

Химические потенциалы и термодинамические характеристики идеальных бозе- и ферми-газов в области квантового вырождения

А.Г. Сотников^{1,2,3}, К.В. Серета², Ю.В. Слюсаренко^{1,2}

¹*Институт теоретической физики им. А.И. Ахиезера, ННЦ ХФТИ НАН Украины
ул. Академическая, 1, г. Харьков, 61108, Украина*

E-mail: slusarenko@kipt.kharkov.ua

²*Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, пл. Свободы, 4, г. Харьков, 61022, Украина*

³*Institute of Physics, ASCR, Na Slovance 1999/2, Prague 8, 18221 Czech Republic*

Статья поступила в редакцию 29 июля 2016 г., опубликована онлайн 25 ноября 2016 г.

Представлены расчеты зависимостей химических потенциалов от температуры для идеальных одноатомных газов со статистиками Бозе–Эйнштейна и Ферми–Дирака в области температур, характерных для коллективного эффекта квантового вырождения. Вне рамок каких-либо дополнительных приближений проведены численные расчеты и построены явные зависимости химических потенциалов от температуры при фиксированной плотности числа частиц газов. Получены приближенные полиномиальные зависимости химических потенциалов от температуры, позволяющие использовать результаты в дальнейших исследованиях уже без привлечения задействованных численных методов. Удобство использования полученных представлений продемонстрировано на примерах деформации распределений для заселенности энергетических состояний при понижении температуры, а также влияния квантовой статистики (обменного взаимодействия) на уравнения состояния идеальных газов и некоторые их термодинамические характеристики. Результаты данной работы по сути объединяют в промежуточной области две противоположные предельные возможности описания равновесных состояний идеальных газов, хорошо и давно известных из университетских курсов статистической физики, тем самым составляя ценность и с педагогической точки зрения.

Наведено розрахунки залежностей хімічних потенціалів від температури для ідеальних одноатомних газів зі статистиками Бозе–Ейнштейна та Фермі–Дірака в області температур, характерних для колективного ефекту квантового виродження. Поза рамками будь-яких додаткових наближень проведено чисельні розрахунки та побудовано залежності хімічних потенціалів від температури при фіксованій густині числа частинок газів. Отримано наближені поліноміальні залежності хімічних потенціалів від температури, що дозволяють використовувати результати у наступних дослідженнях вже без залучення застосованих чисельних методів. Зручність використання отриманих залежностей продемонстровано на прикладах деформації розподілів для заселеності енергетичних станів при зниженні температури, а також впливу квантової статистики (обмінної взаємодії) на рівняння стану ідеальних газів та деякі їх термодинамічні характеристики. Результати даної роботи по суті об'єднують в проміжній області дві протилежні граничні можливості опису рівноважних станів ідеальних газів, що добре та давно відомі з університетських курсів статистичної фізики, тим самим складаючи цінність також і з педагогічної точки зору.

PACS: **05.30.-d** Квантовая статистическая механика;
03.75.-b Материальные волны;
67.85.-d Ультрахолодные газы, газы в ловушках.

Ключевые слова: квантовая статистика, идеальный газ, распределение Бозе–Эйнштейна, распределение Ферми–Дирака, химические потенциалы, квантовое вырождение, термодинамические характеристики газа.

1. Введение

Проявление квантовых эффектов на макроскопическом уровне в XXI веке воспринимается уже в значительной степени обыденно, хотя при детальном анализе многочисленные явления, без сомнения, продолжают вызывать восхищение. К числу такого рода проявлений с полным основанием можно отнести эффекты и явления в квантовых жидкостях и газах. Само по себе понятие «квантовые газы», подразумевающее квантовые системы многих тождественных частиц, стало уже привычным за почти столетнюю историю исследований, основным толчком к развитию которых оказались революционные работы Бозе и Эйнштейна [1,2], а также Ферми и Дирака [3,4], в честь которых впоследствии были названы две основные разновидности статистических распределений частиц с учетом их квантовой природы.

Казалось бы, что за столь длительный период такие простейшие системы, как квантовый идеальный одноатомный газ в отсутствие каких-либо неоднородностей либо внешних полей, должны были предельно детально исследованы с теоретической точки зрения. Однако при знакомстве с существующей литературой, даже считающейся в настоящее время учебной и рекомендованной на курсах статистической физики (см., например, [5–7]), возникают вопросы, на которые хотелось бы иметь более определенные ответы. На наш взгляд, имеется два момента, определяющие чувство неудовлетворенности состоянием дел с описанием отмеченных систем и требующих определенных прояснений и улучшений. Один из моментов связан с математическим аспектом и, скорее, философско-академической стороной вопроса. Второй момент ближе к физическому аспекту описания модельной системы, о которой идет речь.

В самом деле, аналитические методы описания эффектов и явлений в идеальных квантовых газах существенно основаны на некоторых дополнительных эвристических предположениях об особенностях в поведении их вигнеровских функций распределения при низких температурах. Особенности, связанные с зависимостью статистики газов от спина составляющих их частиц, уже заложены в самом виде равновесных функций распределения бозонов и фермионов. По этой причине, казалось бы, никаких дополнительных предположений и не требуется. Необходимость же в таких предположениях возникает из-за необходимости упрощений в аналитических вычислениях при описании физических явлений в квантовых газах. Привлеченные предположения связаны с введением неких «реперных» температурных точек, связанных с особенностями поведения химических потенциалов (а следовательно, и функций распределения) газов бозонов и фермионов при понижении температуры.

