



объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

P17-84-478

Н.М.Плакида, Н.С.Тончев

ТОЧНО РЕШАЕМАЯ d -МЕРНАЯ МОДЕЛЬ
СТРУКТУРНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

Направлено в "ТМФ"

1984

1. МОДЕЛЬНАЯ СИСТЕМА

Рассмотрим модель кристалла, испытывающего структурный фазовый переход ферродисторсионного типа, гамильтониан которой представим в виде /1/:

$$H^d = \frac{1}{2} \sum_{\ell} \left(\frac{P_{\ell}^2}{m} - \Delta Q_{\ell}^2 \right) + \frac{1}{4} \sum_{\ell\ell'} \phi_{\ell\ell'} (Q_{\ell} - Q_{\ell'})^2 + \frac{B}{4N} (\sum Q_{\ell}^2)^2. \quad /1/$$

Величины Q_{ℓ} и P_{ℓ} - операторы смещения и импульса частицы массы m , находящейся в ℓ -м узле d -мерной решетки. Параметр $\Delta > 0$ определяет частоту неустойчивой в гармоническом приближении моды, а параметр $B > 0$ "включает" ангармоническое взаимодействие, обратное пропорциональное числу частиц N . Гармоническая силовая постоянная $\phi_{\ell\ell'}$ отлична от нуля только для ближайших соседей на решетке.

В теории структурных фазовых переходов внимание к моделям такого типа /1-3/ вызвано скорее их простотой, чем прямым отношением к какой-либо конкретной физической системе.

В 1975 году Шнейдером, Столом и Беком /1/ было высказано утверждение о том, что модель /1/ является точно решаемой в термодинамическом пределе, при $d = 3$. В /2/ рассматривался более общий гамильтониан, чем /1/, в котором были включены ангармонические члены более высокой степени, позволяющие изучать и трикритическое поведение. Влияние изолированной примеси на фазовый переход изучалось в /3/.

Несмотря на простоту модели /1/, ее термодинамика далеко нетривиальна. Она отражает большинство основных черт, свойственных теории фазовых переходов: зависимость критического поведения от размерности пространства, наличие области по температуре T с развитым статистическими и квантовыми флуктуациями и т.д.

В /1/ было показано, что модель /1/ по своим критическим свойствам в классическом пределе принадлежит классу универсальности модели Берлина-Каца /4/. Однако метод, используемый в /1/, применим только в классическом пределе, а доказательство точной решаемости модели приведено только в области парафазы, вне точки фазового перехода.

В настоящей работе, на основе идеи метода аппроксимирующего гамильтониана /5/, приведено строгое и полное доказательство утверждения, высказанное в /1/ о том, что модель /1/ является точно решаемой при $N \rightarrow \infty$, и исследовано ее термодинамическое поведение в классическом пределе.

2. АППРОКСИМИРУЮЩИЙ ГАМИЛЬТониАН

Запишем гамильтониан /1/ в представлении нормальных координат

$$Q_{\vec{q}} = \sqrt{\frac{m}{N}} \sum_{\ell} Q_{\ell} \exp(-i\vec{q}\vec{\ell}), \quad P_{\vec{q}} = \frac{1}{\sqrt{mN}} \sum_{\ell} P_{\ell} \exp(-i\vec{q}\vec{\ell})$$

в виде

$$H^d = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} (P_{\vec{q}} P_{-\vec{q}} + \omega_{\vec{q}}^2 Q_{\vec{q}} Q_{-\vec{q}}) + \frac{b}{4N} (\sum_{\vec{q}} Q_{\vec{q}} Q_{-\vec{q}})^2 \quad /2/$$

где частота гармонических фононов

$$\omega_{\vec{q}}^2 = -\frac{\Delta}{m} + \frac{1}{m} [\phi(0) - \phi(\vec{q})] = -\nu^2 + c\vec{q}^2 \quad /3/$$

и константа ангармонизма $b = \frac{B}{m^2} = \frac{B\nu_0^4}{\Lambda^2} = \frac{\nu_0^4}{4E_0}$. При конечном числе

частиц N в объеме V , $N = V/a^d \equiv L^d$ имеем для векторов $\vec{q} = \{q^{\alpha}, \alpha = 1, \dots, d\}$ в /2/:

$$q^{\alpha} = \frac{2\pi}{aL} n^{\alpha} \equiv \frac{a^*}{L} n^{\alpha}, \quad n^{\alpha} = 0, \pm 1, \dots, \pm \frac{L}{2},$$

так что суммирование по \vec{q} означает

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} f(\vec{q}) = \frac{1}{L^d} \sum_{n^{\alpha}=0, \pm 1, \dots} f\left(\frac{a^* n^{\alpha}}{L}\right). \quad /4/$$

В качестве аппроксимирующего предложим ** следующий псевдогармонический гамильтониан:

$$H_0^d(\Delta) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} (P_{\vec{q}} P_{-\vec{q}} + \Omega_{\vec{q}}^2(\Delta) Q_{\vec{q}} Q_{-\vec{q}}) - NE_0(\Delta + 1), \quad /5/$$

где пробная частота

$$\Omega_{\vec{q}}^2(\Delta) = \omega_{\vec{q}}^2 + \nu_0^2(1 + \Delta). \quad /6/$$

*Хотя дебаевское приближение не является принципиальным, оно значительно упрощает дальнейшие вычисления.

