К другим результатам приводит квадратичная стрикция[1]). Этот эффект тоже подавляет флуктуации, но в более слабой степени. Если без учета стрикции в точке перехода теплоемкость обращалась бы в бесконечность (см. § 148), то квадратичная стрикция приводит вместо этого к появлению небольшого скачка энтропии, т. е. фазовый переход становится переходом первого рода, близким к второму; теплоемкость остается при этом конечной, хотя и достигает аномально больших значений[2]).

Задача

Определить корреляционный радиус флуктуаций параметра порядка во внешнем поле h при $T=T_c$.

Решение. Равновесное значение $\bar{\eta}$ дается выражением (144,9), а плотность термодинамического потенциала:

$$\Omega=\Omega_0+b\eta^4+g\left(\frac{\partial\eta}{\partial\mathbf{r}}\right)^2-h\eta=\bar{\Omega}+\frac{3b^{1/3}h^{2/3}}{2^{1/3}}(\eta-\bar{\eta})^2+g\left(\frac{\partial\eta}{\partial\mathbf{r}}\right)^2.$$

Для корреляционной функции получается прежний результат (146,11) с корреляционным радиусом

$$r_c=\frac{2^{1/6}g^{1/2}}{3^{1/2}b^{1/6}h^{1/3}}.$$

§ 147. Эффективный гамильтониан

Прежде чем перейти к описанию свойств фазового перехода вне области применимости теории Ландау (т. е. в непосредственной окрестности точки перехода), покажем, каким образом могла бы быть поставлена статистическая задача об исследовании этих свойств[3]).

Согласно (35,3) термодинамический потенциал Ω определяется статистической суммой

$$\Omega=-T\ln\sum_N e^{\mu N/T}\int e^{-E_N(p,\,q)/T}\,d\Gamma_N, \qquad (147,1)$$

где интегрирование производится по всему фазовому пространству системы N частиц. Если же распространить интегрирование лишь по той части фазового пространства, которая отвечает некоторому заданному распределению параметра порядка $\eta(\mathbf{r})$,

[1]) Этот случай имеет место, в частности, для переходов из пара- в ферромагнитное состояние, где параметром порядка является вектор намагниченности кристалла. Линейная зависимость деформации от намагниченности исключается требованием симметрии относительно обращения времени (оставляющего неизменным деформацию, но меняющего знак магнитного момента).

[2]) См. *А. И. Ларкин, С. А. Пикин*, ЖЭТФ **56**, 1664 (1969).

[3]) Этот способ постановки задачи о фазовом переходе второго рода был высказан *Л. Д. Ландау* (1958).

то определяемый формулой (147,1) функционал $\Omega[\eta(\mathbf{r})]$ можно рассматривать как потенциал, отвечающий этому распределению. Непрерывное распределение $\eta(\mathbf{r})$ удобно при этом заменить дискретным набором комплексных переменных $\eta_{\mathbf{k}} = \eta'_{\mathbf{k}} + i\eta''_{\mathbf{k}}$ — компонент фурье-разложения (146,7). Тогда определение $\Omega[\eta]$ запишется в виде

$$\Omega[\eta(\mathbf{r})] = -T \ln \sum_N e^{\mu N/T} \int \exp\left(-\frac{E_N(p, q)}{T}\right) \times$$
$$\times \prod_{\mathbf{k}} \delta(\eta'_{\mathbf{k}} - \eta'_{\mathbf{k}}(p, q; N))\, \delta(\eta''_{\mathbf{k}} - \eta''_{\mathbf{k}}(p, q; N)) \cdot d\Gamma_N, \qquad (147,2)$$

где $\eta_{\mathbf{k}}(p, q; N)$ — величины $\eta_{\mathbf{k}}$ как функции точки p, q фазового пространства. Очевидно, что при таком определении

$$\Omega = -T \ln \int \exp\left(-\frac{\Omega[\eta]}{T}\right) \prod_{\mathbf{k}} d\eta'_{\mathbf{k}} d\eta''_{\mathbf{k}}. \qquad (147,3$$

В предыдущем параграфе было показано, что аномальному возрастанию вблизи точки перехода подвержены только флуктуации с малыми волновыми векторами $\mathbf{k}$; именно этими флуктуациями определяется, следовательно, характер особенности термодинамических функций. В то же время такие количественные характеристики вещества, как сама температура перехода T_c, определяются в основном атомными взаимодействиями в веществе на близких расстояниях, чему отвечают коротковолновые компоненты $\eta_{\mathbf{k}}$. Это физически очевидное обстоятельство проявляется в статистическом интеграле тем, что большим значениям $\mathbf{k}$ отвечает большой фазовый объем.

