объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

P17-85-400

Н.М.Плакида, Н.С.Тончев

КВАНТОВЫЕ ЭФФЕКТЫ В d-МЕРНОЙ ТОЧНО РЕШАЕМОЙ МОДЕЛИ СТРУКТУРНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

Направлено в журнал "Physica A"
и на II советско-итальянский симпозиум
по математическим проблемам
статистической физики /Львов, 1985/

1985

ВВЕДЕНИЕ

Обычно предполагается, что квантовые эффекты не играют существенной роли при фазовых переходах, поскольку критические длинноволновые флуктуации носят классический характер. Можно ожидать, однако, что при достаточно низких /по сравнению с характерной энергией возбуждений в системе/ температурах фазового перехода T_c существенными должны становиться и квантовые эффекты. Как было показано, например в [1-3], для структурных фазовых переходов типа смещения существует область температур, в которой поведение термодинамических величин определяется квантовыми флуктуациями. В предельном случае $T_c = 0$ классические длинноволновые флуктуации полностью подавлены, и критическое поведение должно носить чисто квантовый характер.

Проблема исследования критического поведения квантовых систем и влияние квантовых флуктуаций на фазовые переходы привлекают в последнее время большое внимание /см., например, [4] и цитированную там литературу/. При этом обычно применяются методы ренормгруппы[4]. Для структурных фазовых переходов типа смещения метод ϵ-разложения был использован в [5,6], где было показано, что критическое поведение d-мерной квантовой системы при $T_c = 0$ такое же, как и в $d+1$-мерной классической системе /размерный кроссовер/. Отметим также работу [7], где был получен строгий результат о подавлении фазового перехода квантовыми флуктуациями.

Представляет значительный интерес исследование точно решаемых d-мерных квантовых моделей фазового перехода, на основе которого можно было бы проследить переход от классического при $T_c \neq 0$, к квантовому, при $T_c = 0$, критическому поведению, и провести проверку теоретических результатов, получаемых методами теории возмущений. В настоящей работе мы рассмотрим такую модель структурного фазового перехода, предложенную в [8]. Эта модель сохраняет /в отличие от моделей типа среднего поля/ наиболее важное свойство реальных систем - зависимость характера критических флуктуаций при фазовом переходе от размерности пространства. В [9] нами было показано, что в термодинамическом пределе, $N \to \infty$, для этой модели в классическом случае может быть получено точное решение, включая область $T \leqslant T_c$.

В отличие от [8], нами был использован метод аппроксимирующего гамильтониана[10], который позволяет с равным успехом исследовать и квантовую область температур, $T_c \to 0$ /ср. с [8] /.

Настоящая работа построена следующим образом. В разделе 1 определена модель и приведены основные неравенства в методе аппроксимирующего гамильтониана, полученные в /9/. В разделе 2 проведено доказательство точной решаемости модели для любых $T_c > 0$ и исследовано термодинамическое поведение системы в области низких температур. Чисто квантовый случай $T_c = 0$ рассмотрен в разделе 3. Обсуждение полученных результатов приведено в разделе 4.

1. МОДЕЛЬНАЯ СИСТЕМА И ОСНОВНЫЕ НЕРАВЕНСТВА

Рассмотрим модель кристалла со структурным фазовым переходом типа смещения, гамильтониан которой представим в виде /8/:

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\ell}\left(\frac{P_\ell^2}{m} - AQ_\ell^2\right) + \frac{1}{4}\sum_{\ell\ell'}\Phi_{\ell\ell'}\left(Q_\ell - Q_{\ell'}\right)^2 + \frac{B}{4N}\left(\sum_\ell Q_\ell^2\right)^2, \qquad /1/$$

где Q_ℓ и P_ℓ - операторы смещения и импульса частицы массой m, находящейся в ℓ-м узле d-мерной решетки. Параметр $A = m\nu_0^2 > 0$ определяет частоту неустойчивой в гармоническом приближении оптической моды, ответственной за фазовый переход ферродисторсионного типа. Гармоническая силовая постоянная $\Phi_{\ell\ell'}$ определяет короткодействующее взаимодействие частиц в d-мерной решетке, а "константа" B/N моделирует бесконечно слабое /при числе частиц $N \to \infty$ /, но с бесконечным радиусом ангармоническое взаимодействие. Как было показано в /8/ и в нашей работе /9/, эта модель в классическом пределе описывает фазовый переход с однокомпонентным параметром порядка, который имеет трикритическое поведение с неклассическими критическими индексами сферической модели Берлина-Каца.

