объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

P17-81-400

В.Н.Плечко

СКЕЙЛИНГОВЫЕ ЗАКОНЫ, ЛОГАРИФМИЧЕСКИЕ ПОПРАВКИ И ВНУТРЕННЕЕ ПОЛЕ

Направлено в "Physics Letters A"

1981

Здесь мы покажем, что исходя из представления о внутреннем "молекулярном" поле, возникающем в упорядоченной фазе при фазовых переходах второго рода, можно построить простую феноменологическую схему, приводящую к стандартным скейлинговым равенствам для индексов степенных асимптотик и к их аналогам для индексов логарифмических поправок, которые подтверждаются в конкретных системах.

Подчеркнем, что под "внутренним молекулярным полем" мы будем понимать не известные результаты "приближения молекулярного поля", а сам физический эффект возникновения такого поля в реальных системах с короткодействием и флуктуациями.

Данную работу можно рассматривать как продолжение [1].

Произвольную систему с гамильтонианом Γ, температурой $\theta = kT$, числом частиц N будем обозначать Γ/θ, величины F, зависящие от Γ/θ, обозначим $F(\Gamma/\theta)$, $F[\Gamma/\theta]$. Пусть $A, B, \ldots$ - параметры порядка /аддитивные самосопряженные операторы, нормированные "на одну частицу"/. Средние $\langle A\rangle_{\Gamma/\theta}$ будем обозначать $A(\Gamma/\theta)$. Введем форму обобщенной восприимчивости $\chi_{AB}(\Gamma/\theta) = (\partial A[\Gamma - xNB/\theta]/\partial x)_{x=0}$, которая обладает свойствами скалярного произведения на множестве $A, B, \ldots$, что позволяет ввести "косинус угла" между A и B [1]:

$$0 \leq \cos^2_{AB}(\Gamma/\theta) \equiv \frac{|\chi_{AB}(\Gamma/\theta)|^2}{\chi_{AA}(\Gamma/\theta)\chi_{BB}(\Gamma/\theta)} \leq 1. \qquad /1/$$

Рассмотрим теперь /условную/ ферромагнитную систему с фиксированным гамильтонианом H, критической температурой θ_c, числом частиц N, однокомпонентным параметром порядка /намагниченностью/ S. При включении внешнего магнитного поля $h > 0$ гамильтониан системы будет $H - hNS$. Вторым "полем" является температура, которой сопряжен гамильтониан. Удобно ввести правильно нормированный температурный параметр порядка $L = -N^{-1}(H - \langle H\rangle_{H/\theta_c})$. В экспериментальных и теоретических исследованиях критического поведения представляют интерес параметры порядка и восприимчивости: S /намагниченность/, L /сингулярная часть энергии/, χ_{SS} /магнитная восприимчивость/, χ_{LL} /теплоемкость/, $\chi_{SL} \equiv \chi_{LS}$ /производная $\partial\langle S\rangle/\partial\theta$ или $\partial\langle L\rangle/\partial h$/, взятые при $h = 0$, $\theta \neq \theta_c$ и $h > 0$, $\theta \equiv \theta_c$.

Рассмотрим систему в упорядоченной фазе $\theta=\theta_c(1-\epsilon)<\theta_c$, $h\equiv 0$ и систему $\theta\equiv\theta_c$, $h>0$. Вводя краткие обозначения $F(\epsilon)=F[H/\theta_c(1-\epsilon)]$, $F(h)\equiv F[H-hNS/\theta_c]$, $F=S,L,\chi_{SL},\ldots$ и предполагая стандартные степенные асимптотики с возможными логарифмическими поправками, запишем, удерживая только главные члены:

$$S(\epsilon)=B\epsilon^{\beta}\,|\ln\epsilon|^{p_\beta}, \qquad /2а/$$

$$\chi_{SS}(\epsilon)=\Gamma_-\epsilon^{-\gamma}\,|\ln\epsilon|^{p_\gamma}, \qquad /2б/$$

$$L(\epsilon)=(1-\alpha)^{-1}A_-\epsilon^{1-\alpha}\,|\ln\epsilon|^{p_\alpha}, \qquad /2в/$$