** Форму аппроксимирующего гамильтониана /5/ можно "построить", руководствуясь соображениями, изложенными в /5/.

Щель Δ в спектре /6/ определяется, как будет показано ниже, из уравнения:

$$\nu_0^2(1 + \Delta) = \frac{b}{N} \sum_{\vec{q}} \langle Q_{\vec{q}} Q_{-\vec{q}} \rangle_0 = \frac{b}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{\hbar}{2\Omega_{\vec{q}}(\Delta)} \operatorname{cth} \frac{\hbar \Omega_{\vec{q}}(\Delta)}{2T}. \quad /7/$$

Термодинамическое среднее $\langle \dots \rangle_0$ в /7/ вычисляется с гамильтонианом /5/.

Докажем следующее утверждение:

Пусть параметр Δ определяется уравнением /7/, тогда плотность функций свободных энергий: $f_N[H^d]$, соответствующая модельному гамильтониану /2/, и $f_N[H_0^d(\Delta)]$, соответствующая аппроксимирующему гамильтониану /5/, совпадают при $N \rightarrow \infty$.

Для доказательства этого факта воспользуемся широко известным неравенством Боголюбова /см., например /5/ /, справедливым для любых гамильтонианов Γ и Γ^0 :

$$\frac{1}{N} \langle \Gamma - \Gamma^0 \rangle_{\Gamma} \leq f_N[\Gamma] - f_N[\Gamma^0] \leq \frac{1}{N} \langle \Gamma - \Gamma^0 \rangle_{\Gamma^0}, \quad /8/$$

где $f_N[\Gamma] = -(T/N) \ln \operatorname{Tr} \exp(-\Gamma/T)$. В нашем случае получаем:

$$\Gamma - \Gamma^0 = H^d - H_0^d(\Delta) = \frac{bN}{4} \left[\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} Q_{\vec{q}} Q_{-\vec{q}} - \frac{\nu_0^2}{b} (1 + \Delta) \right]^2, \quad /9/$$

и из /8/ следует:

$$0 \leq f_N[H^d] - f_N[H_0^d(\Delta)] \leq \frac{b}{4} \left\langle \left[\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} Q_{\vec{q}} Q_{-\vec{q}} - \frac{\nu_0^2}{b} (1 + \Delta) \right]^2 \right\rangle_0. \quad /10/$$

Неравенство /10/ справедливо при произвольном Δ . Воспользуемся этим произволом и определим Δ из условия наилучшей аппроксимации, т.е. выберем такое Δ , при котором $f_N[H_0^d(\Delta)]$ было бы максимальным. Можно показать, что $f_N[H_0^d(\Delta)]$ является выпуклой вверх функцией параметра Δ и что она достигает абсолютного максимума при конечном $\Delta = \Delta_N$. Простым дифференцированием $f_N[H_0^d(\Delta)]$ можно установить, что Δ_N является единственным решением уравнения самосогласования /7/.

Из /7/ и /10/ следует:

$$0 \leq f_N[H^d] - \max_{\Delta} f_N[H_0^d(\Delta)] \leq \frac{b}{4} \left\langle \left[\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} Q_{\vec{q}} Q_{-\vec{q}} - \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \langle Q_{\vec{q}} Q_{-\vec{q}} \rangle_0 \right]^2 \right\rangle_0. \quad /11/$$

Поскольку в правой части /11/ термодинамическое среднее вычисляется по псевдогармоническому гамильтониану /5/, то можно воспользоваться теоремой Вика-Блоха-Доминисиса и получить оценку:

$$0 \leq f_N[H^d] - \max_{\Delta} f_N[H_0^d(\Delta)] \leq$$

$$\leq \frac{b}{2N^2} \sum_{\vec{q}} \langle Q_{\vec{q}} Q_{-\vec{q}} \rangle_0^2 = \frac{b}{2N^2} \sum_{\vec{q}} \frac{\hbar^2}{[2\Omega_{\vec{q}}(\bar{\Delta}_N)]^2} \operatorname{cth} \frac{\hbar \Omega_{\vec{q}}(\bar{\Delta}_N)}{2T}. \quad /12/$$

Доказательство асимптотической малости при $N \rightarrow \infty$ в правой части /12/ в общем случае - при произвольных T и любой размерности пространства d , представляется сложным, поэтому в дальнейшем мы ограничимся классическим пределом высоких температур, когда $T \gg \hbar \Omega_{\vec{q}}(\bar{\Delta}_N)$, и в основном будем обсуждать случай $d = 3$. Доказательство в квантовом пределе низких температур проводится аналогично.

3. АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ $\bar{\Delta}_N$ ПРИ БОЛЬШИХ N И ПРИ $T \rightarrow T_c$

В классическом пределе приближенно можно считать $\operatorname{cth}[\hbar \Omega_{\vec{q}}(\Delta)/2T] \sim 2T/\hbar \Omega_{\vec{q}}(\Delta)$. В этом случае уравнение самосогласования /7/ можно записать в виде:

$$\Delta_N(t) - 1 = \frac{1}{N \Delta_N(t)} + \frac{t}{N} \sum_{\vec{q} \neq 0} [\Delta_N(t) + s^2 q^2]^{-1}, \quad /13/$$

где $t = Tb/\nu_0^4 = T/4E_0$ - безразмерная температура и $s = c/\nu_0$.