Пусть k_0 (параметр обрезания) — некоторое значение k, малое по сравнению с характерным обратным атомным размером. Длинноволновая часть распределения $\eta(\mathbf{r})$ дается суммой

$$\tilde{\eta}(\mathbf{r}) = \sum_{k < k_0} \eta_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \qquad (147,4)$$

а термодинамический потенциал $\Omega[\tilde{\eta}]$, отвечающий этому распределению, дается формулой (147,2), в которой произведение по $\mathbf{k}$ должно быть распространено только по значениям $k < k_0$. Соответственно и связь $\Omega[\tilde{\eta}]$ с Ω дается формулой (147,3) с интегрированием лишь по $\eta_{\mathbf{k}}$ с $k < k_0$[1]).

---

[1]) Для простоты рассуждений мы считаем физическую величину η классической. Такое предположение несущественно, поскольку длинноволновая переменная $\tilde{\eta}$ во всяком случае классична. Для квантовых систем необходимо, однако, выполнение условия вида $\hbar k_0 u \ll T$, где u — характерная скорость распространения колебаний параметра порядка.

Вблизи точки перехода функционал $\Omega[\tilde{\eta}]$ может быть разложен по степеням функции $\tilde{\eta}(\mathbf{r})$, а поскольку эта функция — медленно меняющаяся, то в разложении можно ограничиться членами наиболее низкого порядка по производным этой функции. В то же время это разложение должно уже учитывать самый факт существования фазового перехода, поскольку значение T_c определяется уже исключенными из $\tilde{\eta}$ коротковолновыми компонентами. Это значит, что разложение $\Omega[\tilde{\eta}]$ должно прямо иметь вид (146,5)

$$\Omega[\tilde{\eta}]=\Omega_0+\int[at\tilde{\eta}^2+b\tilde{\eta}^4+g(\nabla\tilde{\eta})^2-h\tilde{\eta}]\,dV.$$

Окончательно, опустив теперь значок $\sim$, приходим к следующему выражению для термодинамического потенциала Ω:

$$\Omega-\Omega_0=-T\ln\int\exp\left(-\frac{H_{\text{эфф}}}{T_c}\right)\prod_{k<k_0}d\eta'_{\mathbf{k}}d\eta''_{\mathbf{k}}, \tag{147,5}$$

где

$$H_{\text{эфф}}=\int[at\eta^2+b\eta^4+g(\nabla\eta)^2-h\eta]\,dV \tag{147,6}$$

играет роль *эффективного гамильтониана* системы, испытывающей фазовый переход.

В области применимости теории Ландау флуктуации малы. Это значит, что в статистическом интеграле (147,5) существенны значения η, лежащие в узком интервале вокруг значения $\eta=\bar{\eta}$, минимизирующего эффективный гамильтониан. Взяв интеграл методом перевала (т. е. заменив показатель экспоненты его разложением вблизи минимума), мы должны вернуться к термодинамическому потенциалу теории Ландау; поэтому коэффициенты в эффективном гамильтониане и в термодинамическом потенциале теории Ландау должны совпадать буквально. При этом, однако, флуктуационные поправки приведут к некоторому сдвигу значения температуры перехода T_c по сравнению со значением $T_c^{(0)}$, фигурирующим в (147,6) в разности $t=T-T_c^{(0)}$.

Интеграл (147,5) берется по бесконечному множеству переменных $\eta_{\mathbf{k}}$ (после того, как эффективный гамильтониан подстановкой $\eta(\mathbf{r})$ из (147,4) выражен через эти переменные). Если бы этот (как говорят, *континуальный*) интеграл мог быть вычислен, тем самым был бы выяснен характер особенности функции $\Omega(\mu, T)$ вблизи точки перехода. Это, однако, оказывается невозможным.

