УДК 53:519.2

ИДЕАЛЬНЫЙ ФЕРМИ-ГАЗ В РАМКАХ КАНОНИЧЕСКОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

В. П. Макаров

Идеальный ферми-газ исследован в рамках канонического распределения Гиббса (с заданным числом частиц N). Полученные результаты отличаются от соответствующих результатов распределения Ферми (большого канонического распределения Гиббса) членами $\sim 1/N$.

Каноническое распределение Гиббса для идеального газа. Обозначим через $\{n\} = n_0, n_1, n_2, ...$ совокупность чисел заполнения $n_k = 0, 1, 2, ...$ всех одночастичных состояний; n_k – число частиц в k-ом состоянии с энергией ϵ_k, причем $\epsilon_{k+1} \geq \epsilon_k$. Вероятность того, что в основном $(k = 0)$ состоянии n_0 частиц, в первом возбужденном состоянии $(k = 1)$ n_1 частиц и т.д., определяется формулой (см. [1] §§28, 31, [2])

$$W_{\{n\}} = Z^{-1} q_0^{n_0} q_1^{n_1} q_2^{n_2} ... q_k^{n_k} ... A_{\{n\}} \delta_{nN}, \tag{1.1}$$

где $q_k = \exp(-\epsilon_k/T)$, $n = \sum\limits_k n_k$, $\delta_{nN} = 0 (n \neq N)$, $\delta_{nN} = 1 (n = N)$, N – полное число частиц в газе (оно считается заданным), для бозе-газа $A_{\{n\}} = 1$, для ферми-газа $A_{\{n\}} = 1$, если во всех состояниях $n_k = 0, 1$, и $A_{\{n\}} = 0$, если в каком-либо состоянии $n_k \geq 2$. Статистическая сумма Z определяется из условия нормировки:

$$\sum_{\{n\}} W_{\{n\}} = 1, \;\; Z = \sum_{\{n\}} A_{\{n\}} \delta_{nN} q_0^{n_0} q_1^{n_1} ... q_k^{n_k} .... \tag{1.2}$$

Химический потенциал μ_{ch} газа определяется формулой (см. [1] §24)

$$\mu_{ch} = -T \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial N} \right)_{\{q\}, T}. \tag{1.3}$$

Средние числа заполнения

$$\bar{n}_k = \sum_{\{n\}} n_k W_{\{n\}} \tag{1.4}$$

можно находить по формуле (см. [2])

$$\bar{n}_k = q_k \frac{\partial \ln Z}{\partial q_k}. \tag{1.5}$$

Если ввести вероятность того, что в k-ом состоянии находится n_k частиц,

$$W_{n_k} = \sum_{\{n_k\}} W_{\{n\}},\ \{n_k\} = n_0, n_1, ..., n_{k-1}, n_{k+1}, ..., \tag{1.6}$$

то

$$\bar{n}_k = \sum_{n_k} n_k W_{n_k}. \tag{1.7}$$

Для

$$\langle n_k n_{k'} \rangle = \sum_{\{n\}} n_k n_{k'} W_{\{n\}} \tag{1.8}$$

легко получить следующую формулу:

$$\langle n_k n_{k'} \rangle = \bar{n}_k \bar{n}_{k'} + \langle \Delta(n_k n_{k'}) \rangle,\ \langle \Delta(n_k n_{k'}) \rangle = \frac{1}{2}\left(q_{k'} \frac{\partial \bar{n}_k}{\partial q_{k'}} + q_k \frac{\partial \bar{n}_{k'}}{\partial q_k} \right). \tag{1.9}$$

Если ввести вероятность того, что в k-ом состоянии находится n_k частиц, а в состоянии $k' \neq k - n_{k'}$ частиц,

$$W_{n_k n_{k'}} = \sum_{\{n_{kk'}\}} W_{\{n\}},\ \{n_{kk'}\} = n_0 n_1 ... n_{k-1} n_{k+1} ... n_{k'-1} n_{k'+1} ..., \tag{1.10}$$

то

$$\langle n_k n_{k'} \rangle = \sum_{n_k, n_{k'}} n_k n_{k'} W_{n_k n_{k'}},\ (k \neq k'). \tag{1.11}$$

Из (1.9) следует, что

$$\langle n^2 \rangle = \left\langle (\sum_k n_k)^2 \right\rangle = \sum_{k,k'} \langle n_k n_{k'} \rangle = \sum_{k,k'} \left(\bar{n}_k \bar{n}_{k'} + q_k \frac{\partial \bar{n}_{k'}}{\partial q_k} \right) = \bar{n}^2 = N^2, \tag{1.12}$$

как, разумеется, и должно быть: число частиц задано и не может флуктуировать.