$$\chi_{LL}(\epsilon)=A_-\epsilon^{-\alpha}\,|\ln\epsilon|^{p_\alpha}, \qquad /2г/$$

$$\chi_{SL}(\epsilon)=\beta B\epsilon^{\beta-1}\,|\ln\epsilon|^{p_\beta}, \qquad /2д/$$

$$S(h)=(h/D)^{1/\delta}\,|\ln h|^{p_\delta}, \qquad /2е/$$

$$L(h)=Zh^{\zeta}\,|\ln h|^{p_\zeta}, \qquad /2ж/$$

$$\chi_{SS}(h)=(h^{1/\delta-1}/\delta D^{1/\delta})\,|\ln h|^{p_\delta}, \qquad /2з/$$

$$\chi_{SL}(h)=\zeta Z h^{\zeta-1}\,|\ln h|^{p_\zeta}, \qquad /2и/$$

$$\chi_{LL}(h)=Eh^{-\varepsilon}\,|\ln h|^{p_\varepsilon}, \qquad /2к/$$

где $\alpha,\ldots,\varepsilon$ – критические индексы, $p_\alpha,\ldots,p_\varepsilon$ – индексы логарифмических поправок, $A_-,\ldots,E$ – критические амплитуды. В системе в неупорядоченной фазе $\theta=\theta_c(1+\epsilon)>0$, $h\equiv 0$, для $\chi_{SS}(\epsilon)$, $\chi_{LL}(\epsilon)$, $L(\epsilon)$ сохраняются асимптотики типа /2/; будем снабжать параметры этих асимптотик индексом +, в реальных системах, как правило $\alpha_+=\alpha$, $p_{\alpha+}=p_\alpha$, $\gamma_+=\gamma$, $p_{\gamma+}=p_\gamma$, но, вообще говоря, $A_+\neq A_-$, $\Gamma_+\neq\Gamma_-$.

Обсудим вначале критическое поведение теплоемкости. Воспользуемся известным термодинамическим соотношением между теплоемкостями при постоянном поле C_h и постоянной намагниченности C_m /аналог соотношения для C_p и C_v /, которое в наших обозначениях можно записать с асимптотической точностью в виде /см. также [1] /:

$$\chi_{LL}(\epsilon)=(\chi_{LL}(\epsilon))_m+\chi_{LL}(\epsilon)\cos^2_{SL}(\epsilon), \qquad /3/$$

где $\chi_{LL}=\theta C_h$, $(\chi_{LL})_m=\theta C_m$. Вклад в теплоемкость $\chi_{LL}\cos^2_{SL}$ обусловлен существованием спонтанной намагниченности в системе. В неупорядоченной фазе, $\theta=\theta_c(1+\epsilon)$, $h\equiv 0$, будет $\langle s\rangle\equiv 0$, $\cos^2_{SL}\equiv 0$, и теплоемкости C_h и C_m совпадают.

Будем интерпретировать $\chi_{LL}(\epsilon)\cos^2_{SL}(\epsilon)$ как вклад "внутреннего молекулярного поля", связанного со спонтанной упорядоченностью.

Вклад внутреннего поля в общую теплоемкость характеризуется параметром $\cos^2_{SL}(\epsilon=+0)$. Как отмечалось в [1], условие $\cos^2_{SL}\leq 1$ /1/ накладывает определенные ограничения на параметры асимптотик /2/, представленные в табл.1. Как видим, при отсутствии логарифмических поправок скейлинговое равенство $\alpha+2\beta+\gamma=2$ эквивалентно $\cos^2_{SL}(\epsilon=+0)>0$ /конечный вклад внутреннего поля в C /. Значения $\cos^2_{SL}(\epsilon=+0)$ в конкретных системах приведены в табл.2. Видно, что с понижением размерности системы вклад внутреннего поля падает. В случае систем "жидкость-газ" CO_2, Xe внутреннее поле можно, видимо, интерпретировать в смысле Ван-дер-Ваальса.