Запишем гамильтониан /1/ в представлении нормальных координат:

$$H = \frac{1}{2}\sum_q\left(P_q P_{-q} + \omega_q^2 Q_q Q_{-q}\right) + \frac{b}{4N}\sum_{qq'} Q_q Q_{-q} Q_{q'} Q_{-q'}, \qquad /2/$$

где Q_q и P_q - фурье-компоненты операторов Q_ℓ и P_ℓ, соответственно. Частота гармонических фононов

$$\omega_q^2 = -\nu_0^2 + (1/m)\left[\Phi(0) - \Phi(q)\right] \approx -\nu_0^2 + c^2 q^2,$$

где длинноволновое приближение не является принципиальным, но значительно упрощает вычисления. Константа ангармонизма $b = B/m^2 = \nu_0^4/4E_0$, где $E_0 = A^2/4B$ - высота барьера в двухъямном потенциале в /1/ при однородном смещении всех частиц: $Q_\ell \to x$; $U(x) = -(A/2)x^2 + (B/4)x^4$.

В работе /9/ в качестве аппроксимирующего был предложен псевдогармонический гамильтониан:

$$H_0(\Delta) = \frac{1}{2}\sum_q\left(P_q P_{-q} + \Omega_q^2\nu_0^2 Q_q Q_{-q}\right) - NE_0(1+\Delta)^2, \qquad /3/$$

где пробная гармоническая частота

$$\Omega_q^2 \equiv \Omega_q^2(\Delta) = \omega_q^2/\nu_0^2 + (1+\Delta) = \Delta + s^2 q^2, \quad s^2 \equiv c^2/\nu_0^2 \qquad /4/$$

определяется зависящей от температуры щелью:

$$\Delta = -1 + \frac{\lambda}{N}\sum \frac{1}{2\Omega_q}\,\mathrm{cth}\,\frac{\lambda\Omega_q}{2t}. \qquad /5/$$

В /5/ введены безразмерная температура $t = T/4E_0$ и квантовый параметр $\lambda = \hbar b/\nu_0^3 = \hbar\nu_0/4E_0$. Отметим, что λ велико, и квантовые эффекты важны не только при большой энергии нулевых колебаний $\hbar\nu_0$, но и при малой глубине ямы E_0.

Используя вариационный принцип Боголюбова, для разности плотностей свободных энергий модельной /3/ и аппроксимирующей /3/ систем мы получили в /9/ оценку:

$$0 \le f_N[H] - \max_\Delta f_N[H_0(\Delta)] \le \frac{1}{2}\xi_N(t), \qquad /6/$$

где

$$f_N[\Gamma] = -(t/N)\ln \mathrm{Tr}\exp(-\Gamma/T)$$

и

$$\xi_N(t) = \frac{1}{N^2}\sum_q\left[\frac{\lambda}{2\Omega_q(\bar\Delta_N)}\,\mathrm{cth}\,\frac{\lambda\Omega_q(\bar\Delta_N)}{2t}\right]^2. \qquad /7/$$

Флуктуационный параметр /7/ вычисляется при $\Delta = \bar\Delta_N$ - единственном решении уравнения самосогласования /5/.

В /9/ нами было показано, что в классическом пределе $\lambda = 0$ параметр $\xi_N(t) \sim O(N^{-\rho})$, $\rho > 0$ для всех $d \ge 3$, и поэтому, согласно /6/, модельная /2/ и аппроксимирующая /3/ системы термодинамически эквивалентны в пределе $N \to \infty$. На основании этого термодинамическое поведение системы при фазовом переходе, включая область температур $T \le T_c$, где $\Delta(T_c) = 0$ при $N \to \infty$, можно было исследовать, используя свободную энергию системы /3/

$$f_N[H_0(\bar\Delta_N)] = \frac{t}{N}\sum_q \ln\left[2\,\mathrm{sh}\,\frac{\lambda\Omega_q(\bar\Delta_N)}{2t}\right] - \frac{1}{4}\left(1+\bar\Delta_N\right)^2. \qquad /8/$$

Для доказательства асимптотической малости $\xi_N(t)$ необходимо иметь решение уравнения самосогласования /5/ для большой, но конечной системы, $N < \infty$. Представляется невозможным получить подобное решение при произвольных T и λ. Однако, помимо классического предела $\lambda = 0$, удается рассмотреть промежуточный режим, $T_c \neq 0$ и $\lambda > 0$, и чисто квантовый предел: $T_c = 0$, $\lambda > 0$.

2. ОБЛАСТЬ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУР, КВАНТОВЫЕ ЭФФЕКТЫ

Рассмотрим сначала промежуточный режим, $T_c \neq 0$, вычисляя квантовые поправки по λ к уравнениям, полученным в /9/. Поскольку общая схема расчета сохраняется, приведем здесь лишь основные результаты.

