Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. П. Маслов, Фазовый переход из “конденсатного” состояния, *Матем. заметки*, 2003, том 74, выпуск 4, 637–640

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm597>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.172.240.79

26 апреля 2023 г., 16:52:36

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД ИЗ “КОНДЕНСАТНОГО” СОСТОЯНИЯ

В. П. Маслов

Пусть $\mathbf{R}$ – вероятностное пространство $(\Omega, \mathcal{F}, P)$, Q – вероятностная мера на $(\Omega, \mathcal{F})$, $Q \ll P$, $\int_{\Omega} dQ = N$.

Положим

$$S_M(Q, P) = \frac{1}{N} \int_{\Omega} \ln \Gamma \left(\frac{dQ}{dP} \right) dP.$$

Если $dQ/dP \rightarrow \infty$, при $N \rightarrow \infty$, то предел

$$\lim_{M \rightarrow \infty} S_M(Q; P) = H(P, Q),$$

где $H(P, Q)$ – относительная энтропия или информация Кулльбака–Лейблера (см. [1]).

Имеет место некоторый закон термодинамики, который не сформулирован четко как закон, но постоянно используется при рассмотрении различных физических задач. Н. Н. Боголюбов называет его принципом “энергетической выгодности”. Точнее говоря, энергию, к которой он приводит, Боголюбов называет “энергетически выгодным состоянием”.

Напомним, что энергетические состояния или энергетические уровни в квантовой механике суть собственные значения некоторого самосопряженного оператора, называемого оператором энергии. Для простоты будем считать оператор конечномерной матрицей.

Имеются две характеристики собственного значения – одна внутренняя, его кратность, другая внешняя. Если собственные значения суть энергетические уровни, то эта внешняя характеристика равна числу частиц, находящихся на данном уровне энергии (боровской орбите атома). Мере dP отвечает внутренняя характеристика или размерность подпространства, соответствующая данному уровню, деленная на размерность всего пространства, а мере dQ – число частиц, сидящих на данном уровне; $\int_{\Omega} dQ = N$ – число всех частиц.

Энергетически выгодное состояние – это такое состояние, когда все частицы находятся на нижнем уровне. А если учитывается принцип Паули, запрещающий находиться в одном состоянии более чем одной частице, то частицы должны занять все нижние уровни.

В предыдущих работах [2], [3] вводились относительные энтропии, отвечающие бозе- и ферми-статистикам. Кроме вероятностных мер P и Q мы вводим еще одну меру $\mu \ll P$ такую, что $\int_{\Omega} d\mu = K$. Их обобщение на случай, когда числа испытаний равны соответственно N и K , имеет следующий вид:

$$S_{N,K}^B = \int_{\Omega} \frac{1}{N+K} \ln \frac{1}{N} \Gamma \left(\frac{dQ}{dP} + \frac{d\mu}{dP} \right) - \frac{1}{N} \ln \Gamma \left(\frac{dQ}{dP} + 1 \right) - \frac{1}{K} \Gamma \left(\frac{d\mu}{dP} \right)$$

для бозе-статистики (осреднение по набору близких по значению энергий) и

$$S_{N,K}^F = \frac{1}{K} \ln \left(\frac{d\mu}{dP} + 1 \right) - \frac{1}{N} \ln \Gamma \left(\frac{dQ}{dP} + 1 \right) - \frac{1}{K+N} \ln \Gamma \left(\frac{d\mu}{dP} - \frac{dQ}{dP} + 1 \right)$$

для ферми-статистики (если имеет место принцип Паули).

Рассматривается минимум свободной энергии, ε_i – уровни энергии, N_i – число частиц, находящихся на ε_i уровне.

Решение задачи

$$\min \left(\beta \sum N_i \varepsilon_i - S_N \right)$$

относительно N_i определяется из неявного уравнения

$$\beta \varepsilon_i = \int_0^1 \frac{1 - z^{N_i}}{1 - z} dz,$$

что следует из известной формулы для логарифмической производной от Γ -функции. Это распределение при условии $\sum N_i = N$ для больших N_i совпадает с распределением Гиббса. Отметим, что распределение Гиббса в физической литературе определяется для целых N_i , однако в окончательной формуле N_i получаются нецелые.

Распределение для бозе- и ферми-статистик получаются соответственно.