В формировании особенности играют роль флуктуации с волновыми векторами $k\sim 1/r_c$. При $t\to 0$ радиус корреляции $r_c\to\infty$, так что существенны сколь угодно малые значения k. Поэтому представляется весьма вероятным, что характер особенности не зависит от выбора величины параметра обрезания k_0. Если считать, что эта особенность состоит в появлении в термодинамическом потенциале членов с нецелыми степенями температуры t и поля h, то сделанное утверждение означает независимость от k_0 показателей этих степеней (так называемых *критических индексов*).

Отсюда в свою очередь должна следовать независимость этих показателей от конкретных значений коэффициентов b и g в эффективном гамильтониане (а тем самым — от μ или P, функциями которого они являются). Действительно, изменение $k_0 \to k_0/\lambda$ эквивалентно изменению масштаба измерения координат ($\mathbf{r} \to \lambda\mathbf{r}$), и потому последнее не должно менять критических индексов. С другой стороны, преобразование $\mathbf{r} \to \lambda\mathbf{r}$ меняет коэффициент g в эффективном гамильтониане, не меняя коэффициента b; поэтому критические индексы не должны зависеть от g. Аналогичным образом, заменив одновременно с преобразованием $\mathbf{r} \to \lambda\mathbf{r}$ также и переменную континуального интегрирования $\eta \to \lambda\eta$, мы изменим b, не изменив g, а потому критические индексы не зависят и от b (изменение же коэффициента α вообще несущественно, так как устраняется соответствующим изменением масштаба t, заведомо не отражающимся на показателе степени).

Таким образом, следует ожидать, что критические индексы будут одинаковы для всех систем с эффективным гамильтонианом вида (147,6). Они, однако, могут быть другими, если симметрия системы такова, что (по-прежнему при одном параметре порядка) квадратичный по производным член в эффективном гамильтониане имеет более общий вид (146,4).

Продолжая эту линию рассуждений, можно ожидать, что и в более общих случаях, когда изменение симметрии при переходе описывается несколькими параметрами порядка, критические индексы зависят только от структуры эффективного гамильтониана, но не от конкретных значений коэффициентов в нем. При этом в понятие структуры гамильтониана входит число и вид инвариантов четвертого порядка (а также знаки и соотношения типа неравенств между коэффициентами при них), и вид членов, квадратичных по производным от параметров порядка. Возникающие в связи с этим вопросы, однако, в настоящее время еще почти вовсе не исследованы.

Наконец, скажем несколько слов о вычислении последовательных членов разложения статистической суммы (147,5—6) по степеням b. Пусть $h=0$, $t>0$, так что $\bar{\eta}=0$; при $b=0$ эффективный гамильтониан

$$H^{(0)}_{\text{эфф}} = V \sum_{k<k_0} (\alpha t + gk^2)\,|\eta_{\mathbf{k}}|^2; \qquad (147,7)$$

он распадается на сумму членов, каждый из которых зависит только от одного из $\eta_{\mathbf{k}}$; статистический интеграл при этом легко вычисляется (см. задачу). Дальнейшие члены разложения (отвечающие уже учету «взаимодействия» между флуктуациями с различными $\mathbf{k}$) представляют собой произведения различных $\eta_{\mathbf{k}}$, усредненные по гауссовому распределению [$\sim\exp(-H^{(0)}_{\text{эфф}}/T_c)$]. Для таких интегралов справедлива теорема, согласно которой среднее значение от произведения нескольких $\eta_{\mathbf{k}}$ равно сумме произведений попарных средних значений от множителей, выбранных из числа имеющихся всеми возможными способами. Каждое такое среднее есть корреляционная функция флуктуаций (в $\mathbf{k}$-представлении), и, таким образом, вычисление последовательных членов разложения по b сводится к вычислению некоторых интегралов от произведений корреляционных функций[1]). По мере приближения к точке перехода эти интегралы расходятся, но оказывается невозможным выделить среди них какую-либо совокупность «наиболее сильно» расходящихся, которую можно было бы просуммировать[2]).