2.1. Доказательство термодинамической эквивалентности систем /2/ и /3/

Прежде всего необходимо найти решение уравнения самосогласования /5/ при $t = t_c$ и больших, но конечных $N \equiv L^d$. Выделяя в /5/ член с $q = 0$ и переходя от суммы по $q_i = (2\pi/aL)n_i$, $n_i = \pm 1, \ldots, \pm L/2$ к интегралу по $x_i = (a/L)n_i$, $a = (2\pi s/\lambda)$, получаем уравнение:

$$\Delta = -1 + \frac{\lambda}{2N\sqrt{\Delta}} \operatorname{cth} \frac{\lambda\sqrt{\Delta}}{2t} + \frac{\lambda}{2} \frac{S_d}{a^d} \int_{x_1}^{x_D} \frac{x^{d-1}}{\sqrt{\Delta + x^2}} \operatorname{cth} \frac{\lambda\sqrt{\Delta + x^2}}{2t}\, dx, \qquad /9/$$

где $S_d = 2(\pi)^{1/d}/\Gamma(d/2)$ - поверхность единичного d-мерного шара, $x_1 = (a/L)$, $x_D = a(L_D/L)$, $L_D = (d/S_d)^{1/d}$. Для переходов типа смещения $a \gg 1$ и $x_D \gg 1$.

Для учета квантовых поправок по степеням λ воспользуемся разложением

$$\frac{\operatorname{cth} z}{z} = \sum_{n=0}^{\infty} 2^{2n} B_{2n} \frac{z^{2(n-1)}}{(2n)!}, \quad |z| < \pi,$$

где $B_0 = 1$, $B_2 = 1/6$, $B_4 = -1/30$ и т.д. - числа Бернулли. Тогда соответствующие интегралы в правой части /9/ легко вычисляются, и после линеаризации по малой величине Δ вместо /9/ получаем уравнение:

$$\Delta\left\{1 - \frac{t_c}{t_c^{\circ}}(d-2)\left[g'_d(0, L_D) + \frac{1}{x_D^2} h^d(\lambda, t_c)\right]\right\} = \frac{t_c}{L^d \Delta} + \frac{t_c}{t_c^{\circ}}\left[(d-2)g_d(0, L_D) - 1\right], \qquad /10/$$

где $t_c^{\circ} = (d-2)a^d/S_d x_D^{d-2}$ - критическая температура фазового перехода при $N \to \infty$ в классическом пределе $\lambda = 0$. В /10/ использованы следующие сокращенные обозначения:

$$g_d(\Delta, L_D) = \int_{1/L_D}^{1} \frac{z^{d-1}dz}{(\Delta/x_D)^2 + z^2}, \quad g_d(0, L_D) = (d-2)^{-1}(1 - L_D^{2-d}),\ d > 2,$$

$$g'_d(0, L_D) \equiv \frac{d g_d(\Delta, L_D)}{d\Delta}\Big|_{\Delta=0} = -\frac{1}{x_D^2}\begin{cases} \dfrac{1 - L_D^{4-d}}{d-4} & \text{при} \quad d \neq 4 \\ \ln L_D & \text{при} \quad d = 4 \end{cases} \qquad /11/$$

и

$$h^d(\lambda, t_c) = \frac{1}{d}\frac{B_4}{4!}\left(\frac{\lambda x_D}{t}\right)^4 + \frac{2}{d+2}\frac{B_6}{6!}\left(\frac{\lambda x_D}{t}\right)^6 + \ldots . \qquad /12/$$

Из уравнения /10/ для главного члена в асимптотическом поведении $\Delta_N(t_c)$ получаем:

$$\bar{\Delta}_N(t_c) \approx \begin{cases} \dfrac{a^2}{4\pi}\cdot\dfrac{1}{L^2} & d = 3 \\ \dfrac{a^2}{\sqrt{2}\,\pi}\cdot\dfrac{1}{L^2(\ln L)^{1/2}} & d = 4 \\ \dfrac{\sqrt{t_c}}{1 - (d-2)(t_c/t_c^{\circ})h^d(\lambda, t_c)x_D^{-2}}\cdot\dfrac{1}{L^{d/2}} & d \geq 5. \end{cases} \qquad /13/$$

Следовательно, восприимчивость $\chi_N(q \to 0, t = t_c) \sim \bar{\Delta}_N^{-1}(t_c)$ большой, но конечной системы возрастает согласно /13/ по закону:

$$\chi_N(q \to 0, t = t_c) \approx \begin{cases} N^{2/3} & d = 3 \\ (N \ln N)^{1/2} & d = 4 \\ N^{1/2} & d \geq 5. \end{cases} \qquad /14/$$

Таким образом, учет квантовых флуктуаций не влияет на асимптотическое поведение восприимчивости при $t_c \geq 0$ - оно совпадает с полученным в /9/ классическим поведением при $\lambda = 0$.

