

Элементы теории Ландау фазовых переходов 2 рода

Побойко Игорь

10 мая 2017

Фазовые переходы второго рода, как правило, связаны с появлением (или исчезновением) нового элемента симметрии в системе. Классическим примером фазового перехода второго рода может служить переход «парамагнетик-ферромагнетик». Высокотемпературная парамагнитная фаза обладает полной вращательной симметрией, в ней «стрелочки» локальной намагниченности направлены произвольным образом, так что макроскопически образец не обладает намагниченностью. Однако при прохождении некоторой температуры фазового перехода T_c (для ферромагнетиков это точка Кюри) системе оказывается выгодно приобрести спонтанную намагниченность. Последняя направлена в каком-то конкретном направлении, в связи с чем симметрия системы понижается (от полных вращений остаётся только вращение в плоскости перпендикулярной намагниченности) — такое явление носит название спонтанного нарушения симметрии. Как правило, высокотемпературная фаза имеет большую симметрию (она менее упорядочена), в то время как низкотемпературной фазе соответствует упорядочение понижение симметрии.

Ключевым объектом в теории фазовых переходов является так называемый *параметр порядка* — некоторая численная характеристика, описывающая возникновение порядка. Проще всего понять, что из себя представляет параметр порядка можно на конкретных примерах. В ферромагнетиках параметром порядка является намагниченность $\mathbf{m}$ (в этом смысле параметр порядка — трёхкомпонентный вектор); в Бозе-конденсации или сверхпроводимости параметром порядка являются аномальные средние $\langle \Omega | \hat{\psi} | \Omega \rangle$ и $\langle \Omega | \hat{\psi}_\uparrow \hat{\psi}_\downarrow | \Omega \rangle$ соответственно (для них параметр порядка — это комплексное число). Параметр порядка в низкотемпературной фазе отличен от нуля, но при критической температуре T_c он зануляется — происходит переход в неупорядоченную фазу.

Большое количество величин в окрестности фазовых переходов испытывают степенные сингулярности, показатели которых называются *критическими индексами*. Среди фазовых переходов второго рода имеется *универсальность* — критические индексы оказываются одинаковыми или почти одинаковыми для целых классов фазовых переходов (классификация происходит более или менее по симметрии параметра порядка). Обычно вводят следующие критические индексы:

1. Критический индекс теплоёмкости α , показывающий характер сингулярности теплоёмкости $C \propto |T - T_c|^{-\alpha}$.
2. Критический индекс параметра порядка β , показывающий по какому закону он обращается в ноль: $\varphi \propto (T_c - T)^\beta$.
3. Критический индекс восприимчивости γ , показывающий по какому закону восприимчивость параметра порядка по отношению к внешнему полю обращается в бесконечность (с обеих сторон фазового перехода!): $\chi = \frac{\partial \varphi}{\partial h} \propto |T - T_c|^{-\gamma}$.
4. Критический индекс корреляционной длины ν : $\xi \propto |T - T_c|^{-\nu}$. Корреляционная длина — важный пространственный масштаб, демонстрирующий характерные длины, на которых параметр порядка изменяется и флуктуирует.
5. Критический индекс δ , показывающий, как зависит параметр порядка от внешнего поля при строгой критической температуре (где восприимчивость обращается в бесконечность): $\varphi \propto |h|^{1/\delta}$.
6. Критический индекс η , характеризующий корреляции параметра порядка на масштабах $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \ll \xi$: $\langle \varphi(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}') \rangle \propto |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-d+2-\eta}$. На масштабах больших ξ корреляции, как правило, экспоненциально затухают.

Теория Ландау

Однородный случай В рамках теории Ландау свободная энергия представляет собой функцию параметра порядка; причём в окрестности фазового перехода, параметр порядка мал — что позволяет разложить в ряд свободную энергию в ряд Тейлора. При этом полученная свободная энергия должна уважать все симметрии, которые имеет исходный параметр порядка — например, если мы имеем дело с намагниченностью, то симметрия по отношению к инверсии $\mathbf{m} \rightarrow -\mathbf{m}$ гарантирует, что останутся только чётные степени; а симметрия по отношению к вращениям показывает, что свободная энергия может зависеть только от длины вектора $\mathbf{m}^2$. Напротив, в сверхпроводимости, где параметр порядка комплексный, свободная энергия может зависеть только от $|\psi|^2$ в силу калибровочной инвариантности.

Мы будем рассматривать модель Изинга, где параметр порядка — спонтанная намагниченность $\varphi = \langle \sigma_z \rangle$ — однокомпонентный, и обладающий единственной симметрией $\varphi \mapsto -\varphi$. Поэтому свободная энергия в общем виде раскладывается следующим образом:

$$\mathcal{F}(\phi) = \frac{1}{2}a\varphi^2 + \frac{1}{4!}b\varphi^4 + \dots \quad (1)$$

