

В. Ф. Елесин В. А. Кашурников

**ФИЗИКА
ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ**

Москва 1997

МИНИСТЕРСТВО ОБЩЕГО И ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
(ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)

В. Ф. Елесин В. А. Кашурников

ФИЗИКА
ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

Рекомендовано к изданию
редсоветом института
в качестве учебного пособия

Москва 1997

УДК 538.945(075)

ББК 22.368.3я7

Е-50

Е л е с и н В.Ф., К а ш у р н и к о в В.А. **Физика фазовых переходов:**
Учебное пособие. М.: МИФИ, 1997. 180с.

Настоящее учебное пособие написано на основе курса лекций и семинаров по физике фазовых переходов, проводимых в течение ряда лет в МИФИ на кафедре “Физика и техническое применение сверхпроводимости”.

Цель курса - выявить единый физический механизм фазовых переходов, основанный на представлении эффективного поля упорядочения. Представлены теории среднего поля, описывающие магнитное и ферромагнитное упорядочения (модели Изинга, Гейзенберга, Стонера), бозе-конденсацию, конденсацию пар-жидкость, отвердевание, переходы металл-диэлектрик (модели Мотта, Келдыша-Кобаева, Андерсона). Данный курс предшествует и способствует изучению теории сверхпроводимости в рамках курса "Теоретическая сверхпроводимость".

Пособие предназначено для студентов старших курсов и аспирантов, специализирующихся в области физики конденсированного состояния и низких температур, физики фазовых переходов, в изучении сильнокоррелированных систем, явлений сверхпроводимости и сверхтекучести.

Авторы признательны Опенову Л.А. за критическое чтение рукописи и полезные замечания.

Рецензент: С. Р. Кельнер

ISBN 5-7262-0094-2

© Московский государственный инженерно-физический институт
(технический университет), 1997 г.

ОГЛАВЛЕНИЕ

	стр.
ВВЕДЕНИЕ. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ПЕРВОГО И ВТОРОГО РОДА.....	5
1. ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД ФЕРРОМАГНЕТИК - ПАРАМАГНЕТИК ДЛЯ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ МОМЕНТОВ. ПРИБЛИЖЕНИЕ СРЕДНЕГО ПОЛЯ.....	9
1.1. Общие понятия о магнитных свойствах твердых тел.....	9
1.2. Магнитные свойства системы локальных магнитных моментов без взаимодействия.....	10
1.3. Система локальных магнитных моментов со взаимодействием. Эффективное поле Вейсса.....	15
1.4. Природа обменного взаимодействия. Модели Изинга и Гейзенберга.....	19
2. МОДЕЛЬ ИЗИНГА	25
2.1. Модель Изинга. Приближение среднего поля.....	25
2.2. Свободная энергия ферромагнетика в модели Изинга. Метод Брэгга-Вильямса.....	28
2.3. Теплоемкость в приближении среднего поля в модели Изинга.	32
2.4. Магнитная восприимчивость в приближении среднего поля в модели Изинга.....	34
2.5. Одномерная модель Изинга. Отсутствие фазового перехода....	36
3. ФЛУКТУАЦИИ В ФЕРРОМАГНЕТИКАХ.....	45
3.1. Ближний и дальний порядок. Функция корреляции.....	45
3.2. Функция корреляции магнитных моментов в модели Изинга...	46
3.3. Флуктуации магнитных моментов вблизи фазового перехода..	50
3.4. Теплоемкость в модели Изинга с учетом флуктуаций.....	51
3.5. Магнитная восприимчивость в модели Изинга с учетом флуктуаций.....	53
3.6. Нарушение симметрии при фазовом переходе ферромагнетик-парамагнетик	54
4. СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ В ФЕРРОМАГНЕТИКАХ В МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА.....	56
4.1. Квантовая модель Гейзенберга.....	56
4.2. Основное состояние ферромагнетика в модели Гейзенберга.....	62
4.3. Возбуждения в гейзенберговском ферромагнетике. Магноны...	63
4.4. Свойства магнонов. Спектр возбуждений.	

