltétele a  $\lambda_T \ll R$  egyenlőtlenség fennállása volt, ahol  $R$  a részecskék átlagos távolsága. Könnyen érthető, hogy kölcsönható rendszerekben  $\lambda_T$ -nek bármely karakterisztikus hosszúságnál jóval kisebbnek kell lennie. Ebben az esetben a potenciál hatótávolsága ( $r_0$ ) lesz az egyik karakterisztikus hosszúság, a feltétel tehát

$$\lambda_T \ll \min(r_0, R). \quad (\text{V.6})$$

Ritka gázban  $r_0 \ll R$ .

$g(\mathbf{r})$ -t most nem matematikai levezetéssel határozzuk meg, hanem a fizikai szemléletre támaszkodva. Vizsgáljuk a  $V$  térfogatú  $N$  atomból álló gáz olyan részrendszerét, melyet két kiválasztott részecske alkot.  $g(\mathbf{r})$  annak a valószínűségével arányos, hogy a két részecske távolsága  $\mathbf{r}$  legyen, s úgy normáltuk, hogy  $g(\mathbf{r}) \rightarrow 1$ , ha  $r \rightarrow \infty$ . Abban az esetben, ha  $r < r_0$ , lényeges a két részecske kölcsönhatásának energiája,  $v(\mathbf{r})$ . Ilyenkor azonban a részecskék már eléggé közel vannak, ezért ritka gázban elhanyagolható annak a valószínűsége, hogy egy harmadik részecske is az első kettő közelébe kerül. A részrendszernek a környezettel való kölcsönhatási energiája tehát elhanyagolható a saját belső energiájához képest, másrészt pedig ez is jóval kisebb, mint a hőtartály (jelen esetben a gáz többi részének) belső energiája. A részrendszerre tehát alkalmazható a kanonikus eloszlás. Az impulzusra történő átlagolás után annak valószínűsége, hogy a két részecske távolsága  $\mathbf{r}$ , arányos az

$$e^{-\beta v(\mathbf{r})}$$

kifejezéssel. Mivel e kifejezés  $r \rightarrow \infty$  esetén 1-hez tart (hiszen reális rendszerekben  $v(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ , ha  $r \rightarrow \infty$ ), ez éppen a keresett  $g(\mathbf{r})$  függvényt adja:

$$g(\mathbf{r}) = e^{-\beta v(\mathbf{r})}.$$

## V.2. Kölcsönható rendszerek termodinamikai potenciáljai

Ebben a fejezetben a kölcsönható rendszerek leírásának általános elveivel ismerkedünk meg. Először a klasszikus esetet vizsgáljuk, majd rátérünk az ezt is magába foglaló kvantummechanikai megfogalmazásra.

A klasszikus állapotösszeg ( $N$  számú nem lokalizált, egyforma részecske esetén):

$$\begin{aligned} Z \equiv e^{-\beta F} &= \frac{1}{N! h^{3N}} \int \exp \left[ -\beta \left( \sum_{i=1}^{3N} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + U \right) \right] d\mathbf{p} d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{N! h^{3N}} (2m\pi k_B T)^{3N/2} Q, \end{aligned} \quad (\text{V.7})$$

ahol

$$Q = \int e^{-\beta U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)} d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N.$$

Felhasználtuk azt a lényeges tulajdonságot, hogy az  $U$  potenciális energia független a  $\mathbf{p}$  impulzustól, ezért az  $\mathbf{r}$  és  $\mathbf{p}$  szerinti integrálok szorzattá esnek szét. Ugyanezen ok miatt a mozgási és a potenciális energia átlagai függetlenek, az egyik csak az impulzus, a másik csak a hely szerinti integrálást tartalmazza. A kinetikus energia átlaga az ekvipartíció tétele szerint  $\bar{K} = \frac{3}{2}Nk_B T$ , így

$$\bar{E} = \bar{K} + \bar{U} = \frac{3}{2}Nk_B T + \bar{U}. \quad (\text{V.8})$$

A kölcsön nem ható rendszer, tehát az ideális (egyatomos) gáz szabad energiája:

$$\ln Z^{(0)} = -\beta F^{(0)} = N \left[ \frac{3}{2} \ln k_B T + \ln \left( \frac{V}{N} \left( \frac{2m\pi}{h^2} \right)^{3/2} e \right) \right]. \quad (\text{V.9})$$

Az ettől az értéktől való eltérést kívánjuk majd meghatározni. A potenciális energia átlaga a párkorrelációs függvénnyel fejezhető ki (l. (V.5)):

$$\bar{E} = \frac{3}{2}Nk_B T + \frac{1}{2}Vn^2 \int v(\mathbf{r})g(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}, \quad (\text{V.10})$$

ahol  $n = N/V$ . Az  $n^2g(\mathbf{r})$  függvényt ebben az esetben az (II.127) és (II.130) összefüggések adják meg. Az átlagenergia képletéből az állapotegyenlet még nem kapható meg, ezért célszerű a szabad energiát meghatározni. Tudjuk, hogy

$$\bar{E} = - \left( \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right)_{V,N} = \left( \frac{\partial (\beta F)}{\partial \beta} \right)_{V,N}.$$

Integráljuk mindkét oldalt az  $\varepsilon$  és  $\beta$  határok között, s tartsunk  $\varepsilon$ -nal nullához:

$$\begin{aligned} \beta F - (\beta F)_{\beta=\varepsilon} &= \int_{\varepsilon}^{\beta} \frac{3}{2} \frac{N}{\beta'} d\beta' + \int_{\varepsilon}^{\beta} \bar{U}(\beta') d\beta' \\ &= \frac{3}{2}N \ln \beta - \frac{3}{2}N \ln \varepsilon + \int_{\varepsilon}^{\beta} \bar{U}(\beta') d\beta'. \end{aligned}$$

A  $\beta = \varepsilon \rightarrow 0$  eset nagyon magas hőmérsékletnek felel meg, s ott akármilyen kölcsönhatás elhanyagolható. Ezért  $(\beta F)_{\beta=\varepsilon}$  közelítőleg a szabad gáz megfelelő mennyiségével egyenlő:

$$-(\beta F)_{\beta=\varepsilon} = -\frac{3}{2}N \ln \varepsilon + N \ln \left[ \frac{V}{N} \left( \frac{2m\pi}{h^2} \right)^{3/2} e \right].$$

Ezt behelyettesítve az  $\ln \varepsilon$ -os tagok kiesnek, s vehetjük az  $\varepsilon \rightarrow 0$  határátmenetet:

$$\beta F = \beta F^{(0)} + \frac{1}{2} V n^2 \int_0^\beta \int v(\mathbf{r}) g_{\beta'}(\mathbf{r}) d\beta' d^3 \mathbf{r}. \quad (\text{V.11})$$

Az (V.11) egyenlet összhangban van azzal is, hogy  $v(\mathbf{r}) \equiv 0$  esetén az ideális gázra vonatkozó eredményt kell visszakapnunk.  $g(\mathbf{r})$  és  $v(\mathbf{r})$  ismeretében tehát a kölcsönható gáz szabad energiája a fenti egyenlet segítségével mindig kiszámítható.

Ritka gázban tudjuk, hogy  $g(\mathbf{r}) = e^{-\beta v(\mathbf{r})}$ , ezért ebben az esetben

$$\int_0^\beta \int v(\mathbf{r}) e^{-\beta' v(\mathbf{r})} d\beta' d^3 \mathbf{r} = - \int (e^{-\beta v(\mathbf{r})} - 1) d^3 \mathbf{r}.$$

Az

$$f(\mathbf{r}) \equiv e^{-\beta v(\mathbf{r})} - 1 = g(\mathbf{r}) - 1 \quad (\text{V.12})$$

( $f(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ , ha  $r \rightarrow \infty$ ) függvény bevezetésével:

$$\beta F = \beta F^{(0)} - \frac{1}{2} \frac{N^2}{V} \int f(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}. \quad (\text{V.13})$$

Ezek után rátérünk a kvantummechanikai leírásra. Most is azt kívánjuk meghatározni, hogy a kölcsönható rendszer termodinamikai potenciáljai ill. állapotösszegei mennyiben térnek el az ideális gázéitól.

A Hamilton-operátor a szabad részecskék  $\hat{\mathcal{H}}_0$  operátorának ( $\hat{\mathcal{H}}_0$  általában nem más, mint a kinetikus energia operátora) és a kölcsönhatási energia operátorának összege.

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{U}. \quad (\text{V.14})$$

Ez a két mennyiség azonban nem cserélhető fel!  $\overline{\langle \hat{K} \rangle}$  ezért nem egyenlő a kölcsönhatás nélküli részecskék kinetikus energiájával, s a fenti eljárás nem alkalmazható. Új módszert kell bevezetnünk. Definiáljuk a következő operátort:

$$\hat{\mathcal{H}}(\lambda) = \hat{\mathcal{H}}_0 + \lambda \hat{U}. \quad (\text{V.15})$$

A  $\lambda$  paraméter változtatásával fokozatosan "bekapcsoljuk" a kölcsönhatást: a  $\lambda = 0$  esetben  $\hat{\mathcal{H}}(0) = \hat{\mathcal{H}}_0$ , s a  $\lambda = 1$  esetben  $\hat{\mathcal{H}}(1) = \hat{\mathcal{H}}$ . Vizsgáljuk először a nagykanonikus sokasággal történő leírást:

$$\mathcal{Z} = \text{Sp} \left\{ e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}} - \mu \hat{N})} \right\}. \quad (\text{V.16})$$

Hasonló módon  $\hat{\mathcal{H}}(\lambda)$ -hoz is rendelhetünk állapotösszeget:

$$\mathcal{Z}(\lambda) = \text{Sp} \left\{ e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}}_0 + \lambda \hat{U} - \mu \hat{N})} \right\}. \quad (\text{V.17})$$

Deriváljuk  $\ln \mathcal{Z}(\lambda)$ -t  $\lambda$  szerint:

$$\frac{\partial \ln \mathcal{Z}(\lambda)}{\partial \lambda} = \text{Sp} \left\{ \frac{\partial}{\partial \lambda} e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}}_0 + \lambda \hat{U} - \mu \hat{N})} \right\} \frac{1}{\mathcal{Z}(\lambda)} = -\frac{\beta}{\mathcal{Z}(\lambda)} \text{Sp} \left\{ \hat{U} e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}}(\lambda) - \mu \hat{N})} \right\} \quad (\text{V.18}).$$

Érdemes megjegyezni, hogy a

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}}_0 + \lambda \hat{U} - \mu \hat{N})} = -\hat{U} \beta e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}}_0 + \lambda \hat{U} - \mu \hat{N})}$$

összefüggés nem igaz. Az operátorok exponenciális függvénye ugyanis a hatványsorral van definiálva, de  $\hat{\mathcal{H}}_0$  és  $\hat{U}$  nem cserélhető föl, ezért a deriváltban mindenféle sorrend előfordul, s az eredmény nem írható fel ismét exponenciális formában. A másodrendű tagban például:

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \left( -\frac{1}{2} \beta^2 (\hat{\mathcal{H}}_0 + \lambda \hat{U} - \mu \hat{N})^2 \right) = -\frac{1}{2} \beta^2 \left( \hat{U} (\hat{\mathcal{H}}(\lambda) - \mu \hat{N}) + (\hat{\mathcal{H}}(\lambda) - \mu \hat{N}) \hat{U} \right).$$

A spur képzésekor azonban az operátorok ciklikusan fölcserélhetők, s ezért az (V.18) egyenlet helyes. A jobboldal definíció szerint (l. (II.103)) a potenciális energia átlagával arányos.  $\lambda$ -val bővítve:

$$\frac{\partial \ln \mathcal{Z}(\lambda)}{\partial \lambda} = -\frac{\beta}{\lambda} \overline{\langle \lambda \hat{U} \rangle_\lambda}.$$

A bővítés azért célszerű, mert így  $\overline{\langle \lambda \hat{U} \rangle_\lambda}$  abban a rendszerben jelenti a potenciális energia átlagát, melyben a potenciális energia  $\lambda \hat{U}$ . Integráljuk mindkét oldalt 0-tól 1-ig:

$$\ln \mathcal{Z} = \ln \mathcal{Z}^{(0)} - \beta \int_0^1 \frac{\overline{\langle \lambda \hat{U} \rangle_\lambda}}{\lambda} d\lambda. \quad (\text{V.20})$$

$\Phi = -pV$ , ezért az állapotegyenlet a következő alakba írható:

$$\beta pV = \ln \mathcal{Z}^{(0)} - \beta \int_0^1 \frac{\overline{\langle \lambda \hat{U} \rangle_\lambda}}{\lambda} d\lambda, \quad (\text{V.20}')$$

ahol  $\mathcal{Z}^{(0)}$  a  $\lambda = 0$  értékhez tartozó állapotösszeg. Ez azonban nem a szabad gáz állapotösszege, ugyanis  $\mathcal{Z}^{(0)}$ -ban a kölcsönható rendszer kémiai potenciálja szerepel (l. (V.17)). Ahhoz, hogy ezt a nehézséget elkerüljük, a kémiai potenciált kell meghatározni. A számoláshoz  $g(\mathbf{r})$  konkrét alakjára is szükség lesz, ezért a levezetést csak speciális esetben, a klasszikus ritka gázok példáján mutatjuk be. Ekkor  $g(\mathbf{r}) = e^{-\beta v(\mathbf{r})}$ , s (V.5) alapján

$$\int_0^1 \frac{\overline{\langle \lambda \hat{U} \rangle_\lambda}}{\lambda} d\lambda = \frac{1}{2} \frac{\overline{N}^2}{V} \int_0^1 \int \lambda v(\mathbf{r}) e^{-\beta \lambda v(\mathbf{r})} \frac{d\lambda}{\lambda} d^3 \mathbf{r} = -\frac{1}{2\beta} \frac{\overline{N}^2}{V} \int f(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}. \quad (\text{V.21})$$

$\overline{\langle \lambda \hat{U} \rangle}_\lambda$  most a nagykanonikus sokasággal vett átlagot jelenti, de tudjuk, hogy makroszkopikus testek esetén az átlagok a sokaságtól függetlenek, s így  $\overline{\langle \lambda \hat{U} \rangle}_\lambda$  ugyanaz, mint a kanonikus sokaságban. Jogosan használjuk tehát az (V.5) összefüggést. Az állapotösszeg:

$$\ln \mathcal{Z} = \ln \mathcal{Z}^{(0)} + \frac{1}{2} \frac{\bar{N}^2}{V} \int f(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}. \quad (\text{V.22})$$

Tudjuk, hogy klasszikus ideális gázban:

$$\ln \mathcal{Z}_{id} = \sum_{\mathbf{k}} \bar{n}_{\mathbf{k}} = \bar{N} = \sum_{\mathbf{k}} e^{-\alpha_{id} - \beta \varepsilon_{\mathbf{k}}} = e^{-\alpha_{id}} \zeta = e^{-\alpha_{id}} \frac{V}{h^3} (2m\pi k_B T)^{3/2},$$

tehát

$$e^{-\alpha_{id}} \frac{V}{h^3} (2m\pi k_B T)^{3/2} = \bar{N} = \ln \mathcal{Z}_{id}.$$

$\mathcal{Z}^{(0)}$ -ban nem az ideális gáz kémiai potenciálja szerepel, hanem a kölcsönható rendszeré. Ha tehát  $\alpha_{id}$  helyébe  $\alpha$ -t írunk, akkor az valamilyen  $\bar{N}'$  értéket ad, mely nem azonos a rendszer átlagos részecskeszámával:

$$e^{-\alpha} \frac{V}{h^3} (2m\pi k_B T)^{3/2} = \bar{N}' = \ln \mathcal{Z}^{(0)}. \quad (\text{V.23})$$

Jelöljük a tényleges  $\bar{N}$ -hez tartozó  $\alpha_{id}$ -t  $\alpha_0$ -lal:

$$e^{-\alpha_0} \frac{V}{h^3} (2m\pi k_B T)^{3/2} = \bar{N}. \quad (\text{V.24})$$

$\bar{N}$  kifejezhető a  $\Phi$  potenciál deriváltjával is:

$$\bar{N} = - \left( \frac{\partial \Phi}{\partial \mu} \right)_{T,V} = - \left( \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \alpha} \right)_{T,V}.$$

(V.22) és (V.23) segítségével:

$$\bar{N} = e^{-\alpha} \frac{V}{h^3} (2m\pi k_B T)^{3/2} - \frac{\bar{N}}{V} \left( \frac{\partial \bar{N}}{\partial \alpha} \right)_{T,V} \int f(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}.$$

(III.50') szerint:

$$\left( \frac{\partial \bar{N}}{\partial \alpha} \right)_{T,V} = - \frac{\bar{N}^2}{V} \kappa_T k_B T.$$

Ritka gázban az integrált tartalmazó tag önmagában is kicsi, (hiszen  $\bar{N}/V$  kicsi), s a kölcsönhatással arányos. A kompresszibilitás kifejezése nyilván az ideális gáz kompresszibilitásával kezdődik, s ezután következnek a kölcsönhatás miatt fellépő tagok:

$$\kappa_T = \kappa_T^{(0)} + \dots$$

A kölcsönhatás elsőrendű járulékát számolva tehát elegendő  $\kappa_T$  helyett a

$$\kappa_T^{(0)} = \frac{V}{\bar{N}k_B T}$$

kifejezést beírni, amiből

$$\bar{N} = e^{-\alpha} \frac{V}{h^3} (2m\pi k_B T)^{3/2} + \frac{\bar{N}^2}{V} \int f(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}.$$

adódik.  $\bar{N}$ -nel osztva és (V.24)-et behelyettesítve:

$$e^{-\alpha+\alpha_0} = 1 - n \int f(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}. \quad (\text{V.25})$$

Ebből az  $\ln(1 - n \int f(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}) \approx -n \int f(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}$  sorfejtés alkalmazása után

$$\mu = \mu_0 - k_B T n \int f(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}. \quad (\text{V.26})$$

Meghatároztuk tehát a kémiai potenciál változását ritka, kölcsönható gázban. (V.23–24)-ből:

$$\ln Z^{(0)} = e^{-\alpha+\alpha_0} \bar{N}.$$

Ezt és (V.25)-öt (V.22)-be beírva:

$$\ln Z = \bar{N} - \frac{1}{2} \frac{\bar{N}^2}{V} \int f(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}. \quad (\text{V.27})$$

Az (V.20') állapotegyenlet tehát a következő alakba írható:

$$\frac{pV}{k_B T} = \bar{N} - \frac{1}{2} \frac{\bar{N}^2}{V} \int f(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}. \quad (\text{V.28})$$

A kémiai potenciál korrekciójából adódó nehézségek nem jelentkeznek, ha a kanonikus sokasággal számolunk. Ugyanazokat a lépéseket alkalmazva, mint (V.20) levezetésekor, azt kapjuk, hogy

$$\ln Z = \ln Z^{(0)} - \beta \int_0^1 \frac{\overline{\langle \lambda \hat{U} \rangle_\lambda}}{\lambda} d\lambda, \quad (\text{V.29})$$

azaz

$$\beta F = \beta F^{(0)} + \beta \int_0^1 \frac{\overline{\langle \lambda \hat{U} \rangle_\lambda}}{\lambda} d\lambda = \beta F^{(0)} + \frac{\beta V n^2}{2} \int_0^1 \int v(\mathbf{r}) g_\lambda(\mathbf{r}) d\lambda d^3 \mathbf{r}. \quad (\text{V.30})$$



$Z^{(0)}$  ill.  $F^{(0)}$  most valóban az ideális gázra vonatkozó mennyiségek, hiszen  $\mu$  nem szerepel bennük, s kölcsönhatás sincs. Most megmutatjuk, hogy (V.30) ekvivalens (V.11)-gyel. Konkrét példaként a klasszikus ritka gázt vesszük. Láttuk, hogy ekkor a  $\langle \lambda \hat{U} \rangle_\lambda$  kifejezhető  $f(\mathbf{r})$ -rel (l. (V.21)), tehát:

$$\beta F = \beta F^{(0)} - \frac{1}{2} \frac{N^2}{V} \int f(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}.$$

Ez megegyezik azzal, amit a klasszikus számolásakor kaptunk (l. (V.13)). Mivel  $p = -(\partial F / \partial V)_{T,N}$ , a fenti egyenletet deriválva a jobboldali első tagban az ideális gáz nyomása jelenik meg, és így

$$-\beta p = -\beta \frac{N k_B T}{V} + \frac{1}{2} \frac{N^2}{V^2} \int f(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r},$$

ami természetesen azonos az (V.28) állapotegyenlettel. Itt felhasználtuk, hogy  $\int f(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}$  független  $V$ -től.

Általános formuláinkat a továbbiakban konkrét rendszerek tulajdonságainak meghatározására használjuk.

### V.3. Van der Waals-gáz

A klasszikus ritka gáz állapotegyenletét az előző fejezetben meghatároztuk:

$$\frac{p}{k_B T} = n - \frac{n^2}{2} \int f(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}. \quad (\text{V.31})$$

Az eredmény tulajdonképpen  $n$ -ben haladó sorfejtés. A magasabb rendű tagokkal így lehetne folytatni:

$$\frac{p}{k_B T} = B_1(T)n + B_2(T)n^2 + B_3(T)n^3 + \dots$$

Ez az ún. viriál-sorfejtés. Ritka gázban elegendő az első korrekcióig elmenni. (V.31)-ből leolvasható, hogy

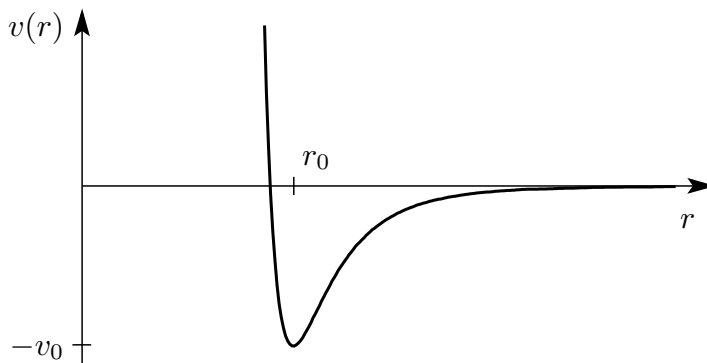
$$B_1(T) \equiv 1,$$

$$B_2(T) = -\frac{1}{2} \int f(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} = -2\pi \int_0^\infty f(r) r^2 dr. \quad (\text{V.32})$$

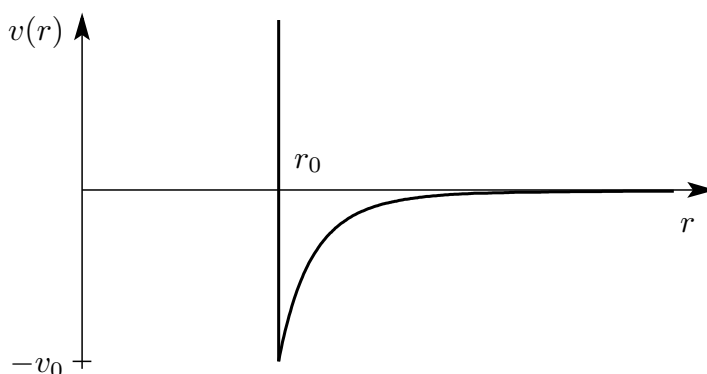
Az utolsó átalakításnál felhasználtuk, hogy  $v(\mathbf{r})$  általában csak a távolság abszolút értékétől függ. Az egyatomos részecskék kölcsönhatását jó közelítéssel az ún. Lennard–Jones-potenciál írja le:

$$v(\mathbf{r}) = v_0 \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right]. \quad (\text{V.33})$$

$v_0$  és  $r_0$  az anyagtól függő állandók, de a függvény típusa minden gázra ilyen. A Lennard–Jones-potenciál a kvantummechanika segítségével számolható ki: a nagy távolságban fellépő gyenge vonzás az atomi polarizáció hatására bekövetkező Van der Waals-erőknek, a kis távolságokban megmutatkozó erős taszítás pedig a Pauli-elvnek a következménye. Grafikusan:



A potenciál az  $r < r_0$  esetben nagyon nagy, ezért jó közelítése a következő :



$v(r)$  két potenciál összegének tekinthető:

$$v(r) = v^{MG} + v_1(r), \quad (\text{V.34})$$

ahol

$$v^{MG} = \begin{cases} \infty, & \text{ha } r < r_0 ; \\ 0, & \text{ha } r > r_0, \end{cases}$$

$$v_1(r) = \begin{cases} 0, & \text{ha } r < r_0 ; \\ -v_0 \left(\frac{r_0}{r}\right)^s, & \text{ha } r > r_0. \end{cases}$$

