

Лекция 1 Модель Изинга. Теория среднего поля и теория Ландау.

Значительная часть этого курса будет посвящена методам теоретического исследования поведения вещества вблизи критических точек фазовых переходов. Основная особенность критических точек состоит в том, что в них наблюдается крупномасштабная корреляция флуктуаций различных микроскопических параметров вещества. Это приводит к тому, что физические величины меняются от точки к точке медленно и допускают описание непрерывными полями. Таким образом, статистическая сумма (точнее, вклад в статсумму от таких коррелированных флуктуаций) в некотором приближении превращается в функциональный интеграл, формально совпадающий с функциональным интегралом квантовой теории поля.

Что же такое фазовый переход. Давайте рассмотрим простую статистическую модель. Рассмотрим простую d -мерную кубическую решетку, то есть некоторую область из N узлов в \mathbb{Z}^d , с шагом a . На каждом узле \mathbf{r} решетки пусть будет расположена «спиновая» переменная $\sigma_{\mathbf{r}}$, принимающая для простоты два значения ± 1 . Совокупность значений спинов $C = \{\sigma_{\mathbf{r}}\}$ образует *конфигурацию*. Для простоты будем считать, что гамильтониан системы будем считать диагональным в базе конфигураций, так что система описывается функционалом полной энергии $E(C)$. Статистическая сумма в этом случае сводится к классической статистической сумме по конфигурациям:

$$Z = \sum_C e^{-\beta E(C)}, \quad (1)$$

где $\beta = 1/T$ — обратная температура. В этом и только в этом смысле мы будем говорить об этой модели как о модели классической статистической механики.

Считается, что фазовые переходы, приводящие к макроскопическим эффектам в масштабах всего образца, таких как магнитное упорядочение, обязаны своим происхождением короткодистанционному взаимодействию в системе, поэтому мы будем рассматривать модель с локальным взаимодействием вида

$$E(C) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'} I(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sigma_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}'}, \quad (2)$$

где $I(\mathbf{r}) = I(-\mathbf{r})$ — константы связи, убывающие достаточно быстро с ростом $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Такая модель называется *моделью Изинга*. Часто мы будем допускать еще большее упрощение, считая что константы связи отличны от нуля только для ближайших соседей:

$$E(C) = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{r}, \mathbf{n} \\ |\mathbf{n}|=a}} I_{\mathbf{n}} \sigma_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}+\mathbf{n}}, \quad I_{\mathbf{n}} = I_{-\mathbf{n}}. \quad (3)$$

Зададимся вопросом: что такое фазовый переход? Из эксперимента мы знаем, что, например, в ферромагнетике при достаточно низких температурах возникает спонтанная намагниченность, причем при понижении температуры вещество расслаивается на несколько фаз, в каждой из которых магнитный момент направлен в свою сторону. Если приложить достаточно сильное однородное магнитное поле, то весь образец перейдет в состояние, в котором магнитный момент будет направлен по полю. Если снять магнитное поле, то образец в течение очень долгого времени останется однородно намагниченным. Если образец настолько мал, что можно пренебречь энергией собственного магнитного поля, создаваемого этим моментом, то для переориентации момента в одну сторону достаточно слабого магнитного поля (но ждать переориентации придется достаточно долго). Важно то, что состояние со спонтанной намагниченностью, строго говоря, не соответствует термодинамическому равновесию, так как симметрия системы ниже симметрии ее гамильтониана: гамильтониан обладает центральной симметрией или даже может быть почти изотропен, а спонтанный момент случайным образом выбирает определенное направление в пространстве. В то же время в макроскопической системе для восстановления симметрии требуется астрономически долгое время, так что нарушение симметрии является фактически равновесным «в большом объеме». При повышении температуры намагниченность уменьшается и в некоторой точке (точке Кюри T_K) исчезает.

