ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 519.2: 517.9

МОДЕЛЬ СЛАБО НЕИДЕАЛЬНОГО БОЗЕ-ГАЗА. ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД И ЭФФЕКТ ФОНТАНИРОВАНИЯ

В. П. Маслов

(*кафедра квантовой статистики и теории поля*)

E-mail: viktor_maslov@hotmail.com

Рассматривается двухуровневая модель слабо неидеального бозе-газа для метастабильного (сверхтекучего) состояния с парным взаимодействием следующего типа: любые пары бозонов, находящиеся (попавшие) на верхний уровень отдают квант энергии порядка $1/N$, где N — число частиц. Показано, что при некоторой температуре совершается фазовый переход второго рода с критическим индексом $1/2$ и с эффектом фонтанирования — термомеханическим эффектом.

В работе Боголюбова [1] было доказано, что существует метастабильное состояние, для которого в решении уравнения Шрёдингера энергия не минимальна (т. е. скорость не равна нулю) при числе частиц, стремящемся к бесконечности. Этот факт можно трактовать как явление сверхтекучести. Н. Н. Боголюбов рассматривал решения только симметричного вида и не учитывал вихри. В дальнейшем было показано, что возникновение вихря прекращает сверхтечение слабо неидеального бозе-газа. До этого критической точкой между сверхтекучим и обычным течением считалась так называемая точка Ландау. Поведение сверхтекучей жидкости при повышении температуры изучено в работе [2]. Вопрос заключался в следующем. При нагревании сверхтекучая жидкость переходит в нормальное состояние, т. е. начинает течь с торможением или даже, можно сказать, с излучением. Если пренебречь возникновением вихрей (этого можно достигнуть с помощью специальных установок) и взять скорость течения выше точки Ландау, то скорость будет уменьшаться, подобно явлению, когда превышение критической скорости приводит к излучению типа черенковского или к возникновению клина Кельвина за ходом корабля. Интересно рассмотреть поведение этой задачи при изменении температуры, т. е. термодинамику такого явления. Иначе говоря, как по четырем переменным (температура, энтропия, число частиц и химпотенциал) возникают критические точки у текущей жидкости. Эта задача была рассмотрена и решена в общем виде в работе [2]. Однако не был рассмотрен точно решенный конкретный пример.

Сейчас такой пример найден — это двухуровневая система (с сильным вырождением) с простым взаимодействием, когда каждая пара бозе-частиц, попавших на верхний уровень, отдает квант энергии, пропорциональный величине $1/N$ (N — число частиц). Эта простая модель приводит к задаче, учитывающей не только глобальный, но и локальный минимум. Их поведение при изменении температуры можно полностью описать.

Пусть газ имеет два уровня ε_1 и ε_2, $\varepsilon_1 < \varepsilon_2$, а G_1 — число состояний (кратность вырождения) уровня ε_1, G_2 — число состояний (вырождение) уровня ε_2, N_1 — число частиц на уровне ε_1, N_2 — на уровне ε_2, $N_1 + N_2 = N$ [3]. Предположим, что энергия газа уменьшилась на величину V/N для любой пары частиц, попавших на верхний уровень ε_2. Поскольку таких пар всего $\frac{N_2(N_2-1)}{2}$ штук, то энергия газа равна

$$E(N_1, N_2) = \varepsilon_1 N_1 + \varepsilon_2 N_2 - \frac{VN_2(N_2-1)}{2N}. \qquad (1)$$

Уровни энергии $E(N_1, N_2)$ (1) вырождены, соответствующая кратность равна [3]

$$\Gamma(N_1, N_2) = \frac{(N_1 + G_1 - 1)!}{N_1!(G_1-1)!} \cdot \frac{(N_2 + G_2 - 1)!}{N_2!(G_2-1)!}. \qquad (2)$$

Введем энтропию, как это было сделано в наших предыдущих статьях. Собственные значения энтропии имеют вид

$$S(N_1, N_2) = \ln(\Gamma(N_1, N_2)), \qquad (3)$$

кратность этих собственных значений совпадает с (2).