Сумма по $\vec{q} \neq 0$ в d -мерном случае при больших $N \equiv L^d$, вычисляется согласно правилу /4/, т.е.

$$I_d^{(1)}(\Delta_N(t), L) = \int_{n^2=1}^{\pm L/2} [\Delta_N(t) + (\alpha/L)^2 n^2]^{-1} = \frac{S_d}{L^d} \int_1^{L_D} \frac{n^{d-1} dn}{\Delta_N(t) + (\alpha/L)^2 n^2}, \quad (\alpha = 2\pi s/a). \quad /14/$$

Здесь $S_d = (2\pi)^{d/2} / \Gamma(d/2)$ - поверхность единичного d -мерного шара / Γ - гамма-функция/. Верхний предел L_D в /14/ определяется из условия нормировки суммы:

$$L^{-d} \sum_{n^2=1}^{\pm L/2} \rightarrow \frac{S_d}{L^d} \int_1^{L_D} n^{d-1} dn = \frac{S_d}{d} \frac{(L_D - 1)^d}{L^d} = 1,$$

что дает $L_D \simeq L(d/S_d)^{1/d}$.

После замены переменных $x = (\alpha/L)n$, $x_1 = \alpha/L$, $x_D = \alpha(L_D/L)$ в /14/, получаем:

$$I_d^{(1)}(\Delta_N(t), L) = \frac{S_d}{a^d} \int_{x_1}^{x_D} \frac{x^{d-1} dx}{\Delta_N(t) + x^2} \quad /15/$$

Интеграл в /15/ легко вычисляется.

Рассмотрим сначала важный частный случай $d = 3$. Из /13/ и /15/ получаем уравнение:

$$\Delta_N(t) = \frac{1}{L^3 \Delta_N(t)} + \frac{tS_3}{a^3} \left(x_D - \frac{a}{L}\right) - 1 - \frac{tS_3}{a^3} \sqrt{\Delta_N(t)} \left[\operatorname{arctg} \frac{x_D}{\sqrt{\Delta_N(t)}} - \operatorname{arctg} \frac{a}{L\sqrt{\Delta_N(t)}} \right]. \quad /16/$$

Удобно ввести величину $\tau = (t - t_c)/t_c$, где критическая температура t_c определяется из условия $\Delta_\infty(t_c) = 0$. После предельного перехода $L \rightarrow \infty$ вместо /16/ получаем

$$\Delta(t) = t \frac{S_3}{a^3} x_D - t \frac{S_3}{a^3} \sqrt{\Delta(t)} \operatorname{arctg} \frac{x_D}{\sqrt{\Delta(t)}} - 1, \quad /17/$$

откуда явно определяем t_c

$$t_c^{-1} = \frac{S_3 x_D}{a^3} = \frac{4\pi}{a^2} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3}. \quad /18/$$

Рассмотрим теперь уравнение /16/ при конечном N и $\tau \rightarrow 0$. Оно имеет вид:

$$\Delta_N(\tau) = \frac{1}{L^3 \Delta_N(\tau)} + \tau - \frac{t}{t_c} \cdot \frac{1}{L_D} - \frac{t}{t_c} \frac{\sqrt{\Delta_N(\tau)}}{x_D} \left[\operatorname{arctg} \frac{x_D}{\sqrt{\Delta_N(\tau)}} - \operatorname{arctg} \frac{x_D}{L_D \sqrt{\Delta_N(\tau)}} \right] /19/$$

Будем искать решение /19/ в виде $\Delta_N(\tau) = \Delta_0(\tau)L^{-2}$. Тогда для больших L при $\tau \rightarrow 0$, получаем следующее уравнение для $\Delta_0(\tau=0) \equiv \Delta_0$:

$$\frac{\Delta_0}{L^2} = \frac{t_c}{L\Delta_0} - \frac{1}{L_D} - \frac{\sqrt{\Delta_0}}{aL_D} \left[\frac{\pi}{2} - \frac{\sqrt{\Delta_0}}{aL_D} - \operatorname{arctg} \frac{a}{\sqrt{\Delta_0}} \right]. \quad /20/$$

Если $a/\sqrt{\Delta_0} \gg 1$, то после разложения $\operatorname{arctg}(\cdot)$, и пренебрегая членами порядка $O(1/L)$ и $O(\Delta_0/a^2)$, получаем:

$$\Delta_0 = t_c \frac{L_D}{L} = \frac{a^2}{4\pi}. \quad /21/$$

Следовательно, при больших N и $\tau = 0$ находим $d = 3/$:

$$\bar{\Delta}_N(r=0) = \frac{a^2}{4\pi} \cdot \frac{1}{N^{2/3}}. \quad /22/$$

Аналогичные рассуждения можно провести и при произвольном d . Результат имеет вид:

$$\bar{\Delta}_N^d(r=0) \sim \begin{cases} O(1/L^{d/2}) & d \geq 5 \\ O(1/L^2 \sqrt{\ln L}) & d = 4. \end{cases} \quad /23/$$

Этими результатами мы воспользуемся в следующем параграфе при оценке правой части неравенства /12/.

4. ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ ЭКВИВАЛЕНТНОСТИ В КЛАССИЧЕСКОМ ПРЕДЕЛЕ

В классическом пределе вместо /12/ можно рассматривать неравенство:

$$0 \leq f_N [H^d] - \max_{\Delta} f_N [H_0^d(\Delta)] \leq \frac{bT^2}{2} \xi_N(T), \quad /24/$$

где

$$\xi_N(T) = \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{q^4 \Delta_N(T)}. \quad /25/$$

Таким образом, в этом случае задача доказательства термодинамической эквивалентности гамильтонианов H^d и $H_0^d(\bar{\Delta}_N)$ сведена к нахождению асимптотики /при больших N / решеточной суммы $\xi_N(T)$. Сходная математическая проблема возникает в задачах о случайном блуждании на решетке /6/.

Представим $\xi_N(T)$ в виде суммы:

$$\xi_N(T) \equiv \xi_N^{(0)}(T) + \xi_N^{(1)}(T) = \frac{1}{N^2 \nu_0^4 \Delta_N(T)} + \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{q} \neq 0} [\nu_0^2 \bar{\Delta}_N(T) + \frac{1}{m} (\phi(0) - \phi(\vec{q}))]^{-2}. \quad /26/$$

Рассмотрим сначала случай $d = 3$. Учитывая, что $\bar{\Delta}_N(T) \neq 0$ при $T > T_c$, из соотношения /22/ для $\xi_N^{(0)}(T)$ получаем:

$$\xi_N^{(0)}(T) \approx \begin{cases} O(1/N^2), & T > T_c \\ O(1/N^{2/3}), & T = T_c. \end{cases} \quad /27/$$

т.е. в термодинамическом пределе этот член исчезает. Аналогичная ситуация имеет место и при произвольном $d (> 2)$ /см. /23//.

Займемся теперь оценкой вклада второго члена в /26/. Введем для удобства эффективный радиус взаимодействия R_0 из условия

$$\begin{aligned} \phi(0) - \phi(\vec{q}) &= \sum_{\vec{l}} \phi(\vec{l}) (1 - e^{-i\vec{q}\vec{l}}) \approx \frac{1}{2} \sum_{\vec{l}} \phi(\vec{l}) (q\vec{l})^2 = \\ &= \phi(q=0) R_0 q^2 = A g_0 R_0^2 q^2 = A g_0 a^2 r_0^2 q^2 \end{aligned} \quad /28/$$

и перепишем сумму по \vec{q} в виде:

$$\xi_N^{(1)}(T) = \frac{1}{N^2 \nu_0^4} \sum_{\vec{q}} [\Delta_N(T) + s^2 q^2]^{-2}, \quad s^2 = g_0 R_0^2. \quad /29/$$

При фиксированном $N \equiv L^d \ll \infty$ проведем суммирование по $q^a = (a^+ n^a / L)$ в /29/ согласно /4/:

$$\xi_N^{(1)}(T) = \frac{1}{L^{2d} \nu_0^4} \sum_{n^a = \pm 1}^{\pm L/2} [\Delta_N(T) + (a/L)^2 n^2]^{-2}. \quad /30/$$

Для достаточно больших L вклад суммы по n^a можно оценить по формуле:

$$\begin{aligned} I_d^{(2)}(\Delta_N(T), L) &= \frac{1}{L^d} \sum_{n^a = \pm 1}^{\pm L/2} [\Delta_N(T) + (a/L)^2 n^2]^{-2} = \\ &= \frac{S_d}{L^d} \int_1^{L/D} \frac{n^{d-1} dn}{[\Delta_N(T) + (a/L)^2 n^2]^2}. \end{aligned} \quad /31/$$

Асимптотическое поведение интеграла $I_d^{(2)}(\Delta_N(T), L)$ при $T \rightarrow T_c$ зависит от размерности пространства d . Вводя переменные $x = (a/L)n$ и τ , получаем /ср. с /14//:

$$I_d^{(2)}(\tau, L) = \frac{S_d}{a^d} \int_{x_1}^{x_D} \frac{x^{d-1} dx}{(\tau + x^2)^2}. \quad /32/$$

Из /32/ при $\tau = 0$ находим

$$I_d^{(2)}(\tau = 0, L) = \begin{cases} \frac{S_d}{a^d} \cdot \frac{x^{d-4}}{d-4} \Big|_{x_1}^{x_D} & \text{при } d \neq 4, \\ \frac{S_d}{a^4} \ln x \Big|_{x_1}^{x_D} & \text{при } d = 4. \end{cases} \quad /33/$$

При $L \rightarrow \infty$ имеем расходимость на нижнем пределе / $x_1 \rightarrow 0$ / для $d \leq 4$. Теперь из /30/ и /33/ получаем оценку:

$$\xi_N^{(1)}(T_c) \approx \begin{cases} O(1/L^2) & \text{при } d = 3 \\ O(\ln L/L^4) & \text{при } d = 4. \end{cases} \quad /34/$$

Окончательно, используя /22/, /23/, /27/ и /34/ из /24/, в термодинамическом пределе, получим равенство:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} f_N[H^d] = \max_{\Delta} \lim_{N \rightarrow \infty} f_N[H_0^d(\Delta)] \quad /35/$$

для всех $d > 2$.