В случае перехода жидкость-газ ситуация, в принципе, аналогична, хотя симметрии здесь и нет. Если мы движемся вдоль кривой перехода на плоскости p — T , то в каждой точке кривой

существуют две фазы, жидкая и газообразная, каждая из которых в данной точке не является равновесной. Равновесной является смесь двух фаз, при которой восстановлению «симметрии» соответствует флуктуационное изменение границ фаз. Роль внешнего поля здесь может играть, например, температура, небольшое изменение которой немедленно стабилизирует одну из фаз. Если мы увеличиваем давление вдоль кривой равновесия, мы можем достичь точки, где разница между плотностями двух фаз исчезает и сам переход между жидкостью и газом за этой точкой происходит непрерывно. Такая точка называется *критической*.

Рассмотрим модель Изинга со строго положительными константами связи $I(\mathbf{r})$. В системе имеется два очевидных вырожденных основных состояния C_+ и C_- в которых все спины равны $+1$ и -1 соответственно. При низких температурах статистическую сумму можно разложить в ряд по числу «перевернутых спинов»:

$$Z = 2e^{\frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'} I(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \left(1 + \sum_{\mathbf{r}} e^{-\beta \sum_{\mathbf{r}'(\neq \mathbf{r})} I(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}_1 \neq \mathbf{r}_2} e^{-\beta \sum_{\mathbf{r}'(\neq \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)} (I(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}') + I(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}'))} + \dots \right). \quad (4)$$

Общий множитель 2 связан с тем, что имеется эти два состояния и должен быть учтен только в случае, когда мы учитываем только небольшое количество первых слагаемых в разложении. Средний спин в системе

$$\langle \sigma_{\mathbf{r}} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_C \sigma_{\mathbf{r}}(C) e^{-\beta E(C)} \quad (5)$$

будет равен нулю в силу симметрии системы относительно обращения всех спинов одновременно. Но если мы будем учитывать только те члены в разложении (4), для которых число спинов, например, вверх будет больше чем число спинов вниз (разложение вблизи C_+), то мы получим ненулевое вакуумное среднее. Обозначив выражение в скобках в (4) через Z' , имеем

$$s_{\text{sp}} = \langle \sigma_{\mathbf{r}_0} \rangle_+ = 1 - \frac{2}{Z'} e^{-\beta \sum_{\mathbf{r}'(\neq \mathbf{r}_0)} I(\mathbf{r}_0-\mathbf{r}')} - \frac{2}{Z'} \sum_{\mathbf{r}(\neq \mathbf{r}_0)} e^{-\beta \sum_{\mathbf{r}'(\neq \mathbf{r}_0, \mathbf{r})} (I(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}') + I(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}'))} + \dots \quad (6)$$

Эта величина стремится к единице при $T \rightarrow 0$ и падает с ростом температуры. Очевидно, это и есть то, что наблюдается как спонтанная намагниченность.

Можно было бы рассуждать более строго. Введем внешнее однородное поле h , модифицировав энергию так:

$$E_h(C) = E(C) - h \sum_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}}(C). \quad (7)$$

После этого можно вычислить зависимость среднего спина $s(h) = \langle \sigma_{\mathbf{r}} \rangle_h$ от поля h с суммированием по всем конфигурациям системы. При низкой температуре и $h > 0$ вероятность основного состояния C_+ в $e^{N\beta h}$ более вероятным, чем состояние C_- . Если $N \sim 10^{23}$, то понятно, что даже очень слабое поле приведет к тому, что членами вблизи состояния C_- надо будет пренебречь. Это значит, что на бесконечной решетке при достаточно низких температурах средний спин $s(h)$ не исчезает при $h \rightarrow 0$:

$$\lim_{h \rightarrow +0} \lim_{N \rightarrow \infty} s(h) = - \lim_{h \rightarrow -0} \lim_{N \rightarrow \infty} s(h) = s_{\text{sp}} \neq 0, \quad T < T_c. \quad (8)$$

При высоких температурах симметрия должна как-то восстанавливаться. Не очевидно, что это будет происходить при конечной (ненулевой и небесконечной) температуре. Тем не менее, одно простое качественное рассуждение может прояснить ситуацию.

