

С 326

Ш-962



**ЛЕКЦИИ  
ДЛЯ МОЛОДЫХ  
УЧЕНЫХ**

А.С.Шумовский, В.И.Юкалов

**ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ  
И ПЕРЕХОДЫ**

**ДУБНА**



ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

P17-85-676

C 326

А.С.Шумовский, В.И.Юкалов

III - 962

ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ И ПЕРЕХОДЫ

125587

Объединенный институт  
ядерных исследований  
БИБЛИОТЕКА

Дубна 1985

## СО Д Е Р Ж А Н И Е

ВВЕДЕНИЕ	3
Лекция 1. Экспериментальные характеристики	6
Лекция 2. Термодинамические величины	21
Лекция 3. Модельные гамильтонианы	38
Лекция 4. Вырождение и квазисредние	50
Лекция 5. Методы квазиусреднения	65
Лекция 6. Явление конденсации	75
Лекция 7. Гомогенные флуктуации	86
Лекция 8. Метод трансфер-матрицы	98
Лекция 9. Ренормгрупповой подход	106
Лекция 10. Флуктуации и неустойчивость	120
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	134
ЛИТЕРАТУРА	135

*"Рассказчик берет на себя смелость утверждать, что книга сия отличается от большей части современных произведений такого рода, толь многие из них были приняты публикой благосклонно".*

*Даниэль Дефо "Роксана"*

### ВВЕДЕНИЕ

В последнее время исследованию фазовых переходов и связанных с ними критических явлений уделяется очень большое внимание. Вызвано это, прежде всего, следующими обстоятельствами.

Во-первых, различные фазовые переходы постоянно используются в современной технике и технологии. Чтобы не быть голословными, приведем несколько примеров.

Известно, что при освещении полупроводников в них может возникнуть фотоздс. По величине фотоздс пропорциональна ширине запрещенной зоны и обычно не превышает нескольких вольт. Однако сравнительно недавно было обнаружено<sup>/1,2/</sup>, что в полупроводниках, являющихся одновременно сегнетоэлектриками, при переходе из параэлектрической в сегнетоэлектрическую фазу может возникнуть фотоздс, достигающая величины порядка  $10^5$  В /аномальный фотовольтаический эффект/. Это явление используется в настоящее время для записи голограмм<sup>/3/</sup>.

В 1949 г. Мотт<sup>/4/</sup> теоретически показал возможность превращения некоторых проводников в изоляторы при понижении температуры. Примерно десять лет спустя такой переход был обнаружен в окиси ванадия и ряде других соединений. Сейчас на использовании этого явления основан принцип действия индикаторных плат и различных устройств автоматического контроля температуры<sup>/5/</sup>.

Укажем также примеры, относящиеся к технологии. Хорошо известно, какое значение для современной электроники имеют кристаллы и с какими трудностями связано их выращивание. Обычно этот процесс идет достаточно медленно. Оказалось, однако, что облучение фотонами может заметно увеличить скорость роста ряда кристаллов<sup>/6/</sup>. Даже обычный лед обрабатывается гораздо быстрее, если на него воздействовать ультрафиолетовым излучением<sup>/7/</sup>. Более того, воздействие фотонов может привести к изменениям в плотности и ориентации полупроводниковых кристаллов, что также используется при изготовлении материалов для электроники.

Если расплавленную сталь очень быстро охладить, например, выливая жидкий металл на вращающийся медный барабан, непрерывно охлаждае-

мый до азотных температур, то образуется аморфное состояние - сталь без кристаллической структуры, т.е. металлическое стекло. Это происходит потому, что при столь быстром охлаждении жидкой стали молекулы просто не успевают образовать упорядоченную в пространстве структуру. Вещество остается в метастабильном фазовом состоянии, имеющем хотя и большое, но все же конечное время жизни /от нескольких лет до нескольких десятков лет/. В конце концов такое металлическое стекло кристаллизуется. Но оно настолько отличается от обычной стали - обладает пластичностью и значительно большей электропроводностью - что его охотнее выгодно использовать в технике, в частности, для приготовления обмоток трансформаторов.

Другое обстоятельство связано с тем, что само понятие фазового перехода, традиционно относившееся к физике конденсированного состояния, в последние годы проникло и укоренилось в самых различных областях физики, химии, даже биологии. Так, в ядерной физике принято говорить о фазовом переходе в связи с аномальным поведением момента инерции тяжелых ядер в области больших значений угловой частоты /back banding/ /8,9/. В квантовой хромодинамике деконфайнмент интерпретируют как фазовый переход из адронного состояния в состояние кварк-глюонной плазмы /10/. В квантовой радиофизике генерацию лазерного излучения описывают как фазовый переход, связанный с достижением порога накачки активной среды /11/. Химическая реакция Белоусова-Жаботинского, периодичность в изменении популяции рысей в лесах Канады /12/, образование тропических ураганов и многие другие явления связаны с фазовыми переходами. При этом особенно важно то, что фазовые переходы и критические явления, происходящие в разных по физической природе системах, обладают общими чертами и могут быть описаны в рамках единого подхода. Это обстоятельство позволяет рассматривать теорию фазовых переходов и критических явлений как самостоятельную научную дисциплину.

Все это приводит к непрерывно возрастающему потоку публикаций в периодических изданиях. Теме фазовых переходов посвящаются конференции, симпозиумы, семинары, публикуются многочисленные монографии /см., например, /13-18/.

В ноябре 1982 г. авторы настоящего курса прочли четыре лекции под общим названием "Спонтанные нарушения симметрии и критические явления" в рамках XV Международной школы по физике высоких энергий /19/. Цель этих лекций состояла в том, чтобы познакомить специалистов в области физики элементарных частиц и квантовой теории поля с основными положениями и методами теории фазовых переходов и критических явлений. По объему и характеру изложения эти лекции /19/ представляют собой крат-

кое введение в предмет. Год спустя, осенью 1983 г., авторы получили возможность прочесть в Объединенном институте ядерных исследований более продолжительный курс лекций, изложению которого и посвящено настоящее издание.

При чтении лекций и подготовке их к публикации мы стремились при условии максимальной простоты и наглядности изложения подчеркнуть общность проблемы фазовых переходов, универсальность применяемых в ней методов и моделей. Это с неизбежностью привело к тому, что центральное место в курсе занимают вопросы о вырождении вакуума в макроскопических системах и фундаментальная концепция квазисредних Н.Н.Боголюбова /20,21/, играющая особую роль в теории фазовых переходов и критических явлений. Последовательно прослеженная взаимосвязь фазового перехода и спонтанного нарушения симметрии в системе позволяет с единой точки зрения описывать фазовые переходы как первого, так и второго рода, а также построить микроскопическую теорию гетерофазных состояний.

Мы признательны академику Н.Н.Боголюбову за внимание к нашей работе и постоянную поддержку. Ряд вопросов, затронутых в настоящем курсе, в разное время обсуждался с А.М.Балдиным, Н.Н.Боголюбовым /мл./, П.Н.Боголюбовым, А.В.Ефремовым, В.К.Лукьяновым, И.Н.Михайловым, С.В.Пелетминским, М.Разетти, Б.И.Садовниковым, Р.Стинчкомбом, Д.Тер Хааром, С.Фраундорфом, Н.А.Черниковым, Д.В.Щирковым, И.Р.Южновским, которым мы, пользуясь случаем, выражаем глубокую благодарность. Мы также благодарны всем слушателям наших лекций за вопросы и дискуссии, способствовавшие улучшению изложения.

### Лекция 1. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Выше мы говорили о фазовом переходе как об интуитивном понятии. Теперь постараемся перейти к более конкретным формулировкам.

Фазовое состояние /или просто фаза/ - состояние макроскопической системы, качественно отличающееся по своим характеристикам от других состояний той же системы.

Фазовый переход - качественное изменение состояния системы при непрерывном, бесконечно малом изменении внешних параметров. С учетом предыдущего определения можно сказать, что это переход из одного фазового состояния системы в другое.

Критические явления - это особенности поведения системы вблизи фазового перехода.

В связи с этими определениями естественно возникает вопрос: какое изменение состояния системы можно считать "качественным" и какие параметры внешними? Чтобы ответить на этот вопрос, рассмотрим некоторые экспериментальные данные.

**Магнитное упорядочение.** Это явление наблюдается у чистых переходных элементов /3-d и 4-f-элементы таблицы Менделеева/, сплавов, интерметаллических соединений и сильно разбавленных растворов атомов на основе этих элементов. Среды с магнитным упорядочением делятся на три группы.

Ферромагнетики - вещества с параллельным упорядочением магнитных моментов в кристаллической решетке /рис. 1/.

Антиферромагнетики - вещества с антипараллельным упорядочением магнитных моментов /рис. 2/. Такую систему можно рассматривать как совокупность двух антипараллельных ферромагнитных подрешеток, вставленных друг в друга \*/.

Ферримагнетики представляют собой набор из двух или нескольких неэквивалентных магнитоупорядоченных подрешеток, расположенных антипараллельно или под углом друг к другу /рис. 3/.

Явление спонтанного магнитного упорядочения наблюдается лишь при температурах ниже некоторой, определенной для каждого вещества точки  $T_0$ ; выше  $T_0$  имеет место магнитный беспорядок, или парамагнитное

\*/ Среди элементов, помимо переходных, к антиферромагнетикам относятся твердый кислород и хром.

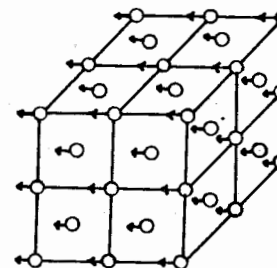


Рис. 1. Ферромагнитное упорядочение в гранцентрированной решетке Ni.

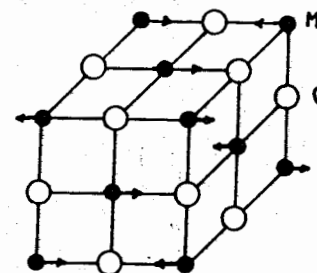


Рис. 2. Антиферромагнитное упорядочение в кубической решетке MnO.



Рис. 3. Ферримагнитное упорядочение в линейной цепочке ионов.

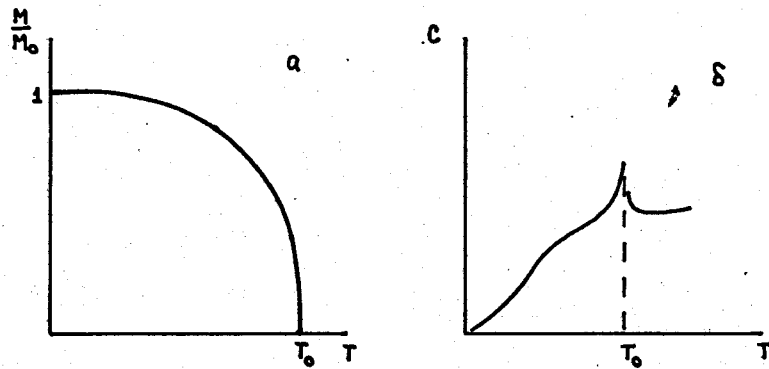


Рис. 4. Спонтанная намагниченность (а) и теплоемкость (б) никеля с  $T_0 = 631\text{K}$ ;  $M_0$  - намагниченность при  $T=0\text{K}$ .

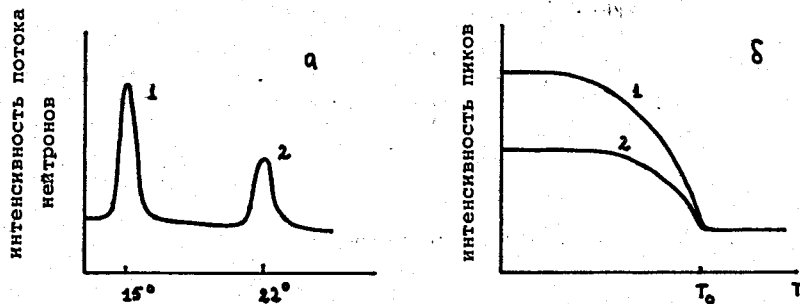


Рис. 5. Угловая зависимость интенсивности потока нейтронов (а) и температурная зависимость пиков (б) для антиферромагнетика  $\text{MnV}_2\text{O}_3$  с  $T_0 = 56\text{K}$ .

состояние. Таким образом, в точке  $T_0$  имеет место качественное изменение состояния таких систем - переход из парамагнитного состояния в магнитоупорядоченное. Какими же параметрами можно характеризовать этот фазовый переход?

В случае ферромагнетика имеет место специфическая зависимость спонтанной намагниченности  $\vec{M}$  /т.е. намагниченности в нулевом внешнем поле/ от температуры /рис. 4а/. Величина  $\vec{M}$  определяется как средний магнитный момент в решетке

$$\vec{M} \equiv N^{-1} \sum_{f=1}^N \vec{m}_f, \quad /1.1/$$

где  $\vec{m}_f$  - средний магнитный момент  $f$ -го иона и  $N$  - число магнитных ионов в решетке. Как нетрудно видеть, выше  $T_0$  величина  $\vec{M} = 0$ , тогда как ниже  $T_0$   $|\vec{M}| > 0$ . Таким образом, непрерывно меняющимся внешним параметром для этого перехода является температура, а особенность в поведении спонтанной намагниченности /излом в точке  $T_0$ / позволяет определить температуру фазового перехода. Для ферромагнетиков ее обычно называют точкой Кюри.

При температуре  $T = T_0$  имеют место особенности и других характеристик ферромагнетика, например, скачок /или расходимость/ теплоемкости /рис. 4б/.

Таким образом, о фазовом переходе и точке, в котором он происходит, можно судить по поведению термодинамических величин, в данном случае - спонтанной намагниченности и теплоемкости.

В антиферромагнетике спонтанная намагниченность каждой из подрешеток имеет вид, согласующийся с рис. 4а. Однако в силу антипараллельности подрешеток спонтанная намагниченность всего образца имеет нулевое значение для всех температур. Практически удобным методом точного определения  $T_0$  для антиферромагнетиков /точки Кюри/ служит рассеяние медленных нейтронов. Так как нейтроны не имеют электрического заряда, но обладают магнитным моментом, их рассеяние в антиферромагнетике будет обусловлено взаимодействием с магнитными ионами, т.е. должно существенно зависеть от магнитного состояния. Действительно, оказывается, что интенсивность пиков рассеяния в разных направлениях /рис. 5а/ имеет характерную зависимость от температуры /рис. 5б/, т.е. от состояния системы. Таким образом, и здесь, как и в случае ферромагнетиков, внешним параметром, бесконечно малое изменение которого приводит к фазовому переходу, является температура.

В случае ферримагнетиков в силу неэквивалентности или неколлинеарности подрешеток спонтанная намагниченность как функция температуры снова является удобной характеристикой фазового перехода /рис. 6/.

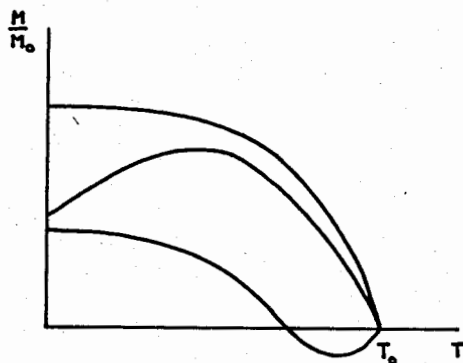


Рис. 6. Типы поведения спонтанной намагниченности, характерные для ферримагнетиков.

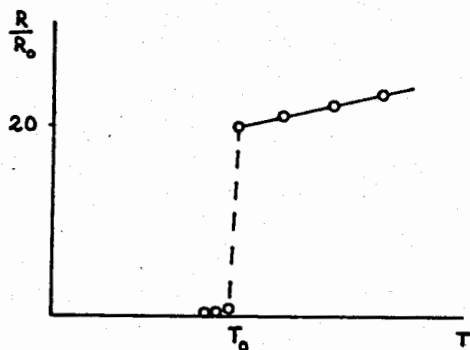


Рис. 7. Температурная зависимость сопротивления Al. Здесь:  $R_0$  - сопротивление при  $T=273$  К;  $T_0=1,2$  К;  $R/R_0=10^{-6}$  при  $T < T_0$ .

Несколько слов о природе магнитного упорядочения. В ферромагнетиках возникновение упорядоченного состояния связано с электростатическим обменным взаимодействием электронов, расположенных в соседних атомах /22,23/. Энергия такого взаимодействия на каждую пару соседних магнитных ионов есть величина порядка  $10^{-13}$  эрг, что соответствует значению температуры перехода порядка  $10^3$  К. Энергия прямого магнитного взаимодействия значительно меньше /  $10^{-16}$  эрг/ и может обеспечить магнитное упорядочение лишь при  $T \lesssim 1$  К. Такой механизм имеет место в  $DyCl_2 \cdot 6H_2O$ . В целом ряде неметаллических ферромагнетиков упорядочение связано с косвенным обменом, при котором взаимодействие между электронами магнитных ионов устанавливается не прямым образом, а через посредство электронов промежуточных магнитно-нейтральных ионов. Например, в ферромагнитном диэлектрике  $EuO$  роль агента-переносчика косвенного взаимодействия между магнитными ионами играют немагнитные ионы  $O^{2-}$ .

В антиферро- и ферримагнетиках за магнитное упорядочение ответственны те же механизмы, что и в ферромагнетиках.

Необходимо отметить, что далеко не всегда ниже  $T_0$  происходит полное магнитное упорядочение, т.е. весь объем образца сразу переходит в магнитоупорядоченное состояние. Как показывает гамма-резонансная спектроскопия, в магнетиках  $CoTi_{1-x}Al_x$ ,  $CoTi_{1-y}Ga_y$  /24,25/ ниже  $T_0$  имеется макроскопическая доля атомов  $Co$ , находящихся в парамагнитном состоянии. При этом разные фазы не локализованы; их взаимное расположение в пространстве непрерывно меняется во времени. При рассмотрении равновесной картины имеет место усреднение по времени. Поэтому равновесное состояние такого ферромагнетика представляет собой смесь двух фаз - ферромагнитной и парамагнитной.

Смесь фазовых состояний одной и той же системы принято называть гетерофазным состоянием.

Сверхпроводимость. При понижении температуры ряд проводников практически полностью теряет сопротивление /рис. 7/. Это явление обусловлено взаимодействием электронов проводимости с колебаниями ионов, образующих остов решетки. При определенных условиях такое взаимодействие приводит к появлению пар электронов с противоположно направленными импульсами и спинами /26,27/. Эти пары образуют сверхтекучий бозе-конденсат.

Температурное поведение сопротивления /рис. 7/, как нетрудно видеть, ничем не напоминает температурного поведения различных характеристик магнитных систем. Однако удастся найти такие параметры сверхпроводящих систем, которые удивительно хорошо согласуются с кривыми на рис. 4. Прежде всего это теплоемкость, также обладающая особенностью в точке перехода /рис. 8а/.

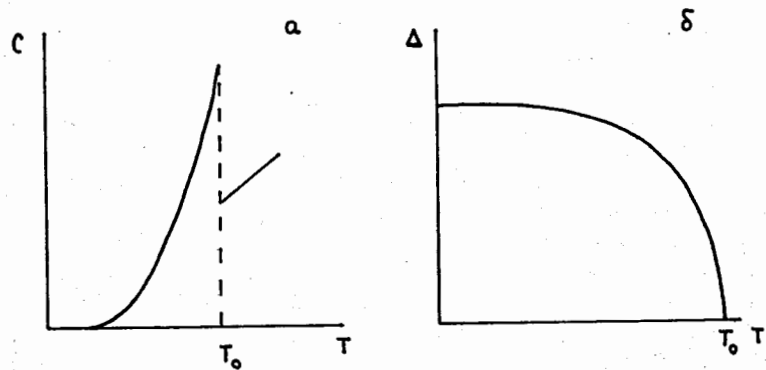


Рис. 8. Температурное поведение теплоемкости (а) и щели (б) для Al.

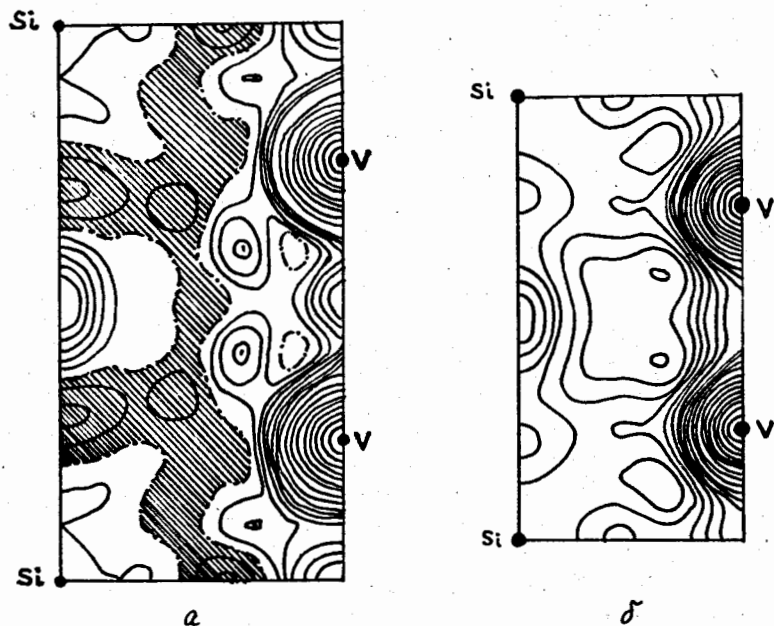


Рис. 9. Тонкое распределение электронной плотности в  $V_3Si$  при  $T=13,5$  К (а) и при  $T=300$  К (б).

Аналогично спонтанной намагниченности ведет себя, для сверхпроводника, величина энергетической щели  $\Delta$  - минимальная энергия, необходимая для создания надконденсатного возбуждения в электронной подсистеме /рис. 8б/.

Таким образом, и в этом случае внешним параметром, характеризующим переход, является температура.

О том, насколько "качественно" меняется состояние сверхпроводника при переходе через  $T_0$ , особенно наглядно позволяют судить эксперименты по изучению тонкого распределения электронной плотности методами рентгеновской спектроскопии /28/.

Результаты этих экспериментов для  $V_3Si$  приведены на рис. 9. Случай /а/ соответствует температуре  $13,5 \text{ К} < T_0 = 16,85 \text{ К}$ , т.е. сверхпроводящей фазе, а случай /б/ -  $T = 300 \text{ К}$ , т.е. почти комнатной температуре. Линии соответствуют изоэнергетическим состояниям электронов. Видно, что плотность распределения состояний и характер связи между ионами сильно меняется при переходе от одной фазы к другой.

Вместе с тем оказывается, что в интервале  $T_0 < T < \tilde{T} = 21 \text{ К}$  в распределении электронной плотности имеются элементы, присущие сверхпроводящей фазе. Таким образом, выше точки перехода в нормальном проводнике уже присутствуют зародыши сверхпроводящего состояния; иначе говоря, здесь наблюдается гетерофазная смесь нормального и сверхпроводящего состояний.

Ниже  $T_0$  в сверхпроводнике также всегда присутствует макроскопическая доля нормальных /неспаренных/ электронов /29/. Их присутствие никак не сказывается на электропроводности, однако может быть обнаружено по другим характеристикам, например, по поведению теплопроводности.

Итак, фазовый переход в сверхпроводниках связан с изменением внешнего параметра - температуры, причем температурное поведение щели и теплоемкости имеет заметное сходство с температурным поведением спонтанной намагниченности и теплоемкости ферромагнетиков.

**Сегнетоэлектричество.** Это свойство присуще классу веществ - кристаллических диэлектриков, в которых при понижении температуры возникает спонтанная поляризация. Это явление связано с небольшими смещениями ионов по отношению к их положению в высокотемпературном параэлектрическом состоянии /рис. 10/, или с упорядочением ориентации электрических диполей, существующих в таких кристаллах, как  $KH_2PO_4$  в обоих фазовых состояниях /30, 31/.

Электрические свойства сегнетоэлектриков очень похожи на магнитные свойства ферромагнетиков. Достаточно сравнить спонтанную поляризацию триглицинсульфата  $(NH_2CH_2COOH)_3 \cdot H_2SO_4$  /рис. 11а/ с намагниченностью  $Ni$  /рис. 4а/, чтобы убедиться в этом.



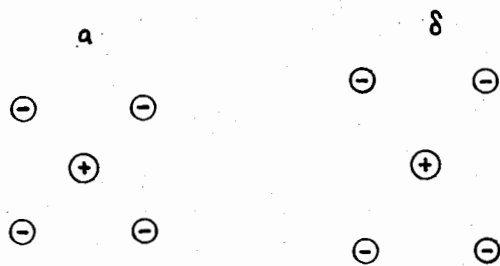


Рис. 10. Расположение ионов в элементарной ячейке сегнетоэлектрика в параэлектрическом (а) и сегнетоэлектрическом (б) состояниях.

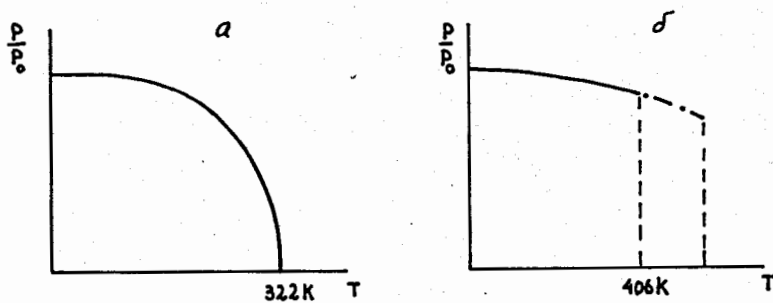


Рис. 11. Спонтанная поляризация триглицинсульфата (а) и титаната бария  $BaTiO_3$  (б).

Для  $BaTiO_3$  и ряда других сегнетоэлектриков спонтанная поляризация в точке перехода меняется не непрерывно, а скачками /рис. 11б/. Кроме того, здесь имеет место температурный гистерезис: при понижении температуры переход в сегнетоэлектрическое состояние происходит при  $T_0 = 406$  К, тогда как при достаточно быстром повышении температуры это состояние может сохраняться в системе вплоть до  $\bar{T} = 416$  К. Состояние сегнетоэлектрического упорядочения в интервале  $406 \text{ К} < T < 416 \text{ К}$  является метастабильным, т.е. имеет конечное время жизни <sup>\*</sup>. Аналогичное скачкообразное поведение спонтанной намагниченности и температурный гистерезис наблюдаются и у некоторых ферромагнетиков.

В сегнетоэлектриках также наблюдаются гетерофазные состояния - макроскопические флуктуирующие зародыши параэлектрической фазы ниже  $T_0$  /32/.

И здесь внешним параметром, связанным с переходом, является температура.

Переход металл-диэлектрик. Выше во Введении мы уже говорили о металлах, которые при понижении температуры превращаются в изоляторы, а не в сверхпроводники. Это явление иллюстрируется кривой зависимости проводимости от температуры /рис. 12/, сильно напоминающей кривую на рис. 7. В точке перехода электропроводность соединения  $V_2O_3$  падает на четыре порядка /5/.

Для объяснения этого перехода по температуре предложены разные механизмы. Один из них основывается на учете взаимодействия электронов, находящихся в разных зонах, при посредстве обмена фононами, т.е. через решетку /модели Фаликова-Кимбала /33/ и Маттиса-Лангера /34//. Другой учитывает возможность локализации электронов проводимости в узлах решетки при наличии кулоновского отталкивания двух электронов на одном узле /модели Андерсона-Хаббарда /35, 36//.

Переходы в ядерных системах. На рис. 13 изображена кривая, очень похожая на рис. 12, 7, но соответствует она зависимости углового момента ядра  $^{152}Dy$  от частоты вращения. Скачок углового момента при  $\Omega = \Omega_0 = 0,28$  МэВ интерпретируется как фазовый переход /37/. По-видимому, это предположение справедливо, так как состояния ядра  $^{152}Dy$  выше и ниже точки  $\Omega_0$  действительно различаются качественно. При  $\Omega < \Omega_0$  ядро  $^{152}Dy$  является сферическим, а при  $\Omega > \Omega_0$  возникает деформация и ядро становится эллиптическим. Подчеркнем, что в этом примере внешним параметром, с изменением которого связан фазовый переход, является уже не температура, а величина частоты вращения ядра  $\Omega$ .

<sup>\*</sup> Ниже будет дано более строгое определение метастабильного состояния.

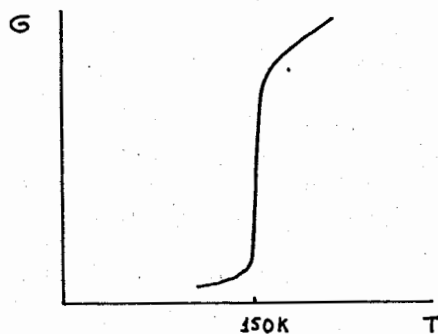


Рис. 12. Температурная зависимость электропроводности соединения  $V_2O_3$ .

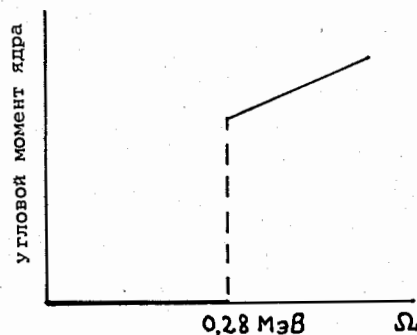


Рис. 13. Зависимость углового момента ядра  $^{152}Dy$  от частоты вращения.

Объяснение этого явления связано с рассмотрением механизма спаривания нуклонов в ядре, впервые предложенного Н.Н.Боголюбовым /38/ /см. также /39/. Ниже  $\Omega_0$  спаривание нуклонов имеет место; ядро представляет собой бозе-конденсатную систему, что и объясняет практически нулевое значение углового момента. Выше  $\Omega_0$  вращение разрушает спаривание, что и приводит к ненулевому угловому моменту /37/.

При фазовых переходах в ядрах может также наблюдаться и явление гистерезиса, напоминающее поведение некоторых сегнетоэлектриков и ферромагнетиков. На рис. 14 изображена соответствующая ситуация для ядра  $^{164}Er$ , момент инерции которого меняется скачком при значении угловой частоты  $\omega_0 \sim 0,29$  МэВ /40/. Однако имеет место возможность "переохлаждения" и "перегрева", т.е. достижения больших значений момента инерции при  $\omega < \omega_0$  и малых при  $\omega > \omega_0$ .

По-видимому, в ядрах также могут наблюдаться гетерофазные состояния. Так, необходимость объяснения промежуточных значений углового момента тяжелых ядер потребовала введения феноменологической модели, описывающей равновесную смесь спаренных и неспаренных нуклонов /41/.

Замечательным примером гетерофазного состояния в ядре может служить наличие мультикварковой примеси, обнаруженное в ряде недавних экспериментов /42-44/, инициированных исследованием кумулятивного эффекта, предсказанного в работах А.М.Балдина /45,46/. Оказывается, что в ядрах помимо нуклонов - мешков с тремя валентными кварками - могут существовать более массивные компактные объекты - мешки, содержащие шесть, девять, двенадцать и т.д. валентных кварков. Мешки с разным числом валентных кварков можно рассматривать как разные фазовые состояния кварк-глюонной материи \*; при этом параметром, изменение которого вызывает фазовый переход, является плотность кварков /47/.

Лазерное излучение. Все рассмотренные выше примеры относились к так называемым равновесным фазовым переходам, при которых состояния системы выше и ниже точки перехода являются равновесными и устойчивыми. Существуют, однако, и динамические фазовые переходы, при которых качественное изменение состояния системы связано с непрерывным изменением внешнего параметра - времени. При этом, естественно, об устойчивости равновесных состояний до и после перехода говорить не приходится. Наглядным примером такой ситуации может служить лазерная система.

Как известно, процесс испускания фотона связан со спонтанным переходом атома из возбужденного состояния в состояние с меньшей энергией. Такое возбуждение атомов может быть реализовано за счет распространения в активной среде световой волны с частотой  $\omega$ , соответствующей

\* С этой точки зрения состояние деконфайнмента можно рассматривать как мешок с бесконечным числом кварков.

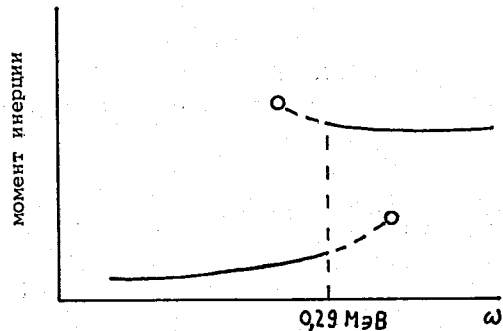


Рис. 14. Явление "гистерезиса" для ядра  $^{164}\text{Er}$ : изображен момент инерции как функция частоты вращения.

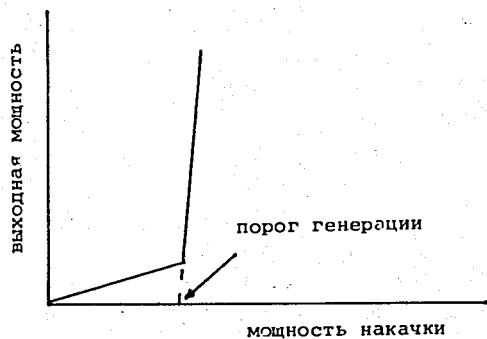


Рис. 15. Зависимость выходной мощности излучения лазера от мощности накачки.

цей разности каких-либо двух энергетических уровней атома. При таком способе накачки к процессам спонтанного испускания добавляются и радиационные процессы, что приводит к увеличению выходной мощности излучения по мере роста мощности накачки /рис. 15/. Однако в условиях термодинамического равновесия населенность нижнего уровня атомов активной среды всегда будет больше, чем верхнего. Увеличение мощности накачки выше порога генерации приводит к созданию инверсной заселенности - когерентного состояния атомной системы, характеризуемого наличием динамического дальнего порядка /12/. В этом состоянии преобладают вынужденные переходы из возбужденного состояния на нижний уровень, что приводит к усилению световой волны накачки и резкому возрастанию выходной мощности излучения /рис. 15/.

Итак, при достижении порогового значения мощности накачки состояние системы активная среда /атомы/ + поле излучения /фотоны/ качественно меняется: в активной среде, состоявшей из первоначально некоррелированных излучателей, возникает дальний порядок /"бесконечный" радиус корреляции/, а излучение становится когерентным и остро направленным. Вместе с тем процесс этот развивается во времени. Максимум интенсивности излучения, соответствующий когерентному состоянию системы излучателей, достигается не сразу после создания инверсной заселенности, а лишь спустя некоторое время  $t_m$  /рис. 16/ /48/. При  $t \gg t_m$  в системе происходит обычное спонтанное испускание.

Динамические фазовые переходы образуют весьма широкий класс физических явлений /см., например, /12/. Методы их описания существенно отличаются от теории равновесных фазовых переходов. В дальнейшем в настоящем курсе мы будем говорить только о равновесных переходах.

Подведем теперь некоторые итоги. Рассмотренные примеры, действительно, иллюстрируют качественный характер изменения состояния систем при фазовых переходах. Последние связаны с непрерывным, бесконечно малым изменением температуры или других термодинамических параметров. При этом качественно меняющиеся величины, характеризующие фазовый переход, также являются термодинамическими параметрами - теплоемкость, намагниченность и т.д. Как известно из курса термодинамики /см., например, /49/, такие величины связаны между собой с помощью термодинамических потенциалов и уравнений состояния. В случае ферромагнетика, например, свободная энергия Гиббса является функцией температуры  $T$  и внешнего поля  $B$ :  $G = G(T, B)$ . Первая производная функции  $G(\cdot)$  по полю определяет намагниченность

$$\vec{M}(T, B) = - \frac{\partial G}{\partial B}$$

Тогда спонтанная намагниченность есть

$$\vec{M}(T, 0) = - \left( \frac{\partial G}{\partial \vec{B}} \right)_{\vec{B}=0} \quad /1.3/$$

Вторая производная по полю определяет магнитную восприимчивость

$$\chi_{\alpha\beta}(T, B) = - \frac{\partial^2 G}{\partial B_\alpha \partial B_\beta} \quad (\alpha, \beta = x, y, z). \quad /1.4/$$

Производные по температуре дают, соответственно, энтропию

$$S(T, B) = - \frac{\partial G}{\partial T} \quad /1.5/$$

и теплоемкость

$$C(T, B) = - T \frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \quad /1.6/$$

Аналогично в случае сегнетоэлектрика внешними параметрами могут быть выбраны температура  $T$  и электрическое поле  $\vec{E}$ :  $G = G(T, \vec{E})$ , откуда для поляризации имеем

$$\vec{P}(T, \vec{E}) = - \frac{\partial G}{\partial \vec{E}} \quad /1.7/$$

Соответствующим образом могут быть определены и другие параметры.

Рассмотренные выше экспериментальные ситуации показывают, что с фазовыми переходами связаны особенности в поведении производных от термодинамических потенциалов, причем эти особенности носят общий характер, и, по-видимому, качественно они не слишком сильно связаны с характером процессов и взаимодействий на микроскопическом уровне, приводящих к фазовым переходам. Иначе говоря, информация о возможности фазового перехода оказывается заложенной где-то в структуре и общих свойствах термодинамических потенциалов. К их изучению мы теперь и перейдем.

"Не в совокупности ищи единства,  
но более - в единообразии разделения".

К. Прутков. "Сочинения".

## Лекция 2. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ВЕЛИЧИНЫ

Термодинамика представляет собой феноменологическую теорию, объектом изучения которой являются тепловые свойства макроскопических систем. Аппарат термодинамики, основывающийся на четырех известных постулатах <sup>/49/</sup>, позволяет установить связи между различными термодинамическими величинами. Проще всего такие связи можно найти с помощью метода потенциалов, введенного в термодинамику Гиббсом. Удобство заключается в том, что дифференциалы от термодинамических потенциалов являются полными. Так, из первого начала термодинамики

$$dE = dQ - dW,$$

где  $E$  - средняя энергия системы,  $Q$  - количество тепла, переданное системе,  $W$  - работа, совершенная системой, а  $dQ$  и  $dW$  - формы, не являющиеся полными дифференциалами. Учитывая второе начало термодинамики

$$dQ = \Theta ds,$$

где  $\Theta$  - температура <sup>\*</sup> и  $S$  - энтропия, а также выражение для элементарной работы

$$dW = \sum_k X_k dx_k,$$

через обобщенные силы  $X_k$  и координаты  $x_k$ , получаем отсюда определение термодинамического потенциала внутренней энергии в дифференциальной форме:

$$dE = \Theta ds - \sum_k X_k dx_k \quad /2.1/$$

Обобщенными координатами, в случае, например, газовой системы, могут служить объем  $V$  и число частиц  $N$ . Тогда силами будут давление  $p$  и химический потенциал  $\mu$ :

$$dE = \Theta ds - pdV + \mu dN \quad /2.2/$$

<sup>\*</sup> Здесь и далее мы будем использовать температуру  $\Theta = k_B T$  с размерностью энергии /  $k_B = 1,38 \cdot 10^{-16}$  эрг/град/.

В случае магнитной системы  $\vec{X} = \vec{B}$  и  $\vec{x} = \vec{M}$ , /13/

$$dE = \Theta dS + \vec{B} d\vec{M} + \mu dN + \dots \quad /2.3/$$

В случае электрической системы  $\vec{X} = \vec{E}$  и  $\vec{x} = \vec{P}$  и т.д.

Другие потенциалы могут быть получены из /2.1/ с помощью преобразований Лежандра. В качестве примера приведем три важнейших потенциала, взяв за основу выражение /2.3/: энтальпия

$$\Phi = E - \vec{H}\vec{B}, \quad d\Phi = \Theta dS - \vec{H} d\vec{B} + \mu dN + \dots, \quad /2.4/$$

свободная энергия Гельмгольца

$$F = E - \Theta S, \quad dF = -S d\Theta + \vec{B} d\vec{M} + \mu dN + \dots, \quad /2.5/$$

потенциал Гиббса /свободная энергия Гиббса/

$$G = F - \vec{H}\vec{B}, \quad dG = -S d\Theta - \vec{H} d\vec{B} + \mu dN + \dots \quad /2.6/$$

Используя свойства полных дифференциалов, отсюда можно получить соотношения Максвелла /49/:

$$\left(\frac{\partial \Theta}{\partial \vec{M}}\right)_S = \left(\frac{\partial \vec{B}}{\partial S}\right)_{\vec{M}}, \quad \left(\frac{\partial \Theta}{\partial \vec{B}}\right)_S = -\left(\frac{\partial \vec{M}}{\partial S}\right)_{\vec{B}}, \quad /2.7/$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \vec{B}}\right)_{\Theta} = \left(\frac{\partial \vec{M}}{\partial \Theta}\right)_{\vec{B}}, \quad \left(\frac{\partial S}{\partial \vec{M}}\right)_{\Theta} = -\left(\frac{\partial \vec{B}}{\partial \Theta}\right)_{\vec{M}}$$

Помимо четырех указанных выше потенциалов, важную роль играет также так называемый большой потенциал

$$\Omega = F - \mu N, \quad d\Omega = -S d\Theta + \vec{B} d\vec{M} - N d\mu + \dots \quad /2.8/$$

Разумеется, приведенными пятью потенциалами полный список их далеко не исчерпывается; для наших целей, однако, указанных потенциалов вполне достаточно \*/.

В статистической механике отправным пунктом являются гамильтонианы, описывающие взаимодействия частиц, составляющих макроскопические системы, и пространства состояний, на которых эти гамильтонианы определены. Гамильтонианы, рассматриваемые в связи с задачей о фазовом переходе, всегда являются модельными. Иначе говоря, при их построении не принимают во внимание все без исключения свойства какой-либо конкретной системы - это привело бы к невероятному усложнению не только решения, но и постановки задачи. Обычно ограничиваются учетом лишь

\*/ Подробная таблица термодинамических потенциалов дана в книге Кубо /49/.

тех свойств, которые представляются наиболее важными с точки зрения изучаемого явления. Такое упрощение принято называть модельным подходом.

