

РОЗДІЛ II

Теоретична фізика

УДК 538.9

А. С. Сіжук – асистент-дослідник Інституту квантових досліджень та інженерії Техаського А&М університету, США;

О. М. Бірук – старший викладач кафедри теоретичної та математичної фізики Волинського національного університету імені Лесі Українки;

П. П. Шигорін – старший викладач кафедри теоретичної та математичної фізики Волинського національного університету імені Лесі Українки;

І. П. Дмитрук – аспірант кафедри теоретичної та математичної фізики Волинського національного університету імені Лесі Українки

Теплоємність ідеального бозе-газу поблизу критичної температури

Роботу виконано на кафедрі теоретичної та математичної фізики ВНУ ім. Лесі Українки

Роботу присвячено теоретичному дослідженню поведінки термодинамічних величин ідеального бозе-газу в околі критичної температури переходу до стану бозе-айнштайнівської конденсації. Розраховані температурні залежності теплоємностей газу. Показано, що при наближенні температури до критичної згори ізобарна теплоємність прямує до безмежності, тоді як в області бозе-айнштайнівської конденсації вона дорівнює нулю. Досліджено характер температурної поведінки хімічного потенціалу для температур вище критичної.

Ключові слова: бозе-газ, критична температура, теплоємність.

Сижук А. С., Бірук О. М., Шигорин П. П., Дмитрук И. П. Теплоемность идеального бозе-газа вблизи критической температуры. Работа посвящена теоретическому исследованию поведения термодинамических величин идеального бозе-газа в окрестности критической температуры перехода в состояние бозе-айнштейновской конденсации. Рассчитаны температурные зависимости теплоемностей газа. Показано, что при приближении температуры к критической сверху изобарная теплоемность следует к бесконечности, тогда как в области бозе-айнштейновской конденсации она равна нулю. Исследовано характер температурной зависимости химического потенциала для температур выше критической.

Ключевые слова: бозе-газ, критическая температура, теплоемность.

Sizhuk A. S., Biruk O. M., Shygorin P. P., Dmytruk I. P. The heat capacity near the critical temperature for the ideal Bose gas. In this paper the behavior of thermodynamic quantities for ideal Bose gas in the vicinity of the critical temperature of transition to the Bose-Einstein condensate is investigated. The dependences of the gas capacities on temperature are estimated. It was shown, that the isobaric capacity approaches infinity at the critical temperature from the right side, then as in the area of the Bose-Einstein condensate it equals zero. The character of the temperature behavior for chemical potential was illustrated in the area of the temperatures above the condensation.

Key words: Bose gas, critical temperature, heat capacity.

Постановка наукової проблеми та її значення. Відкриття в 1995 р. бозе-айнштайнівської конденсації в розріджених парах лужних елементів, які утримуються в магнітних пастках при ультранизьких температурах, надало нового дихання теорії вироджених квантових рідин та газів [9]. Системи, у яких наявний бозе-конденсат, проявляють низку властивостей, які відсутні для класичних рідин та газів. Завдяки квантовим ефектам, макроскопічні властивості ідеального бозе-газу мають низку суттєвих відмінностей порівняно з випадком «максвеллівського» ідеального газу [6; 2].

Бозе-айнштайнівська конденсація (БАК) – одне з найбільш інтригуючих явищ, передбачених квантовою статистичною механікою. Воно має тривалу і багату історію, що починається з 20-х рр. минулого століття.

Уперше термін бозе-статистика з'явився в роботі індійського фахівця з математичної фізики Шат'єндраната Бозе, у якій він на основі статистичних міркувань отримав розподіл Планка для спектра фотонів у випромінюванні абсолютно чорного тіла [3]. У 1924–1925 рр. Айнштайн опублікував дві статті, у яких він узагальнив роботу Бозе на випадок атомів ідеального газу, тобто на випадок частинок із відмінною від нуля масою [4; 5]. У другій із цих статей він звернув увагу на одну цікаву особливість розподілу атомів по квантових енергетичних рівнях: якщо газ атомів-бозонів охолодити нижче певної температури (так званої критичної), то макроскопічне число атомів переходить (конденсується) у квантовий стан із найнижчою енергією.