Эффективная масса.....	68
4.5. Термодинамика магнонов.....	71
4.6. Плоский ферромагнетик. Анизотропная модель Гейзенберга....	73
5. ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД ПАРАМАГНЕТИК -	
АНТИФЕРРОМАГНЕТИК. СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ В	
АНТИФЕРРОМАГНЕТИКАХ.....	80
5.1. Антиферромагнетизм в приближении Вейсса.....	80
5.2. Возбуждения в антиферромагнетиках в модели Гейзенберга.....	92
5.3. Свойства антиферромагнитных магнонов. Термодинамика.....	98
5.4. Неустойчивость антиферромагнитного состояния	
относительно нулевых колебаний и спиновых возбуждений....	100
6. ДЕЛОКАЛИЗОВАННЫЕ МАГНИТНЫЕ МОМЕНТЫ	102
6.1. Дисперсия электрона в кристалле в модели сильной связи.	
Эффективная масса.....	102
6.2. Парамагнетизм Паули.....	107
6.3. Ферромагнетизм в модели Стонера.....	108
7. КОНДЕНСАЦИЯ И ОТВЕРДЕВАНИЕ.....	114
7.1. Фазовый переход газ - жидкость. Конденсация.	
Уравнение Ван-дер-Ваальса.....	114
7.1.1. Теория Ван-дер-Ваальса.....	115
7.1.2. Модель решеточного газа.....	120
7.1.3. Флуктуации в модели решеточного газа.....	123
7.2. Переход жидкость - твердое тело. Кристаллизация.....	124
8. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ МЕТАЛЛ - ИЗОЛЯТОР.....	129
8.1. Переход Мотта.....	129
8.2. Фазовый переход полуметалл - изолятор	
в модели Келдыша - Копаева. Экситоны.....	133
8.3. Модель Хаббарда.....	140
8.3.1. Гамильтониан модели Хаббарда. Основные свойства.....	140
8.3.2. Переход металл - диэлектрик в модели Хаббарда.....	150
8.4. Фазовый переход металл - изолятор для неупорядоченной	
системы. Модель Андерсона. Локализация.....	155
9. КОНДЕНСАЦИЯ И СВЕРХТЕКУЧЕСТЬ В БОЗЕ-ГАЗЕ.....	159
9.1. Бозе-конденсация в идеальном газе -	
фазовый переход второго рода.....	159
9.2. Возбуждения в слабо неидеальном бозе-газе.....	164
9.3. Критерий сверхтекучести Ландау.....	172

ВВЕДЕНИЕ. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ПЕРВОГО И ВТОРОГО РОДА

Изучение систем, состоящих из большого числа взаимодействующих частиц, является одной из важнейших проблем современной физики.

Наиболее интересно термодинамическое поведение веществ при возникновении определенного типа упорядочения (например, выстраивание магнитных моментов). Это упорядочение происходит при некоторой температуре, причем переход совершается в чрезвычайно узкой области температур и носит название фазового перехода (перехода вещества из одной фазы в другую).

Фазовые переходы, связанные с упорядочением, происходят в различных физических системах: бинарных сплавах, ферромагнетиках и антиферромагнетиках, в дипольных моментах в сегнетоэлектриках, электронах в сверхпроводниках, в гелии в сверхтекучем состоянии и т.д.

Особый интерес в поведении макроскопических (термодинамических) систем представляют именно точки фазового перехода (например, по температуре T), так как в них свойства системы меняются скачком. Поскольку из требования термодинамической устойчивости возникает требование непрерывности термодинамических потенциалов (например, из требования положительности теплоемкости C ($C = dE/dT$) вытекает непрерывность энергии E и свободной энергии F), то в точке фазового перехода изменение термодинамического потенциала должно быть мало. Это значит, что возможно:

- 1) либо появление бесконечно малого количества новой фазы с конечным отличием ее свойств от свойств старой;
- 2) либо возникновение одновременно по всему объему “бесконечно малого” изменения свойств, соответствующего новой фазе.

