объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

P17-80-759

В.Н.Плечко

КРИТИЧЕСКИЕ АМПЛИТУДЫ И "КОСИНУС УГЛА" МЕЖДУ ПАРАМЕТРАМИ ПОРЯДКА

Направлено в "Physics Letters A"

1980

При изучении критических явлений обычно рассматривают совместное поведение нескольких параметров порядка и соответствующих восприимчивостей /см., например,[1] /. Здесь мы введем понятие "косинуса угла" между любыми двумя параметрами порядка и обсудим полезность этого понятия при описании критического поведения.

Пусть дана равновесная многочастичная система с гамильтонианом Γ, температурой $\theta = kT$, числом частиц N, которую будем обозначать Γ/θ. Пусть даны также операторные параметры порядка A и B, которые будем предполагать эрмитовыми, $A = A^+, B = B^+$.

Введем обобщенную восприимчивость:

$$\chi_{AB}(\Gamma/\theta) = \left(\frac{\partial}{\partial y} \langle A \rangle_{\Gamma - yNB/\theta}\right)_{y=0}, \qquad /1/$$

где через $\langle A \rangle_{\Gamma/\theta}$ обозначено равновесное гиббсовское среднее. Пусть $|n\rangle$ - квантовомеханическое представление, в котором Γ диагонален; Γ_n - собственные значения Γ; $\bar{A}_{mn}$, $\bar{B}_{nm}$ - матричные элементы операторов $\bar{A} = A - \langle A \rangle_{\Gamma/\theta}$, $\bar{B} = B - \langle B \rangle_{\Gamma/\theta}$. Используя экспоненциальный вид гиббсовского распределения и принимая во внимание правила дифференцирования операторной экспоненты /см., например,[2] /, получаем хорошо известное представление /см., например,[3] /:

$$\chi_{AB}(\Gamma/\theta) = \frac{N}{Q} \sum_{mn} \bar{A}_{mn} \bar{B}_{nm} \frac{e^{-\frac{\Gamma_n}{\theta}} - e^{-\frac{\Gamma_m}{\theta}}}{\Gamma_m - \Gamma_n}, \quad Q = \sum_n e^{-\frac{\Gamma_n}{\theta}}. \qquad /2/$$

Нетрудно заметить, что независимо от системы Γ/θ восприимчивость $\chi_{AB}(\Gamma/\theta)$ является билинейной формой по операторам A, B, удовлетворяющей всем аксиомам скалярного произведения:

$$\chi_{AA}(\Gamma/\theta) \geq 0 \quad (= 0 \text{ при } A = 0), \qquad /3а/$$

$$\chi_{AB}(\Gamma/\theta) = \chi_{BA}(\Gamma/\theta), \qquad /3б/$$

$$|\chi_{AB}(\Gamma/\theta)|^2 \leq \chi_{AA}(\Gamma/\theta)\chi_{BB}(\Gamma/\theta). \qquad /3в/$$

Здесь /3в/ - неравенство типа Коши-Шварца /строго говоря, оно следует из остальных свойств/. Неравенства такого типа были впервые введены в статистическую механику в 1961 г. Н.Н.Боголюбовым [4]; свойства /3/ можно рассматривать как частный случай обобщенных соотношений, обсуждавшихся в [4].

Свойства /3/ позволяют ввести "квадрат косинуса угла между параметрами порядка А и В относительно системы Γ/θ":

$$\cos^2_{AB}(\Gamma/\theta) = \frac{|\chi_{AB}(\Gamma/\theta)|^2}{\chi_{AA}(\Gamma/\theta)\,\chi_{BB}(\Gamma/\theta)}\,, \qquad /4/$$

независимо от системы Γ/θ

$$0 \le \cos^2_{AB}(\Gamma/\theta) \le 1. \qquad /4а/$$

Замечание 1. В особом случае критической системы Γ_0/θ_0 /которым мы как раз и интересуемся/ некоторые или все восприимчивости могут обращаться в ∞ /если, как обычно, они вычисляются при $N \to \infty$ /. В этом случае берем некритическую систему Γ/θ, близкую к Γ_0/θ_0, вычисляем $\cos^2_{AB}(\Gamma/\theta)$ и определяем $\cos^2_{AB}(\Gamma_0/\theta_0)$ путем предельного перехода $\Gamma/\theta \to \Gamma_0/\theta_0$. Подчеркнем, что результат при этом будет, вообще говоря, зависеть от "траектории" этого перехода $\Gamma/\theta \to \Gamma_0/\theta_0$ /по этой причине альтернативное определение: вычисляем $\cos^2_{AB}(\Gamma_0/\theta_0)$ при $N \neq \infty$ и полагаем затем $N \to \infty$, видимо, менее состоятельно/.