Оценим теперь флуктуационный параметр /7/ в соотношении /6/. При $t > 0$ для оценки сверху можем использовать неравенство: $(1/x)\operatorname{cth} x < 1/x^2 + 1/3$. В результате получаем:

$$\xi_N(t) < \frac{\lambda}{144 t^2 N} + \frac{\lambda^2}{6N^2}\sum_q \frac{1}{\bar{\Delta}_N + s^2 q^2} + \frac{t^2}{N^2}\sum_q \frac{1}{(\bar{\Delta}_N + s^2 q^2)^2}. \qquad /15/$$

Первый член при $t_c > 0$ имеет порядок $\mathcal{O}(1/N)$. В случае $d > 2$ второй член тоже имеет порядок $\mathcal{O}(1/N)$. Для оценки последнего слагаемого в /15/ запишем его в виде суммы:

$$\xi_N(t) \equiv \xi_N^{(0)}(t) + \xi_N^{(1)}(t) = \frac{t^2}{N^2\bar{\Delta}_N^2} + \frac{t^2}{N^2}\sum_{q\neq 0}(\bar{\Delta}_N + s^2q^2)^{-2}. \qquad /15a/$$

Используя /13/, находим:

$$\xi_N^{(0)}(t_c) \approx \begin{cases} \mathcal{O}(1/N^{2/3}) & d = 3 \\ \mathcal{O}(\sqrt{\ln N}/N^{3/2}) & d = 4 \\ \mathcal{O}(1/N) & d > 5 \end{cases} \qquad /16/$$

и $\xi_N^{(0)}(t > t_c) \approx \mathcal{O}(1/N^2)$.

Оценка $\xi_N^{(1)}(t)$ в /15a/ проводится аналогично[9], и с учетом /13/ дает:

$$\xi_N^{(1)}(t > t_c) < \xi_N^{(1)}(t_c) \approx \begin{cases} \mathcal{O}(1/N^{2/3}) & d = 3 \\ \mathcal{O}(\ln N/N) & d = 4 \\ \mathcal{O}(1/N) & d \geq 5. \end{cases} \qquad /17/$$

Следовательно, для всех $t \geq t_c > 0$ и $d > 2$ параметр /15/ в термодинамическом пределе имеет оценку: $\xi_N(t) \leq \mathcal{O}(N^{-\rho})$, $\rho > 0$, что и доказывает, согласно /6/, термодинамическую эквивалентность модельной /2/ и аппроксимирующей /3/ систем:

$$\lim_{N\to\infty} f_N[H] = \max_{\Delta} \lim_{N\to\infty} f[H_0(\Delta)]. \qquad /18/$$

2.2. Низкотемпературное критическое поведение

Рассмотрим решение уравнения самосогласования /9/ в пределе $N \to \infty$ и $t_c \to 0$, $t_c > 0$. Используя представление $\operatorname{cth} z = 1 + 2/(e^z - 1)$, проведем интегрирование в /9/, пользуясь разложением экспоненты в виде бесконечного ряда по z. В частном случае $d = 3$ в области температур $\ln(\theta/T) \equiv \ln(x_D\lambda/t) \gg 1$ для восприимчивости системы $\chi_\infty(q = 0, T \to T_c) \equiv \chi(T) = (\nu_0^2\Delta_\infty)^{-1}$ получаем уравнение:

$$\{1 - 2gx_D^2[1 + \frac{2\pi^2}{3}(\frac{T}{\theta})^2]\}\,\nu_0^2\chi(T) + \pi g x_D \nu_0\sqrt{\chi(T)} + [1 + g\ln(\frac{\theta}{T})^2] = 0, \qquad /19/$$

где введена константа связи $g = (\lambda S_3/8a^3)$, малая для переходов типа смещения, и температура Дебая $\theta = \hbar\nu_0 x_D = \hbar c q_D$, $q_D = (2\pi/a)(L_D/L)$.

Из уравнения /19/ получаем выражение для температуры перехода

$$T_c = \frac{\sqrt{3}}{2\pi}\,\frac{\theta}{x_D}\,\frac{1}{\sqrt{g}}(1 - 2gx_D^2)^{1/2}, \qquad /20/$$

и при $T \to T_c$ уравнение /19/ принимает вид:

$$-\frac{4}{3}\pi^2\nu_0^2\frac{x_D^2}{\theta^2}g(T^2 - T_c^2)\chi(T) + \pi x_D\nu_0 g(\frac{T_c}{\theta})\sqrt{\chi(T)} + [1 + g\ln(\frac{\theta}{T_c})^2] = 0. \qquad /21/$$