Первый случай - расслоение на фазы - это фазовый переход первого рода (так как он обычно сопровождается скачком некоторых первых производных от соответствующего

термодинамического потенциала, например энтропии S). Поскольку возникновение новой фазы приводит к появлению поверхностной энергии, зародыши малого объема энергетически невыгодны, а достаточно большие могут возникнуть только благодаря флуктуациям. Поэтому при фазовых переходах первого рода возможны переохлаждение и перегрев при отсутствии таких зародышей. Примерами такого типа переходов являются расслоение на фазы (пар - жидкость, жидкость - твердое тело, пар - твердое тело), в частности, кипение и плавление, и сверхпроводящий переход в магнитном поле.

Во втором случае появление новых свойств не связано с поверхностной энергией и потому исключает перегрев или переохлаждение. Такие фазовые переходы представляют особый интерес, они называются фазовыми переходами второго рода, поскольку в точке фазового перехода некоторые вторые производные термодинамического потенциала обычно имеют особенность (например, теплоемкость C_V). Поскольку “скачкообразное” изменение свойств макроскопического объема невозможно, вблизи точки перехода должны *флуктуационно* возникать все большие области новой фазы, чтобы сразу после перехода новое состояние могло охватить весь объем. Это означает, что при приближении к точке перехода второго рода стремится к бесконечности радиус корреляции флуктуаций. Такие фазовые переходы обычно сопровождаются изменением симметрии состояния. Примеры такого типа переходов: структурные перестройки в кристаллах при определенной температуре; переходы порядок - беспорядок в сплавах; переходы ферромагнетик - парамагнетик или антиферромагнетик - парамагнетик в спиновых системах и ферромагнитных металлах и сплавах; сегнетоэлектричество, появление сверхпроводимости и сверхтекучести, “смешанное” вихревое состояние в “жестких” сверхпроводниках второго рода и т.д.

Для каждого фазового перехода существует понятие параметра порядка, чье ненулевое среднее значение в упорядоченной фазе и нарушает симметрию. Так, у ферромагнетика параметром порядка является средняя намагниченность. Гра-

ничную температуру, при которой спонтанно нарушается симметрия и в которой параметр порядка обращается в нуль, называют критической температурой T_c

(или температурой Кюри Θ , как у ферромагнетиков, рис.1). Различие типа фазовых переходов отражается на характере обращения в нуль параметра порядка в точке фазового перехода. Если параметр порядка плавно обращается в нуль при $T=T_c$ (но с бесконечной производной из-за флуктуаций), то это - фазовый переход второго рода (рис.2). Если же зависимость параметра порядка вблизи области фазового перехода неоднозначна, то в системе обязательно наблюдается расслоение на фазы, и это - переход первого рода (см. рис.2).

Появление общих закономерностей у достаточно разнородных объектов указывает на общность статистических свойств. Это хорошо иллюстрируется с точки зрения термодинамики сравнением внутренней энергии E и энтропии S .

Известно, что S - степень беспорядка. Чем хаотичнее состояние системы, тем больше S . С другой стороны, энергия E стремится к минимуму при

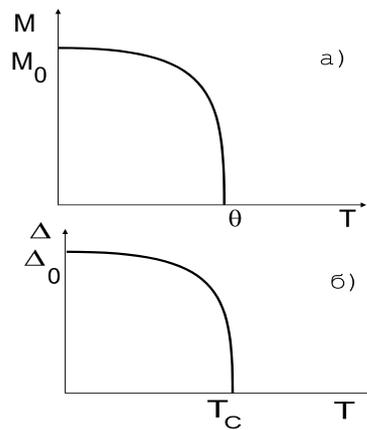


Рис.1. Фазовый переход ферромагнетик - парамагнетик (а) и фазовый переход сверхпроводник - нормальный металл (б): M - намагниченность; Θ - температура Кюри-Вейсса; Δ - сверхпроводящий параметр порядка; T_c - критическая температура сверхпроводника

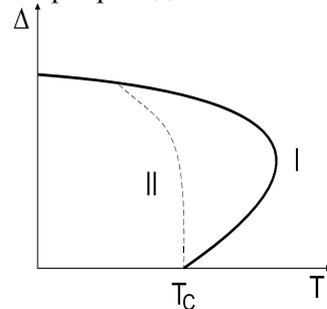


Рис.2. Фазовые переходы:

I - первого рода с неоднозначной зависимостью параметра порядка Δ от T ;

II - второго рода с бесконечной производной $d\Delta/dT|_{T_c}$

упорядочивании системы. Устойчивость системы определяется минимумом свободной энергии F : $F = E - TS$. При высоких температурах основной член: $-TS < 0$, поэтому для минимума F необходима большая энтропия S , т.е. беспорядок. Но при $T \rightarrow 0$ свободная энергия F стремится к E (и к минимальному значению), а энтропия S к нулю, т.е. система упорядочивается. Следовательно, существует температура, при которой эти два фактора - энергии упорядочения и разупорядочения - сравниваются. Это и есть температура перехода.

В основе теории фазовых переходов лежит идея о поле упорядочения, возникающем за счет взаимодействия частиц. Теория наиболее проста, если это поле предполагается равным среднему полю. Именно такая теория среднего поля излагается в настоящем пособии.

1. ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД ФЕРРОМАГНЕТИК - ПАРАМАГНЕТИК ДЛЯ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ МОМЕНТОВ. ПРИБЛИЖЕНИЕ СРЕДНЕГО ПОЛЯ

1.1. Общие понятия о магнитных свойствах твердых тел

Причиной магнитных свойств веществ является магнитный момент μ , относящийся либо к электрону, либо к узлу решетки, где локализован электрон (в этом случае говорят о локализованных магнитных моментах), который обычно возникает при движении по замкнутым траекториям электрона e (например, при его локализации на какой-либо атомной орбитали) с угловой скоростью ω радиусом a . Тогда его можно оценить из следующих соображений:

$$\mu \approx \frac{aJ}{2c} \approx \frac{a^2 e \omega}{2c} \approx \frac{a \omega e a}{2c} \approx \frac{p a e}{2 c m_e},$$

S - площадь орбиты; $J=ev$ - наведенный ток; c - скорость света; $a\omega \sim v$ - линейная скорость; $p=m_e v$ - импульс. Далее, согласно квантово-механическому принципу: $pa \sim \hbar$, откуда имеем:

$$\mu \approx \mu_0 = \frac{e\hbar}{2m_e c}, \text{ где } \mu_0 \text{ - магнетрон Бора.}$$

Будем полагать далее, что каждый электрон в узле имеет магнитный момент $\mu_0 = \frac{e\hbar}{2m_e c}$. Поместим образец во внеш-

нее магнитное поле \vec{H} . Введем намагниченность системы: $\vec{M} = \sum_i \vec{\mu}_i$. Если внешнее магнитное поле \vec{H} - слабое, то

наведенный магнитный момент оказывается пропорциональным ему: $\vec{M} = \vec{H}\chi$. Коэффициент пропорциональности χ называют магнитной восприимчивостью системы. Для маг-

нитной индукции \vec{B} (истинного внутреннего магнитного поля) можно написать:

$$\vec{B} = \vec{H} + 4\pi\vec{M} = \vec{H}(1 + 4\pi\chi) = \vec{H}\mu; \quad \mu \equiv 4\pi\chi + 1.$$

Здесь μ - магнитная проницаемость и $\chi = \frac{\mu-1}{4\pi}$ (множитель 4π

вводится для удобства).

Принята следующая классификация веществ по их магнитным свойствам:

1) парамагнетики: $\mu > 1 \Rightarrow$ магнитное поле внутри усиливается;

2) диамагнетики: $\mu < 1, \chi < 0 \Rightarrow$ ослабление магнитного поля;

3) ферромагнетики: в отсутствии внешнего магнитного поля $\vec{B} \neq 0$, т.е. $\vec{B} \neq 0$ при $\vec{H} = 0$ и $\mu = \infty, \chi = \infty$;

4) идеальный диамагнетизм: полная экранировка внешнего поля:

$$\vec{H} \neq 0, \vec{B} = 0 \Rightarrow \mu = 0, \chi = -\frac{1}{4\pi}.$$

Так, идеальным диамагнетиком является сверхпроводник;

5) немагнитные вещества: $\mu = 1, \chi = 0$.