Чтобы проиллюстрировать полезность введения $\cos^2_{AB}$ при изучении критических явлений, рассмотрим какую-либо простую ферромагнитную систему с фиксированным гамильтонианом H, критической температурой θ_c / H/θ_c - критическая система/ и однокомпонентным параметром порядка /намагниченностью/S; можно иметь в виду, например, модель Изинга. Введем также "температурный параметр порядка" $L = -H/N$. Возьмем систему вблизи критической точки:

$$\Gamma/\theta \equiv H - hNS/\theta_c(1-\epsilon), \quad h>0,\ \epsilon>0,\ h\to 0,\ \epsilon\to 0,$$

где $h>0$ - магнитное поле; $\theta = \theta_c(1-\epsilon)$ - температура /ниже θ_c /. Для этой системы мы можем представить теплоемкость C_h /при "постоянном поле"/ с точностью до поправок, исчезающих при $h\to 0$, $\epsilon\to 0$, в виде $C_h(\Gamma/\theta) \simeq \theta^{-1}\chi_{LL}(\Gamma/\theta)$, где χ_{LL}- стандартная форма восприимчивости, см. /1/. Заметим также, что $\partial\langle S\rangle_{\Gamma/\theta}/\partial\theta = \theta^{-1}\chi_{LS}(\Gamma/\theta)$. Поэтому ниже вместо C_h и $\partial\langle S\rangle/\partial\theta$ будем рассматривать восприимчивости χ_{LL} и χ_{SL}.

Возьмем стандартный случай степенных асимптотик с возможными логарифмическими поправками для параметров порядка и восприимчивостей. Воспользовавшись краткими обозначениями $F(\epsilon) \equiv F[H/\theta_c(1-\epsilon)]$, $F(h) \equiv F[H - hNS/\theta_c]$, $F = S, L, \chi_{SL}$ и т.д. и удерживая только главные члены асимптотик, имеем

$$S(\epsilon) = B\epsilon^{\beta}|\ln\epsilon|^{p_\beta}, \qquad /5а/$$

$$\chi_{SS}(\epsilon) = \Gamma_- \epsilon^{-\gamma}|\ln\epsilon|^{p_\gamma}, \qquad \epsilon = \frac{\theta_c - \theta}{\theta_c}, \qquad /5б/$$

$$\chi_{LL}(\epsilon) = A_- \epsilon^{-\alpha}|\ln\epsilon|^{p_\alpha}, \qquad /5в/$$

$$S(h) = (h/D)^{1/\delta}|\ln h|^{p_\delta}, \quad \delta > 1, \qquad /5г/$$

$$L(h) = Z h^{\zeta}|\ln h|^{p_\zeta} + \text{const}, \qquad /5д/$$

$$\chi_{LL}(h) = E h^{-\epsilon}|\ln h|^{p_\epsilon}, \qquad /5е/$$

при этом

$$\chi_{SS}(h) = (h^{1/\delta - 1}/\delta D^{1/\delta})|\ln h|^{p_\delta}, \qquad /5ж/$$

$$\chi_{SL}(\epsilon) = \beta B \epsilon^{\beta - 1}|\ln\epsilon|^{p_\beta}, \qquad /5з/$$

$$\chi_{SL}(h) = \zeta Z h^{\zeta - 1}|\ln h|^{p_\zeta}, \qquad /5и/$$

где α, β, γ, δ, ζ, ϵ - критические индексы; p_α, p_β, p_γ, p_δ, p_ζ, p_ϵ - логарифмические индексы; A_-, B, Γ_-, D, Z, E - критические амплитуды.