Для идеального газа бозе-атомов такими точками в температурной зависимости химического потенциала (и функции распределения!) является точка фазового перехода к состоянию с бозе-конденсатом. Привлекаются рассуждения, позволяющие прийти к выводу, что в точке перехода химический потенциал должен обращаться в нуль и оставаться равным нулю при дальнейшем понижении температуры вплоть до абсолютного нуля. При этом в функции распределения бозонов в точке перехода появляется составляющая, характеризующая зарождение компонента газа с макроскопически большим количеством частиц (бозе-эйнштейновским конденсатом, БЭК) в одном квантово-механическом состоянии, определяемом самым низким энергетическим уровнем системы. Математически бозе-конденсатная составляющая в функции распределения описывается обобщенной функцией — дельта-функцией Дирака с аргументом, характеризующим самое низкое энергетическое состояние газа бозонов. В пределе нулевой температуры все частицы газа должны находиться в состоянии бозе-конденсата. Таким образом, и вся функция распределения бозе-газа в этих условиях становится дельта-образной с тем же аргументом.

Для идеального газа ферми-атомов особенной точкой на шкале температур является лишь абсолютный нуль. Однако с целью введения физически значимого масштаба энергий удобной характеристикой для температуры вырождения в энергетических единицах является энергия Ферми — энергия наивысшего занятого одночастичного состояния системы (или, что эквивалентно, минимальная затрачиваемая энергия по добавлению одной дополнительной частицы к газу с заданной плотностью) при нулевой температуре. Считается, что при понижении температуры и приближении ее значения к энергии Ферми должны проявляться квантовые свойства газа фермионов. В пределе нулевой температуры фермиевская функция распределения должна иметь вид «ступеньки» — обобщенной функции, которая носит название единичной функции Хевисайда. Аргумент этой функции определяется таким образом, чтобы энергия любой ферми-частицы газа при нулевой температуре не превышала энергию Ферми.

Аналитические выкладки, связанные с описанием явлений в идеальных бозе- и ферми-газах, возможны и производятся только в рамках теории возмущений. Теория возмущений строится на фоне основного состояния, которым считаются описанные выше состояния с минимальной энергией. Именно для возможности формулировки теории возмущений и привлекаются изложенные выше рассуждения, основанные на связи спина частиц и статистики систем, структурными единицами которых эти частицы являются. Отметим, что выводы, сделанные на основе этих рассуждений, нетривиальны и неочевидны. Описанное поведение в области «квантовости» бозе- и ферми-газов их вигне-

ровских функций распределения напрямую, в явном виде этих функций, не просматривается, и по этой причине является именно эвристическим, ждущим оправдания полученным результатом. Хотя, как уже подчеркивалось выше, было понятно, что такое поведение, если оно должно быть, должно быть обязательно заложено в явном виде ферми- и бозе-функций распределения. Такое обстоятельство должно иметь место хотя бы потому, что все свойства, касающиеся связи спина частиц и статистики многочастичных систем, использованы при получении выражений для функций распределения. Однако было также ясно, что найти прямые признаки трансформации «привычного» вида ферми- и бозе-функций распределения при понижении температуры к виду, содержащему перечисленные выше признаки, можно только вне рамок традиционно используемых теорий возмущения, с привлечением численных методов.

Вне рамок теории возмущений находится прояснение и более физического аспекта описания поведения квантовых газов при понижении температуры. Речь идет о самом понятии «квантовости» ферми- или бозе-газа. Выше уже отмечалось, что газы нужно считать квантовыми вблизи характерных температур: температуры бозе-конденсации для бозе-газов и температуры вырождения для ферми-газов. Но насколько «вблизи»? При какой температуре классический газ «становится» квантовым с точки зрения наблюдателя, у которого имеются возможности измерять макроскопические характеристики газа с заданной точностью? Один из вариантов качественного ответа на такой вопрос можно найти в Нобелевской лекции В. Кеттерле [8]. Там предлагается оценка данной температуры из условия, чтобы тепловая волна де Бройля частиц была близка к среднему расстоянию между частицами газа. Тогда при фиксированной плотности газа и последовательном понижении температуры волновые функции частиц с указанной длиной волны претерпевают все большее перекрытие. Последнее обстоятельство приводит к поведению, связанному с квантовыми эффектами обменного взаимодействия, вследствие чего газы становятся «все более и более» квантовыми. Естественно, такой анализ является довольно удачной иллюстрацией основополагающих физических механизмов, однако не претендует на точные количественные оценки.

Изложенные выше аргументы, иллюстрирующие причины неудовлетворенности обоснованием используемых аналитических методов описания равновесных состояний квантовых газов, которые можно считать идеальными, послужили мотивацией к появлению настоящей работы. В ней мы представляем расчеты (в основном с привлечением численных методов), позво-

ляющие, на наш взгляд, прояснить и улучшить понимание изложенных выше аспектов описания равновесных квантовых бозе- и ферми-газов. Основные усилия направлены нами на установление количественных оценок физических характеристик исследуемых систем. Для установления границ применимости теорий возмущений, традиционно используемых при аналитическом описании квантовых газов, близких к идеальным, нами решена более глобальная задача определения их химических потенциалов на всем интервале температур. Решение данной задачи представляется важным с точки зрения возможности приложений в ряде исследований в области ультрахолодных квантовых газов. В частности, полученные результаты несомненно будут полезными при изучении взаимодействия квантовых газов в области вырождения с электромагнитными волнами (см. в этой связи, например, [9]).

2. Зависимости химических потенциалов от температуры

Будем рассматривать идеальные одноатомные газы, которые описываются хорошо известными распределениями среднего числа частиц по квантовым состояниям с энергией ε

$$f(\varepsilon, T) = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/T} \pm 1}, \quad (1)$$

где знаки «-» и «+» указывают на статистики Бозе–Эйнштейна (BE) и Ферми–Дирака (FD) соответственно, а химические потенциалы μ частиц газа в общем случае являются функциями температуры T , которая для простоты описания здесь и ниже записана в энергетических единицах ($k_B = 1$).