Рассмотрим модель идеального бозе-газа N частиц, каждая из которых может находиться на одном из двух энергетических уровней. Будем считать, что энергия нижнего уровня равна 0, а энергия верхнего равна ε ; кроме того, кратность нижнего уровня равна 1, а верхнего – $G \geq 1$. Уровни энергии такого идеального газа имеют вид

$$E_k = \varepsilon k, \quad k = 0, 1, \dots, N, \quad (1)$$

где k – число частиц, находящихся на верхнем энергетическом уровне.

Кратности энергетических уровней (1) имеют вид

$$\mathcal{G}_k = \frac{(k + G - 1)!}{k! (G - 1)!}. \quad (2)$$

Собственные значения свободной энергии при температуре θ суть

$$F_k(\theta) = E_k - \theta \ln(\mathcal{G}_k). \quad (3)$$

Будем теперь считать, что число частиц на энергетическом уровне является непрерывной величиной, а значения свободной энергии имеют вид

$$F(k, \theta) = \varepsilon k - \theta \ln \left(\frac{\Gamma(k + G)}{\Gamma(k + 1) \Gamma(G)} \right), \quad (4)$$

где Γ – гамма-функция Эйлера. Очевидно, что при целых значениях k выражение (4) совпадает с (3). Число частиц, находящихся на нижнем уровне равно $N - k(\theta)$, где $k(\theta)$ – точка, в которой функция (4) имеет минимальное значение на отрезке $k \in [0, N]$. Критическая температура θ_c , при которой происходит “полное” исчезновение конденсата, т.е. температура, при которой число частиц на нижнем уровне становится равным 0, имеет вид

$$\theta_c = \frac{\varepsilon}{\Psi(G + N) - \Psi(N + 1)}, \quad (5)$$

где $\Psi(x) = \Gamma'(x)/\Gamma(x)$ – производная логарифма гамма-функции. Если $\theta \geq \theta_c$, то $k(\theta) = N$, а при $\theta < \theta_c$ $k(\theta)$ определяется из следующего уравнения:

$$\Psi(G + k(\theta)) - \Psi(k(\theta) + 1) = \frac{\varepsilon}{\theta}. \quad (6)$$

Рассмотрим выражения (5) и (6) в пределе при $N \rightarrow \infty$; будем считать при этом, что G зависит от N так, что выполняется условие

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{G}{N} = g > 0. \quad (7)$$

Учтем, что для логарифмической производной гамма-функции имеет место следующее равенство:

$$\Psi(G+k) - \Psi(k+1) = \int_0^1 dt \frac{t^k - t^{G+k-1}}{1-t}. \quad (8)$$

Исходя из (8), используя (5), получим, что

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \theta_c = \frac{\varepsilon}{\ln(1+g)}. \quad (9)$$

Из (6) следует также, что в пределе при $N \rightarrow \infty$ при условии (7) $k(\theta)$ при $\theta < \theta_c$ имеет вид

$$k(\theta) = N \frac{g}{\exp(\varepsilon/\theta) - 1} + O(1). \quad (10)$$

Рассмотрим в этом предельном случае температуры $\theta(m)$, при которых происходит частичное исчезновение конденсата, т.е. на нижнем уровне находится $m = O(N^\delta)$, где $\delta < 1$, частиц. Подставляя в (6) $k(\theta) = N - m$, получим выражение

$$\theta(m) = \frac{\varepsilon}{\Psi(G+N-m) - \Psi(N-m+1)}. \quad (11)$$

В пределе при $N \rightarrow \infty$ и при условии (7) это выражение примет вид

$$\theta(m) = \frac{\varepsilon}{\ln(1+g)} + O\left(\frac{m}{N}\right). \quad (12)$$

Из формулы (12) очевидно, что в бозонном случае частичное исчезновение конденсата происходит при температурах, близких к температуре его полного исчезновения. Заметим, что из (11) следует, что существует температура θ_0 такая, что при $\theta \leq \theta_0$ все частицы находятся на нижнем уровне. Эта температура имеет вид

$$\theta_0 = \frac{\varepsilon}{\Psi(G) - \Psi(1)}. \quad (13)$$

Очевидно, что в пределе при $N \rightarrow \infty$ и выполненном условии (7) θ_0 стремится к 0 как $\varepsilon/\ln(N)$.