Для ферми-газа $W_{n_k} = 0$, если $n_k \geq 2$, так что (см. (1.7))

$$\bar{n}_k = W_{n_k}(n_k = 1),\ W_{n_k}(n_k = 0) = 1 - W_{n_k}(n_k = 1) = 1 - \bar{n}_k; \tag{1.13}$$

$$\langle n_k^2 \rangle = \sum_{n_k} n_k^2 W_{n_k} = W_{n_k}(n_k = 1) = \bar{n}_k,\ \langle (\Delta n_k)^2 \rangle = \langle n_k^2 \rangle - \bar{n}_k^2 = \bar{n}_k(1 - \bar{n}_k), \tag{1.14}$$

как в большом каноническом распределении (см. [1] §113). При $k \neq k'$ $W_{n_k n_{k'}} = 0$, если $n_k \geq 2$ или $n_{k'} \geq 2$, так что (см. (1.11))

$$\langle n_k n_{k'} \rangle = W_{n_k n_{k'}}(n_k = n_{k'} = 1),\ (k \neq k'). \tag{1.15}$$

Статистическая сумма для ферми-газа. Подстановка (см. [2])

$$\delta_{nN} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i(n-N)\varphi} d\varphi \tag{2.1}$$

в (1.2) для ферми-газа дает:

$$Z = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-iN\varphi} \prod_k (1 + q_k e^{i\varphi}) d\varphi. \tag{2.2}$$

Подынтегральная функция в (2.2) как функция комплексной переменной $\varphi = \varphi' + i\varphi''$ является регулярной во всей конечной области φ-плоскости. Поэтому контур интегрирования в (2.2) можно деформировать любым образом (лишь бы он начинался в точке $(-\pi, 0)$ и оканчивался в точке $(\pi, 0)$). Запишем (2.2) в эквивалентном виде

$$Z = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \exp(NW(\varphi)) d\varphi, \tag{2.3}$$

введя функцию (см. [2])

$$W(\varphi) = -i\varphi + \frac{1}{N} \sum_k \ln(1 + q_k e^{i\varphi}). \tag{2.4}$$

Полагая, что $\sum\limits_k (\ldots)$ здесь (и в аналогичных формулах ниже) $\sim N$ (см. [2]), будем вычислять интеграл в (2.3) методом перевала.

Представив функцию (2.4) в виде

$$W = U + iV,\ U = \varphi'' + \frac{1}{2N} \sum_k \ln(1 + 2y_k \cos\varphi' + y_k^2),$$

$$V = -\varphi' + \frac{1}{N}\sum_k \arcsin\frac{y_k \sin\varphi'}{\sqrt{1 + 2y_k\cos\varphi' + y_k^2}}, \tag{2.5}$$

где $y_k = yq_k$, $y = \exp(-\varphi'')$, получим:

$$\frac{\partial U}{\partial\varphi'} = \frac{\partial V}{\partial\varphi''} = -\frac{1}{N}\sin\varphi'\sum_k \frac{y_k}{1 + 2y_k\cos\varphi' + y_k^2},$$
$$\frac{\partial U}{\partial\varphi''} = -\frac{\partial V}{\partial\varphi'} = 1 - \frac{1}{N}\sum_k y_k\frac{\cos\varphi' + y_k}{1 + 2y_k\cos\varphi' + y_k^2}; \tag{2.6}$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial\varphi'^2} = -\frac{\partial^2 U}{\partial\varphi''^2} = \frac{\partial^2 V}{\partial\varphi'\partial\varphi''} = -\frac{1}{N}\sum_k y_k\frac{2y_k + (1 + y_k^2)\cos\varphi'}{(1 + y_k^2 + 2y_k\cos\varphi')^2},$$
$$\frac{\partial^2 U}{\partial\varphi'\partial\varphi''} = \frac{\partial^2 V}{\partial\varphi''^2} = -\frac{\partial^2 V}{\partial\varphi'^2} = \frac{1}{N}\sin\varphi'\sum_k y_k\frac{1 - y_k^2}{(1 + y_k^2 + 2y_k\cos\varphi')^2}. \tag{2.7}$$