Рассмотрим изотропную модель Изинга с взаимодействием только ближайших соседей. Будем представлять себе возбуждения над основным состоянием C_+ как «капли» состояния C_- , окруженные доменными стенками, на которых только и соседствуют спины разного знака. Энергия такого состояния пропорциональна совокупной площади A (в единицах a^{d-1}) всех доменных стенок:

$$E = 2IA.$$

Пусть имеется n_k капель, содержащих по $k = 1, 2, 3, \dots$ узлов каждая. Будем считать, что капля размера k имеет характерную площадь поверхности $c_d k^{(d-1)/d}$ с некоторыми константами c_d . Поэтому

$$A = c_d \sum_k k^{\frac{d-1}{d}}.$$

Поскольку «внутренняя» энтропия одной капли размера k много меньше энтропии k капель размера 1, мы ей пренебрежем по сравнению с энтропией перемещения капли по решетке. Таким образом, энтропию можно оценить как

$$S = N \log N - (N - n) \log(N - n) - \sum_k n_k \log n_k, \quad n = \sum_k n_k.$$

Теперь найдем минимум свободной энергии $F = E - TS$:

$$0 = \frac{\partial F}{\partial n_k} = 2Ic_d k^{\frac{d-1}{d}} - T \log \frac{N - n}{n_k}.$$

Отсюда получаем

$$n_k = (N - n) e^{-2Ic_d k^{\frac{d-1}{d}} / T}.$$

Складывая, находим

$$\frac{n}{N} = \frac{\sum_k e^{-2Ic_d k^{\frac{d-1}{d}} / T}}{1 + \sum_k e^{-2Ic_d k^{\frac{d-1}{d}} / T}}.$$

Окончательно, получаем

$$\frac{n_k}{N} = \frac{e^{-2Ic_d k^{\frac{d-1}{d}} / T}}{1 + \sum_l e^{-2Ic_d l^{\frac{d-1}{d}} / T}}.$$

Отсюда мы можем оценить долю перевернутых спинов:

$$\frac{1 - \langle \sigma \rangle_+}{2} = \frac{N_-}{N} = \frac{1}{N} \sum_k k n_k = \frac{\sum_k k e^{-2Ic_d k^{\frac{d-1}{d}} / T}}{1 + \sum_k e^{-2Ic_d k^{\frac{d-1}{d}} / T}}.$$

При $d > 1$ сумма сходится и дает

$$\langle \sigma \rangle_+ = 1 - 2e^{-\frac{2Ic_d}{T}}, \quad T \ll I.$$

Можно ожидать, что при $T \sim I$ происходит фазовый переход в симметричную фазу. При $d = 1$ сумма расходится, что можно интерпретировать как отсутствие в одном измерении фазового перехода. Средний спин в одном измерении всегда равен нулю.

Давайте уточним оценку для $d = 1$. В одномерном случае мы можем вполне строго рассматривать систему как газ доменных стенок. Если в цепочке длины N имеется n капля перевернутых спинов, то это эквивалентно газу $2n$ доменных стенок. Тогда свободная энергия равна

$$F = 4In - T \left(N \log N - 2n \log 2n - (N - 2n) \log(N - 2n) \right).$$

Отсюда

$$0 = \frac{\partial F}{\partial n} = 4I - 2T \log \frac{N - 2n}{2n}.$$

Следовательно, число доменных стенок равно

$$2n = \frac{N}{1 + e^{2I/T}},$$

а свободная энергия

$$F = -NT \log \left(1 + e^{-2I/T} \right).$$

Обе величины меняются непрерывно и нет никаких признаков фазового перехода. И действительно, даже если мы закрепим спины равными $+1$ на концах цепочки, для спина вдали от концов будет практически равновероятно оказаться после четной или после нечетной от конца доменной стенки.