Равенство /35/ доказывает утверждение, высказанное в п.2, о термодинамической эквивалентности гамильтонианов H^d и $H_0^d(\Delta_N)$ в термодинамическом пределе.

5. АНАЛИЗ УРАВНЕНИЯ САМОСОГЛАСОВАНИЯ В КЛАССИЧЕСКОМ ПРЕДЕЛЕ

При $t \rightarrow t_c$ уравнение /17/ можно записать приближенно /в этом параграфе мы рассматриваем $d = 3$ /:

$$\Delta(\tau) = \tau - \frac{\pi}{2x_D} \sqrt{\Delta(\tau)}. \quad /36/$$

Решение /36/ имеет вид

$$\sqrt{\Delta(\tau)} = \sqrt{\frac{\pi^2}{16x_D^2} + \tau - \pi/4x_D}. \quad /37/$$

В зависимости от соотношения τ и π^2/x_D^2 получаем разную асимптотику:

$$1/ \quad \tau \ll \left(\frac{\pi}{4x_D}\right)^2$$

$$\Delta(\tau) = 4\tau^2 \left(\frac{x_D}{\pi}\right)^2 = 16\tau^2 g_0 r_0^2 \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{2/3}. \quad /38/$$

$$2/ \quad \tau \gg \left(\frac{\pi}{4x_D}\right)^2$$

$$\Delta(\tau) = \tau \left(1 - \frac{\pi}{2x_D \sqrt{\tau}}\right). \quad /39/$$

Таким образом, для восприимчивости "аппроксимирующей системы", при $\tau \rightarrow 0$, получаем:

$$\chi(\vec{q}, \tau) = \frac{1}{\Omega_{\vec{q}}^2(\Delta)} = \frac{1}{\Delta(\tau) + s^2 q^2} \quad /40/$$

или

$$\chi(\vec{q} \rightarrow 0, \tau) \approx \frac{1}{\nu_0^2 \Delta(\tau)} \sim \tau^{-\gamma} \quad /41/$$

и

$$\chi(\vec{q} \rightarrow 0, \tau = 0) = \frac{1}{\nu_0 s^2 q^2} \sim q^{-(2+\eta)}, \quad /42/$$

где критические индексы:

$$\gamma = \begin{cases} 2 & \text{в области } \tau \ll (\pi/4x_D)^2, \\ 1 & \text{в области } \tau \gg (\pi/4x_D)^2 \end{cases} \quad /43/$$

и $\eta = 0$.

Отметим, что область $\tau \ll (\pi/4x_D)^2$ мала для переходов типа смещения, когда $g_0 r_0^2 \gg 1$:

$$\tau \ll \frac{(4\pi/3)^{2/3}}{64g_0 r_0^2} \ll 1. \quad /44/$$

В области температур /44/ велико флуктуационное взаимодействие, которое приводит к кроссоверу критического поведения, т.е. "гауссовский" индекс $\gamma = 1$ переходит в индекс сферической модели Берлина-Каца /4/ $\gamma = 2$.

6. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ МОДЕЛИ ПРИ ФИКСИРОВАННОМ ПАРАМЕТРЕ ПОРЯДКА

Введем вспомогательные гамильтонианы

$$H = H^d - \sqrt{N} \sum_{\vec{q}_i} h_{-\vec{q}_i} Q_{\vec{q}_i}, \quad /45/$$

$$H(\Delta) = H_0^d(\Delta) - \sqrt{N} \sum_{\vec{q}_i} h_{-\vec{q}_i} Q_{\vec{q}_i}, \quad /46/$$

линейно зависящие от вещественных параметров $h_{-\vec{q}_i}$ ($i=1, \dots, p$). Изложенным выше способом можно доказать справедливость равенства:

$$f(T, \{h_{-\vec{q}_i}\}) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} f_N[J] = \max_{\Delta} \lim_{N \rightarrow \infty} f_N[H(\Delta)]. \quad /47/$$

Введем новый термодинамический потенциал $F(T, \{x_{\vec{q}_i}\})$, где $\{x_{\vec{q}_i}\}$ - набор параметров, термодинамически сопряженных $\{h_{-\vec{q}_i}\}$ при помощи преобразования Лежандра /7/:

$$F(T, \{x_{\vec{q}_i}\}) = \max_{\{h_{-\vec{q}_i}\}} \{f(T, \{h_{-\vec{q}_i}\}) + \sum_{\vec{q}_i} h_{-\vec{q}_i} x_{\vec{q}_i}\}. \quad /48/$$

Подставляя $f(T, \{h_{-\vec{q}_i}\})$ из /47/ в /48/, получаем

$$\begin{aligned} F(T, \{x_{\vec{q}_i}\}) &= \max_{\{h_{-\vec{q}_i}\}} \{ \max_{\Delta} [f[H(\Delta)] + \sum_{\vec{q}_i} h_{-\vec{q}_i} x_{\vec{q}_i}] \} = \\ &= \max_{\Delta} \{ \max_{\{h_{-\vec{q}_i}\}} [f[H(\Delta)] + \sum_{\vec{q}_i} h_{-\vec{q}_i} x_{\vec{q}_i}] \}. \end{aligned} \quad /49/$$

