

М. Е. ПЕРЕЛЬМАН

К МИКРОСКОПИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

(Представлено академиком А. Д. Сахаровым 19 VII 1971)

В настоящей статье предлагается микроскопическая модель фазовых переходов как насыщения электрон-фотонных переходов между основными уровнями разных фаз. Вириальные разложения в такой модели суммируются полностью и приводят к разрывам термодинамического потенциала. Модель предсказывает существование характеристического излучения при фазовых переходах, возможности существования стимулированных излучением переходов и может быть проверена экспериментально.

1. Фазовые переходы можно характеризовать как переходы между состояниями, разделенными энергетической щелью (которой в переходах I рода соответствует скрытая теплота перехода). Переход из вышележащего энергетического состояния вниз является объемным эффектом и может быть весьма быстрым даже для макроскопически больших масс вещества (например, кристаллизация переохлажденной жидкости). Теплоотвод при таком переходе не может, во всяком случае полностью, совершаться за счет теплопередачи, так как это привело бы к разогреву окружающей среды — жидкости и резервуара — и затруднило бы кристаллизацию.

Поэтому представляется разумным предположить, что такой переход носит излучательный характер, т. е. предположить, что с микроскопической точки зрения кинетику фазового перехода I рода можно описать как переход атомов (молекул) с одного энергетического уровня на другой (например, из основного состояния жидкости в основное состояние кристалла) с излучением одного или нескольких фотонов.

Простейший вариант рассматриваемой гипотезы приводит к модели, в которой обе фазы представлены одинаковыми (основными для них) уровнями. Излучение в такой двухуровневой системе лежит в далекой инфракрасной области, но частоты этого переходного или фазового излучения могут быть много выше частот теплового излучения (пересчет теплот переходов на одну молекулу приводит, например, для конденсации водяного пара к длине волны $\lambda \sim 2,5 \mu$, а при образовании льда к $\lambda \sim 19 \mu$). Если ширина основных состояний обеих фаз достаточно мала, то, очевидно, можно стимулировать фазовый переход резонансным излучением.

В рамках модели естественно также предположить, что фазовые переходы вниз, как спонтанные, так и стимулированные, могут наблюдаться лишь тогда, когда среда становится прозрачной на частотах перехода, и именно зависимость коэффициента прозрачности от внешних факторов определяет температуру и давление точки перехода. (Можно, в принципе, попытаться объяснить на основе этой модели условия образования аморфных твердых тел как сред малой прозрачности в области характеристического фазового излучения.)

Также могут быть рассмотрены фазовые переходы II рода, узость щели в которых приближает фазовое излучение к микроволновому диапазону. Совершенно очевидна применимость предложенной модели к недавно открытым фазовым переходам в атомных ядрах ⁽¹⁾.

2. Поскольку фазовый переход сопоставляется насыщению электронных переходов в двухуровневой системе, то такая модель может рассмат-

риваться как обобщение на случай конечных температур расчетов, проведенных в наших работах ^(2, 3). В этих работах в рамках квантовой электродинамики были построены и просуммированы бесконечные вириальные разложения для взаимодействий интенсивных потоков резонансных фотонов плотности j со связанным электроном. Изучавшиеся процессы характеризуются порогами процессов по j . Было показано, что эти пороги являются полюсами вириального разложения и что в духе теории времени задержки они объясняются насыщением взаимодействия электронов, находящихся на данном уровне, и их переходом на другой уровень (или перестройкой системы уровней) с включением нового типа взаимодействия (канала реакции). Пороговая плотность потока фотонов оказывается равной

$$j_{0, k} \simeq 1 / (\lambda^2 \tau_k), \quad (1)$$

где λ — длина волны, τ_k — время задержки в упругом ($e - \gamma$)-рассеянии по каналу k . При $j > j_{0, k}$ открываются новые каналы реакции с иным τ , что соответствует изменению типа взаимодействия фотонов с атомами, а следовательно, и атомов друг с другом, т. е. соответствует фазовому переходу (отметим, что аналогия между порогом лазерного режима и фазовым переходом II рода исследовалась в ^(4, 5)).

Рассчитаем, следуя ⁽²⁾, взаимодействие одного атома (молекулы, системы уровней) с далекими частицами через свободные фотоны (ср. ⁽⁶⁾). Температурно-временную функцию Грина связанного электрона возьмем в виде

$$G_{\nu, \lambda}(x_1, x_2; T, \mu) = -i \sum_{N, n} e^{\beta(\Omega + \mu N - E_n)} \langle E_n, N | \{\psi_\nu(x_1), \psi_\lambda(x_2)\}_+ | E_n, N \rangle, \quad (2)$$