Модельные гамильтонианы можно разделить на три класса. К первому относятся те, которые можно сконструировать из ограниченных операторов. В качестве примера укажем модель Изинга - простейшую модель, описывающую фазовый переход типа порядок-беспорядок. Обычно она формулируется следующим образом /50,51/.

Пусть имеется решетка  $\mathbb{Z}^d$  размерности  $d$  / $d=1,2,3$ /. Пусть объект, связанный с узлом  $f \in \mathbb{Z}^d$  /например, атом/, может находиться в одном из двух состояний. Для простоты будем задавать эти состояния переменной  $G_f$ , принимающей только два значения: +1 и -1. Если два соседних объекта находятся в одинаковых состояниях, то  $G_f G_{f'} = +1$ , а если в различных, то  $G_f G_{f'} = -1$ . Пусть далее число объектов  $N$  в решетке фиксировано и взаимодействуют между собой лишь те объекты, которые являются ближайшими соседями, причем энергия их взаимодействия есть  $(-J G_f G_{f'})$ , где  $J = \text{const} > 0$ . Тогда гамильтониан такой системы имеет вид

$$H_N = - \sum_{\langle ff' \rangle} J G_f G_{f'} - B \sum_f G_f, \quad /2.9/$$

в котором  $\langle ff' \rangle$  означает ближайших соседей.

Здесь  $B$  - внешнее поле, добавленное из соображений общности. Ясно, что переменную  $G_f$  в /2.9/ допустимо рассматривать как оператор

$$G_f = \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \mathbb{1} \otimes G^z \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \mathbb{1}$$

в пространстве

$$\mathcal{H}_N = \prod_{f=1}^N \mathbb{C}^2 = (\mathbb{C}^2)^N, \quad \dim \mathcal{H}_N = 2^N, \quad /2.10/$$

где  $\mathbb{1}$  - единичный оператор и  $G^z$  - соответствующая матрица Паули в  $f$ -м подпространстве-сомножителе из /2.10/.

Несмотря на свою простоту /а может быть, благодаря ей/ модель Изинга широко применяется для описания самых различных явлений. Поэтому на ее приложениях мы остановимся подробнее.

Модель Изинга является простейшей моделью ферромагнетика. В этом случае переменная  $G_f$  соответствует спину  $f$ -го иона, а обменное взаимодействие  $J$  имеет, как уже говорилось, электростатическую природу \*/.

\*/ Подробный вывод модельного гамильтониана ферромагнетика в квази-спиновом представлении будет дан в следующей лекции.

Считая, что связанные состояния молекул ДНК соответствуют состояниям со спинами, направленными "вверх" /имеющими значения +1/, а несвязанные - со спином "вниз" /-1/, с помощью модели Изинга с  $d=1$  можно описать так называемое "плавление" ДНК /52/. Аналогичные представления используются в теории перехода спираль-клубок в полипептидах /53/.

В квантовой теории поля на решетке в связи с проблемой конфинемента рассматривается  $d$ -мерная решетка в пространстве-времени. Каждому узлу сопоставляется "спиновая" переменная

$$G_f = \begin{pmatrix} \cos \varphi_f \\ \sin \varphi_f \end{pmatrix}. \quad /2.11/$$

Суммирование проводится по замкнутым путям вдоль сторон квадрата, объединяющего ближайших соседей. Такой квадрат, называемый плакетом, изображен на рис. 17. Предполагается, что действие имеет изинговскую форму /2.9/ с  $B=0$ , что отвечает абелевой калибровочной теории поля на решетке /54,55/.

Модель Изинга применяется также в теориях бинарных сплавов, адсорбции на поверхности, жидкости и даже в теории кодирования /56/.

Ко второму классу относятся гамильтонианы, построенные из неограниченных операторов. Простейшим примером может служить гамильтониан идеального бозе-газа

$$H = \sum_k \left( \frac{p^2}{2m} - \mu \right) b_p^\dagger b_p, \quad /2.12/$$

где  $b_p^\dagger$  ( $b_p$ ) - оператор рождения /уничтожения/ бозона с импульсом  $p$ , определенным на всюду плотном линейном многообразии  $\mathcal{F}^S$  в пространстве Фока  $\mathcal{H}^{(\Phi)}$ :

$$\mathcal{F}^S \mathcal{H}^{(\Phi)} = \sum_{N=1}^{\infty} \oplus \mathcal{H}_N^S.$$

Здесь пространство  $\mathcal{H}_N^S$  образовано функциями /57/

$$\Phi_{(f_1, \dots, f_N)}^S \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\{p_j\}} \Phi_p(f_1, \dots, f_N),$$

где суммирование ведется по всем перестановкам  $N$  индексов  $f_1, \dots, f_N$  и

$$\Phi_{(f_1, \dots, f_N)}^S = \Phi_{f_1}^S \otimes \Phi_{f_2}^S \otimes \dots \otimes \Phi_{f_N}^S, \quad \Phi_f^S \in \mathcal{H}_f = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3).$$

Третий класс образуют гамильтонианы, построенные сразу из ограниченных и неограниченных операторов. В качестве примера рассмотрим снова модель Изинга /2.9/, но будем считать, что атомы не закреплены в узлах решетки, а совершают небольшие тепловые колебания около равно-

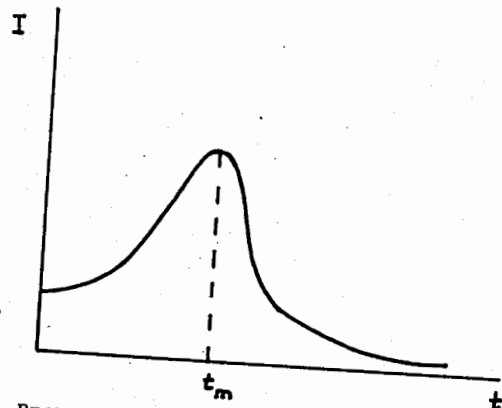


Рис. 16. Временная зависимость интенсивности лазерного излучения.

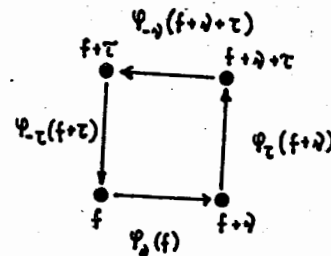


Рис. 17. Элементарная ячейка решетки, образованная сдвигами на вектора  $\nu$  и  $\tau$  ( $|\nu|=|\tau|$ ).

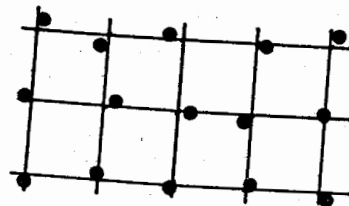


Рис. 18. Тепловые колебания атомов в решетке.

весных положений /рис. 18/. В этом случае  $J$  уже не является константой, а зависит от расстояния между соседними частицами:

$$J = J(\vec{r}_f - \vec{r}_{f'})$$

Пусть  $\vec{u}_f$  - смещение атома из  $f$ -го узла. Тогда  $\vec{r}_f = \vec{r} + \vec{u}_f$ , где  $\vec{r}$  - радиус-вектор узла. Обозначим через

$$\vec{u}_{ff'} = \vec{u}_f - \vec{u}_{f'}$$

относительные смещения соседних атомов и разложим  $J(\cdot)$  по относительным смещениям. Имеем /22/

$$J(\vec{r}_f - \vec{r}_{f'}) = J(\vec{r} - \vec{r}') + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (\vec{u}_{ff'}, \nabla_{ff'})^n J(f, f') \quad /2.13/$$

Считая смещения малыми, оставим лишь линейный по  $\vec{u}_{ff'}$  член и перейдем к представлению вторичного квантования:

$$\vec{u}_f = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_k N}} (b_k e^{i\vec{k}\vec{r}} + b_k^\dagger e^{-i\vec{k}\vec{r}}) \vec{e}_k \quad /2.14/$$

Здесь  $M$  - масса колеблющегося атома,  $\omega_k$  - частота,  $\vec{e}_k$  - единичный вектор поляризации,  $\vec{k}$  - волновой вектор. Тогда с учетом выражений /2.13/, /2.14/ из /2.9/ получаем для энергии спин-фононного взаимодействия

$$H^{(s-ph)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\langle f, f' \rangle} \sum_k G_f G_{f'} B_k(f, f') (b_k^\dagger + b_k) \quad /2.15/$$

где

$$B_k(f, f') = \frac{-i}{\sqrt{2M\omega_k}} \sum_{\nu} \vec{e}_k \cdot \vec{\nu} J(\nu) (e^{i\vec{k}\vec{r}_f} - e^{i\vec{k}\vec{r}_{f'}}) e^{i\vec{\nu}(\vec{r}_f - \vec{r}_{f'})}$$

и  $J(\nu)$  - фурье-образ функции  $J(f, f')$ . Теперь полный гамильтониан ферромагнетика с учетом тепловых колебаний атомов может быть представлен в виде

$$\tilde{H} = H_N + H^{(s-ph)} + H^{(ph)} \quad /2.16/$$

где  $H_N$  - гамильтониан /2.9/ с заменой  $J \rightarrow J(f, f')$  и  $H^{(ph)}$  - гамильтониан свободных фононов

$$H^{(ph)} = \sum_k \hbar \omega_k b_k^\dagger b_k$$

гамильтониан /2.16/ определен, очевидно, на пространстве

$$\tilde{H} = \tilde{H}_N \otimes \mathcal{F}^s$$

В статистической механике свободная энергия  $N$ -частичной системы с гамильтонианом  $H_N(\xi)$ , зависящим от внешнего параметра  $\xi$ , определяется соотношением

$$F_N(\theta, \xi) = -\theta \ln Sp e^{-H_N(\xi)/\theta} \quad /2.17/$$

соответствующим каноническому ансамблю Гиббса. Следует особо подчеркнуть, что потенциал, определяемый соотношением /2.17/, может быть как свободной энергией, так и потенциалом Гиббса в зависимости от того, что является внешним параметром  $\xi$ . Например, в случае модели Изинга /2.9/  $\xi = B$ , и по принятому нами определению /2.6/ соотношение /2.17/ задает именно потенциал Гиббса.

Операторная экспонента в /2.17/ определяется как

$$e^{-H_N(\xi)/\theta} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[-H_N(\xi)]^n}{\theta^n n!}$$

и  $Sp \dots$  берется по соответствующему пространству состояний.

В случае системы с переменным числом частиц имеем

$$\Omega(\theta, \xi) = -\theta \ln Sp e^{\frac{-H_N(\xi) + \mu \hat{N}}{\theta}} \quad /2.18/$$

где  $\hat{N}$  - оператор числа частиц. Соотношение /2.18/ соответствует большому каноническому ансамблю Гиббса <sup>\*</sup>/.

Строго говоря, соотношение /2.17/ задает последовательность функций  $F_N(\theta, \xi)$ , которую мы будем определять на множестве

$$D(\theta, \xi) = [0, \theta_0] \otimes [-\xi_0, \xi_0] \quad (\theta_0 < \infty, \xi_0 < \infty)$$

Иначе говоря, мы не будем рассматривать бесконечные температуры и бесконечные значения внешних параметров /полей/.

В статистической механике интересуются поведением не самих потенциалов типа /2.17/, а их удельными величинами в так называемом термодинамическом пределе

$$\bar{F} = \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} F_N \quad /2.19/$$

<sup>\*</sup>/ Поэтому и  $\Omega(\cdot)$  называют большим потенциалом.

Именно величины типа /2.19/ определяют термодинамическое поведение системы. Обычно переход к пределу  $N \rightarrow \infty$  рассматривают при условии

$$N \rightarrow \infty, V_N \rightarrow \infty, V_N/N = v = const$$

/предел в смысле Боголюбова/ или при условии

$$N \rightarrow \infty, V_N \rightarrow \infty, V_N/N \rightarrow const$$

/предел в смысле Ван Хофа/. Здесь  $V_N$  - объем  $N$ -частичной системы.

Естественно, возникает вопрос: каким условиям должны удовлетворять гамильтонианы, чтобы предел /2.19/ существовал? Впервые исследование этой проблемы было предпринято в 1949 г. Н.Н.Боголюбовым и Б.И.Хацетом /58/ и независимо Ван Ховом /59/. Дальнейшее развитие идей и результатов этих работ /см., например, /60-63/ привело к созданию самостоятельного направления современной математической физики. Особая роль термодинамического предельного перехода в статистической теории фазовых переходов стала понятной после работ Янга и Ли /64/ и в особенности после работ Н.Н.Боголюбова по квазисредним /20, 21/. Эта роль заключается в следующем. Как мы видели выше в лекции 1, фазовые переходы связаны с особенностями поведения производных термодинамических потенциалов. Иначе говоря, термодинамические потенциалы не обладают свойством вещественной аналитичности. Однако, как было показано Янгом и Ли /64/ на примере модели решеточного газа и связанной с ним модели Изинга /2.9/, при конечном  $N$  функция /2.17/ или /2.18/ является вещественно аналитической и теряет это свойство лишь при  $N \rightarrow \infty$ . Более подробно это важное обстоятельство и его причины будут обсуждаться ниже в лекции 4.

К сожалению, в настоящее время общие для всех систем условия существования предела типа /2.19/ неизвестны. Достаточные условия, которыми обычно пользуются, сильно зависят от специфики изучаемой системы. Рассмотрение всех имеющихся здесь возможностей далеко выходит за рамки настоящего курса. Поэтому здесь мы ограничимся тем, что укажем только общее достаточное условие существования термодинамического предела /2.19/ для систем, относящихся к первому из указанных выше классов /60/, именно для систем на решетке.

Пусть  $U^{(k)}(f_1, \dots, f_k)$  -  $k$ -частичный потенциал взаимодействия /в случае модели Изинга /2.9/  $U^{(2)}(f_1, f_2) = J \epsilon_{f_1 f_2}$  /, принадлежащий алгебре локальных наблюдаемых, соответствующих совокупности узлов  $(f_1, \dots, f_k)$ , представимой ограниченными операторами. Тогда достаточным условием существования термодинамического предела /2.19/ в смысле Ван Хофа является совокупность требований:

$$1/ U^{(k)}(\cdot) - \text{эрмитов оператор,}$$

$$2/ U^{(k)}(f_1 + f_2, \dots, f_k + f) = T_f U^{(k)}(f_1, \dots, f_k) - \text{однородность относительно трансляций, где } T_f - \text{некоторая функция от } f,$$

$$3/ \|U^{(k)}(\cdot)\| < \infty.$$

Как нетрудно видеть, модель Изинга /2.9/ удовлетворяет этим условиям и поэтому для нее существует термодинамический предел /2.19/.

Перейдем теперь к рассмотрению некоторых общих свойств последовательности функций, определяемых соотношением /2.17/. Пусть гамильтониан  $H_N$  относится к первому из рассмотренных выше классов и имеет вид

$$H_N = T_N - \sum_{(f_1, \dots, f_k)} U^{(k)}(f_1, \dots, f_k), \quad /2.20/$$

где  $T_N$  - линейный по "одночастичным" операторам эрмитов оператор и  $U^{(k)}(\cdot)$  -  $k$ -частичный потенциал взаимодействия, удовлетворяющий приведенным выше условиям. В случае модели Изинга /2.9/, например,  $T_N = -\sum_f B \epsilon_f$ . В силу ограниченности операторов, образующих гамильтониан /2.20/, соответствующее одночастичное пространство состояний  $\mathcal{H}_f$  должно иметь конечную размерность

$$\dim \mathcal{H}_f = m < \infty. \quad /2.21/$$

Потребуем также, чтобы имела место термодинамическая аддитивность рассматриваемой системы, т.е. чтобы  $N$ -частичная внутренняя энергия, определяемая в статистической механике как

$$E_N = \langle H_N \rangle, \quad \langle \dots \rangle = \frac{\text{Sp} \dots e^{-H_N/\theta}}{\text{Sp} e^{-H_N/\theta}}, \quad /2.22/$$

была пропорциональна  $N$ . Для этого достаточно, чтобы

$$\exists h = const : \forall N \|H_N\| \leq hN. \quad /2.23/$$

В силу условий /2.21/, /2.23/ последовательность функций  $\bar{F}_N$  /2.17/ равномерно ограничена на  $\mathcal{D}$ . Действительно, так как  $\exp\{-H_N/\theta\}$  - положительный ограниченный оператор, то в силу теоремы Перрона /65/ среди его собственных значений всегда существуют наибольшее и наименьшее  $\ast$ /. В силу /2.23/ наибольшее не превосходит  $\exp(hN/\theta)$ , а

$\ast$ / Теорема Перрона справедлива и для неограниченных операторов /66/.



наименьшее не меньше  $\exp\{-hN/\theta\}$ . Так как операция  $S_p$  в /2.17/ определена на пространстве

$$\mathcal{H}_N = \prod_f \mathcal{H}_f, \quad \dim \mathcal{H}_N = m^N,$$

то величина  $S_p \exp\{-H_N/\theta\}$  представляет собой сумму из  $m^N$  положительных членов. Поэтому

$$m^N e^{-hN/\theta} \leq S_p e^{-H_N/\theta} \leq m^N e^{hN/\theta}.$$

Отсюда

$$|\bar{E}_N| \leq h + \theta \ln m \leq h + \theta_0 \ln m.$$

Так как правая часть полученной оценки не зависит от  $N$ , то последовательность функций  $\bar{E}_N(\cdot)$  равномерно ограничена на  $\mathcal{D}$ .

Приведем теперь некоторые определения.

Неотрицательная функция  $\psi(t)$  называется логарифмически выпуклой на  $[a, b]$ , если

$$\forall t_1, t_2 \in [a, b] \quad \psi\left(\frac{t_1 + t_2}{2}\right) \leq \sqrt{\psi(t_1)\psi(t_2)}. \quad /2.24/$$

Функция  $\psi(t)$  называется вогнутой на  $[a, b]$ , если

$$\forall t_1, t_2 \in [a, b] \quad \psi\left(\frac{t_1 + t_2}{2}\right) \geq \frac{\psi(t_1) + \psi(t_2)}{2}. \quad /2.25/$$

/см. рис. 19/ \*./

Если  $\psi(t)$  - логарифмически выпуклая функция на  $[a, b]$ , то либо  $\forall t \in [a, b] \quad \psi(t) \equiv 0$ , либо  $\forall t \in [a, b] \quad \exists \psi(t) = \ln \Psi(t)$ :  $\Psi(t)$  - выпуклая функция.

Установим вогнутость функции /2.17/ по  $\theta$  на  $[0, \theta_0]$ . Пусть  $\theta_1, \theta_2 \in [0, \theta_0]$ . Рассмотрим произведение

$$P = [S_p e^{-H_N/\theta_1}]^{\theta_1/(\theta_1 + \theta_2)} \cdot [S_p e^{-H_N/\theta_2}]^{\theta_2/(\theta_1 + \theta_2)}$$

Так как

$$\frac{\theta_1}{\theta_1 + \theta_2} + \frac{\theta_2}{\theta_1 + \theta_2} = 1$$

и  $S_p \dots$  есть сумма из  $m^N$  положительных членов, можно воспользоваться неравенством Гельдера для сумм

\*/ При изменении направления знака неравенства в /2.24/ мы получим определение логарифмической вогнутости, а в /2.25/ - выпуклости.

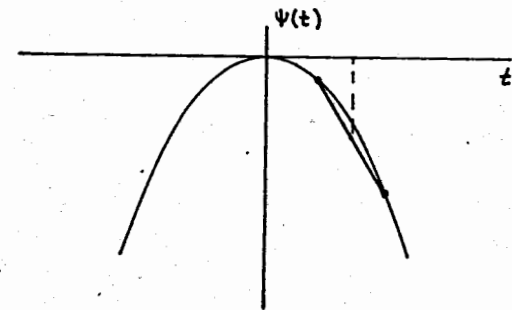


Рис. 19. Пример вогнутой функции  $\psi(t)$ .

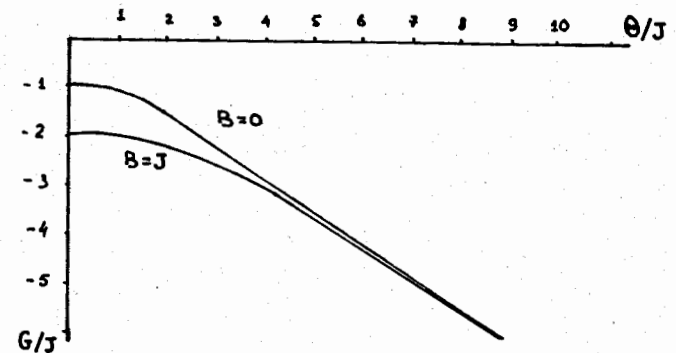


Рис. 20. Температурная зависимость свободной энергии в одномерной модели Изинга при фиксированном поле.

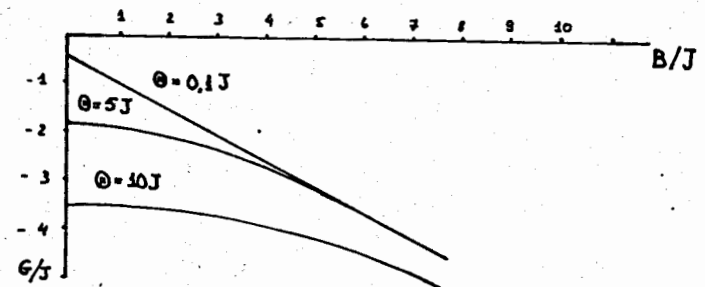


Рис. 21. Пример вогнутости свободной энергии по внешнему параметру, линейно входящему в гамильтониан: функция (2.26) при фиксированной температуре.

$$|\sum_i \alpha_i \beta_i| \leq |\sum_i \alpha_i|^k \cdot |\sum_i \beta_i|^q \quad (k, q > 0, \frac{1}{k} + \frac{1}{q} = 1).$$

Тогда

$$P \geq S_p e^{-2H_N / (\theta_1 + \theta_2)}$$

Прологарифмируем это неравенство и умножим обе его части на  $\frac{-\theta_1 - \theta_2}{2N}$ .  
Получаем

$$\bar{F}_N \left( \frac{\theta_1 + \theta_2}{2} \right) \geq \frac{1}{2} \bar{F}_N(\theta_1) + \frac{1}{2} \bar{F}_N(\theta_2).$$

Таким образом, функция /2.17/ при условии /2.21/ действительно вогнута по температуре. В качестве иллюстрации этого свойства приведем на рис. 20 температурное поведение свободной энергии в модели Изинга при фиксированном  $B$  и  $d=1$ :

$$\bar{G}(\theta, B) = -\theta \ln \left\{ e^{J/\theta} \operatorname{ch} \frac{B}{\theta} + \sqrt{e^{2J/\theta} \operatorname{sh}^2 \frac{B}{\theta} + e^{-2J/\theta}} \right\}. \quad /2.26/$$

Покажем теперь также вогнутость термопотенциала /2.17/ по внешнему параметру  $\xi$ , входящему в гамильтониан  $H_N(\xi)$  линейно:

$$H_N(\xi) = H_N^{(1)} + \xi H_N^{(2)}, \quad (H_N^{(i)})^\dagger = H_N^{(i)}, \quad \xi \in [a, b].$$

Рассмотрим статистическую сумму

$$Q_N(\xi) = S_p e^{-H_N(\xi)/\theta}$$

Пусть  $\xi_1, \xi_2 \in [a, b]$ . В силу неравенства Голдена-Томпсона /67, 68/

$$S_p e^{A+B} \leq S_p (e^A \cdot e^B).$$

Поэтому

$$Q_N \left( \frac{\xi_1 + \xi_2}{2} \right) \leq S_p \left\{ \exp \left[ -\frac{H_N^{(1)} + \xi_1 H_N^{(2)}}{2\theta} \right] \cdot \exp \left[ -\frac{H_N^{(1)} + \xi_2 H_N^{(2)}}{2\theta} \right] \right\} \equiv \mathcal{A}. \quad /2.27/$$

Перейдем к матричному представлению, в котором оператор  $H_N(\xi)$  диагонален и обозначим через  $E_i(\xi)$  его собственные значения ( $i=1, \dots, m^N$ ).

Пусть  $\tilde{E}_i(\xi)$  - диагональные элементы оператора  $H_N(\xi)$  в этом представлении. Правую часть /2.27/ теперь можно переписать в виде

$$\mathcal{A} = \sum_i \left\{ e^{-E_i(\xi_1)/\theta} \cdot e^{-E_i(\xi_2)/\theta} \right\}.$$

Вновь используя неравенство Гельдера с  $k=q=2$ , находим

$$\mathcal{A} \leq \left[ \sum_i e^{-E_i(\xi_1)/\theta} \right]^{1/2} \cdot \left[ \sum_i e^{-E_i(\xi_2)/\theta} \right]^{1/2} \equiv \sqrt{Q_N(\xi_1) Q_N(\xi_2)}.$$

Здесь учтена инвариантность величины  $S_p \dots$  относительно представления. Объединяя теперь полученное неравенство с /2.27/, получаем логарифмическую выпуклость функции  $Q_N(\xi)$  на  $[a, b]$  /ср. /2.24//. Так как по определению  $Q_N(\xi)$  не равна тождественно нулю на  $[a, b]$ , то существует вогнутая функция

$$\bar{F}_N(\xi) = -\theta N^{-1} \ln Q_N(\xi)$$

/см. рис. 21/.

Таким образом, последовательность функций  $\bar{F}_N(\cdot)$  /2.17/ равномерно ограничена на  $D$ , причем сами функции вогнуты по каждой из переменных. Вогнутые и ограниченные функции обладают рядом важных свойств /69/, на рассмотрении которых мы теперь остановимся.

Такие функции непрерывны на  $D$  /по каждой из переменных/. Так как свойство непрерывности сохраняется при переходе к пределу последовательности, то свободная энергия /2.19/ является непрерывной функцией по каждой из переменных на  $D$ , в том числе и в точке фазового перехода. Это очень важное свойство, используемое, как мы увидим в дальнейшем, например, для определения точки фазового перехода первого рода.

В силу равномерной ограниченности и непрерывности функция  $\bar{F}_N(\cdot)$  непрерывно дифференцируема почти всюду по каждой из переменных. Ее производная является невозрастающей функцией /см. рис. 22/. Это же относится и к предельной функции  $\bar{F}(\cdot)$ .

Если существует вторая производная  $\bar{F}_N''(\cdot)$  по каждой из переменных, то  $\bar{F}_N''(\cdot) \leq 0$ . В силу определений /1.4/ и /1.6/ отсюда следует неотрицательность восприимчивости и теплоемкости рассматриваемой системы. В термодинамике с неотрицательностью теплоемкости связывают условие устойчивости системы по отношению к тепловым воздействиям /49/. В силу сказанного достаточным условием такой устойчивости является вогнутость свободной энергии по температуре, следующая непосредственно из определения /2.17/ и свойств модельного гамильтониана /2.21/, /2.23/.

Вернемся к вопросу о фазовом переходе. Мы уже говорили о связи этого явления со свойствами дифференцирования функции  $\bar{F}(\cdot)$ . Укажем теперь принятую классификацию фазовых переходов. Мы установили, что функция  $\bar{F}(\cdot)$  дифференцируема почти всюду. Если фазовый переход имеет место при значении термодинамических параметров на  $D$  и функция  $\bar{F}(\cdot)$  дифференцируема на  $D$ , то говорят, что имеет место переход непрерыв-

ного типа. В противном случае имеет место переход первого рода. Такая классификация была предложена Фишером /70/. В более старой классификации Эренфеста /см./, например, /49/ рассматриваются лишь переходы первого и второго рода. Последний определяется как переход, при котором функция  $\bar{F}(\cdot)$  дважды дифференцируема на  $D$  и вторая производная  $\bar{F}''$  имеет разрыв. Как нетрудно видеть, это - частный случай перехода непрерывного типа. Точку фазового перехода непрерывного типа принято называть критической точкой.\*

До сих пор в связи с фазовым переходом мы всегда говорили о некоторой точке перехода. Строго говоря, совсем необязательно, чтобы переход реализовывался именно в точке. Действительно, пусть система с гамильтонианом  $H_N(\xi)$  удовлетворяет условиям 1/ и 3/ и /2.21/, /2.23/. Тогда

$$\forall \theta, \xi \in D \quad \bar{F}_N(\theta, \xi) \rightarrow \bar{F}(\theta, \xi), \quad /2.28/$$

и почти всюду существуют производные  $\bar{F}'_{N\theta}, \bar{F}'_{N\xi}, \bar{F}'_{\theta}, \bar{F}'_{\xi}$ . Заметим, что из поточечной сходимости /2.28/ следует равномерная сходимость на  $D$ . Действительно, в силу /2.21/, /2.23/ функции  $\bar{F}_N(\cdot)$  удовлетворяют теореме Банаха-Штейнгауза /71/ и последовательность  $\bar{F}_N(\cdot)$  равномерно равностепенно непрерывна на  $D$ . Поэтому в силу теоремы 1.27 работы /72/ из сходимости /2.28/ следует равномерная сходимость

$$\bar{F}'_N(\theta, \xi) \rightarrow \bar{F}'(\theta, \xi). \quad /2.29/$$

Если функция  $\bar{F}(\cdot)$  всюду на  $D$  правильно описывает термодинамическое состояние системы, то, по-видимому, должно выполняться предельное соотношение

$$\forall \lambda \in D \quad \bar{F}'_{N\lambda} \rightarrow \bar{F}'_{\lambda}, \quad \lambda \in \theta, \xi. \quad /2.30/$$

В этой связи укажем следующую теорему /73/.

**Теорема 1.** Для любого  $\delta > 0$  можно указать множество  $\theta_\delta \subset [a, b]$  / $[a, b] = [0, \theta_\delta]$  или  $[-\xi_\delta, \xi_\delta]$  /, мера Лебега которого  $\mu(\theta_\delta) \leq \delta$ , такое, что на множестве  $[a, b] \setminus \theta_\delta$  существуют производные  $\bar{F}'_{N\lambda}, \bar{F}'_{\lambda}$ , причем  $\bar{F}'_{N\lambda} \rightarrow \bar{F}'_{\lambda}$ .

**Доказательство.** Пусть  $R_N \subset [a, b], R \subset [a, b]$  - соответствующие не более чем счетные множества недифференцируемости функций  $\bar{F}_N(\lambda)$  и  $\bar{F}(\lambda)$  на  $[a, b]$ . В силу /2.29/ и теоремы Гриффитса /74/

$$\forall \lambda \in [a, b] \setminus (RU \cup (UR_N)) \quad \bar{F}'_{N\lambda} \rightarrow \bar{F}'_{\lambda}.$$

\*/ Понятие критической точки впервые было введено в 1860 г. Д.И. Менделеевым.

Таким образом, выполнены условия теоремы Д.Ф. Егорова /см. /69/ /, в силу которой

$$\forall \delta > 0 \exists \theta_\delta \subset [a, b]: \mu(\theta_\delta) \leq \delta < \mu([a, b]) \Rightarrow \bar{F}'_{N\lambda} \rightarrow \bar{F}'_{\lambda};$$

теорема доказана.

Эта теорема указывает на возможность того, что какие-то нарушения свойства дифференцирования функции  $\bar{F}_N(\cdot)$  могут происходить не обязательно в точке, но и на множестве нулевой меры. В ряде недавних экспериментов были найдены такие системы, у которых фазовый переход происходит заведомо не в точке /75, 76/. На рис. 23 изображена восприимчивость  $G_{72}, G_{12}, B_{20}$ , расходящаяся на интервале  $55 \text{ K} \leq T \leq 120 \text{ K}$  /см. /75-77/ /.

Пусть фазовый переход реализуется в точке и эта точка является граничной на  $[a, b]$ . Пусть далее

$$\forall \lambda \in (a, b) \quad \bar{F}'_{N\lambda} \rightarrow \bar{F}'_{\lambda}.$$

Тогда

$$\lim_{\lambda \rightarrow a+0} (\lim_{N \rightarrow \infty} \bar{F}'_{N\lambda}(\lambda)) = \bar{F}'_R(a), \quad /2.31/$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow b-0} (\lim_{N \rightarrow \infty} \bar{F}'_{N\lambda}(\lambda)) = \bar{F}'_L(b),$$

где  $\bar{F}'_R(a), \bar{F}'_L(b)$  - соответственно правая и левая производные функции  $\bar{F}(\lambda)$  в точке  $a$  и  $b$ . Действительно, в силу монотонности и непрерывности функций  $\bar{F}'_{\lambda}$  на  $(a, b)$ , существуют  $\sup \bar{F}'_{\lambda} = \bar{F}'_R(a)$  и  $\inf \bar{F}'_{\lambda} = \bar{F}'_L(b)$ , и соотношения /2.31/ выполняются. Заметим, что порядок пределов в /2.31/ нельзя изменять.

Выше мы говорили о том, что один термодинамический потенциал может быть получен из другого заменой переменных. Тогда термодинамические потенциалы, определяемые статистическим путем, должны быть эквивалентны в смысле предельного перехода при  $N \rightarrow \infty$ . Именно из сходимости  $\bar{F}_N \rightarrow \bar{F}$  должна следовать, например, сходимость  $\bar{E}_N \rightarrow \bar{E}$  и наоборот, причем  $\bar{F}$  и  $\bar{E}$  здесь связаны обычным термодинамическим соотношением /2.5/. Рассмотрим этот вопрос подробнее. Имеет место следующая теорема /78/.

**Теорема 2.** Имеет место соотношение эквивалентности

$$\forall \theta, \xi \in \tilde{D} = D \setminus \theta_\delta \quad \bar{F}_N \rightarrow \bar{F} \Leftrightarrow \bar{E}_N \rightarrow \bar{E}.$$

**Доказательство.** Покажем сначала, что

$$\bar{F}_N \rightarrow \bar{F} \Rightarrow \bar{E}_N \rightarrow \bar{E}, \quad \bar{E}_N \equiv N^{-1} E_N, \quad /2.32/$$

/здесь  $E_N$  определяется соотношением /2.22/. Воспользуемся соотношением /2.5/, которое может быть переписано в дифференциальной форме

$$\bar{E}_N = \bar{F}_N - \Theta \frac{\partial \bar{F}_N}{\partial \Theta}$$

/соотношение Гиббса-Гельмгольца/. В силу теоремы 1

$$\forall \Theta, f \in \tilde{D} \quad \bar{F}_N \rightarrow \bar{F} \Rightarrow \bar{F}'_{N\Theta} \rightarrow \bar{F}'_{\Theta},$$

откуда и следует /2.32/.

Покажем теперь, что

$$\forall \Theta, f \in \tilde{D} \quad \bar{E}_N \rightarrow \bar{E} \Rightarrow \bar{F}_N \rightarrow \bar{F}.$$

Ограничимся для простоты рассмотрением лишь зависимости от  $\Theta$ . Пусть  $t \in [0, 1]$ , и определим

$$\bar{E}_N(t) \equiv \bar{E}_N(\Theta/t)$$

соотношение /2.22/ с заменой  $H_N \rightarrow H_N \cdot t$ . Определим функцию

$$\Delta_N(t) \equiv \int_0^t \{\bar{E}_N(\tau) - \bar{E}(\tau)\} d\tau,$$

где  $\bar{E}(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \bar{E}_N(t)$ . Как нетрудно видеть,

$$\Delta_N(t) = \bar{F}_N(\Theta/t) - \bar{F}(\Theta, t).$$

По теореме Лагранжа о конечных приращениях

$$\exists t_0 \in (0, 1): \Delta_N(1) - \Delta_N(0) = \left( \frac{d\Delta_N}{dt} \right)_{t=t_0} = \bar{E}_N(t_0) - \bar{E}(t_0). \quad /2.33/$$

По определению  $\Delta_N(0) = 0$  и  $\Delta_N(1) = \bar{F}_N(\Theta) - \bar{F}(\Theta)$ . По условию теоремы  $\bar{E}_N(\Theta) \rightarrow \bar{E}(\Theta)$  на  $[0, \Theta_0] \setminus \Theta_0$ . Произведем ренормировку температуры:  $\Theta \rightarrow \tilde{\Theta} \equiv \Theta/t$ ,  $t \in (0, 1]$ . Ясно, что в силу произвола выбора  $\Theta_0$  его всегда можно подобрать так, что  $\tilde{\delta}$  не изменится. Теперь

$$\forall t \in (0, 1] \quad \bar{E}_N \rightarrow \bar{E} \Rightarrow \bar{E}_N(t) \rightarrow \bar{E}(t),$$

и в силу /2.33/

$$\bar{E}_N \rightarrow \bar{E} \Rightarrow \bar{F}_N \rightarrow \bar{F}.$$

Аналогичным образом можно рассмотреть зависимость от  $f$ . Соотношения эквивалентности для других потенциалов могут быть получены отсюда с помощью преобразований Лежандра.

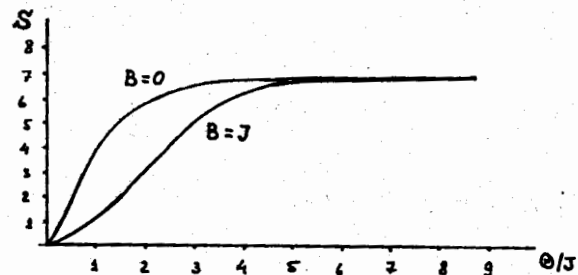


Рис. 22. Энтропия  $S = -(\partial G / \partial \Theta)_B$  в одномерной модели Изинга.

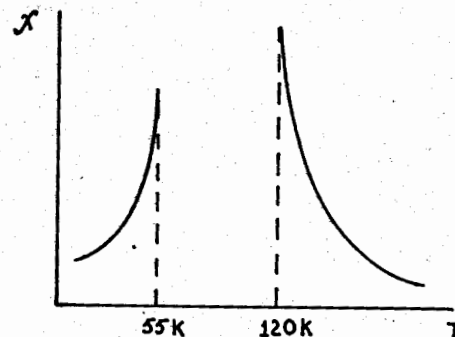


Рис. 23. Восприимчивость как функция температуры для случайно анизотропного магнетика  $Gd_{72}Ga_{18}B_{10}$ .

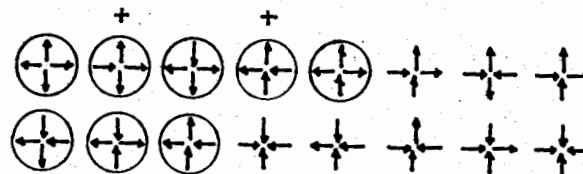


Рис. 24. Возможное расположение стрелок в квадратной решетке. Кругами обозначены комбинации, учитываемые в модели Бакстера. Крестиками помечены комбинации, выбрасываемые при переходе к шестивершинной модели Либа.

"Там были Робин Гусь, Птица Додо, Попугайчик Лори, Орленок Эд и всякие другие удивительные существа".

Люис Кэрролл. "Алиса в стране чудес".

### Лекция 3. МОДЕЛЬНЫЕ ГАМИЛЬТОНИАНЫ

В предыдущей лекции говорилось о модельных гамильтонианах и их классификации, и были приведены три примера. Здесь мы продолжим рассмотрение модельных гамильтонианов для различных физических ситуаций.

Модель Гейзенберга. Вернемся к проблеме магнитного упорядочения. В первой лекции было сказано, что в ряде магнетиков это явление связано с механизмом электростатического обменного взаимодействия электронов, расположенных в соседних атомах. Простейшей моделью такой системы является полярная модель металла, описывающая систему из  $N$  взаимодействующих электронов, находящихся в поле  $N$  ионов. Гамильтониан такой системы имеет вид <sup>/79/</sup>

$$H_N = T + U + H_{int} \quad /3.1/$$

Здесь  $T$  - кинетическая энергия электронов

$$T = \sum_{\mathcal{G}} \int d\vec{r} \psi_{\mathcal{G}}^{\dagger}(\vec{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \mu \right\} \psi_{\mathcal{G}}(\vec{r}),$$

где  $\psi$  - фермиевская полевая переменная,  $\mathcal{G}$  - спиновый индекс и  $\mu$  - химический потенциал. Оператор  $U$  соответствует потенциальной энергии электронов в поле ионов

$$U = \sum_{\mathcal{G}} \int d\vec{r} \psi_{\mathcal{G}}^{\dagger}(\vec{r}) U(\vec{r}) \psi_{\mathcal{G}}(\vec{r}),$$

и  $H_{int}$  - энергия электростатического взаимодействия электронов

$$H_{int} = \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{G}, \mathcal{G}'} \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \psi_{\mathcal{G}}^{\dagger}(\vec{r}) \psi_{\mathcal{G}'}^{\dagger}(\vec{r}') \Phi(\vec{r}, \vec{r}') \psi_{\mathcal{G}}(\vec{r}') \psi_{\mathcal{G}}(\vec{r}),$$

$$\Phi(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

В рассматриваемой системе ионы образуют решетку  $\mathbb{Z}^d$  размерности  $d$ , координаты узлов которой будем обозначать через  $f \in \mathbb{Z}^d$ . Обозначим символом

$$\psi_n(\vec{r}-f) \equiv |f\rangle_n$$

функции Ванье <sup>/80/</sup> - полный ортонормированный набор функций электронов для  $n$ -й зоны, связанных с узлами решетки <sup>x/</sup>. Перейдем к представлению Ванье для фермиевских полевых переменных

$$\psi_{\mathcal{G}}(\vec{r}) = \sum_{f,n} a_{n\mathcal{G}}(f) \psi_n(\vec{r}-f).$$

Теперь гамильтониан <sup>/3.1/</sup> принимает вид

$$H_N = \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{G}, \mathcal{G}'} \sum_{f, f'} L(f-f') a_{\mathcal{G}}^{\dagger}(f) a_{\mathcal{G}'}^{\dagger}(f') a_{\mathcal{G}}(f') a_{\mathcal{G}}(f) + \quad /3.2/$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{G}, \mathcal{G}'} \sum_{\substack{f, f' \\ (f \neq f')}} J(f-f') a_{\mathcal{G}}^{\dagger}(f) a_{\mathcal{G}'}^{\dagger}(f') a_{\mathcal{G}}(f) a_{\mathcal{G}}(f') - \tilde{\mu} \sum_{\mathcal{G}, f} a_{\mathcal{G}}^{\dagger}(f) a_{\mathcal{G}}(f).$$

Здесь введены обозначения

$$L(f-f') \equiv \langle f, f' | \Phi(\vec{r}, \vec{r}') | f', f \rangle,$$

$$J(f-f') \equiv \langle f, f' | \Phi(\vec{r}, \vec{r}') | f, f' \rangle,$$

где  $|f, f'\rangle \equiv |f\rangle |f'\rangle$  - скалярное произведение функций Ванье, и рассмотрение ограничено только одной зоной. Через  $\tilde{\mu}$  обозначен перенормированный химический потенциал

$$\tilde{\mu} = \mu - Q(0), \quad Q(f-f') = \langle f | -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(\vec{r}) | f' \rangle.$$

Матричные элементы  $L(\cdot)$  и  $J(\cdot)$  характеризуют разные механизмы взаимодействия электронов, локализованных в соседних узлах  $f$  и  $f'$  решетки. Параметр  $L(\cdot)$  описывает электростатическое отталкивание электронов /прямое взаимодействие/, а параметр  $J(\cdot)$  - притяжение, возникающее вследствие перекрытия волновых функций соседних электронов /обменное взаимодействие/. Значения  $J(\cdot)$  пропорциональна площади перекрытия. Параметр  $J(\cdot)$  обычно называют интегралом обмена или интегралом перекрытия.