Таким образом, уравнение для определения химического потенциала как функции температуры может быть получено из формулы для полного числа N частиц газа, которое определяется интегрированием (1) по фазовому пространству,

$$N = \frac{gV}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty \frac{4\pi p^2 dp}{e^{(\varepsilon-\mu)/T} \pm 1}, \quad (2)$$

где g — кратность вырождения энергетических состояний частиц газа по остальным (внутренним) степеням свободы, V — объем системы в координатном пространстве. В дальнейшем анализе мы ограничимся стандартной зависимостью энергии от импульса, которая соответствует закону дисперсии для нерелятивистского одноатомного идеального газа, $\varepsilon(p) = p^2/2m$, где m — масса частиц. Отметим, однако, что все ниже следующие расчеты можно без особых сложностей об-

* С математической точки зрения классическое описание является точным лишь при бесконечно большой температуре, что недостижимо в физических условиях.

общить и на случай газов частиц с иными законами дисперсии, в том числе на ультрахолодные газы атомов либо молекул во внешних гармонических потенциалах, обусловленных наличием удерживающих магнитооптических ловушек в соответствующих экспериментах.

Для удобства проведения численных расчетов и их сравнения с аналитическими формулами введем характерные масштабы энергий, позволяющие обезразмерить основные величины. Для бозе-газа с заданной плотностью $n = N/V$ величиной размерности энергии, имеющей наглядный физический смысл, является температура бозе-конденсации (температура в энергетических единицах, при которой химический потенциал становится равным энергии низшего энергетического состояния, что соответствует условию $\mu_{BE} = 0$ в данном случае),

$$T_0 = \frac{1}{2m} \left(\frac{4\pi^2 \hbar^3 n}{\Gamma(3/2)\zeta(3/2)g} \right)^{2/3}. \quad (3)$$

Для газа фермионов такой величиной является энергия (или температура) Ферми — энергия наивысшего заселенного состояния системы при нулевой температуре ($\mu_{FD} = \varepsilon_F$ при $T = 0$),

$$T_F = \frac{1}{2m} \left(\frac{6\pi^2 \hbar^3 n}{g} \right)^{2/3}. \quad (4)$$

Переходя теперь к безразмерным величинам, интеграл в правой части (2) можно представить в виде:

$$\int_0^\infty \frac{\sqrt{x} dx}{e^{-v/t} e^{x \pm 1}} = a_\pm t^{-3/2}, \quad (5)$$

где $t = T/T_0$, $v = \mu/T_0$ и $a_- = \Gamma(3/2)\zeta(3/2)$ в случае бозе-газа; для ферми-газа $t = T/T_F$, $v = \mu/T_F$ и $a_+ = 2/3$.

Таким образом, определение химического потенциала как функции температуры при фиксированной плотности частиц сводится к решению параметрического уравнения (5) в интегральной форме для функции $v(t)$ в зависимости от безразмерного параметра t . При этом необходимо убедиться в соответствии полученных результатов условиям $v_{BE}(t \leq 1) = 0$ для бозонов и $v_{FD}(0) = 1$ для фермионов. Как уже отмечалось выше, данные условия появляются как необходимые для определения основного состояния системы с целью развития теории возмущений для описания термодинамики квантовых газов. Отметим, что если воспользоваться интегральным представлением полилогарифмической функции

$$Li_s(z) \equiv \sum_{k=1}^\infty \frac{z^k}{k^s} = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty \frac{x^{s-1} dx}{z^{-1} e^x - 1}, \quad (6)$$

уравнение (5) может быть приведено к виду:

$$\Gamma(3/2) Li_{3/2}[\mp \exp(v/t)] = \mp a_\pm t^{-3/2}, \quad (7)$$

что является альтернативной формой записи (5) в виде алгебраического уравнения, содержащего бесконечный ряд. В контексте настоящей работы данное представление является менее удобным с точки зрения численного определения химических потенциалов, однако может быть эффективно использовано в ряде приближений наравне с более известной интегральной формой записи (в том числе, при получении общих выражений для термодинамических характеристик газов, см. раздел 4).

Интеграл в левой части уравнения (5) может быть оценен в так называемом «классическом приближении» [5], что при использовании безразмерных переменных приводит к следующим выражениям в нулевом и первом порядках теории возмущений по малому параметру $e^{v/t} \ll 1$:

$$v^{(0)} = t \ln(b_\pm t^{-3/2}),$$

$$v^{(1)} = v^{(0)} + t \ln[1 \pm b_\pm (2t)^{-3/2}], \quad (8)$$

где $b_\pm = a_\pm / \Gamma(3/2)$. Очевидно, что данное разложение может быть корректно использовано только в области высоких температур, $t \gg 1$, где химические потенциалы и бозонов, и фермионов отрицательны. В области же $t \sim 1$ (характерной для проявления эффектов квантового вырождения), теория возмущений становится непригодной. Однако в этой области интегралы, входящие в (5), могут быть оценены численно с необходимой точностью. Это обстоятельство дает возможность определить зависимости химических потенциалов от температуры методом последовательных приближений с задействованием хорошо известных алгоритмов поиска корней уравнений. Результаты данных вычислений представлены на рис. 1

Отметим, что на представленных зависимостях для идеального газа фермионов нами дополнительно приведено низкотемпературное приближение, которое мо-

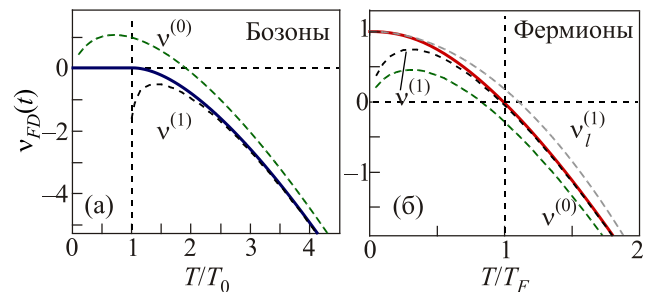


Рис. 1. (Онлайн в цвете) Зависимости химических потенциалов идеальных газов от температуры в случае бозонов (а) и фермионов (б). Пунктирными линиями обозначены приближенные решения, основанные на аналитических выражениях.