Седловые точки определяются уравнениями $\partial U/\partial\varphi' = 0$, $\partial U/\partial\varphi'' = 0$. Из (2.6) следует, что седловые точки имеют $\varphi'_s = \pm 2p\pi$, $p = 0, 1, 2, \ldots$, $\varphi''_s = -\ln z$, причем уравнение, определяющее z, имеет вид (см. [2]):

$$F(z) = N;\ F(z) = \sum_k f_k,\ f_k = f(z_k),\ f(x) = \frac{x}{1 + x};\ z_k = zq_k. \tag{2.8}$$

Кроме этих седловых точек, имеются еще седловые точки с $\varphi' = \tilde{\varphi}'_s = \pm(2p + 1)\pi$, $\varphi'' = \tilde{\varphi}''_s = -\ln\tilde{z}$, причем уравнение, определяющее $\tilde{z}$, имеет вид:

$$\tilde{F}(\tilde{z}) = N;\ \tilde{F}(\tilde{z}) = \sum_k \tilde{f}_k,\ \tilde{f}_k = \tilde{f}(\tilde{z}_k),\ \tilde{f}(x) = \frac{x}{x - 1};\ \tilde{z}_k = \tilde{z}q_k. \tag{2.9}$$

Рассмотрим сначала седловые точки (в интервале $[-\pi, \pi]$) $\varphi_s = (0, -\ln z)$. Функция $f(x)$ монотонно возрастает от 0 до 1 при изменении x от 0 до ∞. Следовательно, уравнение в (2.8) при заданном N имеет единственное решение. При φ, близких к седловой точке $\varphi_s = (0, -\ln z)$, имеем, согласно (2.5) – (2.7):

$$U(\varphi', \varphi'') = -\ln z + \frac{1}{N}\sum_k \ln(1 + z_k) - \frac{G}{2N}\left[\varphi'^2 - (\varphi'' + \ln z)^2\right] + (\ldots),$$
$$V(\varphi', \varphi'') = -\frac{G}{N}\varphi'(\varphi'' + \ln z) + (\ldots), \tag{2.10}$$

где

$$G = \sum_k g_k,\ g_k = g(z_k),\ g(x) = x\frac{df}{dx} = \frac{x}{(1 + x)^2}. \tag{2.11}$$

Так как $z_k > 0$, то $G > 0$. Следовательно (см. (2.10)), направление скорейшего спуска с седловой точки φ_s параллельно оси φ' (а направление скорейшего подъема – параллельно оси φ''). В направлении скорейшего спуска, пренебрегая членами $\sim \varphi'^4$, имеем, согласно (2.10):

$$U(\varphi', \varphi'') = -\ln z + \frac{1}{N}\sum_k \ln(1+z_k) - \frac{G}{2N}\varphi'^2, \; V(\varphi', \varphi'') = 0. \tag{2.12}$$

Рассмотрим теперь седловые точки $\tilde{\varphi}_s = (\pi, -\ln \tilde{z})$. Функция $\tilde{F}(\tilde{z})$ в (2.9) имеет особенности в тех же точках $\tilde{z} = 1/q_k$ (или $\varphi'' = -\epsilon_k/T$), в которых имеет особенности сама функция $W(\varphi)$ (2.2). Функция $\tilde{f}(x)$ убывает от 0 при $x = 0$ до $-\infty$ при $x \to (1-0)$ и от $+\infty$ при $x \to (1+0)$ до 1 при $x \to \infty$. Поэтому уравнение $\tilde{F}(\tilde{z}) = N$ в (2.9) имеет множество решений, расположенных между особыми точками $1/q_k$ функции $\tilde{F}(\tilde{z})$. При φ, близких к некоторой седловой точке $\tilde{\varphi}_s$, имеем, согласно (2.5) – (2.7):

$$U(\varphi', \varphi'') = -\ln \tilde{z} + \frac{1}{2N}\sum_k \ln(1-\tilde{z}_k)^2 + \tilde{G}/2N\left[(\varphi'-\pi)^2 - (\varphi''+\ln\tilde{z})^2\right] + (...),$$

$$V(\varphi', \varphi'') = -\pi + \frac{\tilde{G}}{N}(\varphi'-\pi)(\varphi''+\ln\tilde{z}) + (...), \tag{2.13}$$

где

$$\tilde{G} = \sum_k \tilde{g}_k, \; \tilde{g}_k = \tilde{g}(\tilde{z}_k), \; \tilde{g}(x) = -x\frac{d\tilde{f}}{dx} = \frac{x}{(x-1)^2}. \tag{2.14}$$

Поскольку $\tilde{G} > 0$, направление скорейшего спуска с любой седловой точки $\tilde{\varphi}_s$ параллельно оси φ'', а направление скорейшего подъема параллельно оси φ'.

