

Wykład 13

Funkcja gęstości stanów

dr hab. Agata Fronczak, prof. PW

Wydział Fizyki, Politechnika Warszawska

1 stycznia 2017

Plan prezentacji

1 Funkcja gęstości stanów: definicja i własności

2 Funkcja gęstości stanów: przykłady

3 Pytania kontrolne

Co opisuje funkcja gęstości stanów?

- Jedną wartość energii E układu fizycznego można zwykle realizować na wiele sposobów.
- Jeśli E przyjmuje wartości dyskretne, **funkcja gęstości stanów** $g(E)$ określa liczbę mikrostanów (tj. realizacji) układu, w których ma on zadaną wartość energii E .
- Jeśli E przyjmuje wartości ciągłe, wtedy $g(E)dE$ określa liczbę różnych realizacji (mikrostanów) tego układu, w których ma on energię z przedziału $(E, E + dE)$.

Kiedy przydaje się funkcja gęstości stanów?

Rozkład kanoniczny

W wielu wypadkach, funkcja $g(E)$ znacząco ułatwia obliczenia z wykorzystaniem rozkładu kanonicznego:

$$P(\Omega) = \frac{e^{-\beta E(\Omega)}}{Z(\beta)}. \quad (1)$$

Dzieje się tak ponieważ w zespole kanonicznym, wszystkie mikrostanu mające taką samą wartość energii są równoprawdopodobne.

Na przykład, gdy E przyjmuje ciągłe wartości na przedziale $[0, +\infty)$, wtedy:

- i. prawdopodobieństwo, że badany układ ma energię z przedziału $(E, E + dE)$:

$$P(E)dE = g(E) \frac{e^{-\beta E(\Omega)}}{Z(\beta)} dE, \quad (2)$$

- ii. suma statystyczna tego układu ma postać:

$$Z(\beta) = \int_0^{\infty} g(E) e^{-\beta E} dE. \quad (3)$$

Pewna przydatna własność funkcji $g(E)$

Gdy energia rozważanego układu przyjmuje ciągłe wartości, wtedy często łatwiej jest wyznaczyć funkcję $\Gamma(E)$, która opisuje liczbę stanów o energii $\leq E$, niż $g(E)$.

Między obydwoma funkcjami $\Gamma(E)$ oraz $g(E)$ istnieje prosta zależność:

$$g(E)\Delta E = \Gamma(E + \Delta E) - \Gamma(E), \quad (4)$$

z której wynika, że

$$g(E) = \frac{d\Gamma(E)}{dE}. \quad (5)$$

Przykład 1. Stany energetyczne atomu wodoru

i. Stan atomu wodoru jest określony przez stan jego elektronu.

ii. Stan elektronu określają cztery liczby kwantowe:

- $n = 1, 2, 3, \dots$ - główna liczba kwantowa, określa energię elektronu,
- $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ - poboczna liczba kwantowa, określa długość momentu pędu,
- $m = -l, -(l - 1), \dots, l - 1, l$ - magnetyczna liczba kwantowa, określa rzut momentu pędu na wybrany kierunek (kierunek zewnętrznego pola magnetycznego),
- $s = \pm \frac{1}{2}$ - spinowa liczba kwantowa, określa kierunek spinu.

iii. Podsumowując, liczba możliwych stanów atomu wodoru o energii n jest równa:

$$g(n) = 2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 2n^2. \quad (6)$$

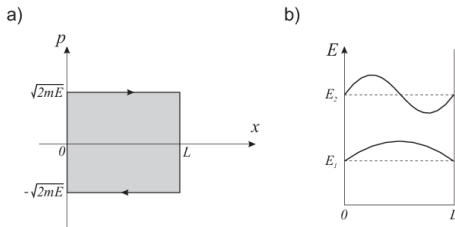
iv. Ponieważ elektrony są fermionami i spełniają zakaz Pauliego, równ. (6) podaje również regułę obsadzania kolejnych powłok elektronowych w atomach wieloelektronowych.

Liczba elektronów na kolejnych powłokach K, L, M,...: $g(1) = 2$, $g(2) = 8$, $g(3) = 18$, ...

Przykład 2. Częstka klasyczna w jednowymiarowym pudełku

Rozważ cząstkę klasyczną o masie m zamkniętą w jednowymiarowym pudełku o długości L . Narysuj trajektorię fazową tej cząstki oraz wyznacz liczbę stanów $\Gamma_c^{1d}(E)$ o energii $\leq E$.

Mikrostan jednowymiarowej cząstki klasycznej o energii E : $\Omega_c = \{x, p\}$, gdzie $0 \leq x \leq L$ oraz $p = \pm\sqrt{2mE}$.



Rysunek: a) Przestrzeń stanów jednowymiarowej cząstki klasycznej. b) Funkcje falowe jednowymiarowej cząstki kwantowej w nieskończonej studni potencjału.

Liczba stanów cząstki klasycznej o energii $\leq E$ jest równa (patrz rys. 1):

$$\Gamma_c^{1d}(E) = \frac{2L\sqrt{2mE}}{\Delta x \Delta p} \propto \sqrt{E}. \quad (7)$$

Przykład 3. Częstka kwantowa 1d w nieskończonej studni potencjału

Rozważ jednowymiarową cząstkę kwantową o masie m zamkniętą w nieskończonej studni potencjału o szerokości L . Wyznacz liczbę stanów $\Gamma_q^{1d}(E)$ takiej cząstki o energii $\leq E$.