Виникнення макроскопічного заповнення одного з квантових станів називають БАК.

Явище БАК унікальне в тому сенсі, що воно являє собою суто квантово-статистичний фазовий перехід, оскільки відбувається навіть у відсутності взаємодії між атомами. Айнштайн назвав такий фазовий перехід «конденсацією без сил притягання».

Більше десяти років явище БАК «не знаходило» застосування у фізиці, доки в кінці 30-х рр. Фріц Лондон [8] та Ласло Тісса [10] не воскресили ідею конденсації як можливого механізму для пояснення надплинності рідкого гелію-4 при температурах нижче λ -точки.

Для пояснення незвичних особливостей надплинного гелію-4 Лондон, ґрунтуючись на близькості температури λ -точки (2,19 К) та температури конденсації ідеального бозе-газу (3,14 К), а також на інтуїтивних міркуваннях про макроскопічну квантову когерентність, висунув гіпотезу, що й за наявності взаємодії між атомами гелію в ньому є бозе-конденсат, який зумовлює надплинність. Незначна відмінність температур пояснювалася неадекватністю моделі ідеального газу рідкому гелієві. Однак є й суттєві відмінності. Реальний фазовий перехід у надплинний стан гелію-4 – другого роду. Теплоємність при постійному об'ємі в λ -точці має нескінченний розрив. У той час відповідна теплоємність ідеального бозе-газу в точці переходу лишається скінченною, і лише її похідна зазнає стрибка.

З огляду на те, що теплоємність при постійному об'ємі як функція температури в точці переходу неперервна, а її перша похідна має стрибок, за класифікацією Еренфеста поява в бозе-газі конденсату є фазовим переходом третього роду [2].

У цій роботі для моделі ідеального бозе-газу досліджено температурну залежність теплоємностей при постійному об'ємові та тискові в околі критичної температури. Показано, що при наближенні температури до критичної згори ізобарна теплоємність прямує до безмежності, тоді як в області бозе-айнштайнівської конденсації вона дорівнює нулю. Така поведінка теплоємності свідчить про фазовий перехід другого роду.

У роботі також проаналізовано температурну поведінку хімічного потенціалу ідеального бозе-газу при температурі, близькій до критичної.

Виклад основного матеріалу й обґрунтування отриманих результатів дослідження. Перейдемо до обчислення теплоємностей у моделі ідеального бозе-газу.

Енергія атома ідеального бозе-газу має вигляд:

$$\varepsilon = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$$

де p_x, p_y, p_z – компоненти вектора імпульсу.

Розподіл частинок за енергіями в термодинамічній границі дається виразом [6]:

$$dN = \frac{V m^{3/2}}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{e^{-\beta(\varepsilon + \mu)}}{\varepsilon} - 1 \right]^{-1} d\varepsilon, \quad (1)$$

де V – об'єм системи, m – маса атома, μ – хімічний потенціал.

Число частинок у системі визначається зі співвідношення:

$$N = \int_0^\infty dN_\varepsilon. \quad (2)$$

На основі (1) та (2) отримуємо:

$$N = \int_0^{\infty} \frac{V m^{3/2}}{\sqrt{2\pi\hbar^2}} e^{-\beta \epsilon} d\epsilon = 1. \quad (3)$$

Енергія системи визначається зі співвідношення:

$$E = \int_0^{\infty} \epsilon dN. \quad (4)$$

Використовуючи (1) та (4), знаходимо:

$$E = \frac{V m^{3/2}}{\sqrt{2\pi\hbar^2}} \int_0^{\infty} \epsilon e^{-\beta \epsilon} d\epsilon = 1. \quad (5)$$

Великий термодинамічний потенціал Гіббса

$$\Omega = \sum_k \left(\frac{m^3}{2\pi\hbar^2} \right) e^{-\beta \epsilon_k}$$

в термодинамічній границі може бути представлений у вигляді [6]:

$$\Omega = \frac{V m^{3/2}}{\sqrt{2\pi\hbar^2}} \int_0^{\infty} e^{-\beta \epsilon} d\epsilon = 1. \quad (6)$$