В соответствии с результатами исследования функции $W(\varphi)$ деформируем контур интегрирования в (2.3) следующим образом: из точки $(-\pi, 0)$ контур идет параллельно оси φ'' до точки $(-\pi, -\ln z)$, затем параллельно оси φ' в точку $(\pi, -\ln z)$ и, наконец, параллельно оси φ'' приходит в точку $(\pi, 0)$. Интегралы по первому и третьему отрезкам сокращаются. Подставляя в (2.3) $W(\varphi)$ в виде (2.12) (и полагая, что $\sqrt{G} \sim \sqrt{N} \gg 1$), получаем:

$$Z = \frac{1}{\sqrt{2G\pi}} z^{-N}\prod_k(1+z_k)\int_{-\pi\sqrt{\frac{G}{2}}}^{\pi\sqrt{\frac{G}{2}}} \exp(-x^2)dz \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi G}} z^{-N}\prod_k(1+z_k) \tag{2.15}$$

или

$$\ln Z = -N\ln z + \sum_k \ln(1+z_k) - \frac{1}{2}\ln(2\pi G). \tag{2.16}$$

Статистическая сумма содержит параметр z. Выясним, как он зависит от числа частиц и температуры. Дифференцируя уравнение $F(z) = N$ в (2.8) по N и учитывая (2.11), получим

$$\frac{\partial \ln z}{\partial N} = \frac{1}{G}. \tag{2.17}$$

Так как $G > 0$, z монотонно возрастает с N. Дифференцируя это же уравнение по T и опять учитывая (2.11), получим:

$$\frac{\partial \ln z}{\partial T} = -\frac{1}{GT^2}\sum_k \epsilon_k g_k. \tag{2.18}$$

Вычислим химический потенциал газа. По формуле (1.4), используя (2.16) и (2.8), получим:

$$\mu_{ch} = -T\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial N}\right)_{\{q\},T} = T\left(\ln z + \frac{1}{2G}\frac{\partial G}{\partial N}\right). \tag{2.19}$$

Из (2.11) находим:

$$\frac{\partial G}{\partial N} = H\frac{\partial \ln z}{\partial N};\ H = \sum_k h_k,\ h_k = h(z_k),\ h(x) = x\frac{dg}{dx} = \frac{x(1-x)}{(1+x)^3}. \tag{2.20}$$

Из (2.17) и (2.20) окончательно следует:

$$\mu_{ch} = \mu + \frac{HT}{2G^2};\ \mu = T\ln z. \tag{2.21}$$

Отличие химического потенциала μ_{ch} от параметра μ, в общем случае, порядка $\sim T/N$.

Средние числа заполнения и флуктуации чисел заполнения. Используя формулы (1.5), (2.16), (2.8) и (2.20), получаем:

$$\bar{n}_k = f_k - \frac{1}{2G}\left(h_k + Hq_k\frac{\partial \ln z}{\partial q_k}\right). \tag{3.1}$$

Дифференцируя равенство $F(z) = N$ в (2.8) по $q_{k'}$ и используя затем (2.11), находим:

$$g_k\frac{\partial \ln z}{\partial q_k} = -\frac{g_k}{G}. \tag{3.2}$$

Подставляя это выражение в (3.1), получаем окончательно:

$$\bar{n}_k = f_k - \frac{1}{2G}\left(h_k - \frac{H}{G}g_k\right). \tag{3.3}$$

Прямая проверка дает: $\sum_k \bar{n}_k = F = N$, как и должно быть. Заметим, что, если в правой части (3.3) опустить члены $\sim 1/N$, то получится: $\bar{n}_k = f_k$ – формула распределения Ферми при условии, что параметр μ совпадает с химическим потенциалом μ_{ch}.