Аналогом термодинамического предела для такой системы является предел при $N \to \infty$, $G_1, G_2 \to \infty$, такой, что $\frac{G_1}{N} = g_1 = \text{const}$, $\frac{G_2}{N} = g_2 = \text{const}$, $\varepsilon_1, \varepsilon_2 = \text{const}$, $V = \text{const}$. Рассмотрим средние числа заполнения для энергетических уровней ε_1 и ε_2: $\overline{n}_1 = N_1/G_1$, $\overline{n}_2 = N_2/G_2$. В данном пределе главные члены внутренней энергии (1) и энтропии (3) выражаются через средние числа заполнения следующим образом:

$$E(N_1, N_2) = G_1\varepsilon_1\overline{n}_1 + G_2\varepsilon_2\overline{n}_2 - \frac{VG_2^2\overline{n}_2^2}{2N}, \qquad (4)$$

$$S(N_1,N_2)=G_1\left((1+\overline{n}_1)\ln(1+\overline{n}_1)-\overline{n}_1)\ln(\overline{n}_1)\right)+ \\ +G_2\left((1+\overline{n}_2)\ln(1+\overline{n}_2)-\overline{n}_2\ln(\overline{n}_2)\right). \tag{5}$$

Свободная энергия равна

$$F(N_1,N_2,\theta)=E(N_1,N_2)-\theta S(N_1,N_2)= \\ =G_1\left(\varepsilon_1\overline{n}_1-\theta\left((1+\overline{n}_1)\ln(1+\overline{n}_1)-\overline{n}_1\ln(\overline{n}_1)\right)\right)+ \\ +G_2\left(\varepsilon_2\overline{n}_2-\theta\left((1+\overline{n}_2)\ln(1+\overline{n}_2)-\overline{n}_2\ln(\overline{n}_2)\right)\right)- \\ -\frac{VG_2^2\overline{n}_2^2}{2N}, \tag{6}$$

где θ — температура. Далее будем считать, что

$$V>\varepsilon=\varepsilon_2-\varepsilon_1. \tag{7}$$

Рассмотрим задачу о нахождении экстремумов удельной свободной энергии (6). Поскольку средние числа заполнения связаны соотношением

$$G_1\overline{n}_1+G_2\overline{n}_2=N, \tag{8}$$

то уравнение экстремума имеет следующий вид:

$$G_2\frac{\partial F}{\partial\overline{n}_1}-G_1\frac{\partial F}{\partial\overline{n}_2}=0. \tag{9}$$

Для удобства дальнейшего исследования введем переменную $n=G_2\overline{n}_2/N=1-G_1\overline{n}_1/N$, которая изменяется от 0 до 1. Тогда свободная энергия (6) выражается следующим образом:

$$F(n,\theta)=N\left(\varepsilon_1+\varepsilon n-\frac{Vn^2}{2}+\theta(n\ln\left(\frac{n}{g_2}\right)- \right. \\ -(g_2+n)\ln\left(1+\frac{n}{g_2}\right)+(1-n)\ln\left(\frac{1-n}{g_1}\right)- \\ \left. -(g_1+1-n)\ln\left(1+\frac{1-n}{g_1}\right)\right). \tag{10}$$

Уравнение (9) теперь может быть записано в виде

$$\frac{\partial F}{\partial n}=0. \tag{11}$$

Уравнение (11) имеет, по крайней мере, одно решение, так как $\frac{\partial F}{\partial n}\to+\infty$ при $n\to1$ и $\frac{\partial F}{\partial n}\to-\infty$ при $n\to0$. Кроме того, поскольку

$$\frac{\partial^4F}{\partial n^4}(n,\theta)=N\cdot2\theta\left(\frac{1}{n^3}-\frac{1}{(g_2+n)^3}+ \right. \\ \left. +\frac{1}{(1-n)^3}-\frac{1}{(g_1+1-n)^3}\right)>0, \tag{12}$$

существует не более трех решений уравнения (11).