Використовуючи зв'язок термодинамічного потенціалу Гіббса Ω з тиском P [2]

$$\Omega = -PV, \quad (7)$$

на основі (6) та (7) отримаємо співвідношення між тиском та енергією:

$$PV = \frac{2}{3} E. \quad (8)$$

Враховуючи (5) та (8), вираз для тиску можемо записати у вигляді:

$$P = \frac{2}{3} \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2\pi\hbar^2}} \int_0^{\infty} \epsilon e^{-\beta \epsilon} d\epsilon = 1. \quad (9)$$

Використаємо термодинамічні співвідношення для теплоємностей при сталому об'ємі C_V та сталому тискові C_P :

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V, \quad (10)$$

$$C_P = \left(\frac{\partial (E+PV)}{\partial T} \right)_P = \frac{5}{3} \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_P.$$

Як відомо з теорії ідеального бозе-газу [2], коли температура бозе-газу дорівнює критичній $T = T_c$, хімічний потенціал обертається на нуль $\mu = 0$.

Розглянемо випадок, коли температура наближається до критичної згори, тобто $T > T_c$ та $T/T_c \rightarrow 1$. На основі (5) знаходимо наближений вираз для енергії:

$$E = \frac{V m^{3/2}}{\sqrt{2\pi\hbar^2}} \int_0^{\infty} \epsilon e^{-\beta \epsilon} d\epsilon = 1. \quad (11)$$

де

$$E = \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2\pi\hbar^2}} \int_0^{\infty} \epsilon e^{-\beta \epsilon} d\epsilon = 1. \quad (12)$$

Проводячи аналогічні наближені обчислення для тиску P , знаходимо наближені вирази для теплоємностей, справедливі при $T = T_c + 0$:

$$C_V = N \left(\frac{1924}{y} - 24(4y) \right) \tag{13}$$

$$C_P = \frac{5}{3} N \left(\frac{051283025}{x^2 + x(1-x)} \right)$$

де $y = \left(\frac{T}{T_c} \right)^2$, $x = \frac{N}{V \lambda^3}$, причому $y \leq 1$, $x \leq 1$. При $T = T_c$ $x = y = 1$.

Зі співвідношень (13) випливає, що при $T \rightarrow T_c + 0$ ізобарна теплоємність $C_P \rightarrow \infty$, тоді як теплоємність при постійному об'ємі залишається скінченною $C_V \rightarrow 1,925N$ і при переході через критичну температуру є непервною функцією.

Аналогічні розрахунки можна провести в області нижче критичної температури, тобто при $T = T_c - 0$. Як показують обчислення [1; 7],

$$\left(\frac{C_V}{dT_V} \right) = 28 \frac{\Delta}{T_c} \tag{14}$$

а для $T = T_c + 0$, із формули (13) випливає:

$$\left(\frac{C_V}{dT_V} \right) = 0,7 \frac{\Delta}{T_c} \tag{15}$$

Отже, похідна від ізохорної теплоємності C_V за температурою зазнає стрибка при переході через критичну температуру T_c . Температурна поведінка теплоємностей зображена на рис. 1.