A  $v^{MG}$  potenciál az  $r_0$  sugarú merev gömbökből álló rendszer kölcsönhatási potenciálja, a  $v_1$  potenciál pedig gyenge vonzást jelent. Az (V.33) képletnek az  $s = 6$  választás felel meg. Az (V.34) potenciállal a második viriál-együttható

$$B_2(T) = 2\pi \int_0^{r_0} r^2 dr - 2\pi \int_{r_0}^{\infty} \left( e^{-\beta v_1(r)} - 1 \right) r^2 dr$$

alakú. Mivel alacsony hőmérsékletektől eltekintve  $\beta v_0 \ll 1$ , ezért a második tagban az exponenciális függvény sorbafejthető, s

$$\begin{aligned} B_2(T) &= 2\pi \int_0^{r_0} r^2 dr + 2\pi\beta v_0 \int_{r_0}^{\infty} \left(\frac{r_0}{r}\right)^s r^2 dr \\ &= \frac{2\pi}{3} r_0^3 \left(1 - \frac{3}{s-3} \frac{v_0}{k_B T}\right) \equiv b' - \frac{a'}{k_B T}. \end{aligned} \quad (\text{V.35})$$

A  $b'$  és  $a'$  paraméterek az anyagi minőségre jellemző, de a hőmérséklettől független mennyiségek:

$$b' = \frac{2\pi}{3} r_0^3; \quad a' = \frac{3}{s-3} b' v_0 = -\frac{1}{2} \bar{v}_1, \quad (\text{V.36})$$

ahol

$$\bar{v}_1 \equiv \int v_1(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}.$$

$\bar{v}_1$  a  $v_1(r)$  potenciál

$$\frac{N^2}{V} \int v_1(\mathbf{r}) g(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}$$

átlagértékével arányos, hiszen  $\beta v_0 \ll 1$ , s így  $g(r) \approx 1$ . Az állapotegyenlet tehát

$$\frac{p}{k_B T} = n + \left(b' - \frac{a'}{k_B T}\right) n^2,$$

azaz

$$p + a' n^2 = n k_B T (1 + b' n). \quad (\text{V.37})$$

Nagy sűrűségek esetén levezetésünk már nem érvényes. A gyenge  $v_1$  potenciál miatt a baloldal továbbra is változatlan marad, továbbra is  $a' n^2$  jelenik meg, a jobboldal azonban változik. Levezetés nélkül közöljük, hogy a nagy sűrűségekre is érvényes állapotegyenlet:

$$\left(p + a' \frac{N^2}{V^2}\right) = \frac{N k_B T}{V - b' N}. \quad (\text{V.38})$$

Ez a Van der Waals-egyenlet. Kis sűrűségekre, vagyis a  $b' n \ll 1$  határesetben természetesen visszakapjuk az (V.37) eredményt. Vezessük be az 1 mol anyagra jellemző mennyiségeket. Jelölje  $\nu$  a molok számát,  $\vartheta$  1 mol anyag térfogatát és  $L$  a Loschmidt-számot. Így

$$\vartheta = \frac{V}{\nu}, \quad n = \frac{N}{V} = \frac{\nu L}{V} = \frac{L}{\vartheta},$$

és az állapotegyenlet:

$$\left(p + \frac{a}{\vartheta^2}\right) (\vartheta - b) = RT, \quad (\text{V.39})$$

ahol

$$R = k_B L, \quad a = L^2 a', \quad b = L b'.$$

A továbbiakban a Van der Waals-állapotegyenlet egy érdekes tulajdonságával foglalkozunk. A kompresszibilitást határozzuk meg. Az (V.38) egyenletből:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T = 2a' \frac{N^2}{V^3} - \frac{Nk_B T}{V^2(1-nb')^2}.$$

Ezzel

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T = \frac{1}{\frac{nk_B T}{(1-nb')^2} - 2a'n^2}. \quad (\text{V.40})$$

Jelentse  $\kappa_T^{MG}$  a merev gömbökből álló gáz kompresszibilitását. Ekkor  $\bar{v}_1 = 0$ , tehát  $a' = 0$  és

$$\kappa_T^{MG} = \frac{1}{\frac{nk_B T}{(1-nb')^2}}. \quad (\text{V.41})$$

Behelyettesítve:

$$\kappa_T = \frac{1}{(\kappa_T^{MG})^{-1} - 2n^2 a'} = \kappa_T^{MG} \frac{1}{1 + \bar{v}_1 n^2 \kappa_T^{MG}}. \quad (\text{V.42})$$

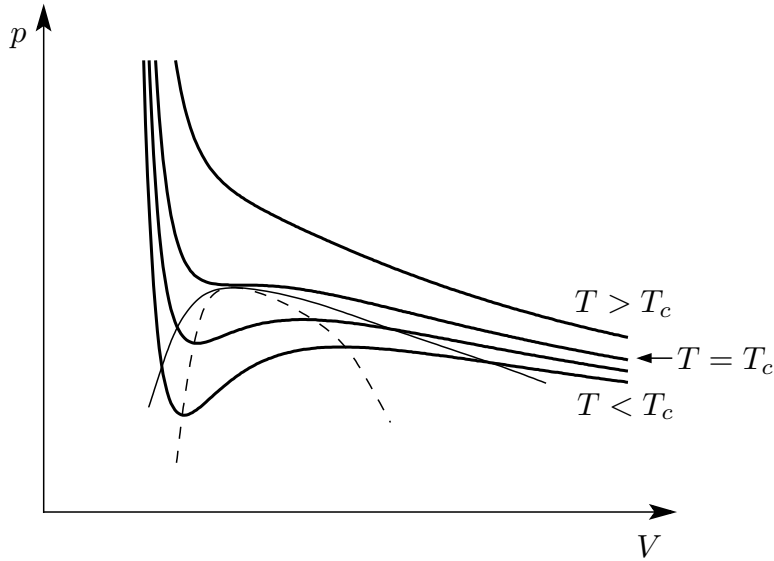
Ezzel a fölírással különválasztottuk a merev gömböktől és a vonzó résztől származó hatást. Érdekes megjegyezni, hogy a hőmérsékletfüggés egyszerűen felírható, hiszen

$$\kappa_T^{MG} = \frac{K(n)}{k_B T}; \quad \kappa_T = \kappa_T^{MG} \frac{1}{1 + \bar{v}_1 \frac{n^2 K(n)}{k_B T}}, \quad (\text{V.43})$$

ahol  $K(n)$  csak a sűrűségtől függ:

$$K(n) = \frac{(1-nb')^2}{n}.$$

Az izotermák:



A szélsőérték-pontokhoz tartozó  $\kappa_T$  végtelen, tehát az (V.43) kifejezés nevezője ott zérus:

$$1 + \bar{v}_1 \frac{n^2 K(n)}{k_B T} = 0.$$

Jelentse  $T_M(n)$  az  $n$  sűrűségű és maximális ill. minimális nyomású állapotok hőmérsékletét.  $K(n)$ -t behelyettesítve:

$$k_B T_M = 2a'n(1 - b'n)^2,$$

és

$$\kappa_T = \kappa_T^{MG} \frac{1}{1 - \frac{T_M(n)}{T}} \propto (T - T_M)^{-1} \quad (T > T_M).$$

Az eddigiekben végig feltételeztük, hogy a rendszer homogén. Ennek megfelelően  $\kappa_T$ -nek pozitívnak kell lennie. Az ábráról leolvasható, hogy ez a  $T > T_M$  hőmérsékletekre teljesül, s így a fenti kifejezésben szükséges a  $T > T_M$  megszorítás. Érdeemes megjegyezni, hogy  $\kappa_T^{MG}$  sehol sem lehet végtelen, mert ebben az esetben  $\bar{v}_1 = 0$ . A kompresszibilitás divergálását tehát a vonzó kölcsönhatás okozza.

Az ábráról leolvasható, hogy a  $T_c$  kritikus hőmérséklet a  $T_M(n)$  hőmérsékletek maximuma.  $T_M(n)$   $n$  szerinti deriválásával a maximumhoz tartozó  $n_c$  érték:

$$n_c = \frac{1}{3b'},$$

a kritikus hőmérséklet pedig:

$$T_c = \frac{8a'}{27b'}.$$

A kritikus  $n_c$  sűrűségnél a kompresszibilitás:

$$\kappa_T = \kappa_T^{MG} \frac{1}{1 - \frac{T_c}{T}} \propto (T - T_c)^{-1} \quad (T > T_c).$$

A kritikus  $T_c$  és  $n_c$  értéknél a rendszer másodrendű fázisátalakuláson megy keresztül, a kompresszibilitás divergál. A különböző fizikai mennyiségek divergenciájának jellemzésére kritikus exponenseket szokás bevezetni. Ezek azt mutatják meg, hogy az illető mennyiség  $|T - T_c|$  milyen hatványával tart végtelenhez a kritikus pontban. A kompresszibilitást jellemző  $\gamma$  exponens definíciója:

$$\kappa_T \propto (T - T_c)^{-\gamma}.$$

Azt látjuk tehát, hogy minden Van der Waals-gázra  $\gamma = 1$ , az anyagi minőségtől függetlenül. Ennél is érdekesebb azonban, hogy a mágnesesség Weiss-féle molekuláris-tér elméletében a kompresszibilitással analóg szuszceptibilitás ugyanúgy a  $\gamma = 1$  exponenssel divergál, s ez is független az anyagi minőségtől. A mérések szerint a kritikus exponensek a  $\gamma \approx 4/3$  értéket veszik fel, de az univerzális viselkedést a kísérletek is

alátámasztják, mert  $\gamma$  értéke minden gázra és bizonyos fajta mágnesekre is ugyanaz. Ezen tény magyarázatát a másodrendű fázisátalakulások modern elmélete adja meg.

A  $T_M \neq T_c$  pontok a metastabil és instabil tartományok határpontjai, ezek termodinamikai egyensúlyban nem valósulnak meg.  $T < T_c$  esetén elsőrendű fázisátalakulás történik.

Visszatérünk a viriál-sorfejtésre, és megvizsgáljuk a kvantumeffektusok által okozott korrekciókat. Láttuk, hogy már ideális gázban is  $n^2$ -tel arányos az állapotegyenlet első kvantumkorrekciója:

$$\frac{p}{k_B T} = n \pm \frac{1}{2^{5/2} \pi^{3/2} g} \frac{\lambda_T^3}{R^3} n + \dots,$$

ahol  $R^3 \equiv 1/n$ . A felső előjel vonatkozik a fermionokra, az alsó a bozonokra. Ezt az eltérést a statisztika okozza, hiszen tudjuk, hogy a Pauli-elv fermionok esetén effektív taszításnak, bozonok esetén effektív vonzásnak felel meg. Az ebből adódó második viriál-együttható tehát

$$B_2^{\text{stat}}(T) = \pm \frac{1}{2^{5/2} \pi^{3/2} g} \lambda_T^3. \quad (\text{V.44})$$

Az (V.30) képlet segítségével a kölcsönhatásból adódó járulék is kiértékelhető. Az első kvantumkorrekció hosszas számolás után:

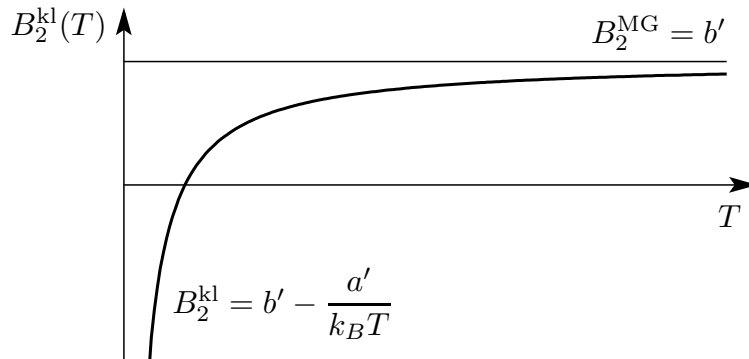
$$B_2^{\text{kölcs}}(T) = \frac{\pi \hbar^2}{6m(k_B T)^3} \int_0^\infty \left( \frac{dv}{dr} \right)^2 e^{-v(r)/k_B T} r^2 dr, \quad (\text{V.45})$$

mindkét statisztikára azonos előjelű. A teljes második viriál-együttható:

$$B_2(T) = B_2^{\text{kl}}(T) + B_2^{\text{stat}}(T) + B_2^{\text{kölcs}}(T).$$

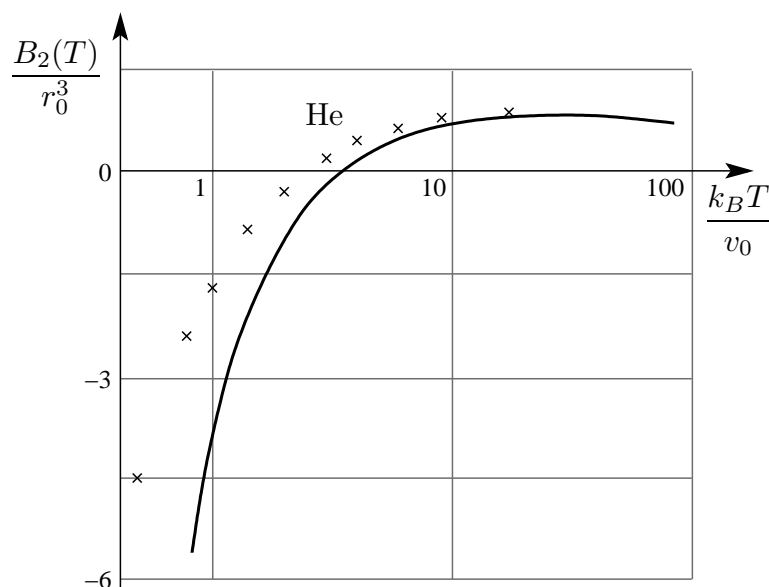
Kis távolságokra a  $v(\mathbf{r})$  potenciálból származó erő biztosan nagy, ezért mindaddig, amíg a hőmérséklet elég magas, a  $B_2^{\text{kölcs}}$ -ben fellépő integrál sem lehet kicsi.  $B_2^{\text{kölcs}}$   $h^2$ -tel arányos, ezzel szemben  $B_2^{\text{stat}}$   $h^3$ -bel, tehát  $B_2^{\text{stat}} \ll B_2^{\text{kölcs}}$ , s a jelentős korrekció (V.45) lesz. Alacsony hőmérsékleten fordított a helyzet, ott a statisztikából adódó járulék dominál. Az ideális gázok esetén is láttuk, hogy alacsony hőmérsékleten a statisztika milyen jelentős változásokat okoz.

A viriál-együttható hőmérséklet függése a  $v(r) = v^{MG} + v_1(r)$  potenciál esetén:



Alacsony hőmérsékleten a kinetikus energia kicsi, a részecskék főleg olyan távolságokban tartózkodnak, ahol  $v_1(r)$  érvényesül, s az így kialakuló átlagosan vonzó kölcsönhatás a nyomás csökkenését okozza:  $B_2 < 0$ . Magas hőmérsékleten az ütközések száma nagy, ezért  $B_2^{\text{kl}}$  a merev gömbök viriál-együtthatójához,  $b'$ -höz tart.

A tényleges Lennard–Jones-potenciállal klasszikusan a következő görbét (folytonos vonal) kapnánk:



A magas hőmérsékleten tapasztalható csökkenés annak tulajdonítható, hogy a nagy kinetikus energia következtében a részecskék a taszító térrészbe is bekerülnek, így csökken a taszítás hatékonysága. A He kivételével az összes nemes gáz jól követi a folytonos görbének megfelelő viselkedést. A He-ra mért adatok a kereszttel jelölt pontoknak felelnek meg. A He tehát nem  $B_2^{\text{kl}}$ -t adja, ami érthető is, hiszen a tömege a legkisebb a nemesgázok között, s  $B_2^{\text{kölcs}}$   $1/m$ -mel arányos, vagyis erre a nemes gázra a legerősebb a kvantumkorrekció. A mért értékek (V.45)-tel teljes összhangban vannak.

#### V.4. A plazma: töltött részecskék állapotegyenlete

Második példánk a teljesen ionizált gáz lesz. Elég magas hőmérsékleten a gázok úgy tekinthetők, mint egyforma, pozitív töltésű, nagy tömegű ionok és kis tömegű negatív elektronok együttesen semleges rendszerei. A könnyű elektronok mozgása nyilván sokkal gyorsabb, mint az ionoké, ezért első közelítésben az ionokat rögzítettnek, sőt egyenletes pozitív háttérként elosztottnak tekinthetjük. Ebben a homogén töltéssűrűségű, dinamika nélküli háttérben mozognak az elektronok. Magas hőmérsékleten jogos a klasszikus közelítés használata. (A fémek ionjai és vezetési elektronjai is hasonló plazmát alkotnak, de ott erősen degenerált elektrongázzal van szó!)

Az alapvető problémát a Coulomb-potenciál jelenléte okozza, ez ugyanis hosszú hatótávolságú, s ezért a ritka gázokra levezetett összefüggések nem alkalmazhatók. Könnyen érthető azonban, hogy az elektronok eredőként olyan effektív potenciált

éreznek, mely már rövid hatótávolságú: egy kiszemelt elektron körül ugyanis a többi negatív részecske a taszítás miatt eltávolodik, s így az átlagoshoz képest negatív töltéshiány, tehát pozitív többlettöltés jelentkezik, mely az eredeti elektron hatását leárnnyékolja, s végülis a Coulomb-potenciálnál sokkal gyengébb kölcsönhatás lép föl. A számításokban alapvető párkorrelációs függvényt majd ezen effektív kölcsönhatás figyelembevételével kell meghatározni.

Az árnyékolás tanulmányozására vizsgáljuk először azt az esetet, amikor a rendszerbe  $-Ze$  töltésű külső részecskét viszünk be. Legyen  $n_0 \equiv N/V$  az elektronok eredeti részecske-sűrűsége. Ekkor  $-n_0e$  a töltéssűrűségük, a háttéré pedig  $n_0e$ . A  $-Ze$  töltés és egy elektron között a  $\varphi(\mathbf{r}) = Ze^2/r$  potenciális energia alakul ki. A háttér merev, ezért  $\varphi$  hatására sem változik meg. Messziről nézve az elektron nemcsak  $\varphi$ -t "érzékel", hanem az elektronsűrűség módosulásából adódó potenciális energiát is. Az eredő effektív kölcsönhatási energia tehát:

$$\varphi_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) + \int v(\mathbf{r} - \mathbf{r}')(\bar{n}(\mathbf{r}') - n_0)d^3\mathbf{r}', \quad (\text{V.46})$$

ahol  $v(\mathbf{r}) = e^2/r$  két elektron kölcsönhatási energiája,  $\bar{n}(\mathbf{r})$  pedig az újonnan kialakult sűrűségeloszlás.

Ezután rátérünk  $\bar{n}(\mathbf{r})$  meghatározására. Ehhez a válaszfüggvénnyel kapcsolatos ismereteinket használjuk föl. A teljes rendszer Hamilton-függvénye (l. (II.132)):

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H} + \int (n(\mathbf{r}) - n_0)\varphi(\mathbf{r})d^3\mathbf{r},$$

ahol  $n(\mathbf{r})$  az elektronok sűrűsége. A második tag azt fejezi ki, hogy a külső potenciál nemcsak az  $n(\mathbf{r})$  sűrűségű elektronokra, hanem az  $n_0$  sűrűségű pozitív háttérre is hat. A nagyon kis távolságoktól eltekintve  $\varphi(\mathbf{r})$  csak kis értékeket vesz föl, így megfelel az általános formalizmusban szereplő külső tér változásának,  $\delta h$ -nak. Ezek szerint az  $r \gg R$  esetben ( $R$  az elektronok átlagos távolsága), (II.133) alapján az átlagos sűrűség megváltozása:

$$\delta\bar{n}(\mathbf{r}) = \int \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\varphi(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}'.$$

A sűrűségnek  $\mathcal{H}$ -val képzett várható értéke, vagyis a külső potenciál nélküli plazma sűrűsége szintén  $n_0$ , ezért  $\delta\bar{n}(\mathbf{r}) = \bar{n}(\mathbf{r}) - n_0$ . A fenti képletben szereplő  $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  a kölcsönható elektrongáz válaszfüggvénye, s ezt nem ismerjük. Tudjuk azonban, hogy az elektronok és a külső tér kölcsönhatása úgy nyilvánul meg, mintha a részecskék  $\varphi_{\text{eff}}(\mathbf{r})$  külső potenciáltérben mozognának, de ekkor már közelítőleg szabad részecskéként, hiszen kölcsönhatásukat a kívánt közelítésben (V.46) második tagja már figyelembe vette. Az egész rendszer közelítőleg  $\varphi_{\text{eff}}(\mathbf{r})$  külső potenciáltérbe helyezett ideális gázként kezelhető, s ennek megfelelően a teljes Hamilton-függvény nyilván áttranszformálható a következő alakra:

$$\mathcal{H}' \approx \mathcal{H}_0 + \int (n(\mathbf{r}) - n_0)\varphi_{\text{eff}}(\mathbf{r})d^3\mathbf{r},$$



ahol  $\mathcal{H}_0$  a klasszikus ideális gáz Hamilton-függvénye. Mivel most  $\varphi_{\text{eff}}$  felel meg  $\delta h$ -nak (szintén csak az  $r \gg R$  esetben), és  $n(r)$ -nek  $\mathcal{H}_0$ -lal képzett átlaga szintén  $n_0$ ,

$$\bar{n}(\mathbf{r}) - n_0 = \int \tilde{\chi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_{\text{eff}}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}',$$

ahol  $\tilde{\chi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  már az ideális gáz válaszfüggvénye. (II.140) alapján:

$$\tilde{\chi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{k_B T} C_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{k_B T} [P(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \bar{n}_0(\mathbf{r})\bar{n}_0(\mathbf{r}') + \bar{n}_0(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')].$$

$C_n(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ , ill.  $P(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  most a  $\mathcal{H}_0$  függvénnyel leírt rendszerre, vagyis a külső tér nélküli klasszikus ideális gázra jellemző mennyiségek. A részecskék teljesen függetlenek, s ennek megfelelően annak a valószínűsége, hogy két részecske egymástól  $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$  távolságban legyen, független  $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ -től. Ez azt jelenti, hogy a párkorrelációs függvény állandó. A normált alak nyilván:

$$P(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = n_0^2.$$

Ezt behelyettesítve:

$$\tilde{\chi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{n_0}{k_B T} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Mindezeket felhasználva:

$$\bar{n}(\mathbf{r}) - n_0 = -\frac{n_0}{k_B T} \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \varphi_{\text{eff}}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' = -\frac{n_0}{k_B T} \varphi_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \quad (r \gg R),$$

vagyis:

$$\bar{n}(\mathbf{r}) = n_0 \left( 1 - \frac{\varphi_{\text{eff}}(\mathbf{r})}{k_B T} \right) \quad (r \gg R). \quad (\text{V.47})$$

Az (V.46–47) egyenletek együttesen határozzák meg a keresett  $\bar{n}(\mathbf{r})$  értéket és az effektív potenciált. Behelyettesítés után:

$$\varphi_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) - \frac{n_0}{k_B T} \int v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \varphi_{\text{eff}}(\mathbf{r}') d^3 r'. \quad (\text{V.48})$$

Definiáljuk tetszőleges  $h(\mathbf{r})$  függvény Fourier-transzformáltját a következőképpen:

$$h(\mathbf{k}) \equiv \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} h(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}.$$

(V.48) mindkét oldalát transzformálva, s kihasználva a konvolúcióra vonatkozó szorzási szabályt:

$$\varphi_{\text{eff}}(\mathbf{k}) = \varphi(\mathbf{k}) - \frac{n_0}{k_B T} v(\mathbf{k}) \varphi_{\text{eff}}(\mathbf{k}),$$

amiből az effektív potenciál:

$$\varphi_{\text{eff}}(\mathbf{k}) = \frac{\varphi(\mathbf{k})}{1 + \frac{n_0}{k_B T} v(\mathbf{k})}. \quad (\text{V.49})$$

Határozzuk most meg a

$$v(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{r} e^{-\kappa r}$$

Yukawa-típusú potenciális energia Fourier-transzformáltját! A  $\kappa = 0$  eset jelenti a Coulomb-kölcsönhatást.