жет быть получено в соответствии с [5] из формулы (5) при условии $v/t \gg 1$,

$$v_l^{(1)} = 1 - \frac{\pi^2}{12} t^2. \quad (9)$$

Заметим также, что помимо точки $T = 0$, где химический потенциал фермионного газа точно определен и равен энергии Ферми ($v_{FD}(t = 0) = 1$ в безразмерных

переменных), есть еще одна точка, положение которой может быть определено точно. Это температура, при которой химический потенциал ферми-газа обращается в нуль. Замечая, что

$$\int_0^{\infty} \sqrt{z} dz / (e^z + 1) = (1 - 1/\sqrt{2})\Gamma(3/2)\zeta(3/2),$$

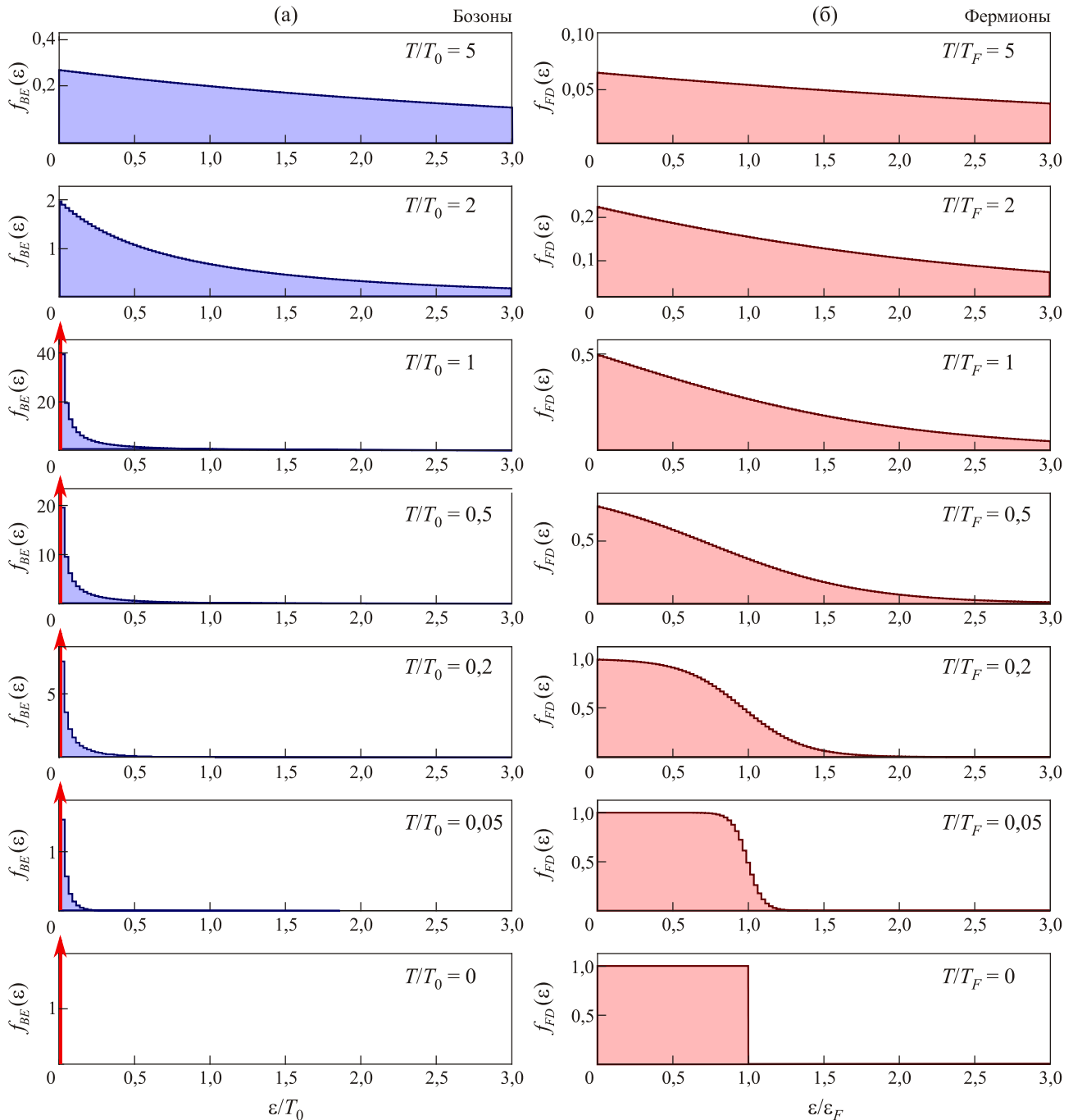


Рис. 2. (Онлайн в цвете) Изменения функций распределения идеальных газов, описываемых статистикой Бозе–Эйнштейна (а) и Ферми–Дирака (б), с понижением температуры. Расчеты проведены на основании полученных температурных зависимостей для химических потенциалов. С целью наглядности использованы различные масштабы для вертикальных осей. В случае бозе-газа ниже температуры БЭК ($T \leq T_0$) средняя заселенность состояния с $\epsilon = 0$ становится бесконечной в термодинамическом пределе и условно обозначена стрелкой. Величина шага вдоль горизонтальных осей (ширина полос) выбрана равной 1/40.

в соответствии с уравнением (5) получим

$$t(v_{FD} = 0) = \left[\frac{4/(1-1/\sqrt{2})}{3\sqrt{\pi}\zeta(3/2)} \right]^{2/3} \approx 0,989, \quad (10)$$

что с высокой точностью согласуется с результатом численных расчетов, представленных на рис. 1, и заметно отклоняется от результатов расчетов на основе аналитических приближений (8) и (9).

