

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
НОВГОРОДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ ЯРОСЛАВА МУДРОГО

А. Ю. Захаров

РЕШЁТОЧНЫЕ МОДЕЛИ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Учебно-методическое пособие

ВЕЛИКИЙ НОВГОРОД

2006

УДК 530.1+531 (075.8)
З-38

Печатается по решению
РИС НовГУ .

Рецензенты:

доктор физико-математических наук **А. Л. Удовский**
кандидат физико-математических наук, доцент **М. М. Ковалевский**

Захаров А. Ю.

З-38 Решёточные модели статистической физики: Учеб.–метод. пособие /
НовГУ им. Ярослава Мудрого. — Великий Новгород, 2006. — 74 с.

Пособие состоит из трёх глав. Первая глава содержит точные аналитические решения нескольких решёточных моделей статистической физики (одномерные модели Изинга и Гайзенберга, модель системы с бесконечным радиусом взаимодействия, а также сферическая модель Берлина-Каца). Вторая глава посвящена методу ренормгруппы в теории фазовых переходов в решёточных моделях. Третья глава посвящена исследованию феноменологических моделей решёточного типа (решёточная и обобщённая решёточная модели, связь между решёточными моделями и приближением Гинзбурга-Ландау).

Пособие может быть использовано студентами, аспирантами и преподавателями в курсах статистической физики, физики конденсированного состояния и физической химии.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Программы “Университеты России” (проект ур.01.01.183)

УДК 530.1+531 (075.8)

© Новгородский государственный
университет, 2006
© А. Ю. Захаров, 2006

Содержание

0.1	Введение	4
1	Точно решённые решёточные модели статистической физи-	7
	ки	
1.1	Одномерная модель Изинга	7
1.1.1	Постановка проблемы	7
1.1.2	Одномерная открытая изинговская цепочка при отсут-	
	ствии внешнего поля	9
1.1.3	Одномерная замкнутая изинговская цепочка во внеш-	
	нем поле	10
1.1.4	Корреляционные функции в модели Изинга	13
1.2	Одномерная классическая модель Гайзенберга	15
1.3	Модель с межатомным потенциалом бесконечного радиуса .	19
1.3.1	Резюме	24
1.4	Гауссова модель	24
1.4.1	Вычисление детерминанта матрицы \mathbf{Q}	27
1.4.2	Одномерный случай	27
1.4.3	d -мерный случай	30
1.4.4	Обращение матрицы \mathbf{Q}	31
1.4.5	Термодинамика гауссовой модели в окрестности кри-	
	тической точки	32
1.5	Сферическая модель Берлина-Каца	36
1.5.1	Статистическая сумма сферической модели	36
1.5.2	Уравнение состояния	41
1.5.3	Упрощение уравнения состояния	42
1.5.4	Резюме	43
2	Метод ренормгруппы: принципы и простейшие применения	45
2.1	РГ исследование одномерной модели Изинга	45
2.2	РГ анализ двумерной модели Изинга	47
2.3	Резюме	52
3	Феноменологические решёточные модели	53
3.1	Решёточная модель бинарного твёрдого раствора	53
3.1.1	Приближение среднего поля в решёточной модели . .	55

3.1.2	Ветвление решений среднеполевых уравнений	57
3.2	Обобщённая решёточная модель — основные идеи и соотношения	61
3.2.1	Переход к теории Гинзбурга-Ландау	63
3.2.2	Гетерогенные состояния в бинарном растворе	65
3.2.3	Составы сосуществующих фаз	66
3.2.4	Концентрационный профиль	68
3.3	Резюме	69

0.1 Введение

Статистическая механика имеет целью установление связи между свойствами макроскопических систем и свойствами частиц, образующих эти системы. Традиционным объектом статистической механики являются системы, состоящие из огромного числа частиц одного или нескольких типов.

Как известно, что для нахождения термодинамических свойств системы достаточно вычислить её каноническую статистическую сумму, определяемую выражением

$$Z(V, N, T) = \text{Sp} \{ \exp [-\beta H] \}, \quad (1)$$

где N, T, V — число частиц, температура и объём системы;

H гамильтониан системы;

$\beta = 1/T$;

Sp — след оператора (или интеграл по фазовому пространству).

Знание статистической суммы позволяет найти свободную энергию Гельмгольца

$$F(V, N, T) = -T \ln [Z(V, N, T)] \quad (2)$$

и все остальные термодинамические функции. Таким образом, соотношение (1) устанавливает связь между механикой и термодинамикой системы и проблема заключается всего лишь в вычислении статистической суммы.

Реализация этой программы встречает весьма существенные трудности, обусловленные следующим.

1. Вычисление канонической статистической суммы не является единственно возможным вариантом старта. Существует несколько исходных распределений в статистической механике (микроканонический, канонический, большой канонический ансамбли и др.), причём строго математического доказательства их эквивалентности пока не существует. Более того, в настоящее время имеются веские основания для сомнения в эквивалентности этих распределений. Наиболее обоснованным распределением является микроканоническое, но его практическая реализация является наиболее затруднительной.
2. Вычисление статистической суммы в *квантовом случае* предполагает знание спектра гамильтониана системы, состоящей из колоссального числа частиц. В настоящее время решение этой задачи представляется

совершенно нереалистичным. В *классическом случае* требуется вычислить конфигурационный интеграл системы частиц, взаимодействующих через заданный потенциал. Кратность этого интеграла по порядку величины совпадает с числом частиц. В настоящее время решение этой задачи также представляется практически нереализуемым.

Таким образом, проблема построения последовательной количественной статистической термодинамики реальных систем требует выполнения работы в следующих направлениях.

1. Разработка методов строгого исследования связей между ансамблями статистической механики.
2. Создание методов, которые в равной мере применимы к различным ансамблям статистической механики.
3. Поиск моделей, допускающих точное решение. Ценность точно решаемых моделей состоит в том, что на них можно проверять эффективность приближённых методов статистической механики.

К настоящему времени в статистической физике имеется очень немного точных результатов, что вынуждает развивать приближенные методы, которые, как правило, не имеют достоверной прямой оценки их точности. Вероятно, единственным доступным в настоящее время способом оценки эффективности приближённых методов является сравнение результатов этих приближённых расчётов с точными результатами, известными для точно решённых моделей. В этом заключается *утилитарная* цель построения точно решаемых моделей.

Существует и (кстати сказать, ничуть не менее важная) *чисто эстетическая* цель. Красота и математическое совершенство многих точно решённых моделей инициирует появление и развитие новых математических структур, которые в свою очередь способствуют созданию новых физических теорий (напомним, к примеру, что теория Гамильтона-Якоби и оптико-механическая аналогия в своё время привели Шрёдингера к квантовой механике).

Литература по точно решённым моделям статистической физики настолько обширна, настолько и разрознена. В настоящее время на русском языке имеется только одна книга, специально посвящённая точно решённым моделям статистической физики [2]. В то же время, имеется довольно

много книг, в которых “вкраплены” результаты, связанные с точными решениями тех или иных моделей. Немногим лучше ситуация с литературой на английском языке [4, 5, 27]. Несмотря на то, что во многих университетах (как в России, так и за её пределами) читаются спецкурсы по точно решённым моделям, учебной литературы по этой тематике почти нет (практически единственный источник такого типа — книга [5]).

Настоящее учебное пособие имеет целью в какой-то мере заполнить данный пробел. Изложение материала (на физическом уровне строгости) является конструктивным и сопровождается довольно большим количеством примеров (ибо “примеры важнее правил”) и задач для самостоятельного решения.

Материал в пособии распределён следующим образом. Во второй главе подробно излагаются наиболее важные (с образовательной точки зрения) точно решённые решёточные модели статистической физики — одномерная модель Изинга, решёточная модель с межатомным потенциалом бесконечного радиуса и сферическая модель Берлина-Каца. Следует отметить, что модель Бакстера в пособие не включена по той причине, что на русском языке имеется достаточно подробное изложение модели, выполненное самим Бакстером [2].

Третья глава содержит краткое изложение идей метода ренормгруппы (преимущественно на примерах одно- и двумерной моделей Изинга). В четвёртой главе части исследуется несколько *феноменологических* моделей решёточного типа. Подробно описаны фазовые переходы в рамках соответствующих моделей, указаны границы применимости моделей. Показана связь между решёточными моделями и моделью Гинзбурга-Ландау.

Подробное изложение материала сопровождается задачами для самостоятельного решения. Задачи не должны вызывать существенных затруднений, поскольку они либо заполняют относительно небольшую часть вычислений, либо дополняют основной текст иными направлениями исследования.

1 Точно решённые решёточные модели статистической физики

1.1 Одномерная модель Изинга

1.1.1 Постановка проблемы

Классические решёточные системы введены в статистическую физику по следующим причинам:

1. Замена классической континуальной модели, для которой вычисление статистического интеграла с потенциалом общего вида весьма проблематично, на решёточную модель с существенным ограничением радиуса действия потенциала. Благодаря этому вместо “реального” межатомного потенциала, задаваемого некоторой функцией $v(\mathbf{r})$ с *бесконечным числом возможных значений*, появляется *конечный набор* значений этой функции в точках, определяемых возможными расстояниями между узлами решётки в пределах радиуса действия потенциала. В случае одномерной модели Изинга, к примеру, от “бывшего” межатомного потенциала остаётся только одна константа — значение потенциала взаимодействия между ближайшими соседями.
2. Как известно из опыта, при достаточно низких температурах (и “подходящих” иных внешних условиях) почти все вещества переходят в кристаллическое состояние. Однако само существование кристаллического состояния вывести из принципов статистической механики пока не удалось *. Поэтому построение статистической термодинамики кристаллического состояния имеет смысл в рамках модели, в которой кристаллическая структура вводится аксиоматически.
3. Наконец, решёточные модели позволяют “оттачивать” математический аппарат и осуществлять апостериорную оценку эффективности разрабатываемых приближённых методов статистической физики.

Гамильтониан модели Изинга задаётся выражением

$$\mathcal{H}(\{s_j\}) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j - \sum_i h_i s_i, \quad (3)$$

*Заметим, что проблема вывода кристаллических структур из “первых принципов” — пока не решённая (и весьма актуальная!) проблема.

где индексы i, j нумеруют узлы решётки;

s_i — дискретная спиновая переменная, принимающая значения ± 1 ;

h_i — значение внешнего поля на i -м узле;

J_{ij} — энергии взаимодействий спинов, находящимися в узлах i, j .

Эта модель является частным случаем более общей (и лучше описывающей ферромагнетизм) модели Гайзенберга, которая определена следующим образом. Каждому узлу j в D -мерной решётке ставится в соответствие n -компонентный вектор $\vec{\phi}_j = (\phi_j^1, \dots, \phi_j^n)$ с единичной длиной $(\vec{\phi}_j \cdot \vec{\phi}_j) = 1$. Энергия для фиксированной конфигурации $\{\vec{\phi}_j\}$ в модели Гайзенберга даётся выражением:

$$\mathcal{H}(\{\vec{\phi}_j\}) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} (\vec{\phi}_i \cdot \vec{\phi}_j) - \sum_i (\vec{h}_i \cdot \vec{\phi}_i). \quad (4)$$

Статистическая сумма в этой модели имеет вид

$$Z = \int \left(\prod_{j \in V} d\vec{\phi}_j \delta(\|\vec{\phi}_j\|^2 - 1) \right) \exp \left[-\beta \mathcal{H}(\{\vec{\phi}_j\}) \right], \quad (5)$$

где V — объём системы;

символ $\|\cdot\|$ обозначает норму вектора.

Формула (5) допускает некоторое полезное обобщение, получаемое заменой дираковской меры $d\mu_D(\phi_j) = d\vec{\phi}_j \delta(\|\vec{\phi}_j\|^2 - 1)$ на некоторую другую $d\mu(\phi_j)$:

$$Z = \int \left(\prod_{j \in V} d\mu(\vec{\phi}_j) \right) \exp \left[-\beta \mathcal{H}(\{\vec{\phi}_j\}) \right], \quad (6)$$

Данная формула представляет собой дискретный аналог функционального интеграла скалярной теории поля. Для установления связи с теоретико-полевыми моделями определим дискретный оператор Лапласа на решётке

$$(\Delta \vec{\phi})_j = \sum_{\nu=1}^d \left(\vec{\phi}_{j+e_\nu} + \vec{\phi}_{j-e_\nu} - 2\vec{\phi}_j \right), \quad (7)$$

где $e_\nu = (0, \dots, 1, \dots, 0)$ обозначает единичный вектор в ν -м направлении решётки.

Отсюда получим выражение для дискретного аналога кинетической энергии

$$-\frac{1}{2} \sum_{j \in Z^d} \left(\vec{\phi}_j \cdot \Delta \vec{\phi}_j \right) = - \sum_{j \in Z^d} \sum_{\nu=1}^d \left(\vec{\phi}_j \cdot \vec{\phi}_{j+e_\nu} - \vec{\phi}_j^2 \right). \quad (8)$$

Первая сумма вида $\sum_{j, \nu} \left(\vec{\phi}_j \cdot \vec{\phi}_{j+e_\nu} \right)$ в правой части этой формулы совпадает с энергией взаимодействия спинов (4) *ферромагнитного типа*.

С теоретико-полевой точки зрения эта величина представляет собой действие *свободного поля*. Мера $\prod_j d\mu(\vec{\phi}_j)$ включает в себя распределение спинов, которое в теории поля описывает *взаимодействие*. К примеру, в течение многих лет исследуется модель ϕ^4 на решётке, для которой эта мера имеет вид

$$d\mu(\vec{\phi}) = \frac{d\vec{\phi} \exp \left(-P(\vec{\phi}) \right)}{\int d\vec{\phi} \exp \left(-P(\vec{\phi}) \right)}, \quad P(\vec{\phi}) = \alpha \vec{\phi}^2 + \gamma \vec{\phi}^4. \quad (9)$$

1.1.2 Одномерная открытая изинговская цепочка при отсутствии внешнего поля

Несмотря на отсутствие нетривиального фазового перехода в данной модели, она является прекрасной иллюстрацией матричного метода. Поскольку в модели Изинга учитывается взаимодействие только ближайших соседей, то суммирование по индексу j в гамильтониане (3) даёт ненулевой вклад только при условии $j = i \pm 1$, поэтому статистическая сумма модели в отсутствие внешнего поля имеет вид:

$$Z_N = \sum_{\{s_1, \dots, s_N = \pm 1\}} \exp \left(A \sum_{j=1}^{N-1} s_j s_{j+1} \right), \quad (10)$$

где $A = \beta J$;

J — обменный интеграл ближайших соседей;

N — суммарное число спинов (узлов решётки).

Заметим, что s_N содержится только в последнем слагаемом суммы под знаком экспоненты в (10):

$$Z_N = \sum_{\{s_1, \dots, s_N = \pm 1\}} \exp \left(A \sum_{j=1}^{N-2} s_j s_{j+1} \right) \exp (A s_{N-1} s_N), \quad (11)$$

поэтому суммирование по $s_N = \pm 1$ в (10) относится только к последней экспоненте и может быть осуществлено немедленно; результат этого суммирования оказывается *не зависящим* ни от s_{N-1} , ни от всех остальных спинов:

$$\sum_{s_N=\pm 1} \exp(A s_{N-1} s_N) = 2 \operatorname{ch}(A s_{N-1}) = 2 \operatorname{ch}(A). \quad (12)$$

В итоге получается рекуррентное соотношение для статистической суммы:

$$Z_N = 2 \operatorname{ch}(A) \sum_{\{s_1, \dots, s_{N-1}=\pm 1\}} \exp\left(A \sum_{j=1}^{N-2} s_j s_{j+1}\right) = 2 \operatorname{ch}(A) Z_{N-1}, \quad (13)$$

которое вместе с очевидным начальным условием

$$Z_2 = \sum_{s_1, s_2=\pm 1} \exp(A s_1 s_2) = \sum_{s_1=\pm 1} 2 \operatorname{ch}(A s_1) = 4 \operatorname{ch}(A) \quad (14)$$

приводит к окончательному выражению для статистической суммы Z_N :

$$Z_N = 2^N [\operatorname{ch}(A)]^{N-1}. \quad (15)$$

Найдём свободную энергию в расчёте на один спин в термодинамическом пределе $N \rightarrow \infty$:

$$f(T) = -T \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln(Z_N) = -T \ln \left[2 \operatorname{ch} \left(\frac{J}{T} \right) \right]. \quad (16)$$

Полученная функция $f(T)$ аналитична при всех $T > 0$, поэтому в данной модели никакого фазового перехода ожидать не следует.

|| ЗАДАЧА 1. Исходя из полученного выражения для f , вычислить удельную теплоёмкость в одномерной открытой цепочке Изинга при нулевом внешнем поле и исследовать её температурную зависимость.

1.1.3 Одномерная замкнутая изинговская цепочка во внешнем поле

Для вычисления намагниченности и восприимчивости системы целесообразно вычислять статистическую сумму при включённом внешнем поле. Тогда соответствующие величины могут быть найдены с помощью дифференцирования статистической суммы (или её логарифма) по внешнему полю.

Приём, который позволил вычислить статистическую сумму открытой цепочки Изинга в предыдущем разделе, при включении внешнего поля, увы, не даёт результата. Вычисление статистической суммы цепочки Изинга во внешнем поле наиболее просто выполнить с помощью трансфер-матрицы, введённой Крамерсом и Ванье, и искусственного замыкания концов решётки друг на друга.

