统计物理中的 Polylogarithm 函数解析解

Shunzhi.Dai
China West Normal University

摘要：本文利用 Polylogarithm 函数给出了 BE 统计及 FD 统计粒子数密度的级数解，并根据 Polylogarithm 函数的渐近行为得到了解在极限情况下的近似，近似结果与经典情况相同.

关键词：Polylogarithm 函数　临界温度　Fermi 能级

一、引言

在计算 Bose Einstein 凝聚的临界温度以及金属中自由电子气体的 Fermi 能级时，会使用积分

$$\int_0^\infty \frac{\varepsilon^n}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} \pm 1} d\varepsilon \tag{1}$$

上式中 ε 为能级；μ 为化学势；$\beta = \frac{1}{kT}$ 为 Lagrange 乘子，其中 k 为 Boltzmann 常数，T 为温度；n 一般取整数或半整数. 计算临界温度时，物理工作者会考虑化学势 μ 趋于零的情况，将积分近似为[1]

$$\lim_{\mu\to 0} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^n}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} d\varepsilon = \int_0^\infty \frac{\varepsilon^n}{e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon \tag{2}$$

计算 Fermi 能级时，物理工作者会考虑温度 T 趋于零的情况，将积分近似为[1]

$$\lim_{\beta\to\infty} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^n}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} d\varepsilon = \int_0^\mu \varepsilon^n d\varepsilon \tag{3}$$

这种考虑特殊情况的做法在非极限情况下就失效了，自然就需要将 (1) 的解析解求出。下面的工作就是将这个积分求出，使得解析解在上述两种极限条件下能够导出同样的结果。

二、Bose Einstein 凝聚

考虑由 N 个全同、近独立玻色子构成的系统，温度为 T，体积为 V，并假设玻色子自旋为零。通过简单的计算可以得到，此时态密度为

$$D(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{2\pi V}{h^3}(2m)^{\frac{3}{2}}\varepsilon^{\frac{1}{2}} d\varepsilon \tag{4}$$

将其与 Bose Einstein 分布结合，便得到

$$dn = \frac{2\pi V}{h^3}(2m)^{\frac{3}{2}} \frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} d\varepsilon \tag{5}$$

考虑到粒子数守恒就得到

$$N = \int dn = \frac{2\pi V}{h^3}(2m)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} d\varepsilon \tag{6}$$

式中积分

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} d\varepsilon = \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}} e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}}{1 - e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}} d\varepsilon \\
= \ & \int_0^\infty \left[\varepsilon^{\frac{1}{2}} e^{-\beta(\varepsilon-\mu)} \sum_{k=0}^\infty e^{-k\beta(\varepsilon-\mu)}\right] d\varepsilon \\
= \ & \sum_{k=1}^\infty \left[\int_0^\infty e^{-k\beta(\varepsilon-\mu)} \varepsilon^{\frac{1}{2}} d\varepsilon\right] = \sum_{k=1}^\infty \left(e^{k\beta\mu} \int_0^\infty e^{-k\beta\varepsilon} \varepsilon^{\frac{1}{2}} d\varepsilon\right) \\
= \ & \sum_{k=1}^\infty \left[e^{k\beta\mu} \frac{\Gamma(\frac{3}{2})}{(k\beta)^{\frac{3}{2}}}\right] = \frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{2\beta^{\frac{3}{2}}} \sum_{k=1}^\infty \frac{e^{k\beta\mu}}{k^{\frac{3}{2}}} = \frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{2\beta^{\frac{3}{2}}} Li_{\frac{3}{2}}(e^{\beta\mu})
\end{aligned}$$

其中

$$Li_s(z) = \sum_{k=1}^\infty \frac{z^k}{k^s} \tag{7}$$

这个函数称为 Polylogarithm 函数. 于是得到解析解

$$N = \frac{V}{h^3}(\frac{2\pi m}{\beta})^{\frac{3}{2}} Li_{\frac{3}{2}}(e^{\beta\mu}) \tag{8}$$

整理得到

$$Li_{\frac{3}{2}}(e^{\beta\mu}) = \frac{N}{V} h^3 (\frac{\beta}{2\pi m})^{\frac{3}{2}} = nh^3(\frac{\beta}{2\pi m})^{\frac{3}{2}} \tag{9}$$

其中 $n = \frac{N}{V}$ 是粒子数密度. 容易发现

$$\lim_{\mu\to 0} Li_{\frac{3}{2}}(e^{\beta\mu}) = Li_{\frac{3}{2}}(1) = \zeta(\frac{3}{2}) \approx 2.612 \tag{10}$$

其中 $\zeta(x)$ 是 Riemann zeta 函数. 于是可以解出

$$\frac{1}{\beta} = \frac{2\pi}{(2.612)^{\frac{2}{3}}} \frac{\hbar^2}{m} n^{\frac{2}{3}} \tag{11}$$

这一温度对应的就是 Bose Einstein 凝聚的临界温度.

