МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

УДК 539.12.01

УПРАВЛЯЕМЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД ДЛЯ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ КВАЗИЧАСТИЦ

Кудинов А.Н., Кудинов П.А.
Тверской государственный университет

Обсуждается способ изменения равновесной концентрации дипольных квазичастиц в условиях фазового перехода на основе неэквивалентности классического и квантового статистических ансамблей во внешнем поле.

Method of change of equilibrium concentration dipole quasi-particles in conditions of phase transition on the basis of nonequivalence classical and quantum statistical ensembles in an external field is discussed.

Ключевые слова: фазовый переход, поляризация, статистическая сумма.
Keywords: phase transition, polarization, statistical sum.

Как известно, квантовые закономерности, (благодаря, например, явлению интерференции), вообще говоря, несут в себе больше информации, чем закономерности обычные «колмогоровские», чисто статистические. Поэтому неудивительно, как было показано ранее [3], что даже такая простейшая (хотя и чисто формальная) квантовая статистическая система, как фотонный газ в адиабатическом ящике, обнаруживает достаточно парадоксальное поведение в неравновесном циклическом процессе (не говоря уже о том, что неравновесное фотонное излучение не обязано быть статистически изотропным). Конечно, большинство обычных, не столь экзотичных, квантовых систем имеют вполне тривиальные классические термодинамические свойства, согласно тому, что квантовые эффекты как правило усредняются и не проявляются непосредственно на макроуровне. Однако ясно, что квантовые системы в принципе отличаются от классических, следовательно, их статистические свойства могут быть разными. В связи с чем было бы полезно на примере несложной качественной модели попытаться выяснить эту разницу, что и будет сделано ниже.

Рассмотрим простейший статистический ансамбль аддитивных невзаимодействующих нейтральных квазичастиц массы «m», обладающий всего двумя ортогональными степенями свободы и имеющий две несмешивающиеся фазы агрегатного состояния — конденсированную и газообразную, в равновесии с термостатом при постоянной температуре «T». Пусть ось «x» является направлением обычного поступательного механического движения квазичастиц, вдоль которой также проходит фазовый переход с границей раздела фаз в точке x = 0. А ось «y» является «внутренней» степенью свободы, вдоль которой меняется величина (например, электрической или магнитной) дипольной поляризации «p» квазичастиц и направлено внешнее (соответствующее) поле «E» (рис. 1).

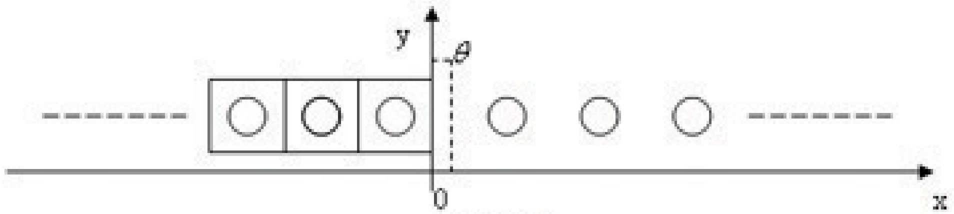

Рис. 1

Предположим для простоты, в отсутствии внешнего поля, каждая свободная квазичастица имеет всего три проквантованных дискретных состояния поляризации $p_i = ip$, характеризуемых квантовым числом $i = \{0, \text{g}\pm 1\}$, обладающих одинаковой энергией, т. е. «триплет», относящийся к одному трехкратно вырожденному энергетическому уровню. Здесь $p = const$. При наличии внешнего поля E в нашем приближении будем полагать, что значение $p_0 = 0$ не меняется (например, из соображений ортогональности или строгой сферической группы симметрии электронной оболочки молекулы данного состояния, принимая это только для упрощения модели), в то время как для $p_{\pm 1} = \pm p + \alpha E$ в связи со «сдвигом уровней» имеется обычная линейная зависимость от поля, с константой поляризуемости $\alpha > 0$.