Таблица 1

Допустимые взаимосвязи между температурными критическими характеристиками и $\cos^2_{SL}(\epsilon=+0)$

$\alpha+2\beta+\gamma=2$		$\alpha+2\beta+\gamma>2$
$p_\alpha+p_\gamma=2p_\beta$	$p_\alpha+p_\gamma>2p_\beta$	
$\beta^2B^2/A_-\Gamma_-\equiv\cos^2_{SL}(\epsilon=+0)\leq 1$		
$\cos^2_{SL}(\epsilon=+0)>0$	$\cos^2_{SL}(\epsilon=+0)=0$	

В рамках такого представления о роли внутреннего поля мы можем попытаться проверить гипотезу о том, что за вычетом "полевой части" теплоемкость симметрична при $\theta>\theta_c$ и $\theta<\theta_c$, т.е. $C_m(H/\theta_c(1-\epsilon))=C(H/\theta_c(1+\epsilon))$. Тогда должно быть: для индексов $\alpha=\alpha_+$, $p_\alpha=p_{\alpha+}$ /эти равенства справедливы в конкретных случаях/ и для амплитуд:

$$\frac{A_+}{A_-}=1-\cos^2_{SL}(\epsilon=+0). \qquad /4/$$

Как видим из данных табл.2, это равенство и в самом деле выполняется с хорошей точностью в конкретных системах /данные для табл.2 см., например, в работе [2]; для CO_2 и Xe здесь приведены значения, усредненные по трем способам обработки эксперимента в табл.4 работы [2] /.

Таблица 2

Данные для теплоемкости в различных системах

Система	$\cos^2_{SL}$ $(\epsilon=+0)$	$1-\cos^2_{SL}$ $(\epsilon=+0)$	$\frac{A_+}{A_-}$
Приближение молекулярного поля	1	0	0
Модель Изинга			
d = 4	3/4	1/4	1/4
d = 3	0,53	0,47	0,51
d = 2	0	1	1
CO_2	0,60	0,40	0,47
Xe	0,44	0,56	0,54

Выдвинем теперь феноменологическую гипотезу о том, что внутреннее молекулярное поле в упорядоченной фазе дает конечный вклад не только в теплоемкость, но и в остальные восприимчивости и параметры порядка и этот вклад может быть описан следующим образом: каждую величину $X = S, L, \chi_{SS}, \ldots$ можно представить в виде суммы двух слагаемых $X_T + X_F$, где X_F соответствует вкладу молекулярного поля, а X_T - "чисто температурному" вкладу /вкладу остальных степеней свободы/. Предположим, что оба слагаемых одного порядка, $X_F(\epsilon) \sim X_T(\epsilon) \sim X(\epsilon)$. Предположим, далее, что полевая часть $X_F(\epsilon)$ описывается эффективным полем, зависящим от температуры:

$$h(\epsilon) = \Phi \epsilon^{\phi} |\ln\epsilon|^{p_\phi}, \qquad /5/$$

и это поле оказывает такое же действие, что и включение внешнего поля такой же величины, так что $X_F(\epsilon)$ имеет ту же асимптотику, что и $X(h) \equiv X[H - hNS/\theta_c]$ при $h = h(\epsilon)$, $X_F(\epsilon) \sim X(h = h(\epsilon))$.

Исходя из гипотез $X(\epsilon) = \sim X_F(\epsilon) \sim X(h(\epsilon))$, легко получить соотношения между асимптотиками в /2/. Рассматривая последовательно $X = S$, χ_{SS}, L, χ_{LL}, χ_{SL}, получаем соответственно для основных индексов: $\beta\delta = \phi$, $\gamma\delta = (\delta-1)\phi$, $1-\alpha = \zeta\phi$, $\alpha = \varepsilon\phi$, $\beta - 1 = (\zeta-1)\phi$, и для логарифмических индексов: $p_\phi = \delta(p_\beta - p_\delta)$, $(\delta-1)p_\phi = \delta(p_\delta - p_\gamma)$, $p_\alpha = p_\zeta + p_\phi\zeta$, $p_\alpha = p_\varepsilon - \varepsilon p_\phi$, $p_\beta = (\zeta-1)p_\phi + p_\zeta$. Параметры внутреннего поля ϕ, p_ϕ исключаются, и в результате имеем для основных индексов:

$$\gamma = \beta(\delta - 1), \qquad /6а/$$

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

$$1 - \alpha = \beta\delta\zeta, \qquad /6в/$$

$$\alpha = \beta\delta\varepsilon, \qquad /6г/$$

для логарифмических индексов:

$$\delta p_\delta = p_\gamma + (\delta-1)p_\beta, \qquad /7а/$$

$$p_\alpha + p_\gamma = 2p_\beta, \qquad /7б/$$

$$p_\zeta = p_\alpha + \zeta(p_\gamma - p_\beta), \qquad /7в/$$

$$p_\varepsilon = p_\alpha + \varepsilon(p_\beta - p_\gamma). \qquad /7г/$$

Если предположить, что $X_T(\epsilon)$ /при $\theta < \theta_c$/ $\sim X_+(\epsilon) \equiv X[H/\theta_c(1+\epsilon)]$ /при $\theta > \theta_c$/, то получаем также $\alpha = \alpha_+$, $\gamma = \gamma_+$, $p_\alpha = p_{\alpha+}$, $p_\gamma = p_{\gamma+}$.

Заметим, что при выводе /6/, /7/ мы фактически использовали не "аддитивность" $X = X_T + X_F$, а только $X_F \sim X$. В случае χ_{LL} и L аддитивность, видимо, действительно имеет место, однако в случае χ_{SS}, например, это неясно /здесь скорее можно ожидать аддитивности для χ_{SS}^{-1} /.

Соотношения /6/ представляют собой обычные скейлинговые равенства. Новый тип равенств представляют соотношения для индексов логарифмических поправок /7/. Такие равенства были получены недавно в [3] при попытке применить некоторые строгие результаты [4], касающиеся вспомогательных /искусственных/ систем, к анализу реальных систем /в [3] обсуждались также соотношения для критических амплитуд, которые мы здесь не затрагиваем/. Вывод исходных строгих соотношений в [3,4] достаточно сложен, в то же время при переходе к реальным системам все равно приходится делать нестрогие физические предположения. Здесь же мы имеем очень простой и чисто феноменологический вывод соотношений /6/, /7/, имеющий наглядный физический смысл.

Видимо, можно построить феноменологическое уравнение состояния скейлингового типа с учетом логарифмических поправок.

Логарифмические поправки есть в 4-мерных моделях ферромагнетиков, где для случая n-компонентного параметра порядка было вычислено /см., напр., [5] /: $\alpha = 0$, $\beta = 1/2$, $\gamma = 1$, $\delta = 3$, $p_\alpha = (4-n)/(n+8)$, $p_\beta = 3/(n+8)$, $p_\gamma = (n+2)/(n+8)$, $p_\delta = 1/3$, где для $n \geq 2$ γ, p_γ взяты из области $\theta > \theta_c$, поскольку здесь из-за симметрии системы $\chi_{SS} = +\infty$ при всех $\theta < \theta_c$, $h = 0$

/ α , p_α одинаковы при $\theta>\theta_c$ и $\theta<\theta_c$ /. В неизотропном случае $n=1$ /модель Изинга/ восприимчивость конечна при $\theta<\theta_c$ и по обе стороны критической точки $\gamma=1$, $p_\gamma=1/3$. Свойство $\chi_{SS}=+\infty$ в изотропных системах, видимо, означает, что внутреннее поле как нелокальное свойство не возникает. Однако мы можем проверить соотношения /7/ и в этом случае, взяв γ, p_γ из области $\theta>\theta_c$. И действительно, соотношения /7а/, /7б/ удовлетворяются, а /7в/, /7г/ приводят к предсказаниям:
$p_\zeta=(10-n)/3(n+8)$, $p_\varepsilon=p_\alpha=(4-n)/(n+8)$ /при $\varepsilon=0$, $\zeta=2/3$ из /6//; при $n=1$ имеем $p_\zeta=p_\varepsilon=1/3$.