$$\begin{aligned} v(\mathbf{k}) &= e^2 \int_0^\infty \int_0^\pi \frac{e^{-\kappa r}}{r} e^{-i k r \cos \vartheta} d(-\cos \vartheta) 2\pi r^2 dr = \frac{4\pi e^2}{k} \int_0^\infty e^{-\kappa r} \sin(kr) dr \\ &= \frac{4\pi e^2}{k} \int_0^\infty \text{Im} \left\{ e^{-(\kappa - ik)r} \right\} dr = \frac{4\pi e^2}{k} \text{Im} \left\{ \frac{1}{\kappa - ik} \right\} = \frac{4\pi e^2}{k^2 + \kappa^2}. \end{aligned} \quad (\text{V.50})$$

Coulomb-potenciálra tehát

$$v(\mathbf{k}) = \frac{4\pi e^2}{k^2}, \quad \varphi(\mathbf{k}) = \frac{4\pi \mathcal{Z} e^2}{k^2}.$$

Ezt (V.49)-be helyettesítve

$$\varphi_{\text{eff}}(\mathbf{k}) = \frac{4\pi \mathcal{Z} e^2}{k^2 + \kappa^2}, \quad \kappa^2 = \frac{4\pi e^2 n_0}{k_B T}. \quad (\text{V.51})$$

(V.50) segítségével leolvasható, hogy az effektív kölcsönhatás

$$\varphi_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \frac{\mathcal{Z} e^2}{r} e^{-\kappa r} \quad (r \gg R)$$

alakú lesz. Az árnyékolás miatt tehát a külső Coulomb-potenciál Yukawa-típusúba megy át. Az  $r_D = 1/\kappa$  ún. Debye-féle árnyékolási hosszon kívül  $\varphi_{\text{eff}}(\mathbf{r})$  gyakorlatilag zérus,  $r_D$  a potenciál hatótávolsága.  $g(\mathbf{r})$  szemléletes jelentése az, hogy ha egy részecskét rögzítünk, akkor valamelyik másik részecske  $g(\mathbf{r})$  valószínűséggel lesz attól  $\mathbf{r}$  távolságra. Ez a valószínűség másképpen kifejezve éppen  $\bar{n}(\mathbf{r})/n_0$ . Így a  $\varphi_{\text{eff}}(\mathbf{r})$  külső potenciáltérbe helyezett ideális gáz párkorrelációs függvénye

$$g(\mathbf{r}) = 1 - \frac{\varphi_{\text{eff}}(r)}{k_B T} = 1 - \frac{\mathcal{Z} e^2}{k_B T} \frac{e^{-\kappa r}}{r} \quad (r \gg R).$$

Képzeljük el most azt, hogy a kérdéses teret nem mesterségesen vesszük be, hanem az egyik kiszemelt elektron hozza létre. Ebben az esetben természetesen  $\mathcal{Z} = 1$ . A párkorrelációs függvény tehát

$$g(\mathbf{r}) = 1 - \frac{e^2}{k_B T} \frac{e^{-\kappa r}}{r} \quad (r \gg R).$$

Az elektronok kölcsönhatási energiája:

$$U_{\text{el-el}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \equiv \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N v(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|),$$

$$\begin{aligned} \bar{U}_{\text{el-el}} &= \frac{N^2}{2V} \int v(\mathbf{r})g(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \frac{N^2}{2V} \int v(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} - \frac{N^2 e^2}{2Vk_B T} \int_0^\infty \frac{e^{-\kappa r}}{r^2} 4\pi r^2 dr \\ &= \frac{N^2}{2V} \int v(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} - \frac{N^{3/2}}{V^{1/2}} \left( \frac{\pi}{k_B T} \right)^{1/2} e^3. \end{aligned}$$

Itt felhasználtuk  $\kappa$  konkrét alakját, (V.51)-et. Az első tag divergens, hiszen  $\int (1/r)d^3\mathbf{r} = \infty$ . A teljes kölcsönhatási energia meghatározásához figyelembe kell venni a háttér-háttér kölcsönhatást, amit a

$$\bar{U}_{\text{h-h}} = \frac{N^2}{2V} \int v(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}$$

kifejezés ad meg, és az elektron-háttér járulékot, amit a

$$\bar{U}_{\text{el-h}} = N \left( -\frac{N}{V} \int v(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \right)$$

kifejezés ad meg. (A zárójelben lévő kifejezés egy elektron és a háttér potenciális energiája.) A teljes energiában tehát a divergens tagok kiesnek. Ezek egyenkénti fellépése azt fejezi ki, hogy töltött rendszerben nincs egyensúlyi eloszlás. A háttér szerepe tehát elsősorban az, hogy a semlegességet biztosítsa. A teljes kölcsönhatási energiára végül

$$\bar{U} = -\frac{N^{3/2}}{V^{1/2}} \left( \frac{\pi}{k_B T} \right)^{1/2} e^3$$

adódik.

Az állapotegyenlet kiszámításához használjuk most (V.29)-et. Helyettesítsük az  $e$  töltést formálisan az  $\tilde{e}$  változóval, és tekintsük  $\lambda$ -nak  $\tilde{e}^2$ -et. Ezt megtehetjük, hiszen  $\tilde{e} = 0$  esetén a szabad gázt kapjuk, az  $\tilde{e} = e$  helyen pedig a teljes  $\bar{U}$ -t. Ily módon

$$\begin{aligned} \ln Z &= \ln Z^{(0)} + \beta \int_0^{e^2} \frac{d\tilde{e}^2}{\tilde{e}^2} \left( \frac{N^{3/2}}{V^{1/2}} \left( \frac{\pi}{k_B T} \right)^{1/2} \tilde{e}^3 \right) \\ &= \ln Z^{(0)} + \frac{2}{3} \beta \frac{N^{3/2}}{V^{1/2}} \left( \frac{\pi}{k_B T} \right)^{1/2} e^3. \end{aligned}$$

Ebből

$$\begin{aligned} p &= k_B T \left( \frac{\partial \ln Z}{\partial V} \right)_{\beta, N} = \frac{Nk_B T}{V} \left[ 1 - \frac{1}{3} \left( \frac{N\pi}{V} \right)^{1/2} \left( \frac{e^2}{k_B T} \right)^{3/2} \right] \\ &= \frac{Nk_B T}{V} \left[ 1 - \frac{1}{18} \left( \frac{4\pi r_D^3 N}{3V} \right)^{-1} \right]. \end{aligned}$$

A levezetés során alkalmazott közelítésben a második tag kicsi. Most leolvasható, hogy ez akkor teljesül, ha

$$r_D \gg \left(\frac{V}{N}\right)^{1/3}, \quad \text{vagyis} \quad \frac{k_B T}{4\pi e^2} \gg \left(\frac{N}{V}\right)^{1/3},$$

ami azt jelenti, hogy sok részecskének kell lennie az  $r_D$  távolságon belül. Meglepő, de ez tényleg kis sűrűségekre teljesül, ugyanis  $\kappa^2 \propto n_0$ , tehát  $r_D$  kis sűrűség esetében lesz nagyon nagy. (A kvantummechanikai határesettel nem foglalkoztunk, de megemlítjük, hogy ott éppen fordított a helyzet: nagy sűrűség esetén lesz sok részecske az árnyékolási hosszban belül.) A levezetés tehát fölhasználja az  $r_D \gg R$  feltételt, ami azt jelenti, hogy a plazma egyáltalán nem tekinthető ritka gáznak.

Eredményeinket általánosíthatjuk arra az esetre, amikor nem egykomponensű a rendszer, hanem például  $l$  számú, különböző  $Z_i e$  töltésű ionizált részecskéből áll. A háttér ilyenkor már nem lényeges, hiszen csak a semlegességet biztosította, de ismét ki kell kötnünk, hogy az egész rendszer semleges legyen, vagyis:

$$\sum_{i=1}^l N_i Z_i = 0.$$

Az állapotegyenlet ekkor így módosul:

$$p = \frac{k_B T}{V} \sum_{i=1}^l N_i - \frac{e^3}{3V^{3/2}} \left(\frac{\pi}{k_B T}\right)^{1/2} \left(\sum_{i=1}^l N_i Z_i^2\right)^{3/2}.$$

Ez az összefüggés az alapja az elektrolitek Debye–Hückel-elméletének.

## V.5. Gyengén kölcsönható Fermi-gáz, a Hartree–Fock-közelítés

Az eddig megvizsgált klasszikus példa után rátérünk a kvantummechanikai kölcsönható rendszerek tárgyalására. Elsőként a gyengén kölcsönható homogén Fermi-gázt tanulmányozzuk. Ebben az esetben a  $v(\mathbf{r})$  potenciál kicsi, tehát elég  $v(\mathbf{r})$ -ben első rendig számolni. Ez azt jelenti, hogy (V.4)-ben, ill. (V.4')-ben  $P(\mathbf{r})$  helyett az ideális gáz  $P_0(\mathbf{r})$  párkorrelációs függvényét írhatjuk. Adott hullámfüggvényű állapotban (V.4) határozza meg a kölcsönhatási energia kvantummechanikai várható értékét:

$$\langle U \rangle = \frac{V}{2} \int v(\mathbf{r}) P_0(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} = \frac{V}{2} \sum_{s_1, s_2} \int v(\mathbf{r}) P_0(\mathbf{r}, s_1, s_2) d^3 \mathbf{r}, \quad (\text{V.52})$$

ahol most kiírtuk a spinállapotokra történő összegezést is. Ahhoz, hogy a fenti kifejezést kiértékelhessük, érdemes áttérni  $v(\mathbf{r})$  és  $P(\mathbf{r})$  Fourier-előállítására:

$$\begin{aligned} v(\mathbf{r}) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} v(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}, \\ P_0(\mathbf{r}, s_1, s_2) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} P_0(\mathbf{q}, s_1, s_2) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (\text{V.53})$$

Felhasználva az

$$\frac{1}{V} \int e^{i(\mathbf{p}+\mathbf{q})\mathbf{r}} d^3\mathbf{r} = \delta_{\mathbf{p},-\mathbf{q}}$$

összefüggést:

$$\langle U \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, s_1, s_2} v(\mathbf{q}) P_0(\mathbf{q}, s_1, s_2).$$

Másrészt viszont az ideális gázok párkorrelációs függvényének tárgyalásakor (IV.12 fejezet) láttuk, hogy

$$P_0(\mathbf{r}, s_1, s_2) = n(s_1)n(s_2) - |\rho_1(\mathbf{r}, s_1, s_2)|^2 = n(s_1)n(s_2) - \left| \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p},s} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \right|^2 \delta_{s_1, s_2},$$

ahol

$$n(s) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p},s}.$$

A párkorrelációs függvény Fourier-transzformáltja

$$\begin{aligned} P_0(\mathbf{q}, s_1, s_2) &= \int P_0(\mathbf{r}, s_1, s_2) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3\mathbf{r} \\ &= Vn(s_1)n(s_2)\delta_{\mathbf{q},0} - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p},s_1} n_{\mathbf{q}-\mathbf{p},s_2} \delta_{s_1, s_2} \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} n_{\mathbf{p},s_1} n_{\mathbf{p}',s_2} \delta_{\mathbf{q},0} - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p},s_1} n_{\mathbf{p}-\mathbf{q},s_2} \delta_{s_1, s_2}. \end{aligned}$$

Itt alkalmaztuk az  $n_{\mathbf{q}-\mathbf{p},s} = n_{\mathbf{p}-\mathbf{q},s}$  egyenlőséget. A potenciális energia átlaga ezután így írható:

$$\langle U \rangle = \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{p}' \\ s, s'}} [v(\mathbf{q}=0) - v(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\delta_{s, s'}] n_{\mathbf{p},s} n_{\mathbf{p}',s'}.$$

Vezessük be az  $u_{\mathbf{p},s}$  mennyiséget az alábbi definícióval:

$$\langle U \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}, s} u_{\mathbf{p},s} n_{\mathbf{p},s}, \quad (\text{V.54})$$

$$u_{\mathbf{p},s} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}', s'} [v(\mathbf{q}=0) - v(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\delta_{s, s'}] n_{\mathbf{p}',s'}. \quad (\text{V.55})$$

E kifejezések szerint  $u_{\mathbf{p},s}$  a  $\mathbf{p}$  impulzusú  $s$  spinű részecske kölcsönhatásból adódó potenciális energiája. A kölcsönhatás páronként történik, ezért a kétszeres számolás elkerülése végett (V.54)-ben fellép az  $1/2$  szorzó is. (V.55)-ből meghatározható  $u_{\mathbf{p},s}$  eredete. Az első tag

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}', s'} n_{\mathbf{p}',s'} v(0) = n \int v(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \int v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}',$$

hiszen  $n = N/V$  állandó. Ezen átalakítás után látjuk, hogy az első tag az a potenciális energia, amit egy klasszikus részecske érezne az  $n(\mathbf{r}')$  sűrűségű közegben. A második tag a részecskék kvantummechanikai azonossága miatt lép fel, és csak azonos spinű részecskékre nem nulla. Ha a teljes  $\Psi$  hullámfüggvényt nem a (II.102) determináns alakban írjuk föl, hanem – helytelenül – egyszerű szorzatként, vagyis ha elhagyjuk az antiszimmetrikusság feltételét, akkor a második tag nem fordul elő. Ennek a járuléknak a neve *kicserélődési kölcsönhatás*, tipikusan kvantummechanikai jelenség. A klasszikus határesetben a kicserélődési kölcsönhatás természetesen elhanyagolható, s

$$u_{\mathbf{p},s} = \frac{N}{V}v(0).$$

Ez az ún. Hartree-közelítés. Mindkét tag figyelembe vétele a Hartree–Fock-közelítést jelenti. Az egész rendszer teljes energiájának várható értéke:

$$E = \langle K \rangle + \langle U \rangle = \sum_{\mathbf{p},s} \left( \frac{p^2}{2m} n_{\mathbf{p},s} + \frac{1}{2} u_{\mathbf{p},s} n_{\mathbf{p},s} \right). \quad (\text{V.55}')$$

Ebből leolvasható, hogy egy részecske energiája

$$\varepsilon_{\mathbf{p},s} = \frac{p^2}{2m} + u_{\mathbf{p},s} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}',s'} [v(\mathbf{q} = 0) - v(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\delta_{s,s'}] n_{\mathbf{p}',s'}. \quad (\text{V.56})$$

Azt mondhatjuk tehát, hogy gyengén kölcsönható Fermi-gázban minden részecske a többi részecske által létrehozott térben mozog, s ebben a térben  $u_{\mathbf{p},s}$  a potenciális energia. Azután, hogy a kölcsönhatást az  $u_{\mathbf{p},s}$  külső téren keresztül már figyelembe vettük, a részecskék függetlennek tekinthetők.

Az eddigiekben az adott hullámfüggvényű állapothoz tartozó fizikai mennyiségeket határoztuk meg. Ha a rendszer nem írható le hullámfüggvénnyel, szükség van az átlagos mennyiségekre is. Ezeket úgy kapjuk, hogy az adott állapothoz tartozó kvantummechanikai várható értéket még a sokaságra is átlagoljuk. Az (V.52–56) kifejezések sokaságra vett átlaga könnyen elvégezhető, s a fenti összefüggések formálisan csak annyiban változnak, hogy  $n_{\mathbf{p},s}$  helyébe mindenhol az  $\bar{n}_{\mathbf{p},s}$  eloszlás kerül. (Fel kell használnunk, hogy  $P_0$ -ban az ideális gázra jellemző  $n_{\mathbf{p},s}$  szerepel. Tudjuk azonban, hogy ideális gázban az eloszlások statisztikusan függetlenek, tehát  $\overline{n_{\mathbf{p},s} n_{\mathbf{p}',s'}} = \bar{n}_{\mathbf{p},s} \bar{n}_{\mathbf{p}',s'}$  ( $\mathbf{p} \neq \mathbf{p}', s \neq s'$ ).) Az  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}$  egyrészecske energia is csak annyiban különbözik (V.56)-tól, hogy benne  $\bar{n}_{\mathbf{p},s}$  szerepel. Az  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}$  energiájú részecskék már függetlennek tekinthetők, eloszlásuk tehát jogosan vehető Fermi-eloszlásnak. A fentiekből látszik, hogy eljárásunk akkor következetes, ha az  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}$  energiájú ideális gáz párkorrelációs függvényét használjuk az  $p^2/2m$  energiájúé helyett. Az eddigi összefüggések továbbra is érvényesek, hiszen  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}$  alakját nem használtuk ki. Az eloszlás és az egyrészecske energia tehát így írható:

$$\bar{n}_{\mathbf{p},s} = \left( e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{p},s} - \mu)} + 1 \right)^{-1},$$

$$\varepsilon_{\mathbf{p},s} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}',s'} [v(\mathbf{q} = 0) - v(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\delta_{s,s'}] \bar{n}_{\mathbf{p}',s'}. \quad (\text{V.57})$$

A teljes részecskeszám

$$N = \sum_{\mathbf{p},s} \bar{n}_{\mathbf{p},s} = \sum_{\mathbf{p},s} \left( e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{p},s}-\mu)} + 1 \right)^{-1}. \quad (\text{V.57}')$$

A fenti két egyenlet önkonzisztens egyenletrendszeret alkot, hiszen  $N$ -et  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}$ -sel fejezzük ki, de  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}$  is függ  $N$ -től, amint azt a Hartree-tag esetén konkrétan is láttuk.

Első alkalmazásként számoljuk ki Hartree-közelítésben a rendszer *kompresszibilitását*. (Ez nyilván csak elég magas hőmérsékleten lesz jogos.) Ekkor

$$\varepsilon_{\mathbf{p},s} = \frac{p^2}{2m} + v \frac{N}{V}, \quad v \equiv v(0).$$

(III.50) alapján

$$\kappa_T = \frac{1}{Nn} \left( \frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{V,T}.$$

$\varepsilon_{\mathbf{p},s}$  is függ  $N$ -től, s ezen keresztül  $\mu$ -től, ezért

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{\beta} &= \sum_{\mathbf{p},s} \frac{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{p},s}-\mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{p},s}-\mu)} + 1)^2} \beta \left[ 1 - \left( \frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{p},s}}{\partial \mu} \right)_{\beta} \right], \\ \left( \frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{p},s}}{\partial \mu} \right)_{\beta} &= \left( \frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{p},s}}{\partial N} \right) \left( \frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{\beta} = \frac{v}{V} \left( \frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{\beta}. \end{aligned}$$

Vezessük be a következő mennyiséget:

$$\left( \frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{\beta}^{(0)} = \sum_{\mathbf{p},s} \frac{\beta e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{p},s}-\mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{p},s}-\mu)} + 1)^2}, \quad (\text{V.58})$$

mely azt a járulékot adja, amit akkor kapnánk, ha  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}$  nem függne  $\mu$ -től. Ezzel

$$\left( \frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{\beta} = \left( \frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{\beta}^{(0)} \left( 1 - \frac{v}{V} \left( \frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{\beta} \right),$$

következésképpen a kompresszibilitás:

$$\kappa_T = \frac{1}{Nn} \left( \frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{\beta}^{(0)} \frac{1}{1 + \frac{v}{V} \left( \frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{\beta}^{(0)}}. \quad (\text{V.59})$$

(V.57') segítségével könnyen belátható, hogy Hartree-közelítésben

$$\mu = \mu^{(0)} + v \frac{N}{V},$$

ahol  $\mu^{(0)}$  a  $p^2/2m$  egyrészecske energiájú,  $N$  részecskéből álló ideális Fermi-gáz kémiai potenciálja. (V.58)-ből

$$\left(\frac{\partial N}{\partial \mu}\right)_\beta^{(0)} = \sum_{\mathbf{p},s} \frac{\beta e^{\beta(p^2/2m - \mu^{(0)})}}{(e^{\beta(p^2/2m - \mu^{(0)})} + 1)^2},$$

ami a  $p^2/2m$  energiájú ideális gázra jellemző mennyiség, tehát

$$\frac{1}{Nn} \left(\frac{\partial N}{\partial \mu}\right)_\beta^{(0)} = \kappa_T^{id},$$

ahol  $\kappa_T^{id}$  a IV. fejezetben tárgyalt ideális Fermi-gáz kompresszibilitása. Ezzel (V.59)-ből

$$\kappa_T = \frac{\kappa_T^{id}}{1 + vn^2 \kappa_T^{id}}. \quad (\text{V.60})$$

Elég magas hőmérsékleten vagy eléggé kis sűrűség esetén, tehát olyan körülmények között, amikor a Fermi-eloszlás Maxwell-Boltzmann eloszlásba megy át:

$$\left(\frac{\partial N}{\partial \mu}\right)_\beta^{(0)} \approx \sum_{\mathbf{p},s} \beta e^{-\beta(p^2/2m + vN/V - \mu^{(0)})}.$$

$\mu^{(0)}$  ebben az esetben a klasszikus ideális gáz kémiai potenciálját adja meg, tehát

$$\frac{1}{Nn} \left(\frac{\partial N}{\partial \mu}\right)_\beta^{(0)} = \frac{\beta}{Nn} \sum_{\mathbf{p},s} \bar{n}_{\mathbf{p},s}^{MB} = \frac{1}{nk_B T} = \kappa_T^{kl}.$$

(V.60)-ből

$$\kappa_T = \frac{\kappa_T^{kl}}{1 + v \frac{n}{k_B T}}. \quad (\text{V.61})$$

A nevezőben fellépő  $vn^2 \kappa_T^{kl}$  jelentős változást okoz. A klasszikus gáz esetén ugyanis  $\kappa_T^{kl}$  csak  $T = 0$ -ban divergál, de ott már nem jogos a közelítés. Most azonban, ha  $v < 0$ , vagyis ha vonzó potenciálról van szó, magas hőmérsékleten is lehet végtelen a kompresszibilitás, méghozzá a

$$k_B T_M = |v|n$$

hőmérsékleten. Ettől eltérő  $T$ -re

$$\kappa_T = \frac{\kappa_T^{kl}}{1 - \frac{T_M}{T}} \propto (T - T_M)^{-1}, \quad (T > T_M).$$

Stabil egyensúlyi állapot csak  $T > T_M$ -re lehetséges. Eredményünk több szempontból is hasonlít a Van der Waals-gáz esetén kapott kifejezésre. Ismét azt látjuk, hogy



a részecskék közötti kölcsönhatás fázisátalakuláshoz vezet, tehát lényegesen új makroszkopikus jelenséget okoz. A  $\gamma$  exponensre most is az 1 értéket kaptuk, ami az univerzalitás egyik megnyilvánulása. Idézzük fel (V.42)-t, ami szerint

$$\kappa_T = \frac{\kappa_T^{MG}}{1 + v_1(0)n^2\kappa_T^{MG}},$$

ahol  $v_1(0)$  a vonzó rész Fourier-transzformáltja a  $\mathbf{q} = 0$  helyen. A Van der Waals-gázra alkalmazott levezetésben a taszító potenciált merev gömbként kezeltük. Mostani gondolatmenetünkkel ez nem hasonlítható össze, hiszen gyenge kölcsönhatásokat vizsgálunk. Ha azonban az atomok sugarát nullának vesszük,  $\kappa_T^{MG}$  nyilván  $\kappa_T^{kl}$ -t adja meg, s a két kompresszibilitás kifejezés azonossá válik. Most tehát más szempontból kaptuk vissza a korábbi eredményt, s azt látjuk, hogy a Van der Waals-egyenlet tulajdonképpen átlagtér-közelítésnek felel meg, ha a taszító részt elhanyagoljuk.

Speciális esetben végrehajtjuk a fenti számolást a Hartree–Fock-közelítésben is. Tegyük fel, hogy a részecskék közötti kölcsönhatás nagyon rövid hatótávolságú, azaz pontszerűnek tekinthető. Ekkor Dirac-deltával fejezhetjük ki a potenciált:

$$v(\mathbf{r}) = v\delta(\mathbf{r}). \quad (\text{V.62})$$

A Fourier-transzformált:

$$v(\mathbf{q}) = v.$$

Az egyrészecske energia:

$$\varepsilon_{\mathbf{p},s} = \frac{p^2}{2m} + vn - vn(s), \quad (\text{V.63})$$

mert

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p},s} v(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\delta_{s,s'}n_{\mathbf{p}',s'} = vn(s).$$

Ha nincs külső mágneses tér,  $n(s) = n/2$ , ezért:

$$\varepsilon_{\mathbf{p},s} = \frac{p^2}{2m} + \frac{v}{2}n.$$

Eredményünk úgy is fogalmazható, hogy pontszerű kölcsönhatás esetén a kicserélődési energia felére csökkenti a Hartree-tagot. Ez megfelel annak az elképzelésnek, hogy a Pauli-elv és a potenciál miatt az azonos spinű részecskék között semmilyen kölcsönhatás nem lehet, s ezért a kölcsönhatás csak az ellentett spinű részecskék járulékát tartalmazza, tehát felére csökken.