Нетрудно убедиться в том, что некоторые комбинации операторов Ванье, удовлетворяющих фермиевским перестановочным соотношениям, ведут себя как операторы спина 1/2. Например,

$$a_f^{\dagger}(f) a_f(f) - 1/2 = -a_f^{\dagger}(f) a_f(f) + 1/2 = S_f^z,$$

$$a_f^{\dagger}(f) a_f(f) = S_f^x + i S_f^y, \quad [S_f^x, S_{f'}^y] = i S_f^z \delta_{ff'}, \quad S_f^{\mu} \equiv \frac{1}{2} \mathcal{G}_f^{\mu}.$$

<sup>x/</sup> Функции Ванье получаются путем унитарного преобразования из функций Блоха.

Теперь в /3.2/ можно перейти к квазиспиновому представлению. Разумеется, гамильтониан /3.2/ невозможно полностью выразить через квазиспиновые переменные; поэтому приходится совершать ряд упрощений, связанных с использованием специального малого параметра /19,22/. В результате получается приближенный  $N$ -частичный гамильтониан вида

$$H_N = N \left( \frac{1}{2} A - \tilde{\mu} \right) \mathcal{D} - \sum_{f,f'} J(f,f') \vec{S}_f \vec{S}_{f'}, \quad /3.3/$$

называемый обычно гамильтонианом Гейзенберга. Здесь  $\mathcal{D}$  - единичный оператор и

$$A = \sum_g [L(g) - \frac{1}{2} J(g)]. \quad /3.4/$$

Следует подчеркнуть, что гамильтониан /3.3/ не описывает взаимодействие между спинами электронов, относящихся к разным узлам решетки, а является квазиспиновым представлением оператора электростатического взаимодействия, связанного с перекрытием орбиталей. Первый член в /3.3/, учитывающий электростатическое отталкивание  $L(\cdot)$ ; обычно опускают, перенормируя энергию основного состояния /22/. Как мы увидим в дальнейшем, учет отталкивания  $L(\cdot)$ , конкурирующего с притяжением  $J(\cdot)$ , может играть важную роль при объяснении ряда физических эффектов.

Воздействие внешнего магнитного поля на систему учитывают обычно, дополняя гамильтониан /3.3/ членом

$$H_{NB} = - \sum_f \vec{B} \vec{S}_f. \quad /3.5/$$

Анизотропию магнитных свойств в кристалле описывают разной величиной интеграла обмена в пространстве спиновых переменных

$$H_N = N \left( \frac{1}{2} A - \tilde{\mu} \right) \mathcal{D} - \sum_{f,f'} \sum_{\alpha} J^{\alpha}(f,f') S_f^{\alpha} S_{f'}^{\alpha} + H_{NB}, \quad \alpha = x, y, z. \quad /3.6/$$

Как нетрудно видеть, из определений /1.2/ и /2.17/, удельная намагниченность в модели Гейзенберга определяется вектором

$$\vec{M}(\theta, B) = \left\langle \frac{1}{N} \sum_f \vec{S}_f \right\rangle. \quad /3.7/$$

В зависимости от параметров гамильтониана /3.6/ вектор  $\vec{M}$  может иметь разную размерность. В предельно анизотропном случае, когда  $J^y(\cdot) = J^z(\cdot) = 0$ ,  $J^x(\cdot) \neq 0$ ,  $\vec{B} = \{0, 0, B\}$ , гамильтониан /3.6/ описывает модель Изинга /2.9/. Если в этом случае поле  $\vec{B} = \{B, 0, 0\}$ , то гамильтониан /3.3/ описывает так называемую модель Изинга в поперечном поле. В случае, когда  $J^x(\cdot) \neq 0$ ,  $J^y(\cdot) \neq 0$ ,  $J^z(\cdot) = 0$ , говорят о модели плоского ротатора или ХУ-модели.

Помимо размерности вектора намагниченности /3.7/ в гамильтониане /3.6/ можно варьировать размерность решетки  $\mathbb{Z}^d$ . Соответствие между различными частными формами гамильтониана /3.3/ и соединениями с магнитным упорядочением подробно рассмотрено в обзоре /81/.

Обобщение гамильтониана /3.6/, учитывающее квадратичное по полю взаимодействие

$$\tilde{H}_N = H_N - \Gamma \left( \sum_f \vec{B} \vec{S}_f \right)^2,$$

используется в связи с проблемой ненулевого угла Кабиббо в теории слабых взаимодействий /82/.

Изотропная модель Гейзенберга с гамильтонианом /3.3/ обладает инвариантностью относительно группы  $SU(2)$  и группы трансляций на решетке  $\mathbb{Z}^d$ . С введением анизотропии симметрия понижается. Так, гамильтониан Изинга /2.9/ в нулевом внешнем поле инвариантен уже только относительно группы трансляций и группы инверсий  $\mathbb{Z}_2$ , состоящей всего из двух элементов: единичного преобразования и инверсии  $G \rightarrow -G$ . Симметрия также понижается при включении внешнего поля  $B$ .

Гамильтониан /3.6/ удовлетворяет, очевидно, условиям, сформулированным в предыдущей главе, и поэтому для него существует термпредел /2.19/.

Как будет показано ниже, к гамильтониану типа /3.6/ приводят модели разных физических явлений.

Модель Бакстера. Эта модель представляет большой интерес, так как для нее удалось получить точное при  $N \rightarrow \infty$  решение, используемое как в статистической механике, так и в квантовой теории поля. Формулировка модели связана с рассмотрением плоской квадратной решетки, в каждый узел которой помещена спиновая переменная, принимающая значения +1 или -1, как в модели Изинга. Рассмотрим некоторый узел и четыре его ближайших соседа. Совокупность ближайших соседей узла в решетке обычно называют координационной сферой. Будем соединять центральный узел координационной сферы со своими соседями стрелками, причем стрелку будем направлять от центрального узла, если значение спина в соседнем узле есть +1, и к центральному узлу, если -1 /рис. 24/. Всего в квадратной решетке возможно 16 различных комбинаций. Если оставить из них лишь те 8, которые отмечены кружками, то получится так называемая восьмивершинная модель Бакстера /83,84/. Если обозначить через  $W(G_i, G_j, G_k, G_l)$  больцмановский вес соответствующего состояния /в модели Бакстера таких состояний 8/, то статистическая сумма будет определяться соотношением

$$Q = \sum_{G} \prod_{(i,j,k,l)} W(G_i, G_j, G_k, G_l). \quad /3.8/$$

где произведение берется по всем восьми состояниям. Оказывается, что проблема вычисления статистической суммы /3.8/ в термпределе эквивалентна задаче о нахождении статистической суммы для анизотропного гамильтониана Гейзенберга на одномерной решетке  $\mathbb{Z}^1$

$$H_N = \frac{1}{4} \sum_{f=1}^N \{ J^x G_f^x G_{f+1}^x + J^y G_f^y G_{f+1}^y + J^z G_f^z G_{f+1}^z \}$$

/так называемая XYZ-модель/ /85/.

Точное решение модели Бакстера может быть получено разными способами. Особое значение имеет регулярная процедура, развитая Л.Д.Фаддеевым и другими /86,87/ на основе квантового метода обратной задачи теории рассеяния.

Модель сегнетоэлектрика KDP-типа. В первой лекции мы говорили о двух механизмах, вызывающих сегнетоэлектрическое упорядочение в кристаллах. Здесь мы подробно остановимся на втором, связанном с упорядочением ионов. К таким сегнетоэлектрикам относится дигидрофосфат калия  $KH_2PO_4$ , давший название всему классу, и ряд других кристаллов с водородными связями:  $RbH_2PO_4$ ,  $RbH_2AsO_4$ ,  $CsH_2AsO_4$  и др. Как показывает нейтронная спектроскопия, выше точки перехода протоны в водородных связях распределены симметрично, тогда как ниже точки перехода это распределение асимметрично относительно соседних ионов /88/.

Это вызвано тем, что водородная связь представляет собой потенциал с двумя минимумами /рис. 25/. В простейшем случае ямы считают симметричными. Квазиспиновый оператор  $S^z$  вводит для описания протона в "правом" или "левом" положении

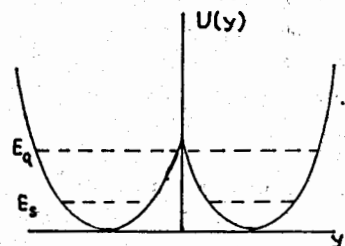


Рис. 25. Водородная связь в KDP.

$$S^z |R\rangle = \frac{1}{2} |R\rangle, \quad S^z |L\rangle = -\frac{1}{2} |L\rangle$$

Гамильтониан  $f$ -го протона в яме

$$H_f = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + U(y)$$

в матричном представлении имеет вид

$$\begin{pmatrix} \langle R | H_f | R \rangle & \langle R | H_f | L \rangle \\ \langle L | H_f | R \rangle & \langle L | H_f | L \rangle \end{pmatrix} = E_0 \mathbb{I} + \Omega S_f^z$$

где  $\Omega = E_a - E_s$ ,  $E_a, E_s$  - соответственно, антисимметричное и симметричное состояния протона в яме и

$$E_0 = \frac{E_a + E_s}{2}$$

далее предполагается, что в решетке содержится  $N$  таких протонов, причем имеет место взаимодействие: 1/ диполей, возникающих за счет нахождения протонов в одной из ям /такое взаимодействие имеет операторную структуру типа  $S_f^z S_{f'}^z$ , ( $f \neq f'$ ) /; 2/ действие поперечного поля одного протона на поперечное поле другого  $S_f^x S_{f'}^x$ . Поэтому гамильтониан сегнетоэлектрика KDP-типа имеет вид

$$H_N = NE_0 \mathbb{I} - \sum_f \Omega S_f^z - \frac{1}{2} \sum_{f,f'} \{ J^z(f,f') S_f^z S_{f'}^z + J^x(f,f') S_f^x S_{f'}^x \} - \mathcal{E} \sum_f S_f^z, \quad /3.9/$$

где  $\mathcal{E}$  - внешнее электрическое поле. В силу малости параметра взаимодействия  $J^x(\cdot)$  соответствующий член обычно опускают /30/.

Как нетрудно видеть, гамильтониан /3.9/ является частным случаем гамильтониана Гейзенберга /3.6/.

Поляризация, определяемая соотношением /1.7/, очевидно, есть

$$P(\mathcal{E}, \mathcal{E}) = \left\langle \frac{1}{N} \sum_f S_f^z \right\rangle,$$

что идентично выражению /3.7/. Такое согласие в гамильтонианах ферромагнетика и сегнетоэлектрика и в определении первых производных от соответствующих свободных энергий не случайно; оно выражает сходство поведения, проявляемое экспериментально /см. рис. 4, 11/.

Модель Дикке. Это простейшая статистическая модель, описывающая когерентное монохроматическое /лазерное/ электромагнитное излучение. Рассмотрим нерелятивистский электрон в поле излучения, характеризующем векторным потенциалом  $\vec{A}$ :

$$H_k = \frac{1}{2m} \left( \vec{k} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + \frac{\mathcal{E}^2 + B^2}{8\pi}$$

где  $\vec{k}$  - импульс электрона. Так как величина  $e^2/2mc^2$  мала, то в первом порядке теории возмущений членом  $\vec{A}^2 \cdot e^2/2mc^2$  можно пренебречь /89/. Пусть электрон относится к атому активной среды и пусть оптическое поле излучения почти монохроматично, а его частота совпадает с одной из частот атомных переходов /например,  $\omega_0$ , рис.26/. В этом случае влиянием остальных уровней атома можно пренебречь. Таким образом, для каждого атома остается лишь двумерное гильбертово /89/ пространство функций состояний  $|+\rangle$  и  $|-\rangle$  /двухуровневый атом /1/. В этом базисе, соответствующем дипольному представлению /см.,

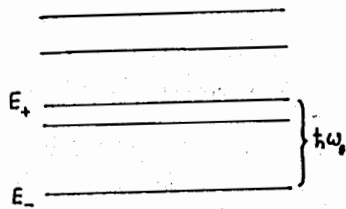


Рис. 26. Переход к двум рабочим уровням.

например, <sup>190/</sup>, атомная часть полного гамильтониана

$$H = H_k + H_a$$

имеет матричные элементы  $\langle \pm | H_a | \pm \rangle = E_{\pm}$ ,  $\langle \pm | H_a | \mp \rangle = 0$ . Поэтому для  $H_a$  может быть использовано квазиспиновое представление

$$H_{af} = \frac{E_+ + E_-}{2} \mathbb{1} + \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sigma_f^z,$$

где  $f$  - индекс данного атома в системе. Далее, электромагнитное поле квантуется в кубе, объем которого  $V \gg V_c$  - объема активной среды:

$$\vec{A} = \sum_q \left( \frac{2\pi \hbar c}{\omega_q V} \right)^{1/2} \{ \vec{\psi}_q(\vec{r}) b_q + b_q^\dagger \vec{\psi}_q^*(\vec{r}) \},$$

где  $b_q^\dagger, b_q$  - операторы рождения, уничтожения фотона с частотой  $\omega_q$  и  $\{ \vec{\psi}_q(\vec{r}) \}$  - полная система функций в объеме  $V$ :

$$\vec{\psi}_q(\vec{r}) = V^{-1/2} \vec{e}_q e^{i\vec{q}\vec{r}}, \quad \int d\vec{r} \vec{\psi}_q(\vec{r}) \vec{\psi}_{q'}(\vec{r}) = \delta_{qq'}, \quad \vec{r} \in V.$$

Здесь  $\vec{e}_q$  - единичный вектор поляризации моды  $\vec{q}$ . В этом представлении

$$\int d\vec{r} \frac{E^2 + B^2}{8\pi} \rightarrow \sum_q \hbar \omega_q b_q^\dagger b_q.$$

Далее, связывая известным образом матричные элементы оператора импульса  $\langle + | \vec{k} | - \rangle$  с матричными элементами оператора дипольного электрического момента перехода

$$\hat{d} = \begin{pmatrix} 0 & d_x + id_y \\ d_x - id_y & 0 \end{pmatrix} = (d_x + id_y) \sigma^+ + (d_x - id_y) \sigma^-, \quad \sigma^\pm = (\sigma^x \pm i\sigma^y)/2$$

и оставляя в  $\vec{k} \vec{A}$  взаимодействие только с резонансной модой  $\omega_0 = \omega_q$ , для энергии взаимодействия поля с двухуровневым атомом нетрудно получить

$$H_{int} = \frac{\lambda}{\sqrt{N}} (\sigma^- b_0^\dagger + \sigma^+ b_0).$$

Здесь использовано приближение вращающейся волны<sup>189/</sup>, т.е. оставлены лишь члены, отвечающие переходам  $E_+ \rightarrow E_-$  с испусканием фотона и  $E_- \rightarrow E_+$

с поглощением фотона. Параметр  $\lambda$  имеет вид

$$\lambda = \sqrt{2\pi \hbar \omega_0 \rho}, \quad \rho \equiv N/V.$$

Тогда полный гамильтониан системы из  $N$  двухуровневых атомов, взаимодействующих с полем электромагнитного излучения, может быть записан в виде /гамильтониан Дикке<sup>191/</sup>

$$H_N = \sum_q \hbar \omega_q b_q^\dagger b_q + N \frac{E_+ + E_-}{2} \mathbb{1} + \sum_{f=1}^N \left\{ \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sigma_f^z + \frac{\lambda}{\sqrt{N}} (\sigma_f^- b_0^\dagger + \sigma_f^+ b_0) \right\}. \quad /3.10/$$

Такой гамильтониан описывает равновесный фазовый переход в состоянии, характеризующее упорядочением диполей и иногда называемое "сверхизлучательным"<sup>192/</sup>, а также процесс спонтанного, когерентного монохроматического излучения<sup>193/</sup> /см. также<sup>194/</sup>.

Как нетрудно видеть, гамильтониан /3.10/ относится к третьему из рассмотренных в лекции 2 классов.

Совершим каноническое преобразование Боголюбова, сдвигающее бозонные переменные<sup>\*</sup>

$$b_0^\dagger \rightarrow \tilde{b}_0^\dagger = b_0^\dagger + \frac{\lambda}{\hbar \omega_0} (N)^{-1/2} \sum_f \sigma_f^+, \quad /3.11/$$

Теперь гамильтониан /3.10/ принимает вид

$$H_N = H_b + H_G, \quad /3.12/$$

где

$$H_b = \sum_{q \neq 0} \hbar \omega_q b_q^\dagger b_q + \hbar \omega_0 \tilde{b}_0^\dagger \tilde{b}_0,$$

$$H_G = N \frac{E_+ + E_-}{2} \mathbb{1} + \sum_f \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sigma_f^z - \frac{\lambda^2}{\hbar \omega_0} N^{-1} \sum_{f,f'} \sigma_f^+ \sigma_{f'}^-.$$

Далее, можно показать<sup>192/</sup>, что при  $N \rightarrow \infty$  в преобразовании /3.11/ последний член может быть заменен  $C$ -числом /оператором, кратным  $\mathbb{1}$  / \*\*/. Это позволяет расцепить пространства состояний, соответствующие бозонной и квазиспиновой подсистемам, и термодинамические свойства каждого из гамильтонианов  $H_b$  и  $H_G$  можно рассматривать по отдельности.

\*/ Это преобразование впервые было предложено в связи с теорией сверхтекучести<sup>195/</sup>.

\*\*/ Это обстоятельство связано с явлением бозонной конденсации /см. главу 6/.



Ясно, что гамильтониан  $H_e$  в /3.12/ представляет собой частный случай гамильтониана Гейзенберга /3.6/ и обладает инвариантностью относительно группы  $U(1)$ .

Модель Фрелиха. Сопротивление проводников связано с взаимодействием электронов с колебаниями ионов в решетке. Такому взаимодействию соответствует диаграмма, изображенная на рис. 27. Обычно пренебрегают поляризацией электронного остова, спин-орбитальным взаимодействием и рядом других взаимодействий, по тем или иным причинам не вносящих заметного вклада в явление сверхпроводимости /27/.

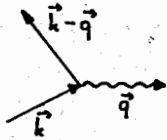


Рис. 27. Электрон-фононное взаимодействие.

Полный гамильтониан рассматриваемой системы можно представить в виде

$$H = H_e + H_i + H_{e-i}, \quad /3.13/$$

где  $H_e$  - энергия электронов,  $H_i$  - энергия ионов и  $H_{e-i}$  - их взаимодействие. В  $H_e$  обычно включают кинетическую энергию электронов и их кулоновское отталкивание /26, 27/:

$$H_e = \sum_l \frac{k_l^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{l \neq m} \frac{e^2}{|r_l - r_m|},$$

где  $r_l$  - координата  $l$ -го свободного электрона и  $k_l$  - его импульс.

$$H_i = \sum_f \frac{p_f^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{f, f'} \Phi(\vec{R}_f, \vec{R}_{f'}),$$

где  $\vec{R}_f$  - координата,  $\vec{p}_f$  - импульс  $f$ -го иона и  $\Phi(\cdot)$  - ион-ионное взаимодействие. Для простоты все ионы будем считать одинаковыми. Наконец,

$$H_{e-i} = \sum_{l, f} U(\vec{r}_l, \vec{R}_f).$$

Пусть  $\vec{R}_f^{(eq)}$  - равновесное положение  $f$ -го иона и  $\vec{R}_f = \vec{R}_f^{(eq)} + \vec{u}_f$ . Смещение  $\vec{u}_f$  будем считать малым. Тогда

$$H_{e-i} \approx \sum_{l, f} \left\{ U(\vec{r}_l, \vec{R}_f^{(eq)}) - \vec{u}_f \cdot [\nabla U(\vec{r}_l, \vec{R}_f)]_{\vec{R}_f = \vec{R}_f^{(eq)}} \right\},$$

и после перехода к представлению вторичного квантования для электронов и фононов /ср./2.14// получаем для второго члена

$$H_{e-ph} = \frac{i}{\sqrt{V}} \sum_q \left\{ J_q b_q \sum_k a_{k-q}^\dagger a_k + \text{з.с.} \right\}. \quad /3.14/$$

Здесь  $\vec{q}$  - волновой вектор фононов и

$$J_q \approx q \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_q}} \int \varphi_{k-q}^*(r) U \varphi_k(r) dr,$$

где  $\varphi_k$  - функции Блоха без экспоненциального множителя /80/, и интеграл берется в пределах одной элементарной ячейки. Разлагая  $\Phi(\cdot)$  по  $\vec{u}$  до второго порядка, оператор  $H_i$  можно представить в виде

$$H_i \approx \sum_q \hbar \omega_q b_q^\dagger b_q \approx H_{ph}$$

/гамильтониан свободных фононов/. Пренебрегая кулоновским отталкиванием, находим

$$H_e = \sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k, \quad \epsilon_k \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu + \tilde{U},$$

где  $\tilde{U}$  - среднее поле ионов, находящихся в положении равновесия. Гамильтониан

$$H = H_e + H_{ph} + H_{e-ph} \quad /3.15/$$

описывает модель Фрелиха /96/. Эта модель широко используется в теории металлов, теории полярона и, в частности, позволяет объяснить изотопический эффект в сверхпроводниках /26, 27/. Гамильтониан /3.15/ также относится к третьему классу по классификации из лекции 2.

На основе /3.15/ может быть получен модельный гамильтониан теории сверхпроводимости.

Модель БКШ-Боголюбова. Выше в лекции 1 говорилось о том, что явление сверхпроводимости связано с возникновением пар электронов, обусловленным электрон-фононным взаимодействием. Теперь мы имеем электрон-фононный гамильтониан /3.15/ и можем попытаться получить отсюда такое спаривание. Заметим, что по операторной структуре /3.15/ напоминает /3.10/. Поэтому можно сделать каноническое преобразование типа /3.11/

$$b_q^\dagger \rightarrow \tilde{b}_q^\dagger = b_q^\dagger + \frac{J_q}{\hbar \omega_q \sqrt{V}} \sum_{k, k'} a_k^\dagger a_{k'}.$$

Если учитывать не более чем счетное число фононных мод, можно показать, что при  $V \rightarrow \infty$  последний член здесь также становится  $C$ -числом /97/. Оставляя только взаимодействие для электронов с противоположно направленными импульсами и спинами, получаем по аналогии с  $H_e$  в /3.12/ эффективный гамильтониан электронной подсистемы

$$H_e = \sum_k \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu \right) a_k^\dagger a_k - \frac{1}{V} \sum_{k, k'} J(k, k') a_{k'}^\dagger a_{-k}^\dagger a_{k'} a_{-k}. \quad /3.16/$$

Оператор /3.16/ называется гамильтонианом БКШ<sup>\*</sup>/-Боголюбова. Подробный вывод /3.16/ из гамильтониана Фрелиха /3.15/ дан в работах Н.Н.Боголюбова /см. /26,98/ /. Ядро взаимодействия  $J(\cdot)$  обычно не вычисляется из первых принципов, а выбирается в виде

$$J(k, k') = \begin{cases} J = \text{const}, & |\frac{k^2}{2m} - \mu| \leq \hbar\Omega \\ 0, & |\frac{k^2}{2m} - \mu| > \hbar\Omega \end{cases}$$

/взаимодействие Бардина/ либо представляется как

$$J(k, k') = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}(k) \lambda_{\alpha}^{*}(k'),$$

где функции  $\lambda(\cdot)$  удовлетворяют некоторым дополнительным условиям /см. /99,100/ /.

Следя работе /101/, рассмотрим оператор  $n_{k\sigma} = a_{k\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma}$ . Ясно, что

$$[(n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow}), H_v] = 0.$$

Пусть волновая функция  $\psi$  соответствует наименьшему собственному значению гамильтониана  $H_v$ . Очевидно, что

$$\forall k \quad (n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow})\psi = 0 \quad /3.17/$$

/доказательство см. /101/ /. Для класса функций  $\{\psi\}$ , удовлетворяющих условию /3.17/, гамильтониан /3.16/ может быть выражен через амплитуды Паули

$$G_k^- = a_{k\uparrow}^{\dagger} a_{-k\downarrow}^{\dagger}, \quad G_k^+ = a_{-k\downarrow} a_{k\uparrow}, \quad G_k^z = \mathbb{1} - (a_{k\uparrow}^{\dagger} a_{k\uparrow} + a_{-k\downarrow}^{\dagger} a_{-k\downarrow}).$$

Здесь операторы  $G^-$ ,  $G^+$  описывают, соответственно, рождение и уничтожение парных состояний из электронов с противоположно направленными импульсами и спинами. В таком квазиспиновом представлении, впервые введенном в теорию сверхпроводимости в работе /102/, гамильтониан /3.16/ имеет вид

$$H_v = \frac{1}{2} \sum_k \left( \frac{k^2}{2m} - \mu \right) (\mathbb{1} - G_k^z) - \frac{1}{V} \sum_{k, k'} J(k, k') G_k^- G_{k'}^+ \quad /3.18/$$

т.е. является частной формой /3.6/. Как и оператор  $H_G$  в /3.12/, гамильтониан /3.18/ инвариантен относительно группы  $U(1)$ .

В первой лекции указывалось сходство в температурном поведении спонтанной намагниченности ферромагнетика /рис. 4а/ и щели в сверхпроводнике /рис. 8б/. Первая из этих двух величин связана, как мы

\*/ Бардина, Купера, Шриффера.

теперь знаем, со средним спином /3.7/. Величина щели определяется как /26,27/

$$\Delta_k(\theta) = \sum_{k'} J(k, k') \langle a_{k\uparrow}^{\dagger} a_{-k\downarrow}^{\dagger} \rangle,$$

т.е. в квазиспиновом представлении  $\Delta$  оказывается пропорционально среднему значению квазиспиновой переменной  $\langle G^z \rangle$ . Таким образом, указанное сходство не является случайным.

Модели ядра. В теории ядра очень широко используются аналогии с теорией сверхпроводимости. Прямым указанием на использование таких аналогий является, прежде всего, то обстоятельство, что вращательные моменты инерции реальных тяжелых ядер значительно меньше тех значений, которые они имели бы, если бы вращались как твердые тела. Такой феномен легко объяснить, если предположить, что протоны и нейтроны /фермиевские частицы/, спариваясь наподобие электронов в сверхпроводнике, образуют сверхтекучий бозе-конденсат /см. подробнее лекцию 5/. Впервые такого рода подход в теории ядерной материи был предложен Н.Н.Боголюбовым /103/. Дальнейшее развитие этого подхода, связанное с использованием модельных гамильтонианов типа /3.16/, /3.18/ и их обобщений, позволило получить ряд важных результатов в теории ядра /см., например, /104/ /, в частности, изучить ротационные и вибрационные состояния ядер.

Приведем здесь формулировку одной из простейших моделей в теории ядра /105/. Пусть система состоит из  $N$  фермионов /нуклонов/, распределенных по двум уровням с разностью энергий  $\epsilon$  и  $N$ -кратным вырождением. Такие уровни можно рассматривать как две оболочки с одинаковыми значениями квантового числа углового момента. Как и в модели Дикке, верхнему и нижнему уровням припишем состояния  $|+\rangle$  и  $|-\rangle$ . Индексом  $f$  будем обозначать отдельное вырожденное состояние. Очевидно, каждому  $f$  соответствует пара состояний  $| \pm \rangle_f$ . Обычно считают, что квантовое число  $f$  характеризует  $z$ -компоненту углового момента системы /105/. Предположим, что двухчастичное взаимодействие не изменяет  $f$ . Гамильтониан такой системы может быть представлен в виде

$$H = \frac{1}{2} \epsilon \sum_{f, s} s a_{f, s}^{\dagger} a_{f, s} + \frac{1}{2} I \sum_{f, f', s} a_{f, s}^{\dagger} a_{f', s}^{\dagger} a_{f', -s} a_{f, -s} + \frac{1}{2} J \sum_{f, f', s} a_{f, s}^{\dagger} a_{f', -s}^{\dagger} a_{f', s} a_{f, -s} \quad /3.18/$$

Здесь  $s = \pm 1$ , константы связи  $I$  и  $J$  характеризуют взаимодействия, соответствующие переходу пары с одного уровня на другой и переходу одной частицы вверх при одновременном переходе другой вниз,  $a^{\dagger}$ ,  $a$  - фермиевские операторы. Последний член в /3.18/ имеет ту же структуру, что и взаимодействие в модели сверхпроводника /3.16/. Здесь также можно перейти к квазиспиновому представлению. Имеем

$$\text{Тогда } G_f^+ = a_{f+1}^+ a_{f-1}^+ , G_f^- = a_{f-1}^+ a_{f+1}^+ , G_f^z = \frac{1}{2} \sum_s s a_{fs}^+ a_{fs}^+ .$$

$$H = \varepsilon \sum_f G_f^z + \frac{1}{2} I \sum_{ff'} (G_f^+ G_{f'}^+ + G_f^- G_{f'}^-) + \frac{1}{2} J \sum_{ff'} (G_f^+ G_{f'}^- + G_f^- G_{f'}^+) . \quad /3.19/$$

Модельный гамильтониан типа /3.18/ или /3.19/ называют иногда моделью Липкина.

Вращение ядер учитывают обычно путем добавления к гамильтониану спаривания так называемого кренкинг-члена

$$H_{\text{cranking}} = -\omega J_x ,$$

где  $\omega$  - частота вращения и  $J_x$  - оператор углового момента

$$J_x = \sum_f J_{xf} (a_{f+1}^+ a_{f-1}^+ + a_{f-1}^+ a_{f+1}^+ ) .$$

Такой член подобен внешнему полю в модели Гейзенберга.

Итак, в настоящей лекции мы рассмотрели ряд примеров модельных задач, изучаемых в связи с разными физическими явлениями. Многие из них обладают сходной математической структурой, в частности, допускают квазиспиновое представление. Это обстоятельство обусловлено той общностью, которой обладают фазовые переходы.

Разумеется, приведенными примерами перечень моделей, применяемых в связи с исследованием фазовых переходов, далеко не исчерпывается. Более подробный обзор дан в /19/. Ниже мы введем в рассмотрение еще несколько моделей. Вообще же рассмотрение различных модельных гамильтонианов статистической механики и их свойств - тема, заслуживающая самостоятельного рассмотрения.

"Отыщи всему начало,  
и ты многое поймешь."

К. Прутков. "Сочинения".

#### Лекция 4. ВЫРОЖДЕНИЕ И КВАЗИСРЕДНИЕ

Для того чтобы разобраться, в каких системах и при каких условиях возможны фазовые переходы, необходимо прежде всего исследовать свойства симметрии модельных гамильтонианов. При этом центральными понятиями для теории фазовых переходов являются следующие: макроскопичес-

кое вырождение, спонтанное нарушение симметрии, термодинамическая выгодность и квазисредние.

Приведем сначала некоторые интуитивные примеры, проясняющие суть указанных понятий. Под вырождением понимается ситуация, при которой допустим выбор из нескольких эквивалентных возможностей. Подобные ситуации часто встречаются в жизни, когда приходится решать: быть или не быть, куда пойти учиться, жениться или не жениться. Если каждое из возможных решений представляется одинаковым, то это и соответствует наличию симметрии. А когда человек, полагаясь на волю случая, жребия или настроения, выбирает одну из возможностей, это соответствует спонтанному нарушению симметрии. Классической иллюстрацией понятий вырождения и спонтанного нарушения симметрии служит постоянно встречающийся в русских народных сказках эпизод, изображенный на рис. 28. Герой оказывается у развилки дорог и читает на камне: "Налево пойдешь - смерть найдешь, направо пойдешь - совсем пропадешь". Естественно, в такой вырожденной ситуации трудно решить куда пойти, куда податься. И когда герой произвольным образом принимает решение, выбирая тот или иной путь, как раз и происходит спонтанное нарушение симметрии. Возникает вопрос, а почему бы герою не ломать голову над выбором, а просто вернуться домой? Но в сказке поясняется, что жизнь его сложилась так, что назад пути ему уже нет - жизненные обстоятельства таковы, что ему выгоднее на что-то решиться, чем ничего не делать. Так мы пришли и к понятию выгодности.

Перейдем теперь к более строгому обсуждению этих понятий. Обратимся к квантовой модели Изинга с гамильтонианом

$$H_N = - \sum_{ij}^N J_{ij} S_i^z S_j^z , \quad /4.1/$$

в котором  $i, j$  нумеруют узлы решетки, полное число которых равно  $N$ ,  $S_i^z$  -  $z$ -компонента оператора спина, обменный интеграл соответствует ферромагнитной системе:

$$J_{ij} = J_{ji} \geq 0 , J_{ii} = 0 .$$

Если в /4.1/ иметь в виду спин 1/2 и проводить суммирование лишь по ближайшим соседям, то мы возвращаемся к гамильтониану /2.9/ в нулевом внешнем поле. Поскольку нам сейчас неважно, по каким соседям проводится суммирование, будем работать с гамильтонианом

$$H_N = - \frac{1}{4} \sum_{ij}^N J_{ij} G_i^z G_j^z , \quad /4.2/$$

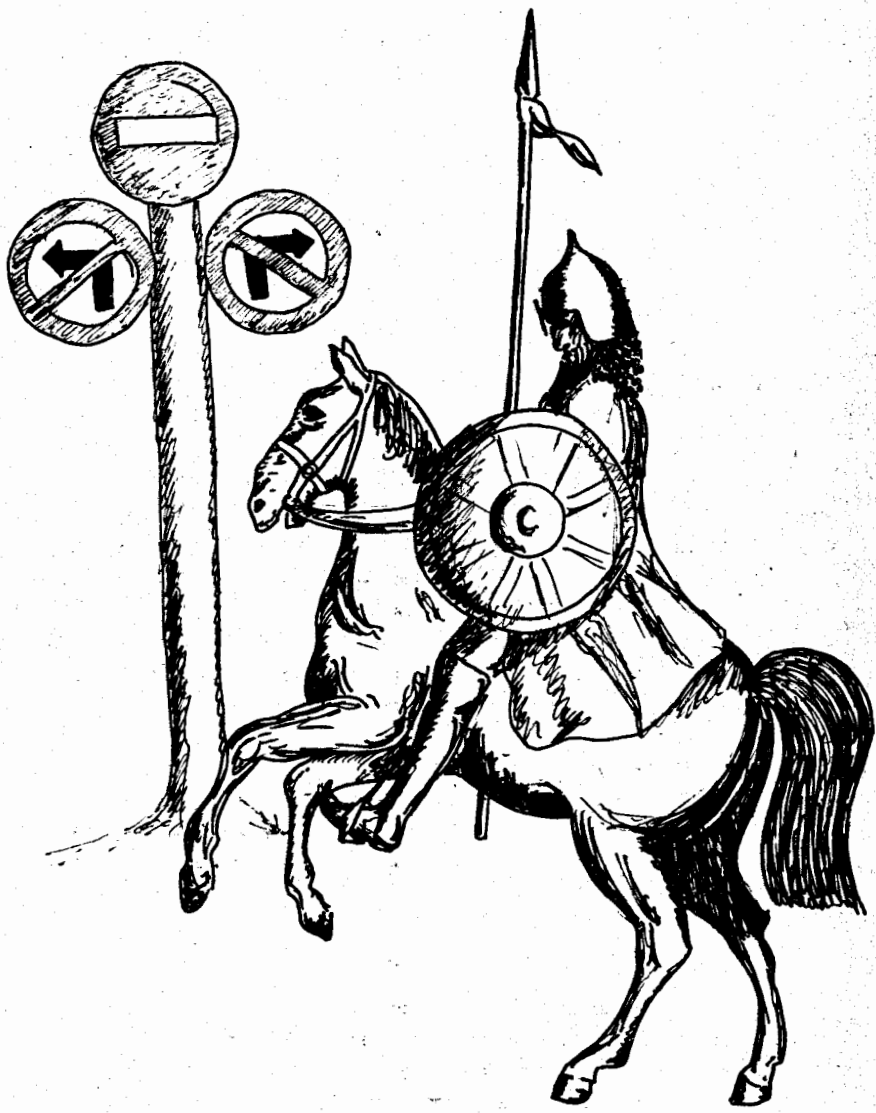


Рис. 28. Пример ситуации, демонстрирующей вырождение и спонтанное нарушение симметрии.

где  $G^z$  - матрицы Паули. Очевидно,  $H_N$  инвариантен относительно группы  $Z_2$  ( $G_i^z \rightarrow G_i^z, G_i^x \rightarrow -G_i^x$ ).

Введем обозначения для спиновых функций, описывающих состояния со спином вверх в  $i$ -м узле,

$$\psi_{i+} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_i = \uparrow_i,$$

а также со спином вниз,

$$\psi_{i-} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_i = \downarrow_i.$$

Эти функции образуют базис в пространстве  $C_i^2$ . Полным пространством состояний для гамильтониана /4.2/ является /2.10/

$$\mathcal{H}_N = \bigotimes_{i=1}^N C_i^2 \equiv (C_i^2)^N. \quad /4.3/$$

В частности, возможны состояния со спинами, ориентированными вверх,

$$\psi_+^N = \bigotimes_{i=1}^N \psi_{i+} = \uparrow_1 \uparrow_2 \uparrow_3 \dots \uparrow_N, \quad /4.4/$$

ориентированными вниз,

$$\psi_-^N = \bigotimes_{i=1}^N \psi_{i-} = \downarrow_1 \downarrow_2 \downarrow_3 \dots \downarrow_N \quad /4.5/$$

и с разориентированными спинами

$$\psi_0^N = \uparrow_1 \downarrow_2 \uparrow_3 \dots \downarrow_N \quad /4.6/$$

Последовательное расположение спинов в этих обозначениях соответствует некоторой нумерации узлов произвольной решетки, но отнюдь не имеет в виду обязательно линейную цепочку. Функции /4.4/-/4.6/ являются собственными для оператора

$$\hat{G} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N G_i^z = \frac{1}{NS} \sum_{i=1}^N S_i^z, \quad /4.7/$$

имеющего смысл оператора приведенного спина. Ясно, что собственными значениями оператора /4.7/ для функций /4.4/, /4.5/ и /4.6/ будут, соответственно, +1, -1 и 0 :

$$(\psi_+^N, \hat{G} \psi_+^N) = 1,$$

$$(\psi_-^N, \hat{G} \psi_-^N) = -1,$$

$$(\psi_0^N, \hat{G} \psi_0^N) = 0.$$

Из всех функций пространства  $\mathcal{H}_N$  особую роль играют те, которые описывают вакуумное состояние, называемое также основным состоянием, или просто вакуумом.

По определению вакуум - это волновая функция, удовлетворяющая следующим двум условиям:

1/ с помощью элементарных возбуждений из нее можно построить полное пространство состояний;

2/ энергия элементарных возбуждений неотрицательна.

Элементарным возбуждением состояния  $\psi^N$  в случае модели Изинга является один спин, перевернутый относительно  $\psi^N$ . Переворот спина называют также спин-флиппом, поэтому такое элементарное возбуждение можно именовать флиппомом.

Флиппонное возбуждение над состоянием  $\psi_+^N$ , соответствующее перевертыванию  $i$ -го спина, описывается функцией

$$\psi_+^N(i) = \uparrow \dots \uparrow \downarrow \uparrow \dots \uparrow \quad /4.8/$$

Перевертывание двух спинов приводит к двухфлиппонному возбуждению с функцией  $\psi_+^N(i, j)$ . Таким образом можно построить многофлиппонные состояния  $\psi_+^N(i_1, \dots, i_n)$  с любым  $n \leq N$ . Очевидно, что если в состоянии  $\psi_+^N$  перевернуть все спины, то получим /4.5/,

$$\psi_+^N(12 \dots N) = \psi_-^N,$$

а если перевернуть только все четные спины, то придем к функции /4.6/,

$$\psi_+^N(246 \dots) = \psi_0^N.$$

Аналогично строятся флиппонные состояния над  $\psi_-^N$ , например, однофлиппонное:

$$\psi_-^N(i) = \downarrow \dots \downarrow \uparrow \downarrow \dots \downarrow \quad /4.9/$$

Точно так же можно определить  $n$ -флиппонные состояния  $\psi_-^N(i_1 \dots i_n)$ .

Понятно, что  $N$ -флиппонное возбуждение превращает /4.5/ в /4.4/:

$$\psi_-^N(12 \dots N) = \psi_+^N.$$

Перебрасывание снизу вверх всех нечетных спинов в  $\psi_-^N$  приводит к разупорядоченному состоянию,

$$\psi_-^N(135 \dots) = \psi_0^N.$$

Ничто не мешает задать флиппонные возбуждения и для  $\psi_0^N$ . Так, однофлиппонное состояние, построенное из /4.6/, имеет вид

$$\psi_0^N(i) = \uparrow \downarrow \uparrow \dots \uparrow \downarrow \uparrow \dots \uparrow \downarrow \uparrow \quad /4.10/$$

Переворот нечетных спинов в /4.6/ дает

$$\psi_0^N(135 \dots) = \psi_-^N,$$

а переброс всех четных спинов -

$$\psi_0^N(246 \dots) = \psi_+^N.$$

Таким образом, все функции пространства /4.3/ переходят одна в другую через последовательность флиппонных состояний. Обратим внимание, что флиппонные возбуждения над упорядоченным состоянием  $\psi_+^N$  или  $\psi_-^N$  соответствуют возникновению разупорядоченных кластеров и кластеров перевернутых спинов, а флиппонные возбуждения в случае неупорядоченного состояния  $\psi_0^N$  эквивалентны появлению упорядоченных кластеров.