По формуле (1.9), используя (3.3) и (3.2), после простых вычислений получаем, опуская члены $\sim 1/N^2$:

$$\langle(\Delta n_k)(\Delta n_{k'})\rangle = \delta_{k'k}\left(g_k - \frac{1}{2G}l_k + \frac{H}{2G^2}h_k\right) - \frac{1}{G}g_k g_{k'};\; l_k = l(z_k),\; l(x) = x\frac{dh}{dx}. \tag{3.4}$$

При $k \neq k'$ $\langle(\Delta n_k)(\Delta n_{k'})\rangle \sim 1/N$. Прямое вычисление показывает, что с принятой точностью $\langle n^2\rangle - N^2 \sim 1$, как, разумеется, и должно быть. При $k' = k$ из (3.4) получаем:

$$\langle(\Delta n_k)^2\rangle = g_k + \frac{H}{2G^2}h_k - \frac{1}{2G}(l_k + 2g_k^2). \tag{3.5}$$

Можно легко проверить, используя (3.5) и (3.3), что равенство в (1.14) $\langle(\Delta n_k)^2\rangle = \bar{n}_k(1-\bar{n}_k)$ выполняется.

Вычисление вероятностей W_{n_k} и $W_{n_k n_{k'}}$. Вероятность того, что в k-ом состоянии находится n_k частиц, W_{n_k} (1.6) равна 0, если $n_k \geq 2$, а если $n_k = 0, 1$, ее можно представить в виде, аналогичном (2.1) – (2.4):

$$W_{n_k} = \frac{g_k^{n_k}}{Z}\sum_{\{n_k\}} q_0^{n_0} q_1^{n_1} \ldots q_{k-1}^{n_{k-1}} q_{k+1}^{n_{k+1}} \ldots \delta_{nN} = \frac{q_k^{n_k}}{2\pi Z}\int_{-\pi}^{\pi} \exp[NW^{(n_k)}(\varphi)]d\varphi, \tag{4.1}$$

где функция

$$W^{(n_k)}(\varphi) = -i\left(1 - \frac{n_k}{N}\right)\varphi + \frac{1}{N}\sum_{k'(\neq k)} \ln(1 + q_{k'}e^{i\varphi}). \tag{4.2}$$

Вычисления, аналогичные тем, которые мы провели после формулы (2.4) при вычислении Z, приводят к следующей формуле:

$$W_{n_k} = \frac{z_k^{n_k}}{1 + z_k}\sqrt{\frac{G}{G^{(n_k)}}}\Theta_{n_k}, \tag{4.3}$$

где

$$z_{k'}^{(n_k)} = q_{k'} z^{(n_k)}, \; G^{(n_k)} = \sum_{k'(\neq k)} g(z_{k'}^{(n_k)}), \; \Theta_{n_k} = \left(\frac{z}{z^{(n_k)}}\right)^{N-n_k} \prod_{k'(\neq k)} \frac{1+z_{k'}^{(n_k)}}{1+z_{k'}}, \tag{4.4}$$

а уравнение

$$\sum_{k'} f(z_{k'}^{(n_k)}) = N - \lfloor n_k - f(z_k^{(n_k)}) \rfloor \tag{4.5}$$

определяет $z^{(n_k)}$. Равенства в (4.4) и (4.5) аналогичны равенствам в (2.11) и (2.8). Так как (при $x > 0$) $0 < f(x) < 1$, $n_k = 0, 1$, то значение $z^{(n_k)}$, определяемое уравнением (4.5), мало отличается от значения z, определяемого уравнением в (2.8), так что

$$z^{(n_k)} = z(1 + \Delta^{(n_k)}), \; z_{k'}^{(n_k)} = z_{k'}(1 + \Delta^{(n_k)}), \; |\Delta^{(n_k)}| \ll 1. \tag{4.6}$$

Из (4.4), (2.11) и (4.6), опуская члены более высокого порядка малости по $\Delta^{(n_k)}$, получаем:

$$\sqrt{\frac{G}{G^{(n_k)}}} = 1 + \frac{1}{2G}(g_k - H\Delta^{(n_k)}). \tag{4.7}$$

Вычисление Θ_{n_k} удобно начать с вычисления $\ln\Theta_{n_k}$ (ср. с [1], §32). В результате получим:

$$\Theta_{n_k} = 1 + (n_k - f_k)\Delta^{(n_k)} + \frac{G}{2}\left(\Delta^{(n_k)}\right)^2; \tag{4.8}$$