Статистическая сумма модели в однородном внешнем поле $h_j = h = \text{const}$ представляется в форме:

$$Z = \sum_{\{s_1, \dots, s_N = \pm 1\}} \exp \left(A \sum_j s_j s_{j+1} + B \sum_j s_j \right), \quad (17)$$

где $B = \beta h$.

Следуя работе Крамерса и Ванье [13], введём вещественную *симметричную* трансфер-матрицу 2×2 с элементами $\langle s|L|s' \rangle$:

$$\langle s|L|s' \rangle = \exp \left(A s s' + B \frac{s + s'}{2} \right). \quad (18)$$

ЗАДАЧА 2. Показать, что матрица L имеет вид:

$$L = \begin{pmatrix} \exp(A + B) & \exp(-A) \\ \exp(-A) & \exp(A - B) \end{pmatrix} \quad (19)$$

Выражение (17) преобразуется к представлению через матрицу L :

$$Z = \sum_{\{s_1, \dots, s_N\}} \langle s_1|L|s_2 \rangle \langle s_2|L|s_3 \rangle \cdots \langle s_{N-1}|L|s_N \rangle \exp \left(B \frac{s_1 + s_N}{2} \right). \quad (20)$$

При отсутствии последней экспоненты, содержащей s_1 и s_N , статсумма Z представляла бы собой сумму всех элементов матрицы 2×2 , полученной в результате возведения матрицы L в степень $(N - 1)$. Но, увы, эта последняя экспонента присутствует, поэтому устраним её негативное влияние переходом от открытой цепочки спинов, требующей граничных условий, к замкнутой на себя цепочке. Для этого введём циклические граничные условия в соответствии с правилом:

$$s_{j+N} \equiv s_j \quad (21)$$

(операция топологического отождествления концов цепочки). Тогда следует добавить в последнюю экспоненту и взаимодействие спинов s_N и s_1 ; в результате формула (20) приобретает гораздо более симпатичный облик:

$$Z = \sum_{\{s_1, \dots, s_N\}} \langle s_1 | L | s_2 \rangle \langle s_2 | L | s_3 \rangle \cdots \langle s_{N-1} | L | s_N \rangle \langle s_N | L | s_1 \rangle. \quad (22)$$

Невозможно не заметить, что в правой части этой формулы содержится след (сумма диагональных элементов) от N -й степени матрицы L :

$$Z = \text{Sp} (L^N). \quad (23)$$

Как известно, след матрицы является одним из инвариантов ортогонального преобразования её. Поскольку матрица L симметрична, то существует ортогональное преобразование O , приводящее её к диагональной форме \tilde{L} :

$$\tilde{L} = O^{-1} L O = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}, \quad (24)$$

(λ_1 и λ_2 суть собственные значения матрицы L , которые вещественны вследствие её симметричности).

ЗАДАЧА 3. Показать, что собственные значения матрицы L имеют вид:

$$\lambda_{\pm} = e^A \left(\text{ch}(B) \pm \sqrt{\text{sh}^2(B) + e^{-4A}} \right) \quad (25)$$

Поскольку

$$\begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}^N = \begin{pmatrix} \lambda_+^N & 0 \\ 0 & \lambda_-^N \end{pmatrix}, \quad (26)$$

то свободная энергия Гельмгольца F выражается через λ_+ , λ_- ($\lambda_- < \lambda_+$) следующим образом:

$$F = -T \ln Z = -T \left\{ N \ln (\lambda_+) + \ln \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right] \right\}. \quad (27)$$

ЗАДАЧА 4. Исследовать зависимость отношения λ_-/λ_+ собственных значений трансфер-матрицы от температуры и внешнего поля, обратив особое внимание на случай $T \rightarrow 0$.

В термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$) слагаемое $\ln \left[1 + (\lambda_-/\lambda_+)^N \right]$ стремится к нулю; отсюда найдём асимптотическое значение свободной энергии Гельмгольца в расчёте на один узел $f = F/N$:

$$f = -T \left[A + \ln \left(\text{ch}(B) + \sqrt{\text{sh}^2(B) + e^{-4A}} \right) \right]. \quad (28)$$

ЗАДАЧА 5. Показать, что в отсутствие внешнего поля $B = 0$ формула (28) приводит к (16). Интерпретировать результат.

ЗАДАЧА 6. Намагниченность M определяется как среднее значение спиновой переменной на один узел, т.е. $\langle s_j \rangle$. Показать, что

$$M = \langle s_j \rangle = \frac{\partial f}{\partial B} = \text{sh}(B) [\text{sh}^2(B) + e^{-4A}]^{-\frac{1}{2}}. \quad (29)$$

Исследовать зависимость намагниченности от температуры и внешнего поля. Заметить, что в отсутствие внешнего поля намагниченность исчезает.

ЗАДАЧА 7. Восприимчивость χ определяется как производная намагниченности по внешнему полю $\chi = \frac{\partial M}{\partial h}$. Вычислить восприимчивость в одномерной модели Изинга и убедиться, что при $T \rightarrow 0$ она стремится к бесконечности. Построить график температурной зависимости восприимчивости $\chi(T)$.

ЗАДАЧА 8. Исходя из выражения (28) для удельной свободной энергии Гельмгольца f , вычислить теплоёмкость и построить график зависимости теплоёмкости от температуры.

1.1.4 Корреляционные функции в модели Изинга

При исследовании фазовых переходов существенную роль играет парная корреляционная функция, которая для модели Изинга определяется

соотношением:

$$\langle s_k s_l \rangle = Z_N^{-1} \sum_{\{s_1, \dots, s_N = \pm 1\}} s_k s_l \exp [-\beta \mathcal{H}(\{s_j\})] \quad (30)$$

и характеризует степень упорядоченности в решётке. Если эта величина при устремлении расстояния между k -м и l -м спинами к бесконечности не стремится к нулю, то в системе имеет место *дальний порядок*, в противном случае дальнего порядка в системе нет. Появление (или исчезновение) в системе дальнего порядка связывается обычно с фазовым переходом.

Вычислим парную корреляционную функцию открытой цепочки при отсутствии внешнего поля с помощью следующего приёма. Вначале усложним выражение (10), введя вместо одного параметра A совокупность параметров A_j :

$$Z_N(A_1, \dots, A_{N-1}) = \sum_{\{s_1, \dots, s_N = \pm 1\}} \exp \left(\sum_{j=1}^{N-1} A_j s_j s_{j+1} \right); \quad (31)$$

обычная статистическая сумма получается отсюда при условии $A_j = A = \beta J$. Суммирование по переменной S_N может быть выполнено немедленно, в результате найдём:

$$Z_N(A_1, \dots, A_{N-1}) = 2 \operatorname{ch}(A_{N-1}) Z_{N-1}(A_1, \dots, A_{N-2}). \quad (32)$$

Действуя далее в полной аналогии с выводом формулы (15), найдём:

$$Z_N(A_1, \dots, A_{N-1}) = 2 \prod_{j=1}^{N-1} [2 \operatorname{ch}(A_j)]. \quad (33)$$

Эта формула пригодится для вычисления парной корреляционной функции. Вначале используем тот факт, что $s_j^2 = 1$. Тогда для $r > 0$ и $k + r < N$

имеем цепочку равенств:

$$\begin{aligned}
\langle s_k s_{k+r} \rangle &= Z_N^{-1} \sum_{\{s_1, \dots, s_N = \pm 1\}} s_k s_{k+r} \exp \left[A \sum_{j=1}^{N-1} s_j s_{j+1} \right] = \\
&= Z_N^{-1} \sum_{\{s_1, \dots, s_N = \pm 1\}} (s_k s_{k+1}) (s_{k+1} s_{k+2}) \cdots (s_{k+r-1} s_{k+r}) \times \\
&\times \exp \left[\sum_{j=1}^{N-1} A_j s_j s_{j+1} \right] \Big|_{A_1 = \dots = A_{N-1} = A} = \\
&= Z_N^{-1} \left[\frac{\partial^r}{\partial A_{k+r-1} \cdots \partial A_k} Z_N (A_1, \dots, A_{N-1}) \right]_{A_1 = \dots = A_{N-1} = A} = \\
&= Z_N^{-1} \left[Z_N (A_1, \dots, A_{N-1}) \prod_{j=k}^{k+r-1} \text{th} (A_j) \right]_{A_1 = \dots = A_{N-1} = A} = \\
&= [\text{th} (A)]^r.
\end{aligned} \tag{34}$$

ЗАДАЧА 9. Исследовать зависимость парной корреляционной функции $\langle s_k s_{k+r} \rangle$ от расстояния r между узлами и от температуры. Рассмотреть предел при $r \rightarrow \infty$ и интерпретировать результат.

1.2 Одномерная классическая модель Гайзенберга

Для вычисления статистической суммы модели Гайзенберга в общем случае потребовалась бы трансфер-матрица с бесконечным числом строк и столбцов, соответствующим непрерывным переменным, которые описывают ориентацию спина.

Статистическая сумма системы с гамильтонианом (4) для открытой цепочки Гайзенберга имеет вид:

$$Z_N = \int \cdots \int \frac{d\Omega_1}{4\pi} \cdots \frac{d\Omega_N}{4\pi} \exp \left[A \sum_{j=1}^{N-1} (\vec{\phi}_j \cdot \vec{\phi}_{j+1}) \right], \tag{35}$$

где $A = J\beta$;

$\vec{\phi}_j$ — единичный вектор в трёхмерном пространстве;

$d\Omega_j$ — элемент телесного угла.

Этот многократный интеграл следует привести к повторному интегралу. Начинать интегрирование следует с переменной Ω_N , а закончить — переменной Ω_2 (при интегрировании по j -й переменной ось z целесообразно направить вдоль вектора $\vec{\phi}_{j-1}$). В итоге получим:

$$Z_N = \int \frac{d\Omega_1}{4\pi} \prod_{j=1}^{N-1} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{d\varphi_j d\theta_j \sin \theta_j}{4\pi} \exp [A \cos \theta_j] = \left(\frac{\text{sh}[A]}{A} \right)^{N-1}. \quad (36)$$

Отсюда легко найти свободную энергию и построить всю термодинамику изотропной модели Гайзенберга.

Парную корреляционную функцию $c_r = \langle (\vec{\phi}_k \cdot \vec{\phi}_{k+r}) \rangle$ можно вычислить также без особенных затруднений:

$$\begin{aligned} c_r &= \langle \vec{\phi}_k \cdot \vec{\phi}_{k+r} \rangle = 3 \langle \phi_{z,k} \phi_{z,k+r} \rangle = \\ &= 3 Z_N^{-1} \int \cdots \int \frac{d\Omega_1}{4\pi} \cdots \frac{d\Omega_N}{4\pi} \phi_{z,k} \phi_{z,k+r} \exp \left[A \sum_{j=1}^{N-1} (\vec{\phi}_j \cdot \vec{\phi}_{j+1}) \right], \end{aligned} \quad (37)$$

где $\phi_{z,k}$ — z -составляющая вектора $\vec{\phi}_k$.*

Без ограничения общности положим $k = 1$. Интегрирование по Ω_j при $j > k + r$ выполним немедленно, выбирая направление оси z вдоль вектора $\vec{\phi}_{j-1}$, что приводит к факторизации этой части интеграла. Оставшуюся часть интеграла преобразуем аналогично, выбирая $\vec{\phi}_{j-1}$ в качестве полярной оси для $\vec{\phi}_j$:

$$\begin{aligned} c_r &= 3 \left[\frac{A}{\text{sh}(A)} \right]^r \int \frac{d\Omega_1}{4\pi} \cos \Theta_1 \int \cdots \int \frac{d\Omega_2}{4\pi} \cdots \frac{d\Omega_{r-1}}{4\pi} \times \\ &\times \exp \left[A \sum_{j=1}^{r-1} (\vec{\phi}_j \cdot \vec{\phi}_{j+1}) \right] \int \frac{d\Omega_r}{4\pi} \cos \Theta_r \exp [A \cos \theta_r], \end{aligned} \quad (38)$$

где Θ_1 и Θ_k — полярные углы относительно оси аппликат z .

*Множитель 3 появился из соображений симметрии — равноправности всех трёх составляющих вектора $\vec{\phi}_k$.

Опять-таки используем $\vec{\phi}_{k-1}$ в прежнем качестве для вектора $\vec{\phi}_k$ и примем во внимание, что

$$\cos \Theta_r = \cos \Theta_{r-1} \cos \theta_r + \sin \Theta_{r-1} \sin \theta_r \cos \varphi_r. \quad (39)$$

Проинтегрируем по θ_r и φ_r в (38); второе слагаемое в (39) после интегрирования исчезнет, а останется рекуррентное соотношение

$$c_r = 3 \langle \cos \Theta_r \rangle = 3 \langle \cos \Theta_{r-1} \rangle \langle \cos \theta \rangle = c_{r-1} u(A), \quad (40)$$

где

$$u(A) = \frac{A}{\operatorname{sh} A} \int_0^\pi \frac{d\theta}{2} \cos \theta \sin \theta \exp [A \cos \theta] = \operatorname{cth}(A) - A^{-1}. \quad (41)$$

Учтём, что $c_0 = 1$; поэтому *

$$\frac{1}{2} c_r = [u(A)]^r. \quad (42)$$

Поскольку при всех A

$$|u(A)| < 1, \quad (43)$$

то

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \vec{\phi}_k \cdot \vec{\phi}_{k+r} \rangle = 0; \quad (44)$$

поэтому в этой системе при любых конечных температурах дальнего порядка нет.

|| ЗАДАЧА 10. Доказать неравенство (43).

Рассмотрим ещё одну поучительную задачу, связанную с одномерной (но *анизотропной* !) замкнутой цепочкой Гайзенберга, гамильтониан которой имеет вид:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{j=1}^N [\phi_{z,j} \phi_{z,j+1} + (1 - \gamma) (\phi_{x,j} \phi_{x,j+1} + \phi_{y,j} \phi_{y,j+1})], \quad (45)$$

где $\vec{\phi}_j = \{\phi_{x,j}, \phi_{y,j}, \phi_{z,j}\}$ – трёхмерный единичный вектор;
 $\vec{\phi}_{j+N} = \vec{\phi}_j$;
 γ – параметр анизотропии.

*Полезно сравнить это соотношение с (34).

Рассмотрим случай [30, стр.202–205] предельной анизотропии $\gamma = 1$, которому соответствует классическая одномерная модель изинго-подобная модель с гамильтонианом

$$\mathcal{H} = -J \sum_{j=1}^N x_j x_{j+1}, \quad (x_{j+N} = x_j), \quad (46)$$

где $x_j = \phi_{z,j}$, $|x_j| \leq 1$.

Статистическая сумма определяется выражением

$$Z_N = \int_{-1}^{+1} \cdots \int_{-1}^{+1} \exp \left[A \sum_{j=1}^N x_j x_{j+1} \right] dx_1 \cdots dx_N. \quad (47)$$

Действуя по аналогии с решением методом трансфер-матрицы для замкнутой цепочки Изинга, представим Z_N в виде

$$Z_N = \int_{-1}^{+1} K^{(N)}(x, x) dx, \quad (48)$$

где $K^{(N)}(x, y)$ обозначает ядро N -й степени интегрального оператора \hat{K} , задаваемого ядром $K(x, y) = \exp(Axy)$, т.е.

$$\hat{K}\{f\}(x) = \int_{-1}^{+1} K(x, y) f(y) dy. \quad (49)$$

Тогда в терминах собственных значений

$$\lambda_0 > \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \quad (50)$$

интегрального уравнения

$$\int_{-1}^{+1} K(x, y) \varphi(y) dy = \lambda \varphi(x) \quad (51)$$

статистическую сумму представим в виде

$$Z_N = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n^N. \quad (52)$$

|| ЗАДАЧА 11. Почему в цепочке неравенств (50) вначале следует знак строгого неравенства $>$, в то время как далее следуют знаки нестрогого неравенства \geq ?

Интегральное уравнение (51) связано со сфероидальными волновыми функциями, теорию которых можно найти в [12, 19].

ЗАДАЧА 12. Показать, что если функция $\varphi(x)$ удовлетворяет уравнению

$$\hat{\mathbf{L}}\varphi = \mu\varphi, \quad (53)$$

где дифференциальный оператор $\hat{\mathbf{L}}$ определяется соотношением

$$\hat{\mathbf{L}} = (x^2 - 1)(d/dx)^2 + 2x(d/dx) - A^2x^2, \quad (54)$$

то и функция $\chi(x)$

$$\chi(x) = \int_{-1}^{+1} e^{Axy} \varphi(y) dy \quad (55)$$

также удовлетворяет этому же уравнению при выполнении условия регулярности

$$(1 - x^2)\varphi(x) = (1 - x^2)\varphi'(x) = 0 \quad (56)$$

для $|x| = 1$.

Из решения этой задачи и определения (55) следует, что функции $\chi(x)$ и $\varphi(x)$ пропорциональны друг другу, т.е. удовлетворяют интегральному уравнению (51).

Таким образом, вычисление удельной свободной энергии в термодинамическом пределе

$$f = -T \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln Z_N = -T \ln \lambda_0 \quad (57)$$

сводится к проблеме нахождения наибольшего собственного значения интегрального оператора \hat{K} .

1.3 Модель с межатомным потенциалом бесконечного радиуса

Здесь мы рассмотрим очередную точно решаемую модель — решёточную модель, в которой взаимодействие между спинами совершенно не зависит от расстояния между ними, т.е. обменный интеграл определяется только взаимной ориентацией спинов.