Отметим, что элементарные возбуждения в многочастичной системе часто называют коллективными возбуждениями.

Выше мы выяснили, что взяв за основу любую из функций пространства /4.3/, с помощью флиппонных возбуждений можно построить все остальные состояния данного пространства. Чтобы решить, какая же из функций претендует на роль вакуума, надо определить энергию флиппонного возбуждения. Вообще говоря, энергии коллективных возбуждений определяются как полюса двухчастичных функций Грина или соответствующих корреляционных функций /106, 107/. Определяемые таким образом энергии зависят от температуры и других термодинамических параметров. Здесь для простоты мы определим энергию флиппонного возбуждения только при нулевой температуре.

Обозначим через  $|0\rangle$  ту волновую функцию, которая претендует на роль вакуума; это может быть  $\psi_+^N$ ,  $\psi_-^N$ ,  $\psi_0^N$  или любая другая из пространства  $\mathcal{H}_N$ . Однофлиппонному возбуждению над состоянием  $\psi_{\dots}^N$

поставим в соответствие функцию  $|i\rangle$ , если флиппон локализован в  $i$  - м узле решетки. Многофлиппонное возбуждение будем описывать состоянием  $|i_1 \dots i_n\rangle$ . Тогда энергию одного флиппона можно определить как разность энергий

$$\mathcal{E}(i) = \langle i | H | i \rangle - \langle 0 | H | 0 \rangle. \quad /4.11/$$

Вообще, энергию  $n$  - флиппонного возбуждения зададим разностью энергий соответствующего возбужденного и основного состояний:

$$\mathcal{E}(i_1 \dots i_n) = \langle i_1 \dots i_n | H | i_1 \dots i_n \rangle - \langle 0 | H | 0 \rangle. \quad /4.12/$$

Набор величин /4.12/ - не что иное, как коллективный спектр системы. Подставляя в /4.11/, /4.12/ конкретные функции, гамильтониан /4.2/ удобно представить в виде суммы одноузельных гамильтонианов:

$$H_N = \sum_i H_i, \quad H_i = -G_i^z \left( \frac{1}{4} \sum_{j \neq i}^N J_{ij} G_j^z \right).$$

Выбирая в качестве  $|0\rangle$  функцию  $\psi_+^N$ , а также  $\psi_-^N$ , для энергии флиппона получаем

$$\mathcal{E}_+(i) = J = \mathcal{E}_-(i), \quad \left( J \equiv \frac{1}{N} \sum_{ij} J_{ij} \right). \quad /4.13/$$

В силу предполагаемой трансляционной инвариантности решетки при  $N \gg 1$  флиппонная энергия не зависит от узла локализации флиппона. По той же причине двухфлиппонная энергия  $\mathcal{E}(ij)$  должна зависеть лишь от разности  $i-j$ . Очень важно, что флиппон, возбуждаемый над упорядоченным состоянием, будь то  $\psi_+^N$  или  $\psi_-^N$ , обладает положительной энергией. Если же в качестве  $|0\rangle$  выбрать неупорядоченное состояние  $\psi_0^N$ , то энергия флиппона, рождающегося из  $\psi_0^N$ , будет неположительной:  $\mathcal{E}_0(i) \leq 0$ . Это проявляется также и в том, что энергия системы в упорядоченном состоянии, равная

$$(\psi_+^N, H \psi_+^N) = -\frac{N}{4} J = (\psi_-^N, H \psi_-^N),$$

ниже, чем в неупорядоченном, где она равна

$$(\psi_0^N, H \psi_0^N) = 0.$$

Так как энергия элементарных возбуждений для  $\psi_0^N$  неположительна, то состояние  $\psi_0^N$  не может служить вакуумом для модели Изинга при нулевой температуре. Определению вакуума удовлетворяют две функции:  $\psi_+^N$  и  $\psi_-^N$ . Причем по всем своим свойствам они полностью эквивалентны. Такая ситуация, когда у системы имеется несколько эквивалент-

ных вакуумов, как раз и называется вырождением. Последнее именуется микроскопическим, поскольку речь идет о конечной системе.

Теперь расширим определение вакуума, данное выше. Если некоторая функция по-прежнему удовлетворяет сформулированным ранее условиям 1/ и 2/, то будем называть ее истинным вакуумом. Если же она удовлетворяет лишь условию 1/, но не обязательно 2/, станем называть ее псевдовакуумом, а если 1/ выполняется, но 2/ нет - ложным вакуумом. При этом, как и раньше, мы имеем в виду нормированные волновые функции. В модели Изинга с конечным числом узлов любая функция из пространства /4.3/ может служить псевдовакуумом. В зависимости от знака энергии элементарных возбуждений ложные вакуумы делятся на два класса. Если все возбуждения, рождающиеся из псевдовакуума, имеют неположительную энергию, то такой псевдовакуум назовем неустойчивым, или лабильным вакуумом. А если часть возбуждений имеет неположительную, тогда как другая часть положительную энергию, то данный псевдовакуум называется метастабильным вакуумом. Согласно этой классификации при нулевой температуре состояния  $\psi_+^N$  и  $\psi_-^N$  - истинные вакуумы, а  $\psi_0^N$  - лабильный вакуум. Примером метастабильного вакуума может служить состояние

$$\psi_{+0}^N = \uparrow \uparrow \dots \uparrow \downarrow \downarrow \dots \downarrow \downarrow \dots \uparrow \uparrow, \quad /4.14/$$

образованное из  $N_1$  узлов с упорядоченными спинами и  $N_2 = N - N_1$  узлов с разупорядоченными спинами. Очевидно, что состояние /4.14/ не является трансляционно-инвариантным, поэтому энергия флиппона зависит от места его локализации. Флиппон, возникающий в упорядоченной области, имеет положительную энергию

$$\mathcal{E}_{+0}(i) = \sum_{j \neq i}^{N_1} J_{ij} > 0 \quad (1 \leq i < N_1),$$

в то время как флиппон в неупорядоченной области - неположительную энергию

$$\mathcal{E}_{+0}(i) \leq 0 \quad (N_1 \leq i \leq N).$$

Для энергии метастабильного состояния /4.14/ справедливо неравенство

$$-\frac{N}{4} J \leq (\psi_{+0}^N, H \psi_{+0}^N) \leq 0.$$

показывающее, что эта энергия лежит между энергиями экстремальных состояний  $\psi_+^N$  и  $\psi_0^N$ , обеспечивающих минимальную и максимальную энергии соответственно. Конечно, говоря об экстремальном состоянии при отличной от нуля температуре, надо было бы подразумевать экстре-

мальность внутренней энергии /2.22/, либо экстремальность любого иного термодинамического потенциала. Однако, как видно из лекции 2, для вычисления термодинамического потенциала приходится брать шпур по произвольному базису некоторого пространства. Система из конечного числа частиц  $N$  имеет единственный унитарно неприводимый базис, то есть такой базис, который не приводится к другому с помощью унитарного преобразования. Следовательно, данная система имеет единственную свободную энергию /единственный потенциал Гиббса .../, когда  $N < \infty$ ,  $T > 0$ . Значит, говорить об экстремальных состояниях для системы из конечного числа частиц при ненулевой температуре нет смысла. Кроме того, в конечной системе не существует и фазовых переходов. Действительно, в пространстве /4.3/ каждому состоянию с некоторой энергией и собственным значением оператора /4.7/ сопоставляется другое состояние с той же энергией и противоположным по знаку собственным числом оператора  $\hat{G}$ . Поэтому

$$\langle \hat{G} \rangle = 0 \quad (\forall \theta \geq 0, N < \infty). \quad /4.15/$$

То есть средний спин системы, играющий роль параметра порядка, всегда равен нулю. Система всегда симметрична относительно группы  $Z_2$ .

В случае же бесконечной системы ситуация не столь тривиальна. Устремляя число узлов к бесконечности, будем обозначать пределы соответствующих функций без индекса  $N$ :

$$\Psi_{\pm}(i_1 \dots i_n) = \lim_{N \rightarrow \infty} \Psi_{\pm}^N(i_1 \dots i_n); \quad /4.16/$$

аналогично обозначим и пределы состояний  $\Psi_{\pm}(i_1 \dots i_n)$ ,  $\Psi_0(i_1 \dots i_n)$  и так далее. В пределах типа /4.16/ предельное состояние содержит сколь угодно большое, но конечное число флиппонов ( $N < \infty$ ). Но таких состояний существует бесконечное множество. Другими словами, предел  $n \rightarrow \infty$  имеет смысл только после термодинамического предела  $N \rightarrow \infty$ . Таким образом, отправляясь от любой из функций

$$\Psi_{\pm} = \lim_{N \rightarrow \infty} \Psi_{\pm}^N, \quad \Psi_0 = \lim_{N \rightarrow \infty} \Psi_0^N, \quad /4.17/$$

с помощью флиппонных возбуждений строятся три различных счетных базиса  $\{\Psi_{\pm}(i_1 \dots i_n)\}$ ,  $\{\Psi_{\pm}(i_1 \dots i_n)\}$  и  $\{\Psi_0(i_1 \dots i_n)\}$ , на которые натягиваются сепарабельные гильбертовы пространства  $\mathcal{H}_{+}$ ,  $\mathcal{H}_{-}$  и  $\mathcal{H}_0$  соответственно. Но это еще не все. Для функций типа /4.14/ предельный переход  $N \rightarrow \infty$  можно определить так, чтобы одновременно  $N_1 \rightarrow \infty$ . Из полученного так состояния

$$\Psi_{+0} = \lim_{\substack{N_1 \rightarrow \infty \\ N_2 \rightarrow \infty}} \Psi_{+0}^N \quad (N_1 + N_2 = N), \quad /4.18/$$

задавая флиппонные возбуждения, можно построить счетный базис  $\{\Psi_{+0}(i_1 \dots i_n)\}$  и натянуть на него сепарабельное пространство  $\mathcal{H}_{+0}$ . Варьируя расположение упорядоченной и разупорядоченной областей на решетке и меняя значения  $N_1$  и  $N_2$  при условии  $N_1 + N_2 = N$ , можно получить /при  $N \rightarrow \infty$ / счетное множество пространств типа  $\mathcal{H}_{+0}$ , которое обозначим через  $\{\mathcal{H}_{+0}\}$ . Таким же образом, начиная с функции

$$\Psi_{-0}^N = \downarrow \downarrow \dots \downarrow \uparrow \uparrow \dots \uparrow, \quad /4.19/$$

приходим к состоянию

$$\Psi_{-0} = \lim_{\substack{N_1 \rightarrow \infty \\ N_2 \rightarrow \infty}} \Psi_{-0}^N \quad (N_1 + N_2 = N), \quad /4.20/$$

а затем к счетному множеству пространств  $\{\mathcal{H}_{-0}\}$ . Наконец, начиная с функции

$$\Psi_{+-}^N = \uparrow \uparrow \dots \uparrow \downarrow \downarrow \dots \downarrow, \quad /4.21/$$

получим счетное множество пространств  $\{\mathcal{H}_{+-}\}$ , в которых роль основного состояния играют функции вида

$$\Psi_{+-} = \lim_{\substack{N_1 \rightarrow \infty \\ N_2 \rightarrow \infty}} \Psi_{+-}^N \quad (N_1 + N_2 = N). \quad /4.22/$$

Итак, в термодинамическом пределе вместо одного пространства  $\mathcal{H}_N$  мы имеем три пространства  $\mathcal{H}_{+}$ ,  $\mathcal{H}_{-}$  и  $\mathcal{H}_0$  с трансляционно-инвариантными псевдовакуумами /4.17/ и счетное множество, состоящее из пространств  $\{\mathcal{H}_{+0}\}$ ,  $\{\mathcal{H}_{-0}\}$  и  $\{\mathcal{H}_{+-}\}$  с трансляционно-неинвариантными псевдовакуумами /4.18/, /4.20/ и /4.22/ соответственно. Это свидетельствует о том, что не существует предела для  $\mathcal{H}_N$  при  $N \rightarrow \infty$ . Подчеркнем, что любые два из пространств  $\mathcal{H}_{+}$ ,  $\mathcal{H}_{-}$ ,  $\mathcal{H}_0$  или из трансляционно-неинвариантного множества состояний

$$\mathcal{H} = \{\mathcal{H}_{+0}\} \oplus \{\mathcal{H}_{+-}\} \oplus \{\mathcal{H}_{-0}\} \quad /4.23/$$

ортогональны друг другу, а следовательно, соответствующие им псевдовакуумы унитарно неэквивалентны между собой.

Раз мы имеем множество различных пространств, то можно дефинировать и соответствующее множество средних значений для каждого из операторов. Например, для приведенной энергии получаем счетный набор

$$\bar{E}(\mathcal{H}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \langle H_N \rangle_{\mathcal{H}} \quad /4.24/$$

в зависимости от того, по какому из пространств берется штур при вычислении среднего.

Рассмотрим свойства симметрии каждого из пространств. У состояния  $\Psi_+$  нарушена симметрия  $Z_2$ , но сохранена симметрия относительно группы трансляций по решетке. Все флиппонные возбуждения над  $\Psi_+$  задают функции, принадлежащие одному и тому же пространству  $\mathcal{H}_+$ . Мы полагаем, что всякая термодинамическая фаза обладает определенным свойством симметрии, отличающим ее от других фаз. Пространство  $\mathcal{H}_+$  описывает упорядоченную фазу со средним спином /или намагниченностью/, направленным вверх. То есть характеристикой упорядоченности служит намагниченность, пропорциональная среднему от оператора /4.7/, в котором надо положить  $N \rightarrow \infty$ . В основном состоянии средний спин максимален

$$(\Psi_+, \hat{S} \Psi_+) = 1.$$

При включении температуры возникают флиппонные возбуждения, понижающие величину намагниченности. Но, как было отмечено, эти возбуждения соответствуют состояниям одного и того же пространства  $\mathcal{H}_+$ , сопоставляемого упорядоченной фазе; параметр порядка, характеризующий фазу, определяется как среднее

$$\langle \hat{S} \rangle_{\mathcal{H}_+} \neq 0. \quad /4.25/$$

Возбуждения, которые описываются функциями одного пространства с заданной симметрией, сопоставляемой определенной фазе, называются гомофазными флуктуациями.

В состоянии  $\Psi_-$  также инверсионная симметрия нарушена, а трансляционная сохранена. Средний спин, служащий параметром порядка, при нулевой температуре равен

$$(\Psi_-, \hat{S} \Psi_-) = -1.$$

Пространство  $\mathcal{H}_-$  описывает фазу с намагниченностью вниз.

Псевдовакуум  $\Psi_0$  обладает как инверсионной, так и трансляционной симметрией. Вследствие инверсионной симметрии

$$(\Psi_0, \hat{S} \Psi_0) = 0$$

и более того, параметр порядка всегда равен нулю:

$$\langle \hat{S} \rangle_{\mathcal{H}_0} = 0.$$

/4.26/

это характеризует разупорядоченную /парамагнитную/ фазу.

Заметим, что флиппонные возбуждения над  $\Psi_+$  или  $\Psi_-$  приводят к частичному разупорядочению спинов. Наоборот, в случае  $\Psi_0$  флиппонные возбуждения приводят к частичному упорядочению. Однако ни в коем случае нельзя сказать /что, к сожалению, часто делается/, что области элементарных возбуждений соответствуют зародышам другой фазы. Как мы уже выяснили, все флиппонные функции принадлежат одному пространству состояний и потому могут описывать лишь одну единственную фазу с определенной симметрией. Кроме того, добавим, что размеры флиппонных областей микроскопичны, то есть их величина в термодинамическом пределе исчезающе мала по сравнению с размером системы / $n/N \rightarrow 0$  /, тогда как по определению фаза всегда макроскопична, то есть величина занимаемой ею области сравнима по размеру со всей системой:  $N_1/N \rightarrow const$ . Пространства состояний  $\mathcal{H}_+$ ,  $\mathcal{H}_-$  и  $\mathcal{H}_0$  описывают чистые фазы.

Смешанные фазовые состояния /гетерофазные состояния/ задаются псевдовакуумами  $\Psi_{+0}$ ,  $\Psi_{-0}$ ,  $\Psi_{+-}$ , а значит, и построенными из последних пространствами  $\mathcal{H}_{+0}$ ,  $\mathcal{H}_{-0}$ ,  $\mathcal{H}_{+-}$ . Все возможные гетерофазные смеси определяются счетным множеством /4.23/.

Дополнительные сведения о свойствах псевдовакуумов можно извлечь, анализируя энергию флиппонных возбуждений. При нулевой температуре эта энергия определяется формулой /4.11/. Действуя так же как и ранее, убеждаемся, что энергия флиппона в пространствах  $\mathcal{H}_+$  и  $\mathcal{H}_-$  положительна, в пространстве  $\mathcal{H}_0$  неположительна, а в каждом пространстве из множества /4.23/ знакопеременна. Следовательно,  $\Psi_+$  и  $\Psi_-$  - истинные вакуумы,  $\Psi_0$  - лабильный вакуум, а вакуумы типа  $\Psi_{+0}$ ,  $\Psi_{-0}$  и  $\Psi_{+-}$  - метастабильны. Энергии флиппонных возбуждений над вакуумами  $\Psi_+$  и  $\Psi_-$  одинаковы. Совпадают и энергии основных состояний, и вообще средние энергии для пространств  $\mathcal{H}_+$  и  $\mathcal{H}_-$ :

$$\bar{E}(\mathcal{H}_+) = \bar{E}(\mathcal{H}_-).$$

Может показаться непонятным, почему энергия флиппона, возбуждаемого из  $\Psi_{+-}$ , бывает отрицательной. Для того, чтобы понять это, достаточно взглянуть на рис. 29, изображающий плоскую квадратную решетку, в которой спины, направленные вверх, показаны плюсами, а направленные вниз, минусами. Очевидно, что переворот спина в узле, обведенном кружком, отвечает отрицательной флиппонной энергии.

Для внутренних энергий, определяемых как средние /4.24/ по разным пространствам, справедливы неравенства



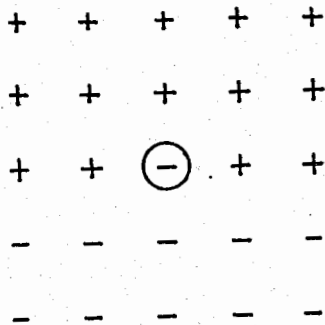


Рис. 29. Метастабильный вакуум  $\psi_{+-}$  для плоской решетки.

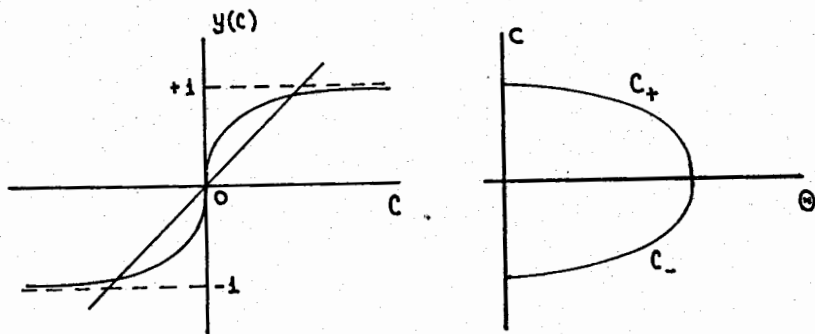


Рис. 30. Графическое решение уравнения (5.14).

$$\bar{E}(\mathcal{H}_+) < \bar{E}(\mathcal{H}) < \bar{E}(\mathcal{H}_-),$$

в которых  $\bar{E}(\mathcal{H})$ -приведенная энергия любого из пространств множества  $\mathcal{H}$ . При нулевой температуре состояния  $\psi_+$ ,  $\psi_-$  и  $\psi_0$  экстремальны. Очевидно, что последнее из них максимально, а первые два минимальны. Причем средние энергии для состояний  $\psi_+$  и  $\psi_-$  одинаковы. Это и называется макроскопическим вырождением. Макроскопичность состоит в том, что система бесконечна и что флиппонные возбуждения над вакуумами  $\psi_+$  и  $\psi_-$  образуют два различных, ортогональных друг другу пространства  $\mathcal{H}_+$  и  $\mathcal{H}_-$ . Напомним, что в отличие от макроскопического вырождения при микроскопическом вырождении функции  $\psi_+^N$  и  $\psi_-^N$  принадлежали одному и тому же пространству  $\mathcal{H}_N$ .

Возникает вопрос - если имеется огромное множество разных пространств, соответствующих различным чистым или смешанным фазовым состояниям, то в каком же из них будет находиться реальная физическая система? Ответить на этот вопрос помогает условие устойчивости термодинамической системы, вытекающее из второго закона термодинамики /49/: равновесная система устойчива, если ее термодинамические потенциалы экстремальны, причем, энтропия максимальна, свободная энергия и потенциал Гиббса минимальны и т.д.

При нулевой температуре свободная энергия или потенциал Гиббса совпадают со средней энергией, выраженной в соответствующих переменных /см. лекцию 2/. Следовательно, физическая система, описываемая моделью Изинга /4.2/, при  $T=0$  должна находиться в одном из двух состояний - либо  $\psi_+$ , либо  $\psi_-$ . Но в каком именно? Ведь оба эти состояния термодинамически эквивалентны. Как видим, физическая система находится в той же ситуации, что и сказочный герой на рис. 28. Что же помогает системе выйти из подобного затруднительного положения? Существуют две причины, внешняя и внутренняя, задающие выбор того или иного вакуума. Внешняя причина - это наличие малых внешних возмущений, снимающих макроскопическое вырождение. Например, если имеется сколь угодно слабое внешнее магнитное поле  $B$ , направленное по оси  $\vec{z}$ , то гамильтониан модели Изинга принимает вид, аналогичный /2.9/. Тогда энергии состояний  $\psi_+$  и  $\psi_-$  уже неодинаковы:

$$(\psi_+, H_N \psi_+) < (\psi_-, H_N \psi_-).$$

Так что система выбирает вакуум  $\psi_+$ .

Но даже если не принимать во внимание внешних возмущений, система все равно сумеет сделать выбор вследствие внутренних причин. Чтобы понять, как это происходит, вспомним, что состояние равновесия является математической идеализацией, связанной с усреднением по бесконеч-

ному временному интервалу /53/. Система, наблюдаемая в течение конечного времени, строго говоря, неравновесна. В ней флуктуационным образом возникают различные чистые и гетерофазные состояния. Большую часть времени система будет проводить в том из состояний  $\Psi_+$  или  $\Psi_-$ , которое возникнет первым. То есть с равновесной точки зрения она самопроизвольно перейдет в одно из состояний с нарушенной инверсионной симметрией.

Переход системы с гамильтонианом, инвариантным относительно некоторой группы симметрии, в состояние, неинвариантное по отношению к той же группе, называется спонтанным нарушением симметрии.

Стало быть, при  $T=0$  основное состояние для модели Изинга /4.2/ должно быть  $Z_2$ -неинвариантно. Пусть выбран вакуум  $\Psi_+$ . При повышении температуры может оказаться, что вплоть до некоторой температуры  $T_0$  системе выгодно иметь нарушенную инверсионную симметрию, то есть приведенный потенциал Гиббса  $\bar{G}(\mathcal{H}_+)$ , вычисляемый в пространстве  $\mathcal{H}_+$  меньше, чем  $\bar{G}(\mathcal{H}_0)$ , вычисляемый в  $\mathcal{H}_0$ . При  $T > T_0$  соотношение между  $\bar{G}(\mathcal{H}_+)$  и  $\bar{G}(\mathcal{H}_0)$  может измениться, так что  $\bar{G}(\mathcal{H}_+) \geq \bar{G}(\mathcal{H}_0)$ , значит, системе будет выгодно перейти в  $Z_2$ -симметричное состояние. Поскольку, как обсуждалось в лекции 2, термодинамические потенциалы непрерывны, в точке перехода они должны совпадать:

$$\bar{G}(\mathcal{H}_+) = \bar{G}(\mathcal{H}_0) \quad (T = T_0). \quad /4.28/$$

Но каждый тип симметрии сопоставляется определенной термодинамической фазе. Поэтому мы приходим к выводу, что при  $T < T_0$  система находится в упорядоченной фазе с параметром порядка /4.25/, а при  $T > T_0$  в неупорядоченной с параметром порядка /4.26/. В точке  $T_0$  происходит фазовый переход.

Спонтанное нарушение симметрии в макроскопической системе - это то же самое, что и фазовый переход.

Необходимым и достаточным условием фазового перехода является: во-первых, наличие макроскопического вырождения, во-вторых, выгодность спонтанного нарушения симметрии при одних значениях термодинамических переменных и невыгодность такого нарушения при других.

Процедура выбора правильного пространства состояний при вычислении средних от операторов называется квазиусреднением, а соответствующие средние - квазисредними /20/. Подчеркнем, что идея о неоднозначности выбора пространства состояний макроскопической системы, устанавливающая принципиальную взаимосвязь понятий "фазовый переход" и "спонтанное нарушение симметрии" и дающая конструктивный подход к определению фазовых состояний, впервые была высказана в 1960 г. ака-

демиком Н.Н.Боголюбовым /20/ и носит название концепции квазисредних.

О том, как технически осуществлять квазиусреднение, пойдет речь в следующей лекции.

"... Только предвзятые мнения заставляют нас считать ложным то, что ново слуху или зрению не привычно, или кажется превышающим наше понимание; если же посмотреть повнимательнее, то обнаружится, что это все не только для соображения очевидно, но и для исполнения легко".

Апулей. "Метаморфозы".

### Лекция 5. МЕТОДЫ КВАЗИУСРЕДНЕНИЯ

В основополагающих работах Н.Н.Боголюбова /20, 21/ был предложен простой и наглядный метод снятия вырождения в макроскопических системах, который будет здесь проиллюстрирован на примере модели Гейзенберга /см. /3.3//

$$H = - \sum_{ff'} J(f, f') \bar{S}_f \bar{S}_{f'} \quad /5.1/$$

Как указывалось в лекции 3, этот гамильтониан обладает инвариантностью относительно группы  $SU(2)$ . В силу такой симметрии удельная намагниченность

$$\bar{m}_N = \frac{1}{N} \sum_f \langle \bar{S}_f \rangle, \quad /5.2/$$

определяемая обычным образом /см. /1.3/, /3.7//, тождественно равна нулю для всех температур  $\Theta$ . Действительно /21/, рассмотрим оператор суммарного спина  $\bar{S} = \sum_f \bar{S}_f$ , удовлетворяющий циклическим перестановочным соотношениям

$$[S^x, S^y] = i S^z. \quad /5.3/$$

Используя /5.3/, нетрудно показать, что

$$[S^a, H] = 0 \quad (a = x, y, z). \quad /5.4/$$

В соответствии с /5.3/ и /5.4/ имеем

$$\begin{aligned} i \text{Sp} (S^z e^{-H/\Theta}) &= \text{Sp} [(S^x S^y - S^y S^x) e^{-H/\Theta}] = \\ &= \text{Sp} (S^x S^y e^{-H/\Theta} - S^y e^{-H/\Theta} S^x). \end{aligned}$$

Отсюда, учитывая перестановочность операторов под знаком шпура, получаем

$$\text{Sp} (S^2 e^{-H/\theta}) = 0.$$

Аналогично для других компонент  $S^m$ . Поэтому при всех  $N$  и  $\theta$ .

$$\bar{m}_N = \frac{1}{N} \langle \bar{S} \rangle = \frac{1}{N} \text{Sp} (\bar{S} e^{-H/\theta}) / \text{Sp} e^{-H/\theta} = 0. \quad /5.5/$$

Это тождество сохраняет справедливость и при  $N \rightarrow \infty$ .

Тривиальность параметра порядка здесь является следствием тех же причин, что и в модели Изинга, подробно рассмотренной в предыдущей лекции. Средний спин конечной системы равен нулю из-за симметрии гамильтониана /5.1/. Симметрия сохраняется и в термодинамическом пределе, когда возникает макроскопическое вырождение. Однако в случае модели Гейзенберга ситуация существенно богаче. В силу  $SU(2)$ -инвариантности имеется уже не два эквивалентных вакуума, связанных с направлениями "вверх" и "вниз" /см. лекцию 4/, а континуум таких вакуумов, каждый из которых характеризуется единичным вектором  $\bar{e}$ , задающим некоторое направление в пространстве /108/. Вектор  $\bar{e}$ , определяемый двумя сферическими углами, фиксирует направление намагниченности в системе. Так как сферические углы меняются непрерывно, то и появляется непрерывное вырождение с континуальным множеством вакуумов  $\psi_{\bar{e}}$ . Над каждым из вакуумов  $\psi_{\bar{e}}$  можно построить пространства состояний  $\mathcal{H}_{\bar{e}}$ , аналогичные пространствам  $\mathcal{H}_{\pm}$  в модели Изинга. Правда, в отличие от последних элементарные возбуждения в  $\mathcal{H}_{\bar{e}}$  уже не являются флиппонами. Подробнее об элементарных возбуждениях в системах с непрерывной симметрией будет рассказано в лекциях 6 и 7. Как и в случае модели Изинга, для модели Гейзенберга можно также построить пространство  $\mathcal{H}_0$  с разупорядоченными направлениями и пространства с трансляционно-неинвариантными псевдовакуумами  $\mathcal{H}_{\bar{e}_0}$ , аналогичные  $\mathcal{H}_{\pm 0}$  из лекции 4. Кроме того,  $SU(2)$ -симметрия гамильтониана /5.1/ позволяет построить и такие трансляционно-неинвариантные пространства состояний, которые не имеют аналогов в модели Изинга. Например, пространства типа  $\mathcal{H}_{\bar{e}_1, \bar{e}_2, \dots, \bar{e}_n}$  ( $n \geq 1$ ), порожденные псевдовакуумами, меняющими свое направление на различных макроскопических участках системы. Или пространства типа  $\mathcal{H}_{\bar{e}_1, \bar{e}_2, \dots, 0, \dots, \bar{e}_n}$ , соответствующие всевозможным смешанным состояниям. Если ввести переменную  $\varphi$ , принадлежащую множеству

$$\{\varphi\} = \{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n \mid n \geq 1; \varphi_j = 0, \bar{e}_j\},$$

то различные допустимые пространства состояний можно обозначить через  $\mathcal{H}_{\varphi}$ . Общее пространство состояний строится как прямой интеграл /108/

$$\mathcal{H} = \int \mathcal{H}_{\varphi} d\varphi,$$

/5.6/

в котором по определению

$$\int d\varphi = \sum_{n=1}^{\infty} \int d\varphi_1 d\varphi_2 \dots d\varphi_n, \quad \int d\varphi_j = 1 + \int d\bar{e}_j.$$

Вернемся теперь к проблеме вычисления средней намагниченности /5.2/ при  $N \rightarrow \infty$ . В термодинамическом пределе среднее  $\langle \bar{S} \rangle$  имеет смысл среднего по полному пространству /5.6/, точнее говоря,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \bar{m}_N = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \frac{1}{N} \bar{S} \rangle = \langle \bar{S} \rangle_{\mathcal{H}}$$

Выражение  $\langle \bar{S} \rangle_{\mathcal{H}}$  определяется обычным образом с помощью шпуров в пространстве  $\mathcal{H}$ :

$$\langle \bar{S} \rangle_{\mathcal{H}} = \text{Sp}_{\mathcal{H}} (\bar{S} e^{-H/\theta}) / \text{Sp}_{\mathcal{H}} e^{-H/\theta}$$

Если заметить, что  $\text{Sp}_{\mathcal{H}}$  содержит интегрирование по всевозможным "направлениям",

$$\text{Sp}_{\mathcal{H}} (\bar{S} e^{-H/\theta}) = \int \text{Sp}_{\varphi} (\bar{S} e^{-H/\theta}) d\varphi,$$

где  $\text{Sp}_{\varphi}$  - это шпур в пространстве  $\mathcal{H}_{\varphi}$ , тогда становится понятным, почему

$$\langle \bar{S} \rangle_{\mathcal{H}} = 0.$$

Взаимосвязь  $\langle \bar{S} \rangle_{\mathcal{H}}$  и среднего  $\langle \bar{S} \rangle_{\varphi}$ , вычисляемого по формуле

$$\langle \bar{S} \rangle_{\varphi} = \text{Sp}_{\varphi} (\bar{S} e^{-H/\theta}) / \text{Sp}_{\varphi} e^{-H/\theta},$$

дается соотношением

$$\langle \bar{S} \rangle_{\mathcal{H}} = \int \langle \bar{S} \rangle_{\varphi} d\mu(\varphi), \quad /5.7/$$

в котором

$$d\mu(\varphi) = \frac{\text{Sp}_{\varphi} e^{-H/\theta}}{\int \text{Sp}_{\varphi} e^{-H/\theta} d\varphi} d\varphi.$$

Равенство, идентичное /5.7/, выполняется и для средних от произвольного оператора  $\mathcal{O}$ :

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{\mathcal{H}} = \int \langle \mathcal{O} \rangle_{\varphi} d\mu(\varphi).$$

Отсюда очевидно, что если  $O$  - не спиновый оператор, то, вообще говоря,

$$\langle O \rangle_{\mathcal{H}} \neq \langle O \rangle_{\Psi},$$

даже если при этом  $\langle \vec{S} \rangle_{\mathcal{H}} = \langle \vec{S} \rangle_{\Psi} = 0$ . Указанное обстоятельство было исследовано в работах /109, 110/. Физически оно становится понятным, если вспомнить, что фиксирование  $\Psi$  означает выбор конкретной термодинамической фазы, параметром порядка которой служит  $\langle \vec{S} \rangle_{\Psi}$ , тогда как  $\langle \vec{S} \rangle_{\mathcal{H}}$  никакой фазе не соответствует и параметром порядка не является.

Для того чтобы выбрать упорядоченную фазу, достаточно ввести в гамильтониан /5.1/ внешнее поле  $\vec{B}$ :

$$H_B = - \sum_{ff'} J(f, f') \vec{S}_f \vec{S}_{f'} - \vec{B} \sum_f \vec{S}_f. \quad /5.8/$$

Такое включение внешнего поля понижает группу симметрии гамильтониана до  $U(1)$  и задает направление вакуума  $\vec{e}$ , коллинеарное  $\vec{B}$ . Теперь среднее для всякого оператора  $O$  надо вычислять по пространству  $\mathcal{H}_{\vec{e}}$ , где  $\vec{e} \parallel \vec{B}$ . Обозначим это среднее через  $\langle O \rangle_{\vec{e} \parallel \vec{B}}$ . Для нахождения среднего  $\langle O \rangle_{\vec{e}}$ , вычисляемого по пространству  $\mathcal{H}_{\vec{e}}$ , в случае системы с гамильтонианом /5.1/ надо в выражении  $\langle O \rangle_{\vec{e} \parallel \vec{B}}$  осуществить переход к термодинамическому пределу, а потом выключить внешнее поле:

$$\lim_{B \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle O \rangle_{\vec{e} \parallel \vec{B}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle O \rangle_{\vec{e}} \equiv \langle O \rangle, \quad /5.9/$$

это и есть простейший способ определения квазисреднего  $\langle O \rangle$ , предложенный Боголюбовым /20, 21/. Ясно, что порядок предельных переходов в /5.9/ менять нельзя.

Заметим, что гамильтониан /5.8/ описывает так называемое линейное взаимодействие внешнего поля со спином. При этом направление вакуума совпадает с направлением  $\vec{B}$ , то есть и средний спин также направлен по  $\vec{B}$ . Если же дополнить гамильтониан /5.8/ еще и квадратичным взаимодействием, записав

$$H_{BD} = H_B - D (\sum_f \vec{B} \vec{S}_f)^2,$$

то направление среднего спина не будет совпадать с  $\vec{B}$ , а будет отличаться от  $\vec{B}$  на угол, определяемый из условия минимальности свободной энергии. Этот пример используется в теории слабых взаимодействий для объяснения ненулевого значения угла Кабиббо /82/.

На первый взгляд имеется парадокс. Концепция квазисредних была сформулирована Н.Н.Боголюбовым в 1960 г. /20/, а модель Гейзенберга - в 1928 г., и тридцать лет ее исследовали, в том числе вычисляли спонтанную намагниченность и, как ни странно, получали при низких температурах не-

нулевой результат. Связано это с использованием приближенных методов, в самой структуре которых заложено нарушение свойств симметрии исходной модельной задачи, т.е. снятие макроскопического вырождения. Поясним это на примере широко известного метода среднего поля, применение которого мы продемонстрируем здесь для модели сегнетоэлектрика KDP-типа. В этом случае указанный метод дает очень хорошее количественное согласие с экспериментальными результатами /30/. Гамильтониан имеет вид /см. /3.9//

$$H_N = - \Omega \sum_f S_f^x - \frac{1}{2} \sum_{f, f'} J(f, f') S_f^z S_{f'}^z. \quad /5.10/$$

Этот гамильтониан обладает теми же свойствами симметрии, что и модель Изинга. Совершим приближенное преобразование

$$S_f^z S_{f'}^z \approx C (S_f^z + S_{f'}^z) - C^2,$$

где  $C$  - вариационный параметр, и подставим результат в /5.10/:

$$H_N^{(app)} = - \Omega \sum_f S_f^x - \sum_{f, f'} J(f, f') S_f^z C + \frac{1}{2} N J C^2. \quad /5.11/$$

$$J = \frac{1}{N} \sum_{f, f'} J(f, f').$$

Параметр  $C$  определим в соответствии с вариационным принципом Боголюбова из условия минимальности аппроксимирующей свободной энергии

$$\bar{F}_N^{(app)} = - \frac{\theta}{N} \ln \text{Sp} e^{-H_N^{(app)}/\theta},$$

откуда

$$C = \langle S_f^z \rangle_{app}. \quad /5.12/$$

Здесь  $\langle \dots \rangle_{app}$  обозначает среднее по аппроксимирующему гамильтониану /5.11/, линейному по операторам спина. Этот гамильтониан легко можно диагонализировать и получить явный вид уравнения /5.12/:

$$C = \frac{J C}{2\sqrt{\Omega^2 + J^2 C^2}} \text{th} \frac{\sqrt{\Omega^2 + J^2 C^2}}{2\theta}. \quad /5.13/$$

Данное уравнение всегда имеет корень  $C_0 = 0$ , соответствующий нулевому среднему спину, т.е. парамагнитной фазе. Найдём другие решения. При  $C \neq 0$  /5.13/ переходит в

$$2\sqrt{\Omega^2 + J^2 C^2} = J \text{th} \frac{\sqrt{\Omega^2 + J^2 C^2}}{2\theta}. \quad /5.14/$$

Это уравнение проще всего решить графически /см. рис. 30/. При условии  $2\Omega > J$  решение  $C_0 = 0$  является единственным. При  $2\Omega < J$  и  $\theta < \theta_c = \Omega / (2J \text{th} 2\Omega/J)$  имеют место два ненулевых решения, которые мы

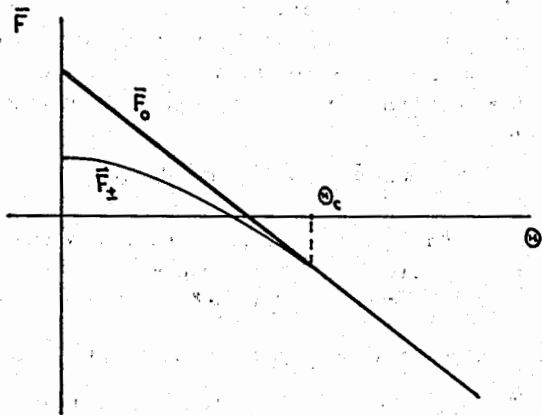


Рис. 31. Свободная энергия для трех возможных параметров порядка.

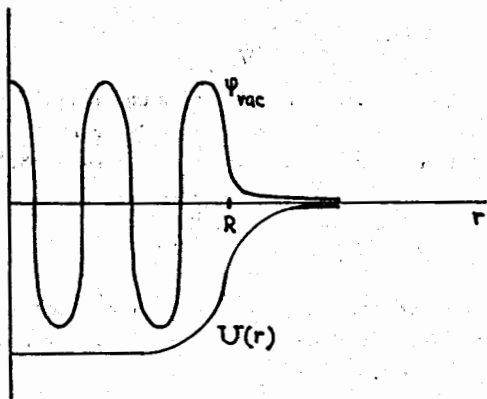


Рис. 32. Пионная конденсация в ядре.

обозначим через  $C_+$  и  $C_-$ . Они соответствуют процедуре взятия операции  $S_P$  по пространствам  $\mathcal{H}_+$  и  $\mathcal{H}_-$  /см. предыдущую лекцию/. Решения  $C_+$ ,  $C_-$  отличаются только знаком, описывают упорядоченную /ферроэлектрическую/ фазу с одинаковой свободной энергией, и мы можем выбрать любое из них. Сравним теперь свободные энергии для различных решений. Имеем /см. рис. 31/

$$\bar{F}_0^{(app)} - \bar{F}_{\pm}^{(app)} = \begin{cases} \theta \ell n \frac{ch(\sqrt{\Omega^2 + J^2 C_{\pm}^2 / 2\theta}) - J C_{\pm}^2 / 2}{ch(\Omega / 2\theta)} > 0, & \theta < \theta_c \\ 0 & \theta > \theta_c. \end{cases}$$

Таким образом, ниже  $\theta_c$  состояние, соответствующее нетривиальному решению, оказывается более выгодным. В точке  $\theta_c$  происходит фазовый переход из параэлектрической в ферроэлектрическую фазу.

Как нетрудно видеть, процедура квазиусреднения была осуществлена при замене исходного гамильтониана /5.10/ аппроксимирующим /5.11/, уже инвариантным относительно группы  $Z_2$ , и выборе одного из нетривиальных решений уравнения самосогласования /5.13/. Мы не говорили здесь о предельном переходе  $N \rightarrow \infty$ , т.к. свободная энергия  $\bar{F}^{(app)}$  оказывается вообще не зависящей от  $N \gg 1$ .