1.2. Магнитные свойства системы локальных магнитных моментов без взаимодействия

Рассмотрим кристалл во внешнем магнитном поле с узлами, имеющими магнитные моменты. Пусть температура $T \neq 0$, и магнитные моменты взаимодействуют только с внешним полем. При включенном внешнем поле энергия взаимодействия $V = -\vec{\mu}\vec{H}$, и поле стремится развернуть моменты в свою сторону (а температура - наоборот, разупорядочить). Тогда: $V = -\vec{\mu}\vec{H} = -\mu_0 H S_z / S$, где S - спин (целый или полуцелый).

Число различных значений суммарного взаимодействия V равно $2S_Z+1$, при этом при $S_Z=1/2$ число значений (степеней свободы) локализованного магнитного момента равно 2 (вдоль и против поля). Соответственно энергия взаимодействия отдельного момента с внешним полем имеет только два значения:

$$\begin{aligned} E_n &= -\mu_0 H \quad (\text{вдоль поля}), \quad \mu = +\mu_0 \uparrow; \\ E_n &= +\mu_0 H \quad (\text{против поля}), \quad \mu = -\mu_0 \downarrow. \end{aligned} \quad (1.1)$$

Рассчитаем среднее значение $\langle \vec{\mu} \rangle$. Для этого рассмотрим полную среднюю намагниченность системы:

$$\langle \vec{M} \rangle = \sum_i \langle \mu_i \rangle = \sum_i \langle \mu \rangle = \langle \mu \rangle N,$$

при этом угловые скобки будут означать квантово-механическое усреднение по ансамблю Гиббса. Тогда по определению имеем

$$\langle \mu \rangle = \frac{Sp \mu \exp[-\bar{H} / kT]}{Sp \exp[-\bar{H} / kT]} = \frac{\sum_n \langle n | \mu \exp[-\bar{H} / kT] | n \rangle}{\sum_n \langle n | \exp[-\bar{H} / kT] | n \rangle},$$

где “ Sp ” означает шпур (сумму диагональных элементов); \bar{H} - гамильтониан системы; k - постоянная Больцмана (ее в дальнейшем полагаем равной единице).

Учитывая, что мы понимаем под состоянием $|n\rangle$ представление собственных функций гамильтониана (например, совокупность мгновенного расположения магнитных моментов на узлах, при этом таких состояний будет 2^N (N - число узлов) - размерность Гильбертова пространства), а также их полноту и ортонормированность, имеем

$$\begin{aligned} \exp[-H / T] | n \rangle &= \exp[-E_n / T] | n \rangle, \quad \langle n | n \rangle = 1; \\ \sum_n \langle n | \exp[-H / T] | n \rangle &= \sum_n \exp[-E_n / T], \end{aligned}$$

где E_n - энергия системы в состоянии $|n\rangle$. Кроме того, учитывая, что

$$\langle n | \mu \exp[-H/T] | n \rangle = \langle n | \mu_n \exp[-E_n/T] | n \rangle = \mu_n \exp[-E_n/T],$$

получаем

$$\langle \mu \rangle = \frac{\sum_n \mu_n \exp[-E_n/T]}{\sum_n \exp[-E_n/T]}. \quad (1.2)$$

Нормировочный знаменатель здесь - статистическая сумма Q .

Учитывая, что магнитные моменты не взаимодействуют, можно независимо рассчитать выражение (1.2) для каждого момента, имея ввиду только его два состояния (1.1):

$$\langle \mu \rangle = \frac{\mu_0 \exp[\mu_0 H/T] - \mu_0 \exp[-\mu_0 H/T]}{\mu_0 \exp[\mu_0 H/T] + \mu_0 \exp[-\mu_0 H/T]}.$$

Напомним, что здесь H - внешнее магнитное поле. Отсюда имеем

$$\langle \mu \rangle = \mu_0 \operatorname{th}(\mu_0 H/T). \quad (1.3)$$

Проанализируем полученное соотношение. Если внешнее поле устремить к нулю, то получаем из (1.3) следующее

$$H \rightarrow 0, N \langle \mu \rangle \cong \frac{\mu_0^2 H}{T} N = \chi H, \quad \chi = \frac{N \mu_0^2}{T} > 0. \quad (1.4)$$