Статистическая сумма

$$Z(E) = \sum_i \exp(p_i(E)E/kT). \tag{1}$$

Так как конденсированная фаза должна быть более упорядоченной, будем считать, вне зависимости от величины внешнего поля, все квазичастицы конденсированной фазы имеют один фиксированный уровень $p_0 = 0$, то есть внешнее поле на них не действует. Единственным существенным для дальнейшего допущением будет введение правила или условия фазового перехода, согласно которому границу раздела фаз могут пересекать только квазичастицы в состоянии $p_0 = 0$. Это означает, что квазичастицы свободной фазы с ненулевой поляризацией $p_{\pm 1}$ просто не участвуют в фазовом переходе. Осуществление такого условия может быть обеспечено наличием на фазовой границе особого идеализированного устройства θ (рис.1), которое назовем «поляризатором», свободно пропускающего в любом направлении все «резонансные» квазичастицы в состоянии $p_0 = 0$, и полностью непрозрачного для $p_{\pm 1} \neq 0$ квазичастиц.

Подобным поляризатором в квантовой механике может служить какое-либо правило отбора, запрещающее (или просто сильно подавляющее) вероятность фазового перехода с изменением состояния поляризации, возможно вследствие каких-либо принципов симметрии, например в силу закона сохранения углового момента (спина), что характерно и для т. наз. «коллективных» квазичастиц типа поляронов, поведение которых например в кристалле полупроводника зависит от свойств его симметрии на границе перехода. Или например, в целях классического соответствия, представим конденсированную фазу как молекулы одного вещества, адсорбированные в порах (вакансиях) атомной кристаллической решетки другого вещества, а свойства химической связи этих веществ таковы, что («шарообразные» нейтральные) молекулы $p_0 = 0$ застревают в решетке, а другие («эллипсовидные» дипольные) для $p_{\pm 1} = \pm p$ отскакивают от нее. Или существует энергия активации, или катализатор, либо «туннельный эффект», «метастабильное состояние» и т. д. свойства которых зависят от ориентации и величины дипольного момента. Очевидно, нет фундаментального запрета на такой поляризатор, (в противном случае следует его найти). Существование подобных эффектов объективно допустимо в физике, например в виде простого поляризационного фильтра для (переносчиков электромагнитного взаимодействия) обычных фотонов. В любом случае, мы будем полагать, что свойства и линейные размеры поляризатора носят микроскопический характер, порядка размеров самих квазичастиц или области фазового перехода, и не зависят от внешнего поля.

Конденсированная фаза $x < 0$ в нашей модели характеризуется только тремя параметрами: нулевой поляризацией, постоянной работой выхода φ=*const*, не зависящей от поля, и концентрацией квазичастиц n_φ = *const*, которая также поддерживается постоянной (вследствие каких-то источников квазичастиц внутри этой фазы, или просто под действием постоянного «давления» со стороны $x = -\infty$). Что касается газообразной фазы «насыщенного пара», в отсутствие поля ее равновесная концентрация определяется очевидной формулой

$$\overline{n}(E = 0) = Z(0)n_\varphi \exp(-\varphi/kT) = 3n_0. \tag{2}$$

где n_0 =*const* - концентрация свободных квазичастиц с нулевой поляризацией p_0=0.

Рассмотрим теперь две различные конфигурации внешнего поля $E(x)$. В первом случае (рис. 2) $E(x = 0) = 0$ и поле очень медленно линейно возрастает на макроскопическом интервале длины l до некоторого фиксированного значения E при $x = l$, а далее остается неизменным вплоть до $x \to +\infty$

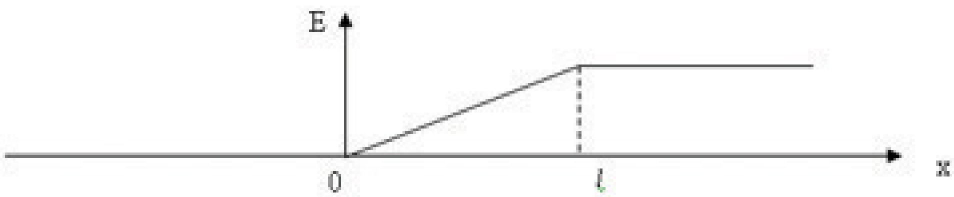

Рис. 2

При постоянном E логично считать поляризацию интегралом движения, когда «внутренняя» энергия квазичастиц $p(E)E$ сохраняется, тогда при медленном квазистатическом изменении поля квазистационарные уровни поляризации $p_i(E)$ зависят от E как от параметра.