Если сравнить с рассмотренным выше случаем модели Гейзенберга, то можно сказать, что роль поля, отбирающего единственное направление вакуума, играет здесь среднее самосогласованное поле, определяемое параметром  $C$ .

В ряде случаев метод среднего поля, основанный на преобразовании гамильтониана указанного выше типа, позволяет получить не приближенное, а точное решение. Рассмотрению этого вопроса было посвящено большое число работ, среди которых важное место занимают исследования Н.Н.Боголюбова /мл./ /см., например, /61,99,100/. Развитый им метод аппроксимирующих гамильтонианов позволяет, в частности, установить достаточно общие условия на ядро взаимодействия  $J(f, f')$ , при которых имеет место совпадение термодинамических величин модельной и аппроксимирующей систем /при  $N \rightarrow \infty$ /. Так, в случае спиновых систем типа модели Гейзенберга таким достаточным условием является /111/

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{ff'} |J(ff') - J|N| = 0, \quad J = const.$$

Аналогичным образом процедура квазиусреднения содержится и в приближенных методах. Так, например, обрыв цепочки уравнений для корреляционных средних или функций Грина также может приводить к нарушению полной симметрии гамильтониана.

Вернемся к методу квазиусреднения /5.9/. В общем случае он может быть сформулирован следующим образом. Пусть  $N$ -частичный гамильтониан  $H_N$  описывает некоторую физическую систему и обладает симметрией от-

носителем группы  $G$ . Пусть состояние системы ниже точки фазового перехода характеризуется группой  $G_1 \subset G$ . Для того чтобы определить квазисреднее, нарушим симметрию исходного гамильтониана, включив в него инфинитезимальный источник:

$$H_N - H_N(\nu) = H_N + \nu \Gamma,$$

где  $\Gamma$  - оператор, понижающий симметрию до  $G_1$ , и  $\nu$  - бесконечно малый параметр. Теперь квазисреднее есть

$$\langle O \rangle = \lim_{\nu \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{Sp \theta e^{-H_N(\nu) / \theta}}{Sp e^{-H_N(\nu) / \theta}} \quad /5.15/$$

где  $\theta$  - произвольный оператор.

Конкретный смысл гамильтониана  $\Gamma$  зависит от рассматриваемой задачи. Так, в случае системы с бинарным взаимодействием, изучаемой в теории кристаллического состояния, добавление  $\Gamma$  соответствует введению бесконечно малого периодического поля, фиксирующего положение кристалла в пространстве /21/. В случае конденсации бозе-газа /см. подробнее лекцию 6/ гамильтониан  $\Gamma$  содержит источники, фиксирующие калибровку бозе-амплитуд /21/.

Заметим, что в определении /5.15/ имеется известный произвол в выборе области определения параметров  $\nu$  и способа их стремления к нулю. Однако, как было показано Н.Н. Боголюбовым /мл. /112, 113/, в ряде случаев произвол в выборе  $\nu$  может привести к отсутствию предела в /5.15/. Рассмотрим в качестве примера модель Боголюбова-БКШ в теории сверхпроводимости /см. /3.16//:

$$H_N = \sum_K \epsilon_K a_K^* a_K - \sum_{K, K'} J(K, K') a_K^* a_{-K}^* a_{-K} a_{K'}, \quad J(K, K') = \lambda(K) \lambda^*(K') /5.16/$$

инвариантную относительно группы  $U(1)$ . Такую симметрию можно нарушить, дополнив /5.16/ инфинитезимальным источником:

$$H_N - H_N(\nu) = H_N - \sum_K \{ \nu \lambda^*(K) a_{-K} a_K + \nu^* \lambda(K) a_K^* a_{-K}^* \}. \quad /5.17/$$

Пусть  $\nu = |\nu| e^{i\varphi}$ . Гамильтониан  $H_N(\nu)$  приводится к виду  $H_N(|\nu|)$  преобразованием калибровки

$$a_K - a_K e^{i\varphi/2}, \quad a_K^* - a_K^* e^{-i\varphi/2}.$$

Будем определять в соответствии с /5.15/ квазисреднее для оператора

$$O = a_K^* a_{-K}^*. \quad \text{Имеем}$$

$$\langle a_K^* a_{-K}^* \rangle_{H_N(\nu)} = e^{-i\varphi} \langle a_K^* a_{-K}^* \rangle_{H_N(|\nu|)} = \frac{\nu^*}{|\nu|} \langle a_K^* a_{-K}^* \rangle_{H_N(|\nu|)}.$$

Из-за наличия множителя  $\nu^*/|\nu|$  предела при  $\nu \rightarrow 0$  здесь, вообще говоря, не существует.

Приведенный пример показывает, что определение квазисреднего /5.15/ должно быть дополнено некоторыми вспомогательными условиями, накладываемыми на параметр  $\nu$  и обеспечивающими существование предела при  $\nu \rightarrow 0$  /см., например, /99/.

Можно, однако, определить квазисреднее, не прибегая к введению источников /113, 114/. Рассмотрим квазиспиновую формулировку модели Боголюбова-БКШ /см. /3.18//

$$H = \frac{1}{2} \sum_K \epsilon_K (\theta - \sigma_K^z) - \sum_{K, K'} J(K, K') \sigma_K^- \sigma_{K'}^+, \quad /5.18/$$

Гамильтониан /5.18/  $U(1)$ -инвариантен, поэтому здесь, как и в модели Гейзенберга, имеется континуум вакуумов, характеризуемых полярным углом  $\varphi \in [0, 2\pi]$  в квазиспиновой плоскости  $XU$ . То есть здесь также имеет место непрерывное вырождение вакуума. Элементарные возбуждения, описываемые оператором рождения  $\sigma_K^-$  и уничтожения  $\sigma_K^+$ , иногда называют боголонами /115/.

Пусть  $\psi$  - вектор из пространства  $\mathcal{C}^2$  и  $\bar{\psi}_\varphi$  - единичный вектор трехмерного пространства квазиспинов, проекция которого на плоскость  $XU$  имеет направление  $\varphi$ . Если  $\psi_{\varphi K}$  - одночастичный вакуум в направлении  $\varphi$ , то

$$(\bar{\sigma}_K \cdot \bar{\psi}_\varphi) \psi_{\varphi K} = \psi_{\varphi K}.$$

Это уравнение определяет  $\psi_{\varphi K}$  с точностью до фазового множителя  $e^{i\varphi}$ .  $N$ -частичный вакуум есть

$$\Psi_\varphi = \prod_K \otimes \psi_{\varphi K}; \quad \Psi_\varphi \in \mathcal{H} = \prod_K \otimes \mathcal{C}^2 = (\mathcal{C}^2)^N.$$

Для скалярного произведения в  $\mathcal{H}$  имеем /116/

$$(\Psi_\varphi, \Psi_{\varphi'}) = \prod_K e^{i\varphi_K} \sqrt{\frac{1 + (\bar{\psi}_\varphi \cdot \bar{\psi}_{\varphi'})}{2}} = e^{i \sum_K \varphi_K} \left( \cos \frac{\varphi - \varphi'}{2} \right)^N.$$

При  $N \rightarrow \infty$  вакуумы с разными  $\varphi, \varphi'$  ортогональны и, следовательно, унитарно неэквивалентны. Иначе говоря, на пространствах  $\{\mathcal{H}_\varphi\}$ , получаемых из вакуумов  $\{\Psi_\varphi\}$  с помощью элементарных возбуждений, реализуются неэквивалентные представления канонических перестановочных соотношений алгебры локальных наблюдаемых /117, 57/. Поэтому квазисреднее можно получить, бесконечно слабо нарушая перестановочные соотношения для операторов  $\sigma_K^-$  /113, 114/. В рассматриваемом случае модели /5.18/ достаточно ввести новые операторные конструкции

$$\begin{cases} \beta_K = u_K^2 \sigma_K^+ - v_K^2 \sigma_K^- L L^* + u_K v_K (2\sigma_K^- \sigma_K^+ - 1) L \\ \beta_K^* = u_K^2 \sigma_K^- - v_K^2 L L^* \sigma_K^+ + u_K v_K L^* (2\sigma_K^- \sigma_K^+ - 1) \end{cases} \quad /5.19/$$

Здесь  $u_K, v_K$  - вещественные числа, связанные соотношением

$$v_K^2 + u_K^2 = 1,$$

и  $L$  - оператор вида

$$L = \frac{1}{N} \sum_K \sigma_K^- < \frac{1}{N} \sum_K \sigma_K^- >_{\psi}^{-1}$$

Среднее  $\langle \dots \rangle_{\psi}$  вычисляется по пространству с фиксированным  $\psi$ , т.е. с нарушенной  $U(1)$ -симметрией. В термодинамическом пределе оператор  $L$  стремится к единичному, и /5.19/ переходит в обычное каноническое преобразование Боголюбова /98/. Заметим, что

$$\sigma_K^z = 2\sigma_K^- \sigma_K^+ - 1,$$

и обращая преобразования /5.19/, можно вычислить среднее  $\langle \sigma_K^z \rangle$  в термодинамическом пределе. После ряда длинных, но несложных преобразований получаем

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle \sigma_K^z \rangle = \frac{\epsilon_K}{\sqrt{\epsilon_K^2 + J^2 C^2}} \tanh \frac{\sqrt{\epsilon_K^2 + J^2 C^2}}{\theta},$$

где  $C = \frac{1}{N} \langle \sum_K \sigma_K^- \rangle_{\psi}$  и  $J(K, K') = \frac{J}{N}$ . Чтобы определить правильным образом параметр  $C$ , заметим, что при обычном усреднении

$$\langle \sigma_K^- \rangle = S_p \{ \sigma_K^- e^{-H_N / \theta} \} / S_p e^{-H_N / \theta} = 0$$

в силу правил отбора, вытекающих из того, что  $H_N$  инвариантен относительно группы  $U(1)$ , а среднее  $\langle \sigma_K^- \rangle$  - неинвариантно. Однако усредняемую величину легко сделать градиентно-инвариантной, дополнив ее фактором  $L^*$ . Теперь квазисреднее  $\langle \sigma_K^- \rangle$  можно определить как /114/

$$\langle \sigma_K^- \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \sigma_K^- L^* \rangle \quad /5.20/$$

Вычисления в правой части /5.20/ производятся по тому же рецепту - с использованием преобразований, обратных к /5.19/.

Смысл определения квазисредних /5.20/ сводится к тому, что фактор  $L$  фиксирует определенный вакуум, задавая представление канонических перестановочных соотношений для операторов Паули /5.19/ на пространстве  $\mathcal{H}_{\psi}$ . Применяя этот способ, можно вычислить квазисредние и для более сложных многовременных операторных конструкций /114/.

В заключение еще раз отметим глубокую взаимосвязь между понятиями квазиусреднения, термодинамического предельного перехода и алгебраической структурой модельных систем. В сущности, квазиусреднение есть выбор одного из возможных вакуумов /псевдовакуумов/, того, что определяемое усреднением по этому вакууму /пространству состояний/ равновесное термодинамическое состояние системы имеет минимальный термодинамический потенциал. Поэтому процедуру квазиусреднения можно проводить прямо в определении среднего, выполняя операцию взятия  $S_p$  по соответствующему пространству состояний. Можно сказать, что свойство термодинамической выгодности выбирает нужный вакуум и представление алгебры операторов, из которых построен модельный гамильтониан.

*"А чуть-чуть туманно или после дождя  
поглядишь сверху, с высоты переулка -  
хоть берет свежего человека: облако село!"*

В.Гиляровский. "Москва и москвичи".

#### Лекция 6. ЯВЛЕНИЕ КОНДЕНСАЦИИ

Очень распространенным примером фазового перехода является переход типа конденсации. В данной лекции мы проиллюстрируем это явление с помощью нескольких простых моделей.

Начнем с рассмотрения вещественного релятивистского скалярного поля  $\varphi = \varphi(\vec{r}, t)$ , которому сопоставляется гамильтониан

$$H = \int H(\varphi) d\vec{r} \quad /6.1/$$

или лагранжиан

$$L = \int L(\varphi) d\vec{r}. \quad /6.2/$$

Плотности гамильтониана и лагранжиана связаны соотношением

$$H(\varphi) = \left( \dot{\varphi} \frac{\partial}{\partial \dot{\varphi}} - 1 \right) L(\varphi) \quad \left( \dot{\varphi} \equiv \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right).$$

Используя систему единиц, в которой скорость света равна единице, а также  $\hbar \equiv 1$ , запишем плотность гамильтониана в виде

$$H(\varphi) = \dot{\varphi}^2 + (\nabla \varphi)^2 + m^2 \varphi^2 + U(\varphi). \quad /6.3/$$

где  $m$  - масса частицы,  $U(\varphi)$  - потенциальное поле. При этом плот-

ность лагранжиана

$$L(\varphi) = \dot{\varphi}^2 - (\nabla\varphi)^2 - m^2\varphi^2 - U(\varphi). \quad /6.4/$$

Вводя обобщенный импульс

$$p(\varphi) = \frac{\delta L}{\delta \dot{\varphi}} = \frac{\delta H}{\delta \dot{\varphi}}$$

и обобщенную силу

$$F(\varphi) = \frac{\delta L}{\delta \varphi} = - \frac{\delta H}{\delta \varphi}.$$

можно записать уравнение Лагранжа в форме уравнения Ньютона

$$\dot{p}(\varphi) = F(\varphi). \quad /6.5/$$

Раскрывая /6.5/, получаем

$$(\square + m^2)\varphi = - \frac{\delta U(\varphi)}{\delta \varphi} \quad (\square \equiv \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2). \quad /6.6/$$

Полное пространство состояний рассматриваемой системы образуется всеми допустимыми решениями уравнения /6.6/.

Конкретизируем вид плотности потенциальной энергии:

$$U(\varphi) = U\varphi^2 + \frac{\lambda}{2}\varphi^4 \quad (U = const); \quad /6.7/$$

здесь  $U$  имеет смысл внешнего однородного поля, а  $\lambda$  обозначает константу взаимодействия. Для определенности положим, что взаимодействие в /6.7/ отталкивательное:  $\lambda > 0$ . Подставляя /6.7/ в /6.3/, имеем гамильтониан

$$H(\varphi) = \dot{\varphi}^2 + (\nabla\varphi)^2 + m_{eff}^2\varphi^2 + \frac{\lambda}{2}\varphi^4, \quad /6.8/$$

в котором

$$m_{eff} = \sqrt{m^2 + U}.$$

Уравнение движения /6.6/ принимает вид

$$(\square + m_{eff}^2)\varphi + \lambda\varphi^3 = 0. \quad /6.9/$$

Определим среднее от динамической переменной  $\mathcal{O}(\varphi)$  как нормированный функциональный интеграл по решениям уравнения /6.9/:

$$\langle \mathcal{O}(\varphi) \rangle \equiv \int \mathcal{O}(\varphi) d\{\varphi\}. \quad /6.10/$$

Выражения /6.8/ и /6.9/ свидетельствуют, что в системе имеется инверсионная симметрия, так что всякому  $\varphi$  соответствует  $-\varphi$ . Поэтому очевидно, что

$$\langle \varphi \rangle \equiv 0. \quad /6.11/$$

аналогично тому, как это имело место для среднего спина в лекциях 4 и 5.

При наличии симметрии в системе может возникнуть и макроскопическое вырождение. Проверим, при каких условиях оно появляется для модели скалярного поля. Для этого прежде всего отыщем решения уравнения /6.9/, соответствующие вакуумам. Ограничимся рассмотрением однородного стационарного вакуумного состояния, для которого

$$\square \varphi_{vac} = 0. \quad /6.12/$$

Тогда, вследствие /6.9/, имеем

$$(m_{eff}^2 + \lambda\varphi_{vac}^2)\varphi_{vac} = 0. \quad /6.13/$$

Из уравнения /6.13/ ясно, что имеются три псевдовакуума:

$$\varphi_{\pm} = \pm m_{eff} / \sqrt{-\lambda}, \quad \varphi_0 = 0. \quad /6.14/$$

Причем первые два имеют смысл только когда

$$m_{eff}^2 < 0 \quad (U < -m^2). \quad /6.15/$$

Если забыть, что  $m_{eff}$  — это просто обозначение, а считать, что гамильтониан /6.8/ описывает частицы с массой  $m_{eff}$ , то при условии /6.15/ эта масса становится мнимой. Такие вымышленные частицы называются тахионами, потому что их скорость превышает скорость света. Однако неравенство /6.15/ может выполняться и для реальных частиц с положительной массой, когда эти частицы находятся в достаточно глубокой потенциальной яме  $U$ . Для приведенных энергий, соответствующих псевдовакуумам /6.14/, получаем

$$H(\varphi_{\pm}) = - m_{eff}^4 / 2\lambda, \quad H(0) = 0.$$

Таким образом, при выполнении условия /6.15/ в системе имеется вырождение, когда существуют два состояния  $\varphi_{\pm}$  с одинаковой энергией  $H(\varphi_{\pm})$ . Поскольку при  $\lambda > 0$  энергия  $H(\varphi_{\pm}) < H(0)$ , то  $\varphi_{\pm}$  — истинные вакуумы. Для того чтобы уточнить природу псевдовакуума  $\varphi_0 = 0$ , надо исследовать элементарные возбуждения.

Проведем преобразование

$$\varphi = \varphi_{vac} + \delta\varphi \quad (\langle \delta\varphi \rangle = 0), \quad /6.16/$$

выделяющее над вакуумом полевые функции элементарных возбуждений  $\delta\varphi$ . Так как речь идет о возбуждениях в модели скалярного поля, будем называть скаляронами квазичастицы, сопоставляемые полевой переменной  $\delta\varphi$ . Линеаризованное относительно  $\delta\varphi$  уравнение /6.9/ приводит к уравнению



$$(\square + m_{\text{eff}}^2 + 3\lambda\varphi_{\text{vac}}^2)\delta\varphi = 0, \quad /6.17/$$

описываемому низколежащую ветвь скалярных возбуждений

$$\delta\varphi = A_1 \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega_k t) + A_2 \sin(\vec{k}\vec{r} - \omega_k t)$$

со спектром  $\omega_k$ , имеющим несколько различных вид в зависимости от  $\varphi_{\text{vac}}$ :

$$\omega_k^2 = \begin{cases} -2m_{\text{eff}}^2 + k^2, & \varphi_{\text{vac}} = \varphi_{\pm} \\ m_{\text{eff}}^2 + k^2, & \varphi_{\text{vac}} = 0. \end{cases} \quad /6.18/$$

Оба типа спектров совпадают при  $m_{\text{eff}}^2 = 0$ . В общем же случае только один из спектров /6.18/ действителен для любых волновых векторов  $k$ . При  $m_{\text{eff}}^2 < 0$  существуют два эквивалентных истинных вакуума  $\varphi_{\pm}$ , а  $\varphi_0 = 0$  представляет собой метастабильный вакуум, в согласии с классификацией, приведенной в лекции 4. Когда  $m_{\text{eff}}^2 > 0$ , действителен спектр возбуждений над псевдовакуумом  $\varphi_0 = 0$ . Как видно из /6.14/, вещественных  $\varphi_{\pm}$  при этом нет, если помнить, что по договоренности  $\lambda > 0$ . Значит, при  $m_{\text{eff}}^2 > 0$  и  $\lambda > 0$  существует единственный истинный вакуум  $\varphi_0 = 0$ .

Заметим, что если рассматривается случай притяжения, когда  $\lambda < 0$ , то при  $m_{\text{eff}}^2 < 0$  истинных однородных вакуумов не существует вообще,  $\varphi_0 = 0$  является метастабильным вакуумом; а при  $m_{\text{eff}}^2 > 0$  вакуум  $\varphi_{\pm}$  метастабильен, тогда как  $\varphi_0 = 0$  — истинный вакуум.

Таким образом, при  $\lambda > 0$  вырождение возникает лишь при выполнении условия /6.15/. Допустим, это условие выполнено. Как можно снять такое вырождение? Для этого надо из полного пространства возможных решений уравнения /6.9/ выделить подпространства  $\mathcal{H}_+$  и  $\mathcal{H}_-$ , где вакуумами служат  $\varphi_+$  и  $\varphi_-$  соответственно. Затем надо определить средние типа /6.10/ как функциональные интегралы по одному из выбранных подпространств. Подобное квазиусреднение можно технически осуществить, воспользовавшись каким-либо из приемов, изложенных в лекции 5. Можно также использовать и следующий способ квазиусреднения: провести сдвиг поля от фиксированного вакуума

$$\varphi \rightarrow \varphi_{\pm} + \varphi', \quad /6.19/$$

наложив дополнительное условие

$$\langle \varphi' \rangle \equiv 0, \quad /6.20/$$

которое и сужает пространство состояний до  $\mathcal{H}_+$  или  $\mathcal{H}_-$ , вследствие того, что при справедливости /6.19/ и /6.20/ в отличие от /6.11/ имеем

$\langle \varphi \rangle = \varphi_{\pm} \neq 0$ , то есть инверсионная симметрия нарушается.

Если принять внешнее поле  $U$  за термодинамическую переменную и выбрать  $\langle \varphi \rangle$  в качестве параметра порядка, то варьируя величину  $U$ , получаем

$$\langle \varphi \rangle = \begin{cases} \pm \sqrt{-(m^2 + U)/\lambda}, & U \leq -m^2 \\ 0, & U \geq -m^2. \end{cases} \quad /6.21/$$

Отсюда видно, что в точке  $U_c = -m^2$  происходит фазовый переход. Такой переход называется конденсацией скалярного поля. Поведение параметра порядка  $\langle \varphi \rangle$  как функции от  $U$  полностью эквивалентно поведению среднего спина как функции температуры, что изображено на рис. 30. Обращение параметра порядка в критической точке  $U_c$  в ноль означает фазовый переход второго рода. Можно определить восприимчивость

$$\chi_U = \left| \frac{\partial \langle \varphi \rangle}{\partial U} \right| = \begin{cases} [-4\lambda(m^2 + U)]^{-1/2}, & U < -m^2 \\ 0, & U \geq -m^2, \end{cases}$$

расходящуюся в точке перехода слева, аналогично восприимчивости магнитных систем.

В том случае, когда внешнее поле  $U$  не постоянно в пространстве, вакуумное состояние также не будет однородным. Например, если  $U$  имеет вид сферической потенциальной ямы, как на рис. 32, то

$$\varphi_{\text{vac}} \sim \begin{cases} \sqrt{\rho_0} \cos \vec{k}_0 \vec{r}, & r < R \\ 0, & r > R. \end{cases}$$

Именно такая ситуация имеет место при предполагаемой конденсации  $\vec{\pi}$ -мезонов в ядрах или нейтронных звездах /118/. Роль неоднородного внешнего поля для пионов играет нуклонная среда. При наличии периодической структуры пионного поля в ядре возникает пионный кристалл, что должно быть заметно в экспериментах по рассеянию, например, электронов на ядрах. В настоящее время ни один эксперимент не показал наличия пионного конденсата в реальных ядрах /119/. Некоторые считают, что хотя пионный конденсат в ядрах и отсутствует, но могут наблюдаться предконденсатные явления /120/, обусловленные близостью ядерного вещества к точке фазового перехода. На пионную конденсацию похожа также конденсация глюонов в кварковой плазме /121/.

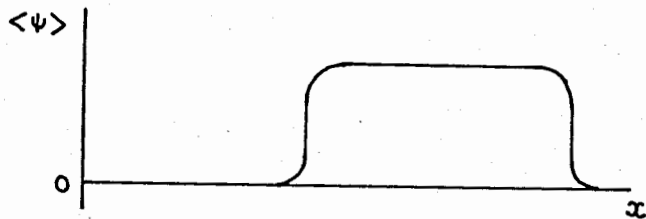


Рис. 33. Локальное нарушение симметрии.

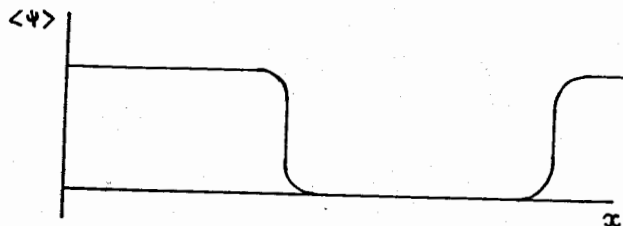


Рис. 34. Локальное восстановление симметрии.

Выше мы несколько раз обращали внимание на то, что модель скалярного поля имеет много общего с моделью Изинга: существование инверсионной симметрии, возможность двукратного вырождения, целевой характер спектра элементарных возбуждений. Из перечисленных свойств определяющим является наличие дискретной группы симметрии у исходных гамильтонианов /лагранжианов/.

Рассмотрим теперь конденсацию в системе с непрерывной группой симметрии на примере релятивистского комплексного поля с плотностью гамильтониана

$$H(\varphi) = |\dot{\varphi}|^2 + |\nabla\varphi|^2 - \alpha|\varphi|^2 + \frac{\lambda}{2}|\varphi|^4, \quad /6.22/$$

где опять имеются в виду частицы с массой  $m$ , отталкивательным взаимодействием  $\lambda$ , в присутствии внешнего однородного поля  $U$ , так что

$$\alpha \equiv -(m^2 + U), \quad \lambda > 0.$$

Плотности гамильтониана и лагранжиана связаны между собой:

$$H(\varphi) = \left( \dot{\varphi} \frac{\partial}{\partial \dot{\varphi}} + \dot{\varphi}^* \frac{\partial}{\partial \dot{\varphi}^*} - 1 \right) L(\varphi).$$

Уравнение движения имеет вид

$$(\square - \alpha + \lambda|\varphi|^2)\varphi = 0. \quad /6.23/$$

Пространство состояний системы строится из всех решений уравнения /6.23/.

В системе имеется градиентная симметрия, так как гамильтониан /6.22/ инвариантен относительно преобразований

$$\varphi \rightarrow \varphi e^{i\delta} \quad (0 \leq \delta \leq 2\pi). \quad /6.24/$$

Очевидно, что определяя средние так же как и в /6.10/ и проводя интегрирование по полному пространству состояний  $\{\varphi\}$ , будем иметь  $\langle \varphi \rangle \neq 0$ . Найдем однородные стационарные вакуумы, удовлетворяющие уравнению /6.12/. Тогда /6.23/ дает континуальное множество вакуумных решений

$$\varphi_\delta = \sqrt{\frac{\alpha}{\lambda}} e^{i\delta}, \quad \varphi_0 = 0. \quad /6.25/$$

Плотности энергий для соответствующих состояний имеют вид

$$H(\varphi_\delta) = -\frac{\alpha^2}{2\lambda}, \quad H(0) = 0. \quad /6.26/$$

Отсюда и из /6.25/ ясно, что при  $\alpha > 0$  появляется континуальное вырождение. Выбор одного из вакуумов  $\varphi_\delta$  эквивалентен фиксации фазы  $\delta = \zeta_{vac}$ .

Исследуем элементарные возбуждения в модели комплексного поля /6.22/. Так как одно комплексное поле аналогично совокупности двух вещественных полей, удобно ввести представление

$$\psi = f e^{i\tau}, \quad /6.27/$$

в котором  $f$  и  $\tau$  - действительные функции. Тогда гамильтониан /6.22/ переходит в

$$H(\psi) = (\dot{f})^2 + (\nabla f)^2 - f^2[(\dot{\tau})^2 - (\nabla\tau)^2] - \alpha f^2 + \frac{\lambda}{2} f^4.$$

А уравнение /6.23/ разбивается на два:

$$\left. \begin{aligned} [\square + (\nabla\tau)^2 - (\dot{\tau})^2 - \alpha] f + \lambda f^3 &= 0 \\ \square \tau &= 0 \end{aligned} \right\} /6.28/$$

Для выделения низколежащей ветви элементарных возбуждений проведем независимую вариацию полей  $f$  и  $\tau$ ,

$$f = f_{vac} + \delta f, \quad \tau = \tau_{vac} + \delta \tau,$$

линеаризуя уравнения /6.28/, откуда

$$\left. \begin{aligned} (\square - \alpha + 3\lambda f_{vac}^2) \delta f &= 0 \\ \square \delta \tau &= 0 \end{aligned} \right\} /6.29/$$

Первое из уравнений /6.29/ дает щелевой спектр

$$\omega_k^2 = \begin{cases} 2\alpha + k^2, & f_{vac} = \sqrt{\alpha/\lambda} \\ -\alpha + k^2, & f_{vac} = 0 \end{cases}, \quad /6.30/$$

который совпадает со скалярным спектром /6.18/, если вспомнить, что  $\alpha = -m_{eff}^2$ . А второе из уравнений /6.29/ приводит к бесщелевому спектру

$$\epsilon_k = k, \quad /6.31/$$

называемому иногда голдстоуновским спектром. Квазичастицы, сопоставляемые возбуждениям со спектром /6.31/, называются часто голдстоуновскими бозонами. Так как в релятивистской теории наличие щели в спектре возбуждений означает существование массы у частиц, то, как видно из /6.31/, голдстоуновские бозоны - безмассовые частицы.

Таким образом, в отличие от случая вещественного скалярного поля, в модели комплексного поля появляется дополнительная ветвь элементарных возбуждений с бесщелевым спектром /6.31/. Наличие бесщелевого спектра коллективных возбуждений характерно для систем с непрерывной группой симметрии.

Как и ранее, можно рассмотреть фазовый переход по внешнему полю  $U$ , или по  $\alpha$ . При  $\alpha < 0$  существует единственный истинный вакуум  $\psi_0 = 0$ . При  $\alpha > 0$  выгоден один из эквивалентных истинных вакуумов  $\psi_0$ ; скалярный спектр возбуждений над состоянием  $\psi_0 = 0$  отрицателен для  $k < \sqrt{\alpha}$  и положителен для  $k > \sqrt{\alpha}$ ; голдстоуновский спектр всегда положителен. Следовательно, в случае  $\alpha > 0$  состояние  $\psi_0 = 0$  является метастабильным вакуумом. В качестве параметра порядка разумно снова взять  $\langle \psi \rangle$ . Так как поле  $\psi$  содержит две компоненты, понятно, что система с гамильтонианом /6.22/ должна быть аналогична спиновой системе с векторами спинов, лежащими в некоторой плоскости, то есть модели плоского ротатора /122/.

При фиксированном внешнем поле, когда  $\alpha = const > 0$ , можно наблюдать фазовый переход, меняя температуру. В последнее время интенсивно исследуются релятивистские модели теории поля при конечной температуре /123/. С физической точки зрения такие модели описывают ситуацию, возникающую после Большого Взрыва, когда Вселенная считается горячей, или соответствуют отдельным объектам во Вселенной, где вследствие большой плотности и давления температура отлична от нуля /124-125/. Конечность температуры необходимо учитывать, например, при изучении начальной стадии эволюции нейтронных звезд или при описании фэйрбола, возникающего в процессе столкновения тяжелых ионов /126-128/. Учет температурных флуктуаций в релятивистских моделях с конденсацией может привести к тому, что характер фазового перехода изменится со второго рода на первый /129-131/.

Если рассматривать заряженные частицы и ввести в гамильтониан /6.22/ электромагнитное поле, то можно убедиться, что конденсация комплексного поля вызывает появление сверхпроводимости /132-133/, связанной с возникновением в системе свойства сверхдиамагнетизма /134/.

В этой лекции мы проиллюстрировали явление конденсации на примере скалярного и комплексного классического поля. Аналогичным образом происходит конденсация и в случае квантового идеального и слабо-неидеального бозе-газа /135/. При этом фазовом переходе появляется отличное от нуля среднее  $\langle \psi \rangle$  от полевого оператора  $\psi$ , что сопровождается, как и ранее, спонтанным нарушением градиентной симметрии. При нарушенной градиентной симметрии одночастичная функция Грина  $G(k, \omega)$  пропорциональна  $(\omega^2 - \epsilon_k^2)^{-1}$ , где  $\epsilon_k \sim k$ , поэтому /135/  $G(k, 0) \sim 1/k^2$ . Данный результат передает смысл теоремы Боголюбова об особенностях функций Грина для систем с нарушенной градиентной симметрией.

Предполагается, что в реальных бозе-жидкостях также может происходить бозе-эйнштейновская конденсация частиц в состояние с нулевым импульсом. В случае квантовой жидкости  $^4\text{He}$  точка конденсации часто

отождествляется с точкой сверхтекучего перехода, хотя взаимосвязь конденсатной и сверхтекучей фракций до сих пор не ясна /см. обсуждение /136/. Поведение термодинамических характеристик сверхтекучего гелия, измеренных вблизи температуры перехода /137,162/, напоминает соответствующие величины, вычисляемые теоретически, для системы возле температуры конденсации, однако низкотемпературные свойства указанных двух систем принципиально различны. Более того, сильное межчастичное взаимодействие не только подавляет обычную бозе-конденсатную фракцию, но может привести к ее полному исчезновению и появлению конденсата с конечным модулем импульса  $\kappa_0$ , когда одночастичный спектр  $\omega(\kappa_0)$  касается нуля /138-140/. В системе с подобным конденсатом не происходит нарушения градиентной симметрии, но имеется дальний, хотя и не бесконечно дальний, порядок, аналогичный тому, как это имеет место для двумерных сверхпроводящих систем без бозе-конденсата /141/. Именно появление выделенного состояния с отличным от нуля  $\kappa_0$ , возможно, и приводит к возникновению сверхтекучести /142/.

В ферми-системах также может осуществиться конденсация, только не одиночных частиц, а их групп, как, например, в сверхпроводнике, где куперовское спаривание электронов приводит к нарушению градиентной симметрии и появлению ненулевых двухоператорных средних типа  $\langle \psi \bar{\psi} \rangle$  и  $\langle \psi \psi \rangle$ . В ферми-жидкости  ${}^3\text{He}$  спаривание частиц вызывает возникновение сверхтекучести /143/. При описании кварк-глюонной материи в квантовой хромодинамике образование мезонов и барионов тоже можно интерпретировать с точки зрения конденсации. В случае мезонов должно быть отлично от нуля среднее  $\langle \psi_q \bar{\psi}_q \rangle$ , в котором  $\psi_q$  - полевой оператор кварка,  $\bar{\psi}_q$  - антикварка, а в случае барионов должно быть отличным от нуля трехоператорное среднее  $\langle \psi_q \psi_q \psi_q \rangle$ . На языке квантовой механики появление подобных кластеров объясняется наличием многочастичных связанных состояний /144/. А на языке статистической механики можно сказать, что адронное состояние вещества оказывается более выгодным по сравнению с кварк-глюонной плазмой, поэтому и происходит адронизация материи в результате конденсации кварков в кварк-глюонные мешки /145,146/. В свою очередь, трехкварковые барионные мешки могут сливаться в шестикварковые и образовывать смешанное состояние из мешков обоих типов. Существование таких гетерофазных состояний подтверждается в экспериментах по кумулятивному эффекту Балдина /147-148/ где изучались реакции взаимодействия протонов и дейтронов с ядрами, при упругом рассеянии электронов на дейтронах /149/, а также в других экспериментах, где приходится прибегать к представлению о многокварковых системах /150-152/.

В отличие от бозе-конденсации, рассмотренной выше, известен и другой тип конденсации - превращение газа в жидкость, то есть фазовый переход первого рода со скачкообразным изменением плотности, которая и служит параметром порядка. Такой переход имеет место как в нерелятивистских /107/, так и в релятивистских /153,154/ моделях. В нейтрон-протонной материи он происходит /155-158/ при  $T_c \approx 20$  МэВ. Подобные условия реализуются в экспериментах по столкновению высокоэнергетических пучков тяжелых ионов /159,160/.

До сих пор при исследовании вакуумных состояний, например, для систем с гамильтонианами /6.8/ и /6.22/, мы имели в виду однородные вакуумы, определяемые как не зависящие от пространственных координат соответствующие решения уравнений /6.9/ и /6.23/. Однако, понятно, что могут существовать и неоднородные вакуумы, в том числе и такие, которые в одной части пространства имеют симметрию одной фазы, а в другой части - симметрию конкурирующей фазы. Подобная ситуация условно представлена на рис. 33 и рис. 34. На первом из них изображен пример локального нарушения, а на втором - локального восстановления симметрии. Область локального изменения симметрии соответствует зародышу конкурирующей фазы. Очевидно, что такие неоднородные вакуумы описывают гетерофазные состояния. По математической структуре эти вакуумы - не что иное, как солитоноподобные решения соответствующих нелинейных уравнений, а зародыши одной фазы в другой - это солитоны.

В качестве иллюстрации рассмотрим образование вихревой нити в модели комплексного поля. Аналогичная ситуация возникает и при описании вихревых нитей в сверхтекучей бозе-жидкости /45/. Поэтому величину

$$\vec{v} \equiv \nabla \chi = \text{const} \quad /6.32/$$

будем называть скоростью сверхтекучего движения. Из уравнений /6.28/, ограничиваясь стационарным решением и учитывая /6.32/, имеем

$$(-\nabla^2 + v^2 - \alpha) f + \lambda f^3 = 0. \quad /6.33/$$

Численное решение уравнения /6.33/ в цилиндрических координатах дает функцию, изображенную на рис. 35, где

$$\rho_0 = \frac{\alpha - v^2}{\lambda}, \quad z_0 = \frac{1}{\sqrt{\alpha - v^2}};$$

$\rho_0$  имеет смысл плотности сверхтекучей фракции,  $z_0$  - радиус нити. Ясно, что вихревая нить представляет собой зародыш нормальной жидкости в сверхтекучей. При повышении скорости движения  $v$  до критической  $v_c = \sqrt{\alpha}$  сверхтекучесть разрушается, так как тогда  $\rho_0 \rightarrow 0$ ,  $z_0 \rightarrow \infty$ , и вся система становится нормальной.

По волнам блуждаю и прячусь в лесу,  
Мерещусь на чистой эмали,  
Разлуку, наверно, неплото снесу,  
Но встречу с тобой - едва ли.

А. Ахматова. "Вместо посвящения".

## Лекция 7. ГОМОГЕННЫЕ ФЛУКТУАЦИИ

Как мы уже говорили в лекции 4, элементарные возбуждения над вакуумным состоянием соответствуют гомогенным, или гомофазным, флуктуациям. Сейчас мы остановимся несколько подробнее на способах описания таких флуктуаций.

Возьмем для начала модель Изинга с произвольным спином:

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z - h \sum_i S_i^z \quad /7.1/$$

Истинным вакуумом здесь является  $\Psi_+$  /см. лекцию 4/. Элементарными возбуждениями служат флиппоны. Операторы рождения  $S_f^-$  и уничтожения  $S_f^+$  флиппона в узле  $f$  - это лестничные операторы

$$S_f^\pm = S_f^x \pm i S_f^y$$

С помощью  $S_f^-$  строятся однофлиппонное

$$\Psi_+^{(i)} = S_i^- \Psi_+ \quad /7.2/$$

двухфлиппонное

$$\Psi_+^{(ij)} = S_i^- S_j^- \Psi_+ \quad (i \neq j), \quad /7.3/$$

и прочие многофлиппонные состояния.

Учитывая коммутационные соотношения

$$[S_i^+, S_j^-] = 2\delta_{ij} S_i^z, \quad [S_i^z, S_j^\pm] = \pm \delta_{ij} S_i^\pm,$$

$$[S_i^z S_j^z, S_f^\pm] = \pm (\delta_{if} S_i^\pm S_j^z + \delta_{jf} S_i^z S_j^\pm),$$

$$[S_i^\pm, H] = \pm (2 \sum_j J_{ij} S_j^z + h) S_i^\pm,$$

и равенства

$$H \Psi_+ = E_0 \Psi_+, \quad S_i^z \Psi_+ = S \Psi_+, \quad /7.4/$$

в которых  $E_0$  - энергия основного состояния,  $S$  - величина спина,

$$E_0 = -N (\bar{J} S^2 + hS) \quad (\bar{J} \equiv \frac{1}{N} \sum_{ij} J_{ij}), \quad /7.5/$$

нетрудно убедиться, что флиппонные функции типа /7.2/, /7.3/ и т.д. - собственные для оператора /7.1/. В самом деле,

$$H \Psi_+^{(i)} = (E_0 + \epsilon_+) \Psi_+^{(i)},$$

где  $\epsilon_+$  - энергия флиппона,

$$\epsilon_+ = 2\bar{J}S + h \quad /7.6/$$

Точно так же можно найти

$$H \Psi_+^{(ij)} = [E_0 + \epsilon_+(ij)] \Psi_+^{(ij)},$$

где энергия двухфлиппонного возбуждения, соответствующего перевороту спинов в узлах  $i$  и  $j$ , равна

$$\epsilon_+(ij) = 2\epsilon_+ - 2J_{ij} \quad /7.7/$$

Действуя оператором Гамильтона /7.1/ на трехфлиппонную функцию

$$\Psi_+^{(ijk)} = S_i^- S_j^- S_k^- \Psi_+ \quad (i \neq j \neq k),$$

находим

$$H \Psi_+^{(ijk)} = [E_0 + \epsilon_+(ijk)] \Psi_+^{(ijk)},$$

причем трехфлиппонное возбуждение имеет энергию

$$\epsilon_+(ijk) = 3\epsilon_+ - 2(J_{ij} + J_{ik} + J_{jk}). \quad /7.8/$$

Из выражений /7.6/-/7.8/ вытекает общий вид флиппонного спектра

$$\epsilon_+(i_1 \dots i_n) = n\epsilon_+ - \sum_{\ell, m=1}^n J_{i_\ell i_m} \quad /7.9/$$

Второе слагаемое в правой части /7.9/ отвечает взаимодействию флиппонов.