где $\psi(x)$ — волновая функция связанного электрона в системе уровней n с полуширинами Γ_n . Для ферромагнитных тел фурье-образ (2) принимает вид

$$G(r_1, r_2; \omega) \approx - (2\pi)^3 \sum_{n, m} \exp [\beta(\Omega + \mu N_n - E_n)] \frac{1}{2s + 1} \sum_{\alpha} (\psi_{\alpha}(r_1))_{n, m} \times \\ \times (\psi_{\alpha}^+(r_2))_{n, m} \frac{1 \pm \exp(-\beta\omega_{n, m})}{\omega_{nm} - \omega - i\Gamma_{nm}}. \quad (3)$$

Гриновская функция (2) соответствует стационарному состоянию в отсутствие излучения. В согласии с обычной процедурой перехода к представлению взаимодействия (или точнее к представлению Фарри) в теории поля примем, что все ($e - \gamma$)-взаимодействия описываются стандартными графиками Фейнмана, где для пропагатора внутренней электронной линии используется стационарная функция Грина (2). Именно эти соображения позволяют пользоваться термодинамическими функциями в рассматриваемой неравновесной задаче.

Расчеты ($e - \gamma$)-взаимодействий с помощью (3) для двухуровневой системы отличаются от проведенных в ^(2, 3) лишь наличием у каждой электронной линии множителя

$$\Delta_n = (1 + \exp(-\beta\omega_0)) \exp [\beta(\Omega + \mu N_n - E_n)]. \quad (4)$$

Суммирование полученных вириальных разложений приводит к скорости реакции с полюсами, соответствующими насыщению рассматриваемого канала взаимодействия, и к открытию нового канала при приближении интенсивности потока фотонов к величине

$$\bar{j}_0 \equiv j_0 / (\Delta_1 \Delta_2) = (\lambda^2 \tau \Delta_1 \Delta_2)^{-1}, \quad (5)$$

т. е. при температуре, когда плотность теплового излучения частоты $\sim \omega_0$ равна $\bar{j}_0$.

Поскольку при $j \sim \bar{j}_0$ из (4) и (5) следует

$$\Omega_k = \frac{1}{2\beta} \{-\mu N + E - \ln \tau_k \cdot [2\lambda^2 j (1 + \operatorname{ch} \beta \omega_0)]\}, \quad (6)$$

то при насыщении одного типа взаимодействия и при переходе к другому типу свободная энергия испытывает скачок

$$\Delta \Omega_k = \Omega_{k+1} - \Omega_k = -\frac{1}{2\beta} \ln (\tau_2/\tau_1) \sim -\frac{1}{\beta} \ln (\Gamma/(2\omega_0)), \quad (7)$$

который и отвечает фазовому переходу. Такой же скачок для $\partial S(j)/\partial t$ можно получить из немарковских уравнений Пригожина — Рисебуа, в которых для момента времени t вероятность представляется вириальными суммами до $n_k = [t/\tau_k]$ и учтена возможность насыщения.

Таким образом, фазовые переходы микроскопически описываются как изменение длительности взаимодействия частиц (ср. (7)), а поскольку τ выражается через S -метрику, то и они могут быть описаны в S -матричной статистической механике (8).

В более реалистической модели фазовых переходов нужно учитывать остальные уровни системы, возможность интерференции амплитуд рассеяния (3), зависимость ω_n и Γ_n от экстенсивных параметров, весь спектр теплового излучения, рассматривать фононные взаимодействия и т. п., но все это, однако, не меняет принципиальных результатов о существовании фазовых переходов в подобных моделях и их определяемости через длительности элементарных актов взаимодействия.

Рассмотренные фазовые переходы являются, очевидно, частным случаем макроскопических явлений, для которых существенную роль играет насыщение электрон-фотонных взаимодействий (фазовые переходы II рода, химические реакции и т. д.).

Автор выражает глубокую благодарность Н. Б. Делоне, Л. В. Келдышу, А. Д. Сахарову, Е. С. Фрадкину, В. В. Чавчанидзе за полезные обсуждения.

Институт кибернетики
Академии наук ГрузССР
Тбилиси

Поступило
15 VII 1971

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ G. Scharff-Goldhaber, A. S. Goldhaber, Phys. Rev. Lett., **24**, 1349 (1970). ² М. Е. Перельман, Phys. Lett., **32A**, 64 (1970); ЖЭТФ, **58**, 2139 (1970). ³ М. Е. Перельман, Сообщ. АН ГрузССР, **59**, 569 (1970); М. Е. Перельман, В. Г. Арутюнян, ЖЭТФ, **62**, в. 2 (1972); М. Е. Перельман, Г. М. Рубинштейн, ДАН, **203**, № 4 (1972). ⁴ R. Graham, H. Haken, Zs. Phys., **237**, 31 (1970). ⁵ V. De Giorgio, M. O. Scully, Phys. Rev. A, **2**, 1170 (1970). ⁶ G. Feinberg, J. Sucher, Phys. Rev. A, **2**, 2395 (1970). ⁷ M. D. Delano, Phys. Rev. A, **1**, 1175 (1970). ⁸ R. Dashen, S.-k. Ma, H. J. Bernstein, Phys. Rev., **187**, 345 (1969).