Параметры разложения a и b , в свою очередь, являются функциями всех остальных параметров системы — температуры, и т.п.; мы также предполагаем их аналитичность. Как мы увидим далее, в точке фазового перехода коэффициент $a(T_c)$ должен зануляться — поэтому мы предполагаем его линейную зависимость от температуры $a(T) = \alpha(T - T_c)$. При $a > 0$ и $b > 0$, у свободной энергии имеется единственный минимум, $\varphi = 0$; а при $a < 0$, $b > 0$ — этих минимумов два, $\varphi = \pm \sqrt{\frac{6|a|}{b}}$, что соответствует нашим представлениям о спонтанном нарушении симметрии. Из этого мы заключаем, что в окрестности T_c в теории Ландау параметр порядка ведёт себя корневым образом (соответствующий критический индекс тем самым $\beta = \frac{1}{2}$):

$$\varphi = \begin{cases} \pm \sqrt{\frac{6\alpha}{b}} \cdot (T_c - T)^{1/2}, & T < T_c \\ 0, & T > T_c \end{cases} \Rightarrow \beta = \frac{1}{2} \quad (2)$$

Свободная энергия, связанная с параметром порядка, тем самым ведёт себя следующим образом:

$$\mathcal{F}(T) = \begin{cases} -\frac{3a^2}{2b} \simeq -\frac{3\alpha^2}{2b}(T - T_c)^2, & T < T_c \\ 0, & T > T_c \end{cases} \quad (3)$$

В соответствии общей классификацией фазовых переходов второго рода, вторая производная свободной энергии по температуре испытывает скачок. Например, скачок испытывает теплоёмкость:

$$C = -T \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial T^2} \Rightarrow \Delta C = -\frac{3\alpha^2}{b} \quad (4)$$

Можно также ввести внешнее поле — член $-h\varphi$, и рассмотреть восприимчивость $\chi = \frac{\partial \langle \varphi \rangle}{\partial h}$ по отношению к этому полю; она оказывается равной $\chi = \frac{1}{\alpha(T - T_c)}$ (при $T > T_c$), и тем самым критический индекс $\gamma = 1$. В самой критической точке параметр порядка зависит от поля как $\varphi = (6h/b)^{1/3}$, поэтому критический индекс $\delta = 3$.

Флуктуации Можно также учесть тот факт, что параметр порядка, вообще говоря, может меняться в пространстве. Таким «изгибным» деформациям должна соответствовать некоторая положительная энергия — ведь, как правило, минимум соответствует однородному параметру порядка. Кроме того, параметр порядка является *макроскопической величиной* и должен меняться на больших масштабах — поэтому свободную энергию также можно разложить по градиентам $\nabla \varphi$. Это позволяет записать следующий функционал Ландау, учитывающий также и неоднородность параметра порядка:

$$\mathcal{F}[\varphi(\mathbf{r})] = \int d\mathbf{r} \left[\frac{1}{2}(a\varphi^2 + c(\nabla \varphi)^2) + \frac{1}{4!}b\varphi^4 \right] \quad (5)$$

В термодинамике все величины, вообще говоря, испытывают флуктуации вокруг своего среднего значения, даваемого минимумом свободной энергии. Из термодинамики же известно, что вероятность флуктуации пропорциональна $\exp\left(-\frac{\mathcal{F}[\varphi(\mathbf{r})]}{T}\right)$. Поэтому учёт температурных и пространственных флуктуаций приводит к появлению «квантовой» теории поля со следующей статсуммой:

$$Z = \int \mathcal{D}\varphi \exp\left(-\frac{\mathcal{F}[\varphi]}{T}\right) \quad (6)$$

Для исследования свойств полученного объекта применяется аппарат квантовой теории поля — в частности, диаграммная техника, и т.п. Например, можно вычислить корреляционную функцию параметра порядка при температуре $T > T_c$. Пренебрегая членом φ^4 , мы получаем Гауссов функциональный интеграл — и для вычисления коррелятора достаточно обратить соответствующий дифференциальный оператор. Получаем:

$$G(\mathbf{k}) = \frac{T}{a + ck^2} \Rightarrow G(\mathbf{r}) = \frac{T}{4\pi c} \cdot \frac{1}{r} \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right), \quad \xi = \sqrt{\frac{c}{a}} \propto (T - T_c)^{-1/2} \quad (7)$$

Корреляции с расстоянием затухают экспоненциально, и в системе имеется характерный масштаб — длина корреляции ξ , на котором типично меняется параметр порядка, и который расходится в точке фазового перехода. Тем самым мы находим ещё два критических индекса: $\eta = 0$ и $\nu = \frac{1}{2}$.

Применимость Теорию Ландау можно вывести из микроскопических соображений для различных «средне-полевых» теорий — теорий, в которых взаимодействие происходит между большим количеством элементов; для них она работает достаточно хорошо. Другим примером, где она выводится является теория сверхпроводимости, для которой полученная теория показала себя прекрасно и объяснила большое количество экспериментальных фактов. С другой стороны, конкретно в модели Изинга она работает хуже. Это связано с тем, что теория возмущений по нелинейному члену φ^4 устроена крайне плохо — этот член сильно меняет поведение системы. Для модели Изинга в системах размерности больше или равных 4 теория Ландау работает прекрасно, с чем связана процедура ϵ -разложения — для вычисления, например, критических индексов рассматривается система в пространстве размерности $4 - \epsilon$ ($\epsilon \ll 1$), а затем полученный асимптотический

ряд по ϵ суммируется оптимально, положив $\epsilon = 1$. Такой способ имеет умеренно хорошую точность, которая, к сожалению, ограничена. В целом, применимость теории Ландау сильно зависит от размерности пространства и характера параметра порядка (является ли он вектором, числом, комплексным числом и т.п.)