Если выполнены условия (7), то легко показать, что при фиксированных параметрах ε, V, g_1, g_2 уравнение (11) имеет три решения — n_1, n_2, n_3 при малых значениях температуры θ и одно решение — n_0 при больших значениях температуры. Асимптотика решений при $\theta\to0$

$$n_1\approx\frac{g_2}{1+g_1}\exp\left(-\frac{\varepsilon}{\theta}\right), \\ n_2-1\approx-\frac{g_1}{1+g_2}\exp\left(-\frac{V-\varepsilon}{\theta}\right), \\ n_3-\frac{\varepsilon}{V}\approx\frac{\theta}{V}\ln\left(\frac{\varepsilon/V}{g_2+\varepsilon/V}\,\frac{g_1+1-\varepsilon/V}{1-\varepsilon/V}\right). \tag{13}$$

При $\theta\to\infty$ асимптотика единственного решения уравнения (11) имеет вид

$$n_0-\frac{g_2}{g_1+g_2}\approx\frac{1}{\theta}\left(V\frac{g_2}{g_1+g_2}-\varepsilon\right)\frac{g_1g_2(1+g_1+g_2)}{(g_1+g_2)^3}. \tag{14}$$

Таким образом, при фиксированных значениях параметров V, ε, g_1, g_2 в зависимости от температуры θ уравнение (11) может иметь три решения, два или одно. Если решений три, функция (6) имеет локальный и глобальный минимумы и максимум, если решений меньше, то функция (6) имеет один глобальный минимум.

Заметим, что глобальный минимум функции (6) совпадает с термодинамической свободной энергией рассматриваемой системы. Покажем, что в данной системе в зависимости от значений параметров V,ε,g_1,g_2 могут происходить фазовые переходы первого рода. Такие фазовые переходы возможны при существовании трех решений уравнения (11). Рассмотрим решения уравнения (11) $n_1(\theta,\varepsilon,V,g_1,g_2)$ и $n_2(\theta,\varepsilon,V_2,g_1,g_2)$, непрерывно зависящие от θ и непрерывно дифференцируемые по θ. Критическое значение температуры определяется из уравнения

$$F(n_1,\theta)=F(n_2,\theta). \tag{15}$$

Если при $\theta<\theta_c$ точками глобального и локального минимумов функции (6) являлись соответственно $n_1(\theta,\varepsilon,V,g_1,g_2)$ и $n_2(\theta,\varepsilon,V_2,g_1,g_2)$, то после превышения температурой критического значения при $\theta>\theta_c$ абсолютный минимум функции (6) достигается при $n=n_2(\theta,V,\varepsilon,g_1,g_2)$, а локальный — при $n=n_1(\theta,V,\varepsilon,g_1,g_2)$. При этом значения внутренней энергии (1) и энтропии (3) изменяются скачком, а это и означает, что происходит фазовый переход первого рода.

Заметим, что локальный минимум функции (6) можно интерпретировать с точки зрения квантовой термодинамики [3] как метастабильное состояние, которое исчезает при повышении температуры. Метастабильное состояние исчезает при температуре θ_0, когда уравнение (11) имеет два решения. При приближении температуры к этому критическому значению со стороны, где существуют три решения, два из этих решений – локальный минимум и максимум функции (6) – приближаются друг к другу и превращаются в одно при достижении критической температуры, а при дальнейшем изменении θ эти решения исчезают (эффект фонтанирования, обнаруженный Аллановым в 1938 г.). Критическая температура θ_0 определяется из уравнения

$$0 = \frac{\partial^2 F}{\partial n^2}(n,\theta) = N\left(-V + \theta\left(\frac{1}{n} - \frac{1}{g_2+n} + \frac{1}{1-n} - \frac{1}{g_1+1-n}\right)\right), \tag{16}$$

где n удовлетворяет уравнению (11). Покажем, что при приближении к критическим значениям производная энтропии по температуре, отвечающая метастабильному состоянию, стремится к бесконечности. Пусть $n = n_0(V,\varepsilon,g_1,g_2)$, $\theta = \theta_0(V,\varepsilon,g_1,g_2)$ удовлетворяют уравнениям (11), (16). Тогда асимптотика решений уравнения (11), отвечающих локальному минимуму и максимуму, при стремлении температуры θ к критическому значению θ_0 имеет вид

$$n - n_0(V,\varepsilon,g_1,g_2) \approx \pm\sqrt{-\frac{2\frac{\partial^2 f}{\partial\theta\partial n}(n_0,\theta)(\theta-\theta_0)}{\frac{\partial^3 f}{\partial n^3}(n_0,\theta)}}. \tag{17}$$