Таким образом, видно, что полученные с помощью численных методов зависимости химических потенциалов от температуры позволяют более детально исследовать ряд термодинамических характеристик идеальных газов в широком диапазоне температур без привлечения дополнительных приближений. Данное обстоятельство дает также возможность напрямую продемонстрировать деформации зависимостей функций распределения по энергиям частиц на интервале температур, где данные функции претерпевают наиболее существенные качественные и количественные изменения. На рис. 2 представлены зависимости для средних чисел заполнения энергетических состояний (функции распределения) идеальных бозе- и ферми-газов при последовательном понижении температуры в области проявления эффектов квантового вырождения газов.

3. Полиномиальное приближение для химических потенциалов

Как можно заметить из представленного выше анализа, в области квантового вырождения ($t \sim 1$) химические потенциалы, определенные точно с помощью численных методов, существенно отличаются от приближенных значений, полученных в рамках высокотемпературных разложений, как в случае бозе-, так и ферми-газов. В связи с этим возникает вопрос более точного установления пределов применимости высокотемпературных приближений. Кроме того, с точки зрения применения полученных здесь результатов при дальнейших исследованиях появляется необходимость развития альтернативных приближений, которые были бы более точными в данной области, однако сохраняли простоту описания.

Так как химические потенциалы бозонов и фермионов в указанных областях являются достаточно гладкими функциями температуры, естественным приближением можно считать моделирование упомянутых зависимостей полиномами. Отметим, что в качестве альтернативы можно использовать аппроксиманты Паде [10] либо иные приближения для сопряженных физически величин, к примеру, для фугитивности $F \propto \exp(\mu/T)$. Однако, как мы увидим ниже, использование традиционных конечных степенных рядов обеспечивает необходимую простоту, достаточную компактность и точность описания.

Учитывая изложенную выше аргументацию и полученные результаты, в случае статистики Бозе–Эйнштейна безразмерный химический потенциал можно записать в виде:

$$v_{BE}(t) \approx \begin{cases} 0, & t \leq 1; \\ \sum_{k=1}^r a_k (t-1)^k, & 1 \leq t \leq t^*; \\ v^{(1)}(t), & t \geq t^*. \end{cases} \quad (11)$$

Для идеального газа фермионов безразмерный химический потенциал может быть промоделирован выражением

$$v_{FD}(t) \approx \begin{cases} 1 + \sum_{k=1}^r a_k t^k, & 0 \leq t \leq t^*; \\ v^{(1)}(t), & t \geq t^*. \end{cases} \quad (12)$$

В последних формулах введена в рассмотрение величина t^* , определяющая температуру, выше которой можно пользоваться «квазиклассическим» приближением, учитывающим только линейные квантовые поправки, заданные выражением (8).

Далее основной задачей является определение наиболее оптимального набора параметров (наименьшее необходимое их количество с целью воспроизведения значений с заданной точностью) для описания химических потенциалов газов. Непосредственные расчеты параметров требуют фиксирования пределов необходимой точности. С целью такого фиксирования выберем погрешность в измерениях плотности частиц на уровне $\Delta n/n = 1\%$, что является типичным значением в условиях современных экспериментов для ультрахолодных газов.

В пределах заданной точности нами получены численно все параметры (см. табл. 1), входящие в аналитические выражения (11) и (12).

Таблица 1. Численные значения параметров, входящих в полиномиальные приближения (11) и (12) для указанной погрешности измерений $\Delta n/n$

Параметр	Бозе–газ	Ферми–газ
$\Delta n/n$	< 0,01	< 0,01
r	4	4
a_1	-0,016	0,016
a_2	-1,064	-0,957
a_3	0,299	-0,293
a_4	-0,043	0,209
t^*	3,68	1,36
t^{**}	20,7	8,82

Также посчитаны значения величины t^* и температуры t^{**} , характеризующей предел, выше которого влияние эффектов обменного взаимодействия стано-

вится пренебрежимо малым для заданной точности измерений, вследствие чего может быть использовано классическое приближение $v = v^{(0)}$, см. (8).

4. Влияние обменного взаимодействия на уравнение состояния и термодинамические характеристики идеальных газов

Полученные зависимости для химических потенциалов позволяют более точно описать ряд свойств и физических эффектов в области квантового вырождения газов. Покажем это прежде всего на наиболее ярком и простом примере — уравнении состояния идеальных газов. В соответствии с [5,7], а также вводя переменную $z = \pm \exp[v(t)/t]$ (здесь и ниже дуальные знаки «+» и «-» относятся к статистикам BE и FD, соответственно), можно записать уравнение состояния в виде

$$P = n'T \cdot \text{Li}_{5/2}(z) / \text{Li}_{3/2}(z), \quad (13)$$

где функции $\text{Li}_s(z)$ даются определением (6), а плотность $n' \equiv n_{\epsilon > 0}$ совпадает с плотностью всех частиц газа n во всех случаях за исключением бозе-газа с выделенным конденсатом при $T < T_0$. В последнем случае необходимо учитывать, что $n' = n - n_0 = n(T/T_0)^{3/2}$. Таким образом, видно, что зависимости химических потенциалов $v(t)$ от температуры полностью определяют уравнение состояния идеальных газов при фиксированной плотности n частиц газа.

