MSC 82B10

РАЗЛИЧИЯ ПОСТАНОВОК ЗАДАЧ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

Ю.П. Вирченко

Белгородский государственный университет,
ул. Студенческая, 14, Белгород, 308007, Россия, e-mail: virch@bsu.edu.ru

Аннотация. Показано, что химический потенциал квантового идеального ферми-газа, при фиксации среднего числа частиц, должен быть функцией температуры, как это имеет место для газа бозе-частиц, в котором наличие такой зависимости приводит к явлению бозе-конденсации.

Ключевые слова: ферми-газ, химический потенциал, температурная зависимость.

Постановка задач в квантовой статистической механике может несколько отличаться по сравнению с традиционной постановкой задач в классической механике. Это связано с тем, что понятия частицы, которым оперирует статистическая механика, в нервом и во втором случае могут отличаться по своему физическому содержанию. В квантовой механике допускается (иделогически) принципиальная невозможность непосредственного наблюдения отдельной частицы в смысле своего пространственного расположения, а наблюдается лишь результат действия сразу многих одинаковых частиц и/или допускается возможность косвенного наблюдения движения отдельной частицы. Такое положение имеет место во всех экспериментах с так называемыми элементарными частицами, в частности, фундаментальными. Такие частицы как электрон, фотон, нейтрино невозможно наблюдать непосредственно. В большой степени они существуют в теории как понятия с целью объяснения всей совокупности экспериментов из мира элементарных частиц. С таким положением тесно связано, в частности, то, что общее число частиц в некотором объеме пространства, которое мы называем системой, может быть в среднем фиксированным и нефиксированным. Если число частиц в среднем нефиксировано, то под этим мы понимаем, что может, принципиально, не иметься возможностей экспериментального управления такой системой, которое бы позволило держать постоянным среднее число частиц. В частности, такое положение реализуется в классической задаче об излучении черного тела, при решении которой, исторически, было введено понятие фотона. Это приводит к тому, что в этой задаче не возникает понятия химического потенциала, посредством которого, математически, производится фиксация среднего числа частиц. Это понятие возникает в статистической механике систем классических частиц, именно, но той причине, что в постановку задач статистической механики таких систем закладывается условие сохранения среднего (хотя статистически и переменного) числа частиц. В свою очередь, такое условие имеет смысл вводить по той причине, что частицы в рамках классической статистической механики мыслятся наблюдаемыми в конкретном месте пространства каждая по отдельности, что предопределяет принципиальную возможность такого управления системой частиц, при которой сохраняется общее их число.

Различие в постановках задач с квантовыми частицами, в одном случае, когда среднее число частиц фиксируется, а во втором, когда оно не фиксируется, сразу же выявляется на примере газа бозе-частиц. Если число бозе-частиц не фиксировано, как, например, в случае фотонов, то мы получаем в качестве решения задачи об излучении черного тела планковскую функцию распределения. Если же число бозе-частиц фиксировано, как это имеет место в случае так называемых голдстоуновских квазичастиц с бозевской статистикой, то возникает понятие химического потенциала, и, как следствие, зависимость его от температуры, причем такая, что возникает явление так называемой *бозе-конденсации*.

Точно такое же положение возникает в случае газа ферми-частиц. Однако, в этом случае не возникает какой-либо аномальной зависимости от температуры физических характеристик системы. К сожалению, на физическое различие в постановках задач в рамках статистической бозе-частиц, приводящих и неприводящих к явлению бозе-конденсации, в учебной (да и в монографической) литературе не обращается внимание. В настоящем сообщении мы проиллюстрируем механизм возникновения температурной зависимости химического потенциала, для простоты, на примере квантового идеального ферми-газа.

Как известно, равновесная квантовая статистическая механика основана на статистическом операторе в форме Гиббса (см., например, [1])