三、Fermi 能级

考虑由 N 个全同、近独立费米子构成的系统，温度为 T，体积为 V，并假设费米子自旋在其动量方向的投影有两个可能值。通过简单的计算可以得到，此时态密度为

$$D(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{4\pi V}{h^3}(2m)^{\frac{3}{2}}\varepsilon^{\frac{1}{2}}d\varepsilon \tag{12}$$

将其与 Fermi Dirac 分布结合，便得到

$$dn = \frac{4\pi V}{h^3}(2m)^{\frac{3}{2}}\frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}d\varepsilon \tag{13}$$

考虑到粒子数守恒就得到

$$N = \int dn = \frac{4\pi V}{h^3}(2m)^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}d\varepsilon \tag{14}$$

式中积分

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}d\varepsilon = \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}}e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}}{1+e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}}d\varepsilon \\
= &\int_0^\infty \left[\varepsilon^{\frac{1}{2}}e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}\sum_{k=0}^\infty(-1)^k e^{-k\beta(\varepsilon-\mu)}\right]d\varepsilon \\
= &-\sum_{k=1}^\infty\left[\int_0^\infty(-1)^k e^{-k\beta(\varepsilon-\mu)}\varepsilon^{\frac{1}{2}}d\varepsilon\right] \\
= &-\sum_{k=1}^\infty\left(e^{k\beta\mu}\int_0^\infty(-1)^k e^{-k\beta\varepsilon}\varepsilon^{\frac{1}{2}}d\varepsilon\right) \\
= &-\sum_{k=1}^\infty\left[(-1)^k e^{k\beta\mu}\frac{\Gamma(\frac{3}{2})}{(k\beta)^{\frac{3}{2}}}\right] \\
= &-\frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{2\beta^{\frac{3}{2}}}\sum_{k=1}^\infty\frac{(-1)^k e^{k\beta\mu}}{k^{\frac{3}{2}}} = -\frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{2\beta^{\frac{3}{2}}}Li_{\frac{3}{2}}(-e^{\beta\mu})
\end{aligned}$$

于是得到解析解

$$N = -2\frac{V}{h^3}(\frac{2\pi m}{\beta})^{\frac{3}{2}}Li_{\frac{3}{2}}(-e^{\beta\mu}) \tag{15}$$

整理得到

$$Li_{\frac{3}{2}}(-e^{\beta\mu}) = -\frac{1}{2}\frac{N}{V}h^3(\frac{\beta}{2\pi m})^{\frac{3}{2}} = -\frac{1}{2}nh^3(\frac{\beta}{2\pi m})^{\frac{3}{2}} \tag{16}$$

文献[2] 第 17 面指出

$$\lim_{k\to\infty} Li_s(-e^k) = -\frac{k^s}{\Gamma(s+1)} \tag{17}$$

那么就有

$$\lim_{\beta\to\infty} Li_{\frac{3}{2}}(-e^{\beta\mu}) = -\frac{(\beta\mu)^{\frac{3}{2}}}{\Gamma(\frac{5}{2})} = -\frac{4}{3}\pi^{-\frac{1}{2}}(\beta\mu)^{\frac{3}{2}} \tag{18}$$

于是可以解出

$$\mu = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}} \tag{19}$$

这一化学势对应的就是 Fermi 能级.

四、总结

可以看出，两种统计的解析解是很对称的. 对于 Bose Einstein 统计有

$$n = \frac{1}{h^3}(\frac{2\pi m}{\beta})^{\frac{3}{2}} Li_{\frac{3}{2}}(e^{\beta\mu}) \tag{20}$$

对于 Fermi Dirac 统计有

$$n = -\frac{2}{h^3}(\frac{2\pi m}{\beta})^{\frac{3}{2}} Li_{\frac{3}{2}}(-e^{\beta\mu}) \tag{21}$$

最后给出一个计算的总结性公式, 对于正数及半整数 n 有

$$\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{n+1}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}\pm 1}d\varepsilon = \mp\frac{\Gamma(n)}{\beta^n} Li_n(\mp e^{\beta\mu}) \tag{22}$$

事实上，n 可以继续延拓，不必局限于整数及半整数.

参考文献

[1] 汪志诚. 热力学・统计物理 [M]. 第五版. 北京：高等教育出版社，2013：230-231，239-245

[2] David Wood.The Computation of Polylogarithms[R].University of Kent, Computing Laboratory, University of Kent, Canterbury, UK: June 1992.