A most kapott energia csak annyiban különbözik a korábban használttól, hogy  $v$  helyett  $v/2$  szerepel. Ennek megfelelően ismét az (V.59) kompresszibilitást kapjuk, csak nem  $v$ , hanem  $v/2$  lesz  $(\partial N/\partial\mu)_\beta^{(0)}$  szorzója:

$$\kappa_T = \frac{1}{Nn} \left( \frac{\partial N}{\partial\mu} \right)_\beta^{(0)} \frac{1}{1 + \frac{v}{2V} \left( \frac{\partial N}{\partial\mu} \right)_\beta^{(0)}}.$$

A Hartree-közelítés esetén használt gondolatmenethez hasonlóan most is könnyen megmutatható, hogy

$$\kappa_T = \frac{\kappa_T^{id}}{1 + \frac{v}{2} n^2 \kappa_T^{id}}. \quad (\text{V.63}')$$

Elég magas hőmérsékleten, ill. eléggé kis nyomáson:

$$\kappa_T = \frac{\kappa_T^{id}}{1 + \frac{v}{2} \frac{n}{k_B T}}.$$

Azt várhatnánk, hogy a fenti  $\kappa_T$  megegyezzék (V.60)-nal, hiszen a kicserélődési kölcsönhatás következményeinek a klasszikus közelítésben elhanyagolhatónak kell lenniük. A képletről azonban leolvashatjuk, hogy ez nem következik be. A magyarázat az, hogy a Fermi-eloszlás Boltzmann-eloszlással való jogos helyettesítése még nem egyenértékű minden szempontból a klasszikus közelítéssel. A klasszikus közelítés ugyanis csak akkor használható, ha a termikus hullámhossz a rendszer minden karakterisztikus hosszúságánál jóval kisebb. Kölcsönható rendszerben két karakterisztikus mennyiség van: a részecskék átlagos távolsága,  $R = \sqrt[3]{V/N}$  és a potenciál hatótávolsága,  $r_0$ . A feltétel tehát:

$$\lambda_T \ll \min(R, r_0).$$

A  $\lambda_T \ll R$  egyenlőtlenség teljesülése esetén a Fermi-eloszlás Boltzmann-eloszlásba megy át, de ez még nem jelenti azt, hogy klasszikus közelítésben vagyunk, hiszen ahhoz a  $\lambda_T \ll r_0$  feltételnek is fenn kell állnia. Dirac-delta típusú potenciál mellett ez azonban semmilyen véges hőmérsékleten sem teljesül. Ilyenkor tehát nem is következhet be az, hogy a kicserélődési kölcsönhatás járuléka eltűnik. A közelítésekben ezért mindig megvizsgálandó, hogy az adott problémában a potenciált mikor szabad Dirac-deltával helyettesíteni.

Második példánk legyen a *szuszceptibilitás* meghatározása. Ha elektronokról van szó, akkor azok saját spinjeik következtében  $\mu_B$  (Bohr-magnetonnyi) mágneses nyomatékkal rendelkeznek. Külső térben  $-\mu_B H$ , ill.  $+\mu_B H$  energiájuk lehet. A paramágnesség a saját mágneses nyomatékok orientációja következtében fellépő jelenség, szemben a diamágnesességgel, melyet a pályamomentumok okoznak. A most vizsgált rendszer, konkrét esetben, a fémek vezetési elektronjainak mágneses hatásáról ad számot, ezért az ezt leíró elméletet a ferromágnesség sáveleméletének nevezik. A ferromágnesség szó arra utal, hogy – mint majd látni fogjuk – elég alacsony hőmérsékleten külső  $H$  tér nélkül is spontán mágnesezettséget mutat az egyébként paramágneses rendszer. Ebben az elméletben az  $\varepsilon_{\mathbf{p},s} \pm \mu_B H$  energiájú részecskék szabad fermion rendszert alkotnak, az elektronok tehát nem helyhez kötöttek. A mágneses tulajdonságok más típusú modelljei az ún. Ising-, ill. Heisenberg-modell, ezekkel azonban most nem foglalkozunk.

A paramágnesség a spinek következtében fellépő jelenség, ezért a részecskék spinjétől olyannyira függő kicserélődési kölcsönhatás nem hanyagolható el, tehát a Hartree-Fock-közelítést kell alkalmaznunk.

A részecskék közötti kölcsönhatás rövid hatótávolságúnak vehető. Közelítsük  $v(\mathbf{r})$ -et a következő potenciállal:

$$v(\mathbf{r}) = v\delta(\mathbf{r}); \quad v(\mathbf{q}) = v.$$

Vezessük be a  $H$  tér irányába mutató spinek átlagos számára az  $N_\uparrow$ , az ellenkező irányúak számára az  $N_\downarrow$  jelölést. A teljes részecskeszám:

$$N = N_\uparrow + N_\downarrow = \sum_{\mathbf{p}} (\bar{n}_{\mathbf{p}\uparrow} + \bar{n}_{\mathbf{p}\downarrow}).$$

Egy részecske energiájában a külső térből adódó járulék is föllép, ezért (V.63) így módosul:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathbf{p}\uparrow} &= \frac{p^2}{2m} - \mu_B H + v \frac{N}{V} - v \frac{N_\uparrow}{V}, \\ \varepsilon_{\mathbf{p}\downarrow} &= \frac{p^2}{2m} + \mu_B H + v \frac{N}{V} - v \frac{N_\downarrow}{V}. \end{aligned}$$

A teljes mágnesezettség:

$$M = \mu_B(N_\uparrow - N_\downarrow) = \mu_B \sum_{\mathbf{p}} (\bar{n}_{\mathbf{p}\uparrow} - \bar{n}_{\mathbf{p}\downarrow}). \quad (\text{V.64})$$

$N_\uparrow$ -t és  $N_\downarrow$ -t behelyettesítve:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathbf{p}\uparrow} &= e_{\mathbf{p}} - \frac{v}{2\mu_B} \frac{M}{V} - \mu_B H, \\ \varepsilon_{\mathbf{p}\downarrow} &= e_{\mathbf{p}} + \frac{v}{2\mu_B} \frac{M}{V} + \mu_B H, \end{aligned} \quad (\text{V.65})$$

ahol

$$e_{\mathbf{p}} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}v \frac{N}{V}.$$

Azt látjuk, hogy mindegyik részecske olyan potenciáltérben mozog, melyben nemcsak a külső  $H$  térből adódó járulék lép fel, hanem az ennek hatására kialakuló mágnesezettséggel arányos tag is. Ez a tárgyalásmód analóg a Weiss-féle közelítéssel. Az ilyen típusú elméleteket közös néven *átlagtér*, vagy *molekuláris-tér* elméletnek nevezik. A Hartree–Fock-közelítés tehát nem más, mint egyfajta átlagtér elmélet.

A mágnesezettség szempontjából most az (V.64–65) egyenletek jelentenek önkonzisztens egyenletrendszert. Az energiákat behelyettesítve:

$$\frac{M}{\mu_B} = \sum_{\mathbf{p}} \left\{ \frac{1}{e^{\beta(e_{\mathbf{p}} - vM/2\mu_B V - \mu_B H - \mu)} + 1} - \frac{1}{e^{\beta(e_{\mathbf{p}} + vM/2\mu_B V + \mu_B H - \mu)} + 1} \right\}. \quad (\text{V.66})$$

(A  $v = 0$  esetben visszkapjuk az ideális Fermi-gázra nyert eredményt.) Megmutatható, hogy egy bizonyos  $T_c$  hőmérséklet alatt akkor is van mágnesezettség, ha a külső

teret megszüntetjük. A későbbiekben speciális esetben meg is határozzuk  $T_c$  értékét. Vizsgáljuk meg előbb a rendszer szuszeptibilitását! Az exponenciálisokban szereplő  $M$  és  $\mu$  is függ  $H$ -tól, ezért

$$\begin{aligned} \chi_T &= \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_{T, H=0} \\ &= \mu_B^2 \sum_{\mathbf{p}} \left\{ \frac{\beta \left[ 1 + \frac{v}{2\mu_B^2 V} \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_{T, H=0} + \frac{1}{\mu_B} \left( \frac{\partial \mu}{\partial H} \right)_{T, H=0} \right] e^{\beta(e_{\mathbf{p}} - vM/2\mu_B V - \mu)}}}{\left[ e^{\beta(e_{\mathbf{p}} - vM/2\mu_B V - \mu)} + 1 \right]^2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\beta \left[ 1 + \frac{v}{2\mu_B^2 V} \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_{T, H=0} - \frac{1}{\mu_B} \left( \frac{\partial \mu}{\partial H} \right)_{T, H=0} \right] e^{\beta(e_{\mathbf{p}} + vM/2\mu_B V - \mu)}}}{\left[ e^{\beta(e_{\mathbf{p}} + vM/2\mu_B V - \mu)} + 1 \right]^2} \right\}. \end{aligned}$$

A kémiai potenciál abból a feltételből határozható meg, hogy a fölfelé és lefelé mutató részecskék együttes száma  $N$  :

$$N = \sum_{\mathbf{p}} \left\{ \frac{1}{e^{\beta(e_{\mathbf{p}} - vM/2\mu_B V - \mu_B H - \mu)} + 1} + \frac{1}{e^{\beta(e_{\mathbf{p}} + vM/2\mu_B V + \mu_B H - \mu)} + 1} \right\}.$$

A kémiai potenciál  $H$ -tól való függésére vagyunk még kíváncsiak. A fenti egyenlet mindkét tagjában  $vM/2\mu_B V + \mu_B H$  szerepel, ezért  $\mu$  is csak ezen kombinációban függhet  $M$ -tól és  $H$ -tól. Így írhatjuk, hogy

$$\mu = \mu_B f \left( H + \frac{vM}{2\mu_B^2 V} \right).$$

Az  $f$  függvény konkrét alakját nem használjuk ki. Deriválás után

$$\left( \frac{\partial \mu}{\partial H} \right)_{T, H=0} = \mu_B f'(H=0) \left[ 1 + \frac{v}{2\mu_B V} \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_{T, H=0} \right].$$

Vezessük be most is azt a mennyiséget, amit akkor kapnánk, ha elfelejtkeznénk arról, hogy az egyrészecske energia  $M$ -en keresztül is függ  $H$ -tól:

$$\begin{aligned} \chi_T^{(0)} &= \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_{T, H=0}^{(0)} \\ &= \mu_B^2 \beta \sum_{\mathbf{p}} \left\{ \frac{(1 + f'(H=0)) e^{\beta(e_{\mathbf{p}} - vM/2\mu_B V - \mu)}}{\left[ e^{\beta(e_{\mathbf{p}} - vM/2\mu_B V - \mu)} + 1 \right]^2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{(1 - f'(H=0)) e^{\beta(e_{\mathbf{p}} + vM/2\mu_B V - \mu)}}{\left[ e^{\beta(e_{\mathbf{p}} + vM/2\mu_B V - \mu)} + 1 \right]^2} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{V.66}')$$

Ezzel

$$\left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{T,H=0} = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{T,H=0}^{(0)} \left(1 + \frac{v}{2\mu_B^2 V} \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{T,H=0}\right),$$

azaz

$$\chi_T = \chi_T^{(0)} \frac{1}{1 - \frac{v}{2\mu_B^2 V} \chi_T^{(0)}}. \quad (\text{V.67})$$

Egyszerűen megmutatható, hogy a spontán mágnesezettséggel nem rendelkező fázisban, tehát a  $T > T_c$  tartományban, a kémiai potenciál  $H^2$ -tel arányos, s ezért

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial H}\right)_{T,H=0} = 0, \quad \text{vagyis} \quad f'(H=0) = 0.$$

Az is könnyen belátható, hogy ilyenkor a zérus térhez tartozó kémiai potenciál és a  $p^2/2m$  egyrészecke energiájú ideális Fermi-gáz  $H=0$  mellett számolt kémiai potenciálja,  $\mu^{(0)}$ , között a következő kapcsolat áll fenn:

$$\mu = \mu^{(0)} + \frac{vN}{2V}.$$

$T > T_c$  hőmérsékleten nincs spontán mágnesezettség,  $M(H=0) = 0$ , így

$$\chi_T^{(0)} = \mu_B^2 \beta \sum_{\mathbf{p}} \frac{2e^{\beta(p^2/2m - \mu^{(0)})}}{[e^{\beta(p^2/2m - \mu^{(0)})} + 1]^2},$$

ami nem más, mint a IV. fejezetben tárgyalt ideális Fermi-gáz szuszeptibilitása,  $\chi_T^{id}$ . (V.67) tehát így írható:

$$\chi_T = \frac{\chi_T^{id}}{1 - \frac{v}{2\mu_B^2 V} \chi_T^{id}} \quad (T > T_c). \quad (\text{V.67}')$$

Az (V.66–67) formulák könnyen kiértékelhetők, ha olyan magas hőmérsékletű, vagy kis sűrűségű rendszereket vizsgálunk, melyekben a Fermi-eloszlás már Boltzmann-eloszlásba megy át. Ismételten emlékeztetünk arra, hogy a fenti közelítés nem jelenti azt, hogy minden szempontból a klasszikus leírást használjuk. A kicserélődési kölcsönhatásból adódó járuléknak az elméletben végig lényeges szerepe van. (V.66)-ből:

$$\begin{aligned} M &= \mu_B(N_{\uparrow} - N_{\downarrow}) \\ &= \mu_B \sum_{\mathbf{p}} \left\{ e^{-\beta(p^2/2m + vN/2V - vM/2\mu_B V - \mu_B H - \mu)} \right. \\ &\quad \left. - e^{-\beta(p^2/2m + vN/2V + vM/2\mu_B V + \mu_B H - \mu)} \right\} \\ &= \mu_B e^{-\beta(vN/2V - \mu)} \text{sh} \left[ \beta \left( \mu_B H + \frac{vM}{2\mu_B V} \right) \right] \zeta, \end{aligned}$$

ahol

$$\zeta = 2 \sum_{\mathbf{p}} e^{-\beta p^2/2m}.$$

Hasonlóan

$$N = N_{\uparrow} - N_{\downarrow} = e^{-\beta(vN/2V - \mu)} \operatorname{ch} \left[ \beta \left( \mu_B H + \frac{vM}{2\mu_B V} \right) \right] \zeta.$$

A két egyenlet elosztása után:

$$M = \mu_B N \operatorname{th} \left[ \beta \left( \mu_B H + \frac{vM}{2\mu_B V} \right) \right].$$

Határozzuk meg azt a  $T_c$  hőmérsékletet, amelyen a spontán mágnesezettség éppen eltűnik!  $T_c$ -nél kissé alacsonyabb hőmérsékleten  $M(H=0)$  is kicsi, a  $\operatorname{th}(x)$  függvény tehát sorbafejthető:

$$\operatorname{th}(x) = x - \frac{x^3}{3} + \dots \quad (x \ll 1),$$

következésképpen

$$M = \mu_B N \left( \frac{\beta v M}{2\mu_B V} - \frac{1}{3} \left( \frac{\beta v M}{2\mu_B V} \right)^3 \right).$$

Ebből

$$M = \frac{2\mu_B V}{\beta v} \left[ 3 \left( 1 - \frac{2V}{\beta v N} \right) \right]^{1/2}.$$

A mágnesezettség eltűnik, ha

$$\beta = \frac{2V}{vN},$$

tehát a kritikus hőmérséklet:

$$k_B T_c = \frac{vN}{2V}. \quad (\text{V.68})$$

Ennél kissé alacsonyabb hőmérsékleten, de  $T_c$  közelében:

$$M = \mu_B N \sqrt{3 \left( \frac{T}{T_c} \right)^2 \left( 1 - \frac{T}{T_c} \right)} \propto \sqrt{T_c - T} \quad (T < T_c),$$

azaz a mágnesezettség parabolikusan tűnik el.

Meghatározzuk a szuszceptibilitást mind a ferromágneses fázisban, mind a paramágneses fázisban:

$$\chi_T = \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_{T, H=0} = \frac{\mu_B N}{\operatorname{ch}^2 \left( \frac{\beta v M}{2\mu_B V} \right)} \left( \beta \mu_B + \frac{\beta v}{2\mu_B V} \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_{T, H=0} \right),$$

$$\begin{aligned}\chi_T &= \frac{\frac{\mu_B^2 N}{k_B T}}{\text{ch}^2\left(\frac{vM}{2\mu_B V k_B T}\right)} \left(1 - \frac{\frac{vN}{2V k_B T}}{\text{ch}^2\left(\frac{vM}{2\mu_B V k_B T}\right)}\right)^{-1} \\ &= \frac{\mu_B^2 N}{k_B T} \frac{1}{\text{ch}^2\left(\frac{T_c}{T} \frac{M}{\mu_B N}\right) - \frac{T_c}{T}},\end{aligned}$$

ami a

$$\chi_T^{(0)} = \frac{\mu_B^2 N}{k_B T} \frac{1}{\text{ch}^2\left(\frac{vM}{2\mu_B V k_B T}\right)}$$

megfeleltetéssel éppen (V.67).

Természetesen ugyanezt az eredményt kapnánk (V.66') Boltzmann-eloszlással történő kiértékelésekor is. Röviden ismertetjük ennek lépéseit. A kémiai potenciált meghatározó egyenlet:

$$N = \sum_{\mathbf{p}} \left\{ e^{-\beta(e_{\mathbf{p}} - vM/2\mu_B V - \mu_B H - \mu)} + e^{-\beta(e_{\mathbf{p}} + vM/2\mu_B V + \mu_B H - \mu)} \right\}.$$

Ebből

$$\mu = -k_B T \left\{ \ln \frac{\zeta}{N} - \frac{\beta v N}{2V} + \ln \text{ch} \left[ \beta \left( \mu_B H + \frac{vM}{2\mu_B V} \right) \right] \right\},$$

ahonnan a kémiai potenciál általános kifejezésében szereplő  $f$  függvény konkrét alakja leolvasható. Ezt felhasználva,

$$f'(H=0) = -\text{th} \left( \frac{\beta v M}{2\mu_B V} \right).$$

Közelítésünkben a Fermi-eloszlás Boltzmann-eloszlással helyettesíthető. (V.66') tehát így alakul:

$$\begin{aligned}\chi_T^{(0)} &= \mu_B^2 \beta \sum_{\mathbf{p}} \left\{ \bar{n}_{\mathbf{p}\uparrow}^{MB} (1 + f'(H=0)) + \bar{n}_{\mathbf{p}\downarrow}^{MB} (1 - f'(H=0)) \right\} \\ &= \mu_B^2 \beta N \left( 1 + f'(H=0) \frac{M}{\mu_B N} \right).\end{aligned}$$

Ebből a fölírásból látjuk, hogy  $\chi_T^{(0)}$  két tagból tevődik össze. Az első a klasszikus ideális gáz szuszceptibilitása. Ehhez  $T_c$  alatt hozzáadódik a spontán mágnesezettség miatt fellépő második tag. Érdekes megjegyezni, hogy  $f'(H=0)$   $M$  páratlan függvénye, s ezért a második tag  $M$  páros függvénye.  $f'(H=0)$  konkrét alakját behelyettesítve természetesen ismét a

$$\chi_T^{(0)} = \frac{\mu_B^2 N \beta}{\text{ch}^2\left(\frac{\beta v M}{2\mu_B V}\right)}$$

eredményt kapjuk.

Vizsgáljuk meg, hogyan viselkedik a szuszceptibilitás a kritikus pont környékén!  $T \lesssim T_c$  esetén  $M$  nem nulla, de már elegendően kicsi. Láttuk, hogy ekkor

$$\frac{T_c}{T} \frac{M}{\mu_B N} = \sqrt{3 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)}.$$

$\chi_T$  általános kifejezésébe behelyettesítve, és a  $\text{ch}^2(x) = 1 + x^2 + \dots$  ( $x \ll 1$ ) sorfejtést felhasználva:

$$\chi_T = \frac{\mu_B^2 N}{k_B T} \frac{1}{4 - 3 \frac{T}{T_c} - \frac{T}{T_c}} \quad (T_c - T \ll T_c).$$

További sorbafejtés után:

$$\chi_T = \frac{\mu_B^2 N}{k_B T} \frac{T_c}{2(T_c - T)} \propto (T_c - T)^{-1} \quad (T \lesssim T_c).$$

$T > T_c$ -re  $M = 0$ , s  $\chi_T^{(0)}$  tényleg az ideális gáz klasszikus határesetben adódó szuszceptibilitása:

$$\chi_T^{kl} = \frac{\mu_B^2 N}{k_B T},$$

és ezért

$$\chi_T = \frac{\chi_T^{kl}}{1 - \frac{vN}{2Vk_B T}} \quad (T > T_c). \quad (\text{V.68}')$$

$\chi_T$  éppen a  $T = T_c$  helyen lesz divergens. Általánosan is igaz, hogy a kritikus hőmérsékleten a szuszceptibilitás végtelenné válik, tehát (V.67') nevezőjének gyökhelye van.

(V.68') azt mutatja, hogy a kölcsönhatás erősen módosítja a szuszceptibilitást.  $\chi_T^{kl}$  csak  $T = 0$ -n divergálna. A kölcsönhatás következtében azonban taszító potenciál esetén  $\chi_T$  viszonylag magas hőmérsékleten is lehet végtelen.  $T_c$ -től eltérő  $T$ -re

$$\chi_T = \chi_T^{kl} \frac{T}{T - T_c} \propto (T - T_c)^{-1} \quad (T > T_c). \quad (\text{V.69})$$

A szuszceptibilitás kritikus exponensére tehát  $T_c$  fölött és alatt egyaránt a  $\gamma = 1$  értéket kaptuk. Az Ising- vagy a Heisenberg-modell Weiss-féle közelítésben történő megoldása szintén ugyanezt eredményezné. Általánosan megmutatható, hogy minden átlagtér elméletben  $\gamma = 1$ . A folyadék-gáz rendszerben a szuszceptibilitás megfelelője a kompresszibilitás. Láttuk, hogy a Van der Waals-egyenletből is és a Hartree-Fock-közelítésből is ugyanez a  $\gamma$  érték adódott, s ez a másodrendű fázisátalakulások univerzalitásának szép példája.

Szemléletesen is megmagyarázható, hogy miért csak taszító potenciál esetén léphet föl kritikus hőmérséklet. Ha ugyanis létezik  $T_c$ , akkor  $T < T_c$ -re a spinek nagy



részének  $H = 0$  esetén is párhuzamosan kell állnia, hiszen van eredő mágnesezettség. Láttuk azonban, hogy a párhuzamos spinű részecskék igyekeznek egymástól távol elhelyezkedni. Ez taszító potenciál esetén csökkenti a kölcsönhatási energiát, s így energetikailag kedvező lehetőséget jelent.

A magas hőmérsékleti viselkedés tanulmányozása után térjünk át most a nagyon alacsony hőmérsékleti tulajdonságok vizsgálatára. (V.60) és (V.67') segítségével a kölcsönható rendszer kompresszibilitása és szuszceptibilitása közvetlenül adódik, ha meghatározzuk a  $p^2/2m$  energiájú ideális Fermi-gáz ugyanezen mennyiségeit. A IV. fejezetben láttuk, hogy nagyon alacsony hőmérsékleten:

$$\kappa_T^{id} = \frac{1}{Nn} \rho(\varepsilon_F),$$

ahol  $\rho(\varepsilon_F)$  az ideális gáz állapotsűrűsége az  $\varepsilon_F = p_F^2/2m$  Fermi-szinten. Jelöljük ezt a mennyiséget a továbbiakban  $\nu$ -vel. (V.63') alapján

$$\kappa_T = \frac{\nu}{Nn} \frac{1}{1 + \frac{v}{2V}\nu}. \quad (\text{V.70})$$

Látjuk tehát, hogy a kölcsönhatás  $T = 0$  hőmérsékleten is megváltoztatja a kompresszibilitásra kapott egyenletet. Ha  $v$  nagy negatív szám, akkor  $\kappa_T < 0$ , ami azt jelenti, hogy a rendszer nem homogén, már magasabb hőmérsékleten fázisátalakuláson ment át. Abban az esetben viszont, ha  $T = 0$ -n is homogén a rendszer, vagyis  $\kappa_T > 0$ , tehát

$$1 + \frac{v}{2V}\nu > 0,$$

véges hőmérsékleten már nem lehet fázisátalakulás.