Очень существенно, что для разреженной газообразной фазы, по самому своему смыслу, (одномерная) концентрация частиц $n(x)$ должна быть настолько мала, чтобы де-бройлевская длина волны $\lambda \approx \hbar\Big/\sqrt{2mkT}g< n^{-1}$ была много меньше среднего расстояния между частицами. В таком приближении при медленном изменении поля справедливо квазиклассическое описание, и согласно теореме

Эренфеста для локализованных волновых пакетов, по определению виртуальной работы можно использовать обычное выражение усредненной обобщенной силы, действующей на дипольную квазичастицу

$$F(x) = \bar{p}(E)\frac{\partial E}{\partial x} = kT\frac{\partial \ln Z}{\partial x}\bigg|_{p_i=const} = \frac{\sum\limits_i p_i(E)\exp(p_i(E)E/kT)}{Z(E)}\frac{\partial E(x)}{\partial x}. \quad (3)$$

И в то же время из обычных статистических постулатов следует, что распределение равновесной концентрации квазичастиц не изменится, если виртуально разделить газ подвижными перегородками на узкие (но макроскопические) слои, в пределах которых распределение квазичастиц можно считать однородным (иначе просто вдвигая и убирая перегородки, можно было бы менять энтропию). Очевидно, средняя сила, действующая со стороны поля на такой отдельный слой, должна уравновешиваться перепадом давления, которое для идеального газа во всех случаях жизни равно nkT , отсюда из

$$F(x)\bar{n}(x)dx = kTd\bar{n} = \bar{n}\bar{p}(E)dE. \quad (4)$$

получаем обычное классическое распределение Больцмана

$$\bar{n}_c(E) = 3n_0 \exp\left\{ \int\limits_0^E \bar{p}(E)dE \bigg/ kT \right\}. \quad (5)$$

в которое всегда асимптотически переходят обе квантовые статистики, Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна, для любых слабовзаимодействующих частиц, при условии малой плотности чисел заполнения, в достаточно слабом и медленноменяющемся поле.

Во втором случае конфигурация внешнего поля будет иметь вид (рис. 3)

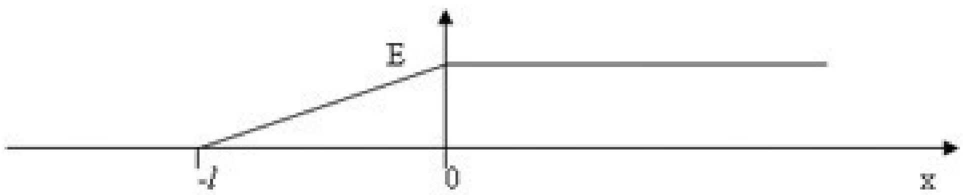

Рис.3

Так как мы полагаем, что ни свойства поляризатора, ни работа выхода не зависят от внешнего поля, то равновесная концентрация неполяризованных квазичастиц в газообразной фазе останется прежней n_0. Отсюда очевидно, полная концентрация

$$\bar{n}_q(E) = Z(E)n_0. \quad (6)$$

И как нетрудно показать

$$\bar{n}_q(E) \neq \bar{n}_c(E), \quad (\bar{n}_q > \bar{n}_c), \quad \text{если} \quad \alpha \neq 0. \tag{7}$$

и совпадают только для $p_i{=}const$, когда поляризация не зависит от поля. Однако как видно в общем случае произвольной зависимости уровней поляризации $p_i(E)$ это не так. Поэтому изменение (макроскопической) конфигурации внешнего поля на фиксированном интервале длины $2l$ изменяет равновесную концентрацию квазичастиц $\bar{n}(E)$ во всей газообразной фазе вплоть до $x \to +\infty$. И если поле создается, например, между пластинами обычного электрического конденсатора, то квазистатически заряжая (сколь угодно большой $x \to +\infty$) конденсатор при одной концентрации (большей) и разряжая при другой (меньшей), для $T{=}const$ мы можем отобрать сколь угодно много энергии у термостата за счет простого изменения емкости этого конденсатора, затрачивая только конечное, и ограниченное количество энергии для изменения поля в интервале (-l,+l) , остается лишь подождать некоторое количество времени (зависящее от линейной величины конденсатора) между перезарядкой, необходимое для изменения равновесной концентрации.