Будем полагать, что одинаково ориентированным спинам соответствует отрицательная энергия взаимодействия — это позволяет надеяться на

возможность упорядочения при достаточно низких температурах. Однако следует иметь в виду, что полная потенциальная энергия системы в этой модели пропорциональна числу пар частиц, которое в свою очередь пропорционально квадрату числа частиц. Этому соответствует нетермодинамическая асимптотическая зависимость термодинамических функций системы от её размеров. Для коррекции данной аномалии будем полагать, что обменный интеграл J обратно пропорционален числу частиц в системе.

Гамильтониан такой системы при наложении однородного внешнего поля h , таким образом, приобретает вид:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \sum_{j,k=1}^N s_j s_k - h \sum_{j=1}^N s_j. \quad (58)$$

Двойная сумма в первом слагаемом может быть записана в виде полного квадрата:

$$\sum_{j,k=1}^N s_j s_k = \left(\sum_{j=1}^N s_j \right)^2. \quad (59)$$

Тогда

$$\exp[-\beta\mathcal{H}] = \exp \left[\frac{\beta J}{2N} \left(\sum_{j=1}^N s_j \right)^2 + \beta h \left(\sum_{j=1}^N s_j \right) \right]. \quad (60)$$

Воспользуемся тождеством (интеграл Пуассона)

$$\exp \left[\frac{\gamma^2}{2\alpha} \right] = \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[-\frac{\alpha}{2} x^2 + \gamma x \right] dx, \quad (\operatorname{Re} \alpha > 0). \quad (61)$$

Заметим, что в левой части этого равенства содержится экспонента от квадрата γ , а в подынтегральном выражении – экспонента от линейной функции параметра γ ; это позволяет свести экспоненту от квадратичной функции к экспоненте от линейной функции за счёт введения дополнительного интегрирования (преобразование Стратоновича-Хаббарда). Преобразуем (60)

$$\exp[-\beta\mathcal{H}] = \sqrt{\frac{N}{2\pi\beta J}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\frac{N}{2\beta J} x^2 + (x + \beta h) \left(\sum_{j=1}^N s_j \right) \right\} dx. \quad (62)$$

Вычислим теперь статистическую сумму:

$$\begin{aligned}
 Z_N &= \sum_{\{s_1, \dots, s_N = \pm 1\}} \exp[-\beta \mathcal{H}] = \\
 &= \sqrt{\frac{N}{2\pi\beta J}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\frac{N}{2\beta J} x^2\right\} \left[\sum_{s=\pm 1} \exp[(x + \beta h)s] \right]^N dx
 \end{aligned} \tag{63}$$

(многократное суммирование по s_1, \dots, s_N факторизовалось в произведение N идентичных сомножителей). Суммирование в квадратных скобках выполняется элементарно, в результате имеем:

$$Z_N = \sqrt{\frac{N}{2\pi\beta J}} 2^N \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\frac{N}{2\beta J} x^2\right\} \text{ch}^N(x + \beta h) dx \tag{64}$$

или

$$Z_N = \sqrt{\frac{N}{2\pi\beta J}} 2^N \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-N \left[\frac{x^2}{2\beta J} - \ln \text{ch}(x + \beta h) \right]\right\} dx. \tag{65}$$

Остаётся вычислить асимптотику ($N \rightarrow \infty$) этого однократного интеграла — это вполне элементарная задача.

|| ЗАДАЧА 13. Доказать, что несобственный интеграл (65) сходится.

Интеграл (65) имеет форму

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-N f(x)] dx, \quad (N \rightarrow \infty). \tag{66}$$

Основной вклад в интегралы такого вида дают окрестности точек минимума функции $f(x)$ на промежутке интегрирования.

ЗАДАЧА 14. Пусть функция $f(x)$ в сходящемся интеграле (66) имеет единственную точку x_0 минимума на промежутке $[a, b]$ и вторая производная этой функции в точке x_0 не равна нулю $f''(x_0) \neq 0$. Показать, что при $N \rightarrow \infty$ имеет место асимптотическое равенство

$$\int_a^b \exp[-Nf(x)] dx \cong e^{-Nf(x_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{Nf''(x_0)}}. \quad (67)$$

Как изменится результат, если функция $f(x)$ на промежутке $[a, b]$ имеет несколько экстремумов?

Эта формула асимптотического вычисления интеграла (67) называется формулой Лапласа.

Применим метод Лапласа к вычислению интеграла (65). Мы выполним это вычисление в частном случае, когда внешнее поле h отсутствует. Вначале нужно найти точки экстремумов функции

$$f(x) = \left[\frac{x^2}{2\beta J} - \ln \operatorname{ch}(x) \right]. \quad (68)$$

Имеем уравнение

$$f'(x) = \frac{x}{\beta J} - \operatorname{th}(x) = 0. \quad (69)$$

ЗАДАЧА 15. Выполнить графический анализ уравнения (69) и показать, что число решений этого уравнения зависит от параметра βJ . При $\beta J \leq 1$ существует единственное решение $x_1 = 0$. При $\beta J > 1$ помимо корня $x_1 = 0$ появляется ещё два решения: $x_2 > 0$ и $x_3 = -x_2 < 0$.

Изменение числа решений уравнений, обусловленное изменением параметров, входящих в уравнение, называется ветвлением решений уравнений. В настоящее время существует обширная математическая теория ветвления решений уравнений (см., к примеру, монографию [33]) и не менее обширная прикладная теория с весьма романтичным названием “теорией катастроф” (см., к примеру, [22]).

ЗАДАЧА 16. Показать, что при $\beta J < 1$ функция (68) в точке $x = 0$ имеет минимум, а при $\beta J > 1$ — максимум. Вычислить интеграл (65) методом Лапласа в отсутствии внешнего поля и при условии $\beta J < 1$.

ЗАДАЧА 17. Используя решение предыдущей задачи, найти свободную энергию Гельмгольца и удельную теплоёмкость системы при $\beta J < 1$. Рассмотреть предельный случай $\beta J \rightarrow 1 - 0$ и дать интерпретацию расходимости теплоёмкости.

ЗАДАЧА 18. Разложить функцию (68) в окрестности точки $x_1 = 0$ с точностью до членов четвёртого порядка и показать, что при $\beta J = 1$ эта функция в нуле имеет минимум.

ЗАДАЧА 19. Показать, что при $\beta J > 1$ функция (68) достигает своего наименьшего значения в точках x_2, x_3 .

Таким образом, в высокотемпературной области $\beta J = J/T \leq 1$ функция (68) в интеграле (65) имеет абсолютный минимум в точке $x = 0$. При дальнейшем понижении температуры (т.е., при $\beta J = J/T > 1$) точка $x_1 = 0$ становится точкой максимума и одновременно появляется две точки минимума x_2, x_3 , положение которых зависит от температуры.

ЗАДАЧА 20. Разложить функцию (68) в окрестности точки $x_1 = 0$ с точностью до членов четвёртого порядка с коэффициентами, зависящими от βJ . Сопоставить полученное выражение со свободной энергией в теории фазовых переходов Ландау, в котором в качестве параметра порядка выступает переменная x . Интерпретировать результат.

ЗАДАЧА 21. В первой сумме гамильтониана (58) содержится “лишнее” слагаемое, соответствующее $j = k$. Поскольку никакого “самодействия” спинов нет, то следует суммирование по переменным j, k выполнить при условии $j \neq k$. Таким образом, корректный гамильтониан в (58) должен иметь вид:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \sum_{\substack{j,k=1 \\ (j \neq k)}}^N s_j s_k - h \sum_{j=1}^N s_j. \quad (70)$$

Внести соответствующие изменения в формулу для статистической суммы (65). Как изменятся последующие результаты в связи с учётом этого “лишнего” слагаемого?

1.3.1 Резюме

Точное решение модели с бесконечным радиусом действия привело нас к результатам, идентичным с теорией среднего поля. Другими словами, среднеполевое приближение является точным результатом для модели с межатомным потенциалом бесконечного радиуса действия. Этот факт имеет простую физическую интерпретацию: в этой модели каждый из атомов попадает в сферу действия бесконечно большого числа атомов, причём влияния пространственно удалённых и близких атомов идентичны. Поэтому “срабатывает” закон больших чисел. Конечно, для реальных межатомных потенциалов каждый из атомов находится в поле конечного (обычно, относительно небольшого) числа других атомов приближение среднего поля соответствует пренебрежению флуктуационными эффектами.

Следует иметь в виду, что приближение среднего поля в ряде случаев приводит к принципиально неверным результатам. В частности, в применении к одномерной модели Изинга это приближение приводит к ложному выводу о существовании фазового перехода при определённом знаке обменного интеграла. С другой стороны, как строго доказано в предыдущих разделах, в одномерной модели Изинга фазового перехода нет.

Следует отметить ещё одно весьма существенное обстоятельство. Термодинамические свойства системы в приближении среднего поля не зависят от размерности пространства. Это совершенно не соответствует действительности. В частности, существенно зависят от размерности пространства критические показатели.

1.4 Гауссова модель

В модели Изинга спиновые переменные s принимают значения ± 1 , т.е., плотность вероятности распределения спиновых переменных узле имеет вид:

$$\rho(s_1, \dots, s_N) = \prod_{j=1}^N [\delta(s_j^2 - 1)] = \prod_{j=1}^N \left\{ \frac{1}{2} [\delta(s_j - 1) + \delta(s_j + 1)] \right\}. \quad (71)$$

|| ЗАДАЧА 22. Объяснить происхождение множителя $\frac{1}{2}$ в этой формуле.

В гауссовой модели вместо дискретной спиновой переменной с дифференциальной функцией распределения вида (71) вводится непрерывная спиновая переменная с плотностью вероятности

$$\rho(s_1, \dots, s_N) = \prod_{j=1}^N \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left[-\frac{s_j^2}{2\sigma^2} \right] \right\}. \quad (72)$$

Подставим эту плотность вероятности в выражение для статистической суммы системы с гамильтонианом (3) при не зависящем от координат внешнем поле h :

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \prod_{j=1}^N \frac{ds_j}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right\} \exp \left[-\sum_{j=1}^N \frac{s_j^2}{2\sigma^2} + \frac{\beta J}{2} \sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j + \beta h \sum_{i=1}^N s_i \right], \quad (73)$$

здесь и далее предполагается, что обменный интеграл J_{ij} отличен от нуля только для ближайших соседей.

Введём вектор-столбец \mathbf{S} с элементами s_1, s_2, \dots, s_N и представим выражение (73) в виде:

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \prod_{j=1}^N \frac{ds_j}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right\} \exp \left[-\frac{1}{2} \mathbf{S}^\dagger \mathbf{Q} \mathbf{S} + \mathbf{H}^\dagger \mathbf{S} \right], \quad (74)$$

где

$$\mathbf{S}^\dagger \mathbf{Q} \mathbf{S} = \sum_{m,j=1}^N s_m Q_{mj} s_j, \quad Q_{mj} = \frac{\delta_{mj}}{\sigma^2} - \beta J \epsilon_{mj}, \quad (75)$$

где \mathbf{H} – вектор-столбец, все элементы которого равны βh ; символ † обозначает транспонирование матрицы;

$$\epsilon_{mj} = \begin{cases} 1, & \text{если } s_m \text{ и } s_j \text{ — ближайшие соседи;} \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (76)$$

ЗАДАЧА 23. Показать, что в одномерном случае ($D = 1$) величины ϵ_{mj} связаны с дельта-символом Кронекера соотношением

$$\epsilon_{mj} = \delta_{m,j-1} + \delta_{m,j+1}. \quad (77)$$

ЗАДАЧА 24. Показать, что при $D = 1$ матрица \mathbf{Q} имеет вид

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma^2} & -\beta J & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -\beta J & \frac{1}{\sigma^2} & -\beta J & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\beta J & \frac{1}{\sigma^2} & -\beta J & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\beta J & \frac{1}{\sigma^2} \end{pmatrix} \quad (78)$$

Кратный интеграл по переменным s_j является гауссовым интегралом и вычисляется с помощью замены переменных, исключающей линейную форму в экспоненте:

$$\mathbf{T} = \mathbf{S} - \frac{1}{2} \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{H} \quad (79)$$

и последующего ортогонального преобразования в пространстве переменных t_1, \dots, t_N , приводящего матрицу \mathbf{Q} к диагональному виду. В итоге найдём*

$$Z = \frac{1}{\sigma^N \{\det \mathbf{Q}\}^{\frac{1}{2}}} \exp \left[\frac{1}{2} \mathbf{H}^\dagger \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{H} \right]. \quad (80)$$

Для дальнейшего продвижения вперёд необходимо решить две задачи:

1. Вычисление детерминанта матрицы Q

$$\det \{Q_{mj}\} = \det \left\{ \frac{\delta_{mj}}{\sigma^2} - \beta J \epsilon_{mj} \right\}. \quad (81)$$

Заметим, что эта задача вычисления детерминанта N -го порядка (т.е. порядка числа частиц в системе) на первый взгляд кажется довольно сложной.

2. Вычисление квадратичной формы

$$\mathbf{H}^\dagger \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{H}, \quad (82)$$

для выполнения которого следует обратить матрицу Q .

*Здесь предполагается, конечно, что квадратичная форма $\mathbf{S}^\dagger \mathbf{Q} \mathbf{S}$ положительно определена.

1.4.1 Вычисление детерминанта матрицы \mathbf{Q}

Заметим, что матрица \mathbf{Q} вещественна и симметрична $Q_{mj} = Q_{jm}$. Следовательно, существует ортогональное преобразование, приводящее эту матрицу к диагональной форме. Поскольку при ортогональном преобразовании детерминант матрицы не изменяется, то

$$\det \mathbf{Q} = \prod_{m=1}^N \lambda_m, \quad (83)$$

где λ_m — собственные значения матрицы \mathbf{Q} .

Для нахождения спектра матрицы \mathbf{Q} составим задачу на собственные значения

$$\mathbf{Q} \cdot \mathbf{u} = \lambda \mathbf{u}, \quad (84)$$

где \mathbf{u} — вектор-столбец с элементами u_1, u_2, \dots, u_N . В координатной записи это уравнение выглядит так:

$$\sum_{j=1}^N Q_{mj} u_j = \lambda u_m. \quad (85)$$

1.4.2 Одномерный случай

Рассмотрим вначале решение задачи (85) на собственные значения в простейшем возможном случае $D = 1$. Используя соотношения (75) и (77), приведём уравнение (85) к виду

$$\frac{1}{\sigma^2} u_m - \beta J \sum_{j=1}^N \epsilon_{mj} u_j = \lambda u_m, \quad m = 1 \div N. \quad (86)$$

Замкнём цепочку спинов по аналогии с тем, как это было выполнено при решении одномерной модели Изинга. Это означает, что вектор \mathbf{S} становится бесконечномерным, однако из всего бесконечного числа его составляющих $(\dots, s_{-1}, s_0, s_1, \dots)$ независимых переменных имеется ровно N из-за условия цикличности

$$s_{m+N} = s_m, \quad m = \dots, -1, 0, 1, \dots. \quad (87)$$

В результате конечная система уравнений трансформируется в бесконечную систему уравнений:

$$\frac{1}{\sigma^2}u_m - \beta J \sum_{j=-\infty}^{+\infty} \epsilon_{mj}u_j = \lambda u_m, \quad m = \dots, -1, 0, 1, \dots \quad (88)$$

ЗАДАЧА 25. Показать, что при $D = 1$ матрица \mathbf{Q} имеет вид

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & -\beta J & \frac{1}{\sigma^2} & -\beta J & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & -\beta J & \frac{1}{\sigma^2} & -\beta J & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & -\beta J & \frac{1}{\sigma^2} & -\beta J & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & -\beta J & \frac{1}{\sigma^2} & -\beta J & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & -\beta J & \frac{1}{\sigma^2} & -\beta J & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (89)$$

Обратить внимание на структуру этой бесконечной матрицы: все элементы главной диагонали равны $\left(\frac{1}{\sigma^2}\right)$, все элементы ближайших двух диагоналей равны $(-\beta J)$. Все остальные элементы матрицы равны нулю.

Ищем решение системы уравнений (88) в виде

$$u_m = \exp(ikm), \quad (90)$$

где k – параметр, подлежащий определению, i – мнимая единица.

Поясним выбор решения именно в таком виде. Главная матрица системы уравнений (88) \mathbf{Q}_{mj} зависит только от *разности* индексов $m - j$, что приводит к экспоненциальной зависимости решения от индекса

$$u_m \propto e^{\gamma m}. \quad (91)$$

Условие цикличности (87) может быть выполнено лишь в том случае, если γ является чисто мнимой величиной, т.е. $\gamma = ik$.

Подставим (90) в (88) и получим:

$$\frac{1}{\sigma^2} e^{ikm} - \beta J \sum_{j=-\infty}^{+\infty} \epsilon_{mj} e^{ikj} = \lambda e^{ikm}. \quad (92)$$

Разделив обе части этого уравнения на $e^{ikm} \neq 0$ и приняв во внимание соотношение (77), найдём собственное значение матрицы \mathbf{Q} :

$$\lambda(k) = \frac{1}{\sigma^2} - 2\beta J \cos k, \quad (93)$$

соответствующее собственному вектору (90). Теперь учтём условие цикличности (87), из которого следует, что

$$e^{ikN} = 1. \quad (94)$$

Отсюда получается “квантование” параметра k :

$$k = \frac{2\pi}{N} n, \quad (95)$$

где $n \in \mathbb{Z}$ (\mathbb{Z} — множество целых чисел).