Заметим, что ввиду того, что $f[H(\Delta)]$ является дифференцируемой функцией по параметрам $\{h_{-\vec{q}_i}\}$, максимум функции в круглых скобках в /49/ достигается на единственном решении системы уравнений:

$$-\frac{\partial f[H(\Delta)]}{\partial h_{-\vec{q}_i}} = x_{\vec{q}_i} \quad /50/$$

или

$$\sqrt{N} x_{\vec{q}_i} = \langle Q_{\vec{q}_i} \rangle_{H(\Delta)}. \quad /51/$$

Уравнения /50/ и /51/ дают $\frac{h_{-\vec{q}_i}}{\Omega_{\vec{q}_i}^2(\Delta)} = x_{\vec{q}_i}$, т.е. при $h_{-\vec{q}_i} \rightarrow 0$,

только для $\vec{q}_i = 0$ получаем $x_{\vec{q}_i=0} = x = 0$, при $T < T_c$.

Соотношение /51/ при $q_i = 0$ определяет параметр порядка в изучаемой модели. Апостериори, полагая равным нулю в /45/ и /46/ все $h_{-\vec{q}_i}$ при $\vec{q}_i \neq 0$ и используя связь

$$h_0 = \Omega_0(\Delta) x \equiv \nu_0^2 \Delta x, \quad /52/$$

из /49/ находим:

$$F(T, x) = \max_{\Delta} \{ f[\tilde{H}_0(\Delta)] - E_0(1 + \Delta)^2 + \frac{1}{2} \nu_0^2 \Delta x^2 \}, \quad /53/$$

где

$$\tilde{H}_0(\Delta) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} [P_{\vec{q}} P_{-\vec{q}} + \Omega_{\vec{q}}^2(\Delta) \delta Q_{\vec{q}} \delta Q_{-\vec{q}}]$$

и

$$\delta Q_{\vec{q}} = Q_{\vec{q}} - x \sqrt{N} \delta_{\vec{q},0}. \quad /54/$$

Из условия экстремума в /53/ получаем уравнение для Δ :

$$\begin{aligned} 1 + \Delta &= \frac{b}{\nu_0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \langle \delta Q_{\vec{q}} \delta Q_{-\vec{q}} \rangle + \frac{b}{\nu_0^2} x^2 = \\ &= \frac{b}{\nu_0^2} x^2 + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{t}{\Delta + s^2 q^2}, \end{aligned} \quad /55/$$

где последнее равенство записано в классическом пределе,

или

$$\chi(\vec{q} \rightarrow 0, \tau) \approx \frac{1}{v_0^2 \Delta(\tau)} \sim \tau^{-\gamma} \quad /41/$$

и

$$\chi(\vec{q} \rightarrow 0, \tau = 0) = \frac{1}{v_0 s^2 q^2} \sim q^{-(2+\eta)}, \quad /42/$$

где критические индексы:

$$\gamma = \begin{cases} 2 & \text{в области } \tau \ll (\pi/4x_D)^2, \\ 1 & \text{в области } \tau \gg (\pi/4x_D)^2 \end{cases} \quad /43/$$

и $\eta = 0$.

Отметим, что область $\tau \ll (\pi/4x_D)^2$ мала для переходов типа смещения, когда $g_0 r_0^2 \gg 1$:

$$\tau \ll \frac{(4\pi/3)^{2/3}}{64g_0 r_0^2} \ll 1. \quad /44/$$

В области температур /44/ велико флуктуационное взаимодействие, которое приводит к кроссоверу критического поведения, т.е. "гауссовский" индекс $\gamma = 1$ переходит в индекс сферической модели Берлина-Каца /4/ $\gamma = 2$.

6. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ МОДЕЛИ ПРИ ФИКСИРОВАННОМ ПАРАМЕТРЕ ПОРЯДКА

Введем вспомогательные гамильтонианы

$$H = H^d - \sqrt{N} \sum_{\vec{q}_i} h_{-\vec{q}_i} Q_{\vec{q}_i}, \quad /45/$$

$$H(\Delta) = H_0^d(\Delta) - \sqrt{N} \sum_{\vec{q}_i} h_{-\vec{q}_i} Q_{\vec{q}_i}, \quad /46/$$

линейно зависящие от вещественных параметров $h_{-\vec{q}_i}$ ($i=1, \dots, p$). Изложенным выше способом можно доказать справедливость равенства:

$$f(T, \{h_{-\vec{q}_i}\}) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} f_N[H] = \max_{\Delta} \lim_{N \rightarrow \infty} f_N[H(\Delta)]. \quad /47/$$

Введем новый термодинамический потенциал $F(T, \{x_{\vec{q}_i}\})$, где $\{x_{\vec{q}_i}\}$ - набор параметров, термодинамически сопряженных $\{h_{-\vec{q}_i}\}$ при помощи преобразования Лежандра /7/:

$$F(T, \{x_{\vec{q}_i}\}) = \max_{\{h_{-\vec{q}_i}\}} \{f(T, \{h_{-\vec{q}_i}\}) + \sum_{\vec{q}_i} h_{-\vec{q}_i} x_{\vec{q}_i}\}. \quad /48/$$