Для возникшего таким образом парадокса можно предложить следующее объяснение. Если рассматривать классическую систему как предельный (асимптотический) случай квантовой, можно заметить, что в квантовой механике результат наблюдения принципиально зависит от типа эксперимента. Так как импульс и координата, вообще говоря, являются несовместными наблюдаемыми, их значения, и значения других наблюдаемых, могут быть различными просто потому, что принадлежат разным экспериментальным полным наборам совместных (коммутирующих) величин. А если выбор того или иного набора, т. е. тип эксперимента определяется каким-либо внешним параметром, типа конфигурации внешнего поля, и внутренняя переменная наподобие поляризации зависит от этого внешнего поля, то и характеристики статистического ансамбля могут зависеть от макроскопического параметра, определяющего применение т. наз. проективного постулата в квантовой физике (что наводит на вопрос о применении известного «парадокса Эйнштейна-Подольского-Розена» к статистике). Условно говоря, изменяя внешние параметры на границе фазового перехода, мы можем сделать его либо «классическим», либо «квантовым». В первом случае играет роль большая неопределенность координат квазичастиц (свободные «дебройлевские» частицы в пустом ящике), и статистическое равновесие достигается только посредством обмена импульсами, которые имеют определенное значение являясь (квази)интегралом движения, следовательно квантовое распределение с хорошим приближением переходит в классическое, делая возможным разделение полной энергии квазичастиц на кинетическую и «внутреннюю», и равновесная концентрация в итоге определяется через классическую макроскопическую функцию средней поляризации единицы объема. Во втором случае напротив, в момент фазового перехода, сама его микроскопическая граница снимает неопределенность местоположения частицы, соответственно импульс здесь неопределен (всякая «размазанная» движущаяся частица становится неподвижной «локализованной» или наоборот), и равновесная концентрация задается теперь только статистической суммой непосредственно через квантовые энергетические уровни поляризации, которые невозможно разделить на чисто «механические» или «внутренние» части и описать классически.

Последнее очевидно характерно не для всех вообще «статистических» частиц.

Например, рассматривая чисто классические броуновские частицы в магнитном поле (внутри которых вмонтированы кристаллы одноосного ферромагнетика), намагниченность которого зависит от проекции магнитного поля вдоль его оси, можно показать, что в этом случае равновесные концентрации совпадают, именно по причине того, что для классических частиц «внутренняя» энергия (в системе собственного центра масс) разделяется на вращательную кинетическую и потенциальную дипольную, а распределение статистического равновесия происходит путем обмена только вращательной (колебательной) энергией. С другой стороны, нет ничего странного в различном поведении классических и квантовых систем (например, квантовые сверхпроводники при температуре выше критической ведут себя как вполне обычные вещества), что мы и хотели продемонстрировать на примере нашей, пусть и предельно упрощенной, но зато математически «прозрачной», модели фазового перехода.

Разумеется, наша точка зрения открыта для дискуссии (говоря словами Нильса Бора, это не утверждение, а вопрос), и объясняется тем, что для идеального газа уравнение состояния одинаковое для классических или квантовых частиц, то есть при наличии только абсолютно упругих механических столкновений между частицами, в случае любой зависимости $p(E)$, классической или квантовой, распределение будет больцмановским (отсюда и возникает «классический» интеграл по изменению поля, который отсутствует для чисто квантового «скачка» на поляризаторе). Кроме того, физические свойства на границе фазового перехода могут зависеть от поля $n_\varphi(E)$, $\theta(E)$, что дополнительно повлияет на концентрацию в случае (рис. 3), но сохранит ситуацию (рис. 2) прежней, то есть различное принципиальное влияние макроскопического параметра (внешнего поля) на типично квантовую (фазовый переход) и квазиклассическую (свободный газ) системы может иметь разный результат, что и было продемонстрировано в данной работе. Подчеркнем, что любой вопрос о практической «реализации» данной абстрактной модели, вне наших предпосылок, здесь не интересует нас вовсе, важно лишь ее чисто формальное соответствие общим принципиальным законам квантовой механики, электродинамики, и статистической физики. Тем не менее, этот вопрос остается открытым, и хотелось бы надеяться на соответствующие поиски более «продвинутых» и реалистичных моделей в предложенном направлении.

Список литературы

[1] Берклеевский курс физики, т. 5. Статистическая физика, Ф. Рейф, пер. с англ., «Наука», 1977.

[2] Квантовая механика и физика элементарных частиц, А. Садбери, пер. с англ., «Мир», 1989.

[3] П. А. Кудинов. Парадокс, или квантовый вечный двигатель, ТвГУ, 1999.