На самом деле, конечно, из множества \mathbb{Z} нужно выбрать N *последовательных* элементов: $(1, 2, \dots, N)$ или $(-\{\frac{N}{2}\}, -\{\frac{N}{2}\} + 1, \dots, 0, \dots, +\{\frac{N}{2}\} - 1)$, дабы не повторять одни и те же собственные векторы матрицы \mathbf{Q} многократно.

Теперь есть всё необходимое для вычисления детерминанта матрицы \mathbf{Q} . Подставим выражение (93) в (83):

$$\det \mathbf{Q} = \prod_k \left[\frac{1}{\sigma^2} - 2\beta J \cos k \right] \quad (96)$$

и учтём, что реально нас интересует случай $N \rightarrow \infty$. Окончательно найдём:

$$\ln \det \mathbf{Q} = \frac{N}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} \ln \left[\frac{1}{\sigma^2} - 2\beta J \cos k \right] dk. \quad (97)$$

ЗАДАЧА 26. Выполнить подробные вычисления, приводящие формулу (96) к (97) Использовать формулу

$$\sum_{k \in [-\pi, +\pi]} \phi(k) = N \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{dk}{2\pi} \phi(k), \quad (98)$$

связывающую суммирование по k , удовлетворяющему условию “квантования” (95), с интегралом по k в пределах первой зоны Бриллюэна; $\phi(k)$ – произвольная интегрируемая функция.

1.4.3 d -мерный случай

В случае d -мерной простой кубической решётки вместо числа k , нумерующего собственные значения матрицы \mathbf{Q} в уравнении (84), появляется d -компонентный вектор \vec{k} , каждая из компонент которого “квантуется” в соответствии с правилом (95). Соответственно, собственные значения матрицы \mathbf{Q} в этом случае имеют вид

$$\lambda(\vec{k}) = \frac{1}{\sigma^2} - 2\beta J (\cos k_1 + \cos k_2 + \dots + \cos k_d), \quad (99)$$

где через k_j обозначены компоненты вектора \vec{k} .

ЗАДАЧА 27. Показать, что для простой кубической d -мерной решётки собственные значения матрицы \mathbf{Q} имеют вид (99).

ЗАДАЧА 28. Показать, что для трёхмерной кубической объёмноцентрированной решётки собственные значения матрицы \mathbf{Q} имеют вид:

$$\lambda(\vec{k}) = \frac{1}{\sigma^2} - 2\beta J (\cos k_1 \cdot \cos k_2 \cdot \cos k_3). \quad (100)$$

ЗАДАЧА 29. Найти собственные значения матрицы \mathbf{Q} для трёхмерной кубической гранецентрированной решётки.

ЗАДАЧА 30. Показать, что в d -мерном случае формула (98) преобразуется к виду:

$$\sum_{(\vec{k} \mid k_l \in [-\pi, +\pi])} \phi(\vec{k}) = N \int_{-\pi}^{+\pi} \cdots \int_{-\pi}^{+\pi} \left(\prod_{l=1}^d \frac{dk_l}{2\pi} \right) \phi(\vec{k}). \quad (101)$$

Итак, задачу вычисления детерминанта матрицы \mathbf{Q} можно считать решённой. В частности, для простой кубической d -мерной решётки результат имеет вид:

$$\ln \det \mathbf{Q} = N \int_{-\pi}^{+\pi} \cdots \int_{-\pi}^{+\pi} \ln \left[\frac{1}{\sigma^2} - 2\beta J \sum_{l=1}^d \cos k_l \right] \left[\prod_{l=1}^d \frac{dk_l}{2\pi} \right]. \quad (102)$$

1.4.4 Обращение матрицы \mathbf{Q}

Ранее было отмечено, что матрица \mathbf{Q} зависит только от разности своих аргументов:

$$Q_{mj} = Q(\vec{R}_m - \vec{R}_j), \quad (103)$$

где \vec{R}_m , \vec{R}_j – радиус-векторы m -го и j -го узлов решётки.

Поэтому элементы матрицы \mathbf{Q} можно представить в виде интегралов

$$Q_{mj} = \int_{-\pi}^{+\pi} \cdots \int_{-\pi}^{+\pi} \left[\prod_{l=1}^d \frac{dk_l}{2\pi} \right] \exp \left\{ i\vec{k} \cdot (\vec{R}_m - \vec{R}_j) \right\} \lambda(\vec{k}). \quad (104)$$

ЗАДАЧА 31. Подставить в эту формулу выражение (99) и убедиться, что в этом случае Q_{mj} отлично от нуля только для ближайших соседей.

Поскольку матрица \mathbf{Q} в \vec{k} -представлении диагональна, то элементы обратной матрицы $(Q^{-1})_{mj}$ могут быть представлены в виде обратного преобразования Фурье функции $[\lambda(\vec{k})]^{-1}$:

$$[Q^{-1}]_{mj} = \int_{-\pi}^{+\pi} \cdots \int_{-\pi}^{+\pi} \left[\prod_{l=1}^d \frac{dk_l}{2\pi} \right] \exp \left\{ i\vec{k} \cdot (\vec{R}_m - \vec{R}_j) \right\} \frac{1}{\lambda(\vec{k})}. \quad (105)$$

|| ЗАДАЧА 32. Выполнить непосредственную проверку этого утверждения.

В частности, для d -мерной простой кубической решётки имеем:

$$[Q^{-1}]_{mj} = \sigma^2 \int_{-\pi}^{+\pi} \cdots \int_{-\pi}^{+\pi} \left[\prod_{l=1}^d \frac{dk_l}{2\pi} \right] \frac{\exp \left\{ i \vec{k} \cdot (\vec{R}_m - \vec{R}_j) \right\}}{1 - 2\beta\sigma^2 J \left(\sum_{l=1}^d \cos k_l \right)}. \quad (106)$$

1.4.5 Термодинамика гауссовой модели в окрестности критической точки

Теперь у нас есть всё необходимое для вычисления статистической суммы в гауссовой модели. Ограничим дальнейшее рассмотрение простой кубической решёткой в пространстве d измерений. Подставим (102) и (106) в (80):

$$\begin{aligned} \ln Z = & -\frac{N}{2} \int_{-\pi}^{+\pi} \cdots \int_{-\pi}^{+\pi} \left[\prod_{l=1}^d \frac{dk_l}{2\pi} \right] \ln \left[1 - 2\beta\sigma^2 J \sum_{l=1}^d \cos k_l \right] + \\ & + \frac{(h\beta\sigma)^2}{2} \sum_{m,j=1}^N \int_{-\pi}^{+\pi} \cdots \int_{-\pi}^{+\pi} \left[\prod_{l=1}^d \frac{dk_l}{2\pi} \right] \frac{\exp \left\{ i \vec{k} \cdot (\vec{R}_m - \vec{R}_j) \right\}}{1 - 2\beta\sigma^2 J \left(\sum_{l=1}^d \cos k_l \right)}. \end{aligned} \quad (107)$$

Второе слагаемое в этой формуле можно существенно упростить. Вначале выполним суммирование по узлам решётки. При $N \rightarrow \infty$ имеем асимптотическое равенство:

$$\frac{1}{N} \sum_{m=1}^N \exp \left\{ i \left(\vec{k} \cdot \vec{R}_m \right) \right\} \asymp \delta_{\vec{k}, \vec{0}}. \quad (108)$$

|| ЗАДАЧА 33. Доказать эту формулу.

Перейдём во втором слагаемом в формуле (107) от интегрирования по \vec{k}

к суммированию по правилу (101) и найдём:

$$\begin{aligned} \ln Z = & -\frac{N}{2} \int_{-\pi}^{+\pi} \cdots \int_{-\pi}^{+\pi} \left[\prod_{l=1}^d \frac{dk_l}{2\pi} \right] \ln \left[1 - 2\beta\sigma^2 J \sum_{l=1}^d \cos k_l \right] + \\ & + \frac{N(h\beta\sigma)^2}{2(1 - 2d\beta\sigma^2 J)}. \end{aligned} \quad (109)$$

Отсюда найдём выражение для удельной свободной энергии d -мерной простой кубической решётки

$$\begin{aligned} f = F/N = & \frac{1}{2\beta} \int_{-\pi}^{+\pi} \cdots \int_{-\pi}^{+\pi} \left[\prod_{l=1}^d \frac{dk_l}{2\pi} \right] \ln \left[1 - 2\beta\sigma^2 J \sum_{l=1}^d \cos k_l \right] - \\ & - \frac{(h\beta\sigma)^2}{2\beta(1 - 2d\beta\sigma^2 J)}. \end{aligned} \quad (110)$$

Удельная свободная энергия, согласно этому выражению, состоит из двух частей: первое слагаемое в правой части обусловлено исключительно взаимодействиями частиц между собой, а второе — взаимодействием частиц с внешним полем h . При этом второе слагаемое зависит и от обменного интеграла J , характеризующего взаимодействие между спинами.

|| ЗАДАЧА 34. Второе слагаемое в (110) пропорционально квадрату внешнего поля. Дать физическую интерпретацию этой “странности”.

Для анализа термодинамических свойств гауссовой модели в отсутствие внешнего поля наиболее удобно использовать выражение (109) при $h = 0$:

$$\ln Z = -\frac{N}{2} \int_{-\pi}^{+\pi} \cdots \int_{-\pi}^{+\pi} \left[\prod_{l=1}^d \frac{dk_l}{2\pi} \right] \ln \left[1 - 2\beta\sigma^2 J \sum_{l=1}^d \cos k_l \right]. \quad (111)$$

Воспользуемся элементарной формулой для вычисления удельной теплоёмкости

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = \beta^2 \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}. \quad (112)$$

ЗАДАЧА 35. Доказать эту формулу, воспользовавшись соотношением для вычисления среднего значения энергии в каноническом ансамбле

$$\overline{E} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}. \quad (113)$$

Подставим (111) в (112):

$$C = \frac{N\beta^2}{2} \int_{-\pi}^{+\pi} \dots \int_{-\pi}^{+\pi} \left\{ \left[\prod_{l=1}^d \frac{dk_l}{2\pi} \right] \frac{\left[2\sigma^2 J \sum_{l=1}^d \cos k_l \right]^2}{\left[1 - 2\beta\sigma^2 J \sum_{l=1}^d \cos k_l \right]^2} \right\}. \quad (114)$$

Поскольку интегрирование здесь осуществляется в конечных пределах, то сингулярное поведение теплоёмкости возможно лишь в том случае, если при какой-либо температуре знаменатель подынтегрального выражения при каких-либо значениях \mathbf{k} будет устремляться к нулю. При высоких температурах величина $\beta = 1/T$ стремится к нулю и C не имеет сингулярностей. Критическая температура T_c определяется из условия обращения в нуль наименьшего по \mathbf{k} значения знаменателя в (114)

$$\min_{\mathbf{k}} \left[1 - 2\beta\sigma^2 J \sum_{l=1}^d \cos k_l \right] = [1 - 2d\beta\sigma^2 J] = 0. \quad (115)$$

Отсюда найдём связь между параметрами модели J, σ, d и критической температурой T_c

$$T_c = 2d\sigma^2 J. \quad (116)$$

Рассмотрим поведение теплоёмкости в окрестности критической температуры

$$0 < T - T_c \ll T_c. \quad (117)$$

В этом случае доминирующий вклад в интеграл по \mathbf{k} в (114) дают малые значения $|k_l| \ll 1$. Разлагая косинусы в окрестности нуля с точностью до

квадратичных членов и выделяя главные члены, найдём:

$$C \approx \frac{N}{2} \int_{-\pi}^{+\pi} \cdots \int_{-\pi}^{+\pi} \left[\prod_{l=1}^d \frac{dk_l}{2\pi} \right] \frac{1}{\left[\frac{T - T_c}{T_c} + \frac{1}{2d} \sum_{l=1}^d k_l^2 \right]^2}. \quad (118)$$

Остаётся перейти к d -мерным сферическим координатам в пространстве переменных k_1, \dots, k_d

$$C \approx \gamma_d \frac{N}{2} \int_0^\Lambda \frac{k^{d-1}}{[\mu^2 + k^2]^2} dk, \quad (119)$$

где $\mu^2 = (T - T_c)/T_c$;

γ_d — константа, зависящая от размерности пространства;

Λ — несущественная константа.

|| ЗАДАЧА 36. Показать, что при $T \rightarrow T_c + 0$ этот интеграл расходится, если $d < 4$ и сходится, если $d > 4$.

|| ЗАДАЧА 37. Показать, что при $\mu^2 \rightarrow +0$ главный член интеграла (119) имеет вид

$$\int_0^\Lambda \frac{k^{d-1}}{[\mu^2 + k^2]^2} dk \sim A \mu^{d-4}, \quad (120)$$

где A — некоторая константа.

Заметим, что теплоёмкость системы связана со средним значением квадрата флуктуаций энергии в каноническом ансамбле соотношением

$$T^2 C = \overline{(\delta E)^2}, \quad (121)$$

поэтому сингулярность теплоёмкости означает наличие сильно развитых флуктуаций энергии в системе.

|| ЗАДАЧА 38. Вывести соотношение (121) и дать ему физическую интерпретацию.

1.5 Сферическая модель Берлина-Каца

Сферическая модель была предложена в работе Берлина и Каца [3] в 1952 г. Эта модель вполне аналогична модели Изинга на произвольной пространственной решётке произвольной размерности с тем отличием лишь, что вместо условия $s_i = \pm 1$ ($s_i^2 = 1$) накладывается несравненно более слабое условие:

$$\sum_{i=1}^N s_i^2 = N. \quad (122)$$

В остальном значения спинов остаются произвольными. Таким образом, каждая из спиновых переменных пробегает *непрерывный* ряд значений, ограниченный единственным условием (122).

1.5.1 Статистическая сумма сферической модели

Статистическая сумма для сферической модели определяется соотношением:

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} ds_1 \cdots ds_N \exp \left\{ A \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + h \sum_{i=1}^N s_i \right\} \delta \left(\sum_{i=1}^N s_i^2 - N \right), \quad (123)$$

где $h = \beta H$;

H — однородное внешнее поле;

$A = \beta J$;

J — обменный интеграл;

символ $\langle i, j \rangle$ обозначает пары ближайших соседей i, j .

Дельта-функция под знаком интеграла в (123) позволяет автоматически учесть условие (122). Воспользуемся интегральным представлением дельта-функции:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{isx} ds, \quad (124)$$

и преобразуем выражение (123) к виду:

$$Z = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} ds_1 \cdots ds_N \int_{-\infty}^{+\infty} ds \quad (125)$$

$$\times \exp \left\{ A \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + h \sum_{i=1}^N s_i + (\alpha + is)N - (\alpha + is) \sum_{i=1}^N s_i^2 \right\}.$$

Здесь в подынтегральной функции в (123) был введён множитель

$$\exp \left(\alpha N - \alpha \sum_i s_i^2 \right), \quad (126)$$

который из-за дельта-функции равен единице: этот множитель окажется весьма полезным в дальнейших преобразованиях.

Экспонента в подынтегральной функции (126) содержит квадратичную форму $\mathbf{S}^\dagger \mathbf{Q} \mathbf{S} = \sum_{j,k=1}^N s_j Q_{jk} s_k = (\alpha + is) \sum_j s_j^2 - A \sum_{\langle j,k \rangle} s_j s_k$ и линейную форму $\mathbf{H}^\dagger \mathbf{S} = h \sum_{i=1}^N s_i$ от спиновых переменных s_i . Здесь через \mathbf{S} обозначена матрица-столбец с элементами s_j , \mathbf{H} – матрица-столбец, все элементы которой равны h , символ † указывает на транспонирование соответствующей матрицы. В этих компактных обозначениях статистическая сумма выглядит следующим образом:

$$Z = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} ds_1 \cdots ds_N \int_{-\infty}^{+\infty} ds \exp \left(-\mathbf{S}^\dagger \mathbf{Q} \mathbf{S} + \mathbf{H}^\dagger \mathbf{S} + (\alpha + is)N \right). \quad (127)$$

Положим произвольный параметр α достаточно большим, дабы обеспечить положительность вещественных частей всех собственных значений матрицы \mathbf{Q} . Это даёт основание изменить порядок интегрирования в выражении (125): вначале проинтегрируем по всем переменным s_j , и лишь затем – по s . Внутренний интеграл по переменным s_j является гауссовым интегралом и вычисляется с помощью замены переменных, исключаящей

линейную форму в экспоненте:

$$\mathbf{T} = \mathbf{S} - \frac{1}{2}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{H} \quad (128)$$

и последующего ортогонального преобразования в пространстве переменных t_1, \dots, t_N , приводящего матрицу \mathbf{Q} к диагональному виду (подробности можно найти в предыдущем разделе данного пособия, содержащем гауссову модель). В итоге найдём:

$$Z = \frac{\pi^{\frac{N}{2}-1}}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{ds}{\{\det \mathbf{Q}\}^{\frac{1}{2}}} \exp \left[(\alpha + i s)N + \frac{1}{4}\mathbf{H}^\dagger \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{H} \right]. \quad (129)$$

Таким образом, проблема вычисления статистической суммы для сферической модели сведена к двум относительно несложным задачам:

1. Вычисление детерминанта матрицы \mathbf{Q} и обращения этой матрицы. С этой задачей мы имели дело в связи с гауссовой моделью в предыдущем разделе данного пособия.
2. Асимптотическое вычисление однократного интеграла (129) по переменной s .