Подставляя $f(T, \{h_{-\vec{q}_i}\})$ из /47/ в /48/, получаем

$$\begin{aligned} F(T, \{x_{\vec{q}_i}\}) &= \max_{\{h_{-\vec{q}_i}\}} \{ \max_{\Delta} [f[H(\Delta)] + \sum_{\vec{q}_i} h_{-\vec{q}_i} x_{\vec{q}_i}] \} = \\ &= \max_{\Delta} \{ \max_{\{h_{-\vec{q}_i}\}} [f[H(\Delta)] + \sum_{\vec{q}_i} h_{-\vec{q}_i} x_{\vec{q}_i}] \}. \end{aligned} \quad /49/$$

Заметим, что ввиду того, что $f[H(\Delta)]$ является дифференцируемой функцией по параметрам $\{h_{-\vec{q}_i}\}$, максимум функции в круглых скобках в /49/ достигается на единственном решении системы уравнений:

$$-\frac{\partial f[H(\Delta)]}{\partial h_{-\vec{q}_i}} = x_{\vec{q}_i} \quad /50/$$

или

$$\sqrt{N} x_{\vec{q}_i} = \langle Q_{\vec{q}_i} \rangle H(\Delta). \quad /51/$$

Уравнения /50/ и /51/ дают $\frac{h_{-\vec{q}_i}}{\Omega_{\vec{q}_i}^2(\Delta)} = x_{\vec{q}_i}$, т.е. при $h_{-\vec{q}_i} \rightarrow 0$,

только для $\vec{q}_i = 0$ получаем $x_{\vec{q}_i=0} = x = 0$, при $T < T_c$.

Соотношение /51/ при $q_i = 0$ определяет параметр порядка в изучаемой модели. Апостериори, полагая равным нулю в /45/ и /46/ все $h_{-\vec{q}_i}$ при $\vec{q}_i \neq 0$ и используя связь

$$h_0 = \Omega_0(\Delta) x \equiv v_0^2 \Delta x, \quad /52/$$

из /49/ находим:

$$F(T, x) = \max_{\Delta} \{ f[\tilde{H}_0(\Delta)] - E_0(1 + \Delta)^2 + \frac{1}{2} v_0^2 \Delta x^2 \}, \quad /53/$$

где

$$\tilde{H}_0(\Delta) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} [P_{\vec{q}} P_{-\vec{q}} + \Omega_{\vec{q}}^2(\Delta) \delta Q_{\vec{q}} \delta Q_{-\vec{q}}]$$

и

$$\delta Q_{\vec{q}} = Q_{\vec{q}} - \overline{x \sqrt{N} \delta_{\vec{q},0}}. \quad /54/$$

Из условия экстремума в /53/ получаем уравнение для Δ :

$$\begin{aligned} 1 + \Delta &= \frac{b}{v_0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \langle \delta Q_{\vec{q}} \delta Q_{-\vec{q}} \rangle + \frac{b}{v_0^2} x^2 = \\ &= \frac{b}{v_0^2} x^2 + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{t}{\Delta + s^2 q^2}, \end{aligned} \quad /55/$$

где последнее равенство записано в классическом пределе,

7. РАЗЛОЖЕНИЕ ФУНКЦИИ $F(T, x)$ ПО СТЕПЕНЯМ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА

Введем безразмерные величины $\eta^2 = \frac{\nu_0^2 x^2}{4E_0} = \frac{bx^2}{\nu_0^2}$, $\mathcal{F} = \frac{F}{4E_0}$ и переписем /53/ в виде:

$$\mathcal{F}(T, \eta) = \max_{\Delta} \mathcal{F}(T, \eta; \Delta) \equiv \mathcal{F}(T, \eta; \bar{\Delta}(\eta)), \quad /56/$$

где

$$\mathcal{F}(T, \eta; \Delta) = t \int d\vec{q} \cdot \ln \left(2 \operatorname{sh} \frac{\Omega_q(\Delta)}{2T} \right) - \frac{1}{4} (1 + \Delta)^2 + \frac{1}{2} \Delta \eta^2.$$

Построим разложение функции

$$\mathcal{F}(T, \eta) = \mathcal{F}(T, 0) + \bar{A} \eta^2 + \frac{1}{2} \bar{B} \eta^4 + \frac{1}{6} \bar{C} \eta^6 + \dots, \quad /57/$$

с помощью которого удобно исследовать термодинамику системы в окрестности критической температуры T_c .

Разлагая $\mathcal{F}(T, \eta; \bar{\Delta}(\eta))$ в ряд по степеням η^2 для первых трех коэффициентов в /57/, получаем при $T > 0$:

$$\bar{A} = \frac{1}{2} \Delta(\eta=0) \sim \tau^\gamma, \quad \bar{B} = \frac{d^2 \mathcal{F}}{d(\eta^2)^2} \Big|_{\eta=0} \sim \tau^{\gamma/2}, \quad \bar{C} = \frac{d^3 \mathcal{F}}{d(\eta^2)^3} \Big|_{\eta=0} = \text{const} > 0.$$

В критической точке / $\tau = 0$ /: $\bar{A} = 0$, $\bar{B} = 0$ и $\bar{C} > 0$ и при больших $N \equiv L^3$ имеют вид: $\bar{A} \sim L^{-2}$, $\bar{B} \sim L^{-1}$.