В описанной постановке задачи подразумевается, что характер особенности не зависит от наличия членов более высоких порядков в разложении эффективного гамильтониана по степеням η. Есть веские основания полагать, что это действительно так, поскольку такие члены приводят к интегралам, расходящимся слабее, чем интегралы, возникающие от члена $\sim\eta^4$.

Задача

Найти первую флуктуационную поправку к теплоемкости в области применимости теории Ландау (*А. П. Леванюк*, 1963).

Решение. Произведем вычисления для симметричной фазы в отсутствие поля. В первом приближении эффективный гамильтониан дается выражением (147,7). Вычисление статистического интеграла по формуле (147,5) дает

$$\Omega-\Omega_0=-T_c\sum_{k<k_0}\ln\frac{\pi T}{V(\alpha t+gk^2)}=T_cV\int\limits_0^{k_0}\ln\frac{V(\alpha t+gk^2)}{\pi T}\frac{2\pi k^2\,dk}{(2\pi)^3}$$

(интегрирование производится по половине $\mathbf{k}$-пространства, поскольку $\eta_{\mathbf{k}}$ и $\eta_{-\mathbf{k}}$ не независимы). Представляя собой малую поправку в потенциале Ω, это выражение дает поправку также и к потенциалу Φ. Двукратное дифференцирование

[1]) Указанная теорема играет здесь роль, аналогичную роли теоремы Вика в квантовой электродинамике, а отдельные члены ряда могут быть изображены графиками, аналогичными диаграммам Фейнмана. Изложение построенной таким образом «диаграммной техники» вычисления статистической суммы можно найти в книге: *А. З. Паташинский, В. Л. Покровский*, Флуктуационная теория фазовых переходов, «Наука», 1975.

[2]) Такое выделение оказывается возможным в формальной задаче о фазовом переходе в пространстве четырех измерений (интегралы в этом случае расходятся при $t\to 0$ логарифмически). На этом обстоятельстве основан предложенный *Вильсоном* (*K. G. Wilson*, 1971) способ оценки критических индексов: они вычисляются для случая пространства «$4-\varepsilon$ измерений» (с малым ε), после чего результат экстраполируется к $\varepsilon=1$.

этого выражения по t дает поправку к теплоемкости

$$C_p - C_{p0} = \frac{T_c^2 V \alpha^2}{4\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{(\alpha t + g k^2)^2} = \frac{T_c^2 V \alpha^{3/2}}{16\pi g^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{t}}. \tag{1}$$

Потребовав малости этой поправки по сравнению со скачком теплоемкости (143,8), мы снова придем к условию применимости теории Ландау (146,15) в виде

$$\alpha |t| \gg \frac{T_c^2 b^2}{32\pi^2 g^3}. \tag{2}$$

Обратим внимание на большой численный коэффициент в знаменателе выражения в правой стороне неравенства.

§ 148. Критические индексы

Существующая теория фазовых переходов второго рода основана на некоторых хотя и не доказанных строго, но вполне правдоподобных предположениях. Она опирается, конечно, и на подтверждение этих предположений эмпирическими данными, а также результатами численных расчетов на определенных простых моделях.

Эти данные дают основание считать, что при $T \to T_c$ всегда обращается в бесконечность производная $\partial C_p/\partial T$, а во многих случаях — и сама теплоемкость C_p. Уже отсюда можно сделать ряд заключений о поведении некоторых других термодинамических величин. Сделаем это в предположении обращения в бесконечность самой теплоемкости (*A. B. Pippard*, 1956).

Обращение $C_p = T(\partial S/\partial T)_P$ в бесконечность означает, что энтропия тела может быть представлена в виде

$$S = S(T,\ P - P_c(T)),$$

(где $P = P_c(T)$ — уравнение кривой точек фазового перехода в плоскости P, T), причем производная этой функции по ее второму аргументу стремится при $P - P_c \to 0$ к бесконечности. Обозначив дифференцирование по этому аргументу штрихом и оставляя только расходящиеся члены, имеем

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_P = -S' \frac{dP_c}{dT}, \qquad -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = \left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T = S',$$

откуда

$$C_p = T_c \frac{dP_c}{dT} \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P \quad \text{при} \quad T \to T_c, \tag{148,1}$$

т. е. коэффициент теплового расширения обращается в бесконечность по тому же закону, что и C_p.