При этом если положить внешнее поле точно нулю, то при любой температуре

$$H = 0, \quad \langle \mu \rangle \equiv 0, \quad \langle M \rangle = 0. \quad (1.5)$$

Таким образом, из (1.4)-(1.5) заключаем, что система локализованных невзаимодействующих магнитных моментов проявляет типичные парамагнитные свойства. Более того, она никогда не испытывает фазового перехода (рис.3) - для этого необходимо взаимодействие. Температурная зависимость восприимчивости ($\sim 1/T$), показанная на рис. 3, называется законом Кюри.

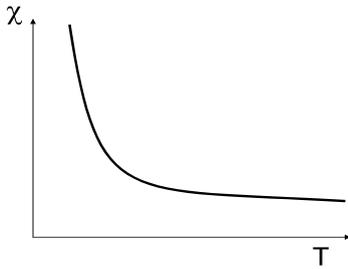


Рис.3. Температурная зависимость восприимчивости χ - закон Кюри ($\sim 1/T$) для невзаимодействующих моментов

Задачи

1.2.1. Найти выражение для статистической суммы Q модели Изинга без взаимодействия в магнитном поле.

Решение. Гамильтониан модели:

$\bar{H} = -\sum_i \mu_i H$, $\mu_i = \mu_0 S_i$, $S_i = \pm 1$. Так как моменты не взаимодействуют, то :

$$Q = \prod_i \sum_{S_i=\pm 1} \exp(\beta \mu_0 S_i H) = [2 \operatorname{ch}(\beta \mu_0 H)]^N.$$

1.2.2. Найти энергию E модели Изинга без взаимодействия при температуре T .

Ответ: $E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Q = -N \mu_0 H \operatorname{th}[\beta \mu_0 H].$

1.2.3. Найти энтропию $S(T)$ модели Изинга без взаимодействия.

Решение. Вероятность n -го состояния системы с энергией E_n : $P_n = \exp(-\beta E_n) / Q$. Поэтому

$$\begin{aligned} S &= -\sum_n P_n \ln P_n = -1/Q \sum_n \exp(-\beta E_n) \ln[\exp(-\beta E_n) / Q] = \\ &= \ln Q + \beta E = N[\ln\{2 \operatorname{ch}[\beta \mu_0 H]\} - \beta \mu_0 H \operatorname{th}[\beta \mu_0 H]]. \end{aligned}$$

1.2.4. Найти энтропию S модели Изинга без взаимодействия в микроканоническом ансамбле при заданной энергии E .

Решение. Обозначим W - статистический вес, число способов, которыми можно реализовать состояние с заданной энергией. Энергия E задается числом спинов вверх N_+ и полным числом спинов N . Тогда:

$$W = C_N^{N_+} = N!/[N_+!(N - N_+!)]$$

Положим $N_+ = xN$, $0 < x < 1$. Используя формулу Стирлинга для $N \rightarrow \infty$ ($\ln N! = N \ln N - N$), получаем энтропию:

$$S = -Nk \ln x - N(1-x) \ln(1-x)$$

Учитывая, что энергия $E = -\mu_0 H(N_+ - N_-) = -N\mu_0 H(2x - 1)$, имеем:

$$S = -N/2[(1-z) \ln(1-z) + (1+z) \ln(1+z)] + N \ln 2, \quad z = E/N\mu_0 H$$

1.2.5. Установить соответствие между энтропией в каноническом и микроканоническом ансамбле в невзаимодействующей модели Изинга.

Указание: использовать в выражении для энтропии, полученном в задаче 1.2.4, энергию для канонического ансамбля (задача 1.2.2).

1.2.6. Найти свободную энергию невзаимодействующей системы спинов.