Отметим, что в случае бозе-газа ниже температуры БЭК ($T < T_0$) отличие от классического уравнения Менделеева–Клапейрона $P_{cl} = nT$ может быть проанализировано и аналитически: так как $v_{BE}(t \leq 1) = 0$, то

$$P_{BE}(t \leq 1) = nT \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)} t^{3/2} \approx 0,5135 \cdot t^{3/2} nT. \quad (14)$$

В случае же ферми-газа хорошо известно выражение для так называемого давления Ферми — давления идеального ферми-газа при нулевой температуре, $P_0 = \frac{2}{5} n\epsilon_F$, а также низкотемпературное разложение при $t \ll 1$ (см., например, [5])

$$P_{l,FD}^{(1)} = P_0 \left(1 + \frac{5\pi^2}{12} t^2 \right). \quad (15)$$

На рис. 3 видно, что численные расчеты полностью воспроизводят асимптотическое поведение давления газов вблизи указанных пределов. Однако в нашем распоряжении имеются теперь уточненные выражения для химических потенциалов как функций температуры, вследствие чего есть возможность исследовать уравнения состояния на всем интервале температур. Это позволяет наблюдать яркое проявление влияния обменного взаимодействия — фермионная статистика приводит к увеличению давления, т.е. характеризует эффективное

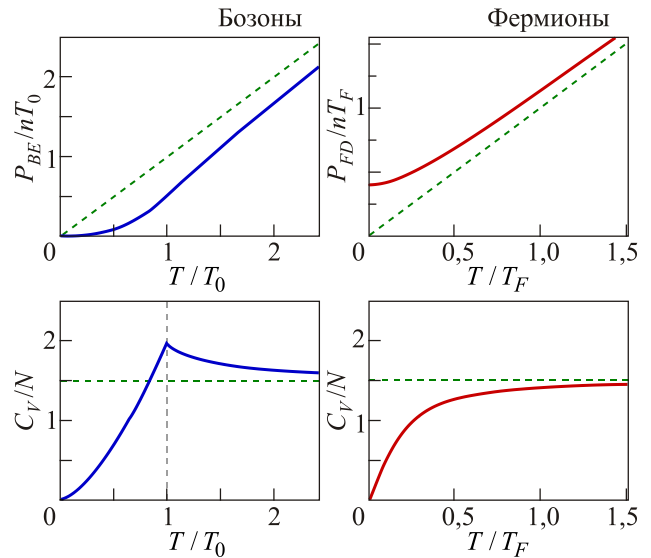


Рис. 3. (Онлайн в цвете) Зависимости давления (верхний ряд) и теплоемкости ($C_V \propto (\partial P / \partial T)_n$, нижний ряд) идеальных квантовых газов от температуры. Пунктирными линиями обозначены зависимости для классического идеального газа.

отталкивание (anti-bunching), обусловленное принципом запрета Паули; бозе-статистика, напротив, проявляется в эффективном притяжении (bunching) между тождественными частицами, что приводит к понижению давления по сравнению с классическим газом.

Как известно, термодинамические потенциалы (и, в частности, внутренняя энергия $E = \frac{3}{2} PV$) идеальных квантовых газов являются непрерывными функциями температуры без каких-либо точек особенностей. В то же время влияние различия статистик уже отражается на первых производных от термодинамических потенциалов. Для демонстрации этого обстоятельства на рис. 3 мы представили также зависимости теплоемкостей $C_V = (\partial E / \partial T)_n = \frac{3}{2} V (\partial P / \partial T)_n$ от температуры. Из сравнения данных графиков видно, что для бозе-газа появляется особенная точка при $T = T_0$, где теплоемкость конечна и непрерывна, однако ее производная $\partial C_V / \partial T$ (и, следовательно, вторая производная от термодинамического потенциала E) претерпевает разрыв, что сигнализирует о наличии фазового перехода второго рода в такой системе. В идеальном газе фермионов, напротив, отсутствуют какие-либо фазовые переходы при ненулевых температурах, что и подтверждается отсутствием каких-либо особенностей на представленных графиках.

Отметим, что для общего выражения для теплоемкостей квантовых газов можно получить компактную форму записи для обеих квантовых статистик на всем интервале температур, если использовать рекуррентные соотношения для интегралов $\text{Li}_s(z)$, $\partial \text{Li}_s(z) / \partial z = \text{Li}_{s-1}(z) / z$ (см. также [7]) и обобщить полученные результаты,

$$C_V = \left[\frac{15 \operatorname{Li}_{5/2}(z)}{4 \operatorname{Li}_{3/2}(z)} - \frac{9 \operatorname{Li}_{3/2}(z)}{4 \operatorname{Li}_{1/2}(z)} \right] n'V. \quad (16)$$

Легко увидеть теперь, что в случае бозе-газа ниже температуры конденсации последнее выражение может быть существенно упрощено. В самом деле, в связи с расходимостью интеграла $\operatorname{Li}_{1/2}(1) = \infty$ второй член в скобках не дает вклада в теплоемкость, а первое слагаемое не зависит от температуры, так как обращается в отношение дзета-функций, что и приводит к результату $C_{V, BE}(t \leq 1) = \frac{15}{4} N t^{3/2} \zeta(5/2) / \zeta(3/2)$. Этот результат может быть получен также прямым дифференцированием выражения (14) и согласуется с зависимостями, представленными на рис. 3. Для фермионного газа можно заметить, что в низкотемпературном пределе теплоемкость возрастает линейно с температурой, $C_{V, FD}(t \rightarrow 0) \rightarrow \pi^2 t / 2$. Помимо этого, легко убедиться, что в пределе высоких температур $\lim_{t \rightarrow \infty} [\operatorname{Li}_s(z) / \operatorname{Li}_{s-1}(z)] = 1$, а следовательно, теплоемкость стремится к классическому пределу $3N/2$, что подтверждается также результатами, представленными на упомянутых графиках.