Вернемся к случаю $d \geq 2$. Интуитивно понятно, что спонтанная намагниченность возникает как результат воздействия на каждый спин поля, создаваемого окружающими его спинами. Давайте

попробуем формализовать эту интуицию. Именно, возьмем один единственный узел решетки (например в точке $\mathbf{0}$) и рассмотрим его как самостоятельную статистическую систему в *среднем поле* окружающих его спинов. Будем считать, что эти спины в среднем имеют намагниченность $\langle \sigma \rangle$. Тогда функционал энергии выделенного узла равен

$$\varepsilon_h(\sigma_0) = -(I\langle \sigma \rangle + h)\sigma_0, \quad I = \sum_{\mathbf{r} \neq \mathbf{0}} I(\mathbf{r}).$$

Так как

$$\langle \sigma \rangle = \frac{e^{-\beta\varepsilon_h(+1)} - e^{-\beta\varepsilon_h(-1)}}{e^{-\beta\varepsilon_h(+1)} + e^{-\beta\varepsilon_h(-1)}},$$

находим отсюда уравнение на $\langle \sigma \rangle$:

$$\langle \sigma \rangle = \text{th } \beta(I\langle \sigma \rangle + h). \quad (9)$$

Сравнивая графики левой и правой части легко видеть, что *уравнение среднего поля* (9) имеет одно решение при $\beta I < 1$ и от одного до трех решений (в зависимости от внешнего поля h) при $\beta I > 1$.

Рассмотрим сначала случай $h = 0$. В этом случае при $T > I$ имеется одно решение $\langle \sigma \rangle = 0$. При $T < I$ это решение сохраняется но возникает еще два решения $\langle \sigma \rangle_{\pm} = \pm s(T)$, причем функция $s(T)$ имеет следующие асимптотики:

$$s(T) = 1 - 2e^{-2I/T}, \quad T \rightarrow 0; \quad (10)$$

$$s(T) = \sqrt{3 \frac{T_c - T}{T_c}}, \quad T \rightarrow T_c = I. \quad (11)$$

Отметим, что первая оценка согласуется с наивной «капельной» моделью. Запомним также показатель $1/2$ в зависимости средней намагниченности от температуры:

$$s(T) \sim (-\tau)^{1/2}, \quad \tau = \frac{T - T_c}{T_c} \rightarrow -0.$$

Средняя намагниченность $\langle \sigma \rangle$ в модели Изинга настолько важна, что мы будем использовать для нее отдельную букву

$$\varphi = \langle \sigma \rangle \quad (12)$$

и специальное название: *параметр порядка*. Параметры порядка строятся различными способами для различных систем. Важно, чтобы они хорошо различали разные фазы. В случае фазовых переходов, связанных с изменением симметрии, параметры порядка выбираются так, чтобы группа симметрии симметричной фазы действовала бы на них нетривиально, а группа симметрии несимметричной фазы — тривиально. Тогда в симметричной фазе параметры порядка равны нулю, а в несимметричной они могут быть ненулевыми.

Найдем теперь термодинамический потенциал $\Phi = F + Nh\varphi$ в приближении среднего поля. Мы не можем просто взять статсумму одного спина во внешнем среднем поле и прологарифмировать, поскольку это никак не учитывает взаимодействия со «средой». Чтобы найти свободную энергию, надо воспользоваться очевидным соотношением

$$\varphi(T, h) = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial h}.$$

То есть надо взять интеграл

$$\frac{F}{N} = - \int dh \varphi(T, h).$$

Следовательно

$$\frac{\Phi}{N} = \int d\varphi h(T, \varphi)$$

Из уравнений (9) легко найти, что $h(T, \varphi) = T \text{arth } \varphi - I\varphi$ и получить

$$\frac{\Phi}{N} = -\frac{I\varphi^2}{2} + \frac{T}{2} \log(1 - \varphi^2) + T \text{arth } \varphi. \quad (13)$$

Очевидно, уравнение (9) пишется как

$$h = \frac{1}{N} \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi}.$$

Если теперь записать свободную энергию $F(\varphi) = \Phi - N\varphi h$ как функцию φ , зависящую от h как от параметра,

$$f(\varphi) = \frac{F(\varphi)}{N} = -\frac{I\varphi^2}{2} + \frac{T}{2} \log(1 - \varphi^2) + T \operatorname{arth} \varphi - \varphi h, \quad (14)$$