Покажем, чем отличается случай, когда частицы газа являются различимыми. В этом случае кратность собственных значений (1) имеет вид

$$\mathcal{G}_k = \frac{N! G^k}{k! (N-k)!}. \quad (14)$$

Значения свободной энергии в этом случае принимают вид

$$F(k, \theta) = \varepsilon k - \theta \ln \left(\frac{\Gamma(N+1) G^k}{\Gamma(k+1) \Gamma(N-k+1)} \right). \quad (15)$$

Так же, как ранее, будем считать, что число частиц на верхнем уровне равно значению $k(\theta)$, при котором функция (15) минимальна. В данном случае температура, при которой на нижнем уровне находится $0 < m < N$ частиц, выражается следующим образом:

$$\theta(m) = \frac{\varepsilon}{\ln(G) + \Psi(m+1) - \Psi(N-m+1)}. \quad (16)$$

Из формулы (16) следует, что в больцмановском случае также существует температура θ_0 такая, что при $\theta \leq \theta_0$ все частицы находятся на нижнем уровне, эта температура имеет вид

$$\theta_0 = \frac{\varepsilon}{\ln(G) + \Psi(N+1) - \Psi(1)}. \quad (17)$$

В пределе при $N \rightarrow \infty$ и при выполненном условии (7) θ_0 стремится к 0 как $\varepsilon/2 \ln(N)$. Далее, поскольку правая часть равенства (16) является убывающей функцией переменной m , то очевидно, что “полное” исчезновение конденсата в системе возможно, только если выполнено неравенство

$$\ln(G) + \Psi(1) - \Psi(N+1) > 0. \quad (18)$$

Если это неравенство справедливо, то конденсат исчезает полностью при температуре θ_c :

$$\theta_c = \frac{\varepsilon}{\ln(G) + \Psi(1) - \Psi(N+1)}, \quad (19)$$

и при температурах $\theta \geq \theta_c$ на нижнем уровне нет частиц. Если же неравенство (18) не справедливо, то с повышением температуры число частиц на нижнем уровне уменьшается, но не достигает нулевого значения и стремится при $\theta \rightarrow \infty$ к m_∞ , где m_∞ определяется из уравнения

$$\ln(G) + \Psi(m_\infty + 1) - \Psi(N - m_\infty + 1) = 0. \quad (20)$$

Рассмотрим предел при $N \rightarrow \infty$, считая, что условие (7) выполнено. Имеет место следующее асимптотическое равенство:

$$\Psi(N+1) - \Psi(1) = \ln(N) + C + O(1), \quad (21)$$

где C – постоянная Эйлера. Поэтому условие полного исчезновения конденсата (18) примет вид

$$g > e^C, \quad (22)$$

Для критической температуры (19) при выполнении условия (22) справедливо равенство

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \theta_c = \frac{\varepsilon}{\ln(g) - C}. \quad (23)$$

Кроме того, очевидно, что если (22) выполнено, а число частиц на нижнем уровне m есть $O(1)$, то для температуры частичного исчезновения конденсата $\theta(m)$ из (16) получим следующую асимптотику:

$$\theta(m) = \frac{\varepsilon}{\ln(g) + \Psi(m+1)} + o(1). \quad (24)$$

При выводе этой формулы учтено, что $\Psi(1) = -C$. Из (24) следует, что в случае бoльцмановского идеального газа температура частичного исчезновения конденсата не является близкой к температуре полного исчезновения конденсата и существенно зависит от m . Если неравенство (22) не выполнено, то из (20) следует, что

$$\lim_{N \rightarrow \infty} m_\infty = \tilde{m}_\infty = O(1), \quad (25)$$

где $\tilde{m}_\infty$ – решение следующего уравнения:

$$\ln(g) + \Psi(\tilde{m}_\infty + 1) = 0. \quad (26)$$

Из (25) следует, что хотя при увеличении температуры частицы на нижнем уровне не исчезают полностью, но их число есть $O(1)$ и мало по сравнению с полным числом частиц N в газе.

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Маслов В. П., Черный А. С. О минимизации и максимизации энтропии в различных дисциплинах // Теор. вероятн. и ее примен. 2003. Т. 48. № 4 (в печати).
2. Маслов В. П. // Теор. вероятн. и ее примен. 2003. Т. 48. № 2. С. 482–502.
3. Маслов В. П. // Проблемы передачи информации. 2003. Т. 39. № 3.
4. Маслов В. П. // Матем. заметки. 2002. Т. 71. № 4. С. 558–566.
5. Маслов В. П. // Докл. РАН. 2002. Т. 385. № 4. С. 456–459.
6. Маслов В. П. // ТМФ. 2002. Т. 132. № 3. С. 388–389.
7. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика. М.: Наука, 1995.