Матрица \mathbf{Q} , содержащаяся в выражении (129), зависит от типа решётки, в узлах которой расположены спины, и от параметра s . Ограничимся рассмотрением простой кубической решётки в пространстве d измерений. Действуя точно так же, как и в случае гауссовой модели (см. формулу (102)), найдём:

$$\ln \det \mathbf{Q} = N \int_{-\pi}^{+\pi} \cdots \int_{-\pi}^{+\pi} \ln \left[(\alpha + i s) - A \sum_{l=1}^d \cos k_l \right] \left[\prod_{l=1}^d \frac{dk_l}{2\pi} \right]. \quad (130)$$

ЗАДАЧА 39. Вычислить собственные значения матрицы \mathbf{Q} и вывести формулу (130). Показать, что необходимое и достаточное условие положительности вещественных частей всех собственных значений матрицы \mathbf{Q} имеет вид

$$\alpha - Ad > 0. \quad (131)$$

Преобразуем формулу (130) к виду

$$\ln \det \mathbf{Q} = N [\ln A + g(z)], \quad (132)$$

где

$$z = (\alpha + is - Ad)/A \quad (133)$$

и

$$g(z) = \int_{-\pi}^{+\pi} \cdots \int_{-\pi}^{+\pi} \ln \left[z + d - \sum_{l=1}^d \cos k_l \right] \left[\prod_{l=1}^d \frac{dk_l}{2\pi} \right]. \quad (134)$$

|| ЗАДАЧА 40. Найти матрицу \mathbf{Q}^{-1} .

Вычислим теперь слагаемое $\mathbf{H}^\dagger \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{H}$, содержащееся по знаком экспоненты интеграла (129):

$$\mathbf{H}^\dagger \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{H} = \frac{N h^2}{Az} \quad (135)$$

и подставим результат в (129):

$$Z = \frac{1}{2i} \left(\frac{\pi}{A} \right)^{\frac{N}{2}-1} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \exp [N\varphi(z)] dz, \quad (136)$$

где $c = (\alpha - Ad)/A > 0$, а функция $\varphi(z)$ определяется соотношением

$$\varphi(z) = A(z + d) - \frac{1}{2}g(z) + \frac{h^2}{4Az}. \quad (137)$$

Интеграл (136) нужно вычислить при условии больших N . Асимптотическое вычисление естественно выполнить методом наискорейшего спуска. Сначала выполним анализ функции $\varphi(z)$ для вещественных положительных z . При положительном значении параметра A и отличном от нуля внешнем поле h имеем

$$\lim_{z \rightarrow +0} \varphi(z) = +\infty, \quad \lim_{z \rightarrow +\infty} \varphi(z) = +\infty. \quad (138)$$

Поэтому, при вещественных z функция $\varphi(z)$ на промежутке $(+0, +\infty)$ имеет по меньшей мере один минимум.

|| ЗАДАЧА 41. Проверить соотношения (138).

Найдём вторую производную функции $\varphi(z)$:

$$\varphi''(z) = \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{+\pi} \cdots \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{1}{\left[z + d - \sum_{l=1}^d \cos k_l \right]^2} \left[\prod_{l=1}^d \frac{dk_l}{2\pi} \right] + \frac{h^2}{2Az^3}. \quad (139)$$

Нетрудно убедиться, что при всех $z > 0$ вторая производная $\varphi''(z)$ положительна, поэтому на указанном промежутке функция $\varphi(z)$ имеет единственный минимум. Положим, что этот минимум достигается в некоторой точке $z_0 > 0$.

Заметим, что функция $\varphi(z)$ аналитична в полуплоскости $\operatorname{Re} z > 0$, поэтому при всех $c > 0$ интеграл в правой части (136) не зависит от c , т.е. c можно положить равным любому положительному числу. Положим

$$c = z_0. \quad (140)$$

Поскольку функция $\varphi(z)$ вдоль пути $\operatorname{Im} z = 0$, $\operatorname{Re} z > 0$ в точке z_0 имеет минимум, то вдоль пути интегрирования от $z_0 - i\infty$ до $z_0 + i\infty$ в этой же точке имеет максимум. При $N \rightarrow \infty$ основной вклад в интеграл даёт окрестность точки z_0 , определяемой из условия $\varphi'(z_0) = 0$, откуда

$$A - \frac{h^2}{4Az_0^2} - \frac{1}{2}g'(z_0) = 0. \quad (141)$$

Вычислив асимптотическое значение интеграла (136) при $N \rightarrow \infty$, найдём свободную энергию в расчёте на один узел:

$$f = -T \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln Z}{N} = -T \left[\frac{1}{2} \ln \left(\frac{\pi}{A} \right) + \varphi(z_0) \right]. \quad (142)$$

|| ЗАДАЧА 42. Выполнить промежуточные вычисления от (136) до (142).

Поскольку уравнение (141) имеет единственный корень, то система уравнений (137), (141), (142) определяет свободную энергию f как функцию от A и h при условии, что $A > 0$ и $h \neq 0$. Таким образом, исследование термодинамики сферической модели с учётом внешнего поля сведена к сравнительно несложной задаче, которой мы и займёмся в последующих разделах.

1.5.2 Уравнение состояния

Продифференцируем соотношение (142) по внешнему полю h с учётом определения (137) функции $\varphi(z)$, а также принимая во внимание зависимость положения точки z_0 от h :

$$\frac{df}{dh} = -T \left[\frac{h}{2Az} + \varphi'(z_0) \frac{dz_0}{dh} \right]. \quad (143)$$

Поскольку согласно (141) $\varphi'(z_0)$ и намагниченность M на один узел определяется соотношением

$$M = \frac{1}{N} \frac{d \ln Z}{dh}, \quad (144)$$

то

$$M = \frac{h}{2Az_0} = \frac{H}{2Jz_0}, \quad (145)$$

где H — внешнее поле;

J — обменный интеграл.

Исключим теперь z_0 из уравнений (145) и (141) и получим *асимптотически точное* уравнение состояния сферической модели, связывающее между собой M , H , T :

$$2J(1 - M^2) - Tg' \left(\frac{H}{2JM} \right) = 0. \quad (146)$$

Полезно вычислить и внутреннюю энергию U системы в расчёте на один спин, которая определяется соотношением

$$U = -\frac{1}{N} \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right). \quad (147)$$

Учитывая, что $\varphi'(z_0) = 0$, найдём

$$U = \frac{1}{2}T - J(z_0 + d) - \frac{H^2}{4Jz_0}. \quad (148)$$

Наконец, исключим z_0 с помощью (145) и получим точную связь между внутренней энергией и намагниченностью

$$U = \frac{1}{2}T - Jd - \frac{H}{2} (M^{-1} + M). \quad (149)$$

1.5.3 Упрощение уравнения состояния

К сожалению, уравнение состояние сферической модели в форме (146) весьма неудобно для анализа, что обусловлено наличием в этом уравнении производной от функции $g(z)$, определённой соотношением (134). Упрощение уравнения состояния начнём с преобразования функции

$$g'(z) = \int_{-\pi}^{+\pi} \cdots \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{1}{\left[z + d - \sum_{l=1}^d \cos k_l \right]} \left[\prod_{l=1}^d \frac{dk_l}{2\pi} \right]. \quad (150)$$

Воспользуемся тождеством

$$\frac{1}{\lambda} = \int_0^{+\infty} e^{-\lambda t} dt, \quad (151)$$

которое в применении к подынтегральной функции (150) даёт

$$g'(z) = \int_{-\pi}^{+\pi} \cdots \int_{-\pi}^{+\pi} \left[\prod_{l=1}^d \frac{dk_l}{2\pi} \right] \int_0^{+\infty} dt \exp \left[-t \left(z + d - \sum_{l=1}^d \cos k_l \right) \right]. \quad (152)$$

Этот интеграл при $\operatorname{Re} z > 0$ сходится, поэтому можно изменить порядок интегрирования. Интегралы по переменным k_l идентичны и выражаются через функции Бесселя нулевого порядка чисто мнимого аргумента (или модифицированную функцию Бесселя $I_0(t)$)

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{\pm t \cos k_l} dk_l = J_0(it) = I_0(t). \quad (153)$$

Подставим (153) в (152) и получим интегральное представление для функции $g'(z)$:

$$g'(z) = \int_0^{+\infty} dt e^{-t(z+d)} [I_0(t)]^d. \quad (154)$$

Это представление несравненно удобнее для анализа функции $g'(z)$, чем выражение (150).

ЗАДАЧА 43. Используя асимптотическое разложение функции Бесселя $I_0(t)$ для больших t

$$I_0(t) \approx \frac{e^t}{\sqrt{2\pi t}}, \quad (155)$$

доказать сходимость интеграла (154) при условии $\operatorname{Re} z > 0$.

Исследуем на сходимость интеграл в правой части (154) при $z = 0$. Сходимость (или расходимость) этого интеграла определяется асимптотикой подынтегральной функции при больших t

$$e^{-td} [I_0(t)]^d \approx \frac{1}{(2\pi t)^{d/2}}, \quad (156)$$

откуда следует расходимость $g'(0)$ при $0 < d \leq 2$ и конечность этой величины при $d > 2$.

Таким образом, после проделанных упрощений уравнение состояния сферической модели можно представить в форме

$$2J(1 - M^2) - Tg' \left(\frac{H}{2JM} \right) = 0, \quad (157)$$

где

$$g'(z) = \int_0^{+\infty} dt e^{-t(z+d)} [I_0(t)]^d. \quad (158)$$

Анализ уравнения состояния показывает, что в сферической модели фазовый переход имеет место при размерности пространства d , большей двух, причём (в отличие от теории среднего поля) критические показатели существенно зависят от размерности пространства. Подробный анализ уравнения состояния может быть найден в работах [2, 8, 17, 26].

1.5.4 Резюме

В данном разделе были рассмотрены несколько точно решённых решёточных моделей конденсированных систем. К сожалению, все известные в настоящее время точно решённые модели статистической физики имеют весьма существенный недостаток: все они безмерно далеки от реальности. Тем не менее эти модели могут быть полезны в качестве “пробного камня” для разработки эффективных приближённых методов, для которых не

существует априорных оценок степени их погрешности. Наконец, сами по себе решёточные модели послужили источником новых красивых математических задач, и возникшая на их базе новая математика, несомненно, со временем найдёт обширные и плодотворные применения.

2 Метод ренормгруппы: принципы и простейшие применения

Основы метода ренормализационной группы (РГ) применительно к задачам статистической физики были заложены К. Вильсоном (K. Wilson) в начале 1970-х годов*. Основная идея метода заключается в последовательном сокращении описания макроскопической системы с целью учёта крупномасштабных флуктуаций в окрестности критической точки с помощью масштабных преобразований.

2.1 РГ исследование одномерной модели Изинга

Основные идеи метода РГ могут быть хорошо представлены на одномерной модели Изинга, точное решение которой уже рассмотрено нами в предыдущей главе.

В отсутствие внешнего поля статистическая сумма этой модели задаётся выражением

$$Z(A, N) = \sum_{s_1, s_2, \dots, s_N = \pm 1} \exp [A (s_1 s_2 + s_2 s_3 + s_3 s_4 + s_4 s_5 + s_5 s_6 + \dots)], \quad (159)$$

где $A = \beta J$;

J – обменный интеграл;

β – обратная температура.

Первый шаг состоит в исключении конечной доли степеней свободы путём усреднения по этим степеням свободы. Для этого представим статсумму (159) в форме

$$Z(A, N) = \sum_{s_1, s_2, \dots, s_N = \pm 1} \exp [A (s_1 s_2 + s_2 s_3)] \exp [A (s_3 s_4 + s_4 s_5)] \cdots \quad (160)$$

Выполним суммирование по всем спинам с чётными номерами, т.е. в первой экспоненте выполним суммирование по s_2 , во второй – по s_4 и т.д. В итоге найдём

$$Z(A, N) = \sum_{s_1, s_3, s_5, \dots} \{ \exp [A (s_1 + s_3)] + \exp [-A (s_1 + s_3)] \} \times \quad (161)$$

$$\times \{ \exp [A (s_3 + s_5)] + \exp [-A (s_3 + s_5)] \} \cdots$$

*Лекции Вильсона по методу РГ по “горячим следам” опубликованы на английском и русском языках [34].

Таким образом, все степени свободы с чётными номерами устранены.

Второй шаг – преобразовать выражение (161) к форме, подобной (159), но с вдвое меньшим числом спинов (т.е. $N/2$ спинов) и другой константой связи A (или другой температурой). Если такое изменение масштабов возможно, то можно будет получить рекуррентные соотношения для статистической суммы. Итак, мы ищем функцию $f(A)$ и новую константу связи A' , которые удовлетворяют соотношению

$$e^{A(s+s')} + e^{-A(s+s')} = f(A)e^{A'ss'}. \quad (162)$$

Конечно, при произвольных s, s' такое преобразование не существует, однако нам требуется существование этого преобразования только при $s, s' = \pm 1$. Подставляя в (162) указанные значения спиновых переменных, получим четыре уравнения относительно $f(A)$ и A' . Из этих уравнений независимых только два:

$$\begin{cases} e^{2A} + e^{-2A} = f(A)e^{A'}, \\ 2 = f(A)e^{-A'}. \end{cases} \quad (163)$$

Решение этой системы уравнений вполне тривиально и имеет вид:

$$\begin{cases} A' = \frac{1}{2} \ln \operatorname{ch}(2A), \\ f(A) = 2\sqrt{\operatorname{ch}(2A)}. \end{cases} \quad (164)$$

В результате мы имеем искомое рекуррентное соотношение для статистической суммы:

$$Z(A, N) = \sum_{s_1, s_3, \dots} f(A)e^{K's_1s_3} f(A)e^{K's_3s_5} \dots = [f(A)]^{\frac{N}{2}} Z\left(A', \frac{N}{2}\right). \quad (165)$$

Это преобразование называется *преобразованием Каданова**.

Логарифм статистической суммы в термодинамическом пределе является экстенсивной величиной, поэтому целесообразно ввести интенсивную (т.е., не зависящую от размеров системы) переменную $g(A)$ согласно определению

$$g(A) = \frac{1}{N} \ln Z(A, N). \quad (166)$$

Логарифмируя обе части рекуррентного соотношения (165) и используя выражение (164) для $f(A)$, найдём

$$g(A') = 2g(A) - \ln \left(2\sqrt{\operatorname{ch}[2A]} \right). \quad (167)$$

*Феноменологические идеи этого преобразования были сформулированы Л. Кадановым в 1960-х годах. Современное состояние проблемы можно найти в учебнике Каданова [10].

Уравнения (167) и (164) называются уравнениями ренормгруппы. Эти уравнения описывают преобразования, которые обладают *групповым свойством*. При известной статистической сумме для некоего значения A может быть воссоздана статистическая сумма для других значений A посредством рекуррентных уравнений или *перенормировки*.

ЗАДАЧА 44. Показать, что “новая” константа связи A' , получаемая из первого соотношения (164), меньше “старой” константы связи A , т.е., $A' < A$.

ЗАДАЧА 45. Вывести систему уравнений, обратную по отношению к системе (167) и (164). Исходя из полученной системы уравнений показать, что $A > A'$.

ЗАДАЧА 46. Показать, что отображение $A' = (1/2) \ln \text{ch}(2A)$ имеет только две неподвижные точки $A_1 = 0$ и $A_2 = \infty$. Эти две точки называют *тривиальными* неподвижными точками. Исследовать каждую из этих точек на устойчивость.

2.2 РГ анализ двумерной модели Изинга

Рассмотрим систему, в которой имеет место фазовый переход, — двумерную модель Изинга на квадратной решётке.

Первый шаг – просуммировать по части всех спиновых переменных. Один из вариантов выбора этой части переменных представлен на рисунке в виде светлых кружков:

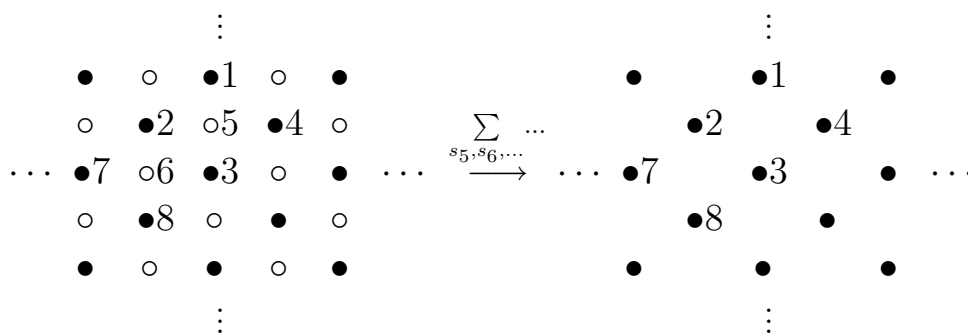


Рис. 1. Результат суммирования по части спиновых переменных в двумерной модели Изинга.

Преобразуем выражение для статистической суммы:

$$Z(A, N) = \sum_{s_1, s_2, \dots} \cdots \exp [As_5 (s_1 + s_2 + s_3 + s_4)] \times \exp [As_6 (s_2 + s_3 + s_7 + s_8)] \cdots . \quad (168)$$

После суммирования по s_5, s_6, \dots получим

$$Z = \sum_{\text{остаток от } s_i} \cdots \{ \exp [A(s_1 + s_2 + s_3 + s_4)] + \exp [-A(s_1 + s_2 + s_3 + s_4)] \} \times \quad (169)$$

$$\times \{ \exp [A(s_2 + s_7 + s_8 + s_3)] + \exp [-A(s_2 + s_7 + s_8 + s_3)] \} \cdots .$$

Как и в одномерной модели Изинга, нам хотелось бы найти преобразование Каданова, которое приводит эту отчасти отсуммированную статистическую сумму к первоначальному неотсуммированному виду. Конечно, нет и быть не может уверенности в том, что такое преобразование существует.