$$\hat{\rho} = Z^{-1} \exp\Big(-\frac{\hat{H} - \mu\hat{N}}{\kappa T}\Big) ,$$

$$Z = \mathrm{Sp} \exp\Big(-\frac{\hat{H} - \mu\hat{N}}{\kappa T}\Big) ,$$

где $\mu > 0$ – химический потенциал, $\hat{H}$ и $\hat{N}$ – соответственно операторы энергии и числа частиц, κT – абсолютная температура в энергетических единицах. Рассмотрим эти выражения в представлении вторичного квантования в гильбертовом пространстве векторов состояния, натянутом на базис векторов $|n(\mathbf{p})\rangle$, поставленным во взаимно однозначное соответствие с множеством произвольных распределений $n(\mathbf{p}) \in \{0, 1\}$ чисел заполнения (возможную зависимость от других квантовых чисел мы опускаем). Здесь $\mathbf{p} \in \{2\pi\hbar\mathbf{l}/L : \mathbf{l} = \sum_{i=1}^{3} l_i \mathbf{e}_i\}$, $\mathbf{e}_i$, $i = 1, 2, 3$ – орты евклидового пространства. Действие операторов $\hat{H}$, $\hat{N}$ определяется на векторах базиса посредством равенств $\hat{N}|n(\mathbf{p})\rangle = \sum\limits_{\mathbf{p}} n(\mathbf{p})$, $\hat{H}|n(\mathbf{p})\rangle = \sum\limits_{\mathbf{p}} \varepsilon(\mathbf{p})n(\mathbf{p})$, где $\varepsilon(\mathbf{p})$ – неотрицательная функция, называемая одночастичным спектром. Тогда $Z = \prod\limits_{\mathbf{p}} \Big(1 + \exp(-(\varepsilon(\mathbf{p}) - \mu)/\kappa T)\Big)$, а среднее число частиц –

$$N = Z^{-1}\mathrm{Sp}\hat{N} \exp\Big(-\frac{\hat{H} - \mu\hat{N}}{\kappa T}\Big) = \sum_{\mathbf{p}} \Big[\exp\Big(\frac{\varepsilon(\mathbf{p}) - \mu}{\kappa T}\Big) + 1\Big]^{-1} . \tag{1}$$

Ясно, что для возможности такого равенства при постоянном N необходимо, чтобы величина μ являлась функцией температуры. Однако, заранее, не очевидно, что эта функция существует и существует ли она во всем диапазоне температур. Напомним, что явление бозе-конденсации связано именно с тем, что аналогичная функция в случае идеального бозе-газа не существует при $T < T_c$, где $T_c > 0$ – некоторая критическая точка фазового перехода второго рода – бозе-конденсации. В связи с этим, актуально доказать следующее утверждение.

Теорема. *Уравнение (1) имеет единственное решение $\mu > 0$ при любом $\kappa T > 0$.*

□ Обозначим $I(z) = \sum\limits_{\mathbf{p}} \Big[z \exp\Big(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})}{\kappa T}\Big) + 1\Big]^{-1}$, $z = e^{-\mu/\kappa T}$. Заметим $I(0) = \infty$, $I(\infty) = 0$ и

$$\frac{dI}{dz} = -\sum_{\mathbf{p}} \exp\Big(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})}{\kappa T}\Big)\Big[z \exp\Big(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})}{\kappa T}\Big) + 1\Big]^{-2} < 0 .$$

По этой причине, существует единственное решение уравнения $I(z) = N$ при любом $N > 0$.

Непосредственным вычислением асимптотики функции $\mu(T)$, неявно определенной (1), убеждаемся, что при достаточно малых значениях T построенная функция $\mu(T) > 0$. Поэтому, если $\mu(T)$ в какой-то точке T' становится отрицательной, то существует точка T'', в которой $\mu(T'') = 0$ и $(d\mu/dT)_{T''} < 0$.

Далее, из (1) имеем

$$0 = \frac{dI}{d(\kappa T)} = \frac{z}{\kappa^2 T}\sum_{\mathbf{p}} \exp\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})}{\kappa T}\right)\left[z\exp\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})}{\kappa T}\right)+1\right]^{-2}\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{p})-\mu}{T} - \frac{d\mu}{dT}\right).$$

Из этого уравнения, неявно определяющего производную dI/dT, находим, что в любой точке T_0, в которой $\mu(T_0) = 0$, производная $(d\mu/dT)_{T_0} > 0$. Полученное противоречие доказывает, что $\mu(T) > 0$. ■

Литература

1. Боголюбов Н.Н. Лекции по квантовой статистике / Избранные труды в 3-х тт., Т.2./Киев: Наукова думака, 1970. – С.287-493.

DIFFERENCES OF PROBLEM SETTINGS IN STATISTICAL MECHANICS

Yu.P. Virchenko

Belgorod State University,
Studencheskaya St., 14, Belgorod, 308007, Russia, e-mail:virch@bsu.edu.ru

Abstract. It is shown that chemical potential of quantum ideal fermi-gas should be depended on temperature when the average particle density is fixed as it is in bose-gas. In the last case such an effect leads to the appearance of the bose-condensation.

Key words: fermi-gas, chemical potential, temperature dependence.