Az alacsony hőmérsékleti szuszceptibilitás ideális gázban:

$$\chi_T^{id} = \mu_B^2 \rho(\varepsilon_F) = \mu_B^2 \nu.$$

(V.67')-be behelyettesítve:

$$\chi_T = \frac{\mu_B^2 \nu}{1 - \frac{v}{2V}\nu}. \quad (\text{V.71})$$

Ha a nevező pozitív, akkor összhangban vagyunk kiindulási feltevésünkkel, tehát  $T = 0$ -ig paramágneses maradt a rendszer, nem történt fázisátmenet. Azon esetekben azonban, amikor a potenciál olyan nagy, hogy

$$\frac{v}{2V}\rho(\varepsilon_F) > 1,$$

akkor véges hőmérsékleten fázisátalakulásnak kellett végbemennie,  $T = 0$ -n tehát ferromágneses a rendszer. Ez az ún. Bloch-feltétel.

## V.6. Fermi-gáz viselkedése az alapállapot közelében

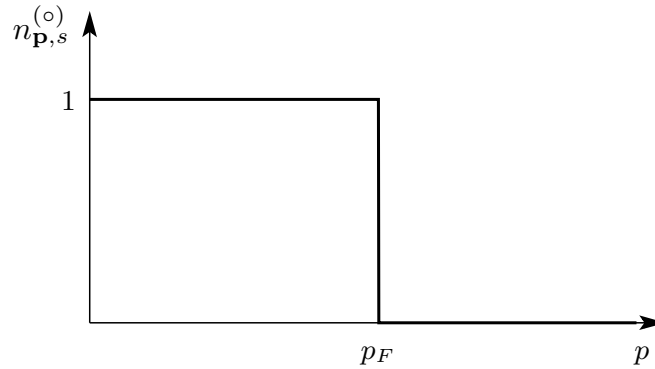
Az alacsony hőmérsékletű, gyengén kölcsönható Fermi-gáz leírására a Hartree–Fock-közelítést kell alkalmaznunk, hiszen ilyenkor a kvantumeffektusok és így a kicserélődési energia is jelentős szerepet játszik. (V.55') szerint a teljes energia várható értéke:

$$E = \sum_{\mathbf{p},s} \left( \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} u_{\mathbf{p},s} \right) n_{\mathbf{p},s}.$$

Az alapállapot közelében  $n_{\mathbf{p},s}$  csak keveset tér el az alapállapot eloszlástól:

$$n_{\mathbf{p},s} = n_{\mathbf{p},s}^{(\circ)} + \delta n_{\mathbf{p},s},$$

ahol  $n_{\mathbf{p},s}^{(\circ)}$  az ismert lépcső-függvény:



Vizsgáljuk meg, hogyan írható föl az energia  $\delta n_{\mathbf{p},s}$ -sel kifejezve. Ha  $n_{\mathbf{p},s}$  felbontását (V.55)-be helyettesítjük,  $E$  a következő alakban áll elő:

$$E = E_0 + \sum_{\mathbf{p},s} \varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(\circ)} \delta n_{\mathbf{p},s} + \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\mathbf{p},\mathbf{p}' \\ s,s'}} f_{\mathbf{p},s,\mathbf{p}',s'} \delta n_{\mathbf{p},s} \delta n_{\mathbf{p}',s'}, \quad (\text{V.72})$$

ahol  $E_0$  az alapállapotbeli energia:

$$E_0 = \sum_{\mathbf{p},s} \frac{p^2}{2m} n_{\mathbf{p},s}^{(\circ)} + \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\mathbf{p},\mathbf{p}' \\ s,s'}} [v(0) - v(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \delta_{s,s'}] n_{\mathbf{p},s}^{(\circ)} n_{\mathbf{p}',s'}^{(\circ)}, \quad (\text{V.73})$$

$\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(\circ)}$  az alapállapotbeli egyrészecske energia:

$$\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(\circ)} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}',s'} [v(0) - v(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \delta_{s,s'}] n_{\mathbf{p}',s'}^{(\circ)}, \quad (\text{V.74})$$

és végül a  $\mathbf{p}, s$  és  $\mathbf{p}', s'$  állapotú részecskék kölcsönhatási energiája:

$$\frac{1}{V} f_{\mathbf{p},s,\mathbf{p}',s'} = \frac{1}{V} [v(0) - v(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \delta_{s,s'}]. \quad (\text{V.75})$$

Vizsgáljuk meg az egyes tagok szemléletes jelentését! Tegyük föl, hogy az alapállapothoz egy részecskét hozzáadunk. E részecske impulzusának,  $\mathbf{p}_0$ -nak, a Fermi-impulzusnál nyilván nagyobbnak kell lennie:  $p_0 > p_F$ . Ebben az esetben

$$\delta n_{\mathbf{p},s} = \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}_0} \delta_{s,s_0},$$

ahol  $s_0$  a részecske spinje. A rendszer energiája

$$E = E_0 + \varepsilon_{\mathbf{p}_0,s_0}^{(\circ)} + \frac{1}{2V} f_{\mathbf{p}_0,s_0,\mathbf{p}_0,s_0} = E_0 + \varepsilon_{\mathbf{p}_0,s_0}^{(\circ)},$$

mert (az (V.75) összefüggés alapján)  $f_{\mathbf{p}_0,s_0,\mathbf{p}_0,s_0} = 0$ .  $\varepsilon_{\mathbf{p}_0,s_0}^{(\circ)}$  tehát azt mutatja meg, hogy egy részecske hozzáadásával mennyit változott az energia. Ez két részből tevődik össze (l. (V.74)), a kinetikus energiából és a Fermi-gömbön belüli részecskékkel történő kölcsönhatás energiájából.

Tekintsük ezután azt az esetet, amikor egy Fermi-gömbön belüli  $\mathbf{p}_1$  impulzusú  $s_0$  spinű részecskét a Fermi-gömbön kívülre gerjesztünk úgy, hogy impulzusa  $\mathbf{p}_2$  legyen. Azt mondjuk ilyenkor, hogy a gerjesztés következtében  $\mathbf{p}_1$  impulzusú lyuk és  $\mathbf{p}_2$  impulzusú részecske keletkezett. Az eloszlás megváltozása most:

$$\delta n_{\mathbf{p},s} = \delta_{\mathbf{p}_2,\mathbf{p}} \delta_{s_0,s} - \delta_{\mathbf{p}_1,\mathbf{p}} \delta_{s_0,s}.$$

Ezt behelyettesítve:

$$\begin{aligned} E &= E_0 + \varepsilon_{\mathbf{p}_2,s_0}^{(\circ)} - \varepsilon_{\mathbf{p}_1,s_0}^{(\circ)} + \frac{1}{2V} (f_{\mathbf{p}_1,s_0,\mathbf{p}_1,s_0} + f_{\mathbf{p}_2,s_0,\mathbf{p}_2,s_0} - f_{\mathbf{p}_1,s_0,\mathbf{p}_2,s_0} - f_{\mathbf{p}_2,s_0,\mathbf{p}_1,s_0}) \\ &= E_0 + \varepsilon_{\mathbf{p}_2,s_0}^{(\circ)} - \varepsilon_{\mathbf{p}_1,s_0}^{(\circ)} - \frac{1}{V} f_{\mathbf{p}_1,s_0,\mathbf{p}_2,s_0}, \end{aligned}$$

hiszen az esetek legnagyobb többségében  $v(\mathbf{r})$  csak  $\mathbf{r}$  nagyságától függ, ekkor viszont (V.53)-ból leolvasható, hogy  $v(\mathbf{q}) = v(-\mathbf{q})$ , s ezért  $f_{\mathbf{p},s,\mathbf{p}',s'} = f_{\mathbf{p}',s',\mathbf{p},s}$ . Az  $\varepsilon_{\mathbf{p}_2,s_0}^{(\circ)} - \varepsilon_{\mathbf{p}_1,s_0}^{(\circ)}$  mennyiség a részecske és a lyuk energiája. Egymás közötti kölcsönhatási energiájuk,  $V^{-1} f_{\mathbf{p}_1,s_0,\mathbf{p}_2,s_0}$ , a jelen esetben elhanyagolható, mert termodinamikai határesetben számolunk. Ilyenkor  $V \rightarrow \infty$ , s mivel  $f_{\mathbf{p}_1,s_0,\mathbf{p}_2,s_0}$   $V$ -től független, a kérdéses mennyiség nagyon kicsi.

Megállapíthatjuk tehát, hogy az (V.72)-ben szereplő második tag a gerjesztett részecskék és lyukak energiája, a harmadik pedig a közöttük fellépő kölcsönhatásból származó energia.

Az eddig bevezetett jelölésekkel az  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}$  egyrészecske energia, (V.56), a következő alakra hozható:

$$\varepsilon_{\mathbf{p},s} = \varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(\circ)} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}',s'} f_{\mathbf{p},s,\mathbf{p}',s'} \delta n_{\mathbf{p}',s'}. \quad (\text{V.76})$$

$\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(\circ)}$  a kinetikus energiát és a Fermi-gömbön belüli részecskékkel történő kölcsönhatást adja meg, a második tag pedig a gerjesztett részecskékkel történő kölcsönhatást. A termodinamikai határérték miatt az utóbbi mennyiség mindaddig elhanyagolható, amíg a gerjesztett részecskék száma nem makroszkopikus. Ellenkező esetben

$\sum_{\mathbf{p}',s'} f_{\mathbf{p},s,\mathbf{p}',s'} \delta n_{\mathbf{p}',s'}$  maga is makroszkopikussá válik, tehát a második tag véges értéket vesz föl. Sok gerjesztett részecske esetén a kölcsönhatásukból adódó járulék már nem elhanyagolható módon befolyásolja az egyrészecske energiát.

Eddig az adott hullámfüggvényű állapothoz tartozó fizikai mennyiségekkel foglalkoztunk. Ha a rendszer nem írható le hullámfüggvénnyel, célszerűbb az átlagos mennyiségeket meghatározni. Ezek a fenti kifejezések sokaságra vett átlagolásával adódnak.  $T \neq 0$ -n az eloszlás:

$$\bar{n}_{\mathbf{p},s} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{p},s} - \mu)} + 1}.$$

$E$ , ill.  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}$  kifejezésében ilyenkor  $\delta n_{\mathbf{p},s}$  helyett  $\delta \bar{n}_{\mathbf{p},s} = \bar{n}_{\mathbf{p},s} - n_{\mathbf{p},s}^{(o)}$  szerepel, ahol  $n_{\mathbf{p},s}^{(o)} = \bar{n}_{\mathbf{p},s}(T=0)$ .

Az előző fejezetben csak Dirac-delta típusú potenciál esetén határoztuk meg az egyensúlyi mennyiségeket. Most megvizsgáljuk, hogy általános potenciál esetén hogyan járhatunk el. Mivel  $s$  két értéket vehet föl,  $+1/2$  vagy  $-1/2$ -et, az egyrészecske energia, (V.76), mindig átírható a következő alakba:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathbf{p},s} = \varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(o)} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}'} \left[ \frac{1}{2} (f_{\mathbf{p},s,\mathbf{p}',s} + f_{\mathbf{p},s,\mathbf{p}',-s}) (\delta n_{\mathbf{p}',s} + \delta n_{\mathbf{p}',-s}) \right. \\ \left. + \frac{1}{2} (f_{\mathbf{p},s,\mathbf{p}',s} - f_{\mathbf{p},s,\mathbf{p}',-s}) (\delta n_{\mathbf{p}',s} - \delta n_{\mathbf{p}',-s}) \right]. \end{aligned}$$

Vezessük be a spinben szimmetrikus és antiszimmetrikus kombinációkat,

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}^{sz} &= \frac{1}{2} (f_{\mathbf{p},s,\mathbf{p}',s} + f_{\mathbf{p},s,\mathbf{p}',-s}), \\ f_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}^a &= \frac{1}{2} (f_{\mathbf{p},s,\mathbf{p}',s} - f_{\mathbf{p},s,\mathbf{p}',-s}). \end{aligned}$$

Ha nincs külső tér, a fenti mennyiségek  $s$ -től már függetlenek, mert kitüntetett irány nem lévén  $f_{\mathbf{p},s,\mathbf{p}',s'}$  csak  $s$  és  $s'$  relativ helyzetétől függ.  $f_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}^{sz}$  és  $f_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}^a$  tehát a  $H=0$  esetre jellemző mennyiségek. Amennyiben a rendszert mágneses térbe helyezzük, megváltoznak az  $\bar{n}_{\mathbf{p}',s}$  és  $\bar{n}_{\mathbf{p}',-s}$  eloszlások, hiszen ezentúl nem igaz, hogy a fölfelé és lefelé mutató spinek átlagos száma megegyezik. Első közelítésben elegendő, ha a kölcsönhatást a nulladrendű mennyiségekkel, tehát  $f_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}^{sz(a)}$ -vel írjuk le, mert a tér vezető rendű hatását az eloszlások megváltozása már tartalmazza.  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}$  tehát mindkét esetben így alakítható át:

$$\varepsilon_{\mathbf{p},s} = \varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(o)} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}'} [f_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}^{sz} (\delta n_{\mathbf{p}',s} + \delta n_{\mathbf{p}',-s}) + f_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}^a (\delta n_{\mathbf{p}',s} - \delta n_{\mathbf{p}',-s})].$$

A második tag  $\delta n_{\mathbf{p},s}$ -ben elsőrendű, ezért elegendő  $f_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}^{sz(a)}$ -t nulladrendben, tehát a  $|\mathbf{p}| = |\mathbf{p}'| = p_F$  helyen kiszámolni. Azt a speciális esetet vizsgáljuk, amelyben  $\delta n_{\mathbf{p}',s}$

csak  $|\mathbf{p}'|$ -től függ. Ekkor a  $\mathbf{p}$  és  $\mathbf{p}'$  közötti  $\vartheta$  szögtől való függés csak  $f_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}^{sz(a)}$ -ban lép fel. Definiáljuk a következő mennyiséget:

$$f_0^{sz(a)} \equiv \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi f^{sz(a)}(p_F, \cos \vartheta) 2\pi \sin \vartheta d\vartheta.$$

Fejezzük ki a kölcsönhatási potenciál segítségével  $f_0^{sz(a)}$ -at! (V.75)-ből

$$f_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}^{sz} = v(0) - \frac{1}{2}v(\mathbf{p}' - \mathbf{p}),$$

$$f_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}^a = -\frac{1}{2}v(\mathbf{p}' - \mathbf{p}).$$

A Fermi-felületen  $|\mathbf{p}' - \mathbf{p}| = 2p_F \sin(\vartheta/2)$ , és

$$f_0^{sz} = v(0) - \frac{1}{4} \int_0^\pi v(2p_F \sin(\vartheta/2)) \sin \vartheta d\vartheta,$$

$$f_0^a = -\frac{1}{4} \int_0^\pi v(2p_F \sin(\vartheta/2)) \sin \vartheta d\vartheta.$$

Mivel  $\sum_{\mathbf{p}'} \delta n_{\mathbf{p}',s}$  az  $s$  spinű részecskék számának megváltozását,  $\delta N_s$ -t jelenti,

$$\varepsilon_{\mathbf{p},s} = \varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(o)} + f_0^{sz} \frac{\delta N}{V} + f_0^a \frac{\delta N_s - \delta N_{-s}}{V}, \quad (\text{V.76}')$$

ahol  $\delta N = \delta N_s + \delta N_{-s}$ . A fenti összefüggés úgy értendő, hogy ha a rendszer részecskeszámát megváltoztatjuk, ill. ha a rendszert mágneses térbe helyezzük, akkor az egyrészecske energia már nem az alapállapot  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(o)}$  lesz, hanem  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}$ . Termodinamikai egyensúlyban  $\delta N_s$  makroszkopikus mennyiség, ezért  $\delta N_s/V$  a  $V \rightarrow \infty$  határértékben nem tűnik el. Ugyanakkor, ha csak kis változásokat engedünk meg, a  $\delta N_s/V$  mennyiséget infinitezimálisan kicsivé tehetjük, s azt gondolhatnánk, hogy elhanyagolásuk jogos. Ez a lépés azonban nem tehető meg, hiszen az  $\varepsilon_{\mathbf{p},s} = \varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(o)}$  feltevés azt jelenti, hogy (V.72) harmadik tagját, tehát a gerjesztések kölcsönhatását elhanyagolnánk; viszont könnyen belátható, hogy (V.72) harmadik tagja ugyanolyan nagyságrendű, mint a második. A  $\sum_{\mathbf{p},s} \varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(o)} \delta n_{\mathbf{p},s}$  mennyiség ugyanis nem csak a gerjesztett részecskék, hanem a lyukak energiáját is tartalmazza, ez utóbbiakat azonban negatív előjellel. Az alapállapot közelében létrejövő részecske és lyuk gerjesztések a Fermi-szinthez közel esnek, az  $\varepsilon_{\text{részecske}}^0 - \varepsilon_{\text{lyuk}}^0$  mennyiség kicsi, s ennek alapján megmutatható, hogy a fenti állítás igaz.

Az  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(o)}$  energia meglehetősen nehezen kezelhető. Tudjuk azonban, hogy a Fermi-szint közelében keveset tér el az  $\varepsilon_F = \mu$  Fermi-energiától. A részecskék energiája

nyilván nem függ a spin iránytól, és minthogy a rendszer izotróp, csak az impulzus vektor nagyságát tartalmazhatja. Ezért jogos a következő sorfejtés:

$$\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(\circ)} = \varepsilon_p = \mu + \frac{p_F}{m^*}(p - p_F), \quad (\text{V.77})$$

ahol az  $m^*$  effektív tömeg definíciója:

$$\frac{p_F}{m^*} = \left( \frac{\partial \varepsilon_p}{\partial p} \right)_{p=p_F}.$$

A  $p \approx p_F$  tartományban a szabad Fermi-részecske energiája

$$\varepsilon_p^{id} = \mu^{id} + \frac{p_F}{m}(p - p_F),$$

tehát teljesen hasonló típusú, csak  $\mu^{id}$ , ill.  $m$  szerepel benne. A  $p \gg p_F$ , ill.  $p \ll p_F$  esetekben a sorfejtés természetesen nem érvényes, de ilyenkor  $\delta n_{\mathbf{p},s}$  már gyakorlatilag nulla. Ezek a tartományok tehát nem lényegesek. Fejezzük ki  $m^*$ -ot is a  $v$  kölcsönhatási potenciállal! (V.74)-ből:

$$\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m} + v(0) \frac{N}{V} - \int v(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) n_{\mathbf{p}',s}^{(\circ)} \frac{d^3 \mathbf{p}'}{h^3}.$$

Következésképpen:

$$\nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon_p = \frac{\mathbf{p}}{m} - \int \nabla_{\mathbf{p}} v(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) n_{\mathbf{p}',s}^{(\circ)} \frac{d^3 \mathbf{p}'}{h^3} = \frac{\mathbf{p}}{m} + \int [\nabla_{\mathbf{p}'} (v(\mathbf{p}' - \mathbf{p}))] n_{\mathbf{p}',s}^{(\circ)} \frac{d^3 \mathbf{p}'}{h^3}.$$

Parciális integrálás után

$$\nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon_p = \frac{\mathbf{p}}{m} - \int v(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \nabla_{\mathbf{p}'} n_{\mathbf{p}',s}^{(\circ)} \frac{d^3 \mathbf{p}'}{h^3}.$$

$n_{\mathbf{p}',s}^{(\circ)}$  lépcső-függvény, ezért:

$$\nabla_{\mathbf{p}'} n_{\mathbf{p}',s}^{(\circ)} = -\frac{\mathbf{p}'}{p'} \delta(p' - p_F),$$

$$\nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon_p = \frac{\mathbf{p}}{m} + \int v(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \frac{\mathbf{p}'}{p'} \delta(p' - p_F) \frac{d^3 \mathbf{p}'}{h^3}.$$

A fenti kifejezést  $\mathbf{p}$ -vel skalárisan beszorozva és a  $|\mathbf{p}| = p_F$  helyen véve,

$$\mathbf{p} \nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon_p |_{\mathbf{p}=\mathbf{p}_F} = \frac{p_F^2}{m} + \frac{2\pi p_F^3}{h^3} \int v(2p_F \sin(\vartheta/2)) \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta.$$

Felhasználva, hogy

$$\nabla_{\mathbf{p}}\varepsilon_p = \frac{\partial\varepsilon_p}{\partial p} \frac{\mathbf{p}}{p}, \quad \frac{\partial\varepsilon_p}{\partial p} = \frac{\mathbf{p}}{p} \nabla_{\mathbf{p}}\varepsilon_p,$$

$m^*$ -ra a következő összefüggést kapjuk:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} + \frac{2\pi p_F}{h^3} \int v(2p_F \sin(\vartheta/2)) \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta.$$

Ha  $v(\mathbf{r}) = v\delta(\mathbf{r})$ , akkor  $f_0^{sz} = v/2$ ,  $f_0^a = -v/2$ , és  $m^* = m$ .

A kompresszibilitás számolásakor  $H = 0$ , tehát  $\delta N_{\uparrow} = \delta N_{\downarrow}$ . Így

$$\varepsilon_{\mathbf{p},s} = \varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(o)} + f_0^{sz} \frac{\delta N}{V} = \mu + \frac{p_F}{m^*} (p - p_F) + f_0^{sz} \frac{\delta N}{V}.$$

A Dirac-delta potenciállal számolt egyrészecske energiával, (V.63)-mal összehasonlítva azt látjuk, hogy a két kifejezés a Fermi-felület közelében egy konstans erejéig azonos, csak most  $v/2$  helyett  $f_0^{sz}$ ,  $m$  helyett pedig  $m^*$  szerepel. Az V.5. fejezetben leírt lépések rendre megismételhetők, de a megfeleltetés alapján rögtön is fölírhatjuk, hogy (V.70) így módosul:

$$\kappa_T(T=0) = \frac{\nu}{Nn} \frac{1}{1 + \frac{\nu}{V} f_0^{sz}}. \quad (\text{V.77}')$$

A  $\nu$  állapotűrűség csak annyiban tér el a  $p^2/2m$  energiájú Fermi-gázra jellemző mennyiségtől, hogy benne nem  $m$ , hanem  $m^*$  lép föl:

$$\nu = \frac{Vm^* p_F}{\pi^2 \hbar^3}. \quad (\text{V.78})$$

A szuszceptibilitás meghatározásakor  $\delta N = 0$ . Másrészt  $\delta M = \mu_B(\delta N_{\uparrow} - \delta N_{\downarrow})$ , tehát az egyrészecske energia  $H$  külső tér esetén a következő:

$$\varepsilon_{\mathbf{p},\uparrow(\downarrow)} = \varepsilon_{\mathbf{p},\uparrow(\downarrow)}^0 + f_0^a \frac{\delta N_{\uparrow(\downarrow)} - N_{\downarrow(\uparrow)}}{V} \mp \mu_B H.$$

(V.65)-tel összehasonlítva leolvasható, hogy  $v/2$ -nek  $-f_0^a$  felel meg. Az analógiát fölhasználva, (V.71) alapján:

$$\chi_T(T=0) = \frac{\mu_B^2 \nu}{1 + \frac{\nu}{V} f_0^a}. \quad (\text{V.79})$$

$\nu$ -ben természetesen most is  $m^*$  szerepel.