Подчеркнем, что флиппонные возбуждения присутствуют и в приближении среднего поля, когда в операторе /7.1/ делается замена

$$S_i^z S_j^z \rightarrow S_i^z \langle S_j^z \rangle + \langle S_i^z \rangle S_j^z - \langle S_i^z \rangle \langle S_j^z \rangle,$$

что дает

$$H_{MF} = \sum_i (2\mathcal{J}S\sigma + h) S_i^z + N\mathcal{J}\sigma^2 S^2, \quad /7.10/$$

где средний приведенный спин

$$G \equiv \langle S_c^z \rangle / S. \quad /7.11/$$

При действии гамильтониана /7.10/ на основное состояние имеем

$$H_{MF} \Psi_+ = E_0^{MF} \Psi_+,$$

энергия основного состояния

$$E_0^{MF} = -N[\mathcal{J}S\sigma(2-S\sigma) + h].$$

Равенство

$$H_{MF} \Psi_+(i) = (E_0^{MF} + \mathcal{E}_+^{MF}) \Psi_+(i)$$

определяет энергию однофлиппонного возбуждения

$$\mathcal{E}_+^{MF} = 2\mathcal{J}S\sigma + h. \quad /7.12/$$

Отличие /7.12/ от /7.6/ состоит в том, что в приближении среднего поля флиппонный спектр зависит от температуры через средний спин /7.11/. Действие гамильтониана /7.10/ на многофлиппонную функцию, то есть

$$H_{MF} \Psi_+(i_1 \dots i_n) = [E_0^{MF} + \mathcal{E}_+^{MF}(i_1 \dots i_n)] \Psi_+(i_1 \dots i_n),$$

задает общее выражение для флиппонного спектра

$$\mathcal{E}_+^{MF}(i_1 \dots i_n) = n\mathcal{E}_+^{MF}. \quad /7.13/$$

Как видно из /7.13/, в приближении среднего поля флиппоны не взаимодействуют между собой.

При исследовании спиновых систем очень часто используют представление операторов, зависящих не от векторов  $z_i$  прямой решетки, а от векторов  $q$  обратной решетки. Переход к такому представлению осуществляется с помощью фурье-преобразований, например, для оператора спина:

$$S_i^\alpha = \frac{1}{N} \sum_q S^\alpha(q) \exp(iqz_i) \quad (\alpha = x, y, z, \pm),$$

$$S^\alpha(q) = \sum_j S_j^\alpha \exp(-iqz_j). \quad /7.14/$$

Применяя аналогичные преобразования к обменному интегралу

$$\mathcal{J}_{ij} = \frac{1}{N} \sum_q \mathcal{J}(q) \exp(iqz_{ij}) \quad (z_{ij} \equiv z_i - z_j),$$

$$\mathcal{J}(q) = \frac{1}{N} \sum_{ij} \mathcal{J}_{ij} \exp(-iqz_{ij}),$$

а также привлекая условия ортонормированности

$$\frac{1}{N} \sum_j \exp(iqz_j) = \delta_{q0},$$

$$\frac{1}{N} \sum_q \exp(iqz_{ij}) = \delta_{ij}.$$

гамильтониан /7.1/ можно записать в форме

$$H = -\frac{1}{N} \sum_q \mathcal{J}(q) S^z(q) S^z(-q) - h S^z(0). \quad /7.15/$$

Для спиновых операторов /7.14/ имеют место коммутационные соотношения

$$[S^+(p), S^-(q)] = 2S^z(p+q),$$

$$[S^z(p), S^\pm(q)] = \pm S^\pm(p+q),$$

$$[S^z(p)S^z(q), S^\pm(k)] = \pm \{S^\pm(p+k)S^z(q) + S^z(p)S^\pm(q+k)\}.$$

Учитывая свойства обменного интеграла

$$\mathcal{J}_{ii} = 0, \quad \mathcal{J}_{ij} = \mathcal{J}_{ji}, \quad \mathcal{J} = \mathcal{J}(0),$$

$$\mathcal{J}(-q) = \mathcal{J}(q), \quad \sum_q \mathcal{J}(q) = 0,$$

находим также коммутатор

$$[S^\pm(q), H] = \pm \frac{2}{N^2} \sum_p \mathcal{J}(p) S^\pm(p+q) S^z(-p) \pm h S^\pm(q).$$

Все эти коммутаторы пригодятся нам сейчас для ответа на такой вопрос: нельзя ли с помощью  $S^-(q)$  построить возбужденные состояния над вакуумом

$\Psi_+$ , и будут ли построенные функции собственными для оператора /7.15/?

Определим систему функций

$$\Psi(q) = S^-(q) \Psi_+ = \sum_j \Psi_+(ij) \exp(-iqz_j),$$

$$\Psi(p, q) = S^-(p) \Psi(q) = \sum_{ij} \Psi_+(ij) \exp(-ipz_i - iqz_j), \dots$$

$$\Psi(q_1, \dots, q_n) = \sum_{i_1, \dots, i_n} \Psi_+(i_1, \dots, i_n) \exp(-i \sum_{m=1}^n q_m z_{j_m}). \quad /7.16/$$

соответствующих возбуждениям в пространстве векторов обратной решетки. Посмотрим, как на эти функции действуют операторы /7.14/. Для  $z$ -компоненты спина имеем

$$S^z(q) \psi_+ = NS \delta_{q_0} \psi_+,$$

$$S^z(p) \psi(q) = NS \delta_{p_0} \psi(q) - \psi(p+q),$$

$$S^z(k) \psi(p, q) = NS \delta_{k_0} \psi(p, q) - [\psi(p, k+q) + \psi(k+p, q)].$$

А для оператора Гамильтона находим

$$H \psi(q) = (E_0 + E_+) \psi(q),$$

$$H \psi(p, q) = (E_0 + 2E_+) \psi(p, q) - \frac{2}{N^2} \sum_k \mathcal{J}(k) \psi(p+k, q-k), \quad /7.17/$$

откуда видно, что функции /7.16/, вообще говоря, не являются собственными для гамильтониана /7.15/, за исключением  $\psi_+$  и  $\psi(q)$ . Вспомним, что все функции  $\psi_+(i_1, \dots, i_n)$ , определенные на прямой решетке, собственные для гамильтониана /7.1/. Из всех функций /7.16/, строго говоря, возбуждение описывает лишь  $\psi(q)$ . Квазичастицу, соответствующую возбуждению в пространстве векторов обратной решетки, называют магномом. То есть магном дуален к флиппону. Первое из выражений /7.17/ показывает, что энергия магнома в модели Изинга  $E_+ = const$ . А второе из /7.17/ подтверждает, что многомагнные возбуждения, в отличие от многофлиппонных, для модели Изинга определены плохо. Тем не менее можно условно дефинировать спектр многомагнных возбуждений, прибегнув к процедуре, которую мы поясним на примере второго из уравнений /7.17/, для чего перепишем его в виде

$$H \psi(p, q) = E_0 \psi(p, q) + \sum_k \mathcal{E}(k) \psi(p-k, q+k). \quad /7.18/$$

Здесь спектр бимагнана

$$\mathcal{E}(q) = \frac{1}{N} \sum_{ij} \mathcal{E}_+(ij) \exp(-iq \tau_{ij})$$

представляет собой фурье-образ от энергии бифлиппона

$$\mathcal{E}_+(ij) = \frac{1}{N} \sum_q \mathcal{E}(q) \exp(iq \tau_{ij}),$$

задаваемой равенством /7.3/. Следовательно,

$$\mathcal{E}(q) = 2E_+ N \delta_{q_0} - 2\mathcal{J}(q). \quad /7.19/$$

Посмотрим, какова длинноволновая асимптотика бимагнного спектра /7.19/. Для этого разложим  $\mathcal{J}(q)$  в ряд:

$$\mathcal{J}(q) \approx \mathcal{J}(1 - \frac{1}{2} a^2 q^2) \quad (q \rightarrow 0),$$

где введена среднеквадратичная длина взаимодействия

$$a^2 \equiv \frac{1}{N} \sum_{ij} \frac{\tau_{ij}^2}{\mathcal{J}} \tau_{ij}^2 \cos^2 \vartheta_{ij} \quad (\cos^2 \vartheta_{ij} \equiv \frac{q \tau_{ij}}{|q| |\tau_{ij}|}).$$

Подставляя это разложение в /7.19/, видим, что в длинноволновом пределе бимагнный спектр квадратичен по  $q$ .

$$\mathcal{E}(q) \approx E_0 + \mathcal{J} a^2 q^2 \quad (q \rightarrow 0), \quad /7.20/$$

и имеет щель

$$E_0 = -2\mathcal{J}.$$

Аналогично можно определить и многомагнный спектр в модели Изинга.

При нулевой температуре статистические средние совпадают со средними по вакууму. Повышение температуры от нуля приводит к необходимости учета коллективных возбуждений, то есть гомофазных флуктуаций. Их роль становится особенно важной, когда температура приближается к критической. Именно вследствие чрезвычайно сильного влияния возбуждений среднего спин /7.11/ равен нулю в критической точке, а некоторые термодинамические характеристики в ней имеют особенности. Связь между ролью гомофазных флуктуаций в системе и термодинамическими величинами хорошо прослеживается по поведению корреляционных функций. Проиллюстрируем эту связь на примере модели Изинга с гамильтонианом /7.1/.

Вспомня определение лекции 2, зададим намагниченность

$$m = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^z \rangle = \sigma S$$

и восприимчивость

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} = \frac{1}{\theta N} \sum_{ij} K_{ij}, \quad /7.21/$$

последняя выражается через корреляционную функцию

$$K_{ij} = \langle S_i^z S_j^z \rangle - \langle S_i^z \rangle \langle S_j^z \rangle. \quad /7.22/$$

Определяя фурье-преобразование

$$K_{ij} = \frac{1}{N} \sum_q K(q) \exp(iq \tau_{ij}),$$

$$K(\varphi) = \frac{1}{N} \sum_{ij} K_{ij} \exp(-i\varphi z_{ij}),$$

восприимчивость /7.21/ представляем в виде предела

$$\chi = \lim_{\varphi \rightarrow 0} \chi(\varphi) \quad /7.23/$$

от функции отклика

$$\chi(\varphi) \equiv \frac{1}{\theta} K(\varphi). \quad /7.24/$$

Таким образом, восприимчивость прямо связана с длинноволновым пределом фурье-образа от корреляционной функции /7.22/.

В приближении среднего поля, вычисляя средние по гамильтониану /7.10/, имеем

$$K_{ij}^{MF} = \delta_{ij} K_0, \quad K_0 \equiv \langle (S_i^z)^2 \rangle_{MF} - \langle S_i^z \rangle_{MF}^2, \quad /7.25/$$

что дает

$$K^{MF}(\varphi) = K_0, \quad \chi^{MF}(\varphi) = \frac{K_0}{\theta}.$$

Более точные выражения для корреляционных функций можно найти, оперируя с уравнениями, определяемыми с помощью теории возмущений. Покажем, как получаются эти уравнения. Прежде всего заметим, что если в гамильтониане /7.1/ сделать замену

$$h \sum_i S_i^z \rightarrow \sum_i h_i S_i^z,$$

то через статсумму  $Z = \text{Sp} e^{-\beta H}$  выражаются и средний спин

$$\langle S_i^z \rangle = \theta \frac{\partial \ln Z}{\partial h_i}, \quad /7.26/$$

и корреляционная функция /7.22/

$$K_{ij} = \theta^2 \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial h_i \partial h_j}. \quad /7.27/$$

Введем не зависящий от магнитного поля вершинный оператор

$$\Gamma = \frac{1}{\theta} (H_0 - H), \quad \frac{\partial \Gamma}{\partial h_i} = 0, \quad /7.28/$$

в котором  $H_0$  - произвольный гамильтониан нулевого приближения. Для гамильтониана  $H$  при этом имеем

$$H = H_0 - \theta \Gamma, \quad \frac{\partial H}{\partial h_i} = -S_i^z.$$

А затем разлагаем  $\ln Z$  по степеням  $\Gamma$ , получая

$$\ln \left( \frac{Z}{Z_0} \right) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{m=0}^{n-1} \frac{(-1)^m m!}{Z_0^m} \langle \Gamma^n \rangle_0,$$

где  $Z_0 = \text{Sp} e^{-\beta H_0}$ , а  $\langle \rangle_0$  означает усреднение по гамильтониану  $H_0$ . Используя /7.26/ и /7.27/, находим средний спин

$$\begin{aligned} \langle S_i^z \rangle &= \langle S_i^z \rangle_0 + \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{m=0}^{n-1} \frac{(-1)^m m!}{Z_0^m} [\langle S_i^z \Gamma^n \rangle_0 - (m+1) \langle S_i^z \rangle_0 \langle \Gamma^n \rangle_0] \end{aligned} \quad /7.29/$$

и корреляционную функцию

$$\begin{aligned} K_{ij} &= K_{ij}^0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{m=0}^{n-1} \frac{(-1)^m m!}{Z_0^m} \left\{ \langle S_i^z S_j^z \Gamma^n \rangle_0 - \right. \\ &- (m+1) [\langle S_i^z S_j^z \rangle_0 \langle \Gamma^n \rangle_0 + \langle S_i^z \rangle_0 \langle S_j^z \Gamma^n \rangle_0 + \langle S_i^z \Gamma^n \rangle_0 \langle S_j^z \rangle_0] + \\ &\left. + (m+1)(m+2) \langle S_i^z \rangle_0 \langle S_j^z \rangle_0 \langle \Gamma^n \rangle_0 \right\}. \end{aligned} \quad /7.30/$$

Можно было бы также разлагать не  $\ln Z$ , а  $Z$ , тогда

$$Z = Z_0 \langle e^{\Gamma} \rangle_0 = Z_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \langle \Gamma^n \rangle_0.$$

При этом вместо /7.29/ и /7.30/ будем иметь

$$\langle S_i^z \rangle = \frac{\langle S_i^z e^{\Gamma} \rangle_0}{\langle e^{\Gamma} \rangle_0},$$

$$K_{ij} = \frac{\langle S_i^z S_j^z e^{\Gamma} \rangle_0}{\langle e^{\Gamma} \rangle_0} - \frac{\langle S_i^z e^{\Gamma} \rangle_0 \langle S_j^z e^{\Gamma} \rangle_0}{\langle e^{\Gamma} \rangle_0^2}.$$

Кроме того, замечая, что

$$\frac{\partial H}{\partial \Gamma_{ij}} = -S_i^z S_j^z,$$

корреляционную функцию можно представить в виде

$$K_{ij} = \theta \frac{\partial \ln Z}{\partial \Gamma_{ij}} - \left( \theta \frac{\partial \ln Z}{\partial h_i} \right)^2,$$

а потом опять применить разложения в ряды.



Если в разложении типа /7.30/ в качестве нулевого взять приближенное среднее поля и оставить только слагаемые, соответствующие лестничным диаграммам, изображенным на рис. 36, то получающийся ряд удастся свернуть и прийти к уравнению Орнштейна-Цернике /163/

$$K_{ij} = K_{ij}^{MF} + 2 \sum_{ff'} K_{if}^{MF} \frac{f_{ff'}}{\theta} K_{f'j} \quad /7.31/$$

По структуре уравнение /7.31/ аналогично уравнению Бете-Солпитера, изучаемому в теории поля и теории ядра. Переходя к фурье-представлению, находим функцию отклика

$$\tilde{f}(q) = \frac{K_0}{\theta - 2K_0 \tilde{f}(q)} \quad /7.32/$$

отвечающую приближению Орнштейна-Цернике. Длинноволновая асимптотика функции /7.32/,

$$\tilde{f}(q) \approx \frac{Q^2}{q^2 + \xi^{-2}} \quad (q \rightarrow 0),$$

имеет форму экранированного кулоновского взаимодействия, где

$$Q^2 = \frac{1}{f_0 a^2}, \quad \xi^2 = \frac{a^2 K_0 \tilde{f}}{\theta - 2K_0 \tilde{f}} \quad /7.33/$$

Введенная в /7.33/ величина  $\xi$  называется корреляционной длиной, так как она показывает, на каком расстоянии скоррелированы коллективные возбуждения. Температура, при которой корреляционная длина расходится, соответствует критической:

$$\xi \rightarrow \infty \quad (\theta \rightarrow \theta_c = 2fK_0).$$

При этом и восприимчивость /7.23/ также расходится. Если же температура не равна критической, то восприимчивость для модели Изинга, как следует из свойств свободной энергии, описанных в лекции 2, всегда конечна и положительна. Заметим, что, вообще говоря, восприимчивость для других моделей может быть и отрицательной /164/.

Теперь перейдем к рассмотрению гомофазных флуктуаций в системе с нарушенной непрерывной группой симметрии. В оставшейся части данной лекции будем исследовать модель Гейзенберга с гамильтонианом

$$H_N = - \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j - \vec{h} \sum_i \vec{S}_i \quad /7.34/$$

Допустим, основным состоянием здесь, как и для модели Изинга, служит вакуум  $\Psi_0$ , для чего направим  $\vec{h}$  по оси  $\vec{z}$ . Напомним, что при  $\vec{h} = 0$  вследствие  $SU(3)$ -симметрии гамильтониана /7.34/ система континуально вырождена, как было подробно разобрано в лекции 5, а вы-

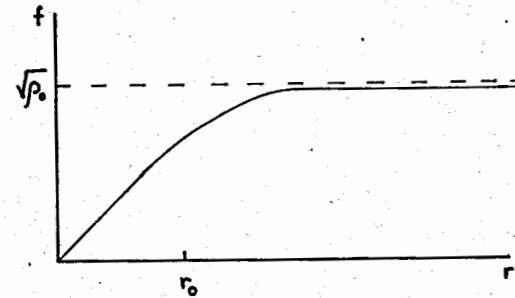


Рис. 35. Вихревая нить.

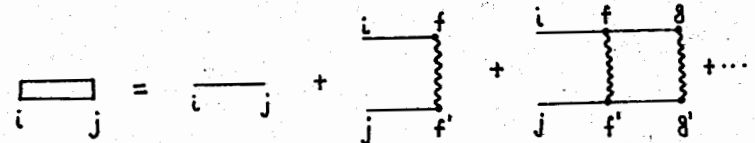


Рис. 36. Корреляционная функция в приближении Орнштейна-Цернике.

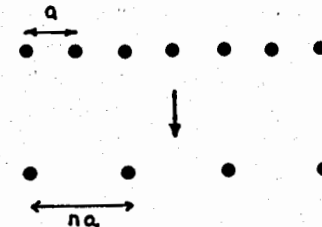


Рис. 37. Укрупнение решетки при децимационной процедуре для  $n=2$ .

бор одного из истинных вакуумов означает спонтанное нарушение симметрии. В случае отличного от нуля внешнего поля  $\vec{h} \parallel \vec{z}$  единственный истинный вакуум - это именно  $\Psi_+$ .

Энергия основного состояния, задаваемая равенством

$$H_N \Psi_+ = E_0 \Psi_+,$$

совпадает с выражением /7.5/ для модели Изинга. В отличие от последней флиппонные функции типа /7.2/ и /7.3/ уже не являются собственными для гамильтониана Гейзенберга /7.34/. В этом несложно убедиться, воспользовавшись коммутатором

$$[H_N, S_i^-] = 2 \sum_j J_{ij} (S_i^- S_j^z - S_j^- S_i^z) + h S_i^-$$

и получая

$$H \Psi_+(i) = (E_0 + \mathcal{E}_+) \Psi_+(i) - 2S \sum_j J_{ij} \Psi_+(j), \quad /7.35/$$

где  $\mathcal{E}_+$  - флиппонная энергия /7.6/. Однако из /7.35/ следует, что функция  $\Psi(q)$ , являющаяся Фурье-образом от

$$\Psi_+(j) = \frac{1}{N} \sum_q \Psi(q) \exp(iqz_j),$$

представляет собой собственную функцию оператора /7.34/, который можно записать в форме

$$H_N = -\frac{1}{N} \sum_q J(q) \bar{S}(q) \bar{S}(q) - h \bar{S}(0). \quad /7.36/$$

Действительно,

$$H_N \Psi(q) = [E_0 + \omega(q)] \Psi(q); \quad /7.37/$$

энергия магнона

$$\omega(q) = 2S [J - J(q)] + h. \quad /7.38/$$

Для образования многомагнонной функции надо подействовать нужное число раз оператором рождения магнона  $S^-(q)$  на  $\Psi_+$ , как это делается в /7.16/. Но двухмагнонные и прочие многомагнонные функции - не собственные для гамильтониана Гейзенберга, так же как это было и для модели Изинга. Поэтому магноны могут представлять хорошо определенные квазичастицы только тогда, когда их число мало, то есть при низких температурах. Подействовав коммутатором магнонных операторов рождения и уничтожения на вакуумное состояние, получим

$$[S^-(p), S^-(q)] \Psi_+ = 2NS \delta_{p+q,0} \Psi_+,$$

откуда следует, что магноны - это почти бозоны. Гомогенные флуктуации, соответствующие магнонным возбуждениям, обычно называют спиновыми волнами, так как в классической интерпретации эти возбуждения эквивалентны прецессии спинов.

В длинноволновом приближении спектр спиновых волн /7.38/ принимает вид

$$\omega(q) \approx S J a^2 q^2 + h \quad (q \rightarrow 0). \quad /7.39/$$

На языке теории поля наличие щели в спектре означает наличие массы у соответствующей частицы. Значит, в присутствии внешнего магнитного поля магнон имеет массу  $h$ . А когда внешнего поля нет, тогда магнон - безмассовый почти бозон. Напомним, что подобные безмассовые частицы, возникающие в системе с непрерывным вырождением, когда симметрия нарушается за счет выбора одного из вакуумов, часто называются голдстоуновскими бозонами.

При повышении температуры роль многомагнонных возбуждений увеличивается, и картина спиновых волн становится плохо определенной. Тем не менее существует так называемое приближение случайных фаз<sup>/22/</sup>, сохраняющее магнонную идеологию и даже разумное описание спиновых систем при конечных температурах вплоть до критической точки. Переход от спиновых волн к температурным магнонам приближения случайных фаз соответствует замене операторов  $S^-(q)$  и  $S^+(q)$  на квазибозовские операторы

$$b_q^+ = S^-(q) \sqrt{\frac{S}{\langle S_i^z \rangle}}, \quad b_q^- = S^+(q) \sqrt{\frac{S}{\langle S_i^z \rangle}}, \quad /7.40/$$

что, грубо говоря, эквивалентно замене  $S_i^z$  на  $\langle S_i^z \rangle$ . При нулевой температуре операторы /7.40/ переходят в операторы спиновых волн:

$$b_q^+ = S^-(q), \quad b_q^- = S^+(q) \quad (\langle S_i^z \rangle = S, \theta = 0).$$

Вместо спектра /7.38/ имеем спектр

$$\omega_q = 2 \langle S_i^z \rangle [J - J(q)] + h, \quad /7.41/$$

зависящий от температуры через  $\langle S_i^z \rangle$ . Соответственно, в случае длинных волн

$$\omega_q \approx \langle S_i^z \rangle J a^2 q^2 + h \quad (q \rightarrow 0). \quad /7.42/$$

В приближении случайных фаз для среднего спина при  $S = \frac{1}{2}$  получаем уравнение

$$\langle S_i^z \rangle = \frac{1}{2} - \frac{2}{N} \sum_q n_q \langle S_i^z \rangle, \quad /7.43/$$

в котором

$$n_q \equiv \langle S_q^- S_q^+ \rangle = [\exp(\omega_q / \theta) - 1]^{-1} \quad /7.44/$$

Обратим внимание на то, что при подходе к критической точке  $\theta = \theta_c$ ,  $h=0$ , характеристическая частота /7.41/ стремится к нулю:

$$\omega_q \rightarrow 0 \quad (\langle S_i^z \rangle \rightarrow 0, \quad h=0) \quad /7.45/$$

Такое поведение спектра известно в литературе как смягчение моды и часто встречается вблизи критической точки.

Мы рассмотрели в этой лекции простейшие методы описания коллективных возбуждений на примере магнетиков Изинга и Гейзенберга. Но, естественно, аналогичные рассуждения сохраняют силу и для сегнетоэлектриков<sup>/30,31/</sup> сегнетомангнетиков<sup>/165/</sup>, диэлектрических стекол<sup>/166,167/</sup> и других квазиспиновых систем<sup>/19/</sup>.

*Здесь ты должен следовать упорядоченным путем, который требует предположений, от одного отрывка к другому в каждой части, и таким образом тебя хорошо поймут и не будут теряться в догадках.*

Леонардо Да Винчи. "Кодекс".

## Лекция 8. МЕТОД ТРАНСФЕР-МАТРИЦЫ

В отдельных случаях вклад всех состояний флиппонного типа удается учесть точно. Это относится к системам с дальним действием<sup>/99,111/</sup> и к некоторым моделям с короткодействием. Для последних оказывается довольно эффективным метод трансфер-матрицы, или матрицы переноса.

Мы проиллюстрируем сейчас этот метод на примере модели Изинга со взаимодействием между ближайшими соседями. При этом в гамильтониане

$$H = -\frac{J_0}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \quad /8.1/$$

сумма по  $\langle ij \rangle$  означает суммирование только по ближайшим соседям без повторений. Введя набор величин

$$\{\sigma_i\} = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n\} \quad (\sigma_i = \pm 1),$$

собственные значения гамильтониана /8.1/ можно записать в форме

$$E(\{\sigma_i\}) = -\frac{J_0}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad /8.2/$$

Статистическая сумма, представляющая собой след от  $\exp(-H/\theta)$  по пространству спиновых функций, преобразуется в классическую сумму

$$Z = \text{Tr} \exp(-H/\theta) = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp[E(\{\sigma_i\})/\theta] \quad /8.3/$$

Рассмотрим одномерную изинговскую цепочку с периодическим граничным условием

$$\sigma_{N+1} = \sigma_1 \quad /8.4/$$

Так как в конечном счете нас интересуют значения наблюдаемых величин в термодинамическом пределе, то конкретный вид граничных условий не принципиален, и разумно выбрать такие условия, которые облегчают решение задачи.

Энергия пары спинов

$$E_{ij} = -\frac{1}{2} [J_0 \sigma_i \sigma_j + B(\sigma_i + \sigma_j)] \quad (j = i \pm 1), \quad /8.5/$$

просуммированная по всем соседним узлам, дает полную энергию /8.2/,

$$E(\{\sigma_i\}) = \sum_{\langle ij \rangle} E_{ij} = \sum_{i=1}^N E_{ii+1} \quad /8.6/$$

Трансфер-матрица, соответствующая узлам  $i$  и  $j$ , определяется как больцмановская экспонента

$$\hat{t}_{ij} = \exp(-E_{ij}/\theta) \quad /8.7/$$

Вводя обозначения безразмерных константы связи  $g$  и внешнего поля  $b$ ,

$$g \equiv \frac{J_0}{2\theta}, \quad b \equiv \frac{B}{\theta}, \quad /8.8/$$

матрицу /8.7/ несложно выписать явно,

$$\hat{t}_{ij} = \begin{pmatrix} e^{g+b} & e^{-g} \\ e^{-g} & e^{g-b} \end{pmatrix} = \hat{t}, \quad /8.9/$$

откуда видно, что  $\hat{t}_{ij}$  не зависит от номеров соседних узлов. Для статсуммы /8.3/ имеем

$$Z = \text{Sp} \prod_{i=1}^N \hat{t}_{ii+1} = \text{Sp} \hat{t}^N \quad /8.10/$$

Шпур матрицы не зависит от ее представления, а для расчета желательно получить диагональное представление  $\hat{t}$ . Решим задачу на собственные значения и собственные функции трансфер-матрицы:

$$\hat{t} \psi = \lambda \psi, \quad \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad /8.11/$$

Подставляя сюда /8.9/, находим

$$\lambda_{\pm} = e^g (ch b \pm \sqrt{3h^2 b + e^{-4g}}) \quad /8.12/$$

Учитывая нормировку собственных функций

$$\varphi_1^2 + \varphi_2^2 = 1$$

с точностью до фазового множителя, как известно, несущественного, получаем

$$\varphi_1^2 = \frac{1}{1 + e^{2g}(\lambda - e^{g+\delta})^2}, \quad /8.13/$$

$$\varphi_2^2 = \frac{e^{2g}(\lambda - e^{g+\delta})^2}{1 + e^{2g}(\lambda - e^{g+\delta})^2}.$$

Из /8.10/ очевидно, что  $\hat{z}^N$  играет роль ненормированного статистического оператора, собственные функции которого описывают физические состояния системы. Поэтому интересно проанализировать выражения /8.12/ и /8.13/ в различных предельных ситуациях.

Допустим, при слабом внешнем поле  $B \rightarrow 0$  асимптотика /8.12/ имеет вид

$$\lambda_{\pm} \approx (e^g \pm e^{-g})(1 + \frac{b^2}{2}) \quad (b \rightarrow 0).$$

Асимптотические выражения компонент /8.13/ собственной функции  $\varphi$  даются равенствами

$$\varphi_1^2 \approx \frac{1}{\sqrt{2}}(1 \pm \frac{b}{2}e^{2g}),$$

$$\varphi_2^2 \approx \pm \frac{1}{\sqrt{2}}(1 \mp \frac{b}{2}e^{2g}) \quad (b \rightarrow 0).$$

В пределе нулевого магнитного поля

$$\lambda_+ \approx 2chb, \quad \lambda_- \approx 2shb \quad (b \rightarrow 0).$$

При этом структура собственных функций

$$\varphi_+ \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \varphi_- \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (b \rightarrow 0) \quad /8.14/$$

свидетельствует о том, что намагниченности в системе быть не должно, в чем чуть позднее мы и убедимся. Вспомним, что вид /8.14/ имеют собственные функции матрицы Паули  $\sigma^x$ . Как легко проверить, выполняются обычные условия ортонормированности

$$\hat{\varphi}_+ \varphi_+ = 1 = \hat{\varphi}_- \varphi_-, \quad \hat{\varphi}_+ \varphi_- = 0 = \hat{\varphi}_- \varphi_+.$$

А, например, при сильном внешнем поле  $B \rightarrow \infty$  собственные функции трансфер-матрицы

$$\varphi_+ \approx \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_- \approx \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (b \rightarrow \infty) \quad /8.15/$$

совпадают с собственными функциями матрицы Паули  $\sigma^z$ , что, по-видимому, отвечает полностью упорядоченному спиновому состоянию системы. Собственные значения  $\hat{z}$  при этом равны

$$\lambda_+ \approx e^{g+\delta}, \quad \lambda_- \approx 0 \quad (b \rightarrow \infty).$$

Если температура стремится к нулю ( $\theta \rightarrow 0$ ), то это эквивалентно  $g \rightarrow \infty$ , поэтому

$$\lambda_+ \approx e^{g+\delta}, \quad \lambda_- \approx e^{g-\delta} \quad (g \rightarrow \infty),$$

и состояние системы вновь упорядочено:

$$\varphi_+ \approx \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_- \approx \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (g \rightarrow \infty). \quad /8.16/$$

Наконец, когда  $\theta \rightarrow \infty$ , а значит,  $g \rightarrow 0$ ,  $b \rightarrow 0$ , тогда

$$\lambda_+ \approx 2chb, \quad \lambda_- \approx 0 \quad (g \rightarrow 0);$$

физическое состояние системы в высокотемпературном пределе, естественно, будет неупорядоченным:

$$\varphi_+ \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \varphi_- \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (g \rightarrow 0, b \rightarrow 0). \quad /8.17/$$

Вернемся к статистической сумме /8.10/. Вследствие /8.11/ и /8.12/ она равна

$$Z = \lambda_+^N + \lambda_-^N \quad (\lambda_+ > \lambda_-). \quad /8.18/$$

Поэтому приведенная свободная энергия

$$\bar{F} = -\frac{\theta}{N} \ln Z \approx -\theta \ln \lambda_+ \quad (N \rightarrow \infty). \quad /8.19/$$

Удобно определить безразмерную величину

$$f = -\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\bar{F}}{\theta} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z, \quad /8.20/$$

называемую иногда функцией Массье /49/. Согласно /8.12/ и /8.19/ имеем

$$f = g + \ln(chb + \sqrt{sh^2b + e^{-4g}}). \quad /8.21/$$

С помощью свободной энергии /8.19/ или функции Массье /8.21/ можно вычислить любые термодинамические характеристики. Например, средняя намагниченность на один узел

$$m = -\frac{\partial \bar{F}}{\partial B} = \frac{\partial f}{\partial B}. \quad /8.22/$$

Удельная энтропия

$$\bar{s} = -\frac{\partial \bar{F}}{\partial \theta} = f - (g \frac{\partial}{\partial g} + b \frac{\partial}{\partial b}) f. \quad /8.23/$$

Удельная внутренняя энергия

$$\bar{E} = F + \theta \bar{S} = -\theta \left( g \frac{\partial}{\partial g} + b \frac{\partial}{\partial b} \right) f. \quad /8.24/$$

Теплоемкость

$$C_v = \frac{\partial \bar{E}}{\partial \theta} = \left( g \frac{\partial}{\partial g} + b \frac{\partial}{\partial b} \right)^2 f. \quad /8.25/$$

Восприимчивость

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial B} = \frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial B^2}. \quad /8.26/$$

При наличии внешнего поля  $B \neq 0$  выражения для указанных термодинамических характеристик, кроме намагниченности /8.22/

$$m = \frac{ghb}{\sqrt{gh^2b + e^{-4g}}}, \quad /8.27/$$

имеют довольно громоздкий вид, поэтому выписывать их не станем.

Из /8.27/ вытекает, что

$$m \rightarrow \begin{cases} 0, & b \rightarrow 0 \\ 1, & b \rightarrow \infty \\ 1, & g \rightarrow \infty \end{cases}. \quad /8.28/$$

То есть при нулевом внешнем поле система находится в неупорядоченном состоянии, а при бесконечном магнитном поле или нулевой температуре она намагничена до насыщения - это согласуется с формой собственных функций трансфер-матрицы /8.14/-/8.17/ при соответствующих условиях.

Намагниченность /8.27/ служит параметром порядка. Ее поведение /8.28/ показывает, что при отличном от нуля внешнем поле фазового перехода в системе нет. Если же внешнее поле  $B$  включается как инфинитезимальный источник для квазиусреднения, то при нулевой температуре происходит скачкообразный фазовый переход. Таким образом, точка фазового перехода задается равенствами

$$\theta_c = 0, \quad B = 0. \quad /8.29/$$

В случае нулевого внешнего поля термодинамические характеристики существенно упрощаются:

$$f = \ln(2chg), \quad \bar{S} = \ln(2chg) - g \operatorname{th}g,$$

$$\bar{E} = \theta g \operatorname{th}g, \quad C_v = (g/chg)^2,$$

$$\chi = e^{2g}/\theta, \quad (B=0).$$

При низких температурах это дает

$$f \approx g, \quad \bar{S} \approx 2g e^{-2g},$$

$$\bar{E} \approx g_0 \left( \frac{1}{2} - e^{-2g} \right), \quad C_v \approx 4g^2 e^{-2g}.$$

$$\chi \approx (2g/g_0) e^{2g} \quad (g \rightarrow \infty).$$

Как видно, в точке фазового перехода  $\theta_c = 0$  восприимчивость расходится.

Теперь покажем, как при помощи трансфер-матрицы можно найти корреляционную функцию

$$K_{ij} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle. \quad /8.30/$$

Для этого заметим, что

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle = \frac{1}{Z} \operatorname{Sp} \left[ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \hat{T}^n \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \hat{T}^{N-n} \right],$$

откуда

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle = \frac{\lambda_+^n \lambda_-^{N-n} + \lambda_+^{N-n} \lambda_-^n}{\lambda_+^N + \lambda_-^N} \approx \left( \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^n. \quad /8.31/$$

Ограничиваясь для простоты случаем нулевого внешнего поля, когда

$$\langle \sigma_i \rangle = m = 0 \quad (B=0),$$

из /8.30/ и /8.31/ получаем

$$K_{ij} = (thg)^{|i-j|}. \quad /8.32/$$

Вводя расстояние между узлами  $i$  и  $j$

$$r_{ij} = a |i-j|,$$

где  $a$  - шаг цепочки, преобразуем /8.32/ к виду

$$K_{ij} = \exp(-r_{ij}/\xi), \quad /8.33/$$

в котором

$$\xi = a / \ln(cthg) \quad /8.34/$$

- это корреляционная длина, характеризующая размер области, где существуют межузельные корреляции. В общем случае корреляционная функция для двух удаленных друг от друга узлов имеет асимптотику

$$K_{ij} \sim \frac{\exp(-r_{ij}/\xi)}{r_{ij}^{d-2+\zeta}} \quad (r_{ij} \rightarrow \infty),$$

причем по определению  $\xi$  называется корреляционной длиной,  $d$  - это размерность решетки, а  $\zeta$  - характерный индекс. Как видим, для одно-

мерной ( $d=1$ ) цепочки Изинга  $z=1$ . В точке перехода коллективные возбуждения резко усиливаются, что проявляется в расходимости корреляционной длины

$$\xi \approx \frac{a}{2} e^{2g} \quad (g \gg 1),$$

стремящейся к бесконечности при  $\theta \rightarrow \theta_c = 0$  по тому же закону, что и восприимчивость.

Метод трансфер-матрицы применим и для двумерной модели Изинга с близкодействием. Покажем, как производится матричная формулировка модели с гамильтонианом /8.1/ на примере квадратной решетки из  $N$  узлов. Расположим решетку так, чтобы у нее было  $n = \sqrt{N}$  строк и  $n = \sqrt{N}$  столбцов. Теперь каждый узел  $i$  характеризуется номерами строки  $\alpha$  и столбца  $\beta$ , в которых он находится. Переменные  $S_i = \pm 1$  при этом заменяются на

$$S_{\alpha\beta} = \pm 1 \quad (\alpha, \beta = 1, 2, \dots, n). \quad /8.35/$$

Введем обозначение

$$J_{\alpha} \equiv \{S_{\alpha 1}, S_{\alpha 2}, \dots, S_{\alpha n}\} \quad (n = \sqrt{N}) \quad /8.36/$$

для набора переменных /8.35/, принадлежащих одной и той же строке. Свернем решетку в цилиндр, налагая условие периодичности

$$S_{n+1} = S_1. \quad /8.37/$$

Энергия спинов на одной строке имеет вид

$$E(S_{\alpha}) = -\frac{J_0}{2} \sum_{\beta=1}^n S_{\alpha\beta} S_{\alpha\beta+1} - B \sum_{\beta=1}^n S_{\alpha\beta},$$

и энергия взаимодействия двух строк

$$E(S_{\alpha}, S_{\alpha'}) = -\frac{J_1}{2} \sum_{\beta=1}^n S_{\alpha\beta} S_{\alpha'\beta} \quad (\alpha' = \alpha \pm 1).$$

Полная энергия решетки, являющаяся собственным значением гамильтониана /8.1/, равна

$$E(\{S_{\alpha}\}) = \sum_{\alpha=1}^n [E(S_{\alpha}, S_{\alpha+1}) + E(S_{\alpha})], \quad /8.38/$$

причем

$$\{S_{\alpha}\} \equiv \{S_1, S_2, \dots, S_n\} \quad (N = n^2).$$

Определим  $2^n$ -мерную квадратную матрицу

$$\hat{t}_{\alpha\alpha'} = [t(S_{\alpha}, S_{\alpha'})] \equiv \hat{t}, \quad /8.39/$$

состоящую из элементов

$$t(S_{\alpha}, S_{\alpha'}) = \exp\left\{-\frac{1}{\theta} [E(S_{\alpha}, S_{\alpha'}) + E(S_{\alpha})]\right\}. \quad /8.40/$$

Это и есть трансфер-матрица для двумерного случая. В силу одинаковости интенсивности взаимодействия  $J_0$  между любыми двумя ближайшими соседями матрица /8.39/ не зависит от номеров соседних строк.

Статистическую сумму /8.3/ теперь можно переписать так:

$$Z = \sum_{\{S_{\alpha}\}} \prod_{\alpha=1}^n t(S_{\alpha}, S_{\alpha+1}) = Sp \prod_{\alpha=1}^n \hat{t}_{\alpha\alpha+1} = Sp \hat{t}^n. \quad /8.41/$$

Для того чтобы привести трансфер-матрицу к диагональному виду, надо найти ее собственные значения  $\lambda_k$  и собственные функции

$$\Psi_k = [\Psi_{kk'}] \quad (k' = 1, 2, 3, \dots, 2^n),$$

задаваемые уравнением

$$\hat{t} \Psi_k = \lambda_k \Psi_k \quad (k = 1, 2, 3, \dots, 2^n).$$

Тогда статсумма /8.41/ становится равна

$$Z = \sum_{k=1}^{2^n} \lambda_k^n. \quad /8.42/$$

По определению трансфер-матрицы /8.39/, /8.40/ все ее собственные числа должны быть положительны. Обозначим наибольшее из них через

$$\lambda_{max} = \max_k \{\lambda_k\} \quad (\lambda_k \geq 0).$$

Очевидно, что для статсуммы /8.42/ верны неравенства

$$\lambda_{max}^n \leq Z \leq 2^n \lambda_{max}^n,$$

откуда

$$\frac{1}{n} \ln \lambda_{max} \leq \frac{1}{n} \ln Z \leq \frac{1}{n} (\ln \lambda_{max} + \ln 2).$$

Вследствие свойства аддитивности /см. лекцию 2/ надо полагать, что  $\lambda_{max} \sim e^n$ , поэтому

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \lambda_{max} > 0.$$

Таким образом, для удельной свободной энергии будем иметь

$$\bar{F} = -\frac{\theta}{n^2} \ln Z \approx \frac{1}{n} \ln \lambda_{max} \quad (n \rightarrow \infty). \quad /8.43/$$

Значит, проблема сводится к отысканию максимального собственного значения трансфер-матрицы. Это значение отвечает тому подпространству полного пространства спиновых конфигураций /см. лекцию 4/, которое

минимизирует свободную энергию; то есть максимальное собственное значение трансфер-матрицы соответствует истинному вакууму. Остальные собственные значения соответствуют метастабильным или лабильным вакуумам. Точнее говоря, из-за  $Z_2$ -симметрии гамильтониана /8.1/ имеется два истинных вакуума  $\psi_+$  и  $\psi_-$ , которым отвечает одно и то же  $\lambda_{max}$ , а вырождение, как обычно, снимается с помощью квазиусреднения /лекции 4 и 5/.

Использование метода трансфер-матрицы для двумерной модели Изинга с взаимодействием ближайших соседей подробно изложено в книге Хуанга /50/ для случая нулевого внешнего поля. Решение для модели Изинга с полем до сих пор не найдено - имеется в виду точное решение.

