Краткие сообщения по физике № 3 1983

К ВОПРОСУ О СУЩЕСТВОВАНИИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В ИДЕАЛЬНОМ БОЗЕ-ГАЗЕ

В. И. Крылов

УДК 530.145

При анализе зависимости химического потенциала от температуры идеального однородного Бозе-газа учтен вклад частиц с нулевой энергией. Показано, что такое уточнение теории может привести к сглаживанию, при температуре вырождения, кривой теплоемкости идеального Бозе-газа, состоящего из частиц с ненулевым спином.

1. В настоящей заметке нам хотелось бы обратить внимание на одно обстоятельство в теории Бозе-газа, связанное с известным изломом кривой его теплоемкости, при так называемой температуре вырождения. Теоретически показано (см., например, монографию /1/ и литературу там же), что в идеальном однородном Бозе-газе при температуре $T_{ds} = [4\pi^2 n/g\Gamma(3/2)\zeta(3/2)]^{2/3}(\hbar^2/2m)$ (где n — концентрация газа, $g = 2s + 1$ — кратность вырождения энергетических уровней, s — спин частицы, m — ее масса; Γ и ζ — гамма и дзета функции Эйлера и Римана) кривая теплоемкости терпит излом. Это позволяет говорить о фазовом переходе третьего рода, при конденсации Бозе-Эйнштейна.

Формально, причина этого излома связана с недостаточной гладкостью химического потенциала μ как функции температуры при $T = T_{ds}$, когда μ становится равным нулю. Однако следует отметить, что в литературе при определении зависимости $\mu(T)$, когда T близка к T_{ds}, не учитывались частицы, находящиеся в состояниях с нулевой энергией, число которых уже при $T > T_{ds}$ может оказаться макроскопическим.

Можно показать, что учет таких частиц при определении $\mu(T)$ может привести к сглаживанию этой зависимости, по крайней мере, для случая газа частиц с ненулевым спином.

2. Для доказательства рассмотрим идеальный однородный Бозе-газ, состоящий из N частиц, находящихся в объеме V (имея в виду в дальнейшем термодинамический предельный переход $N, V \to \infty$; $N/V = n = \mathrm{const}$).

Введем среднее число частиц n_{kN} такой системы, находящихся в k-ом квантовом состоянии. Рассмотрим термодинамический предел $\lim_{N\to\infty} n_{kN,\varepsilon=0}/N = f$, где $n_{kN,\varepsilon=0}$ – среднее число частиц, находящихся в квантовом состоянии k, с энергией ε равной нулю.

Величина f является функцией от T и $\alpha \equiv \mu/T$. Причем $f(\alpha,T)$ явно не зависит от g (аналогично распределениям Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака). Функция $f(\alpha,T)$ тождественно не равна нулю, так как выражение $nf(\alpha,T)$ представляет число частиц бесспинового газа с нулевой энергией (в единице объема), которое является макроскопической величиной при конденсации Бозе – Эйнштейна. Отсюда также следует, что $f(0,0) = 1$.

Проводя суммирование по всем состояниям при конечных N и V, имеем,

$$N = g \sum_{k,\varepsilon>0} n_{kN} + g n_{kN,\varepsilon=0}. \qquad (\mathrm{I})$$

Поделив (I) почленно на V, перейдем к термодинамическому пределу, заменяя при этом суммирование интегрированием обычным образом, и используя распределение Бозе – Эйнштейна. Тогда получим:

$$1 = (T/T_{ds})^{3/2}\left[\Gamma(3/2)\zeta(3/2)\right]^{-1} \int_0^\infty x^{1/2}\left[\exp(x-\alpha)-1\right]^{-1} dx + g f(\alpha,T). \qquad (2)$$

Это уравнение определяет зависимость α от T при различных s.

В соответствии с общепризнанной теорией /I/, кривые $\alpha(T)$, для случаев различных значений спинов частиц идеальных газов s_1, s_2 ($s_1 < s_2$), тождественны при $T < T_{ds2}$ (когда $\alpha(T) \equiv 0$). Но тогда при $T \to 0$ уравнение (2) приводит к противоречию $g_1 = g_2$.

Это значит, что кривые $\alpha(T)$ при различных s нигде не должны совпадать, а при $T=0$ значение $\alpha(0)$ определяется из уравнения $1 = gf(\alpha(0),0)$. Химический потенциал μ при $T\to 0$ также стремится к нулю, но $\mu/T \to \alpha(0)$. При этом все частицы газа попадут в состояния с нулевой энергией.

Следовательно, если при $s = 0$ функция $\alpha(T)$ достигает нуля при $T = T_{d0}$, и теплоемкость может иметь при этой температуре излом, то при $s > 0$ функция $\alpha(T)$ всегда меньше нуля и не видно каких-либо причин, которые могли бы привести к появлению особенностей в производных $\alpha(T)$ по температуре.

Физически, отсутствие изломов функции $\alpha(T)$ означает, что число частиц в состояниях с нулевой энергией становится макроскопической величиной уже при $T > T_{ds}$, а фазовых переходов в идеальном Бозе-газе нет.

На вопрос о том, имеет ли место излом кривой теплоемкости идеального Бозе-газа бесспиновых частиц, можно ответить (если, конечно, пытаться реализовать изложенную выше программу [ж)]) только найдя функцию $f(\alpha,T)$.

Таким образом, учет частиц идеального газа, находящихся в состояниях с нулевой энергией, в общем балансе частиц приводит к тому, что при конденсации Бозе - Эйнштейна не будет фазового перехода, по крайней мере, для случая $s > 0$.

Автор выражает глубокую благодарность А. А. Рухадзе, И. С. Данилкину и А. М. Игнатову за полезную дискуссию.

Поступила в редакцию
27 сентября 1982 г.

Литература

1. В. В. Толмачев, Теория Бозе-газа, изд. МГУ, М., 1969 г., с. 7.
2. Р. Фейнман, Статистическая механика, "Мир", М., 1978 г., с. 77.

ж) В принципе, можно найти теплоемкость идеального Бозе-газа, как функцию температуры, с помощью статистической суммы и без использования химического потенциала. Однако и в этом случае при конкретном расчете из-за математических трудностей все равно приходится использовать распределение частиц, выраженное через μ (см., напр., /2/).