Итак, попытаемся найти преобразование Каданова в форме

$$\{ \exp [A(s_1 + s_2 + s_3 + s_4)] + \exp [-A(s_1 + s_2 + s_3 + s_4)] \} = \stackrel{?!}{=} f(A) \exp [A'(s_1 s_2 + s_2 s_3 + s_3 s_4 + s_4 s_1)] \quad (170)$$

и потребуем, чтобы это соотношение выполнялось для всех значений спиновых переменных $s_1, s_2, s_3, s_4 = \pm 1$. Имеется всего четыре *существенно различных* варианта:

$$\begin{aligned} (1) : & s_1 = s_2 = s_3 = s_4 = \pm 1; \\ (2) : & s_1 = s_2 = s_3 = -s_4 = \pm 1; \\ (3) : & s_1 = s_2 = -s_3 = -s_4 = \pm 1; \\ (4) : & s_1 = -s_2 = s_3 = -s_4 = \pm 1, \end{aligned} \quad (171)$$

которые приводят к системе *четырёх* уравнений с *двумя* неизвестными $f(A)$ и A' . К сожалению, эта система уравнений несовместна.

Видимо, простейший путь к исправлению ситуации состоит в модификации уравнения (170) с увеличением числа неизвестных:

$$\begin{aligned} & \{ \exp [A(s_1 + s_2 + s_3 + s_4)] + \exp [-A(s_1 + s_2 + s_3 + s_4)] \} = \\ & = f(A) \exp [(1/2)A_1(s_1 s_2 + s_2 s_3 + s_3 s_4 + s_4 s_1)] \times \\ & \times \exp [A_2(s_1 s_3 + s_2 s_4) + A_3 s_1 s_2 s_3 s_4]. \end{aligned} \quad (172)$$

Подставляя (171) в (172), получим систему уравнений

$$\begin{cases} 2 \operatorname{ch} 4A = f(A) \exp [2A_1 + 2A_2 + A_3]; \\ 2 \operatorname{ch}(2A) = f(A) \exp [-A_3]; \\ 2 = f(A) \exp [-2A_2 + A_3]; \\ 2 = f(A) \exp [-2A_1 + 2A_2 + A_3], \end{cases} \quad (173)$$

содержащую четыре неизвестных (A_1 , A_2 , A_3 и $f(A)$). Логарифмируя левые и правые части каждого из уравнений, получим систему линейных алгебраических уравнений относительно A_1 , A_2 , A_3 и $\ln f(A)$, которая имеет решение

$$\begin{cases} A_1 = (1/4) \ln \operatorname{ch}(4A); \\ A_2 = (1/8) \ln \operatorname{ch}(4A); \\ A_3 = (1/8) \ln \operatorname{ch}(4A) - (1/2) \ln \operatorname{ch}(2A); \\ f(A) = 2 \{\operatorname{ch}(2A)\}^{1/2} \{\operatorname{ch}(4A)\}^{1/8}. \end{cases} \quad (174)$$

|| ЗАДАЧА 47. Показать, что решение системы уравнений (173) имеет вид (174).

Подставим соотношение (172) в выражение для статистической суммы и найдём:

$$\begin{aligned} Z(A, N) = [f(A)]^{N/2} \sum_{\text{остаток } s_i} \cdots \exp \left[\frac{1}{2} A_1 (s_1 s_2 + s_2 s_3 + s_3 s_4 + s_4 s_1) \right] \times \\ \times \exp [A_2 (s_1 s_3 + s_2 s_4) + A_3 (s_1 s_2 s_3 s_4)] \times \\ \times \exp \left[\frac{1}{2} A_1 (s_2 s_7 + s_7 s_8 + s_8 s_3 + s_3 s_2) \right] \times \\ \times \exp [A_2 (s_2 s_8 + s_7 s_3) + A_3 (s_2 s_7 s_8 s_3)]. \end{aligned} \quad (175)$$

Заметим, что в этом выражении каждая пара ближайших соседей встречается дважды. В частности, в выписанных здесь явно членах дважды встречаются пары $s_2 s_3$: первый раз при суммировании по s_5 , второй раз — при суммировании по s_6 . В то же время пары, состоящие из следующих за ближайшими соседями (т.е. пары из вторых координативных сфер, к примеру, $s_1 s_3$) встречаются лишь по одному разу.

Таким образом, мы имеем:

$$\begin{aligned}
 Z(A, N) &= \sum_{N \text{ спинов}} \exp \left[A \sum'_{ij} s_i s_j \right] = \\
 &= [f(A)]^{N/2} \sum_{N/2 \text{ спинов}} \exp \left[A_1 \sum'_{i,j} s_i s_j + A_2 \sum''_{l,m} s_l s_m + A_3 \sum'''_{p,q,r,t} s_p s_q s_r s_t \right], \quad (176)
 \end{aligned}$$

где двойной штрих означает суммирование по *второй* координационной сфере решётки с $N/2$ спинами, тройной штрих соответствует суммированию по всем четвёркам спинов вокруг всех $N/2$ исключённых узлов.

Подведём итоги этого преобразования. После исключения половины степеней свободы исходной решётки и перехода к новой решётке с оставшимися степенями свободы произошло существенное усложнение взаимодействия за счёт членов с A_2 и A_3 . Такого сорта усложнение — совершенно обычная ситуация для систем с нетривиальным взаимодействием. Из-за усложнения взаимодействия уравнение (176) не имеет формы, допускающей точные ренормализационные вычисления, поэтому нам придётся ввести некоторые приближения.

Для начала попробуем ввести наипростейшее приближение, попросту пренебрегая слагаемыми, содержащими A_2 и A_3 . Это даёт

$$Z(A, N) \approx [f(A)]^{N/2} Z(A_1, N/2), \quad A_1 = \frac{1}{2} \ln \operatorname{ch}(4A). \quad (177)$$

|| ЗАДАЧА 48. Показать, что пренебрежение величинами A_2 и A_3 не позволяет обнаружить фазовый переход в системе.

Для получения удовлетворительного результата следует сохранить хотя бы A_2 . Мы выполним это в приближении среднего поля, которое позволяет учесть взаимодействие не ближайших соседей:

$$A_1 \sum'_{ij} s_i s_j + A_2 \sum''_{lm} s_l s_m \approx A'(A_1, A_2) \sum'_{ij} s_i s_j. \quad (178)$$

Это приближение приводит к следующему результату:

$$Z(A, N) = [f(A)]^{N/2} Z[A'(A_1, A_2), N/2]. \quad (179)$$

Положив $g(A) = \frac{\ln Z(A, N)}{N}$, получим

$$g(A) = \frac{1}{2} \ln f(A) + \frac{1}{2} g(A'), \quad (180)$$

или

$$g(A') = 2g(A) - \ln \left\{ 2 [\operatorname{ch}(2A)]^{1/2} [\operatorname{ch}(4A)]^{1/8} \right\}. \quad (181)$$

|| ЗАДАЧА 49. Вывести формулы (180) и (181).

Выполним оценки величин A' . Для этого из всех возможных конфигураций рассмотрим ту, когда все спины одинаковы. Поскольку в решётке, состоящей из $N/2$ спинов, общее число связей равно N , то

$$A_1 \sum'_{ij} s_i s_j = N A_1. \quad (182)$$

Далее, поскольку число связей со вторыми соседями у каждого из $N/2$ спинов равно четырём, то нетрудно получить для конфигурации с “параллельными” спинами

$$A_2 \sum''_{lm} s_l s_m = N A_2. \quad (183)$$

|| ЗАДАЧА 50. Выполнить детальный вывод формул (182) и (183).

|| ЗАДАЧА 51. Будет ли справедливо соотношение (182), если знаки спинов в соседних узлах противоположны? Будет ли справедливо соотношение (183), если знаки спинов у вторых соседей противоположны?

Подставляя соотношения (182) и (183) в (178), получим оценку A' :

$$A' \approx A_1 + A_2. \quad (184)$$

Используем, наконец, выражения (174) для A_1 , A_2 и найдём окончательно

$$A' = \frac{3}{8} \ln \operatorname{ch}(4A). \quad (185)$$

Это отображение имеет нетривиальную неподвижную точку, т.е. существует некоторое конечное число A_c , определяемое из уравнения

$$A_c = \frac{3}{8} \ln \operatorname{ch}(4A_c). \quad (186)$$

ЗАДАЧА 52. Найти приближённое значение корня уравнения (186)

$$A_c \approx 0.50698. \quad (187)$$

Величина $A_c = J/T_c$ определяет критическую температуру. Точное соотношение между обменным интегралом J и критической температурой T_c для двумерной модели Изинга было установлено Крамерсом и Ванье в 1941 году [13], за три года до точного решения этой модели Онзагером.

$$A_{\text{exact}} = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2}) = 0,44068 \dots \quad (188)$$

Отметим, что ренормгрупповое и точное значения оказались довольно близки между собой.

2.3 Резюме

Метод ренормгруппы в настоящее время широко используется в квантовой теории поля и статистической физике. В данном разделе разобраны две простейшие модели (одно- и двумерная модели Изинга), которые иллюстрируют метод ренормгруппы. Изложение материала основывается на работах Каданова [16] и Вильсона [34]. С современным состоянием теории ренормгруппы можно ознакомиться по книгам [1, 9, 10, 15, 20, 32, 40].

3 Феноменологические решёточные модели

Одной из важнейших сфер приложений статистической механики является материаловедение. К сожалению, современное состояние статистической механики таково, что вычислить термодинамические функции системы, состоящей из ядер и электронов, из “первых принципов” не представляется возможным. Более того, пока не удаётся дать корректную оценку погрешностей тех приближённых методов, которые применяются к заведомо более простым задачам статистической физики. До сих пор не удалось показать, что система взаимодействующих атомов при достаточно низких температурах переходит в кристаллическое состояние. Это вынуждает использовать феноменологические модели вещества, в которых используются дополнительные предположения, степень обоснованности которых может быть оценена только апостериори.

3.1 Решёточная модель бинарного твёрдого раствора

Одной из наиболее популярных моделей твёрдых растворов является так называемая *решёточная модель* [14, 23, 11, 25]. В основе модели лежат два предположения:

1. Атомы раствора распределяются по узлам некоторой *идеальной* кристаллической решётки;
2. Конфигурационная энергия раствора имеет вид суммы парных взаимодействий атомов.

Положим, что атомы двух типов A и B распределены по узлам некоторой решётки. Введём две случайные функции $c_1(\mathbf{r})$ и $c_2(\mathbf{r})$:

$$c_1(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & \text{если в узле } r \text{ находится атом типа } A, \\ 0, & \text{если в узле } r \text{ находится атом типа } B, \end{cases} \quad (189)$$

$$c_2(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & \text{если в узле } r \text{ находится атом типа } A, \\ 1, & \text{если в узле } r \text{ находится атом типа } B. \end{cases} \quad (190)$$

Эти случайные функции связаны соотношением

$$c_1(\mathbf{r}) + c_2(\mathbf{r}) = 1, \quad (191)$$

смысл которого очевиден: каждый узел занят каким-либо из атомов.

Гамильтониан бинарного раствора в данной модели представляется в форме:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^2 \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} K_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') c_i(\mathbf{r}) c_j(\mathbf{r}'), \quad (192)$$

где $K_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ — потенциальная энергия взаимодействия атомов i -го и j -го типов, находящихся в точках \mathbf{r} , \mathbf{r}' соответственно.

Исключим $c_2(\mathbf{r})$ из (192) с помощью (191) и обозначим $c_1(\mathbf{r})$ через $c(\mathbf{r})$. В итоге найдём:

$$H = H_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') c(\mathbf{r}) c(\mathbf{r}'), \quad (193)$$

где

$$K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = K_{11}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + K_{22}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - 2K_{12}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (194)$$

— линейная комбинация межатомных потенциалов, часто (и не совсем точно) называемая энергией смещения, а

$$H_0 = \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} K_{12}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') c(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} K_{22}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [1 - 2c(\mathbf{r})]^*. \quad (195)$$

|| ЗАДАЧА 53. Проверить формулы (194) и (195).

|| ЗАДАЧА 54. Обозначим через N полное число атомов в системе, и через N_1 — число атомов первого компонента. Показать, что при фиксированном брутто-составе раствора величина H_0 является константой, не зависящей от распределения компонентов в системе:

$$H_0 = N_1 \tilde{K}_{12} + \frac{1}{2} (N - 2N_1) \tilde{K}_{22}, \quad (196)$$

|| где $\tilde{K}_{ij} = \sum_{\mathbf{r}} K_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ — не зависящие от \mathbf{r}' константы.

Выберем H_0 в качестве начала отсчёта энергии. Тогда гамильтониан (193) системы является квадратичным функционалом от $c(\mathbf{r})$:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') c(\mathbf{r}) c(\mathbf{r}'). \quad (197)$$

*Здесь учтено, что $K_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = K_{ij}(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$, и использована возможность переобозначения немых переменных \mathbf{r} , \mathbf{r}' .

3.1.1 Приближение среднего поля в решёточной модели

Введём среднее значение случайной величины $c(\mathbf{r})$:

$$n(\mathbf{r}) = \langle c(\mathbf{r}) \rangle, \quad (198)$$

где угловые скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают усреднение по каноническому ансамблю Гиббса.

Величина $n(\mathbf{r})$ есть вероятность того, что в данном узле \mathbf{r} находится атом первого компонента. В неупорядоченном растворе эта величина не зависит от координат \mathbf{r} и равна атомной доле первого компонента

$$n = \frac{N_1}{N_1 + N_2}. \quad (199)$$

В случае раствора с упорядочением величина $n(\mathbf{r})$ зависит от координат.

Следуя [11], предположим, что функция $n(\mathbf{r})$ имеет вид функции распределения Ферми-Дирака:

$$n(\mathbf{r}) = \frac{1}{\exp [\beta \{ \Phi(\mathbf{r}) - \mu \}] + 1}, \quad (200)$$

где $\beta = 1/T$ – обратная температура;

$\Phi(\mathbf{r})$ – суммарный потенциал в точке \mathbf{r} , создаваемый всеми атомами;

μ – параметр, называемый в дальнейшем химическим потенциалом.

Выбор этой функции обусловлен “своеобразным принципом Паули: в каждом узле может находиться либо один, либо ни одного атома первого компонента”. Будем предполагать, что потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ имеет вид:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{r}'} K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n(\mathbf{r}'). \quad (201)$$

Следует заметить, что здесь сделаны два допущения:

1. Предположение о выборе функции $n(\mathbf{r})$ в виде распределения именно Ферми-Дирака никак не обосновано. Дело в том, что существует бесконечно много функций, которые удовлетворяют “своеобразному принципу Паули”.
2. Выбор локального потенциала в виде (201) также никак не обоснован. Точное значение локального потенциала в точке \mathbf{r} имеет вид:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{r}'} K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') c(\mathbf{r}'), \quad (202)$$

и замена случайной переменной $c(\mathbf{r}')$ её средним значением $n(\mathbf{r}')$ не вполне убедительна. Это приближение называется *приближением самосогласованного (или среднего) поля*. Из физических соображений ясно, что это приближение тем лучше, чем более далекодействующим является межатомный потенциал, поскольку в этом случае в сферу действия потенциала попадает достаточно много частиц, чтобы можно было использовать предельные теоремы теории вероятностей.

Подставляя (201) в (200), получим замкнутое уравнение для функции $n(\mathbf{r})$ в приближении среднего поля:

$$n(\mathbf{r}) = \frac{1}{\exp \left[\beta \left\{ \sum_{\mathbf{r}'} K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n(\mathbf{r}') - \mu \right\} \right] + 1}. \quad (203)$$

ЗАДАЧА 55. Показать, что уравнение (203) может быть получено из условия минимума функционала свободной энергии вида

$$\begin{aligned} F = & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}') + \\ & + T \sum_{\mathbf{r}} \{ n(\mathbf{r}) \ln n(\mathbf{r}) + [1 - n(\mathbf{r})] \ln [1 - n(\mathbf{r})] \} - \\ & - \mu \sum_{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (204)$$

Интерпретировать физический смысл отдельных слагаемых в этом функционале.

Уравнение (203) представляет собой нелинейное относительно $n(\mathbf{r})$ конечно-разностное уравнение. Первый вопрос, который возникает при анализе этого уравнения, это вопрос о существовании и количестве его решений. Нетрудно заметить, что это уравнение всегда имеет *тривиальное решение* вида

$$n(\mathbf{r}) \equiv \text{const} = n_0. \quad (205)$$

ЗАДАЧА 56. Показать, что для тривиального решения уравнения (203) связь между n_0 и химическим потенциалом μ задаётся соотношением вида

$$\mu = K^{(0)}n_0 + T \ln \left(\frac{n_0}{1 - n_0} \right), \quad (206)$$

где $K^{(0)} = \sum_{\mathbf{r}} K(\mathbf{r})$. Рассмотреть предельные случаи $0 < n_0 \ll 1$ и $0 < (1 - n_0) \ll 1$ и дать физическую интерпретацию получаемым при этом результатам.

3.1.2 Ветвление решений среднеполевых уравнений

Общим свойством большинства нелинейных уравнений (включая трансцендентные и нелинейные интегральные уравнения) является зависимость числа решений от значений параметров, входящих в эти уравнения. Уравнение (203) также обладает этим свойством.