Határozzuk meg még az alacsony hőmérsékleti fermion-gáz fajhőjét! A hőmérsékletben legalacsonyabb rendig számolva  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}$ -t helyettesíthetjük  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(o)}$ -lal, s így

$$C_V = \left( \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_V = \sum_{\mathbf{p},s} \varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(o)} \frac{\partial \bar{n}_{\mathbf{p},s}}{\partial T}.$$

Ideális gázban is igaz ugyanez a kifejezés, csak ott  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{id}$  szerepel. Ezekután minden lépés megismételhető, s a következő kifejezést kapjuk:

$$C_V = \frac{1}{3}\pi^2\nu k_B^2 T. \quad (\text{V.80})$$

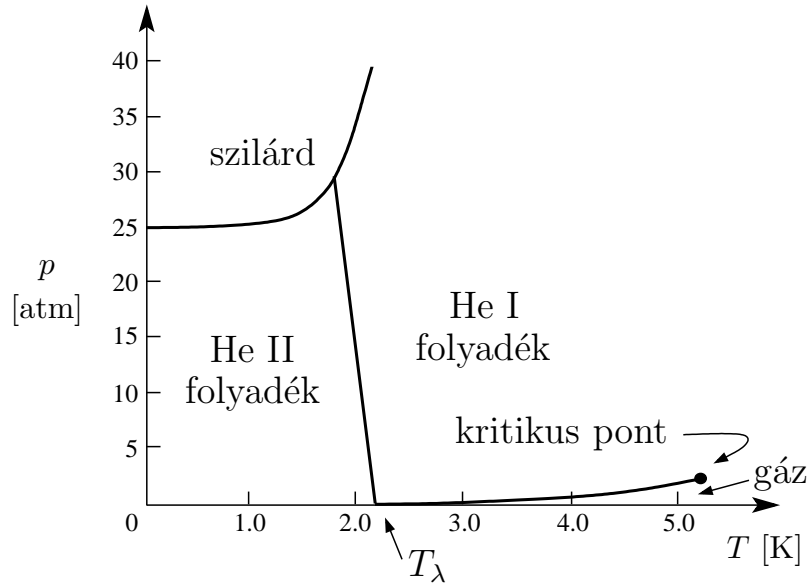
Az alapállapot közelében levő Fermi-gáz Hartree–Fock-közelítésben történő leírásakor tehát minden mennyiséget három paraméter:  $f_0^{sz}$ ,  $f_0^a$  és  $m^*$  meghatározására vezetünk vissza. A  $v(\mathbf{r})$  kölcsönhatási potenciál ismeretében mindegyikük kiszámítható.

## V.7. Kvantumfolyadékok

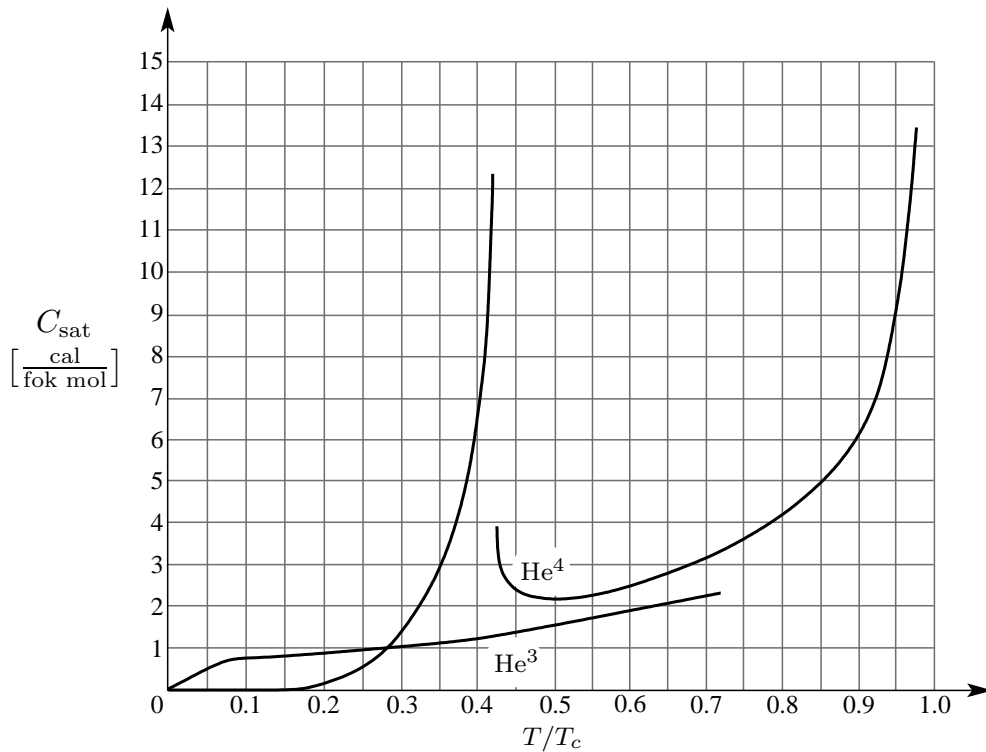
Ha a folyadékok hőmérsékletét csökkentjük, csökken a folyadék molekuláinak kinetikus energiája, és így a molekulák közötti kölcsönhatás egyre fontosabb szerepet játszik. Ennek eredményeként a legtöbb esetben elsőrendű fázisátmenet figyelhető meg: a rendszer a folyadék halmazállapotból szilárd halmazállapotba megy át. Kivételet csak a hélium két stabil izotópjából álló folyadék, a tiszta  $\text{He}^4$  és  $\text{He}^3$  folyadék, továbbá ezek különböző koncentrációjú keverékei jelentenek, melyek nem túl nagy nyomás esetén (25 atmoszféra alatt) folyadék halmazállapotban maradnak az elérhető legalacsonyabb hőmérsékletig. Feltehetően ez a helyzet egész a zérus hőmérsékletig. A hőmérsékletet csökkentve növekszik az atomok hőmozgásának megfelelő de Broglie-hullámhossz ( $\lambda_T$ ), és a folyékony hélium esetén 3–4 K hőmérsékleten az atomok közötti távolság ( $R$ ) nagyságrendjébe esik. Így érthető, hogy ilyen és ennél alacsonyabb hőmérsékleteken a folyékony hélium viselkedése jellegzetes kvantumeffektusokat mutat. (Ezért használatos a kvantumfolyadék elnevezés is.) Kvantumeffektus maga az a tény is, hogy a hélium egészen az abszolút zérus pontig folyadék marad. A hélium kitüntetett szerepét az magyarázza, hogy az atomok között ható erők viszonylag gyengék (Van der Waals-erők), ugyanakkor az atomok kis tömegük miatt nagy zérusponti rezgéssel rendelkeznek, s ez túlságosan nagy ahhoz, hogy megengedje a szilárd halmazállapotba történő kondenzációt, melynek a klasszikus fizika szerint be kellene következnie.

A  $\text{He}^3$  és  $\text{He}^4$  folyadékok forráspontjaik közelében (3.19 K, ill. 4.21 K) még egymáshoz meglehetősen hasonlóan viselkednek, alacsonyabb hőmérsékleteken azonban megszűnik a hasonlóság. A folyékony  $\text{He}^4$  telített gőz nyomáson,  $T_\lambda = 2.172$  K hőmérsékleten latens hő nélküli, tehát másodrendű fázisátalakuláson megy át. A fázisátmenet hőmérséklete a nyomás növelésével csökken. Az ábra a  $\text{He}^4$  fázisdiagramját adja meg.





A tapasztalat szerint a fajhő hőmérsékletfüggése logaritmikus szingularitást mutat. A következő ábrán láthatjuk, hogy ez egy lambda-hoz hasonló görbét ad a fázisátalakulási pont körül, ezért a fázisátalakulás helyét lambda-pontnak is szokás nevezni. A folyadékot e fölött He I-nek, ez alatt He II-nek hívjuk.



A He I folyadék normál viselkedésével szemben a He II folyadék számos rendkívüli tulajdonsággal rendelkezik, melyek közül a szuperfolyékonyság a legnevezetesebb. Ez

egyéb jellegzetességek mellett abban áll, hogy a folyadék mérhető viszkozitás nélkül folyik keresztül kapillárisokon. (Viszkozitása legalább  $10^6$ -szor kisebb, mint a He I folyadéké.)

A  $\text{He}^3$  folyadék egészen alacsony hőmérsékletekig nem mutat fázisátmenetet. Az utóbbi években azonban bebizonyosodott, hogy néhányszor  $10^{-3}$  K alatt a  $\text{He}^3$  is szuperfolyékony lesz. A továbbiakban ezzel a nagyon alacsony hőmérsékleti viselkedéssel csak röviden foglalkozunk. A  $\text{He}^3$  tulajdonságai 0.1 K alatt (és  $10^{-3}$  K fölött) igen jellegzetesek. A fajhő a hőmérséklettel közel lineárisan változik, a szuszceptibilitás nem követi a Curie-törvényt, hanem állandó lesz. Ezek a hőmérsékletfüggések teljesen különböznek a forráspont körülektől, és hasonlítanak az ideális, Fermi-statisztikának eleget tevő gáz törvényszerűségeihez. A  $\text{He}^3$  atomok  $1/2$  spinű fermionok, ezért eléggé alacsony hőmérsékleten, ahol a kvantumeffektusok kifejezésre jutnak, a statisztikai természetű tényezőknek fontos szerep jut. A  $\text{He}^3$  és a  $\text{He}^4$  folyadék tulajdonságai közötti különbségnek is az a fő oka, hogy a  $\text{He}^3$  atomok Fermi-, a  $\text{He}^4$  atomok pedig Bose-statisztikának tesznek eleget. A  $\text{He}^3$  atomokból álló folyadék szokásos elnevezése Fermi-folyadék, a  $\text{He}^4$  atomokból álló pedig Bose-folyadék. Valószínű, hogy a  $\text{He}^4$  folyadékban a lambda fázisátalakuláskor az atomok Bose–Einstein-kondenzációja megy végbe, amikor is a zérus impulzusú állapotba makroszkopikusan nagy számú részecske kerül.

A kvantumfolyadékok viselkedésének megértése szempontjából a kvantumstatisztika szerepe mellett hangsúlyoznunk kell a részecskék közötti kölcsönhatás fontosságát is. A kölcsönhatás gyengébb, mint a többi folyadékban, de elég erős ahhoz, hogy semmilyen perturbációszámítással ne lehessen kezelni. Ennek tulajdonítható, hogy az eddig tárgyalt Fermi-, ill. Bose-gáz konkrét tulajdonságaitól való eltérések meglehetősen jelentősek. Annak ellenére viszont, hogy a részecskék közötti kölcsönhatás viszonylag erős, és hogy kvantummechanikai sokrészecske rendszerrel van dolgunk, a kvantumfolyadékok tulajdonságai jobban tárgyalhatók, mint a klasszikus folyadékoké. Ennek magyarázatát az elemi gerjesztések adják meg.

## V.8. Elemi gerjesztések

Az erősen kölcsönható rendszerek problémája általánosan nincs megoldva. Alacsony hőmérsékleten azonban ezek a rendszerek is jól tárgyalhatók az ún. elemi gerjesztések fogalmának bevezetésével. Erre az ad lehetőséget, hogy – amint azt a kvantumfolyadékok példáján az előző fejezetben is láttuk – a kísérletek eredményei szerint a kondenzált anyagok alacsony hőmérsékleti viselkedése sok szempontból az ideális kvantumgázok viselkedéséhez hasonló. A konkrét számítások azt mutatják, hogy ezen rendszerekhez található olyan transzformáció, mellyel állandó sűrűség és külső tér esetén a Hamilton-operátor közelítőleg diagonalizálható, s a rendszer adott állapotbeli energiája a következő alakú lesz:

$$E = E_0 + \sum_{\mathbf{p},s} \varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(0)} \delta n_{\mathbf{p},s} + \dots \quad (\text{V.81})$$

Az (V.81) kifejezés formáját tekintve hasonlít a gyengén kölcsönható, alacsony hőmérsékletű Fermi-gázra kapott (V.72) egyenlethez. Erősen kölcsönható rendszerekben  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(0)}$  nem ismert, méréssel vagy elméleti megfontolásokkal kell meghatározni. Az

egyres tagok szemléletes jelentése ugyanúgy állapítható meg, amint azt az V.6. fejezetben láttuk. Most azonban  $\delta n_{\mathbf{p},s}$  nem az alapállapotú eloszláson kívül eső részecskék számát jelenti, hanem új objektumok, az ún. *elemi gerjesztések* számát.  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(0)}$  a  $\mathbf{p}$  impulzusú,  $s$  spinű elemi gerjesztés energiája.  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(0)}$ -t gerjesztési spektrumnak vagy disperzióknak is nevezik. A további tagok az elemi gerjesztések közötti kölcsönhatást írják le, ami alacsony hőmérsékleten állandó sűrűség és külső tér esetén elhanyagolhatóan kicsi.  $E_0$  az alapállapotú energiát jelenti. Ezek alapján (V.81) úgy értelmezhető, hogy a makroszkopikus testek minden gyengén gerjesztett állapota felfogható úgy, mint *közéltőleg független elemi gerjesztések* rendszere. Azt is mondhatjuk, hogy a rendszer tetszőleges gerjesztése csak  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(0)}$  kvantumokban történhet. Erre utal az elemi gerjesztés elnevezés is.

Mielőtt tovább mennénk, hangsúlyoznunk kell, hogy csak a rendszer gerjesztési energiája tekinthető úgy, mint az egyes elemi gerjesztések energiáinak összege.  $E_0$ -t is mérésel, vagy elméleti megfontolással kell meghatározni, de ismerete a legtöbb probléma szempontjából nem lényeges.

Az elemi gerjesztések közötti kölcsönhatás rendszerint megmutatkozik abban, hogy a független elemi gerjesztésekkel leírt állapot általában nem sajátállapota a rendszernek, tehát az elemi gerjesztések véges élettartammal rendelkeznek. Ha kölcsönhatásuk erős, az élettartam rövid, s így nincs is értelme elemi gerjesztésekről beszélni.

A nem nulla hőmérsékleti egyensúlyi tulajdonságok meghatározásához szükség van az energia átlagos értékére is. A rendszer ilyenkor nem írható le hullámfüggvényel, tehát az egyes megengedett állapotokhoz tartozó energiákat még átlagolni kell, vagyis képeznünk kell (V.81) sokaságra vett átlagát. Így

$$E = E_0 + \sum_{\mathbf{p},s} \varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(0)} \delta \bar{n}_{\mathbf{p},s} + \text{az elemi gerjesztések kölcsönhatása.} \quad (\text{V.81}')$$

Az elemi gerjesztések közéltőleg függetlenek, tehát egyensúlyi eloszlásuk a rendszer konkrét tulajdonságaitól függően Fermi-, vagy Bose-eloszlás, melyben az  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(0)}$  spektrum szerepel:

$$\delta \bar{n}_{\mathbf{p},s} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(0)} - \mu)} \pm 1} - n_{\mathbf{p},s}^{(0)}. \quad (\text{V.82})$$

Itt  $\mu$  az elemi gerjesztések gázának kémiai potenciálja.  $n_{\mathbf{p},s}^{(0)}$  a megfelelő ideális kvantum gáz nulla hőmérsékleti eloszlása.

Fontos megjegyeznünk, hogy minden számunkra érdekes fizikai tulajdonságot az eloszlás megváltozásával,  $\delta \bar{n}_{\mathbf{p},s}$ -sel tudunk kifejezni, általában csak ez a mennyiség definiálható jól a elemi gerjesztésekre. Fermion típusú elemi gerjesztések esetén például  $n_{\mathbf{p},s}^{(0)}$  nem értelmezhető a Fermi-felülettől távol, mert az ilyen impulzusú részecskék élettartama már igen rövid. Ezért azután az alapállapotú energia sem fogható fel úgy, mint  $n_{\mathbf{p},s}^{(0)}$  funkcionálja.

Alacsony hőmérsékleten  $\delta \bar{n}_{\mathbf{p},s}$  kicsi, tehát kevés elemi gerjesztés van a rendszerben, s ennek megfelelően kölcsönhatásuk is csekély. Az elemi gerjesztések fogalmát ezért csak alacsony hőmérsékleten lehet használni.

Azt, hogy az elemi gerjesztések melyik kvantum statisztikát követik, minden konkrét rendszerben külön kell meghatározni.

Itt térünk vissza röviden a harmadik főtétel problémaköréhez. Láttuk, hogy a makroszkopikus rendszerek alacsony hőmérsékleti viselkedése  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(o)}$  gerjesztési spektrumú ideális gáz viselkedésének vizsgálatára vezethető vissza. Az ilyen ideális gáz entrópiája is konkrétan meghatározható, s  $T \rightarrow 0$  esetén tényleg nullához tart. Ezért mondhatjuk azt is, hogy az elemi gerjesztésekkel való leírás létjogosultsága a harmadik főtétel igazolásának tekinthető.

Az elemi gerjesztések általában két nagy csoportba oszthatók: *kvázirészecskék*, vagy másnéven egyrészecske gerjesztések és *kollektív gerjesztések*.

A kvázirészecske típusú elemi gerjesztés erősen kötődik a rendszert eredetileg alkotó részecskékhez. Szemléletesen a következő elképzelést alakíthatjuk ki: válasszunk ki egy részecskét a rendszerből. Ez a kölcsönhatás miatt taszítja vagy vonzza a körülötte levő részecskéket, s ily módon körülveszi magát egy részecskefelhővel (esetleg részecskék hiányából álló felhővel). Az eredeti részecske és a távolabbi részecskék közötti kölcsönhatás erőssége ezért lecsökken. Az így kialakult objektumot nevezzük kvázirészecskének, ami ezek szerint más kvázirészecskékkel csak gyengén hat kölcsön. Az egyes kvázirészecskék ezért közelítőleg függetlenek tekinthetők. A felhő jelenléte ugyanakkor érthetővé teszi azt is, hogy a kvázirészecskék egyes tulajdonságai eltérhetnek az eredeti részecskéitől, így például effektív tömegük lehet. Azt, hogy a kvázirészecske nem más, mint az eredeti részecske és azt körülvevő polarizált felhő, úgy is szokták mondani, hogy az eredeti *csupasz* részecske és a *felhő* együttesen a *felöltöztetett részecskét*, a kvázirészecskét alkotják. Ezt a szemléletes terminológiát használva: a csupasz részecskék rendszeréből a kölcsönhatás következtében kialakul a felöltöztetett részecskék közelítőleg kölcsönhatás mentes rendszere. A felhőt alkotó részecskék természetesen cserélődhetnek, de az egész objektum azért még viszonylag stabil marad. Ha kevés kvázirészecske jön létre, akkor köztük csak ritkán történik ütközés. Az ütközés következtében a kvázirészecskék rendszerint más impulzusú állapotba kerülnek át, ezért élettartamuk az átlagos ütközési időnek felel meg.

A fentiek alapján megállapíthatjuk, hogy már korábban is találkoztunk kvázirészecskékkel. A plazmát alkotó csupasz elektronok Coulomb-erővel hatnak kölcsön, de az árnyékolás figyelembevételével a  $\varphi_{\text{eff}}$  Yukawa-kölcsönhatás alakul ki. A  $\varphi_{\text{eff}}$ -vel kölcsönható független részecskék tulajdonképpen a felöltöztetett kvázirészecskék.  $\varphi_{\text{eff}}$  olyan, hogy még magas hőmérsékleten is gyenge a kölcsönhatás, ezért alkalmazható ebben a tartományban is a kvázirészecske kép. A másik, már ismert példa a gyengén kölcsönható Fermi-gáz. A csupasz részecskék a  $v(\mathbf{r})$  potenciállal hatnak kölcsön, a felöltöztetett részecskék viszont a közelítőleg független  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}$  spektrumú részecskék, ahol  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}$ -t (V.56) határozta meg. A kvázirészecske fogalom azért volt használható magas hőmérsékleten is, mert az eredeti kölcsönhatás gyenge volt.

Megemlítünk néhány más példát is a kvázirészecskékre vonatkozóan. A Bloch-elektron a vezetési elektron és a rögzített kristályrács által létrehozott periódikus potenciáltér következtében kialakuló csupasz egyrészecske állapot. Ez a csupasz részecske a többi Bloch-elektronnal történő kölcsönhatása révén módosul, és kialakul egy kvázirészecske. Ha poláros kristályon elektron halad át, az ionok elmozdulnak nyugalmi helyzetükből, az elektront fonon-felhő veszi körül, s létrejön az ún. pola-

ron. Az atommagokban levő nukleonokat az erős rövid hatótávolságú erők miatt más nukleonokból álló felhő övezi, s az így kialakult objektumok közel függetlenek.

Az elemi gerjesztések másik alapvető típusa a kollektív gerjesztés, amely a rendszernek, mint egésznek a gerjesztésével kapcsolatos. Általában valamilyen zavar halad végig a rendszeren, s az így kialakuló *hullám kvantumai* a kollektív gerjesztések.

A kollektív gerjesztések a Bose-statisztikát követik, hiszen tetszőleges számú elemi gerjesztés lehet ugyanabban az állapotban. Másrészt a kollektív gerjesztések számát tekintve nem áll fenn megmaradási követelmény, ezért a fotongázra alkalmazott gondolatmenethez hasonlóan most is belátható, hogy a rájuk vonatkozó kémiai potenciál nulla. Ebből az is következik, hogy számukra az  $n_{\mathbf{p},s}^{(\circ)}$  alapállapotú eloszlás azonosan zérus.

Néhány alapvető példa: A fononok a kondenzált testekben kialakuló hanghullámok kvantumai. Az elektron gázban létrejött sűrűségfluktuációk független elemi gerjesztések, a plazmonok összességének tekinthetők. Ferromágneses anyagokban a spinek mozgása hullámszerűen adódik tovább, létrejön az ún. spinhullám, aminek kvantumai a magnonok. Az atommagokban bekövetkező rezgési és forgási mozgásokhoz is rendelhetők kollektív gerjesztések.

Befejezésül megjegyezzük, hogy egy adott rendszeren belül egyszerre több fajta elemi gerjesztés is előfordulhat. A fémek elektrongázában például egyszerre léphetnek föl plazmonok és árnyékolt elektronokból kialakuló kvázirészecskék.