То уравнение (9) примет вид

$$\frac{\partial f(\varphi)}{\partial \varphi} = 0.$$

Разложим теперь $f(\varphi)$ по степеням φ вблизи нуля:

$$f(\varphi) = -h\varphi + \frac{I}{2}\tau\varphi^2 + \frac{T}{12}\varphi^4 + O(\varphi^6). \quad (15)$$

Такое разложение имеет смысл вблизи $T = T_c$, где параметр порядка φ действительно мал. Запишем это разложение в виде

$$f(\varphi) = f_0 - h\varphi + A\varphi^2 + B\varphi^4 + O(\varphi^5), \quad A = A'\tau. \quad (16)$$

Обращение параметра A в нуль соответствует фазовому переходу при достаточно малых полях, так как в этой точке меняется число минимумов функции $f(\varphi)$.

Конечно, коэффициенты A' и B сами зависят от температуры, но эта зависимость не будет приводить к качественным эффектам. Член f_0 добавлен для общности. В приближении среднего поля для модели Изинга он постоянен, но в более общем случае он может быть функцией температуры. Разложение вида (16) называется *разложением Ландау*. Это разложение нетрудно получить непосредственно из свойств симметрии модели Изинга. Оно напрямую не связано с какой-либо микроскопической теорией. Вывод разложений такого типа из симметричных свойств переходов составляет содержание *теории Ландау* для фазовых переходов второго рода. В следующей лекции мы увидим, что теория Ландау, будучи феноменологической теорией, содержит некоторое внутреннее противоречие. Тем не менее, правильное ее понимание дает основу для более глубокой *флуктуационной теории* фазовых переходов.

Рассмотрим случай $h = 0$. Легко видеть, что при $\tau > 0$ функция $f(\varphi)$ имеет ровно один минимум $\varphi = 0$. При $\tau < 0$ точка $\varphi = 0$ становится максимумом, но появляется два минимума

$$\varphi = \pm \sqrt{\frac{A'}{2B}} (-\tau)^{1/2}. \quad (17)$$

Энтропия на один узел

$$s = -\frac{df}{dT} = -\frac{df_0}{dT} + \begin{cases} 0, & T > T_c, \\ \frac{A'^2}{2BT_c} \tau, & T < T_c. \end{cases} \quad (18)$$

Скачок энтропии в точке перехода отсутствует. Это значит, что переход не требует затрат тепла. Такой переход называется фазовым переходом *второго рода*.

Продифференцируем еще раз. Мы получим удельную теплоемкость

$$c = T \frac{ds}{dT} = c_0 + \begin{cases} 0, & T > T_c \\ \frac{A'^2}{2BT_c}, & T < T_c, \end{cases} \quad c_0 = -T \frac{d^2 f_0}{dT^2}. \quad (19)$$

Таким образом, теплоемкость испытывает скачок $\Delta c = \frac{A'^2}{2BT_c}$.

Рассмотрим теперь случай $h \neq 0$. При достаточно малых h картина не сильно меняется. Просто кривые слегка сдвигаются. Вычислим восприимчивость $\chi = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial h} \right)_T$ в нулевом поле:

$$\chi = \frac{1}{2A'|\tau|} \times \begin{cases} 1, & T > T_c, \\ 1/2, & T < T_c. \end{cases} \quad (20)$$

Мы видим, что восприимчивость имеет особенность при $T = T_c$, причем показатель степени одинаков по обе стороны от критической точки, а коэффициенты различаются. Следует учитывать, что ниже точки перехода восприимчивость при нулевом поле, строго говоря, равна бесконечности, а формула (20) дает восприимчивость при слабом ненулевом поле.