Нетрудно написать решение квадратного уравнения /21/ для $\chi(T)$ в общем случае. Приведем здесь лишь выражения для $\chi(T)$ вне критической области:

$$\chi(T) = \frac{3}{(2\pi)^2}\cdot\frac{\theta}{\nu_0^2 x_D^2}\cdot\frac{1 + g\ln(\theta/T_c)^2}{g(T^2 - T_c^2)}, \qquad /22/$$

когда

$$Gi = \frac{3}{2\pi^3}\,\frac{g}{1 + g\ln(\theta/T_c)^2} \ll \frac{T^2 - T_c^2}{T_c^2}, \qquad /23/$$

и в критической области:

$$\chi(T) = \frac{9\pi^2}{16}\cdot\frac{\theta^2}{\nu_0^2 x_D^2}\cdot\frac{1}{(T - T_c)^2}, \qquad /24/$$

когда в /23/ выполняется противоположное неравенство.

Вычисления для размерности $d = 4$ дают следующие результаты для критической температуры и восприимчивости в низкотемпературном пределе в уравнении /9/:

$$T_c = \frac{\theta}{2}\left[\frac{1}{2\zeta(3)}\left(\frac{1}{gx_D^3} - \frac{2}{3}\right)\right]^{1/3}, \qquad /25/$$

$$\chi(T) = \frac{1}{12\zeta(3)}\cdot\frac{\theta^2}{\nu_0^2 x_D^2}\,\frac{\ln(T/T_c - 1)}{(T - T_c)T_c}. \qquad /26/$$

Как и в классическом пределе[9], размерность $d = 4$ является граничной: индекс $\gamma = 1$, и в близкой окрестности T_c существенны логарифмические поправки.

3. КВАНТОВЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ $T = 0$

Полученные в предыдущем разделе результаты не допускают прямого обобщения на случай $T = 0$ /см. напр./10/, /15//. Поэтому чисто квантовый случай нулевой температуры мы рассматриваем отдельно для каждой из размерностей $d = 1,2,3$ и $d \geq 4$. В этом случае уравнение самосогласования /5/ и выражение для параметра /7/ могут быть записаны в виде:

$$\Delta = -1 + \frac{\lambda}{2N\sqrt{\Delta}} + \frac{\lambda}{2} I_d(\Delta), \qquad /27/$$

$$\xi_N(\lambda) = \frac{\lambda^2}{4N^2\bar{\Delta}_N} + \frac{\lambda^2 x_D^{d-2}}{4N} g_d(\bar{\Delta}_N, L_D), \qquad /28/$$

где функция

$$I_d(\Delta) = \frac{1}{N}\sum_{q\neq 0} \frac{1}{(\Delta + s^2 q^2)^{1/2}} \approx \frac{S_d}{a^d}\int_{x_1}^{x_D} \frac{x^{d-1}\,dx}{(\Delta + x^2)^{1/2}}. \qquad /29/$$

Как следует из /27/, при достаточно больших значениях квантового параметра $\lambda > \lambda_c$, щель в спектре $\Delta(\lambda > \lambda_c) > 0$, и фазовый переход отсутствует даже при $T = 0$. Рассмотрим далее фазовый переход по константе λ, полагая $T = 0$. Подобный переход в реальных системах можно наблюдать, действуя внешним давлением или меняя параметр λ с помощью внесения примесей [2,3].

3.1. Одномерная система

При $d = 1$ уравнение /27/ приобретает вид:

$$\Delta = -1 + \frac{\lambda}{2L\sqrt{\Delta}} + \frac{\lambda}{a} \ln\left| \frac{x_D + \sqrt{\Delta + x_D^2}}{x_1 + \sqrt{\Delta + x_1^2}} \right|. \qquad /30/$$

При любых λ всегда $\bar{\Delta}_L > 0$, и фазовый переход в одномерной системе отсутствует. В пределе $L \to \infty$ для $a/\lambda \gg 1$ из /30/ получаем решение: $\bar{\Delta}_\infty \approx (2x_D)^2 \exp(-2a/\lambda)$.

Оценка /28/ в этом случае показывает, что $\xi_N(\lambda) \sim O(1/L)$, и для вычисления энергии системы можно использовать формулу /8/ при $t = 0$.

3.2. Двумерная система

Уравнение самосогласования при $d = 2$, согласно /27/, /29/, имеет вид:

$$\Delta = -1 + \frac{\lambda}{2L^2\sqrt{\Delta}} + \frac{\pi\lambda}{a^2}\left(\sqrt{\Delta + x_D^2} - \sqrt{\Delta + x_1^2}\right). \qquad /31/$$

Решая это уравнение в пределе $L \to \infty$ и $\Delta \ll x_D^2 = a^2/\pi$, находим:

$$\sqrt{\Delta_\infty} = \sqrt{\left(\frac{\lambda}{2\lambda_c}\right)^2 + \epsilon} - \frac{\lambda}{2\lambda_c^2}, \qquad /32/$$

где $\lambda_c = a/\sqrt{\pi}$, $\epsilon = (\lambda/\lambda_c - 1) > 0$.