В заключение проанализируем поведение сжимаемости и энтропии квантовых газов в областях их квантового вырождения. Используя соотношение $\kappa_T = -\frac{1}{V} (\partial V / \partial P)_T = \frac{1}{n^2} (\partial n / \partial \mu)_T$, а также формулу (7) с упомянутым рекуррентным соотношением при дифференцировании полилогарифмов, можно получить общее выражение для изотермической сжимаемости

$$\kappa_T = \frac{1}{nT} \frac{\operatorname{Li}_{1/2}(z)}{\operatorname{Li}_{3/2}(z)}. \quad (17)$$

Из данной формулы, а также из представленных на рис. 4 зависимостей можно увидеть, что для бозе-газа при $T \leq T_0$ изотермическая сжимаемость становится бесконечной (иными словами, имеет место расходимость в точке фазового перехода). Заметим, что это обстоятельство является следствием отсутствия зависимости давления газа от объема в фазе с БЭК, см. выражение (14). Для идеального газа фермионов, как и следовало ожидать, отсутствуют какие-либо точки особенностей на всем интервале температур, а в низкотемпературном пределе $T \rightarrow 0$ сжимаемость является конечной, $\kappa_T \rightarrow (3/2nT_F)(1 - \pi^2 t^2 / 12)$. В пределе высоких температур отношение полилогарифмов обращается в единицу, и мы получаем известное выражение для сжимаемости классического идеального газа $\kappa_T = 1/nT = 1/P$.

Из уравнения состояния (13), а также соотношения $E + PV - TS = \mu N$ легко получить общее выражение, определяющее зависимости энтропии газов от температуры,

$$\frac{S}{N} = \frac{5}{2} \frac{n'}{n} \frac{\operatorname{Li}_{5/2}(z)}{\operatorname{Li}_{3/2}(z)} - \frac{\mu}{T}. \quad (18)$$

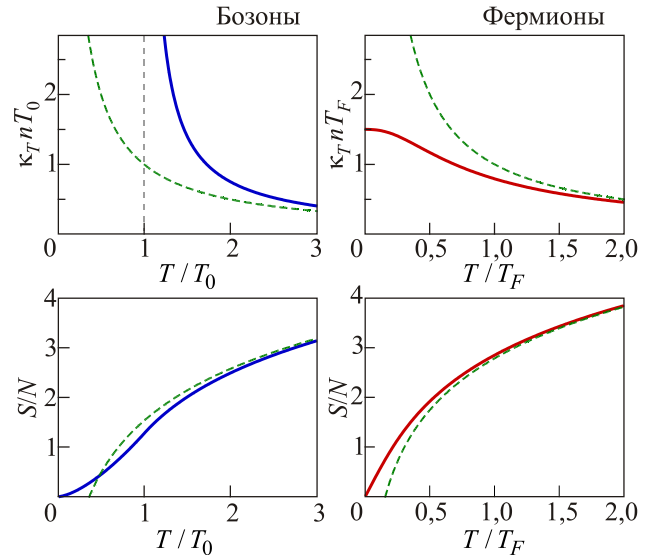


Рис. 4. (Онлайн в цвете) Зависимости изотермической сжимаемости (верхний ряд) и энтропии (нижний ряд) идеальных квантовых газов от температуры. Пунктирными линиями обозначены зависимости для классического идеального газа.

В пределе высоких температур в соответствии с левым приближением (8) для химического потенциала μ данная формула переходит в классическое выражение

$$\frac{S_{cl}}{N} = \frac{5}{2} + \ln \left[\frac{g}{n} \left(\frac{2\pi m T}{h^2} \right)^{3/2} \right].$$

При понижении температуры, что также можно заметить на рис. 4, вклад квантовых поправок в энтропию становится все более значительным. В итоге, в пределе нулевых температур энтропии газов стремится к нулю ($S/N = \frac{5}{2} [\zeta(5/2) / \zeta(3/2)] t^{3/2}$ при $T \leq T_0$ и $S/N = \pi^2 / 2 t$ при $T \ll T_F$ для бозе- и ферми-газов соответственно), что полностью согласуется (в отличие от классического приближения) с третьим законом термодинамики.

Общие зависимости для энтропии от температуры в виде (18) позволяют проанализировать уравнение адиабаты идеальных газов. Действительно, рассматривая адиабатический процесс ($S/N = \text{const}$), а также используя тот факт, что правая часть уравнения (18) является функцией, зависящей только от отношения μ/T (либо только от переменной t в фазе с БЭК), в соответствии с формулой (5) можно получить уравнение $t = \text{const}$ для такого процесса. Переходя далее к переменным P и V с помощью уравнения состояния (13), получим уравнение адиабаты в «привычном» виде

$$PV^{5/3} = \text{const}. \quad (19)$$

Как и следовало ожидать, это уравнение не зависит от типа квантовой статистики, а также наличия либо отсутствия фазы с БЭК в системе (что является логичным, учитывая альтернативное определение показате-

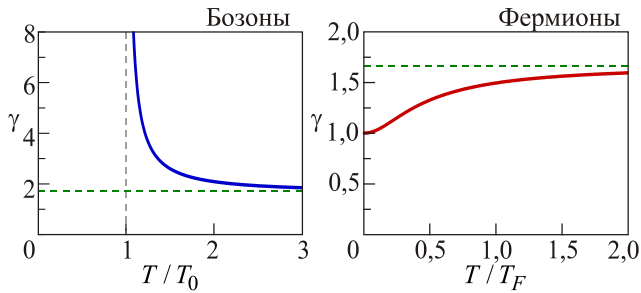


Рис. 5. Зависимости величины $\gamma = C_P / C_V = \kappa_T / \kappa_S$ идеальных квантовых газов от температуры. Пунктирными линиями обозначен показатель адиабаты $k = 5/3$.

ля адиабаты k через количество степеней свободы частиц i , $k = (i + 2) / i$.