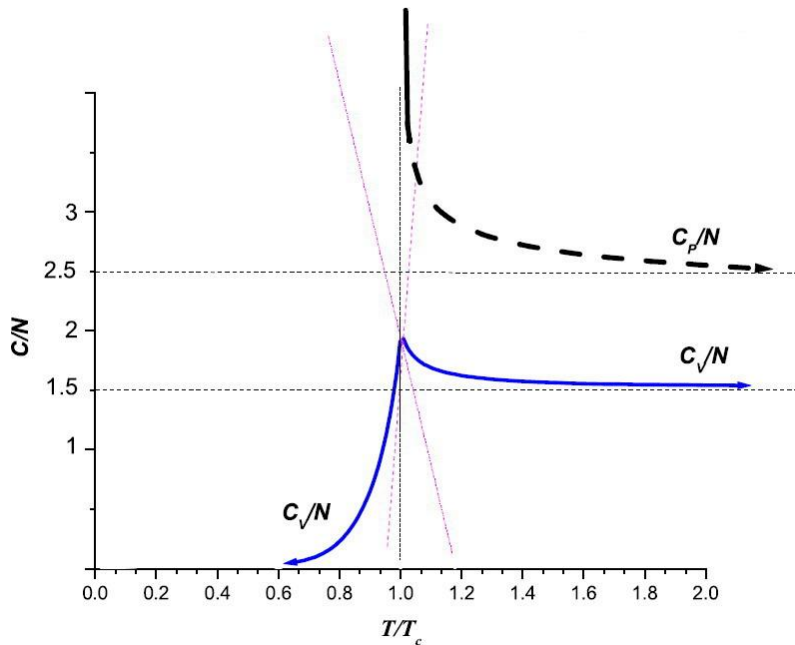


Рис 1. Температурна залежність теплоємностей

Зауважимо, що при $T < T_c$ хімічний потенціал бозе-газу рівний нулю $\mu = 0$ і, як випливає з виразу для тиску P (9), нижче критичної температури тиск ідеального бозе-газу не залежить від об'єму, тобто $P = P(T)$ та $V = V(T)$. Отож, для $T < T_c$ у процесі, коли $P = const$, має бути $T = const$ та $V = const$, тобто в цьому випадку неможливо запровадити ізобарну теплоємність C_P .

Тепер формально дослідимо поведінку хімічного потенціалу ідеального бозе-газу для температур вище критичної. Для цього звернемося до рівняння (3) для числа частинок у системі. Із нього матимемо, що у випадку $\mu < 0$:

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{V} \int_0^\infty \frac{g(\epsilon) d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} - 1} \quad (16)$$

$$= \frac{1}{V} \int_0^\infty \frac{g(\epsilon) d\epsilon}{e^{\beta\epsilon} e^{-\beta\mu} - 1} = \frac{1}{V} \int_0^\infty \frac{g(\epsilon) d\epsilon}{e^{\beta\epsilon} (e^{-\beta\mu} - 1) + 1}$$

тут функція $f\left(s, e^{\frac{\mu}{T}}\right)$ визначена відповідним рядом і, як видно з вищенаведеного рівняння, має такі границі:

$$f\left(s, e^{\frac{\mu}{T}}\right) \rightarrow \frac{1}{s} \text{ при } \frac{|\mu|}{T} \ll 1 \quad (17)$$

$$\text{та } f\left(s, e^{\frac{\mu}{T}}\right) \rightarrow 1 \text{ при } \frac{|\mu|}{T} \gg 1 \text{ і } \mu < 0.$$

Тоді з виразу (16) маємо таку апроксимацію, перейшовши до системи одиниць СІ (у нашому випадку, зробивши перехід $T \rightarrow k_B T$):

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{V} \int_0^\infty \frac{g(\epsilon) d\epsilon}{e^{\beta\epsilon} (e^{-\beta\mu} - 1) + 1} \quad (18)$$

де $\hat{y} = \frac{T}{T_c}$. Останній вираз у границі, строго кажучи, описує випадок $\frac{|\mu|}{T} \ll 1$. Ми ж зобразимо

залежність (18), апроксимовану як $\mu = \frac{3}{2} k_B T \ln \hat{y}$, і для $\frac{|\mu|}{T} \gg 1$, враховуючи вигляд отриманої функції. Більш точний графік для широкого діапазону температур може бути побудований зацікавленим читачем. Характер температурної поведінки хімічного потенціалу зображений на графіку рис. 2 для випадку сталої концентрації (критичної температури) з температурою бозе-конденсації $T_c = 2,17$ К.

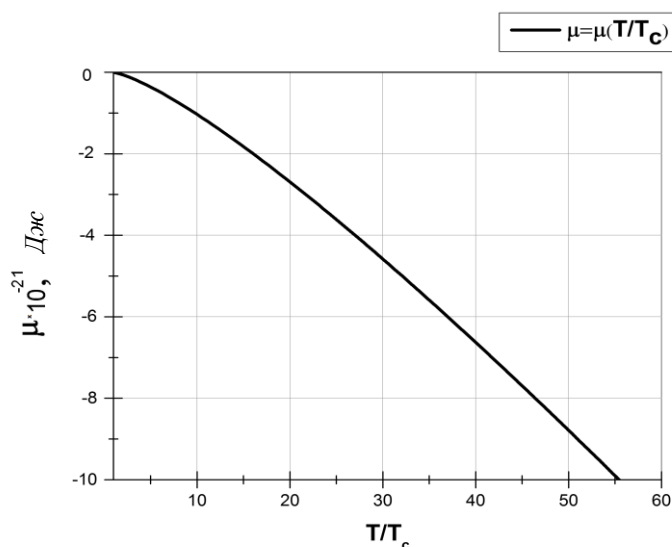


Рис 2. Ілюстрація температурної залежності хімічного потенціалу бозе-газу.