Заметим, что в термодинамическом пределе уравнение самосогласования /9/ в двумерном случае может быть записано для $t \neq 0$ в виде:

$$\Delta = -1 + \frac{\lambda\pi}{a^2}\left\{\sqrt{\Delta + x_D^2} - \sqrt{\Delta} + \frac{2t}{\lambda}\ln\left[\left(1 - \exp\left(-\frac{\lambda}{t}\sqrt{\Delta + x_D^2}\right)\right)/\left(1 - \exp\left(-\frac{\lambda}{t}\sqrt{\Delta}\right)\right)\right]\right\}.$$

Решение его $\Delta(t_c, \lambda) = 0$ существует лишь при $t_c = 0$, то есть фазовый переход в модели возможен только при нулевой температуре по константе λ.

В области среднего поля, $\epsilon \gg \pi/4a^2$, решение /32/ ведет себя как

$$\bar{\Delta}_\infty(\lambda) \approx \epsilon(1 - 1/\lambda_c\sqrt{\epsilon}) \sim \epsilon^\gamma, \quad \gamma = 1, \qquad /33а/$$

а в критической области, $\epsilon \ll (\lambda/2\lambda_c^2)^2 \approx \pi/4a^2 \ll 1$, как

$$\bar{\Delta}_\infty(\lambda) \approx \lambda_c^2\epsilon^2 \sim \epsilon^\gamma, \quad \gamma = 2. \qquad /33б/$$

Для оценки параметра /28/ при $d = 2$ получаем

$$\xi_N(\lambda) = \frac{\lambda^2}{4L^4\bar{\Delta}_L} + \frac{\lambda^2}{4}\,\frac{\pi}{a^2L^2}\ln\left|\frac{\bar{\Delta}_L + x_D}{\bar{\Delta}_L + a/L}\right|. \qquad /34/$$

Решение уравнения /31/ при конечном L дает $\bar{\Delta}_L(\lambda_c) \approx \approx (a^2/4\pi^2)(1/L^2)$, и поэтому

$$\xi_N(\lambda) = \begin{cases} O(1/L^2), & \epsilon > 0 \\ O(\ln L/L^2), & \epsilon = 0, \end{cases} \qquad /35/$$

что соответствует результатам для классической системы при $d = 3$ [9].

Таким образом, для $d = 2$ в системе /2/ при $T = 0$ имеет место фазовый переход по константе λ с оценкой /35/ для разности свободных энергий /6/ модельной /2/ и аппроксимирующей /3/ систем.

3.3. Трехмерная система

После интегрирования в /29/ при $d = 3$ для уравнения самосогласования /27/ получаем:

$$\Delta = -1 + \frac{\lambda}{2L^3\sqrt{\Delta}} + \frac{\pi\lambda}{a^3}\{x_D\sqrt{\Delta + x_D^2} - x_1\sqrt{\Delta + x_1^2} - \Delta \ln\left|\frac{x_D + \sqrt{\Delta + x_D^2}}{x_1 + \sqrt{\Delta + x_1^2}}\right|\} \qquad /36/$$

В пределе $L \to \infty$ решение $\bar{\Delta}_\infty(\lambda_c) = 0$ определяет значение $\lambda_c = a^3/\pi x_D^2$, а при $\lambda > \lambda_c$ решение находится из уравнения:

$$\Delta = \epsilon - \frac{\lambda}{\lambda_c}\frac{\Delta}{x_D^2}\ln\frac{2x_D}{\sqrt{\Delta}}, \qquad /37/$$

где мы опустили малые члены $\Delta \ll x_D = a(3/4\pi\sqrt{2})$, полагая $a \gg 1$.

Возможны две области значений $\epsilon = \lambda/\lambda_c - 1 > 0$:

а/ $\epsilon \gg 4x_D^2 e^{-2x_D^2} \sim a^2 e^{-a^2}$. Интегрируя уравнение /37/, находим:

$$\bar{\Delta}_\infty \approx \epsilon[1 - \frac{\lambda}{\lambda_c}\frac{1}{x_D^2}\ln\frac{2x_D}{\sqrt{\epsilon}}]. \qquad /38а/$$

Нетрудно проверить, что в этой области второй член здесь - малая поправка.