Построим для случая асимптотик /5/ $\cos^2_{SL}(\epsilon) = \cos^2_{SL}[H/\theta_c(1-\epsilon)]$ и перейдем к пределу $\epsilon \to +0$. Используя /4а/, получим ограничения на критические параметры. Если $\cos^2_{SL}(\epsilon = +0) > 0$, то с необходимостью

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \qquad /6а/$$

$$p_\alpha + p_\gamma = 2p_\beta, \qquad /6б/$$

$$0 < \beta^2 B^2/A_-\Gamma_- = \cos^2_{SL}(\epsilon = +0) \le 1. \qquad /6в/$$

Если же $\cos^2_{SL}(\epsilon = +0) = 0$, то

$$\alpha + 2\beta + \gamma \ge 2, \qquad /7/$$

в частности, если $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$, то

$$p_\alpha + p_\gamma > 2p_\beta. \qquad /8/$$

Совершенно аналогично, рассматривая $\cos^2_{SL}(h)$ при $h \to 0$, находим, что если $\cos^2_{SL}(h=0) > 0$, то

$$2\zeta + \epsilon - 1/\delta = 1, \qquad /9а/$$

$$p_\delta + p_\epsilon = 2p_\zeta \ , \qquad /9б/$$

$$0 < \delta\zeta^2 Z^2 D^{1/\delta}/E = \cos^2_{SL}\ (h=0) \le 1 . \qquad /9в/$$

Если же $\cos^2_{SL}(h=0) = 0$, то

$$2\zeta + \epsilon - 1/\delta \ge 1, \qquad /10/$$

причем если $2\zeta + \epsilon - 1/\delta = 1$, то

$$p_\delta + p_\epsilon > 2p_\zeta \ . \qquad /11/$$

Перечисленными возможностями исчерпываются все допустимые варианты соотношений между критическими параметрами, вытекающие из /4а/.

Известное равенство /6а/ было впервые предложено Эссамом и Фишером[5]. Обобщенные неравенства /7/ и /10/ были получены соответственно Рашбруком[6] и Куперсмитом[7] на основе известного термодинамического соотношения между теплоемкостями C_h и C_m /обсуждение /6а/ см. также в[8] /; в наших обозначениях $C_m(\Gamma/\theta) = C_h(\Gamma/\theta)(1-\cos^2_{SL_\Gamma}(\Gamma/\theta))$, $L_\Gamma \equiv \Gamma/N$.

Таким образом, мы имеем здесь новое доказательство неравенств Рашбрука и Куперсмита, а также доказательство ряда новых соотношений для логарифмических индексов и амплитуд, не связанное с термодинамикой и основанное непосредственно на "первых принципах", т.е. на свойствах канонического гиббсовского распределения, которые отражены в неравенстве /4а/.

Это новое доказательство существенно более общее, чем прежние. Соотношения /6/-/8/ остаются справедливыми и в случае, когда вместо изменения температуры рассматривается произвольная вариация гамильтониана $H \to H + V(\epsilon)$, $V(\epsilon) \to 0$ при $\epsilon \to +0$, а под S и L подразумеваются два произвольных параметра порядка /с асимптотиками /5/ для $\chi_{SS}(\epsilon)$, $\chi_{LL}(\epsilon)$, $\chi_{SL}(\epsilon)$ /, для которых может и не быть соотношения, аналогичного связи C_h и C_m .

Пусть ϵ и h опять будут температурным и "полевым"параметрами. Было предложено[9,10] использовать при обработке экспериментальных данных безразмерные комбинации амплитуд A_+/A_- , Γ_+/Γ_- , $R = A_+\Gamma_+/B^2$ /здесь A_+ и Γ_+ являются аналогами A_- и Γ_- для области $\theta > \theta_c$ /. Высказывалось, в частности, предположение, что эти безразмерные комбинации могут обладать свойством универсальности /как критические индексы/, т.е. зависеть только от пространственной размерности и симметрии системы[9,10] /подробное обсуждение см. в[10] /.

Таблица

Величины R^* и $\cos^2_{SL}$ $(\epsilon = +0)$ для модели Изинга при различных размерностях решетки

Модель	/6а/	/6б/	R^*	$\cos^2_{SL}(\epsilon = +0)$
молекулярное поле, $d=\infty$	да	x	1	1
Изинг, $d=4$	да	да	0,75	0,75
Изинг, $d=3$	да	x	0,53	0,53
Изинг, $d=2$	да	нет	1,85	0

Соотношения /6/-/8/ показывают, что в случае однокомпонентных параметров порядка вместо R более естественной величиной является

$$R^* = \frac{\beta^2 B^2}{A_- \Gamma_-} = \frac{A_+}{A_-} \frac{\Gamma_+}{\Gamma_-} \frac{\beta^2}{R}. \qquad /12/$$

При выполнении /6а/, /6б/ с необходимостью имеем $0 < R^* = \cos^2_{SL}(\epsilon = +0) \leq 1$ и наоборот. Аналогом R^* для случая "полевой" вариации является $R^{**} = \delta\zeta^2 Z^2 D^{1/\delta}/E$; одновременное выполнение /9а/, /9б/ эквивалентно $0 < R^{**} = \cos^2_{SL}(h=0) \leq 1$.