Отсюда видно, что исследуемая нами модель обнаруживает интересную особенность - трикритическое поведение; коэффициент перед четвертой степенью в разложении /57/ "зануляется" в критической точке $T = T_c$ благодаря сильно развитым флуктуациям. В теории критических явлений обычно трикритическое поведение связывается с "гауссовской" неподвижной точкой^{/8/}, имеющей классические критические индексы /напр., $\gamma = 1/$. Здесь реализуется довольно редко встречающаяся возможность /см. /9// - трикритическое поведение, которое, однако, в данном случае характеризуется неклассическими критическими индексами сферической модели Берлина-Каца.

Используя преобразование Лежандра, обратное /48/, $f(T, h) =$

$= \min_{\eta} \{ \mathcal{F}(T, \eta) - h \eta \}$ видим, что при $h = 0$ разложение /57/ является разложением Ландау для термодинамического потенциала $f(T, 0)$. Дифференцируя /56/ с учетом /55/, получаем уравнение самосогласования для параметра порядка η :

$$\Delta(\eta, T) \cdot \eta = 0. \quad /58/$$

Уравнение /64/ имеет два решения:

а/ тривиальное $\eta = 0$, которое реализует минимум при $T > T_c$,
б/ нетривиальное $\eta \neq 0$, которое реализует минимум при $T < T_c$ и определяется из условия $\Delta(\eta, T < T_c) \equiv -1 + \eta^2 + y(t) = 0$, где

$$y(t) = -\frac{b}{\nu_0^2} \int d\vec{q} \frac{1}{2\Omega_q(0)} \operatorname{cth} \frac{\Omega_q(0)}{2T}. \text{Ниже } T_c, \Omega_q^2(0) = c^2 q^2 \text{ и в классическом}$$

пределе $\eta^2(t) = 1 - t/t_c$, где t_c естественно совпадает с определением t_c в формуле /18/.

8. ОБСУЖДЕНИЕ

Рассматриваемая нами модель структурного фазового перехода представляет собой некую специфическую реализацию модели ϕ^4 на d -мерной решетке. Вследствие дальнодействующего характера ангармонического взаимодействия /обратно пропорционального числу частиц/ удастся получить точное в термодинамическом пределе решение.

Термодинамическое поведение системы нетривиальным образом зависит от размерности пространства d . В работе основное внимание уделено случаю $d = 3$. Из рассуждений, проведенных в п.п. 3 и 4, видно, что свойство "точной решаемости" сохраняется при всех $d > 2$.

Модель обнаруживает трикритическое поведение с неклассическими критическими индексами сферического типа, что указывает на существенную роль флуктуаций.

Авторы благодарны И.Гочеву, В.А.Загребнову и Т.Пашкевичу за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Scheider T., Stoll E., Beck H. Physica, 1975, 79A, p. 201-216.
2. Sarbach S., Schneider T. Z.Physik, 1975, B20, p. 399-403.
3. Schäfer R., Beck H., Thomas H. Z.Physik, 1978, B30, 223-229.
4. Joyce C.S. Critical Properties of Spherical Model. In/ Phase Transition and Critical Phenomena, eds. Domb C. Green M.S. N.Y.: Acad.Press 1972, vol.2, p. 375-442.
5. Боголюбов Н.Н. /мл./ Метод исследования модельных гамильтонианов. "Наука", М., 1974; Боголюбов Н.Н. /мл./ и др. Метод

аппроксимирующего гамильтониана в статистической физике,
изд. БАН, София, 1981.

6. Montroll E.W., Weiss G.H. Journ. of Math. Phys., 1975, 6, No 2, p. 167-181.
7. Griffiths R.B. In: "Phase Transition and Critical Phenomena". eds. Domb C., Green M.S. N.Y.: Academic Press, 1972, vol.1, p. 35.
8. Riedel E.K., Wegner F.J. Phys.Rev.Lett., 1972, 29, p. 349.
9. Aharony A. In: Phase Transitions and Critical Phenomena, eds. Domb C., Green M.S. N.Y.: Academic Press, 1976, vol.6, p. 357.

Плакида Н.М., Тончев Н.С. P17-84-478
Точно решаемая d -мерная модель структурного фазового
перехода

Методом аппроксимирующего гамильтониана доказано, что решеточная модель $g\phi^4$ с константой взаимодействия $g = \lambda/N$ имеет точное решение. Исследована термодинамика фазового перехода в этой модели.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод Т.Ю.Думбрайс

Plakida N.M., Tonchev N.S. P17-84-478
 d -Dimensional Exactly Soluble Model for Structural Phase
Transition

The approximating hamiltonian method is used to prove the exact solvability of a lattice type $g\phi^4$ model with the interacting constant $g = \lambda/N$. The thermodynamical properties of the phase transition in this model is studied as well.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1984

Рукопись поступила в издательский отдел
6 июля 1984 года,