мы удерживаем здесь член $\sim (\Delta^{(n_k)})^2$, так как он имеет большой коэффициент $G \sim N$. Подставляя (4.7) и (4.8) в (4.3), получим:

$$W_{n_k} = \frac{z_k^{n_k}}{1+z_k}\left[1 + \left(n_k - f_k - \frac{H}{2G}\right)\Delta^{(n_k)} + \frac{1}{2G}g_k + \frac{G}{2}(\Delta^{(n_k)})^2\right]. \tag{4.9}$$

Осталось вычислить $\Delta^{(n_k)}$. Подстановка $z_{k'}^{(n_k)}$ из (4.4) в (4.5) дает с принятой точностью:

$$\Delta^{(n_k)} = -(n_k - f_k)/G. \tag{4.10}$$

Из (4.9) и (4.10) окончательно находим:

$$W_{n_k} = \frac{z_k^{n_k}}{1+z_k}\left\{1 + \frac{1}{2G}\left[g_k - (n_k - f_k)^2 + \frac{H}{G}(n_k - f_k)\right]\right\}, \; (n_k = 0, 1). \tag{4.11}$$

Легко проверить, что (3.11) и (3.3) согласуются с общим требованием (1.13). Если в (4.11) опустить все члены, содержащие G и H ($\sim 1/N$), то получится соответствующий результат большого канонического распределения (если еще при этом положить, что $\mu = \mu_{ch}$).

Аналогично находится вероятность $W_{n_k n_{k'}}$ ($k \neq k'$) (1.10) того, что в k-ом состоянии находится n_k частиц, а в k'-ом состоянии ($k' \neq k$) – $n_{k'}$ частиц. При n_k или $n_{k'} \geq 2$ эта вероятность равна 0, а при $n_k, n_{k'} = 0, 1$ ее можно представить в виде, аналогичном (4.1):

$$W_{n_k n_{k'}} = \frac{q_k^{n_k} q_{k'}^{n_{k'}}}{2\pi Z} \int\limits_{-\pi}^{\pi} \exp[NW^{(n_k n_{k'})}(\varphi)] d\varphi, \; (n_k, n_{k'} = 0, 1, \; k \neq k'), \tag{4.12}$$

где (ср. с (4.2))

$$W^{(n_k n_{k'})}(\varphi) = -i\left(1 - \frac{n_k + n_{k'}}{N}\right)\varphi + \frac{1}{N}\sum_{k''(\neq k, k')} \ln(1 + q_{k''} e^{i\varphi}). \tag{4.13}$$

Формула, аналогичная (4.3) – (4.4), имеет вид:

$$W_{n_k n_{k'}} = \frac{z_k^{n_k} z_{k'}^{n_{k'}}}{(1+z_k)(1+z_{k'})} \left[\frac{z}{z^{(n_k n_{k'})}}\right]^{N - n_k - n_{k'}} \sqrt{\frac{G}{G^{(n_k n_{k'})}}} \prod_{k''(\neq k, k')} \frac{1 + z_{k''}^{(n_k n_{k'})}}{1 + z_{k''}}, \tag{4.14}$$

где

$$z_{k''}^{(n_k n_{k'})} = q_{k''} z^{(n_k n_{k'})}, \; G^{(n_k n_{k'})} = \sum_{k''(\neq k, k')} g(z_{k''}^{(n_k n_{k'})}), \tag{4.15}$$

а $z^{(n_k n_{k'})}$ определяется из уравнения (ср. с (4.5))

$$\sum_{k''} f(z_{k''}^{(n_k n_{k'})}) = N - [n_k - f(z_k^{(n_k n_{k'})})] - [n_{k'} - f(z_{k'}^{(n_k n_{k'})})]. \tag{4.16}$$

Аналогично (4.6)

$$z^{(n_k n_{k'})} = z[1 + \Delta^{(n_k n_{k'})}], \; z_{k''}^{(n_k n_{k'})} = z_{k''}[1 + \Delta^{(n_k n_{k'})}], \; |\Delta^{(n_k n_{k'})}| \ll 1. \tag{4.17}$$

Из (4.16), используя (4.17), получим (ср. с (4.10)):

$$\Delta^{(n_k n_{k'})} = -\frac{1}{G}[(n_k - f_k) + (n_{k'} - f_{k'})]. \tag{4.18}$$

Окончательная формула имеет вид (ср. с (4.11)):

$$W_{n_k n_{k'}} = \frac{z_k^{n_k} z_{k'}^{n_{k'}}}{(1+z_k)(1+z_{k'})} \times$$

$$\times \left\{ 1 + \frac{1}{2G} \left[g_k + g_{k'} - (n_k - f_k + n_{k'} - f_{k'})^2 + \frac{H}{G}(n_k - f_k + n_{k'} - f_{k'}) \right] \right\}. \qquad (4.19)$$

Как и должно быть, $\sum\limits_{n_{k'}=0,1} W_{n_k n_{k'}} = W_{n_k}$. Легко проверить, что выполняется и равенство (1.15), если в него подставить (4.19), (1.9), (3.3) и (3.4).