Заметим, что для формулировки метода трансфер-матрицы достаточно свернуть решетку в цилиндр, применяя граничное условие /8.37/. Но обычно, в целях удобства вычислений, полученный цилиндр сворачивают в тор, прибегая к условию периодичности вдоль каждой из строк

$$\sigma_{\alpha n+1} = \sigma_{\alpha 1} \quad (\alpha = 1, 2, 3, \dots, 2^n).$$

В принципе метод трансфер-матрицы может быть формально перенесен и на трехмерную модель Изинга. Однако нахождение собственных значений трансфер-матрицы встречает непреодолимые пока сложности даже в отсутствие внешнего магнитного поля.

*Необходимо было лекарство  
быстрое и сильно действующее.*

*Наполеон. "Избранные произведения".*

## Лекция 9. РЕНОРМГРУППОВОЙ ПОДХОД

В том случае, когда нас интересует поведение системы только вблизи критической точки, можно использовать подход, опирающийся на понятие ренормализационной группы. Заметим сразу же, что существуют два несколько отличающихся друг от друга ренормгрупповых метода. Один из них был развит в связи с проблемами квантовой теории поля в работах Гелл-Манна, Лоу, Боголюбова и Ширкова /168/. А другой, связанный с именами Фишера, Вайдома, Каданова и Вильсона /16,17/, применяется в статистической механике. Чтобы различать два указанных вида ренормгрупп, первую из них называют для краткости полевой ренормгруппой, или ренормгруппой Боголюбова-Ширкова, а вторую - статистической ренормгруппой, или ренормгруппой Каданова-Вильсона.

Опишем суть статистической ренормгруппы. Допустим, система с гамильтонианом  $H$  характеризуется набором некоторых переменных

$$\sigma = \sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n. \quad /9.1/$$

Определим безразмерный гамильтониан

$$H\{\sigma\} = H/\theta. \quad /9.2/$$

Тогда статистическая сумма представима в форме

$$Z = \sum_{\sigma} \exp(-H\{\sigma\}). \quad /9.3/$$

Разобьем набор /9.1/ на два поднабора:

$$\sigma = \{\mathcal{J}_1, \mathcal{J}'_1\}. \quad /9.4/$$

Естественно, что при этом

$$Z = \sum_{\mathcal{J}_1} \sum_{\mathcal{J}'_1} \exp(-H\{\mathcal{J}_1, \mathcal{J}'_1\}). \quad /9.5/$$

Введем новый гамильтониан  $H_1\{\mathcal{J}_1\}$  с помощью соотношения

$$\exp(-H_1\{\mathcal{J}_1\}) = \sum_{\mathcal{J}'_1} \exp(-H\{\mathcal{J}_1, \mathcal{J}'_1\}), \quad /9.6/$$

вследствие чего статсумма /9.5/ равна

$$Z = \sum_{\mathcal{J}_1} \exp(-H_1\{\mathcal{J}_1\}). \quad /9.7/$$

Теперь набор  $\mathcal{J}_1$  разобьем на два поднабора:

$$\mathcal{J}_1 = \{\mathcal{J}_2, \mathcal{J}'_2\}.$$

Зададим новый эффективный гамильтониан  $H_2\{\mathcal{J}_2\}$  равенством

$$\exp(-H_2\{\mathcal{J}_2\}) = \sum_{\mathcal{J}'_2} \exp(-H_1\{\mathcal{J}_2, \mathcal{J}'_2\}).$$

В результате для /9.7/ имеем

$$Z = \sum_{\mathcal{J}_2} \exp(-H_2\{\mathcal{J}_2\}).$$

Продолжая далее процедуру последовательного разбиения переменных на поднаборы и суммирования по одному из поднаборов, на  $l$ -м шаге получим

$$Z = \sum_{\mathcal{J}_n} \exp(-H_n\{\mathcal{J}_n\}), \quad /9.8/$$

где эффективный гамильтониан

$$H_n\{\mathcal{J}_n\} = -\ln \sum_{\mathcal{J}'_n} \exp(-H_{n-1}\{\mathcal{J}_n, \mathcal{J}'_n\}). \quad /9.9/$$

Соотношения типа /9.6/ и /9.9/ называются рекуррентными.

Можно определить оператор  $R [s'_n]$ , действующий на функции штрихованных переменных

$$\Psi \equiv \Psi \{s'_m, \dots, s'_n, \dots\}$$

по закону

$$R [s'_m] \Psi \equiv -\ell_n \sum_{s'_m} e^{-\Psi} \quad /9.10/$$

Оператор двойного преобразования  $R [s'_m + s'_n]$  определяется равенством

$$R [s'_m + s'_n] \Psi \equiv -\ell_n \sum_{s'_m} \sum_{s'_n} e^{-\Psi} \quad /9.11/$$

А тождественное преобразование задается выражением

$$R [0] \equiv 1. \quad /9.12/$$

Согласно определениям /9.10/ и /9.11/ выполняются следующие свойства:

$$R [s'_m + s'_n] = R [s'_m] R [s'_n] = R [s'_n] R [s'_m]. \quad /9.13/$$

Следовательно, множество операторов  $R [s'_n]$  составляет коммутативную полугруппу. Именно полугруппу, а не группу, поскольку обратное преобразование не определено. Указанные операторы позволяют переписать рекуррентные соотношения типа /9.6/ в виде

$$H_1 \{s_1\} = R [s'_1] H \{s\},$$

$$H_2 \{s_2\} = R [s'_2] H_1 \{s_1\} = R [s'_2] R [s'_1] H \{s\}$$

и так далее, а общее соотношение /9.9/ переписывается в форме

$$H_n \{s_n\} = R [s'_n] R [s'_{n-1}] \dots R [s'_1] H \{s\}. \quad /9.14/$$

Эффективные гамильтонианы /9.14/ называются ренормированными гамильтонианами, а полугруппа абелевых преобразований  $R [s'_n]$  - это и есть то, что называют статистической ренормализационной группой.

Посмотрим, во что преобразуется рекуррентное соотношение /9.14/, то есть

$$H_n \{s_n\} = R [s'_n] H_{n-1} \{s_{n-1}\}, \quad /9.15/$$

где

$$n \geq 1, \quad H_0 \{s_0\} \equiv H \{s\},$$

при стремлении номера  $n$  к бесконечности. Предположим, что существуют пределы

$$\tilde{H} = \lim_{n \rightarrow \infty} H_n \{s_n\}, \quad \tilde{R} = \lim_{n \rightarrow \infty} R [s'_n].$$

Тогда при  $n \rightarrow \infty$  /9.15/ переходит в

$$\tilde{H} = \tilde{R} \tilde{H}. \quad /9.16/$$

Отсюда с учетом /9.12/ следует

$$\tilde{R} = 1 \approx R [0]. \quad /9.17/$$

В свою очередь, это означает, что

$$s_n \rightarrow 0 \quad (n \rightarrow \infty). \quad /9.18/$$

Термодинамические свойства системы можно характеризовать введенной в лекции 8 функцией Массье

$$f \approx \frac{1}{N} \ell_n Z \quad (N \rightarrow \infty).$$

Из /9.3/ и /9.10/ видно, что

$$f = \frac{1}{N} \ell_n \sum_{\sigma} \exp(-N \mathcal{G}) = -\frac{1}{N} R [\sigma] H \{\sigma\}. \quad /9.19/$$

Вследствие /9.7/

$$f = -\frac{1}{N} R [s_1] H_1 \{s_1\}.$$

Наконец, согласно /9.8/

$$f = -\frac{1}{N} R [s_n] H_n \{s_n\}. \quad /9.20/$$

В частности, при  $n \rightarrow \infty$  вместо /9.20/ имеем

$$f = -\frac{1}{N} \tilde{H}.$$

Таким образом, если для какой-то конкретной системы мы сумели бы бесконечное число раз перенормировать гамильтониан, это было бы равнозначным точному вычислению термодинамического потенциала. Но, естественно, такую процедуру удастся осуществить лишь для очень небольшого числа систем, например, для одномерной модели Изинга, для которой чуть ниже мы это и сделаем. Для большинства же систем мы в состоянии выполнить только несколько шагов при ренормировке гамильтониана, надеясь, что этого достаточно для получения разумного приближения:

$$f \approx f_n = -\frac{1}{N} H_n \{0\}. \quad (n > 1). \quad /9.21/$$

Мы описали сейчас общую структуру статистического ренормгруппового подхода. В приложениях используют его частный вариант, к которому мы и перейдем.



Допустим, гамильтониан системы содержит некий набор параметров  $G$ , которые можно условно назвать константами связи:

$$H\{\sigma\} = H\{\sigma; G\}, \quad H_n\{S_n\} = H_n\{S_n; G\}.$$

Предположим, что при проведении ренормализационных преобразований по указанной ранее схеме выполняются следующие условия.

1/ В результате каждого шага перенормировки форма гамильтониана не меняется, но перенормируются константы связи:

$$\begin{aligned} H_n\{S_n; G\} &= H\{S_n; G_n\}, \\ G_n &\equiv G_n(G), \quad G_0 \equiv G. \end{aligned} \quad /9.22/$$

Так что рекуррентное соотношение /9.15/ принимает вид

$$H\{S_n; G_n\} = R\{S'_n\} H\{S_{n-1}; G_{n-1}\}. \quad /9.23/$$

2/ Рекуррентные соотношения для гамильтониана эквивалентны существованию рекуррентных соотношений для констант связи:

$$G_n(G) = R_n G_{n-1}(G) = \prod_{i=1}^n R_i G. \quad /9.24/$$

3/ Среди множества параметров  $G$  имеются такие, которые при конечном  $n \gg 1$  удовлетворяют уравнению

$$G_n(G^*) = G^*. \quad /9.25/$$

Решения этого уравнения называются неподвижными, или фиксированными, точками. Неподвижная точка  $G^*$  может быть тривиальной, если она соответствует бесконечной температуре, и нетривиальной, когда она отвечает критической точке системы, где происходит фазовый переход. Нетривиальная неподвижная точка  $G^*$  идентифицируется с критической точкой системы на основании предположения о преобладающей роли крупномасштабных флуктуаций вблизи последней. Подробные физические представления по этому поводу были неоднократно изложены в различных работах /14-19/. Здесь же мы сосредоточим наше внимание на математических аспектах метода ренормгруппы.

Варьируя константы связи

$$\delta G = G - G^* \quad /9.26/$$

и линеаризуя рекуррентные соотношения /9.24/

$$G_n(G) = G_n(G^*) + \frac{\partial G_n(G^*)}{\partial G} \delta G, \quad /9.27/$$

можно получить приближенное выражение для термодинамического потенциала /9.21/, который вблизи критической точки имеет вид

$$f_n \approx f_n(G^*) + \delta f_n \quad (G \rightarrow G^*),$$

/9.28/

$$\delta f_n = -\frac{1}{N} \frac{\partial H\{0; G_n(G^*)\}}{\partial G_n(G^*)} \frac{\partial G_n(G^*)}{\partial G} \delta G.$$

Дифференцируя /9.28/, можно определить критическое поведение термодинамических величин.

При приближении температуры  $\theta$  к критической точке  $\theta_c$  удобно ввести относительное температурное отклонение

$$\tau \equiv (\theta - \theta_c) / \theta_c. \quad /9.29/$$

Термодинамические функции вблизи  $\theta_c$  принято характеризовать критическими индексами /13,169/, определяемыми как степенные показатели в следующих выражениях для теплоемкости:

$$C_V \sim \begin{cases} (-\tau)^{-\alpha'} & , \quad \theta < \theta_c \\ \tau^{-\alpha} & , \quad \theta > \theta_c \end{cases}, \quad /9.30/$$

намагниченности:

$$m \sim \begin{cases} (-\tau)^{\beta'} & , \quad \theta < \theta_c \\ \tau^{\beta} & , \quad \theta > \theta_c \end{cases}, \quad /9.31/$$

восприимчивости:

$$\chi \sim \begin{cases} (-\tau)^{-\gamma'} & , \quad \theta < \theta_c \\ \tau^{-\gamma} & , \quad \theta > \theta_c \end{cases}, \quad /9.32/$$

связи магнитного поля с намагниченностью:

$$B \sim m^{\delta}, \quad \theta = \theta_c, \quad /9.33/$$

корреляционной длины:

$$\xi \sim \begin{cases} (-\tau)^{-\nu'} & , \quad \theta < \theta_c \\ \tau^{-\nu} & , \quad \theta > \theta_c \end{cases}, \quad /9.34/$$

и для корреляционной функции:

$$K_{ij} \sim z_{ij}^{-(d-2+\eta)}, \quad \theta = \theta_c, \quad /9.35/$$

где  $d$  - размерность пространства.

Из асимптотик /9.30/-/9.35/ очевидно, что изменение масштаба аргумента ведет к соответствующему изменению масштаба функций, например, заменяя  $\tau$  на  $\lambda\tau$ , для теплоемкости получим

$$C_B - C_B \begin{cases} \lambda^{-\alpha'} & , \theta < \theta_c \\ \lambda^{-\alpha} & , \theta > \theta_c \end{cases} (\tau - \lambda\tau).$$

Аналогично и для других термодинамических величин, являющихся в критической области однородными функциями своих аргументов. Указанная однородность носит название скейлинга. Кроме того, обычно считают, что выполняются следующие скейлинговые соотношения:

$$\alpha = \alpha', \quad \beta = \beta', \quad \gamma = \gamma', \quad \nu = \nu', \quad /9.36/$$

а также

$$\begin{aligned} \alpha + 2\beta + \gamma &= 2, & \alpha + \beta(\delta + 1) &= 2, \\ \gamma &= \beta(\delta - 1), & \gamma &= (2 - \delta)\nu, & \alpha + \nu d &= 2. \end{aligned} \quad /9.37/$$

В этих пяти соотношениях четыре независимых. Следовательно, из шести критических индексов  $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu, \zeta$  только два независимы. Остальные могут быть выражены через них.

Критический индекс, относящийся к некоторой термодинамической величине  $y(G)$ , может быть также найден, если известен закон преобразования этой величины при ренормгрупповой процедуре. Например, если

$$\frac{y_n(G)}{y(G)} \approx \left[ \frac{\partial G_n(G^*)}{\partial G^*} \right]^{-\psi} (G \rightarrow G^*),$$

то

$$\psi = \ln \frac{y(G^*)}{y_n(G^*)} / \ln \frac{\partial G_n(G^*)}{\partial G^*}. \quad /9.38/$$

При изучении критических явлений часто апеллируют к гипотезе универсальности, согласно которой численные значения критических индексов не зависят от конкретных свойств систем, принадлежащих к одному классу универсальности. Иногда такое приближенное совпадение соответствующих критических индексов для разных веществ действительно имеет место. Однако во многих случаях вещества, описываемые моделями одного и того же класса универсальности, демонстрируют на опыте довольно различное критическое поведение /170/. Существуют и точно решаемые модели, в которых критические индексы непрерывно меняются в достаточно широком интервале значений в зависимости от вида межузельного взаимодействия /171/.

Отметим еще одну серьезную проблему, связанную с преобразованиями ренормгруппы - это то, что нет никакой гарантии относительно существования фиксированных точек. Простое приближение к преобразованию мо-

жет ошибочно давать фиксированную точку, когда ее нет в точном преобразовании /172/.

В отличие от статистической ренормгруппы полевая ренормгруппа обычно формулируется с помощью дифференциальных уравнений. Другим важным отличием служит то, что она является полной группой, а не подгруппой, как статистическая ренормгруппа. Дифференциальные или функциональные групповые уравнения можно сформулировать, исходя, например, из уравнений движения для функций Грина или корреляционных функций. Однако, если вдуматься, то можно заметить, что функциональная итерация любого нелинейного уравнения дает последовательность соотношений, аналогичных рекуррентным. А множество рекуррентных преобразований очень часто оказывается эквивалентным ренормгруппе. При итерации уравнений движения неподвижную точку, обладающую свойством устойчивости, называют аттрактором /173/.

Сейчас мы схематически поясним, как на основании рекуррентных соотношений для констант связи можно получить дифференциальное уравнение полевой ренормгруппы. Предположим, что справедливы рекуррентные соотношения типа /9.24/. От дискретного индекса  $0, 1, 2, \dots$  перейдем к непрерывной переменной  $x(n)$ , такой, что

$$x(0) = 1, \quad x(\infty) = \tilde{x} < \infty.$$

Подставляя функцию  $n(x)$ , обратную к  $x(n)$  в  $G_n(G)$ , будем иметь

$$\bar{G}(x, G) \equiv G_{n(x)}(G).$$

Так как, согласно /9.22/,  $G_0(G) = G$ , то

$$\bar{G}(1, G) = G. \quad /9.39/$$

Пусть функция  $x(n)$  такая, что рекуррентное соотношение /9.24/ удастся записать в форме функционального уравнения

$$\bar{G}(\lambda x, G) = \bar{G}(x, \bar{G}(\lambda, G)). \quad /9.40/$$

Уравнение /9.40/ имеет место в квантовой теории поля для инвариантных зарядов; оно также справедливо для широкого класса других физических систем, обладающих свойством функциональной автомодельности /174/.

Если уравнение /9.40/ неверно в строгом смысле, то несложно заметить, что оно всегда справедливо как асимптотическое равенство при  $\lambda \rightarrow 1$  и всех  $x$  или при  $x \rightarrow 1$  и всех  $\lambda$ .

Дифференцируя /9.40/ по  $x$  и переходя к пределам  $x \rightarrow 1, \lambda \rightarrow x$ , получаем

$$\frac{\partial \bar{G}(x, G)}{\partial \ln x} = \beta(\bar{G}(x, G)). \quad /9.41/$$

где

$$\beta(G) = \left[ \frac{\partial \bar{G}(x, G)}{\partial x} \right]_{x=1} \quad /9.42/$$

представляет собой функцию Гелл-Манна-Лоу /168/. Уравнение /9.41/ и является искомым дифференциальным уравнением полевой ренормгруппы. Его интегрирование дает

$$\int_G^{\bar{G}} \frac{dG}{\beta(G)} = \ln x \quad /9.43/$$

Неподвижные точки определяются, аналогично /9.25/, равенством

$$\bar{G}(x, G^*) = G^*, \quad /9.44/$$

откуда, в соответствии с /9.42/, следует, что функция Гелл-Манна-Лоу в неподвижной точке обращается в ноль:

$$\beta(G^*) = 0. \quad /9.45/$$

При непосредственной реализации ренормгруппового подхода можно работать как в импульсном, так и в прямом координатном пространстве. В последнем случае метод выглядит более прозрачным /175/. Поэтому ниже мы проиллюстрируем его на примере решеточной системы в реальном пространстве.

Пусть имеется решетка из  $N$  узлов с расстоянием "а" между ближайшими узлами. Под  $G_i$  / $i=1, 2, \dots, N$ / в формуле /9.1/ будем иметь в виду некоторую переменную, связанную с  $i$ -м узлом. Постепенное отсуммирование части переменных при вычислении статсуммы, как это описано в начале данной лекции, означает, что мы последовательно переходим от решетки с расстоянием между ближайшими соседями, равным "а", к укрупненной решетке с межузельным расстоянием "п а". Подобный переход на физическом жаргоне называется децимационной процедурой. Происхождение слова децимация связано с наказанием легионов в Древнем Риме, проявивших трусость в бою. Тогда под децимацией понималось умерщвление каждого десятого легионера. В нашем случае децимация - это отсуммирование части переменных. Связанное с этим укрупнение решетки изображено на рис. 37. Следует также вспомнить, что децимационная процедура для решеточных систем имела своей предшественницей практически идентичную ей итерационную трансформацию декорированных решеток /176/.

Рассмотрим снова нашу любимую модель Изинга с гамильтонианом

$$H = \frac{N}{2} U - \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_0 \sigma_i^z \sigma_j^z, \quad /9.46/$$

в который мы включили обыкновенно выбрасываемое постоянное слагаемое  $\frac{N}{2} U$ , чтобы посмотреть, как оно преобразуется в результате действия ренормгрупповых операций. Введем безразмерные величины

$$\omega \equiv \frac{U}{2\theta}, \quad g \equiv \frac{J_0}{2\theta}. \quad /9.47/$$

В случае одномерной цепочки собственные значения гамильтониана /9.46/ имеют вид

$$E = \sum_{i=1}^N E_{ii+1},$$

где наложены периодические граничные условия /см. лекцию 8/, причем

$$E_{ij} = \theta (\omega - g \sigma_i \sigma_j) \quad (\sigma_i = \pm 1).$$

Статистическая сумма представима в форме

$$\mathcal{Z} = \sum_G \exp(-H\{G\}) \quad (G \equiv \{\sigma_i\}), \quad /9.48/$$

в которой

$$H\{G\} = \sum_{i=1}^N (\omega - g \sigma_i \sigma_{i+1}) = \sum_{i=1}^N H_{ii+1} \quad /9.49/$$

Следуя /9.4/, разобьем набор переменных  $G$  на два поднабора  $G_1$  и  $G'_1$ , так что  $G_1$  содержит все нечетные, а  $G'_1$  все четные спины:

$$G_1 = \{\sigma_{2i-1}\}, \quad G'_1 = \{\sigma_{2i}\} \quad (i=1, 2, \dots, N/2).$$

Определим  $H'_{13}$  с помощью соотношения

$$\exp(-H'_{13}) = \sum_{G_2} \exp(-H_{12} - H_{23}).$$

Используя равенство

$$\exp(-H_{ij}) = e^{-\omega} \text{ch } g (1 + \sigma_i \sigma_j \text{th } g),$$

находим

$$H'_{13} = \omega_2 - g_2(g) \sigma_1 \sigma_3,$$

где ренормированные константы  $\omega_2$  и  $g_2$  определяются в результате суммирования

$$\sum_{G_2} \exp(-H_{12} - H_{23}) = 2(e^{-\omega} \text{ch } g)^2 (1 + \sigma_1 \sigma_3 \text{th}^2 g)$$

и представления

$$\exp(-H'_{13}) = e^{-\omega_2} \text{ch } g_2(g) [1 + \sigma_1 \sigma_3 \text{th } g_2(g)],$$

что дает

$$\omega_2 = 2\omega - \ln 2 - 2 \ln \operatorname{ch} g + \ln \operatorname{ch} g_2(g), \quad /9.50/$$

$$g_2(g) = \operatorname{arctg} h (th^2 g).$$

В качестве ренормированного гамильтониана, задаваемого формулой /9.6/ и отвечающего цепочке с удвоенным периодом, получаем

$$H_1 \{S_1\} = H'_{13} + H'_{35} + H'_{57} + H'_{79} + \dots + H'_{N1} = \sum_{i=1}^{N/2} [\omega_2 - g_2(g) \sigma_{2i-1} \sigma_{2i+1}]. \quad /9.51/$$

Преобразование гамильтониана при укрупнении решетки называют преобразованием Каданова. Рекуррентные соотношения /9.50/ переписываются значительно проще, если использовать обозначения

$$u = e^{-\omega} \operatorname{ch} g, \quad t = th g, \quad /9.52/$$

а также

$$u_n(u) = e^{-\omega_n} \operatorname{ch} g_n(g), \quad t_n(t) = th g_n(g). \quad /9.53/$$

Тогда /9.50/ эквивалентно

$$u_2(u) = 2u^2, \quad t_2(t) = t^2.$$

Продолжая следовать схеме /9.6/-/9.8/, перейдем к решетке с расстоянием между ближайшими соседями, равным  $4a$ . Тогда ренормировка гамильтониана /9.51/ дает

$$H_2 \{S_2\} = H''_{15} + H''_{59} + \dots,$$

где  $H''_{ij}$  имеют ту же структуру, что и  $H_{ij}$  и  $H'_ij$ , но с ренормированными константами  $\omega_4$  и  $g_4(g)$ , удовлетворяющими рекуррентным соотношениям

$$u_4(u) = 2u_2^2(u) = 2^3 u^4, \\ t_4(t) = t_2^2(t) = t^4.$$

Еще раз удваивая период, так что межузельное расстояние становится равным  $8a$ , получаем трижды ренормированный гамильтониан

$$H_3 \{S_3\} = H'''_{19} + \dots,$$

константы которого связаны рекуррентными соотношениями

$$u_8(u) = 2^7 u^8, \quad t_8(t) = t^8.$$

Прелесть одномерной цепочки Изинга состоит в том, что она позволяет вывести рекуррентные соотношения для констант гамильтониана в случае

произвольного  $n$ -го шага перенормировочной процедуры:

$$u_n(u) = 2^{n-1} u^n, \quad t_n(t) = t^n, \quad /9.54/$$

или, что идентично,

$$\omega_n = n\omega - (n-1) \ln 2 - n \ln \operatorname{ch} g + \ln \operatorname{ch} g_n(g), \quad /9.55/ \\ g_n(g) = \operatorname{arctg} h (th^n g).$$

Статистическая сумма /9.8/ содержит  $2(N/2^n)$  слагаемых, а  $n$  раз ренормированный гамильтониан /9.9/ представим рядом

$$H_n \{S_n\} = H^{(n)}_{12^{n+1}} + H^{(n)}_{2^{n+1} 2^{n+1}} + \dots \quad /9.56/$$

из  $N/2^n$  членов, имеющих вид

$$H^{(n)}_{ij} = \omega_{2^n} - g_{2^n}(g) \sigma_i \sigma_j \quad /9.57/$$

Обрывая перенормировочную процедуру на  $n$ -м шаге, получаем в соответствии с /9.21/ приближенное выражение для функции Массье:

$$f_n = -\omega_{2^n} / 2^n \quad (2^n \leq N). \quad /9.58/$$

Максимально возможный шаг перенормировки  $n$  таков, что  $2^n = N$ . Учитывая, что  $N \gg 1$ , имеем

$$f \approx -\omega + \ln(2 \operatorname{ch} g) - \frac{1}{N} \ln \operatorname{ch} g_N(g). \quad /9.59/$$

Рекуррентное соотношение для  $g_N(g)$  при  $N \rightarrow \infty$ , вследствие асимптотики

$$th^N(g) \approx \begin{cases} 0, & g < \infty \\ 1 - 2Ne^{-2g}, & g \rightarrow \infty \end{cases}$$

и тождества

$$\operatorname{arctg} h g = \frac{1}{2} \ln \frac{1+g}{1-g},$$

принимает форму

$$g_N(g) \approx \begin{cases} 0, & g < \infty \\ g, & g \rightarrow \infty \end{cases} \quad (N \rightarrow \infty). \quad /9.60/$$

А так как при этом

$$\frac{1}{N} \ln \operatorname{ch} g_N(g) \approx \begin{cases} 0, & g < \infty \\ \frac{g}{N}, & g \rightarrow \infty \end{cases}$$

то мы убеждаемся, что /9.59/ при любых конечных  $g$  с точностью до постоянного слагаемого  $\omega$  совпадает с функцией Массье, полученной в лекции 8 с помощью метода трансфер-матрицы.

Отыщем теперь неподвижные точки преобразований /9.54/, /9.55/. Эти точки, в соответствии с /9.25/, определяются уравнениями

$$t_n(t^*) = t^*, \quad u_n(u^*) = u^*, \quad /9.61/$$

или

$$g_n(g^*) = g^*, \quad \omega_n(\omega^*, g^*) = \omega^*. \quad /9.62/$$

Подставляя в /9.61/ явный вид /9.54/, имеем

$$t^* = (t^*)^n, \quad u^* = 2^{n-1} (u^*)^n,$$

откуда

$$t^* = 0; 1, \quad u^* = 0. \quad /9.63/$$

Следовательно, неподвижными точками для преобразований /9.55/ служат

$$g^* = 0; \infty, \quad \omega^* = \infty. \quad /9.64/$$

Решение  $g^* = 0$  относится к тривиальной высокотемпературной фиксированной точке. Принимая во внимание обозначение /9.47/, видим, что единственная температурная неподвижная точка, удовлетворяющая /9.64/, совпадает с критической точкой одномерной модели Изинга:

$$\theta^* = \theta_c = 0. \quad /9.65/$$

Остановимся на преобразовании корреляционной длины при увеличении межузельного расстояния в  $n$  раз:

$$\xi_n(t) = \xi(t) / n. \quad /9.66/$$

Кроме того, положим, что вблизи нетривиальной неподвижной точки справедливо скейлинговое соотношение

$$\xi(t) \sim (\delta t)^{-\nu} \quad (t - t^* = 1). \quad /9.67/$$

Тогда

$$\frac{\xi_n(t)}{\xi(t)} = \left[ \frac{\partial t_n(t^*)}{\partial t^*} \right]^{-\nu} (t - t^*).$$

А так как, согласно /9.54/,

$$\frac{\partial t_n(t^*)}{\partial t^*} = n (t^*)^{n-1} = n \quad (t^* = 1),$$

то критический индекс корреляционной длины, вычисляемый аналогично /9.38/, равен

$$\nu = \ln n / \ln n = 1. \quad /9.68/$$

Неподвижная точка  $t^* = 1$  отвечает  $\theta^* = 0$ , поэтому

$$\delta t = t - t^* = t h g - 1 \simeq e^{-2g}.$$

Откуда следует, что при  $\theta \rightarrow 0$  корреляционная длина экспоненциально расходится,

$$\xi \sim e^{2g} \quad (g \rightarrow \infty),$$

что согласуется с результатом лекции 8. На основании рекуррентного соотношения /9.66/ можно было бы написать /177/ и дифференциальное уравнение типа /9.41/.

Разобранный пример одномерной модели Изинга с ближайшими соседями позволяет построить группу ренормировочных преобразований, сохраняющих форму гамильтониана. Однако подобная ситуация является приятным исключением. Обычно же преобразование Каданова портит структуру гамильтониана. В качестве примера рассмотрим трансформацию двумерной решетки, изображенную на рис. 38. Отсуммировав по ближайшим соседям, показанным кружками, придем к ренормированному гамильтониану

$$H_1\{\beta, \beta'\} = \frac{N}{2} \omega_2 - g_2 \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - g_2' \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \sigma_i \sigma_j - g_2'' \sum_{[ijkl]} \sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l,$$

в котором

$$\omega_2 = 2\omega - \ln 2 - \frac{1}{8} (\ln \operatorname{ch} 4g + 4 \ln \operatorname{ch} 2g),$$

$$g_2 = \frac{1}{4} \ln \operatorname{ch} 4g,$$

$$g_2' = \frac{1}{2} g_2, \quad g_2'' = \frac{1}{8} (\ln \operatorname{ch} 4g - 4 \ln \operatorname{ch} 2g),$$

сумма с индексом  $\langle\langle ij \rangle\rangle$  означает суммирование по соседям, следующим за ближайшими, а сумма с  $[ijkl]$  - суммирование по так называемым плакетам, т.е. по узлам, образующим квадрат, не содержащий других узлов внутри себя. Как видим, в гамильтониане появились новые слагаемые с новыми константами связи. Поскольку в подавляющем большинстве практически интересных случаев нет возможности построить точные рекуррентные соотношения, сохраняющие форму гамильтониана, приходится прибегать ко всевозможным приближениям /14-17, 172, 178/, обсуждать которые у нас

здесь нет возможности, почему мы и ограничиваемся цитированием нескольких обзорных работ, где можно найти подробные ссылки.

*Мир стал таким неустойчивым, что любая мелочь имеет теперь огромное значение.*

Ч.П.Сноу, "Наставники".

### Лекция 10. ФЛУКТУАЦИИ И НЕУСТОЙЧИВОСТЬ

С макроскопической точки зрения фазовый переход происходит в системе тогда, когда это ей термодинамически выгодно. Какой же микроскопический механизм провоцирует систему изменить свое фазовое состояние? Этим механизмом является возникновение какой-либо неустойчивости, связанной с усилением флуктуаций. Ниже мы приведем конкретные примеры такой неустойчивости.

Посмотрим, как сильные гомофазные флуктуации могут разрушить упорядоченное состояние. Возьмем изотропную модель Гейзенберга /см. лекцию 3/ в нулевом внешнем поле со спином  $S = 1/2$ . Радиус взаимодействия считаем конечным. В приближении случайных фаз /см. лекцию 7/ средний спин определяется уравнением

$$\langle S_i^z \rangle = \frac{1}{2} - \langle S_i^z \rangle \frac{2}{N} \sum_q n_q. \quad /10.1/$$

в котором функция распределения магновов

$$n_q = \frac{\langle S_q^- S_q^+ \rangle}{2 \langle S_i^z \rangle} = (e^{\epsilon_q / \theta} - 1)^{-1}$$

выражается через магнный спектр  $\epsilon_q$ . Понятно, что величина

$$\nu_m = \frac{1}{N} \sum_q n_q \quad /10.2/$$

имеет смысл концентрации магновов, то есть числа магновов на один узел. Переписав /10.1/ в форме

$$2 \langle S_i^z \rangle = (1 + 2\nu_m)^{-1}, \quad /10.3/$$

видим, что намагниченность насыщения достигается только при нулевой температуре, когда число магновов равно нулю:

$$\langle S_i^z \rangle = \frac{1}{2}, \quad \nu_m = 0 \quad (\theta = 0).$$

Что же происходит при конечной температуре? Перейдем к термодинамическому пределу в  $d$ -мерном пространстве. Тогда

$$\frac{1}{N} \sum_q n_q = \frac{2^{d-1} \pi}{(2\pi)^d \rho} \int_0^\infty n_q q^{d-1} dq; \quad /10.4/$$

здесь  $\rho \equiv N/V$  - средняя плотность системы. В отсутствие магнитного поля магнный спектр бесцелевой,

$$\epsilon_q \rightarrow 0 \quad (q \rightarrow 0),$$

поэтому из /10.2/ и /10.4/ следует, что для любого  $\theta > 0$

$$\nu_m \gg \frac{2^{d-1} \pi \theta}{(2\pi)^d \rho} \int_0^{\theta} \frac{q^{d-1}}{\epsilon_q} dq.$$

Длинноволновая асимптотика магнного спектра имеет вид

$$\epsilon_q \approx \langle S_i^z \rangle \gamma a^2 q^2 \quad (q \rightarrow 0),$$

откуда

$$\nu_m \gg \frac{2^{d-1} \pi \theta}{(2\pi)^d \rho \gamma a^2 \langle S_i^z \rangle} \int_0^{\theta} q^{d-3} dq. \quad /10.5/$$

Беря в /10.5/ интеграл

$$\int_0^{\theta} q^{d-3} dq = \begin{cases} \infty, & d \leq 2 \\ \frac{\theta^{d-2}}{d-2}, & d > 2 \end{cases},$$

убеждаемся, что плотность магновов становится бесконечной в следующих случаях:

$$\nu_m = \infty \quad \begin{cases} \theta \neq 0, & d \leq 2 \\ \theta = \theta_c, & d > 2 \end{cases}. \quad /10.6/$$

А из /10.3/ очевидно, что при бесконечной концентрации магновов упорядоченное состояние невозможно:

$$\langle S_i^z \rangle = 0 \quad (\nu_m = \infty).$$

Таким образом, в системах с низкой размерностью  $d \leq 2$  магнные флуктуации разрушают дальний порядок при всех конечных температурах, а в

системах с размерностью  $d \geq 3$  упорядоченное состояние существует до критической температуры  $\theta_c$ , где оно разрушается в результате бесконечного увеличения плотности магнов. Размерность пространства, ниже которой упорядоченное состояние не может существовать при конечной температуре, называется нижней критической размерностью  $d_c$ . В случае изотропной модели Гейзенберга  $d_c = 3$ .

В качестве другого примера, рассмотрим идеальный бозе-газ из частиц со спином  $S$  /см. лекцию 2/. Дальний порядок в такой системе связан с наличием бозе-конденсата, состоящего из частиц с нулевой энергией. Плотность конденсата

$$\rho_0 = \rho - \rho_n, \quad /10.7/$$

где  $\rho_n$  - плотность нормальной фракции,

$$\rho_n = \frac{2^{d-1} \pi (2S+1)}{(2\pi)^d} \int_0^\infty n_k k^{d-1} dk, \quad /10.8/$$

константа Планка  $\hbar \equiv 1$ ,

$$n_k = (e^{\omega_k/\theta} - 1)^{-1}, \quad \omega_k = \frac{k^2}{2m} - \mu.$$

Сравнивая /10.7/ с /10.1/, замечаем, что  $\rho_n$  соответствует плотности надконденсатных флуктуаций, играя роль, аналогичную плотности магнанных флуктуаций /10.2/. Для того чтобы распределение частиц по импульсам

$n_k$  было неотрицательно, необходимо, чтобы  $\omega_k \geq 0$ . значит,  $\mu \leq 0$ . Плотность /10.8/ является неубывающей функцией химического потенциала, так как

$$\frac{\partial \rho_n}{\partial \mu} = \frac{2^{d-1} \pi (2S+1)}{(2\pi)^d \theta} \int_0^\infty n_k^2 e^{\omega_k/\theta} k^{d-1} dk \geq 0.$$

Следовательно, максимальное значение  $\rho_n$  достигается при  $\mu = 0$ .

$$\text{Sup}_\mu \rho_n = \frac{2^{d-1} \pi (2S+1)}{(2\pi)^d} \int_0^\infty \frac{k^{d-1} dk}{\exp(k^2/2m\theta) - 1}.$$

Поэтому

$$\rho_n \leq \frac{2^{3d/2} (2S+1) (m\theta)^{d/2}}{4\pi^{d-1}} \Gamma\left(\frac{d}{2}\right) \zeta\left(\frac{d}{2}\right), \quad /10.9/$$

где  $\Gamma(\cdot)$  - гамма-функция, а  $\zeta(\cdot)$  - дзета-функция Римана. Из /10.9/ ясно, что плотность надконденсатных возбуждений убывает при уменьшении температуры,

$$\rho_n = 0 \quad (\theta \rightarrow 0).$$

Точка бозе-конденсации определяется равенствами

$$\rho = \rho_n, \quad \theta = \theta_c, \quad \mu = 0, \quad /10.10/$$

которые дают

$$\theta_c = \frac{\pi^2}{2m} \left[ \frac{4\rho}{\pi (2S+1) \Gamma(d/2) \zeta(d/2)} \right]^{2/d}. \quad /10.11/$$

Дзета-функция обладает свойством

$$\zeta(d/2) = \infty \quad (d \leq 2),$$

из которого следует, что бозе-конденсация в системе размерности меньше трех невозможна ни при какой конечной температуре:

$$\theta_c = 0 \quad (d \leq 2), \\ \theta_c > 0 \quad (d > 2).$$

Понятно, что нижняя критическая размерность для бозе-газа  $d_c = 3$ . Итак, для  $d \neq 2$  появление бозе-конденсата, а следовательно, и нарушение градиентной симметрии /21/, невозможно ни при какой температуре  $\theta > 0$ .

Аналогичным образом удается показать, что не существует одномерных и двумерных кристаллов с бесконечно дальним порядком /100/. То есть для системы частиц с конечным радиусом взаимодействия нижней критической размерностью относительно перехода в кристаллическое состояние служит  $d_c = 3$ . Подобные рассуждения справедливы и для сверхтекучих систем /100/, для которых также  $d_c = 3$ .

Рассмотренный тип неустойчивости, связанный с тем, что размерность системы недостаточна для стабилизации флуктуаций, естественно назвать размерной неустойчивостью. Можно ли все-таки стабилизировать такие системы так, чтобы в них существовал дальний порядок при отличной от нуля температуре. Разберем имеющиеся для этого возможности.

1/ С формальной точки зрения, считая размерность  $d$  непрерывной, достаточно увеличить размерность системы на величину  $\varepsilon = d_c - d - 1$ , и тогда размерная неустойчивость при

$$d = d_c - 1 + \varepsilon \quad (\varepsilon > 0)$$

будет устранена. Но, конечно, это довольно искусственный прием, хотя с математической точки зрения он эквивалентен некоторым другим, более физичным, которые будут обсуждены ниже.

2/ Система, состоящая из одномерных или двумерных подсистем, будет стабилизирована, если между ее подсистемами существует хотя бы сла-

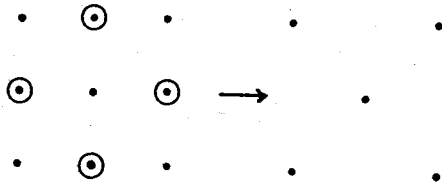


Рис. 38. Децимационная процедура для двумерной решетки.

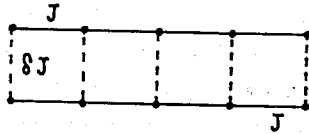


Рис. 39. Квазиодномерная система спиновых цепочек.

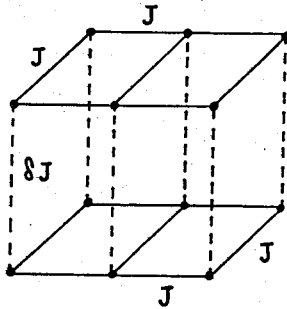


Рис. 40. Квазидвумерная система плоскостей.

бая связь. Представим себе для примера совокупность спиновых цепочек /одномерных систем Гейзенберга/, внутри каждой из которых между ближайшими соседями имеется сильная связь  $J$ , а между соседними узлами различных цепочек слабое взаимодействие  $\delta J$ .

$$\delta \equiv \delta J / J \ll 1. \quad /10.12/$$

Такая квазиодномерная система изображена на рис. 39. Несложно представить себе и квазидвумерную систему, состоящую из плоскостей с сильным взаимодействием между узлами одной и той же плоскости и слабой связью между узлами соседних плоскостей, как это показано на рис. 40, где опять сильная связь  $J$  изображена сплошной, а слабая  $\delta J$  - пунктирной линией. Имеется довольно много примеров квазиодномерных и квазидвумерных систем. Так, к последним относятся диалкогениды переходных металлов и слоистый антиферромагнетик  $Rb_2 Mn F_4$ .

Оценим критическую температуру для случая слабосвязанных слоев гейзенберговского ферромагнетика как точку, в которой плотность магнов  $\nu_m$  стремится к бесконечности, так что произведение  $\nu_m \sigma$ , где

$$\sigma \equiv \frac{1}{S} |\langle \bar{S} \rangle|, \quad \bar{S} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{S}_i,$$

остается конечным. Ограниченность  $\nu_m \sigma$  вытекает из /10.1/, откуда

$$\nu_m \sigma = |S - \langle \bar{S} \rangle| / S.$$

Подставляя в /10.4/ длинноволновый магнный спектр

$$\epsilon_q \approx J a^2 \sigma (q_x^2 + q_y^2 + q_z^2 \delta) \quad (q \rightarrow 0),$$

в котором  $\delta$  задается равенством /10.12/, находим

$$\theta_c \sim J / (-\ln \delta) \quad (\delta \ll 1). \quad /10.13/$$

Очевидно, при  $\delta \rightarrow 0$  возвращаемся к чисто двумерной ситуации, когда  $\theta_c \rightarrow 0$ .