## V.9. A $\text{He}^3$ folyadék

A Fermi-folyadék kvázi-részecskéinek definiálása céljából tekintsünk egy olyan ideális Fermi-gázt, amelynek sűrűsége megegyezik a folyadék sűrűségével. Az alapállapotban, zérus hőmérsékleten, a részecskék a  $p_F$  sugarú Fermi-gömbön belül helyezkednek el, tehát  $n_{\mathbf{p},s}^{(\circ)} = 1$ , ha  $p \leq p_F$ , és zérus egyébként. Láttuk, hogy ha egyetlen  $\mathbf{p}'$  impulzusú,  $s'$  spinű részecskét helyezünk el a Fermi-felületen kívül, akkor

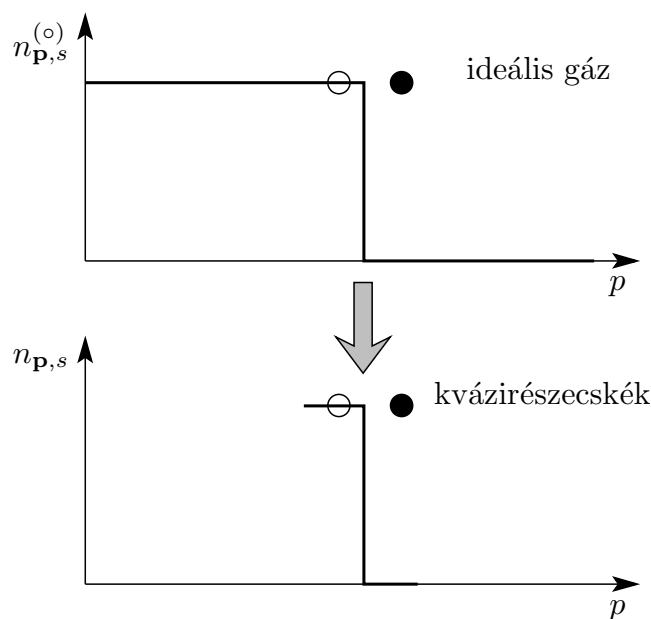
$$\delta n_{\mathbf{p},s} = \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \delta_{s,s'} \quad (p > p_F).$$

Ha viszont egy részecskét elveszünk az alapállapotban lévő rendszerből, lyuk keletkezik a Fermi-felületen belül, és

$$\delta n_{\mathbf{p},s} = -\delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \delta_{s,s'} \quad (p < p_F).$$

Az előbbi *részecske*, az utóbbi *lyuk gerjesztésnek* nevezzük, és ezek alkotják a Fermi-gáz elemi gerjesztéseit. A rendszer egy gerjesztett állapotát jellemezhetjük az ezen állapotban lévő részecske és lyuk gerjesztések összességével. Ha a részecskék száma állandó, a részecske és a lyuk gerjesztések számainak egyenlőnek kell lenniük. Kapcsoljuk most be a részecskék közötti kölcsönhatást végtelenül lassan a zérus értékről a folyadékban uralkodó tényleges értékre. Feltesszük, hogy ilyen adiabatikus feltételek mellett a Fermi-gáz alapállapota fokozatosan átmegy a kölcsönható rendszer alapállapotába, a többi sajátállapot pedig a kölcsönható rendszer valamelyik állapotába; a szintek klasszifikálása változatlan marad. (Ez a feltevés szuperfolyékony fermion

rendszer esetén, mint pl. szupravezető anyag elektrongázában vagy a szuperfolyékony He<sup>3</sup>-ban, nem teljesül, a kölcsönhatás ebben az esetben alapvetően módosítja a rendszer tulajdonságait.) Ilyen módon a folyadék és az ideális gáz állapotai között kölcsönösen egyértelmű megfeleltetés lesz, és a folyadék egy állapota egyértelműen jellemezhető, ha megadjuk  $\delta n_{\mathbf{p},s}$ -t. Az ideális gáz minden egyes részecskéje egy kvázirészecskébe transzformálódik, mely a részecskéből és az azt körülvevő polarizációs felhőből áll. Hasonlóan, az ideális gáz egy lyuk gerjesztéséből a folyadék egy kvázilyuk gerjesztését kapjuk.  $\delta n_{\mathbf{p},s}$ -ben kvázirészecskékre  $p > p_F$ , míg kvázilyukakra  $p < p_F$ . Eljárásunkból következik, hogy  $p_F$  és a rendszer sűrűsége közötti kapcsolat ugyanaz marad, mint a szabad gáz esetében, azaz  $n = (3\pi)^{-1}(p_F/\hbar)^3$ . Az adiabatikus bekapcsolás után, az alapállapot kivételével, az állapotok nem lesznek a kölcsönható rendszer egzakt energia sajátállapotai. Más szóval a kvázirészecskék és kvázilyukak élettartama véges lesz. Kimutatható azonban, hogy pl. zérus hőmérsékleten az élettartam a Fermi-felülettől mért energia négyzetével fordítottan arányos, így a Fermi-felülethez elég közel jól definiálhatók az elemi gerjesztések. A továbbiakban mindig szem előtt tartjuk, hogy eljárásunknak csak akkor van értelme, ha  $\delta n_{\mathbf{p},s}$  csak a Fermi-felület környezetében különbözik zérustól. A megfeleltetést a következőképpen szemléltethetjük:



Adott gerjesztett állapot energiája nyilván valamilyen funkcionálja az  $n_{\mathbf{p},s}$  kvázirészecske eloszlásnak. Ahhoz, hogy a kvázirészecske kép érvényes legyen,  $\delta n_{\mathbf{p},s}$  csak a Fermi-felület körüli kis tartományban különbözhet zérustól, és ott is  $\delta n_{\mathbf{p},s} \ll 1$ . Az energia tehát kifejezhető a következő formában:

$$E = E_0 + \sum_{\mathbf{p},s} \varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(o)} \delta n_{\mathbf{p},s} + \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{p},\mathbf{p}' \\ s,s'}} f_{\mathbf{p},s,\mathbf{p}',s'} \delta n_{\mathbf{p},s} \delta n_{\mathbf{p}',s'} + \mathcal{O}(\delta n^3).$$

A fenti összefüggésben  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(o)}$  és  $f_{\mathbf{p},s,\mathbf{p}',s'}$  ismeretlen paraméterek, de a kifejezés alakilag

teljesen megegyezik az alapállapot közelében levő Fermi-gáz Hartree–Fock-közelítésben kapott energiájával.  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(o)}$  és  $f_{\mathbf{p},s,\mathbf{p}',s'}$  konkrét alakját ott sehol nem használtuk ki, ezért az V.6. fejezet azon eredményei, melyekben csak  $f_0^{sz}$ ,  $f_0^a$  és  $m^*$  szerepel, a He<sup>3</sup> folyadékra is átvihetők.

Most is az a helyzet, hogy a részecske és lyuk típusú gerjesztések egyszerre fordulnak elő a Fermi-szinthez közel eső nagyságú, de ellenkező előjelű energiával, ezért makroszkopikus  $\delta n_{\mathbf{p},s}$  esetén a második tag is makroszkopikus nagyságrendű. Az általános kvázirészecske formalizmushoz visszatérve ez azt jelenti, hogy az (V.81)-ben kicsinek feltételezett tag nem elhanyagolható, az  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(o)}$  energiájú objektumok tehát nem tekinthetők kvázirészecskéknek, hiszen kölcsönhatásuk egyáltalán nem csekély. Lehetőség van azonban arra, hogy éppen úgy, ahogy a Hartree–Fock-közelítésben láttuk, figyelembe vegyük az  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(o)}$  energiájú objektumnak a többi gerjesztett objektummal történő kölcsönhatását (l. (V.76)), s így az

$$\varepsilon_{\mathbf{p},s} = \varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(o)} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}',s'} f_{\mathbf{p},s,\mathbf{p}',s'} \delta n_{\mathbf{p}',s'}$$

energiájú, immár közelítőleg független, tehát kvázirészecskének nevezhető objektumokkal írjuk le a rendszert. A kvázirészecskék definíciójakor láttuk, hogy az ideális Fermi-gáz és a Fermi-folyadék állapotai között egyértelmű megfeleltetés áll fenn. Az entrópia kiszámítása pusztán kombinatorikai feladat, s így könnyű belátni, hogy a kvázirészecskék egyensúlyi eloszlása a Fermi-eloszlás lesz, tehát:

$$n_{\mathbf{p},s} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{p},s} - \mu)} + 1}.$$

Egyensúlyi mennyiségek számolásakor  $E$ -ben  $\delta n_{\mathbf{p},s}$  helyett  $\delta \bar{n}_{\mathbf{p},s} = \bar{n}_{\mathbf{p},s} - n_{\mathbf{p},s}^{(o)}$  írandó.

Most is bevezethető az  $f_0^{sz}$  és a  $f_0^a$  kombináció és ismét az

$$\varepsilon_{\mathbf{p},s} = \varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(o)} + f_0^{sz} \frac{\delta N}{V} + f_0^a \frac{\delta N_s - \delta N_{-s}}{V} \quad (\text{V.83})$$

összefüggést kapjuk.  $\delta N_s = \sum_{\mathbf{p}} \delta \bar{n}_{\mathbf{p},s}$ , mivel azonban az ideális Fermi-gáz és a kölcsönható rendszer között egyértelmű megfeleltetés van, a kvázirészecskék számának változása meg kell egyezzen a valódi részecskék számának változásával.  $\delta N$  tehát a részecskeszám változást jelenti,  $\delta N_s - \delta N_{-s}$  pedig a mágnesezettség változásával arányos.  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(o)}$  most sem függhet a spin irányától, a He<sup>3</sup> rendszer is izotróp, ezért az  $m^*$  effektív tömeg ugyanúgy definiálható, mint korábban (l. (V.77)),

$$\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(o)} = \mu + \frac{p_F}{m^*} (p - p_F). \quad (\text{V.84})$$

Az  $f_0^{sz}$ ,  $f_0^a$ ,  $m^*$  paramétereket most mérésrel kell meghatározni. Az egyensúlyi mennyiségek ugyanúgy fejezhetők ki, amint azt az V.6. fejezetben láttuk. (V.80) szerint

$$C_V = \frac{\pi^2}{3} \nu k_B^2 T,$$

ahol

$$\nu = \frac{Vm^*p_F}{\pi^2\hbar^3}.$$

$C_V$  mérésével meg lehetett határozni, hogy

$$\frac{m^*}{m_{\text{He}^3}} = 2.88.$$

Ez azt jelenti, hogy a csupasz He atomok között nagyon erős a kölcsönhatás, hiszen nagy effektív tömeget hoz létre.

A kompresszibilitás (l. (V.77')):

$$\kappa_T(T=0) = \frac{1}{Nn} \frac{\nu}{1 + \frac{\nu}{N} f_0^{sz}}.$$

Méréséből

$$\frac{\nu f_0^{sz}}{V} = 9.63.$$

Ha a kvázirészecskék kölcsönhatása gyenge lenne, akkor  $\nu f_0^{sz}/V \ll 1$  lenne. A mérés ennek ellenkezőjét igazolja.

Lényeges megemlíteni, hogy az elemi gerjesztés energiájának a kvázirészecskék eloszlásával történő (V.76)-beli kifejezését azért tudtuk felhasználni a kompresszibilitás meghatározásakor, mert a kvázirészecskék és a valódi részecskék között egyértelmű megfeleltetés van. A sűrűségváltozás, azaz a csupasz részecskék számának megváltozása ezért egyenlő a kvázirészecskék számának megváltozásával. Hasonló eljárást kollektív gerjesztések esetén nem alkalmazhatunk.

A szuszceptibilitás számításakor  $\varepsilon_{\mathbf{p}\uparrow}$ -ben most  $-\mu_N H$  jelenik meg, ahol  $\mu_N$  a magmagneton, hiszen a  $\text{He}^3$ -nak csak magspinje van ( $S = 1/2$ ).  $\chi_T$  ettől eltekintve ugyanaz, mint a Hartree-Fock-közelítésben (l. (V.79)),

$$\chi_T = \frac{\mu_N^2 \nu}{1 + \frac{\nu}{V} f_0^a}.$$

A csupasz részecskék és a kvázirészecskék közötti egyértelmű megfeleltetés itt is éppen olyan fontos szerepet játszik, mint a kompresszibilitás esetén. A mérésből:

$$\frac{\nu f_0^a}{V} = -0.685.$$

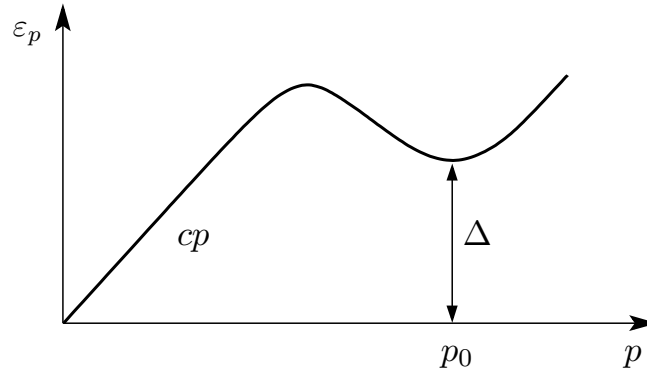
A kölcsönhatás tehát kb. háromszorosára növeli az  $\varepsilon_{\mathbf{p},s}^{(o)}$  spektrumú "kvázirészecskék-ből" adódó szuszceptibilitást. Ha  $\nu f_0^a/V = -1$  lenne, akkor elérkeznénk az instabilitási ponthoz. Ez nem áll fenn, tehát a  $\text{He}^3$  nem lesz ferromágneses  $T = 0$  hőmérsékleten sem, de már közel van az átalakuláshoz, ezért az átalakulásra jellemző spinfluktuációk már nagyok a  $\text{He}^3$  folyadékban.

Az elméletben szereplő három paraméter,  $f_0^{sz}$ ,  $f_0^a$  és  $m^*$  értékét az egyensúlyi mennyiségek mérése meghatározta. A kinetikus viselkedést leíró mennyiségeket (pl. hővezetési együttható, hangcsillapodás) szintén ki lehet elméletileg számítani, s azokban is a fenti három paraméter szerepel. E mennyiségek mérése azt bizonyította, hogy a  $\text{He}^3$  folyadék itt ismertett elmélete konzekvens.



## V.10. A He<sup>4</sup> folyadék – szuperfolyékonyság

A He<sup>3</sup>-ban egyértelmű megfeleltetést sikerült találnunk az elemi gerjesztések (ezek kvázirészecskék voltak) és az ideális Fermi-gáz gerjesztései között. Nulla hőmérsékletű Bose-folyadékban ez nem vihető végbe, mert az ideális Bose-gáz alapállapota nagyon erősen degenerált: a kondenzáció miatt minden részecske a nulla impulzusú állapotban van. Landau a mérési eredmények alapján arra következtetett, hogy nyugvó folyadékban az elemi gerjesztések spektruma a következő alakú:



Az elemi gerjesztések energiája – mint az impulzus függvénye – lineáris szakasszal kezdődik:  $\varepsilon_{p,f} = cp$ , ahol  $c$  a hang terjedési sebessége a folyadékban. Ezek az elemi gerjesztések tehát longitudinális fononoknak felelnek meg. Nagyobb impulzus értékeknél a görbének minimuma van, amelynek közelében  $\varepsilon_{p,r} = \Delta + (p - p_0)^2/2m$ . Landau az elemi gerjesztéseket ebben a tartományban rotonoknak nevezte el. A spektrumban szereplő állandókat úgy választotta meg, hogy a számított értékek a fajhő és egyéb fizikai mennyiségek tapasztalati értékével megegyezzenek. Később lassú neutronok szóródásának segítségével közvetlenül is sikerült meghatározni a gerjesztési spektrumot, mely jól egyezett a Landau által feltételezett alakkal. Az állandók jelenleg legpontosabban mért értékei a következők:

$$\frac{\Delta}{k_B} = 8.6 \text{ K}, \quad \frac{p_0}{\hbar} = 19.1 \text{ nm}^{-1}, \quad \mu = 0.16 m_{\text{He}^4}.$$

Az elemi gerjesztések Bose-statisztikának tesznek eleget, aminek megfelelően az egyenúlyi eloszlásfüggvény:

$$\bar{n}_p = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_p} - 1}.$$

Az elemi gerjesztések száma nem állandó, s ezért kémiai potenciáljuk nulla. A rotonok esetében  $\beta\Delta$  nagy értéke miatt jó közelítéssel használhatjuk az  $\bar{n}_{p,r} = \exp(-\varepsilon_{p,r}/k_B T)$  Boltzmann-féle eloszlásfüggvényt. Kb. 0.8 K hőmérsékletig gyakorlatilag csak a fononok gerjesztődnek, e hőmérséklet felett megjelennek a rotonok is. Számuk lényegesen nagyobb, mint a velük egyenlő energiájú fononoké, mert az állapotsűrűség, ami  $dp/d\varepsilon$ -nal arányos, a roton minimuma közelében nagy. Így a különböző fizikai mennyiségekben a lényeges járulékot a kis energiájú fononok és a rotonok szolgáltatják.

A fenti spektrummal definiált elemi gerjesztések spinje nulla. A  $\text{He}^4$  folyadékot alkotó valódi részecskék és az elemi gerjesztések között nincs egyértelmű megfeleltetés, a gerjesztés a rendszernek mint egésznek a mozgásával kapcsolatos, ezért *kollektív gerjesztésekről* van szó. A továbbiakban csak állandó sűrűségű és külső tér nélküli rendszert vizsgálunk, az elemi gerjesztések jó közelítéssel függetlennek tekinthetők.

Az alacsony hőmérsékletű  $\text{He}^4$  folyadék jellegzetes tulajdonsága a szuperfolyékonyság. Vizsgáljunk egy olyan szűk kapillárist, amelyben a surlódás miatt minden közönséges folyadék azonnal megállna.  $T > T_\lambda$  esetén a  $\text{He}^4$  sem folyik keresztül a kapillárison,  $T < T_\lambda$  hőmérsékletekre azonban a viszkozitás hirtelen lecsökken, s a folyadék megfigyelhető lassulás nélkül áramlik.

Az elemi gerjesztés-kép nagy sikere, hogy a Landau-spektrum segítségével a szuperfolyékonyság megmagyarázható.

Válasszuk a hőmérsékletet először az abszolút zérus pontnak, s tegyük föl, hogy a folyadék alapállapotában van. Vizsgáljuk a szuperfolyékony folyadék mozgását, amint konstans  $\mathbf{v}$  sebességgel halad át a kapillárison. A viszkozitás abban nyilvánulna meg, hogy a cső falán és a folyadék belsejében fellépő surlódás következtében a folyadék kinetikus energiája disszipálódna, és az áramlási sebesség fokozatosan lecsökkenne.

Válasszunk kezdetben a folyadékkal együttmozgó koordinátarendszert ( $\mathbf{K}$ ), amelyben a kapilláris  $-\mathbf{v}$  sebességgel mozog. Ha viszkozitás van jelen, a nyugvó hélium mozogni kezd. Nyilvánvaló, hogy nem közvetlenül az egész folyadék jön mozgásba, hanem belső mozgások fokozatos gerjesztése – azaz elemi gerjesztések megjelenése – útján jön létre a makroszkopikus mozgás. Tegyük fel, hogy keletkezett egy  $\mathbf{p}$  impulzusú és  $\varepsilon_p$  energiájú gerjesztés. Akkor a folyadék  $\mathbf{P}$  impulzusa egyenlő a gerjesztés  $\mathbf{p}$  impulzusával:

$$\mathbf{P} \equiv \sum_i m_i \mathbf{v}_i = \mathbf{p}.$$

(V.81) szerint pedig:

$$E = E_0 + \varepsilon_p = K_0 + U_0 + \varepsilon_p,$$

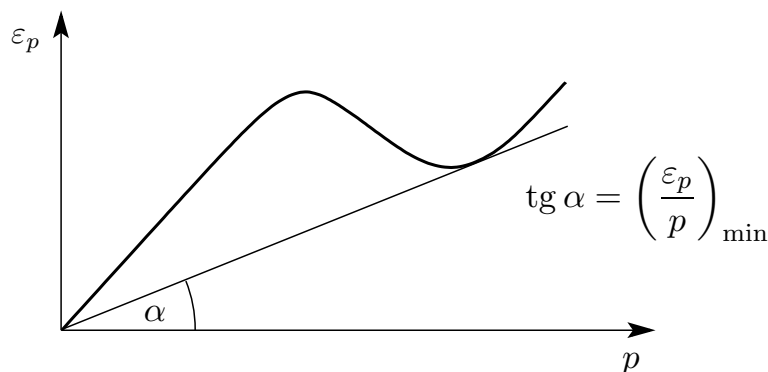
ahol  $K_0 \equiv \sum_i m_i v_i^2/2$  és  $U_0$  az alapállapotbeli mozgási és kölcsönhatási energia.

Térjünk át most a kapillárishoz rögzített koordinátarendszerre ( $\mathbf{K}'$ ). A kölcsönhatási energia,  $(U_0 + \varepsilon_p)$  csak a relatív koordinátáktól függ, tehát nem transzformálódik. A  $\mathbf{K}'$ -beli teljes kinetikus energia viszont  $\sum_i m_i (\mathbf{v}_i + \mathbf{v})^2/2$  lesz, az impulzus pedig  $\sum_i m_i (\mathbf{v}_i + \mathbf{v})$ . Ezért:

$$\begin{aligned} E' &= U_0 + \varepsilon_p + \sum_i \frac{1}{2} m_i v_i^2 + \mathbf{P}\mathbf{v} + \frac{1}{2} M v^2 \\ &= E_0 + \varepsilon_p + \mathbf{P}\mathbf{v} + \frac{1}{2} M v^2; \\ \mathbf{P}' &= \mathbf{P} + M\mathbf{v}. \end{aligned}$$

Itt  $M$  a folyadék teljes tömege,  $Mv^2/2$  adja a mozgó folyadék kezdeti kinetikus energiáját,  $\varepsilon_p + \mathbf{p}\mathbf{v}$  pedig a gerjesztés következtében fellépő energiaváltozást. Az utóbinak negatívnak kell lennie, minthogy a mozgó folyadék energiájának csökkennie

kell:  $\varepsilon_p + \mathbf{p}\mathbf{v} < 0$ . Adott  $\mathbf{p}$  esetén a baloldal akkor a legkisebb, ha  $\mathbf{p}$  és  $\mathbf{v}$  ellentétes irányúak, amiből  $\varepsilon_p - pv < 0$ , azaz  $v > \varepsilon_p/p$ . Annak a feltételét tehát, hogy a mozgó folyadékban gerjesztések jelenjenek meg, oly módon kapjuk, hogy megkeressük  $\varepsilon_p/p$  minimumát.  $\varepsilon_p/p$  az origótól az  $\varepsilon_p$  görbéhez húzott egyenes iránytangense, és minimumát ott kapjuk, ahol ez az egyenes a görbét érinti.



Ha ez a minimális érték különbözik zérustól, akkor kis folyási sebességeknél gerjesztések nem keletkezhetnek. Ez annyit jelent, hogy a folyadék nem lassul le, azaz szuperfolyékony. A szuperfolyékonyság feltétele arra az egyszerű követelményre redukálódik, hogy az  $\varepsilon_p$  görbe ne érintse az abszcisszát az origóban (elhanyagolva azt a valószínűtlen lehetőséget, hogy ezt a tengelyt esetleg máshol érinti). Szuperfolyékonyság tehát felléphet minden olyan spektrum esetén, amelynél a legalacsonyabb energiájú gerjesztések fononok. Egyben az is következik, hogy egy szabad Bose-gáz, amelynek energiaspektruma  $p^2/2m$ , nem lesz szuperfolyékony.

Ugyanerre az eredményre jutunk a következő gondolatmenettel is. Képzeljük el, hogy nulla hőmérsékletű, nyugvó szuperfolyékony héliumot tartalmazó edényben mozog egy  $m$  tömegű makroszkopikus test, melynek sebessége  $\mathbf{v}$ . Azt vizsgáljuk, hogy milyen feltételek mellett keletkezhetnek elemi gerjesztések a folyadékban. Surlódásos mozgás akkor jön létre, ha kialakulnak elemi gerjesztések. Tegyük föl, hogy adott pillanatban létrejön az  $\varepsilon_p$  energiájú,  $\mathbf{p}$  impulzusú elemi gerjesztés. Az energia-, és impulzus-megmaradás szerint igazak a következő összefüggések:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}mv^2 &= \frac{1}{2}mv'^2 + \varepsilon_p, \\ m\mathbf{v} &= m\mathbf{v}' + \mathbf{p}. \end{aligned}$$

$\mathbf{v}'$  az  $m$  tömegű test sebessége a folyadék gerjesztése után. A két egyenletből:

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{p} = \frac{p^2}{2m} + \varepsilon_p.$$

Surlódás csak olyan  $\mathbf{v}$  esetében jöhet létre, melyre a fenti feltétel valamely  $\mathbf{p}$  impulzussal teljesül. Adott  $\mathbf{p}$  mellett  $\mathbf{v}$  akkor a legkisebb, ha  $\mathbf{p}$  és  $\mathbf{v}$  azonos irányúak, ekkor

$$v = \frac{p}{2m} + \frac{\varepsilon_p}{p}.$$

A mozgó test makroszkopikus, ezért  $p/m \ll \varepsilon_p/p$ , és így

$$v \approx \frac{\varepsilon_p}{p}.$$

Abban az esetben, ha  $\varepsilon_p/p$  minimuma nem nulla, létezik olyan sebesség, méghozzá a

$$v_{\text{krit}} = \left( \frac{\varepsilon_p}{p} \right)_{\text{min}}, \quad (\text{V.85})$$

melynél kisebb sebességre nem surlódásos a mozgás. Az ilyen folyadék szuperfolyékony. A most kapott feltétel azonos a korábban talált feltétellel, noha a gondolatmenet egészen más jellegű.