Заметим, что равенство /7б/ нарушается в 2-мерной модели Изинга, где $p_\alpha=1$, $p_\beta=p_\gamma=0$. Это неудивительно, если учесть, что, полагая $X_F\sim X$ в случае $X=L$, χ_{LL}, χ_{SL}, мы фактически считаем $\cos^2_{SL}(\epsilon=+0)>0$, а здесь $\cos^2_{SL}(\epsilon)\sim|\ln\epsilon|^{-1}\to 0$.
Чтобы включить в рассмотрение и случай $\cos^2_{SL}(\epsilon=+0)=0$, следует исходить для $X=L$, χ_{LL}, χ_{SL} непосредственно из $X_F(\epsilon)\sim$
$\sim X(h(\epsilon))$. Нетрудно видеть, что $(\chi_{LL})_F=\chi_{LL}\cos^2_{SL}$, $L_F\sim L\cos^2_{SL}$
имеют асимптотики типа /2/, где вместо α, p_α взято $\alpha^*=2-\gamma-2\beta$, $p^*_\alpha=2p_\beta-p_\gamma$. В результате в общем случае $\cos^2_{SL}(\epsilon=+0)\geq 0$ вместо /6б/, /7б/ мы имеем возможности <u>табл.1</u>, а в соотношениях /в/, /г/ в /6/, /7/ индексы α, p_α следует заменить на α^*, p^*_α /равенства /а/ сохраняются/. Заметим еще, что поскольку в 2-мерной модели Изинга $\alpha^*=0$, $p^*_\alpha=p_\beta=p_\gamma=0$, то из модифицированных соотношений /6г/, /7г/ следует $\varepsilon=p_\varepsilon=0$, т.е. получается, что теплоемкость в системе $\theta\equiv\theta_c$, $h>0$ несингулярна при $h\to 0$, хотя $\chi_{LL}(\epsilon)\sim|\ln\epsilon|\to+\infty$. Это предсказание вытекает из предположения, что в системе $\theta\equiv\theta_c$, $h>0$ "возбуждается" только энергия L_F и $\chi_{LL}(h)\sim(\chi_{LL}(h))_F$, теплоемкость же внутреннего поля $(\chi_{LL})_F=\chi_{LL}\cos^2_{SL}$ здесь несингулярна.

В заключение мы хотели бы обратить внимание экспериментаторов и специалистов по теоретическим моделям на то, что большой интерес представляет изучение систем в ненулевом поле при критическом значении температуры $\theta\equiv\theta_c$, $h>0$ /или $\theta\equiv\theta_c$, $p\neq p_c$ в системах "жидкость-газ"/. Между тем, насколько нам известно, здесь фактически полностью отсутствуют результаты для $\chi_{LL}(h)$ и $L(h)$ /для параметров соответствующих асимптотик в /2/ нет даже общепринятых обозначений, мы исходим из последовательности букв в греческом алфавите/. Ввиду обсуждения, проведенного выше, можно поставить, например, конкретные вопросы об анализе 4-мерных ферромагнитных моделей при $\theta\equiv\theta_c$, $h>0$ и о поведении теплоемкости в 2-мерной модели Изинга при $\theta\equiv\theta_c$, $h>0$, $h\to 0$. Представляет также большой интерес вычисление "полевых" критических амплитуд и проверка гипотезы $\cos^2_{SL}(h=0)=1$

в системе $H-hNS/\theta_c$, $h\to 0$, или отклонений от нее /см. также[1] /. Заметим, что ввиду термодинамической связи между C_p и C_v информацию о поведении сингулярной части энергии в системах "жидкость-газ" при $\theta\equiv\theta_c$, $p\neq p_c$ можно было бы получить из экспериментальных данных для C_p и C_v.

Автор благодарит проф. Н.Н.Боголюбова /мл./ за интерес к работе и поддержку.

ЛИТЕРАТУРА

1. Plechko V.N. Phys.Lett.A., 1981 (to appear); ОИЯИ, Р17-80-759, Дубна, 1980.
2. Aharony A., Hohenberg P.C. Phys.Rev.B., 1976, v.13, p.3081.
3. Plechko V.N. JINR, E17-13050, E17-80-756, Dubna, 1980.
4. Плечко В.Н. ТМФ, 1981, т.47, №1, с.106.
5. Brezin E., Le Guillou J.C., Zinn-Justin J. In: Phase Transitions and Critical Phenomena. Ed. by C.Domb and M.S.Green. AIP, 1976, v.6, p.125.

Рукопись поступила в издательский отдел
11 июня 1981 года.