3/ Фазовый переход в упорядоченное состояние при  $\theta_c > 0$  возможен и в двумерной системе, если она анизотропна. Вспомним, ведь такой переход имеется в двумерной модели Изинга, являющейся анизотропным пределом модели Гейзенберга. Гамильтониан анизотропной модели Гейзенберга можно представить /179/ в форме

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} [(1-\alpha) \bar{S}_i \bar{S}_j + \alpha S_i^z S_j^z], \quad /10.14/$$



где  $\alpha$  имеет смысл константы анизотропии. В изотропном случае  $\alpha = 0$ , и мы приходим к изотропной модели Гейзенберга. А в предельно анизотропной ситуации  $\alpha = 1$ , и мы имеем модель Изинга. Меняя  $\alpha$  от 0 до 1 можно изучать кроссовер между упомянутыми моделями. Спектр спиновых волн для модели /10.14/ имеет вид

$$\epsilon_q = J - (1 - \alpha) J(\varphi), \quad J \equiv J(0).$$

Оценивая снова критическую точку как температуру, при которой  $\chi_m \propto S$ , получаем в случае слабой анизотропии для  $d=2$

$$\theta_c \sim J / (-\ln \alpha) \quad (\alpha \ll 1). \quad /10.15/$$

Естественно, при  $\alpha = 0$  критическая температура стремится к нулю.

Заметим, что в анизотропных магнетиках фазовый переход возможен и при наложении внешнего магнитного поля /180/.

4/ Дальний порядок и в одномерной, и в двумерной системе становится осуществимым при ненулевой температуре, если потенциал взаимодействия содержит наряду с короткодействующим еще и дальнедействующее слагаемое:

$$J_{ij} = J_{ij}^s + J_{ij}^l; \quad /10.16/$$

каждое из этих слагаемых обладает по определению либо конечным, либо бесконечным радиусом действия. Пусть, например,  $J_{ij}^s$  описывает взаимодействие лишь  $Z$  ближайших соседей с интенсивностью

$$J_{ij}^s = \frac{J_s}{Z}, \quad J_s \equiv \frac{1}{N} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}^s. \quad /10.17/$$

Для дальнедействующего слагаемого, как известно /99/, в термодинамическом пределе справедлива подстановка

$$J_{ij}^l = \frac{J_l}{N}, \quad J_l \equiv \frac{1}{N} \sum_{ij} J_{ij}^l. \quad /10.18/$$

В зависимости от того, что мы имеем в виду, изотропную модель Гейзенберга или модель Изинга, в гамильтониане под знаком суммы стоит либо  $\vec{S}_i \vec{S}_j$ , либо  $S_i^z S_j^z$ . Объединим эти две ситуации с помощью обозначения

$$S_{ij} \equiv \{ \vec{S}_i \vec{S}_j, S_i^z S_j^z \}.$$

Введем константу дальнего действия

$$\lambda = \frac{J_l}{J_s} \quad (J = \frac{1}{N} \sum_{ij} J_{ij} = J_s + J_l). \quad /10.19/$$

Тогда гамильтониан

$$H = -J \left( \sum_{\langle ij \rangle} \frac{1-\lambda}{Z} S_{ij} + \sum_{ij} \frac{\lambda}{N} S_{ij} \right) \quad /10.20/$$

соответствует при  $\lambda = 0$  близкоедействующей, а при  $\lambda = 1$  дальнедействующей модели. Последняя асимптотически точно, при  $N \rightarrow \infty$ , описывается приближением среднего поля, в котором фазовый переход при  $\theta_c > 0$  существует для любой размерности  $d$ . Этими обстоятельствами и обеспечивается стабилизация упорядоченной фазы систем с низкой ( $d < d_c$ ) размерностью при введении дальнедействующего слагаемого.

Подчеркнем, что в перечисленных выше случаях устранение размерной неустойчивости за счет введения константы слабой связи  $J$ , или константы анизотропии  $\alpha$ , или константы дальнего действия  $\lambda$  математически эквивалентно эффективному увеличению размерности пространства, то есть введению константы  $\epsilon$ .

5/ Упорядоченное состояние в одномерной или двумерной системе может существовать, если эта система конечна. Оценки показывают /100/, что, например, в одномерной цепочке спинов, где, как мы выяснили, бесконечно дальний порядок отсутствует, имеется порядок для конечного числа узлов  $N \sim 10^4$ . Подобное упорядочение в двумерной модели Гейзенберга возможно /100/ для  $N \sim 10^{80}$ . Двумерный кристалл может состоять /181/ из  $N \sim 10^{42}$  частиц. Известно, что существуют сверхтекучие пленки, а также двумерные и одномерные сверхпроводники /141,182/ конечных размеров. Различные ограниченные системы низкой размерности детально исследовались с помощью машинных экспериментов /181,183/, в которых было надежно установлено наличие фазовых переходов /несколько размытых/ между упорядоченной и разупорядоченной фазами. Уравнения состояния двумерных систем, найденные на основе метода молекулярной динамики и метода Монте-Карло /181,183/, аналогичны соответствующим эмпирическим уравнениям для трехмерных веществ /184,185/.

Обычно, говоря о фазовом переходе, имеют в виду появление или исчезновение бесконечно дальнего порядка, связанного с глобальной симметрией. Однако существуют фазовые переходы, не сопровождающиеся спонтанным нарушением глобальной симметрии. При этом понятие фазового перехода не теряет своего смысла, поскольку имеется качественное изменение свойств системы в точке перехода. Например, коррелятор  $C(r) = \langle \vec{S}(r) \vec{S}(0) \rangle$  /в неупорядоченном состоянии/ на больших расстояниях ведет себя по закону

$$C(\tau) \sim \exp(-\tau/\xi) \quad (\tau \rightarrow \infty); \quad /10.21/$$

если в системе появляется бесконечно дальний порядок, то

$$C(\tau) \sim \text{const} > 0 \quad (\tau \rightarrow \infty); \quad /10.22/$$

но возможна ситуация, когда

$$C(\tau) \sim \tau^{-(d-2+\epsilon)} \quad (\tau \rightarrow \infty). \quad /10.23/$$

В последнем случае бесконечно дальний порядок отсутствует, но очевидно, что имеется качественное различие между экспоненциальным законом затухания коррелятора /10.21/ и степенным /10.23/. Степенное убывание коррелятора соответствует так называемому квазидальному порядку /186/. Подобное явление имеет место для некоторых двумерных моделей: ХУ-модель, гелиевые пленки, жидкие кристаллы, твердотельные монослои /186,187/. Фазовый переход, связанный с изменением закона /10.23/ на /10.21/, отвечает появлению и лавинообразному размножению линейных и вихревых дефектов типа дислокаций и дисклинаций в кристаллической решетке, или вихревых нитей в сверхтекучих жидкостях и сверхпроводниках /186,188/. Фазовые переходы без нарушения глобальной симметрии известны и в моделях квантовой теории поля на решетке /189,190/. Например, в абелевой калибровочной теории на решетке с включением хиггсовских полей возможен фазовый переход первого рода /191/, сопровождающийся скачком среднего  $\langle \psi \rangle$ , в котором  $\psi$  - хиггсовское поле, тогда как  $\langle \psi \rangle \neq 0$ .

Линейные и вихревые дефекты в двумерных и трехмерных структурах, а также эквивалентные вихрям центры проскальзывания фазы в сверхпроводящих каналах /192/ представляют собой зародыши разупорядоченной фазы в упорядоченной. Обычные точечные дефекты, вроде межузельных атомов или вакансий /193,194/, взятые по отдельности, конечно такими зародышами не являются; однако если они скапливаются в большом количестве в некоторой компактной макроскопической области, то подобная область разупорядочения тоже соответствует зародышу неупорядоченной фазы.

Кроме изменения типа дальнего порядка фазовый переход может отвечать также изменению характера ближнего порядка, описываемого поведением коррелятора  $\langle \vec{S}(\vec{r}) \vec{S}(0) \rangle$  или  $\langle \rho^*(\vec{r}) \rho(0) \rangle$ , где  $\rho(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) \psi(\vec{r})$ , на близких расстояниях, включающих ближайших соседей и несколько следующих за ними координационных сфер. Например, при переходе кристалл-жидкость ближний порядок практически не меняется /195,196/, тогда как при переходе жидкость-газ он меняется существенно. И в жидкости,

и в газе дальний порядок отсутствует. Но в жидкости имеется ближний порядок, проявляющийся в осцилляции коррелятора  $\langle \rho(\vec{r}) \rho(0) \rangle$  на расстояниях порядка нескольких атомных /196/. В случае газа подобные осцилляции практически пропадают - поэтому говорят, что ближнего порядка в газе нет.

При всяком фазовом переходе наряду с усилением гомогенных флуктуаций возрастает и становится определяющей роль гетерофазных флуктуаций. Возникновение и развитие гетерофазных зародышей описывается кинетическими уравнениями. Переход из метастабильного состояния в устойчивое происходит в результате интенсивного образования зародышей конкурирующей фазы /197/. Этот процесс называется метастабильной нуклеацией. Напомним, что в метастабильном состоянии система остается устойчивой - ее теплоемкость  $C_V$  и обратная сжимаемость  $B_\theta$  положительны:

$$C_V = \left( \frac{\partial E}{\partial \theta} \right)_V = -\theta \left( \frac{\partial^2 F}{\partial \theta^2} \right)_V \geq 0, \quad /10.24/$$

$$B_\theta = -V \left( \frac{\partial P}{\partial V} \right)_\theta = V \left( \frac{\partial^2 F}{\partial V^2} \right)_\theta \geq 0,$$

а переход обусловлен термодинамической выгодностью стабильного состояния. Граница устойчивости, соответствующая равенству  $B_\theta = 0$ , называется спинополью. Процесс перехода вещества от спинополья к стабильному состоянию называют спинопольным распадом /198/. Резкой качественной разницы между метастабильной нуклеацией и спинопольным распадом нет /199/. И то, и другое - это неравновесный необратимый процесс перехода от одного состояния к другому. Если такой переход осуществляется достаточно медленно, то есть соответствующее ему время релаксации  $\tau_r$  гораздо больше времени установления локального равновесия  $\tau_l$ , то можно использовать приближение локального равновесия /200/. Время  $\tau_l$  для конденсированных сред можно оценить несколькими способами. Например,  $\tau_l \sim a/V_s$ , где  $a$  - среднее межатомное расстояние,  $V_s$  - скорость звука; или  $\tau_l \sim \hbar/\theta_D$ , где  $\theta_D$  - дебаевская энергия; или  $\tau_l \sim \hbar/G_0$ , где  $\hbar$  - динамическая вязкость,  $G_0$  - модуль сдвига; для электронов в металле  $\tau_l \sim \lambda/v_F$ , где  $\lambda$  - длина свободного пробега,  $v_F$  - скорость Ферми; для спиновой системы  $\tau_l \sim \hbar/\theta_c$ , где  $\theta_c = \kappa_B T_c$ ,  $T_c$  - температура Кюри. Все эти оценки для большинства веществ дают величины, лежащие в интервале

$$\tau_l \sim 10^{-14} \div 10^{-13} \text{ с}. \quad /10.25/$$

Существует огромное количество метастабильных состояний с временем жизни, гораздо большим, чем /10.25/. Так, для переохлажденной воды  $\tau_z \sim 10 - 100$  с /197/. Может оказаться, что метастабильная свободная энергия в локально-равновесном приближении - комплексная функция /199/.

Тогда мнимая часть от  $\bar{F}$  определяет время жизни метастабильного состояния

$$\tau_z \sim \hbar / \text{Im} \bar{F}.$$

Кроме рассмотренной выше необратимой нуклеации может существовать и обратимая нуклеация осцилляторного типа, напоминающая реакцию Белоусова-Жаботинского /201/, когда флуктуационным образом возникают зародыши конкурирующей фазы, живут, размножаются, а после конечного времени вымирают, так что вещество не переходит в новое, но возвращается в прежнее состояние; потом процесс повторяется. Усредняя по времени характеристики таких систем, последние можно представить как смеси разных фаз, то есть как гетерофазные системы.

Если чистая система оказывается метастабильной, то начало ее перехода в смешанное состояние должно, очевидно, инициироваться наличием неустойчивости относительно образования зародышей иной фазы. Как же математически сформулировать условие этой неустойчивости? Можно поступить следующим образом: найти условие устойчивости гетерофазной системы - тогда найденное условие и будет условием неустойчивости чистого состояния.

Прежде всего подчеркнем, что описание гетерофазной системы принципиально отличается от описания сосуществующих чистых фаз. Поясним это, рассматривая потенциал Гиббса

$$G = G(\theta, p, N) = N\mu,$$

в котором  $p$  - давление, а химический потенциал

$$\mu = \mu(\theta, p) = \left( \frac{\partial G}{\partial N} \right)_{\theta, p}$$

Когда сосуществуют две чистые фазы с потенциалами Гиббса

$$G' = G'(\theta, p, N) = N\mu'(\theta, p),$$

$$G'' = G''(\theta, p, N) = N\mu''(\theta, p),$$

то условие сосуществования /49/ имеет вид

$$G'(\theta, p, N) = G''(\theta, p, N),$$

что эквивалентно

$$\mu'(\theta, p) = \mu''(\theta, p).$$

Из последнего равенства следует, что сосуществование чистых фаз допустимо только вдоль линии

$$\theta_z = \theta_z(p),$$

определяющей температуру перехода из одного чистого состояния в другое. Иными словами, чистые фазы могут сосуществовать не на всем множестве термодинамических параметров /в данном примере  $\{\theta, p, N\}$ /, но лишь на его подмножестве /здесь  $\{p\}$ /, задаваемом условиями равновесия. Это утверждение передает смысл правила фаз Гиббса /49/.

Смешанное же состояние может существовать на всем множестве параметров. Потенциал Гиббса гетерофазной смеси определяется /49/ суммой

$$\tilde{G} = G_1(\theta, p, N_1) + G_2(\theta, p, N_2), \quad /10.26/$$

в которой  $N_1$  и  $N_2$  - числа частиц первой и второй фазы;

$$G_s(\theta, p, N_s) = N_s \mu_s \quad (s = 1, 2), \quad /10.27/$$

$\mu_s$  - химический потенциал  $s$ -й фазы,

$$\mu_s = \left( \frac{\partial \tilde{G}}{\partial N_s} \right)_{\theta, p}. \quad /10.28/$$

Концентрация частиц каждой из фаз

$$W_s = \frac{N_s}{N} \quad (N = N_1 + N_2), \quad /10.29/$$

очевидно, обладает вероятностными свойствами

$$0 \leq W_s \leq 1, \quad W_1 + W_2 = 1, \quad /10.30/$$

поэтому /10.29/ можно назвать фазовой вероятностью /109, 110/.

Условие равновесия гетерофазной системы при фиксированных температуре и давлении

$$\delta \tilde{G} = 0 \quad (\theta = \text{const}, p = \text{const}) \quad /10.31/$$

дает

$$\left( \frac{\partial \tilde{G}}{\partial N_1} \right)_{\theta, p} \delta N_1 + \left( \frac{\partial \tilde{G}}{\partial N_2} \right)_{\theta, p} \delta N_2 = 0. \quad /10.32/$$

Отсюда, учитывая /10.28/, имеем

$$\mu_1 \delta N_1 + \mu_2 \delta N_2 = 0. \quad /10.33/$$

Полагая, что полное число частиц в системе сохраняется, следовательно,

$$\delta N_1 = -\delta N_2 \quad (N = \text{const}), \quad /10.34/$$

убеждаемся, что химические потенциалы  $\mu_1$  и  $\mu_2$  должны совпадать. Для развернутой записи их равенства удобно ввести обозначение

$$W \equiv W_1, \quad W_2 \equiv 1 - W. \quad /10.35/$$

Тогда

$$\mu_3 = \mu_3(\theta, \rho, w). \quad /10.36/$$

Приравнивая химические потенциалы согласно /10.33/ и /10.34/, мы тем самым получаем уравнение

$$\mu_1(\theta, \rho, w) = \mu_2(\theta, \rho, w), \quad /10.37/$$

решение которого задает фазовую вероятность

$$W = W(\theta, \rho). \quad /10.38/$$

Подчеркнем, что равенство /10.37/, вообще говоря, имеет смысл при всех  $\theta$  и  $\rho$ . Конечно, может случиться так, что уравнение /10.37/ не имеет решений /10.38/, совместных со свойствами вероятности /10.30/. Последнее означало бы, что гетерофазное состояние в системе невозможно, и она обязана находиться в одном из чистых состояний, в том, которое термодинамически выгоднее.

Таким образом, условие экстремальности /10.31/ для потенциала Гиббса гетерофазной системы

$$\tilde{G} = \tilde{G}(\theta, \rho, N, w) \quad /10.39/$$

приводит к уравнению /10.37/. Легко заметить, что из равенств /10.32/, /10.34/ вытекает уравнение

$$\left( \frac{\partial \tilde{G}}{\partial w} \right)_{\theta, \rho, N} = 0, \quad /10.40/$$

эквивалентное /10.37/. Устойчивость системы определяется минимальностью потенциала Гиббса, то есть положительностью второй вариации

$$\delta^2 \tilde{G} \geq 0 \quad (\theta, \rho, N = const). \quad /10.41/$$

Отсюда сразу же находим условие гетерофазной устойчивости

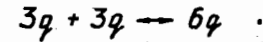
$$\left( \frac{\partial^2 \tilde{G}}{\partial w^2} \right)_{\theta, \rho, N} \geq 0. \quad /10.42/$$

Одновременно /10.42/ есть условие нуклеационной неустойчивости чистой фазы. Равенство в /10.42/ определяет точку нуклеации, где чистая фаза переходит в смешанную.

Если проварьировать потенциал /10.39/ по температуре и давлению, то получим условия термической и механической устойчивости, тождественные /10.24/.

Остановимся еще на одном типе неустойчивости - реакенной неустойчивости, когда система становится лабильной относительно развития химических реакций, или взаимопревращений частиц. По сути дела, этот вид лабильности является разновидностью гетерофазной неустойчивости.

Рассмотрим для примера реакцию слияния трехкварковых мешков в шестикварковый



Трехкварковый мешок, который может быть либо жестким, либо деформируемым /202/, как известно, служит моделью бариона. Шестикварковый мешок для краткости будем иногда называть сикстоном. Имеется большое число экспериментальных данных, свидетельствующих о том, что в атомных ядрах могут существовать подобные многокварковые системы /149-152/. В квантовой хромодинамике материя представляется в виде кварк-глюонной плазмы /203/. Образование связанных состояний, вроде адронов и сикстонов, можно интерпретировать как конденсацию кварков, аналогично возникновению капель жидкости из газа. Поэтому адронные и сикстонные состояния можно представить как разные фазы кварковой материи.

Обозначим число трехкварковых и шестикварковых мешков через  $N_{3q}$  и  $N_{6q}$  соответственно. Полное число кварков, образующих мешки, равно

$$N = 3N_{3q} + 6N_{6q}. \quad /10.43/$$

Определим вероятность барионной фазы

$$w = 3N_{3q} / N. \quad /10.44/$$

Потенциал Гиббса гетерофазной барион-сикстонной смеси записывается так же, как и в равенствах /10.26/, /10.27/:

$$\tilde{G} = \mu_{3q} N_{3q} + \mu_{6q} N_{6q},$$

где  $\mu_{3q}$  и  $\mu_{6q}$  - химические потенциалы барионов и сикстонов. Условие равновесия /10.31/ дает /10.33/, куда надо подставить вытекающее из /10.43/ соотношение

$$\delta N_{3q} + 2\delta N_{6q} = 0 \quad (N = const).$$

В результате получаем уравнение

$$2\mu_{3q}(\theta, \rho, w) = \mu_{6q}(\theta, \rho, w), \quad /10.45/$$

из которого можно найти вероятность барионной фазы как функцию температуры и давления. Условие устойчивости такой реагирующей смеси совпадает с /10.42/.

Анализируя в этой лекции различные типы неустойчивостей, мы ограничились достаточно простыми примерами. Ситуация становится существенно богаче, если рассматривать системы, состоящие из нескольких подсистем с сильной взаимной связью. Взаимодействие подсистем, как правило, усиливает роль флуктуаций и приводит к фазовому переходу первого рода. Именно так обстоит дело, например, в диполь-фононных сегнетоэлектрических системах /204/, полупроводниках с переменной валентностью /205/, слоистых и пайерлсовских квазиодномерных металлах с волнами зарядовой плотности /206/, в ядерном веществе с псионным полем /129-131, 207-210/.

"Начни с начала, - важно ответил Король, - и продолжай, пока не дойдешь до конца. Как дойдешь - кончай!".

Льюис Керролл. "Алиса в стране чудес".

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Авторы настоящих лекций ставили главной целью изложение принципиальных основ теории фазовых переходов и критических явлений. Поэтому целый ряд интересных результатов и методов остался за пределами настоящего рассмотрения. То же относится и к модельным задачам теории фазовых переходов, обзор которых мог бы составить обширную монографию.

Нам еще раз хочется подчеркнуть общность проблемы фазовых переходов и универсальность подхода, основанного на рассмотрении спонтанных нарушений симметрии в рамках концепции квазисредних Н.Н.Боголюбова.

Многие вопросы, затронутые в лекциях, нуждаются в дальнейшей детальной разработке. Прежде всего, это относится к проблеме перехода от динамического к равновесному описанию /усреднение по времени наблюдения за системой, гипотеза о перемешивании и ряд других вопросов/.

Предложенный в <sup>109/</sup> подход к микроскопическому описанию гетерофазных состояний позволяет не только объяснить целый ряд экспериментальных результатов, плохо вписывавшихся в стандартные теории переходов между чистыми фазами, но и предсказать новые особенности в поведении систем, в частности, явление нуклеации. Систематическое изучение термодинамики гетерофазных состояний в различных физических системах должно стать одной из первоочередных задач эксперимента.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Греков А.А. и др. Кристаллография, 1970, 15, 500.
2. Glass A.M., von der Linde D., Negran T.J. Appl.Phys.Lett., 1974, 25, 233.
3. Фридкин В.М. Фотосегнетоэлектрики. М. "Наука", 1979.
4. Мотт Н.Ф. Переходы металл-изолятор. М. "Мир", 1979.
5. Бугаев А.А., Захарченя Б.П., Чудновский Ф.А. Фазовый переход металл-полупроводник и его применение. Л. "Наука", 1979.
6. Касаткин А.П. Кристаллография, 1966, 11, 328.

7. Van den Berg C.B., Van Delden I.E., Bouman I. Phys.stat.sol., 1969, B36, K89.
8. Tanabe K. Nucl.Phys., 1982, A390, 385.
9. Goodman A.L. Nucl.Phys., 1983, A402, 189.
10. Rafelski J. Perspectives in high energy nuclear collisions. NBSIR 83-2725, Washington, 1983.
11. Haken H. Handbuch der Physik XXV, 2C, Springer-Verlag, Berlin, 1970.
12. Хакен Г. Синергетика, М. "Мир", 1980.
13. Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления. М. "Мир", 1973.
14. Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. М. "Наука", 1975.
15. Квантовая теория поля и физика фазовых переходов. М. "Мир", 1975.
16. Вилсон К., Когут Дж. Ренормализационная группа и  $\epsilon$ -разложение. М. "Мир", 1975.
17. Ма Ш.К. Современная теория критических явлений. М. "Мир", 1980.
18. Синай Я.Г. Теория фазовых переходов. М. "Наука", 1980.
19. Шумовский А.С., Юкалов В.И. В сб.: ХУ Международная школа по физике высоких энергий. ОИЯИ, Д2,4-83-179, Дубна, 1983, с.223.
20. Bogolubov N.N. Physica, 1960, 26S, 1.
21. Боголюбов Н.Н. ОИЯИ, Д-781, Дубна, 1961.
22. Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма. М. "Наука", 1975.
23. Вонсовский С.В. Магнетизм. М. "Наука", 1971.
24. Endo K., Ooiwa K., Shinogi A., Data M., Hiramoto K. J.Magn.Magn. Mat., 1983, 31-34, 35.
25. Suzuki H., Narada J. J.Magn.Magn.Mat., 1983, 31-34, 69.
26. Боголюбов Н.Н., Толмачев В.В., Ширков Д.В. Новый метод в теории сверхпроводимости. М. Изд. АН СССР, 1958.
27. Шриффер Дж. Теория сверхпроводимости. М. "Наука", 1970.
28. Staudenmann J.-L. Sol.State Comm., 1978, 26, 461.
29. Линтон Э. Сверхпроводимость. М. "Мир", 1971.
30. Блиниц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. М. "Мир", 1975.
31. Аксенов В.Л., Плакида Н.М., Стаменкович С. Рассеяние нейтронов сегнетоэлектриками. М. "Энергоатомиздат", 1984.
32. Brookman J., Rigamonti A. Phys.Rev., 1980, B24, 4925.
33. Adler D., Brocks H. Phys.Rev., 1967, 155, 826.
34. Mattis D.C., Langer W.D. Phys.Rev.Lett., 1970, 25, 376.
35. Hubbard J. Proc. Roy.Soc., 1963, A276, 238.
36. Anderson P.W. Phys.Rev., 1961, 124, 41.
37. Frauendorf S. Lect. Not. New-Orlean, USA, 1983.
38. Боголюбов Н.Н. ДАН СССР, 1958, 119, 52.
39. Соловьев В.Г. Теория сложных ядер. М. "Наука", 1970.

40. Bohr A., Mottelson B. Perspectives in study of nuclei with high angular momentum. Nordita preprint, 1977.
41. Janssen D., May F.R., Mikhailov I.N., Nazmitdinov R.G. Phys.Lett., 1978, B73, 271.
42. Балдин А.М. и др. ЯФ, 1975, 21, 1008.
43. Савин И.А. В сб.: Труды У1 Международного семинара по избранным проблемам физики высоких энергий. ОИЯИ, Д1,2-81-728, Дубна, 1981.
44. Балдин А.М., Панебратцев Ю.А., Ставинский В.С. Препринт ОИЯИ P1-84-185, Дубна, 1984.
45. Балдин А.М. Краткие сообщения по физике, ФИАН, М., 1971, 18, 465.
46. Baldin A.M. in: "Progress in particle and nuclear physics". 1980, v. 4, p. 95.
47. Балдин А.М., Назмитдинов Р.Г., Чижов А.В., Шумовский А.С., Юкалов В.И. ДАН СССР, 1984, 279, 602.
48. Bogolubov N.N. Jr., Fam Le Kien, Shumovsky A.S. Physica, 1984, 128A, 82.
49. Кубо Р. Термодинамика. М. "Мир", 1970.
50. Керзон Хуанг. Статистическая механика. М. "Мир", 1966.
51. Фейнман Р. Статистическая механика. М. "Мир", 1978.
52. Zimm B., Doty P., Iso K. Proc.Nat.Acad.Sci. USA, 1959, 45, 160.
53. Исихара А. Статистическая физика. М., "Мир", 1973.
54. Kogut J.V., Susskind L. Phys.Rev., 1975, D11, 395.
55. Kogut J.V. Rev.Mod.Phys., 1979, 51, 659.
56. Прикладной комбинаторный анализ. М., "Мир", 1968.
57. Эмх Ж. Алгебраические методы в статистической механике и квантовой теории поля. М., "Мир", 1976.
58. Боголюбов Н.Н., Хацет Б.И. ДАН СССР, 1949, 66, 321.
59. Van Hove L. Physica. 1949, 15, 951.
60. Gallavotti G., Miracle-Sole S., Robinson D.W. Comm.Math. Phys., 1968, 10, 311.
61. Bogolubov N.N. Jr. Physica, 1969, 41, 601.
62. Минлос Р.А. УМН, 1968, 1, 133.
63. Рюэль Д. Статистическая механика. М., "Мир", 1971.
64. Yang C.N., Lee T.D. Phys.Rev., 1952, 87, 404; 410.
65. Беллман Р. Введение в теорию матриц. М., "Мир", 1969.
66. Харрис Т. Теория ветвящихся случайных процессов. М., "Мир", 1966.
67. Golden S. Phys.Rev. 1965, B137, 1127.
68. Thompson C. J.Math.Phys., 1965, 6, 1812.
69. Натансон М.П. Теория функций вещественной переменной. М., 1974.
70. Фишер М. Природа критического состояния. М., "Мир", 1968.
71. Рудин У. Функциональный анализ. М., "Мир", 1975.
72. Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. Т. 1. М., "Мир", 1977.

73. Шумовский А.С. В сб.: Международный симпозиум по избранным проблемам статистической механики. ОИЯИ, Д17-11490, Дубна, 1978.
74. Griffiths R. J.Math.Phys., 1967, 8, 478.
75. O'Shea M.J., Sellmyer D.J. J.Appl.Phys., 1982, 53, 7722.
76. O'Shea M.J., Cornelison S.G., Chen Z.D., Sellmyer D.J. Sol.State Comm., 1983, 46, 313.
77. Aharony A., Pytte E. Phys.Rev.Lett., 1980, 45, 1583.
78. Боголюбов Н.Н. /мл./, Шумовская А.Г., Шумовский А.С. ТМФ, 1976, 29, 388.
79. Боголюбов Н.Н. Лекции по квантовой статистике. Избр. труды, т. 2, Киев, "Наукова думка", 1970.
80. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. М., "Мир", 1979.
81. de Jongh L.J., Miedema A.R. Adv.Phys., 1974, 23; 1.
82. Pagels D. Phys.Rev., 1975, D11, 1213.
83. Baxter R.G. Ann.Phys., (NY), 1972, 70, 193.
84. Baxter R.G. J.Stat.Phys., 1982, 28, 1.
85. Baxter R.G. J.Phys., 1973, C6, L445.
86. Тахтаджян Л.А., Фаддеев Л.Д. УМН, 1979, 34, 13.
87. Тахтаджян Л.А., Фаддеев Л.Д. Записки научных семинаров.ЛОМИ, 1981, 109, 134.
88. Pease R.S., Bacon G.E. Proc. Roy.Soc., 1953, A220, 397; 1955, A236, 359.
89. Аллен Л., Эберли Дж. Оптический резонанс и двухуровневые атомы. М., "Мир", 1978.
90. Давыдов А.С. Квантовая механика. М., "Наука", 1973.
91. Dicke R.H. Phys.Rev., 1954, 93, 99.
92. Bogolubov N.N. Jr., Plechko V.N. Physica, 1976, 82A, 163.
93. Боголюбов Н.Н. /мл./, Фам Ле Киен, Шумовский А.С. ТМФ, 1982, 52, 423.
94. Боголюбов Н.Н. /мл./, Плечко В.Н., Шумовский А.С. ЭЧАЯ, 1988, 14, 1443.
95. Боголюбов Н.Н. Изв. АН СССР, сер.физ., 1947, 11, 77.
96. Frölich H. Phys.Rev., 1950, 79, 845.
97. Brankov J.G., Tonchev N.S. Physica, 1976, 84A, 371; 534.
98. Боголюбов Н.Н. Избр. Труды, т. 3, Киев, "Наукова думка", 1971.
99. Боголюбов Н.Н. Метод исследования модельных гамильтонианов. М., "Наука", 1974.
100. Боголюбов Н.Н., Садовников Б.И. Некоторые вопросы статистической механики. М., "Высшая школа", 1975.
101. Боголюбов Н.Н. Сообщение ОИЯИ P-511, Дубна, 1960.
102. Боголюбов Н.Н. ЖЭТФ, 1958, 34, 73.
103. Боголюбов Н.Н. ДАН СССР, 1958, 119, 1; 52.
104. Соловьев В.Г. Теория ядра. М., "Энергоиздат", 1981.

105. Lipkin H.J. et al. Nucl.Phys., 1965, 62, 188.
106. Бонч-Бруевич В.Л., Тябликов С.В. Метод функций Грина в статистической механике. М., Физматгиз, 1961.
107. Ter Haar D. Lectures on Selected Topics in Statistical Mechanics. Oxford, Pergamon Press, 1977.
108. Yukalov V.I. Physica, 1982, 110A, 247.
109. Юкалов В.И. ТМФ, 1976, 26, 403.
110. Юкалов В.И. ТМФ, 1976, 28, 92.
111. Shumovsky A.S., Yukalov V.I. Physica, 1982, 110A, 518.
112. Боголюбов Н.Н. /мл./, ТМФ, 1970, 5, 1.
113. Bogolubov N.N. Jr., J.Math.Phys., 1973, 14, 26.
114. Боголюбов Н.Н. /мл./, Шумовский А.С. Труды МИАН СССР, 136, 351, 1975.
115. Маттук Р.Д. Фейнмановские диаграммы в проблеме многих тел. М., "Мир", 1969.
116. Thirring W., Wehrl A. Comm.Math.Phys., 1967, 4, 303.
117. Haag R. Nuovo Cimento, 1962, 25, 287.
118. Мигдал А.Б. Фермионы и бозоны в сильных полях. М., "Наука", 1978.
119. Meyer-Ter-Vehn J. Phys.Rep., 1981, 74, 323.
120. Дюгаев А.М. ЯФ, 1983, 38, 1131.
121. Bertlmann R.A., Bell J.S. Nucl.Phys., 1983, B227, 435.
122. Вакс В.Г., Ларкин А.И. ЖЭТФ, 1965, 49, 975.
123. Linde A.D. Rep.Prog.Phys., 1979, 42, 389.
124. Irvine J.M. Rep.Prog.Phys., 1975, 38, 1385.
125. Canuto V., Datta B. Nucl.Phys., 1979, A328, 320.
126. Montvay I., Zimanyi J. Nucl.Phys., 1979, A316, 490.
127. Zimanyi J., Fai G., Jakobsson B. Phys.Rev.Lett., 1979, 43, 1705.
128. Voskresensky D.N. Preprint NBI-83-22, Copenhagen, 1983.
129. Воскресенский Д.Н., Мишустин И.Н. Письма ЖЭТФ, 1978, 28, 486.
130. Necking P. Nucl.Phys., 1980, A348, 493.
131. Бунатян Г.Г., Мишустин И.Н. ЯФ, 1982, 36, 1121.
132. Анисимов Н.Ю., Воскресенский Д.Н. ЯФ, 1979, 30, 1181.
133. Воскресенский Д.Н., Анисимов Н.Ю. ЖЭТФ, 1980, 78, 28.
134. Гинзбург В.Л. Письма в ЖЭТФ, 1979, 30, 345.
135. Боголюбов Н.Н. Избранные труды, т. 3, "Наукова думка", Киев, 1971.
136. Юкалов В.И. ТМФ, 1978, 37, 390.
137. Ahlers G. Rev.Mod.Phys., 1980, 52, 489.
138. Yukalov V.I. Physica, 1980, A100, 431.
139. Yukalov V.I. Phys.Lett., 1981, 83A, 26.
140. Yukalov V.I. Physica, 1981, 107B, 233.
141. Шевченко С.И. ФНТ, 1983, 9, 1013.

142. Yukalov V.I. Preprint Oxf. Univ., DTP 21-81, Oxford, 1981.
143. Serene J., Rainer D. Phys.Rep., 1983, 101, 221.
144. Henley E.M., Kisslinger L.S., Miller G.A. Phys.Rev., 1983, C28, 1277.
145. Горенштейн М.И., Липских С.И. ЯФ, 1983, 38, 1262.
146. Kapusta J.I., Olive K.A. Nucl.Phys., 1983, A408, 478.
147. Балдин А.М. и др. ЯФ, 1973, 18, 79.
148. Балдин А.М. и др. ЯФ, 1974, 20, 1201.
149. Музафаров В.М., Троицкий В.Е., Трубников С.В. ЭЧАЯ, 1983, 14, 1112.
150. Кобушкин А.П. ЯФ, 1978, 28, 495.
151. Лукьянов В.К., Титов А.И. XV Международная школа молодых ученых по физике высоких энергий, ОИЯИ, Д2,4-83-179, Дубна, 1983, с.456.
152. Кобушкин А.П., Шелест В.П. ЭЧАЯ, 1983, 14, 1146.
153. Walecka J.D. Ann.Phys., 1974, 83, 491.
154. Theis J. et al. Phys. Rev., 1983, D28, 2286.
155. Barranco M., Buchler J. Phys.Rev., 1980, C22, 1729.
156. Lamb D.Q., Lattimer J.M., Phethick C.J., Ravenhall D.G. Nucl. Phys., 1981, A360, 459.
157. Friedman B., Pandharipande V. Nucl.Phys., 1981, A361, 502.
158. Barranco M., Buchler J. Phys.Rev., 1981, C24, 1191.
159. Schulz H., Münchow L., Röpke G., Schmidt M. Phys.Lett., 1982, 119B, 12.
160. Schulz H., Voskresensky D., Bondorf J. Phys.Lett., 1983, 133B, 141.
161. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Статистическая физика, М., "Наука", 1978.
162. Takada T., Watanabe T. J.Low Temp.Phys., 1982, 49, 435.
163. Браут Р. Фазовые переходы. М., "Мир", 1967.
164. Vosko S.H., Perdew J.P. Can.J.Phys., 1975, 53, 1385.
165. Смоленский Г.А., Чупис И.Е. УФН, 1982, 137, 415.
166. Смоляков Б.П., Хаймович Е.П. УФН, 1982, 136, 317.
167. Малеев С.В. ЖЭТФ, 1983, 84, 260.
168. Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В. Введение в теорию квантованных полей. М., "Наука", 1973.
169. Kumar A., Krishnamurthy N., Gopal E. Phys.Rep., 1983, 98, 57.
170. Александров К.С., Федосеева Н.В., Спевакова И.П. Магнитные фазовые переходы в галлоидных кристаллах. Новосибирск, "Наука", 1983.
171. Joyce G.S. Phys.Rev., 1966, 146, 349.
172. Вильсон К.Д. УФН, 1983, 141, 193.
173. Фейгенбаум М. УФН, 1983, 141, 343.
174. Ширков Д.В. ДАН СССР, 1982, 263, 64.
175. Hu B. Phys.Rep., 1982, 91, 233.

176. Fisher M.E. Phys.Rev., 1959, 113, 969.
177. Shirkov D.V. JINR, E2-83-790, Dubna, 1983.
178. Юхновский И.Р. ТМФ, 1978, 36, 373.
179. Stinchcombe R.V. Phase Trans.Crit.Phen., 1983, 7, 151.
180. Камиллов И.К., Алиев Х.К. УФН, 1983, 140, 639.
181. Abraham F.F. Phys.Rep., 1981, 80, 339.
182. Soda T. Prog.Theor.Phys., 1983, 69, 1060.
183. Методы Монте-Карло в статистической физике, М., "Мир", 1982.
184. Godwal B., Sikka S., Chidambaram R. Phys.Rep., 1983, 102, 121.
185. Бушман А.В., Фортвов В.Е. УФН, 1983, 140, 177.
186. Nelson D.R. Phase Trans.Crit. Phen., 1983, 7, 1.
187. Kleinert H. Phys.Lett., 1983, 95A, 381.
188. Kleinert H. Phys.Lett., 1982, 89A, 294.
189. Kogut J.V. Rev.Mod.Phys., 1983, 55, 775.
190. Droffe J.M., Zuber J.V. Phys.Rep., 1983, 102, 1.
191. Gerdt V.P., Ilchev A.S., Mitrjushkin V.K. JINR, E2-83-758, Dubna, 1983.
192. Ивлев Б.И., Копнин Н.Б. УФН, 1984, 142, 435.
193. Kanert O. Phys.Rep., 1982, 91, 133.
194. Klinger M.I. Phys.Rep., 1983, 94, 183.
195. Feijoo L., Rahman A. J. Chem.Phys., 1982, 77, 5687.
196. Enderby J.E. Cont. Phys., 1983, 24, 561.
197. Скрипов В.П., Коверда В.П. Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей. М., "Наука", 1984.
198. Abraham F.F. Phys.Rep., 1979, 53, 93.
199. Unger C., Klein W. Phys.Rev., 1984, B29, 2698.
200. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. М., "Наука", 1971.
201. Tyson J.J. Lect.Notes Biomath. - The Belousov-Zhabotinskii Reaction, Springer-Verlag, Berlin, 1976.
202. Oi H., Saito K. Prog.Theor.Phys., 1983, 69, 1467.
203. Halzen F. Cont.Phys., 1983, 24, 591.
204. Banerjee S., Nath D., Chaudhuri B. Phys.Rev., 1981, B24, 6469.
205. Kuttly A.P. J.Phys.Chem.Sol., 1984, 45, 121.
206. Уайт Р., Джебелл Т. Дальний порядок в твердых телах. М., "Мир", 1982.
207. Дюгаев А.М. ЖЭТФ, 1982, 83, 1005.
208. Бунатян Г.Г. ЯФ, 1983, 37, 558.
209. Бунатян Г.Г. ЯФ, 1983, 38, 601.
210. Бунатян Г.Г. ЯФ, 1984, 39, 572.

Рукопись поступила в издательский отдел  
17 сентября 1985 года.

Шумовский А.С., Юкалов В.И.  
Фазовые состояния и переходы

P17-85-676

В лекциях изложены основные положения и методы теории фазовых переходов и критических явлений. Подчеркивается общность проблемы фазовых переходов в различных областях физики и универсальность применяемых методов и моделей. Центральное место занимают вопросы вырождения вакуума в макроскопических системах и концепция квазисредних Н.Н.Боголюбова, имеющая фундаментальное значение в теории фазовых переходов. Последовательно прослеженная взаимосвязь фазового перехода и спонтанного нарушения симметрии позволяет с единой точки зрения описывать переходы как первого, так и второго рода.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод авторов

Shumovsky A.S., Yukalov V.I.  
Phase States and Transitions

P17-85-676

The main ideas and methods of the theory of phase transitions are presented in these Lectures. A common character of phase-transition problems in different fields of physics as well as the universality of methods and models used are emphasized. A central place is occupied by the questions of vacuum degeneration in macroscopic systems and by the Bogolubov concept of quasiaverages having a fundamental value in the theory of phase transitions. A consistently analysed interconnection between a phase transition and spontaneous symmetry breaking lets to treat from a unique point of view phase transitions of first as well as of second order.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985