Будем искать решение уравнения (203) в виде:

$$n(\mathbf{r}) = n_0 + \epsilon f(\mathbf{r}), \quad (207)$$

где $\epsilon f(\mathbf{r}) \ll 1$ – малая поправка.

Таким образом, мы ищем решение среднеполевого уравнения (203), соответствующее “почти равномерному” распределению компонентов в системе. Выполним разложение левой и правой частей уравнения (203) по малому параметру ϵ с точностью до линейных членов:

$$n_0 + \epsilon f(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{e^{\beta(K^{(0)}n_0 - \mu)} + 1} - \epsilon \frac{e^{\beta(K^{(0)}n_0 - \mu)}\beta}{\left[e^{\beta(K^{(0)}n_0 - \mu)} + 1 \right]^2} \sum_{\mathbf{r}'} K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') f(\mathbf{r}'). \quad (208)$$

Приравняем выражения при нулевой и первой степенях ϵ в левой и правой частях этого уравнения и найдём:

$$\begin{cases} n_0 = \frac{1}{e^{\beta(K^{(0)}n_0 - \mu)} + 1}; \\ f(\mathbf{r}) = -\frac{e^{\beta(K^{(0)}n_0 - \mu)}\beta}{\left[e^{\beta(K^{(0)}n_0 - \mu)} + 1 \right]^2} \sum_{\mathbf{r}'} K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') f(\mathbf{r}'). \end{cases} \quad (209)$$

Используя первое из уравнений этой системы, приведём второе уравнение к более простому виду:

$$f(\mathbf{r}) = -\beta n_0(1 - n_0) \sum_{\mathbf{r}'} K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') f(\mathbf{r}'). \quad (210)$$

ЗАДАЧА 57. Процедура линеаризации уравнения (203) выполнена не вполне строго. Корректно было бы разлагать по “малому” параметру не только $n(\mathbf{r})$, но и химический потенциал μ :

$$\mu = \mu_0 + \epsilon \mu_1. \quad (211)$$

Почему μ_1 не зависит от координат \mathbf{r} ? Выполнить корректное разложение решения уравнения (203) по параметру ϵ с учётом соответствующей поправки к химическому потенциалу и условия фиксации брутто-состава раствора $n_0 = N_1/(N_1 + N_2) = \text{const}$. Сравнить полученное уравнение относительно $f(\mathbf{r})$ с уравнением (210). Интерпретировать полученный результат.

Уравнение (210) представляет собой линейное однородное разностное уравнение типа свёртки. Оно всегда имеет тривиальное решение вида

$$f(\mathbf{r}) \equiv 0. \quad (212)$$

С помощью метода преобразования Фурье можно легко установить условия, при которых уравнение (210) имеет нетривиальные решения. Итак, ищем решение уравнения (210) в виде интеграла Фурье:

$$f(\mathbf{r}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \tilde{f}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (213)$$

Подставим это выражение в уравнение (210):

$$\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \tilde{f}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = -\beta n_0(1 - n_0) \int \frac{d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2}{(2\pi)^6} \tilde{K}(\mathbf{q}_1) \tilde{f}(\mathbf{q}_2) e^{i\mathbf{q}_1 \mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}'} e^{i(\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1) \mathbf{r}'}, \quad (214)$$

где $\tilde{K}(\mathbf{q})$ – Фурье-трансформанта функции $K(\mathbf{r})$.

В подынтегральной функции правой части этого уравнения содержится выражение вида

$$S(\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1) = \sum_{\mathbf{r}'} e^{i(\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1) \mathbf{r}'}. \quad (215)$$

Эта сумма по узлам решётки \mathbf{r}' отлична от нуля лишь в тех случаях, когда разность векторов $(\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1)$ совпадает с векторами обратной решётки, т.е.,

$$(\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1) = \mathbf{Q}_l. \quad (216)$$

Обозначим объём элементарной ячейки решётки через Ω_0

ЗАДАЧА 58. Проверить, что решёточные суммы $S(\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1)$ удовлетворяют соотношению

$$S(\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1) = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0} \sum_l \delta(\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1 - \mathbf{Q}_l), \quad (217)$$

где векторы обратной решётки \mathbf{Q}_l определяются условиями

$$\mathbf{Q}_l \cdot \mathbf{r}_s = 2\pi M_{ls}, \quad (218)$$

где M_{ls} — произвольные целые числа.

ЗАДАЧА 59. Показать, что если оба вектора \mathbf{q}_2 и \mathbf{q}_1 лежат внутри первой зоны Бриллюэна, то

$$S(\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1) = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0} \delta(\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1). \quad (219)$$

ЗАДАЧА 60. Показать, что векторы \mathbf{q}_2 и \mathbf{q}_1 принадлежат первой зоне Бриллюэна.

Уравнение (214) преобразуется к виду:

$$\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left\{ \left[1 + \frac{\beta n_0(1 - n_0)}{\Omega_0} \tilde{K}(\mathbf{k}) \right] \tilde{f}(\mathbf{k}) \right\} = 0. \quad (220)$$

Это равенство имеет место для всех \mathbf{r} . Отсюда следует, что выражение в фигурных скобках тождественно равно нулю при всех \mathbf{k} :

$$\left[1 + \frac{\beta n_0(1 - n_0)}{\Omega_0} \tilde{K}(\mathbf{k}) \right] \tilde{f}(\mathbf{k}) \equiv 0. \quad (221)$$

Имеется всего два варианта.

1. Вещественная функция — Фурье-трансформанта межатомного потенциала $\tilde{K}(\mathbf{k})$ — неотрицательна для всех \mathbf{k} , т.е.

$$\min_{\mathbf{k}} \tilde{K}(\mathbf{k}) \geq 0. \quad (222)$$

|| ЗАДАЧА 61. Доказать вещественность Фурье-трансформанты центрального межатомного потенциала.

В этом случае выражение в квадратных скобках при всех \mathbf{k} положительно и поэтому

$$\tilde{f}(\mathbf{k}) \equiv 0. \quad (223)$$

Таким образом, при условии (222) уравнение (210) имеет только тривиальное решение (212).

2. Наименьшее по \mathbf{k} значение Фурье-трансформанты потенциала $\tilde{K}(\mathbf{k})$ отрицательно

$$\min_{\mathbf{k}} \tilde{K}(\mathbf{k}) < 0. \quad (224)$$

Тогда при условии

$$T < T_c = -\frac{n_0(1 - n_0)}{\Omega_0} \min_{\mathbf{k}} \tilde{K}(\mathbf{k}) \quad (225)$$

неупорядоченное распределение компонентов, описываемое уравнением $n(\mathbf{R}) = n_0 = \text{const}$, становится неустойчивым по отношению к образованию в растворе сверхструктуры. Действительно, в этом случае для непрерывной функции $\tilde{K}(\mathbf{k})$ существуют значения волнового вектора \mathbf{k} , при которых выражение в квадратных скобках в уравнении (221) обращается в нуль. Соответственно, при этих значениях волнового вектора функция $\tilde{f}(\mathbf{k})$ может принимать произвольные значения.

Таким образом, количество решений нелинейного уравнения (203) зависит от температуры T , входящей в это уравнение в качестве параметра. Значения параметров, при которых происходит изменение числа решений уравнений, называются точками ветвления решений.*

*Обстоятельное изложение теории ветвления решений нелинейных алгебраических, трансцендентных, интегральных и дифференциальных уравнений содержится в монографии [33].

3.2 Обобщённая решёточная модель — основные идеи и соотношения

Обобщённая решёточная модель многокомпонентных конденсированных систем предложена в работах [35, 36], существенное развитие было выполнено в работах [37, 38, 39]. Эта модель позволяет учесть как различия собственных атомных размеров компонентов (т.е. короткодействующих частей межатомных потенциалов), так и дальнедействующие части межатомных потенциалов.

Положим, что короткодействующая часть межатомных потенциалов может быть учтена путём введения ограничений *сверху* на локальную плотность $n_i(\mathbf{r})$ каждого из компонентов ($i = 1 \div m$, m — число компонентов)

$$n_i(\mathbf{r}) \leq \frac{1}{\omega_i}, \quad (226)$$

где ω_i — предельное значение обратной плотности числа частиц, имеющее размерность объёма и отождествляемое далее с собственным атомным (удельным) объёмом i -го компонента.

Локальная доля объёма, занятая i -м компонентом, составляет $\omega_i n_i(\mathbf{r})$, поэтому условие занятости каждого элемента пространства может быть представлено в форме:

$$\sum_{i=1}^m \omega_i n_i(\mathbf{r}) - 1 = 0. \quad (227)$$

Следующий этап — фиксация числа частиц в системе. При сохранении числа частиц N_i каждого из компонентов должно выполняться следующее условие

$$\int_{(V)} n_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - N_i = 0. \quad (228)$$

Таким образом, при отсутствии химических реакций и в пренебрежении термическими дефектами в конденсированной системе независимо от формы модельного выражения для термодинамических потенциалов, экстремум последних должен отыскиваться при дополнительных условиях (227) и (228).

Свободную энергию Гельмгольца F представим в виде

$$F = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m \iint K_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n_i(\mathbf{r}) n_j(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' + T \sum_{i=1}^m \int n_i(\mathbf{r}) \ln \left(\frac{n_i(\mathbf{r})}{n(\mathbf{r})} \right) d\mathbf{r}; \quad (229)$$

где первое слагаемое — конфигурационная часть свободной энергии;

второе — энтропийный член;

T — абсолютная температура в энергетических единицах;

$n(\mathbf{r}) = \sum_i n_i(\mathbf{r})$ — суммарная плотность числа частиц.

Равновесное распределение компонентов определяется из требования минимума свободной энергии Гельмгольца (229) при наличии условий (227) и (228). Введём функционал Лагранжа

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\{n_i(\mathbf{r})\}, \{\Psi(\mathbf{r})\}, \mu_i) = & F - \sum_{i=1}^m \mu_i \left[\int n_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - N_i \right] - \\ & - \int \Psi(\mathbf{r}) \left(\sum_{i=1}^m \omega_i n_i(\mathbf{r}) - 1 \right) d\mathbf{r}, \end{aligned} \quad (230)$$

зависящий от функций $n_i(\mathbf{r})$, $\Psi(\mathbf{r})$ и параметров μ_i (все они появляются как неопределённые множители).

Необходимое условие экстремума свободной энергии — равенство нулю функциональных производных по $n_i(\mathbf{r})$ и $\Psi(\mathbf{r})$ и обычных частных производных по μ_i от функционала приводят к системе уравнений:

$$\begin{cases} T \ln \left(\frac{n_i(\mathbf{r})}{n(\mathbf{r})} \right) + \sum_{j=1}^m \int K_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n_j(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' - \omega_i \Psi(\mathbf{r}) - \mu_i = 0, \\ \sum_{i=1}^m \omega_i n_i(\mathbf{r}) - 1 = 0, \\ \int n_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - N_i = 0. \end{cases} \quad (231)$$

Равновесное распределение компонентов удовлетворяет этой системе *нелинейных интегральных* уравнений. Отметим, что все компоненты входят в эту систему уравнений совершенно равноправным образом.

Следует подчеркнуть, что функции $K_{ij}(\mathbf{r})$, входящие в свободную энергию Гельмгольца, не являются “настоящими” межатомными потенциалами,

поскольку введение собственных атомных объёмов ω_i запрещает сближение атомов на расстояния, меньшие

$$a_{ij} \simeq \left[(\omega_i)^{1/3} + (\omega_j)^{1/3} \right]. \quad (232)$$

Поэтому функции $K_{ij}(\mathbf{r})$ представляют собой только *дальнодействующие части* реальных межатомных потенциалов, получающиеся отсечением короткодействующих (т.е., на расстояниях меньших или порядка a_{ij}) частей потенциалов:

$$K_{ij}(\mathbf{r}) = \begin{cases} W_{ij}(\mathbf{r}), & \text{при } |\mathbf{r}| \geq a_{ij}, \\ 0, & \text{в противном случае,} \end{cases} \quad (233)$$

где $W_{ij}(\mathbf{r})$ — “настоящий” межатомный потенциал.

Таким образом, в рамках данного подхода короткодействующая (сингулярная) часть межатомных потенциалов не даёт прямого вклада в термодинамические свойства систем, а проявляется исключительно через собственные атомные объёмы компонентов.

3.2.1 Переход к теории Гинзбурга-Ландау

В системе имеется три характерных масштаба размеров: атомные размеры a_0 , радиус действия дальнодействующих частей межатомных потенциалов r_0 и расстояние, на которых заметно изменяются локальные плотности компонентов b_0 . Положим, что из трёх этих величин наибольшей является b_0 :

$$a_0 \lesssim r_0 \ll b_0. \quad (234)$$

С учётом этого обстоятельства преобразуем выражение для конфигурационной части энергии в (229)

$$F_{\text{config}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m \iint K_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n_i(\mathbf{r}) n_j(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (235)$$

Полагая, что $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \ll b_0$, найдём

$$n_j(\mathbf{r}') \approx n_j(\mathbf{r}) + \sum_{s=1}^3 \frac{\partial n_j(\mathbf{r})}{\partial x_s} (x'_s - x_s) + \frac{1}{2} \sum_{s_1, s_2=1}^3 \frac{\partial^2 n_j(\mathbf{r})}{\partial x_{s_1} \partial x_{s_2}} (x'_{s_1} - x_{s_1})(x'_{s_2} - x_{s_2}), \quad (236)$$

где x_s, x'_s — декартовы координаты векторов \mathbf{r} и \mathbf{r}' соответственно.

Подставим (236) в (235) и проинтегрируем по \mathbf{r}' ; поскольку все потенциалы $K_{ij}(\mathbf{r})$ центральны, то все нечётные моменты потенциалов равны нулю. В итоге найдём (после дополнительного интегрирования по частям):

$$F = \int d\mathbf{r} \left\{ -\frac{1}{12} \sum_{i,j} K_{ij}^{(2)} (\nabla n_i(\mathbf{r}), \nabla n_j(\mathbf{r})) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} K_{ij}^{(0)} n_i(\mathbf{r}) n_j(\mathbf{r}) + \right. \\ \left. + T \sum_{i=1}^m n_i(\mathbf{r}) \ln \left(\frac{n_i(\mathbf{r})}{n(\mathbf{r})} \right) \right\}, \quad (237)$$

где параметры $K_{ij}^{(p)}$ — некоторые интегральные характеристики межатомных потенциалов

$$K_{ij}^{(p)} = \int K_{ij}(\mathbf{r}') |\mathbf{r}'|^p d\mathbf{r}'. \quad (238)$$

Функционал (237) имеет форму, подобную функционалу Гинзбурга-Ландау, но в отличие от последнего это выражение:

1. Не ограничено членами конечных степеней по параметру порядка;
2. Все параметры в (237) имеют прозрачную физическую интерпретацию.

Из экстремума этого функционала при дополнительных условиях (227) и (228) легко получить систему уравнений для равновесного распределения компонентов:

$$\begin{cases} \frac{1}{6} \sum_{j=1}^m K_{ij}^{(2)} \Delta n_j(\mathbf{r}) + \sum_{j=1}^m K_{ij}^{(0)} n_j(\mathbf{r}) + T \ln \left(\frac{n_i(\mathbf{r})}{n(\mathbf{r})} \right) - \omega_i \Psi(\mathbf{r}) - \mu_i = 0; \\ \sum_{j=1}^m \omega_j n_j(\mathbf{r}) - 1 = 0; \\ \int n_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - N_i = 0, \end{cases} \quad (239)$$

где Δ — оператор Лапласа.

Функционал (237) в свою очередь имеет определённые преимущества перед более точным исходным функционалом (229):

- выражение (237) не содержит никаких неизвестных функций общего вида (типа межатомных потенциалов $K_{ij}(\mathbf{r})$); вместо них содержится конечное число их простых характеристик — числовых параметров $K_{ij}^{(p)}$ (238);

- анализ и решение системы уравнений (239) несравненно проще, чем проблема решения системы интегральных уравнений (231);
- обратные задачи — нахождение параметров теории из экспериментальных данных (к примеру — из диаграмм состояния) — невообразимо трудны для случая системы интегральных уравнений (231), но вполне реализуемы для функционала (237);
- наконец, решения, основанные на функционале (237), вполне могут быть использованы в качестве начального приближения при решении проблем, относящихся к функционалу (231).

3.2.2 Гетерогенные состояния в бинарном растворе

В качестве простого примера приложения развиваемой теории рассмотрим задачу о концентрационном профиле двухкомпонентного ($m = 2$) раствора с одинаковыми удельными объёмами компонентов ($\omega_1 = \omega_2 = \omega$, $n(\mathbf{r}) = \text{const} = 1/\omega$). Функционал (237) зависит от одной независимой переменной $y(\mathbf{r}) = \omega n_1(\mathbf{r}) = \frac{n_1(\mathbf{r})}{n(\mathbf{r})}$ — локальной мольной доли первого компонента — и имеет вид:

$$F = \int d\mathbf{r} \left\{ -\frac{1}{12\omega^2} K^{(2)} (\nabla y(\mathbf{r}))^2 + \frac{1}{2\omega^2} \left[K^{(0)} y^2(\mathbf{r}) - Q^{(0)} y(\mathbf{r}) + K_{22}^{(0)} \right] + \frac{T}{\omega} [y(\mathbf{r}) \ln y(\mathbf{r}) + (1 - y(\mathbf{r})) \ln(1 - y(\mathbf{r}))] \right\}, \quad (240)$$

$$\begin{aligned} \text{где } K^{(2)} &= \sum_{i,j=1}^2 (-1)^{i+j} K_{ij}^{(2)}; \\ K^{(0)} &= \sum_{i,j=1}^2 (-1)^{i+j} K_{ij}^{(0)}; \\ Q^{(0)} &= 2K_{22}^{(0)} - K_{12}^{(0)} - K_{21}^{(0)}. \end{aligned}$$

Отсюда следует необходимое условие *математической корректности* приближения (240) Гинзбурга-Ландау для бинарной системы:

$$K^{(2)} < 0, \quad (241)$$

поскольку в противном случае функционал (240) неограничен снизу.