Приклад для «гіпотетичного» газу атомів гелію-4 з критичною температурою в лямбда-точці $T_c = 2,17$ К

Висновки. Таким чином, у роботі теоретично досліджено поведінку термодинамічних величин E , C_V , та C_P ідеального бозе-газу в околі критичної температури переходу до стану бозе-айнштейнівської конденсації. Розраховані температурні залежності цих теплоємностей газу. Показано, що при наближенні температури до критичної згори ізобарна теплоємність прямує до безмежності, тоді як в області бозе-айнштейнівської конденсації вона дорівнює нулю. Крім цього, цікаво зазначити, що для $T \gg T_c$ ми матимемо «максвеллівський» газ, і тоді $\frac{C_P}{C_V} = \frac{5}{3}$ та $C_P - C_V = N$. Останнє, як видно з вищенаведених виразів, не справджується для достатньо низьких температур і, отже, є наслідком цілком визначеної статистики заселеності квантованих енергетичних рівнів системи.

Досліджено характер температурної поведінки хімічного потенціалу для температур вище критичної. Цікавим є те, що абсолютне значення хімічного потенціалу монотонно зростає і при температурах $\frac{T}{T_c} > e$ стає більшим за середню кінетичну енергію молекули або атома. Тут зауважимо, що

для $\frac{T}{T_c} \geq 1+0$ слід аргументувати запровадження хімічного потенціалу для опису системи як такої у великому канонічному ансамблі, оскільки потрібно визначити підсистеми цього гіпотетичного великого канонічного ансамблю. Отже, знайдений вираз (18) для хімічного потенціалу без додаткової інформації про систему зі сталим середнім числом частинок є, взагалі кажучи, формальним.

Список використаної літератури

1. Полуэктов, Ю. М. Изобарическая теплоемкость идеального бозе-газа / Ю. М. Полуэктов // Известия вузов. Физика. – 2001. – Т. 44–6.
2. Свідзинський А. В. Математичні методи теоретичної фізики : підручник : у 2 т. – Вид. 4-те, допов. і переробл. / А. В. Свідзинський. – К. : Ін-т теорет. фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України, 2009. – Т. 2. – 436 с. – ISBN 978-966-02-5132-8.
3. Bose S. Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese / S. Bose // Z. Physik. – 1924. – Vol. 26. – P. 178–186.
4. Einstein A. Quantentheorie des Einatomigen idealen gases I / A. Einstein // Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. Phys. Math. – 1924. – P. 261.
5. Einstein A. Quantentheorie des Einatomigen idealen gases II / A. Einstein // Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. Phys. Math. – 1925. – P. 3.
6. Huang K. Statistical Mechanics / K. Huang. – New York : John Wiley & Sons, 1983.
7. Jincan Chen. Low-temperature behaviour of an ideal Bose gas and some forbidden thermodynamic cycle / Jincan Chen and Bihong Lin // J. Phys. A: Math. Gen. 36 (2003) 11385–11390.
8. London F. The λ -Phenomenon of Liquid Helium and the Bose-Einstein Degeneracy / F. London // Nature. – 1938. – Vol. 141. – P. 643–644.
9. Pethick C. J. Bose–Einstein Condensation in Dilute Gases / C. J. Pethick, H. Smith. – Cambridge : Cambridge Univ. Press, 2002. – 404 p.
10. Tisza L. Sur la theorie des liquides quantiques. Application a helium liquide II / L. Tisza // Journ. Phys. Rad. – 1940. – Vol. 1. – P. 350–358.

Стаття надійшла до редколегії
15.10.2012 р.