Stany kwantowe takiej cząstki znajdujemy rozwiązując równanie Schrödingera z odpowiednimi warunkami brzegowymi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x). \quad (8)$$

Przy założeniu sztywnych, nieprzepuszczalnych ścianek pudełka (tj. $\psi(0) = \psi(L) = 0$), rozwiązaniem tego są fale stojące (rys. 1 b), których węzły są umieszczone na ściankach pudełka:

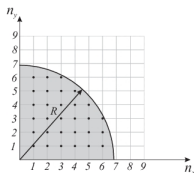
$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{\sqrt{2mE_n}x}{\hbar}\right), \quad \text{gdzie} \quad E_n = \frac{\hbar^2}{8mL^2} n^2 \quad \text{dla} \quad n = 1, 2, \dots \quad (9)$$

Liczba n w wyrażeniu na energię numeruje stany kwantowe. Poniżej stanu n -tego jest $(n - 1)$ stanów, tzn. liczba stanów o liczbie kwantowej mniejszej lub równej n jest $\Gamma_q^{1d}(n) = n$. Wynika stąd, że liczba stanów o energii mniejszej lub równej od E jest:

$$\Gamma_q^{1d}(E) = n(E) = \frac{2L\sqrt{2mE}}{\hbar} \propto \sqrt{E}. \quad (10)$$

Przykład 4. Dwuwymiarowa cząstka kwantowa

Liczba stanów cząstki w dwuwymiarowym pudełku. Wyznacz liczbę stanów o energii $\leq E$ dla cząstki kwantowej o masie m zamkniętej w dwuwymiarowej nieskończonej studni potencjału o wymiarach $L \times L$.



Rysunek: Przestrzeń stanów dwuwymiarowej cząstki kwantowej rozważanej w przykładzie 4.

Energia badanej cząstki jest równa $E = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m}$, gdzie $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, przy czym wektor falowy dwuwymiarowej fali stojącej spełnia warunki $k_x = \frac{\pi}{L} n_x$ i $k_y = \frac{\pi}{L} n_y$, gdzie $n_x, n_y = 1, 2, \dots$. Podstawiając ostatnie wyrażenia do wzoru na energię otrzymujemy $E = \frac{h^2}{8mL^2} (n_x^2 + n_y^2)$. Z powyższej zależności wynika, że stany o tej samej energii są reprezentowane przez łuk leżący na okręgu o promieniu $R = \frac{2L}{h} \sqrt{2mE}$ i odpowiadający dodatnim wartościom n_x, n_y (patrz rys.). W granicy dużych energii, liczba stanów o energii $\leq E$ jest równa polu powierzchni ćwiartki koła o promieniu R :

$$\Gamma_q^{2d}(E) \simeq \frac{1}{4} \pi R^2 = \frac{\pi L^2}{h^2} (2mE) \propto E. \quad (11)$$

Funkcja gęstości stanów dla cząstki jedno-, dwu- i trójwymiarowej

Ponieważ dla cząstki jednowymiarowej (klasycznej i kwantowej) funkcja $\Gamma^{1d}(E) \propto \sqrt{E}$, wynika stąd, że:

$$g^{1d}(E) = \frac{d\Gamma^{1d}(E)}{dE} \propto \frac{1}{\sqrt{E}}. \quad (12)$$

W podobny sposób można pokazać (patrz materiały do wykładu na stronie przedmiotu), że dla cząstek dwu- i trójwymiarowych funkcja gęstości stanów zależy od energii w następujący sposób:

$$g^{2d}(E) = \text{const}, \quad (13)$$

$$g^{3d}(E) \propto \sqrt{E}. \quad (14)$$

Przykład 5. Funkcja gęstości stanów dla fotonów

Przykład. Funkcja gęstości stanów dla fotonów

Wyznacz funkcję gęstości stanów dla fotonów. Pamiętaj o tym, że fotony nie mają masy spoczynkowej, zaś ich energia jest równa $E = \hbar\omega$, gdzie częstość drgań fali $\omega = ck$ zależy liniowo od długości wektora falowego $k = |\vec{k}|$, zaś c jest prędkością światła.

Rozwiązanie

Funkcję gęstości dla fotonów wyprowadza się podobnie jak dla trójwymiarowych cząstek materialnych. Jedyna różnica polega na tym, że w przypadku cząstek materialnych $E \propto k^2$, a w przypadku fotonów $E \propto k$. Wynika stąd, że liczba stanów mających długość wektora falowego $\leq k$ zależy od k w następujący sposób

$$\Gamma^{fot}(k) \propto k^3, \quad (15)$$

co z powodu liniowej zależności $E \propto k$ przekłada się na taką samą zależność dla energii:

$$\Gamma^{fot}(E) \propto E^3. \quad (16)$$

Podstawiając ostatnie wyrażenie do wzoru (5) dostajemy:

$$g^{fot}(E) \propto E^2. \quad (17)$$

Pytania kontrolne

- 1 Co to jest funkcja gęstości stanów?
- 2 W jaki sposób funkcja gęstości stanów zależy od energii dla cząstki swobodnej jedno-, dwu- i trójwymiarowej? Jaką postać ma funkcja gęstości stanów dla fotonów?