Legyen most a folyadék hőmérséklete közel 0 K, de az abszolút zérus ponttól különböző. Ebben az esetben a folyadék gerjesztéseket tartalmaz. Ha a szuperfolyékony áramlás fenti feltétele teljesül, az most annyit jelent, hogy a folyadék mozgásának következményeképpen, újabb gerjesztések nem léphetnek föl. Vizsgáljuk meg, hogy milyen következményei vannak a már jelenlévő gerjesztéseknek. Olyan feltételek mellett, hogy a gerjesztett kvázirészecskék gyakran szóródnak a cső falán, a kvázirészecskék és a cső fala között egyensúlyi állapot alakul ki. A kvázirészecskék gáza tehát lelassul, éppúgy, mint a kapillárison keresztüláramló közönséges gáz. Legyen, mint előbb, a folyadék áramlási sebessége a kapillárishoz rögzített koordinátarendszerben  $\mathbf{v}$ . Ebben a vonatkoztatási rendszerben, mint láttuk, egy elemi gerjesztés energiája  $\varepsilon_p + \mathbf{p}\mathbf{v}$  lesz. Mivel a cső fala  $T$  hőmérsékletű termosztátnak felel meg, és a kvázirészecskék ezzel termodinamikai egyensúlyban vannak, a Bose–Einstein-eloszlásfüggvény  $\varepsilon_p + \mathbf{p}\mathbf{v}$ -t és nem  $\varepsilon_p$ -t fogja tartalmazni. A gáz teljes impulzussűrűsége a folyadékkal együtt mozgó koordinátarendszerben tehát:

$$\mathbf{J}_0 = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{p} \bar{n}(\varepsilon_p + \mathbf{p}\mathbf{v}) = \int \mathbf{p} \bar{n}(\varepsilon_p + \mathbf{p}\mathbf{v}) \frac{d^3\mathbf{p}}{h^3}. \quad (\text{V.86})$$

Tegyük fel, hogy  $\mathbf{v}$  kicsi, és fejtsünk sorba  $\mathbf{p}\mathbf{v}$  szerint. A nulladrendű tag járuléka természetesen zérus, az elsőrendűé pedig a következő alakra hozható:

$$\mathbf{J}_0 = -\rho_n \mathbf{v}.$$

Tekintsük ugyanis  $z$  tengelynek a  $\mathbf{v}$  vektor egyenesét, ekkor

$$J_{0z} = \int_0^\infty \int_0^\pi p \cos \vartheta p v \cos \vartheta \frac{d\bar{n}(\varepsilon_p)}{d\varepsilon_p} \frac{2\pi d(-\cos \vartheta) p^2 dp}{h^3}.$$

Könnyen belátható, hogy  $J_{0x}$  és  $J_{0y}$  nulla, ami természetes is, hiszen eredő impulzusáramlás csak  $\mathbf{v}$  irányában lehetséges. Felhasználva az

$$\int_0^\pi \cos^2 \vartheta d(-\cos \vartheta) = \int_{-1}^1 x^2 dx = \frac{2}{3}$$

összefüggést leolvashatjuk, hogy

$$\rho_n = \frac{4\pi}{3h^3} \int_0^\infty p^4 \left( -\frac{d\bar{n}(\varepsilon_p)}{d\varepsilon_p} \right) dp. \quad (\text{V.88})$$

Látjuk, hogy a kvázirészecskék gázának a mozgását  $\rho_n$  sűrűségű tömegvándorlás kíséri. Az áramsűrűség a kapillárishoz rögzített koordináta-rendszerben  $\mathbf{J} = \rho_s \mathbf{v}$ , ahol  $\rho_s \equiv \rho - \rho_n$  az ún. szuperfolyékony komponens sűrűsége, s ez a komponens úgy viselkedik, mint a viszkozitással nem rendelkező folyadék. Az áramsűrűség kifejezését tetszés szerinti koordináta-rendszerbe transzformálva azt kapjuk, hogy

$$\mathbf{J} = \rho_s \mathbf{v}_s + \rho_n \mathbf{v}_n, \quad (\text{V.89})$$

ahol  $\mathbf{v}_s$  a szuperfolyékony komponens,  $\mathbf{v}_n$  pedig a normál komponens áramlási sebessége. A szuperfolyékony hélium tehát véges hőmérsékleten úgy tekinthető, mintha két komponensből tevődne össze:  $\rho_n$  sűrűségű viszkózan áramló normális folyadékból és  $\rho_s$  sűrűségű szuperfolyékony komponensből. Látni fogjuk, hogy  $T = 0$  hőmérsékleten az egész folyadék szuperfolyékony, tehát  $\rho_s = \rho$ , a  $T = T_\lambda$  hőmérsékleten pedig eltűnik a szuperfolyékony komponens,  $\rho_s = 0$ .

Értékeljük most ki a fenti  $\rho_n$  kifejezést! Már korábban megállapítottuk, hogy csak a fononok és a rotonok járuléka lesz jelentős. Ennek megfelelően úgy tekintjük a rendszert, mintha független fononok és rotonok összessége lenne, külön számolunk a fononok és a rotonok eloszlásával. A fononok eloszlása a  $|\mathbf{p}| \approx 0$ , a rotonoké pedig a  $|\mathbf{p}| \approx p_0$  tartományon kívül gyorsan levág, ezért nem követünk el nagy hibát, ha mindkét esetben a teljes térre integrálunk.

A fononok járuléka parciális integrálással egyszerűbb alakra írható:

$$\rho_{nf} = -\frac{4\pi}{3h^3c} \int_0^\infty p^4 \frac{d\bar{n}_{p,f}}{dp} dp = \frac{16\pi}{3h^3c} \int_0^\infty p^3 \bar{n}_{p,f} dp.$$

Felhasználva az

$$\int_0^\infty \frac{x^n dx}{e^{ax} - 1} = \frac{1}{a^{n+1}} \Gamma(n+1) \zeta(n+1) \quad (\text{V.90})$$

összefüggést, s a  $\zeta(4) = \pi^4/90$ ,  $\Gamma(4) = 6$ ,  $a = \beta c$  értéket behelyettesítve:

$$\rho_{nf} = \frac{16\pi^5}{45c^2} \left( \frac{k_B T}{hc} \right)^3 k_B T.$$

A rotonokból adódó komponens

$$\rho_{nr} = \frac{4\pi}{3h^3} \frac{e^{-\Delta/k_B T}}{k_B T} \int_0^\infty p^4 e^{-\beta(p-p_0)^2/2\mu} dp.$$

Néhány K-ig  $\beta p_0^2/\mu \gg 1$ , az integrandus tehát nagyon éles függvény a  $p_0$  hely körül, s így jó közelítéssel írhatjuk:

$$\rho_{nr} = \frac{4\pi}{3h^3} \frac{e^{-\Delta/k_B T}}{k_B T} p_0^4 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta(p-p_0)^2/2\mu} dp = \frac{4\pi}{3h^3} p_0^4 \frac{e^{-\Delta/k_B T}}{k_B T} \sqrt{2\mu\pi k_B T}.$$

Ha bevezetjük a  $T$  hőmérsékleten lévő rotonok számát,  $N_r$ -et,

$$N_r = \int \bar{n}_{p,r} \frac{d^3\mathbf{p}}{h^3} = \frac{4\pi e^{-\Delta/k_B T}}{h^3} \int_0^{\infty} p^2 e^{-\beta(p-p_0)^2/2\mu} dp = \frac{4\pi}{h^3} p_0^2 e^{-\Delta/k_B T} \sqrt{2\mu\pi k_B T},$$

(V.91)

$\rho_{nr}$  így írható:

$$\rho_{nr} = \frac{p_0^2}{3k_B T} N_r.$$

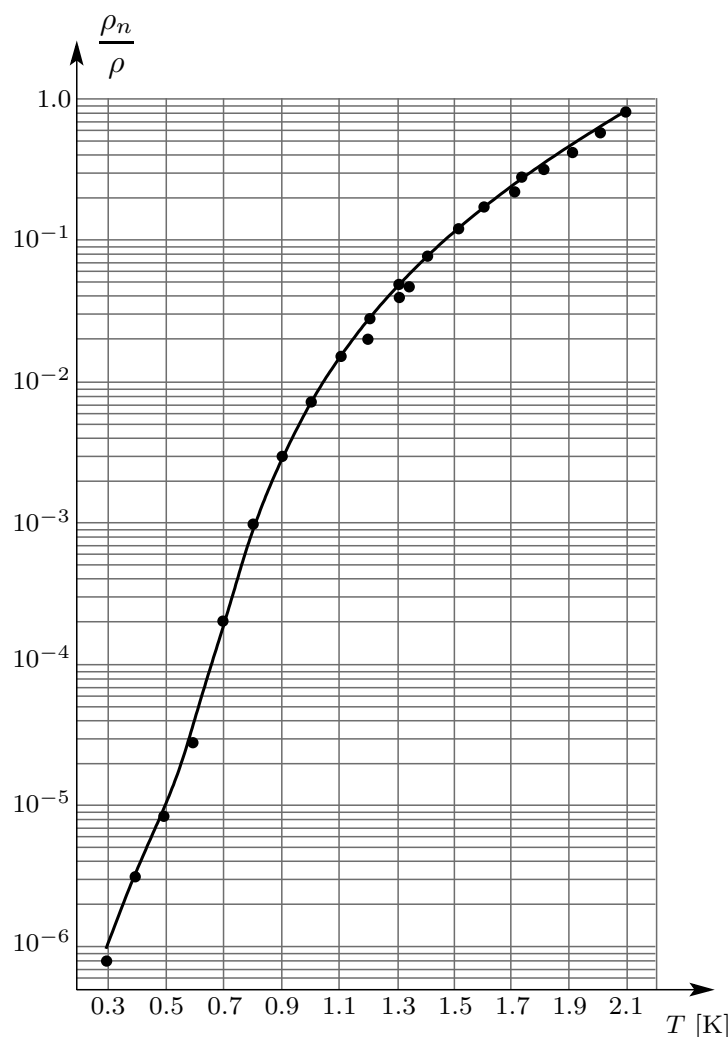
A normál komponens teljes sűrűsége:

$$\rho_n = \rho_{nf} + \rho_{nr}.$$

A fenti kifejezésekből leolvasható, hogy  $\rho_n \rightarrow 0$ , ha  $T \rightarrow 0$ , tehát az egész rendszer szuperfolyékony lesz zérus hőmérsékleten.

$\rho_n$  első közvetlen mérését Andronikasvili végezte el. Vékony korongokat helyezett egymáshoz közel közös tengelyre, majd a vizsgált folyadékba merítve mérte a rendszer torziós rezgéseit. A korongok csak a folyadék normál komponensét ragadták magukkal, és így a tehetetlenségi momentum mérése közvetlenül szolgáltatta  $\rho_n$ -t. A mért és számított értékek 8 % hibahatáron belül 2 K hőmérsékletig megegyeztek. A mérés szerint a hőmérséklet növekedésével  $\rho_n$  is növekszik, és a lambda-pontnál – ahol a szuperfolyékonyság megszűnik – egyenlő lesz a teljes sűrűséggel.

A lambda ponthoz közeli hőmérsékleteken a legújabb mérések szerint a szuperfolyékony sűrűség a  $\rho_s \propto (T_\lambda - T)^{2/3}$  törvényszerűség szerint tart zérushoz. Ebben a tartományban az elemi gerjesztés kép már nem használható. Kimutatható, hogy a másodrendű fázisátalakulások skálatörvényeiből és a fajhő logaritmikus szingularitásából a fenti 2/3-os törvény következik.



Már említettük, hogy a mérések valószínűvé teszik azt, hogy  $T_\lambda$  alatt a  $\text{He}^4$ -et alkotó atomok között Bose–Einstein-kondenzáció történik. A kölcsönhatás miatt természetesen alapállapotban sem lesz az összes atom nulla impulzusú, a kísérletek szerint csak körülbelül 10 %-uk. Ha  $\rho_0$ -al jelöljük a kondenzátum sűrűségét ( $\rho_0 = N_0/V$ ), akkor  $T = 0$  hőmérsékleten  $\rho_0/\rho = 0.1$ , másrészt  $T = T_\lambda$  hőmérsékleten  $\rho_0/\rho = 0$ .  $\rho_0$  nem tévesztendő össze a szuperfolyékony komponens sűrűségével,  $\rho_s$ -sel, hiszen  $T = 0$  hőmérsékleten  $\rho_s/\rho = 1$ . A szuperfolyékony áramlás a kondenzátum áramlásának tekinthető, de az is bebizonyítható, hogy a kondenzátum magával ragadja a folyadék szuperfolyékony komponensének megfelelő részét, zérus hőmérsékleten az egész folyadékot.

Ha  $\mathbf{v}$  sebességgel laminárisan áramló Bose-folyadékot vizsgálunk a kapillárishoz rögzített  $K'$  koordinátarendszerekből, akkor azt mondhatjuk, hogy a kondenzáció a  $\mathbf{v}$  sebességnek megfelelő impulzusállapotba történik. Általános mozgás esetén ez a kijelentés úgy módosul, hogy valamelyik egyrészecske állapotba kondenzálódnak az atomok. Ezáltal makroszkopikusan nagy számú részecske kerül ugyanabba az állapotba, s az egész kondenzátum leírható egyetlen  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  hullámfüggvénnyel. Mivel sok részecske jut ugyanabba az állapotba, a kvantummechanikai jelenség fölerősödik, s

makroszkopikusan is megmutatkozik. Úgy szokták fogalmazni, hogy a szuperfolyékonyság *makroszkopikusan észlelhető kvantumeffektus*. Ezek alapján nem is meglepő, ha valamilyen makroszkopikus fizikai mennyiség kvantált lesz. Ennek egyik legszebb megnyilvánulása a kvantált örvénygyűrűk létezése.

Irjuk a kondenzátum hullámfüggvényét a

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \Phi_0(\mathbf{r}, t)e^{i\varphi(\mathbf{r}, t)}$$

alakba, ahol  $\Phi_0$  és  $\varphi$  valós függvények. Feltéve, hogy  $\nabla\varphi$  elég lassan változik, ez a hullámfüggvény egy  $\mathbf{v}_s(\mathbf{r}, t) = (\hbar/m)\nabla\varphi(\mathbf{r}, t)$  lokális sebességgel való áramlást ír le ( $m$  egy atom tömege).  $\mathbf{v}_s$  definíciójából következik, hogy  $\text{rot}\mathbf{v}_s = 0$ , tehát az  $\oint \mathbf{v}_s d\mathbf{l}$  cirkuláció egyszeresen összefüggő tartományban zérus. A szuperfolyékony folyadék tartálya azonban nemcsak tényleges akadályok jelenléte miatt lehet többszörösen összefüggő, hanem nem-szuperfolyékony tartományok keletkezése által is. Ezek a tartományok örvénymagok, amelyek körül a folyadék forog. A hidrodinamika szerint ugyanis az örvénymagok körüli áramlási sebesség a távolsággal fordítottan arányos. A maghoz elég közel tehát biztosan olyan nagy a sebesség, hogy a folyadék már nem szuperfolyékony. Másrészt  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  szükségképpen egyértékű függvény. Ebből következik, hogy ezekben a tartományokban  $\oint \mathbf{v}_s d\mathbf{l} = (h/m)\nu$ , ahol  $\nu$  egész szám. Az örvényfonalak cirkulációja tehát  $h/m$  egységekben kvantált.

Az örvényfonalak létezését közvetlen kísérletekkel is kimutatták. Ionok mozgását vizsgálták folyékony héliumban, s azt találták, hogy amikor a gyorsított ionok energiája növekedett, sebességük csökkent. Ez oly módon magyarázható, hogy az ion befogódott egy örvénygyűrűbe, és a mérés folyamán az örvénygyűrű mozgását figyelték meg, ami a klasszikus hidrodinamika törvényei szerint írható le. Így azt is meg lehetett határozni, hogy az örvénygyűrű cirkulációja egy kvantumnyi volt.

A részletes elméletet Feynman dolgozta ki, aki az örvényfonalakkal meg tudta magyarázni többek között a szuperfolyékony áramlás kritikus sebességének mért értékeit. A Landau-féle gerjesztési spektrum adatait a  $\min\{\varepsilon_p/p\}$  mennyiségbe helyettesítve ugyanis közelítőleg 65 m/s-ot kapunk, a mért értékek viszont ennél körülbelül két nagyságrenddel kisebbek. Feynman feltételezte, hogy a kritikus sebesség felett az áramlással szembeni ellenállást örvényfonalak keletkezése okozza. Az örvények keltésére vonatkozó kritikus sebességre  $v_{\text{krit}} = \ln(d/a)/(md)$  adódott, ahol  $d$  a kapilláris sugara és  $a$  az örvényfonal magjának mérete.  $10^{-5}$  cm átmérőjű kapilláris esetén  $a$ -t  $10^{-8}$  cm-nek véve, a kritikus sebesség 100 cm/sec lett, ami a mérésekkel megegyezik.

A továbbiakban a termodinamikai mennyiségek meghatározásával foglalkozunk. Az ideális gázok tárgyalásakor láttuk, hogy a szabadenergia sűrűség:

$$F = -k_B T \int \ln(1 + \bar{n}_p) \frac{d^3 \mathbf{p}}{h^3} = k_B T \int \ln(1 - e^{-\beta\varepsilon_p}) \frac{d^3 \mathbf{p}}{h^3}. \quad (\text{V.92})$$

Parciálisan integrálva:

$$\begin{aligned} F &= k_B T \left[ 4\pi \frac{p^3}{3} \ln(1 - e^{-\beta\varepsilon_p}) \right]_0^\infty - k_B T \int \frac{\beta e^{-\beta\varepsilon_p}}{1 - e^{-\beta\varepsilon_p}} \frac{d\varepsilon_p}{dp} \frac{p}{3} \frac{d^3 \mathbf{p}}{h^3} \\ &= -\frac{1}{3} \int \bar{n}_p p \frac{d\varepsilon_p}{dp} \frac{d^3 \mathbf{p}}{h^3}. \end{aligned}$$



Ismét a fonon és roton járulékat számoljuk. Fononokra  $\varepsilon_{p,f} = cp$ , tehát

$$F_f = -\frac{1}{3} \int cp \bar{n}_p \frac{d^3 \mathbf{p}}{h^3} = -\frac{1}{3} E_f.$$

(V.90) felhasználásával:

$$F_f = -\frac{4\pi^5}{45} \left( \frac{k_B T}{hc} \right)^3 k_B T.$$

Ebből az entrópia és a fajhő:

$$S_f = - \left( \frac{\partial F_f}{\partial T} \right)_V = \frac{16\pi^5}{45} k_B \left( \frac{k_B T}{hc} \right)^3,$$

$$C_{Vf} = T \left( \frac{\partial S_f}{\partial T} \right)_V = \frac{16\pi^5}{15} k_B \left( \frac{k_B T}{hc} \right)^3.$$

A rotonokra  $\bar{n}_{p,r}$  Boltzmann-eloszlás, tehát  $\bar{n}_{p,r} \ll 1$ , ezért (V.92) első egyenlősége alapján

$$F_r = -k_B T N_r.$$

Az entrópia és a fajhő pedig:

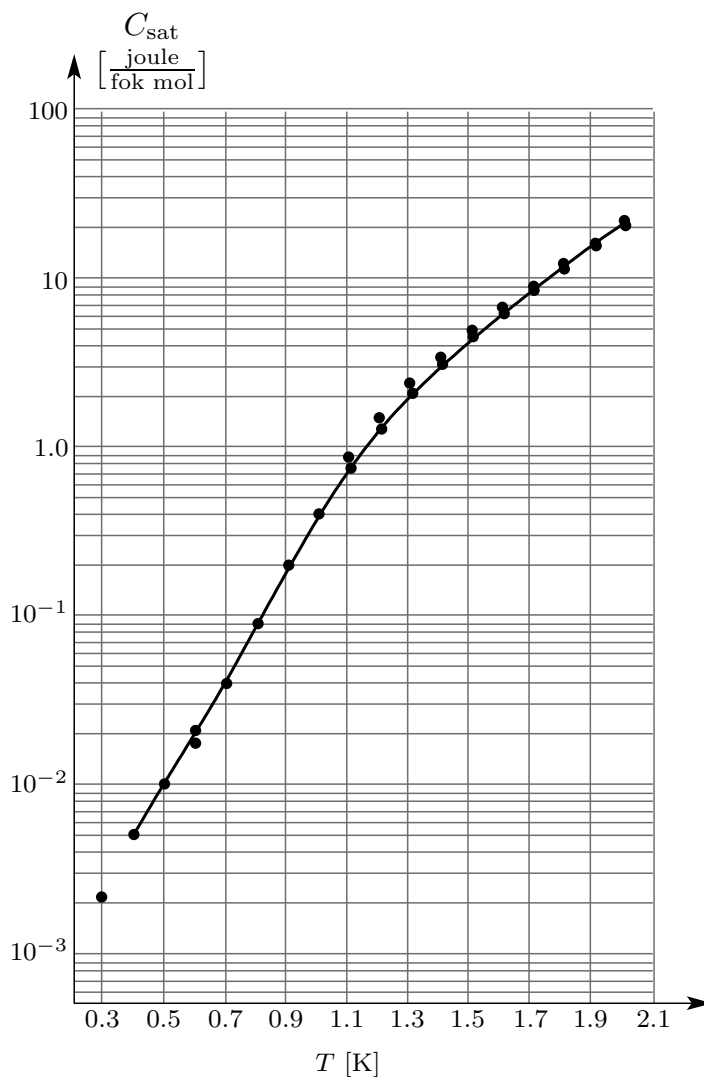
$$S_r = k_B N_r \left( \frac{\Delta}{k_B T} + \frac{3}{2} \right),$$

$$C_{Vr} = k_B N_r \left( \frac{\Delta^2}{k_B^2 T^2} + \frac{\Delta}{k_B T} + \frac{3}{4} \right).$$

A teljes fajhő:

$$C_V = C_{Vf} + C_{Vr}.$$

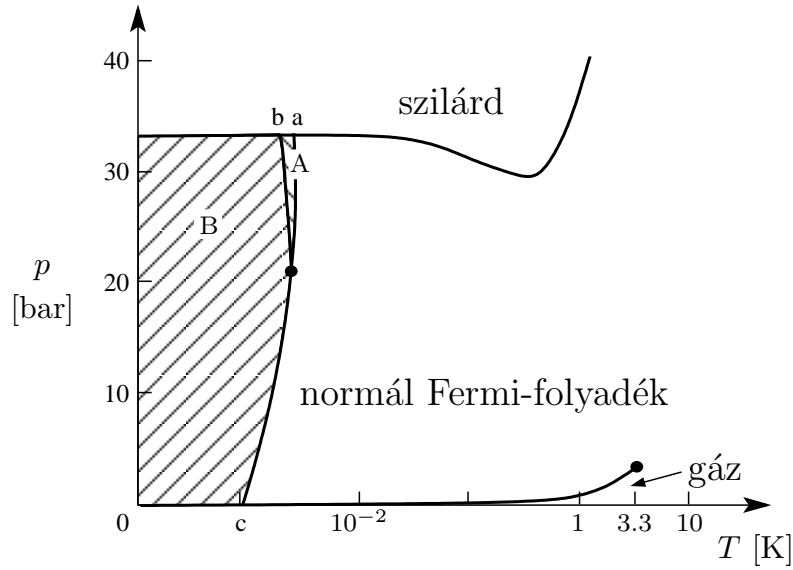
Eltelkenve a lambda ponthoz közeli hőmérsékletektől, az így számított fajhő jól egyezik a mérésekkel, amint azt az ábra mutatja.



Mint már említettük, a fázisátmenet hőmérsékletén a fajhőnek logaritmikus singularitása van, aminek kielégítő elméleti magyarázata ezideig nincs. Az elemi gerjesztések közötti kölcsönhatás 1.7–1.8 K felett kezd jelentőssé válni, és ekkor élettartamuk csökken. A lambda-pont közelében ezért az elemi gerjesztés fogalma már elveszti értelmét.

### V.11. A He<sup>3</sup> szuperfolyékonyságáról

A Fermi-folyadék szuperfolyékony tulajdonságát 1973-ban sikerült kimutatni. A mérési technika ekkorra érte el azt a fejlettségi szintet, hogy néhány ezred Kelvin-fok hőmérsékletet stabilan lehetett tartani, tehát megbízható mérésekre nyílt lehetőség. A He<sup>3</sup> folyadék éppen ilyen alacsony hőmérsékleteken válik szuperfolyékonnyá, s ez az átmenet is másodrendű fázisátalakulás. A He<sup>3</sup> fázisdiagramja 1 K alatt:



Az a,b,c, pontok hőmérsékletei rendre:  $T_a=2.6$  mK,  $T_b=2.0$  mK,  $T_c=0.93$  mK.

Jelenlegi ismereteink szerint két szuperfolyékony fázis létezik: az *A* és a *B* tartomány. A köztük lévő eltérés mágneses tulajdonságaikban mutatkozik meg. A  $\text{He}^3$  szuperfolyékonyágának mikroszkopikus magyarázata nagyon hasonlít a szupravezetés elméletéhez. A szupravezető anyagok elektrongáza lényegében szuperfolyékony Fermi-gáz, hiszen ellenállás nélkül áramlik. Tudjuk, hogy a szupravezetőkben két-két elektron kötött állapotba kerül úgy, hogy eredő impulzusuk nulla, s eredő spinjük is zérus, tehát *S* állapotú párok keletkeznek. A  $\text{He}^3$ -ban szintén kötött állapotok alakulnak ki, itt két atom között. Az eredő impulzus nulla, de a spinek most párhuzamosan állnak, az eredő spin 1, tehát *P* állapotú párok keletkeznek. A teljes spin adott komponense ennek megfelelően három értéket vehet föl: +1, 0 és -1 értéket. Az *A* és *B* fázisok mágneses tulajdonságai azért különbözőek, mert az *A* folyadékban a  $\pm 1$  spinű beállítás fordul csak elő, a *B* folyadékban pedig csak a 0 spinű.