Энтропия, отвечающая решениям уравнения (11), равна

$$S = -\frac{\partial f}{\partial\theta}(n,\theta), \tag{18}$$

где $f = F/N$. Ее производная по температуре выражается следующей формулой

$$\frac{\partial S}{\partial\theta} = -\frac{\partial^2 f}{\partial\theta^2}(n,\theta) - \frac{\partial^2 f}{\partial\theta\partial n}(n,\theta)\frac{\partial n}{\partial\theta} = \ln\left(\frac{g_2+n}{n}\,\frac{1-n}{g_1+1-n}\right)\frac{\partial n}{\partial\theta}. \tag{19}$$

В силу (18) очевидно, что при приближении θ к критическому значению $\theta_0(V,\varepsilon,g_1,g_2)$ выражение (19) растет как $\frac{1}{\sqrt{|\theta-\theta_0|}}$. Таким образом, для метастабильного состояния имеет место фазовый переход с критическим индексом $1/2$.

В заключение заметим, что при некоторых значениях параметров задачи V,ε,g_1,g_2 в рассматриваемой системе возможен фазовый переход второго рода. Он имеет место, если при некоторой температуре θ_c три решения уравнения (11) переходят в одно решение. Температура θ_c выражается из системы уравнений (11), (16) и уравнения

$$\frac{\partial^3 F}{\partial^3 n} = 0. \tag{20}$$

В этом случае описанные выше фазовый переход первого рода и фазовый переход критического индекса $1/2$ для метастабильного состояния не происходят. Можно показать, что при температуре θ_c свободная энергия и энтропия непрерывны, а теплоемкость имеет конечный скачок.

Кривые, идущие от максимальной точки и от локального минимума, в точке фазового перехода пересекаются, и их критический индекс равен $1/2$. В квантовой механике возникает такая же ситуация в точке поворота, вернее даже, в классической механике, потому что вероятность пребывания частицы в данной точке равна единице, деленной на скорость. В точке поворота скорость равна квадратному корню из энергии минус потенциал, а потенциал равен энергии.

Как и в классической механике, в двумерном фазовом пространстве с координатой температуры и «импульсом» энтропии [4, 5] кривая будет гладкой, она совершает поворот. Температура как функция энтропии не содержит особенностей, просто обратная функция неоднозначна и поэтому возникает критическая точка. С точки зрения квантовой теории это — фокальная точка или точка поворота. В точке поворота в данном случае функция Эйри дает асимптотику аналога статистической суммы для метастабильного состояния. В этой точке она имеет особенность: ее предэкспонента равна $N^{1/6}$, т. е. растет. Если эта точка попадает на абсолютный минимум, то она тоже будет точкой фазового перехода. Таким образом, здесь встречаются три кривые: одна исходит из максимума, вторая — из локального минимума, а третья — из абсолютного минимума. Наблюдая за абсолютным минимумом, можно заметить, что происходит скачок теплоемкости без обращения в бесконечность, хотя рядом существуют точки, в которых теплоемкость обращается в бесконечность. Здесь будет маленький подъем, отвечающий переходу типа λ точки, когда логарифмический член выделен [6]. В силу того что фокальные точки сольются в «фазовом» пространстве, т. е. в четырехмерном пространстве, в котором энтропия и число частиц играют роль импульсов, а температура и химпотенциал — роль координат, эта картина распутывается. Из эффекта более высокого порядка, т. е. из геометрического квантования термодинамики, может возникнуть некоторый дополнительный член, который около точки разрыва даст что-то наподобие λ точки [6].

Отметим, что аналогичные результаты получены в фермионном случае, кроме того, рассмотрена модель, в которой взаимодействуют не только частицы на верхнем уровне. Качественная картина фазового перехода останется в этом случае той же.

Литература

1. *Боголюбов Н.Н.* Избранные труды. Т. 2. Киев, 1970.
2. *Маслов В.П.* Ультравторичное квантование и квантовая термодинамика. М., 2001.
3. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. М., 1976.
4. *Маслов В.П.* // ТМФ. 1994. **101**, № 3. С. 433.
5. *Маслов В.П.* // Функциональный анализ и его приложения. 1994. **28**, № 4. С. 28.
6. *Квасников И.А.* Термодинамика и статистическая физика. Т. 1. Теория равновесных систем. Термодинамика. М., 2002.

Поступила в редакцию
30.12.02