б/ $\epsilon \ll a^2 e^{-a^2}$ - флуктуационная область. Решение уравнения /37/ можно записать в виде:

$$\bar{\Delta}_\infty \approx \epsilon[1 + \frac{1}{x_D^2}\ln\frac{2x_D}{\sqrt{\epsilon}}]^{-1} \sim x_D^2\epsilon\,|\ln\epsilon|^{-1}. \qquad /38б/$$

Следовательно, для трехмерной системы в квантовом пределе, $T_c = 0$, получаем для восприимчивости $\chi^{-1}(\epsilon) = \nu_0^2\Delta(\epsilon) \sim \epsilon^\gamma$ критический индекс $\gamma = 1$ с логарифмическими поправками, что соответствует в классическом пределе, $\lambda = 0$, поведению системы при $d = 4$.

Решая уравнение /36/ при больших, но конечных L и для $\epsilon = 0$, находим

$$\bar{\Delta}_L(\lambda_c) \approx \frac{a^2}{L^2}\frac{1}{(2\pi\ln L_D)^{2/3}} \sim \frac{1}{L^2(\ln L)^{2/3}}. \qquad /39/$$

Для параметра /28/ при $d = 3$ с учетом /38/, /39/ находим следующие оценки:

$$\xi_N(\lambda > \lambda_c) \approx \frac{\lambda^2}{4N^2\epsilon} + \frac{\pi\lambda^2}{a^3 N}[x_D - \sqrt{\epsilon}\,\mathrm{arctg}\frac{x_D}{\sqrt{\epsilon}}] \sim \mathcal{O}(\frac{1}{N}),$$
$$\xi_N(\lambda_c) \approx \frac{\lambda^2}{N}\{\frac{1}{4N^{1/3}}\frac{[(2\pi/3)\ln N]}{a^2} + \frac{\pi x_D}{a^3}\} \sim \mathcal{O}(\frac{1}{N}). \qquad /40/$$

Следовательно, при $N \to \infty$ системы /2/ и /3/, согласно оценке /6/, термодинамически эквивалентны.

3.4. Размерность $d \geq 4$

Для размерности $d > 3$ можно пренебречь флуктуационными поправками в правой части уравнения самосогласования /27/ и получить решение при произвольных $d \geq 4$. Полагая $\Delta = 0$ в /29/ при $d \geq 4$, находим решение /27/ в виде:

$$\bar{\Delta}_\infty(\lambda) \approx \epsilon, \quad \bar{\Delta}_N(\lambda_c) \approx (\frac{\lambda_c}{2N})^{2/3}, \qquad /41/$$

и для оценки /28/ получаем:

$$\xi_N(\lambda) \approx \frac{\lambda}{2N}(\frac{\lambda}{2N\bar{\Delta}_N} + \frac{1}{x_D}\frac{d-1}{d-2}) \sim \mathcal{O}(\frac{1}{N}), \qquad /42/$$

где $\lambda_c = 2(d-1)a/S_d(L_D/L)^{d-1}$. Полученные выражения интересно сопоставить с соответствующими выражениями при $d \geq 5$ в классическом пределе, $\lambda = 0$, $\tau = (T_c/T - 1) \to 0$

$$\Delta_\infty(\tau) \approx \tau, \quad \Delta_N(\tau_c) \approx (\frac{t_c}{N})^{1/2}, \qquad /43/$$

$$\xi_N(\tau) \approx \frac{T}{N}\{\frac{t_c^0}{N\Delta^2} + \frac{t}{t_c}\frac{d-2}{d-4}\frac{1}{x_D^2}\} \sim \mathcal{O}(\frac{1}{N}), \qquad /44/$$

где $t_c^0 = (d-2)a^2/S_d(L_D/L)^{d-2}$ - температура фазового перехода в классическом пределе.

4. ОБСУЖДЕНИЕ

В работе исследована модель структурного фазового перехода, допускающая точное в термодинамическом пределе решение. При этом удалось в аналитическом виде исследовать фазовый переход как для классического, так и для квантового случая при произвольной размерности пространства d, что является замечательным свойством данной модели. В этой связи заметим, что сферическая модель Берлина-Каца, которая в литературе /см., напр.,[11]/ считается единственной нетривиальной моделью фазового перехода, допускающая точное решение для $d \geq 3$, является чисто классической.

Нами было показано, что квантовые флуктуации приводят к подавлению фазового перехода: согласно /20/ и /25/, $T_c \to 0$ при увеличении квантового параметра $g \sim \lambda$.