Подчеркнем, однако, что в общем случае показатель адиабаты для одноатомных идеальных газов ($k = 5/3$) нельзя отождествлять с величиной $\gamma = C_P / C_V = \kappa_T / \kappa_S$. В самом деле, для этой величины, используя соотношение $\gamma = (\partial z / \partial T)_P / (\partial z / \partial T)_n$ и уравнение (13), можно получить следующее выражение (см. также [7]):

$$\gamma = \frac{5 \operatorname{Li}_{5/2}(z) \operatorname{Li}_{1/2}(z)}{3 [\operatorname{Li}_{3/2}(z)]^2}. \quad (20)$$

Отсюда, а также из представленных на рис. 5 температурных зависимостей видно, что «привычная» ассоциация γ с показателем адиабаты справедлива лишь в пределе высоких температур (иными словами, для классического газа). Учет же квантовой статистики частиц приводит к тому, что для идеального бозе-газа всегда справедливо неравенство $\gamma > 5/3$, причем $\gamma(T \leq T_0) = \infty$, что также связано с бесконечной теплоемкостью C_P (в отличие от C_V) ниже точки фазового перехода. Для идеального газа фермионов, напротив, всегда справедливо соотношение $\gamma < 5/3$, причем в низкотемпературном пределе $\gamma_i^{(1)} = 1 + \pi^2 t^2 / 3$.

5. Выводы

В данной работе, в основном базируясь на численных расчетах, исследованы зависимости химических потенциалов от температуры одноатомных идеальных бозе- и ферми-газов в области квантового вырождения. Проведено прямое сравнение полученных зависимостей с известными аналитическими приближениями, что позволило не только удостовериться в точности результатов в соответствующих пределах, но и получить важное представление о пределах применимости различных приближений.

С целью последующего использования результатов настоящей работы в дальнейших теоретических исследованиях в области квантового вырождения газов бо-

зонов и фермионов, построено полиномиальное приближение для химических потенциалов в области температур, в которой эффекты обменного взаимодействия дают существенный вклад в зависимости термодинамических величин. В качестве примера рассмотрены уравнения состояния квантовых газов, а также построены зависимости ряда термодинамических характеристик газов от температуры. На представленных зависимостях четко видны эффекты проявления квантовой статистики газов, а также различие в особенностях поведения бозе- и ферми-газов в области температур, сопоставимых с масштабами характерных энергий.

Помимо ценности с академической точки зрения, полученные результаты открывают новые перспективы для исследований различных свойств квантовых газов при ненулевых температурах. В частности, заметим, что вопрос определения химических потенциалов газов важен при рассмотрении задач, связанных с различными аспектами термодинамического равновесия в смесях ультрахолодных газов, состоящих из нескольких сортов частиц, например, в смеси двух фермионных компонент и одной бозонной (как связанного состояния двух фермионов), см. [11]. Кроме того, остается ряд вопросов, связанных с влиянием перехода идеального газа в состояние с БЭК на отклик системы на внешнее электромагнитное возмущение и, в частности, на так называемый эффект замедления света в БЭК [12]. Представленные же зависимости позволяют теперь обобщить теоретический анализ на случай ненулевых температур [13], не ограничиваясь при рассмотрении лишь фазой с выделенным бозе-конденсатом. Перспективным представляется также использование результатов и выводов настоящей статьи для развития теоретических подходов, в которых напрямую может быть учтено влияние неоднородных внешних полей, удерживающих ультрахолодные атомы в так называемых магнито-оптических ловушках.

1. S.N. Bose, *Zeitschrift für Physik* **26**, 178 (1924).
2. A. Einstein, *Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften* **1**, 3 (1925).
3. E. Fermi, *Rendiconti Lincei* **3**, 145 (1926).
4. P.A.M. Dirac, *Proc. Royal Society A* **112**, 661 (1926).
5. L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Statistical Physics*, 3rd ed., Pergamon Press, Oxford (1980), Nauka, Moscow (1976).
6. F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, Waveland Press, Illinois (2009).
7. R.K. Pathria and P.D. Beale, *Statistical Mechanics*, Elsevier, Burlington (2011).
8. W. Ketterle, *When Atoms Behave as Waves: Bose-Einstein Condensation and the Atom Laser, Nobel Lecture* (2001).
9. Y. Slyusarenko and A. Sotnikov, *Phys. Rev. A* **78**, 053622 (2008).
10. G.A. Baker and P.R. Graves-Morris, *Padé Approximants*, Cambridge University Press, Cambridge (1996).

11. Ю.В. Слюсаренко, А.Г. Сотников, *ФНТ* **33**, 41 (2007) [*Low Temp. Phys.* **33**, 30 (2007)].
12. L.V. Hau, S.E. Harris, Z. Dutton, and C.H. Behroozi, *Nature* **397**, 594 (1999).
13. Y. Slyusarenko and A. Sotnikov, *Phys. Rev. A* **80**, 053604 (2009).

Chemical potentials and thermodynamic characteristics of the ideal Bose and Fermi gases in the region of quantum degeneracy

A.G. Sotnikov, K.V. Sereda,
and Y.V. Slyusarenko

We determine dependencies of chemical potentials on the temperature for ideal monatomic gases obeying the Bose–Einstein and Fermi–Dirac statistics in the region of temperatures where the collective effects of quantum degeneracy have a significant impact. Without applying any additional approaches we perform numerical calculations and study dependencies of chemical potentials on the temperature at the fixed density of particles of gases. We obtain approximate polyno-

mial dependencies of chemical potentials on the temperature that allow to use the obtained dependencies in further studies without applying the used numerical procedures. A convenience of using these representations is shown for the case of deformation of distributions for occupation of energy states with decreasing temperature and also for studying the influence of quantum statistics (exchange interaction) on the equations of state of ideal gases and their thermodynamic characteristics. The results of the present paper bridge two opposite limits in a description of the equilibrium state of ideal gases that are well-known for a long time from the statistical mechanics courses, therefore, they are also valuable from the pedagogical point of view.

PACS: **05.30.-d** Quantum statistical mechanics;
03.75.-b Matter waves;
67.85.-d Ultracold gases, trapped gases.

Keywords: quantum statistics, ideal gas, Bose–Einstein distribution, the Fermi–Dirac distribution, chemical potentials, quantum degeneracy, thermodynamic characteristics of gas.