Ниже точки перехода с ростом поля одна из ям углубляется, а другая становится более мелким. Наконец при некотором пороговом поле более мелкая яма и вовсе исчезает. Это поле по модулю равно

$$h_\tau = B^{-1/2} \left(\frac{2}{3} A'(-\tau) \right)^{3/2}. \quad (21)$$

Заметим, что в приближении среднего поля для модели Изинга при произвольных температурах это пороговое поле равно

$$h_\tau = T_c \left((-\tau)^{1/2} - (1 + \tau) \operatorname{arth}(-\tau)^{1/2} \right), \quad 0 \leq \tau \leq 1. \quad (22)$$

В чем физический смысл поля h_τ ? Дело в том, что при изменении знака поля ниже критической точки система совершает фазовый переход, при котором параметр порядка меняется скачкообразно. При $h = 0$ системе надо перейти из состояния, например, с $\varphi = -s(T)$ в состояние с $\varphi = +s(T)$. При этом системе надо перейти через энергетический барьер между двумя состояниями. Естественно, система не переходит этот барьер сразу целиком. Сначала флуктуационным образом появляются маленькие зародыши новой фазы, потом они начинают расти, и в конце концов заполняют весь объем. Зародыши образуются не сразу и система довольно долго может находиться в метастабильном состоянии с отрицательным параметром порядка. Но если поле продолжает расти, то потенциальный барьер уменьшается и степень устойчивости метастабильного состояния падает. При $h = h_\tau$ метастабильное состояние становится абсолютно неустойчивым и система быстро переходит в стабильное состояние «как целое», без образования зародышей.

Если $h \gg h_\tau$, но параметр порядка s все же достаточно мал для того, чтобы можно было применять разложение Ландау, то, очевидно, параметр порядка не зависит от температуры:

$$\varphi = \left(\frac{h}{4B} \right)^{1/3}. \quad (23)$$

Приближение среднего поля, на котором основаны полученные результаты, содержит внутреннее логическое противоречие. С одной стороны, мы пытаемся установить эффект спонтанного упорядочения, связанный с корреляцией спинов на больших расстояниях. С другой стороны, все влияние соседних спинов описывается исключительно средним полем, хотя спины эти постоянно флуктуируют. Но вспомним, что взаимодействие локально, так что дальние корреляции на самом деле реализуются посредством ближних. Можно довольно строго показать, что теория среднего поля становится точной при взаимодействии на ближайших узлах, но не на кубической решетке, а на решетке Бете, то есть на бесконечном дереве, в котором нет замкнутых петель. На такой решетке узлы, принадлежащие первой координационной сфере, ведут себя по отношению к «центральному» спину совершенно независимо и имитируют среднее поле.

Тем не менее, приближение среднего поля дает довольно неплохое согласие с экспериментом в при температурах не слишком близких к T_c или в достаточно сильных полях. Это значит, что приближение основано на, в принципе, правильном понимании физической причины фазовых переходов. Можно ли улучшить теорию среднего поля? Да, можно. Для этого надо рассмотреть кластер из нескольких узлов в среднем поле всех остальных узлов. Эта идея реализована в ряде численных методов расчета фазовых переходов, хотя выбор подходящего кластера и описания среднего поля, которые бы существенно улучшили согласие с экспериментом и остается до сих пор, в некотором роде, искусством. Тем не менее, чем ближе мы подходим к точке фазового перехода, тем больших размеров нужно брать кластер. Нет ли какого-нибудь существенно более правильного способа описывать фазовый переход вблизи критической точки?

Задачи

1. Модель Изинга легко переформулировать как модель решеточного газа. Действительно, предположим, пусть $n_r = \frac{1}{2}(\sigma_r + 1) = 0, 1$ — число заполнения узла r частицей газа. Перепишите

энергию модели Изинга с внешним полем в этих переменных и найдите связь между термодинамическими функциями модели Изинга (свободной энергией, намагниченностью, магнитным полем, восприимчивостью, теплоемкостями) и термодинамическими функциями газа (давлением, плотностью, химическим потенциалом, сжимаемостью, теплоемкостями). Запишите разложение Ландау в естественных для газа переменных.

2. Модель решеточного газа, полученная в предыдущей задаче обладает дополнительной симметрией $n_r \rightarrow 1 - n_r$ (нарушаемой только сдвигом химического потенциала). В более близких к реальности случаях эта симметрия отсутствует, так что в разложении Ландау появляется член $C\varphi^3$. Покажите, что для непрерывный фазовый переход (без скачка φ) возможен в этом случае, только если C обращается в нуль при $\tau = 0$. Найдите, как ведут себя различные физические величины вблизи критической точки перехода жидкость-газ.