Больцмановский газ и вырожденный ферми-газ. Будем отсчитывать энергию от энергии основного состояния: $\epsilon_0 = 0$. Уравнение $F(z) = N$ в (2.8) имеет решения $z \ll 1$. Действительно: при $z \ll 1$ $f_k \approx g_k \approx h_k \approx z_k \ll 1$, $G \approx H \approx F = N$ и

$$z = \frac{N}{\sum\limits_k q_k}, \ \mu = -T \ln \frac{\sum\limits_k q_k}{N}. \qquad (5.1)$$

Это – предельный случай больцмановского газа. Согласно (2.21), (3.5) и (3.4) при пренебрежении членами более высокого порядка малости по $1/N$, получаем:

$$\mu_{ch} = \mu + \frac{T}{2N}; \ \bar{n}_k = f_k; \ \langle (\Delta n_k)^2 \rangle = f_k; \ \langle (\Delta n_k)(\Delta n_{k'}) \rangle = -\frac{1}{N} z_k z_{k'}, \ (k \neq k'). \qquad (5.2)$$

Согласно (4.11),

$$W_0 = 1 - z_k; \ W_1 = z_k; \ W_{n_k} = 0 \ (n_k \geq 2). \qquad (5.3)$$

Согласно (2.17), z и μ монотонно возрастают при уменьшении температуры, так что, если при достаточно высокой температуре T $z \ll 1$, $|\mu| \gg T$ $(\mu < 0)$, то при некоторой более низкой температуре $z = 1$, $\mu = 0$, а при дальнейшем уменьшении температуры (в пределе $T \to 0$) уравнение в (2.8) будет иметь решение: $\mu(T = 0) = \epsilon_{k_F}$, ϵ_{k_F} – энергия Ферми, определяемая из условия $\sum\limits_{k<k_F} 1 = N$. При этом

$$z_k = \exp\left(\frac{|\mu - \epsilon_k|}{T}\right) \to \infty, \ f_k \approx 1 - \frac{1}{z_k} \to 1, \ g_k \approx \frac{1}{z_k} \to 0, \ h_k \approx -\frac{1}{z_k} \to 0, \ (k < k_F);$$

$$z_k = \exp\left(-\frac{|\epsilon_k - \mu|}{T}\right) \to 0, \ f_k \approx g_k \approx h_k \approx z_k \to 0 \ (k > k_F). \qquad (5.4)$$

Параметры G и $H \to 0$, но медленее, чем g_k и h_k. Для газа в отсутствие внешних полей легко найти по формулам (2.11) и (2.20), что

$$G \sim H \sim N\frac{T}{\epsilon_F},\ G, H > 0,\ (T/\epsilon_F) \to 0. \tag{5.5}$$

По-видимому, этот результат является общим, т.е. справедлив и в присутствии внешнего поля. Учитывая (5.4) и (5.5) в (3.3) – (3.5), получаем, что в предельном случае полностью вырожденного ферми-газа ($T = 0$) результаты: $\bar{n}_k = 1$ ($k < k_F$), $\bar{n}_k = 0$ ($k > k_F$), $\langle\Delta(n_k)^2\rangle = 0$, $\langle(\Delta n_k)(\Delta n_{k'})\rangle = 0$ ($k \neq k'$) совпадают с соответствующими результатами распределения Ферми (большого канонического распределения Гиббса). Из (2.21) получаем, что положительная величина $(\mu_{ch} - \mu) \sim \epsilon_F/N$.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика, часть 1, М., Наука, 1976.

[2] Леонтович М. А. Введение в термодинамику. Статистическая физика, М., Наука, 1983, §§51, 52.

Институт общей физики
им. А. М. Прохорова РАН

Поступила в редакцию 1 апреля 2004 г.