Замечание 2. Для изотропных ферромагнетиков ($n \geq 2$) $\Gamma_- = +\infty$ и формально $R^* = 0$ /если $A_- \neq 0$ /.

В таблице приведены значения R^* и $\cos^2_{SL}(\epsilon = +0)$ для изинговских решеток различной размерности d /необходимые данные и ссылки на оригинальные работы см., например, в /10/; относительно 4-мерной модели Изинга см. также /11/ /. В таблице "да" "нет" обозначают, выполняются или нет /6а/, /6б/; × означает отсутствие логарифмических поправок, $p_\alpha = p_\beta = p_\gamma = 0$. Отметим, что при $d=4$ в модели Изинга $p_\alpha = p_\beta = p_\gamma = 1/3$ и /6б/ справедливо.

Было бы весьма желательно построить аналогичную таблицу для R^{**} и сравнить значения $\cos^2_{SL}(h=0)$ для различных систем, а также со значениями $\cos^2_{SL}(\epsilon = +0)$ для тех же самых систем. К сожалению, из-за отсутствия необходимых данных для "полевых" вариаций мы в настоящее время лишены такой возможности.

Как видно из таблицы, $\cos^2_{SL}(\epsilon = +0)$ монотонно убывает с понижением размерности системы, т.е. "угол" между параметром порядка и гамильтонианом возрастает. Этому можно дать и физическую интерпретацию.

Заключительные замечания. А. Естественными безразмерными комбинациями амплитуд для случая однокомпонентного параметра порядка являются R^* и R^{**}, фигурирующие в /6в/, /9в/. Можно рекомендовать включать R^*, R^{**} и/или $\cos^2_{SL}$ $(\epsilon=+0)$, $\cos^2_{SL}$ $(h=0)$ в таблицы критических амплитуд.

Б. При наличии логарифмических поправок следует проверять справедливость соотношений /6б/, /8/, /9б/, /11/.

В. Представляется весьма желательным иметь полный набор данных для критических "полевых" характеристик/включая значения критических параметров для $L(h)$ / или $\chi_{SL}(h)$/ и $C(h)\equiv\theta^{-1}\chi_{LL}(h)$, см. /5//, хотя бы для простейших моделей.

Г. В целом можно отметить, что критические амплитуды и индексы логарифмических поправок представляют не меньший интерес, чем основные критические индексы, поскольку они являются более "тонкими" характеристиками, чем основные индексы.

Автор благодарит проф. Н.Н.Боголюбова /мл./ за ценные замечания и интерес к работе и участников семинара проф. В.К.Федянина за обсуждение.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kadanoff L.P. In: Phase Transitions and Critical Phenomena (Ed. Domb and Green), 1976, vol.5a, p.1.
2. Wilcox R.M. J.Math.Phys., 1967, v.8, p.962.
3. Bogolubov N.N., Jr. Physica, 1966, v.32, p.933.
4. Боголюбов Н.Н. ОИЯИ, Д-781, Дубна, 1961; Bogolubov N.N. Lectures on Quantum Statistics, vol.2, Quasi-Averages, Gordon and Breach, N.Y., 1971.
5. Essam J.W., Fisher M.E. Journ.Chem.Phys., 1963, v.38, p.802.
6. Rushbrooke G.S. Journ.Chem.Phys., 1963, v.39, p.842.
7. Coopersmith M.S. Phys.Rev., 1968, v.167, p.478.
8. Rushbrooke G.S. J.Chem.Phys., 1965, v.43, p.3439.
9. Bauer H.C., Brown G.R. Phys.Lett. A., 1975, v.51, p.68.
10. Aharony A., Hohenberg P.C. Phys.Rev.B., 1976, v.13, p.3081.
11. Brezin E. J.Phys.-Lett (Paris), 1975, v.36, p.L-51.

Рукопись поступила в издательский отдел
25 ноября 1980 года.