ЗАДАЧА 62. Ясно, что при невыполнении условия (241) функционал (240) не может быть использован. Как следует обобщить функционал (240) в этом случае?

Из условия экстремума свободной энергии $\frac{\delta F}{\delta y(\mathbf{r})} = 0$ имеем:

$$\frac{1}{6}K^{(0)}\Delta y(\mathbf{r}) + f(y(\mathbf{r})) = 0, \quad (242)$$

где

$$f(y) = K^{(0)}y - \frac{Q^{(0)}}{2} + \omega T \ln \left(\frac{y}{1-y} \right). \quad (243)$$

Это уравнение описывает равновесное распределение компонентов в бинарном растворе.

3.2.3 Составы сосуществующих фаз

Необходимым условием существования гетерофазных состояний в системе является немонотонность функции $f(y)$ на промежутке $0 < y < 1$. Действительно, в глубине каждой из фаз $\Delta y(r) = 0$, поэтому функция $f(y)$ обращается в нуль для каждого из составов сосуществующих фаз, что возможно только в случае ее немонотонности.

Элементарное исследование функции $f(y)$ показывает, что при любых значениях параметров $K^{(0)}$, $Q^{(0)}$ и температуры T она имеет по меньшей мере один корень на промежутке $(0; 1)$. Поскольку при появлении новых корней помимо функции $f(y)$ обращается в нуль и ее производная $f'(y)$, то соответствующая критическая точка удовлетворяет системе уравнений относительно неизвестных температуры T и состава y :

$$\begin{cases} K^{(0)}y - \frac{Q^{(0)}}{2} + \omega T \ln \left(\frac{y}{1-y} \right) = 0; \\ K^{(0)} + \frac{\omega T}{y(1-y)} = 0. \end{cases} \quad (244)$$

После исключения температуры найден замкнутое уравнение для критического состава:

$$\frac{Q^{(0)}}{2K^{(0)}} = y - y(1-y) \ln \left(\frac{y}{1-y} \right). \quad (245)$$

Отсюда следует, что необходимым и достаточным условием существования критической точки (а следовательно и гетерофазных состояний) в данной модели является выполнение сразу *двух неравенств*:

$$\begin{cases} K^{(0)} < 0; \\ 0 < \frac{Q^{(0)}}{2K^{(0)}} < 1, \end{cases} \quad (246)$$

первое из которых известно как критерий Горского-Брэгга-Вильямса (ГБВ).

Следует особо подчеркнуть, что *одного условия ГБВ недостаточно* для существования фазового перехода. Система неравенств (246) эквивалентна следующей:

$$\begin{cases} K_{22}^{(0)} - K_{12}^{(0)} < 0; \\ K_{11}^{(0)} - K_{12}^{(0)} < 0, \end{cases} \quad (247)$$

(здесь учтено, что $K_{12}^{(0)} = K_{21}^{(0)}$).

Положим, что условия (247) существования фазового перехода в системе выполнены. Поскольку правая часть уравнения (245) монотонно возрастает на промежутке $0 < y < 1$ и ее значения также заключены между 0 и 1, то в этом случае уравнение имеет единственное решение, которое может быть получено численными методами.

В качестве иллюстрации рассмотрим простейший частный случай, для которого уравнение (245) может быть решено аналитически:

$$K_{11}^{(0)} = K_{22}^{(0)} \quad (248)$$

Тогда $y_c = 0.5$ и критическая температура T_c связана с y_c соотношением:

$$K^{(0)} = -4y_c(1 - y_c)\omega T_c. \quad (249)$$

Исключим $K^{(0)}$ и $Q^{(0)}$ в функции (243). Уравнение, связывающее составы сосуществующих фаз с температурой, приобретает форму

$$f(y) = -4\omega T_c(y - 0.5) + \omega T \ln \left(\frac{y}{1 - y} \right) = 0. \quad (250)$$

При $T < T_c$ это уравнение имеет три корня $y_1 < y_2 < y_3$, причём $y_2 = 0.5$, а $y_1 + y_3 = 1$. При $T \ll T_c$ асимптотическое выражение для y_1 , y_3 имеет вид:

$$\begin{cases} y_1 \approx \exp \left(-\frac{2T_c}{T} \right); \\ y_3 \approx 1 - \exp \left(-\frac{2T_c}{T} \right). \end{cases} \quad (251)$$

В окрестности критической точки введём безразмерную температуру $\tau = (T_c - T)/T_c$ ($|\tau| \ll 1$) и малый параметр ($\xi = 0.5 - y$) и найдём связь между τ и ξ :

$$4\xi^2 - 3\tau = 0. \quad (252)$$

Этот результат соответствует хорошо известному среднеполевому приближению.

3.2.4 Концентрационный профиль

Рассмотрим вначале концентрационный профиль для случая плоской границы раздела фаз и температуры, близкой к критической. Направим ось абсцисс по нормали к границе раздела фаз.

Перейдём от $y(x)$ к переменной $\xi(x) = 0.5 - y(x)$, $|\xi(x)| \ll 1$ и приведём уравнение (242) к виду:

$$\frac{K^{(2)}}{24\omega T_c} \xi''(x) + \xi(x) \left[-\tau + \frac{4\xi^2(x)}{3} \right] = 0. \quad (253)$$

Это уравнение после понижения порядка существенно упрощается:

$$\frac{K^{(2)}}{24\omega T_c} [\xi'(x)]^2 - \tau \xi^2(x) + \frac{2}{3} \xi^4(x) + C_1 = 0. \quad (254)$$

Константу интегрирования C_1 найдём из условия обращения в нуль величины $\xi'(x)$ в глубине фазы при равновесных значениях составов (252) $C_1 = \frac{3\tau^2}{8}$, после чего уравнение (254) становится предельно простым:

$$\frac{K^{(2)}}{16\omega T_c} [\xi'(x)]^2 + \left(\xi^2(x) - \frac{3\tau}{4} \right)^2 = 0. \quad (255)$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$\xi(x) = \frac{\sqrt{3\tau}}{2} \operatorname{th} \left[2\sqrt{\frac{3\tau\omega T_c}{-K^{(2)}}} x \right]. \quad (256)$$

(Заметим, что параметр $K^{(2)}$ отрицателен согласно (241), а константа интегрирования положена равной нулю, что связано с произволом в выборе начала координаты x).

Отсюда нетрудно найти связь характерной толщины d границы раздела фаз с характеристиками межатомных потенциалов в системе

$$d \simeq \frac{1}{2} \sqrt{\frac{-K^{(2)}}{3\tau\omega T_c}} \propto \tau^{-1/2}. \quad (257)$$

Температурная зависимость d , как и следовало ожидать, соответствует приближению эффективного поля.

3.3 Резюме

Решёточные модели весьма привлекательны своей наглядностью и простотой. Невольно возникает искушение выполнить компьютерные вычисления статистической суммы достаточно большой (но всё же конечной!) решёточной системы. Однако простая оценка показывает, что система из N спинов имеет $2^N \sim 10^{3N/10}$ возможных конфигураций. В частности, при сравнительно небольшом $N = 10^3$ (т.е. для трёхмерного куба с ребром, содержащим всего-навсего 10 спинов) число конфигураций имеет порядок 10^{300} , что на много порядков превосходит число нуклонов во всей нашей Вселенной. Поэтому для анализа решёточных моделей имеется два пути:

1. Поиск аналитического решения. К сожалению, успехи в этом направлении весьма скромны: имеется точное решение одномерной модели Изинга с внешним полем, точное решение двумерной модели Изинга в отсутствие внешнего поля, а также семейство двумерных моделей Бакстера. Несмотря на колоссальные усилия целой армии исследователей, пока не удалось существенно продвинуться ни в направлении учёта вторых, третьих и т.д. соседей, ни получить точного решения какой-либо трёхмерной модели. Ознакомиться с методами и результатами исследований решёточных моделей можно по книгам [2, 5, 18, 27], а также по серии коллективных монографий *Phase Transitions and Critical Phenomena*, издаваемых издательством Academic Press с 1972 года под редакцией С. Domb, M.S. Green (тома 1—6) и после 1976 года под редакцией С. Domb, J.L. Lebowitz (тома 7—20).
2. Использование феноменологических выражений для термодинамических функций решёточных моделей. Основной недостаток этого подхода — отсутствие строгого обоснования — в некоторой степени “компен-

сируется” результатами. Однако следует иметь в виду, что приближения (явные и неявные), используемые при выводе феноменологических выражений, иногда приводят не только к количественным погрешностям, но и к качественно неверным результатам (особенно это касается низкоразмерных систем).

Тем не менее, следует особо подчеркнуть, что именно феноменологические модели в настоящее время дают определённые возможности для количественных расчётов термодинамических свойств конденсированных систем, а также для прогнозирования свойств многокомпонентных систем.

Список литературы

- [1] *D.J. Amit*. Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena. Singapore: World Scientific, 1984. XVI+394 p.
- [2] *R.J. Baxter*. Exactly Solved Models in Statistical Mechanics. London e.a.: Academic Press, 1982. (*Р. Бэксстер*. Точно решаемые модели в статистической механике. М.: Мир, 1985. 488 с.)
- [3] *T.H. Berlin, M. Kac*. The spherical Model of a Ferromagnet // *Phys. Rev.* 1952. **86**. No.6. Pp.821–835.
- [4] *C. Domb*. Ising Model // *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 3. C. Domb, M.S. Green, Eds. London e.a.: Academic Press, 1974. Pp. 357–485.
- [5] *H. Grosse*. Models in Statistical Physics and Quantum Field Theory. Berlin e.a.: Springer, 1989. 151 p.
- [6] *R.B. Israel*. Convexity in the Theory of Lattice Gases. Princeton: Princeton University Press, 1979. LXXXV+167 p.
- [7] *C. Itzykson, J.-M. Drouffe*. Théorie statistique des champs. T. 1. Paris: Editions du CNRS, 1989. XIV+392 p.
- [8] *G.S. Joyce*. Critical Properties of the Spherical Model // *Phase transitions and Critical Phenomena*. Vol. 2. C. Domb, M.S. Green, Eds. London e.a.: Academic Press, 1972. Pp. 375–442.

- [9] *Yu.M. Ivanchenko, A.A. Lisyansky.* Physics of Critical Fluctuations. Berlin: Springer, 1995. XV+390 pp.
- [10] *L.P. Kadanoff.* Statistical Physics. Statics, Dynamics and Renormalization. Singapore e.a.: World Scientific, 2000. XIII+483 p.
- [11] *А.Г. Хачатурян.* Теория фазовых превращений и структура твёрдых растворов. М.: Наука, 1974. 384 с.
- [12] *И.В. Комаров, Л.И. Пономарёв, С.Ю. Славянов.* Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М.: Наука, 1976. 320 с.
- [13] *H.A. Kramers, G.H. Wannier.* Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnets. Parts I, II // *Phys. Rev.* 1941. **60**. No. 1. Pp.252–262, 263–276.
- [14] *М.А. Кривоглаз, А.А. Смирнов.* Теория упорядочивающихся сплавов. М.: ГИФМЛ, 1958. 388 с.
- [15] *S.-k. Ma.* Modern Theory of Critical Phenomena. London e.a.: W.A. Benjamin, 1976. (*III. Ma.* Современная теория критических явлений. М.: Мир, 1980. 229 с.)
- [16] *H.J. Maris, L.P. Kadanoff.* Teaching the Renormalization Group // *American Journal of Physics.* 1978. **46**. No.6. Pp.652–657.
- [17] *D.C. Mattis.* The Theory of Magnetism. II. Thermodynamics and Statistical Mechanics. Berlin e.a.: Springer, 1985. XII+177 p.
- [18] *B.M. McCoy, T.T. Wu.* The Two-Dimensional Ising Model. Cambridge, Massachusetts: Harvard University Press, 1973. 418 p.
- [19] *P. Morse, H. Feshbach.* Methods of Theoretical Physics. New York e.a.: McGraw-Hill, 1953. (*Ф. Морс, Г. Фешбах.* Методы теоретической физики. Т.1. М.: ИЛ. 1958. 932 с.; Т.2. М.: ИЛ, 1960. 896 с.)
- [20] *P. Pfeuty, G.Toulouse.* Introduction to the renormalization group and critical phenomena. N.Y. e.a.: Wiley, 1977. 194 p.
- [21] *В.Н. Попов.* Континуальные интегралы в квантовой теории поля и статистической физике. М.: Атомиздат, 1976. 256 с.

- [22] *T. Постон, И. Стюарт.* Теория катастроф и её приложения. М.: Мир, 1981. 608 с.
- [23] *I.R. Prigogine.* The Molecular Theory of Solutions. Amsterdam: North-Holland, 1957. 448 p. (*И.Р. Пригожин.* Молекулярная теория растворов. М.: Металлургия, 1990. 360 с.)
- [24] *B. Simon.* The Statistical Mechanics of Lattice Gases. Vol. 1. Princeton: Princeton University Press, 1993. XI+522 p.
- [25] *Н.А. Смирнова.* Молекулярные теории растворов. Л.: Химия, 1987. 336 с.
- [26] *H.E. Stanley.* Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena. Oxford: Clarendon Press. 1971. XX+308 p. (*Г. Стенли.* Фазовые переходы и критические явления. М.: Мир, 1973. 421 с.)
- [27] *B. Sutherland.* Beautiful Models. 70 Years of Exactly Solved Quantum Many-Body Problems. Singapore: World Scientific, 2004. XV+381 p.
- [28] *H.N.V. Temperley.* Two-dimensional Ising Models // Phase Transitions and Critical Phenomena, Vol. 1. C. Domb, M.S. Green, Eds. London e.a.: Academic Press, 1972. Pp. 227–269.
- [29] *C.J. Thompson.* Mathematical Statistical Mechanics. London: Macmillan Co., 1972. 278 p.
- [30] *C.J. Thompson.* One-dimensional Models — Short Range Forces // Phase Transitions and Critical Phenomena, Vol. 1. C. Domb, M.S. Green, Eds. London e.a.: Academic Press, 1972. Pp. 177–226.
- [31] *А.Н. Васильев.* Функциональные методы в квантовой теории поля и статистике. Л.: ЛГУ, 1976. 295 с.
- [32] *А.Н. Васильев.* Квантовополевая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамике. Санкт-Петербург: ПИЯФ, 1998. 810 с.
- [33] *М.М. Вайнберг, В.А. Треногин.* Теория ветвления решений нелинейных уравнений. М.: Наука, 1969. 528 с.

- [34] *K. Wilson, J. Kogut.* The Renormalization Group and ϵ -expansion // Physics Reports. 1974. **12C**. No. 2. Pp.75–199. (*К. Вильсон, Дж. Когут.* Ренормализационная группа и ϵ -разложение. М.: Мир, 1975. 256 с.)
- [35] *А.Ю. Захаров, С.В. Терехов.* Обобщённая решёточная модель фазовых равновесий в многокомпонентных системах // Математические задачи химической термодинамики. Новосибирск: Наука, 1985. С. 173–181.
- [36] *А.Ю. Захаров, С.В. Терехов.* Теория диффузии атомов в сплавах // Физика металлов и металловедение. 1985. **59**. №2. С.261–268.
- [37] *A.Yu. Zakharov, M.A. Zakharov, O.V. Loginova.* Connection between generalized lattice model of multicomponent systems and Ginzburg-Landau theory // International Journal of Quantum Chemistry. 2004. **100**. No. 4. Pp. 435-441.
- [38] *A.Yu. Zakharov, M.A. Zakharov, V.V. Lebedev.* Generalized lattice model of multicomponent equilibrium and nonequilibrium systems // International Journal of Quantum Chemistry. 2005. **104**. No. 2. Pp.126–132.
- [39] *А.Ю. Захаров, А.Л. Удовский.* Обобщённая решёточная модель и ее применение к прогнозированию термодинамических свойств многокомпонентных растворов // Физика и химия обработки материалов. 2005. № 1. С.5–14.
- [40] *J. Zinn-Justin.* Quantum Field Theory and Critical Phenomena. Oxford: Clarendon, 1996. XXII+1008 p.

Учебное издание

Захаров Анатолий Юльевич

РЕШЁТОЧНЫЕ МОДЕЛИ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Учебно-методическое пособие

Оригинал-макет печатается в авторской редакции

Изд. лиц. ЛР № 020815 от 21.09.98

Подписано в печать 11.09.2006. Бумага офсетная. Формат 60 × 84 1/16

Гарнитура Times New Roman. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 4.2. Уч. изд. л. 4.6. Тираж 150 экз. Заказ № 110Д

Издательско-полиграфический центр

Новгородского государственного университета им. Ярослава Мудрого.

173003, Великий Новгород, ул. Б. Санкт-Петербургская, 41.

Отпечатано в ИПЦ НовГУ им. Ярослава Мудрого.

173003, Великий Новгород, ул. Б. Санкт-Петербургская, 41.