В разделе 2 исследовано низкотемпературное поведение восприимчивости, в основном для наиболее интересного частного случая $d = 3$. Интересно отметить, что полученное нами выражение для восприимчивости вне флуктуационной области /22/ совпадает с точностью до численного множителя при $g\ln(\theta/T_c)$ с результатами, полученными в работах[1,3] в рамках более реалистичной модели, но в "паркетном" приближении. Это показывает, что приближение самосогласованных фононов, которое для модели /1/ является точным, эквивалентно суммированию паркетных диаграмм [12]. В отличие от работ [1-8], в рамках модели /1/ исследована и флуктуационная область, которая, согласно /23/, при оценках для параметров $g = 10^{-2}$, $\theta = 100$ K и $T_c = 10$ K [1], составляет $\tau = (T/T_c - 1) \sim 10^{-8}$. В этой области при $T_c > 0$ наблюдается такое же поведение, как и в классическом пределе $\lambda = 0$, рассмотренном в [9]. В частности, критический индекс $\gamma = 2$ при $d = 3$ и $\gamma = 1$ при $d \geq 4$ с логарифмическими поправками при $d = 4$ /см./24/ и /26//. Кроме того, согласно /14/, асимптотическое поведение восприимчивости $\chi_N(q \to 0, T = T_c)$ при больших N не зависит от квантовых эффектов.

В чисто квантовом пределе, $T_c = 0$, на примере вычисления восприимчивости нами было строго доказано, что имеет место "размерный кроссовер" /см. также [4-6]/, согласно которому критическое поведение квантовой d-мерной системы эквивалентно поведению классической $d+1$ мерной системы при $T_c > 0$ /см. /33б/ для $d = 2$, /38б/ для $d = 3$ и /41/, /43/ для остальных d/.

Поскольку модель /1/ допускает точное вычисление свободной энергии в виде /8/, то возможно исследование критического поведения и другиx термодинамических величин /теплоемкости, параметра порядка и т.д./. В принципе возможно также и вычисление всех корреляционных функций как в классическом, так и в квантовом пределе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Речестер А.Б. ЖЭТФ, 1971, 60, с.782.
2. Хмельницкий Д.Е., Шнеерсон В.Л. ФТТ, 1971, 13, с.832.
3. Хмельницкий Д.Е., Шнеерсон В.Л. ЖЭТФ, 1973, с.316.
4. Busiello G., De Cesare L., Rabuffo I. Physica, 1983, 117A, p.445.
5. Morf R., Schneider T., Stoll E. Phys.Rev., 1977, 16B,p.462.
6. Millev Y.T., Uzunov D.I. J.Phys.C: Solid State Phys., 1983, 16, p.4107.
7. Schneider T., Beck H., Stoll E. Phys.Rev., 1976, B13,p.1123.
8. Schneider T., Stoll E., Beck H. Physica, 1975, 79A, p.201.
9. Плакида Н.М., Тончев Н.С. ТМФ, 1985, 63, с.270.
10. Боголюбов Н.Н. /мл./ и др. Метод аппроксимирующего гамильтониана в статистической физике. Изд-во БАН, София, 1981, с.5-245.
11. Thompson C.J. Phase Transitions in Exactly Soluble Models. In: Recent Advances in Statistical Mechanics. Brasov Int.School, Romania, 1979.
12. Аксенов В.Л., Плакида Н.М. ТМФ, 1978, 34, с.353.

Рукопись поступила в издательский отдел
29 мая 1985 года.

Плакида Н.М., Тончев Н.С. P17-85-400
Квантовые эффекты в d-мерной точно решаемой модели структурного фазового перехода

Рассмотрена точно решаемая d-мерная модель структурного фазового перехода с дальнодействующим ангармоническим взаимодействием в квантовой области температур перехода $T_c \to 0$. Показано, что квантовые флуктуации приводят к подавлению фазового перехода, но при $T_c > 0$ не меняют критического поведения. Последнее становится чисто квантовым при $T_c = 0$, когда выполняется правило "размерного кроссовера", согласно которому критическое поведение квантовой d-мерной системы при $T_c = 0$ и классической $d+1$-мерной эквивалентны. Получены также выражения для восприимчивости в этих случаях при больших, но конечных размерах системы.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод авторов

Plakida N.M., Tonchev N.S. P17-85-400
Quantum Effects in d-Dimensional Exactly Soluble Model for Structural Phase Transition

Exactly soluble d-dimensional model of a structural phase transition with a long-range anharmonic interaction is considered in the low temperature region $T_c \to 0$ when the quantum effects are essential. It is shown that the quantum fluctuations lead to a suppression of the phase transition. However, at $T_c > 0$ they do not change the critical behaviour. The latter becomes pure quantum mechanical at $T_c = 0$ when the dimensional crossover is fulfilled, according to which the critical behaviour of a d-dimensional quantum system ($T_c = 0$) and of a(d+1)-dimensional classical system ($T_c > 0$) becomes equivalent. Temperature and volume dependences of the susceptibility are investigated for all $d \geq 1$.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985