Ответ: $F = E - TS = -TN \ln[2 \operatorname{ch}[\beta\mu_0 H]] = -T \ln Q$

1.2.7. Найти среднее число спинов, повернутых вверх $N_+(T)$.

$$N_+(T) = 1/Q \sum_{N_+=0}^N N_+ C_N^{N_+} \exp \beta \mu_0 H (2N_+ - N) =$$

Ответ:

$$= N [1 + \exp(2\beta\mu_0 H)]^{-1}$$

1.2.8. Получить теплоемкость системы невзаимодействующих изинговских спинов. Исследовать в предельных случаях $T \rightarrow 0$ и $T \rightarrow \infty$. Построить график $C(T)$.

Ответ:

$$C(T) = dE / dT = -T \partial^2 F / \partial T^2 = N(\mu_0 H / T)^2 \operatorname{ch}^{-2}[\mu_0 H / T]$$

1.2.9. Найти среднюю намагниченность системы при температуре T .

Ответ: $M = \mu_0 \langle (N_+ - N_-) \rangle = \mu_0 \langle (2N_+ - N) \rangle = \mu_0 N \tanh[\beta \mu_0 H]$.

1.2.10. Найти удельную магнитную восприимчивость системы.

Ответ: $\chi = (1/N) dM/dH|_{H \rightarrow 0} = \mu_0^2/T$.

1.2.11. Найти связь между намагниченностью, магнитной восприимчивостью и свободной энергией модели Изинга без взаимодействия.

Ответ: $M = \partial \ln Q / \partial \beta H = -\partial F / \partial H$, $\chi = -\partial^2 F / \partial H^2$.

1.3. Система локальных магнитных моментов со взаимодействием.

Эффективное поле Вейсса.

Пусть магнитные моменты взаимодействуют друг с другом, при этом энергия взаимодействия

$$V = -\lambda \vec{\mu}_i \vec{\mu}_j. \quad (1.6)$$

Здесь λ - безразмерный параметр взаимодействия между моментами. Суммарный гамильтониан имеет вид

$$\bar{H} = -1/2 \sum_{ij} \lambda_{ij} \vec{\mu}_i \vec{\mu}_j - H \sum_i \vec{\mu}_i. \quad (1.7)$$

В этом параграфе мы рассматриваем возможную ориентацию магнитных моментов только по $(+\mu)$ и против $(-\mu)$ поля. Согласно (1.6)-(1.7), магнитные моменты стремятся упорядочить друг друга. Тогда на выделенный магнитный момент будет действовать внешнее поле H и поле взаимодействия (1.6) от всех остальных моментов

$$H_i = \sum_j \lambda_{ij} \mu_j + H. \quad (1.8)$$

Усредненное (квантово-механически) суммарное поле будет тогда равно

$$\langle H_i \rangle = \sum_j \lambda_{ij} \langle \mu_j \rangle + H \quad (1.9)$$

В силу трансляционной инвариантности ($\langle \mu_j \rangle$ не зависит от j) в среднем на выделенный спин действует результирующее эффективное поле

$$H_{eff} = \langle H_i \rangle = \lambda \langle \mu \rangle N + H. \quad (1.10)$$

Здесь обозначено $\lambda N = \sum_j \lambda_{ij}$, так что λ имеет смысл без-

размерного параметра взаимодействия, приходящегося на один магнитный момент. Приближение молекулярного поля Вейсса состоит в предположении, что истинное суммарное поле в i -м узле совпадает со средним полем H_{eff} и не зависит от ориентации i -го спина μ_i . Легко видеть, что это действительно приближение, так как при направленном вверх i -м спине вероятность для соседей быть направленными вверх больше средней, т.е. в приближении Вейсса мы пренебрегаем флуктуациями. Это лучше всего выполняется при большем числе ближайших соседей Z . Более того, при $Z \rightarrow \infty$ приближение Вейсса дает *точный* результат.

Таким образом, учитывая, что каждый момент находится в эффективном среднем поле H_{eff} (1.10), из (1.3) можно получить самосогласованное уравнение

$$\langle \mu \rangle = \mu_0 \operatorname{th} \left(\frac{\mu_0 [H + \langle \mu \rangle N \lambda]}{T} \right). \quad (1.11)$$

Уравнение (1.11) - уравнение Вейсса. Рассмотрим предельный случай $H \rightarrow 0$. При достаточно больших температурах T из (1.11) получаем :

$$\langle \mu \rangle = \mu_0 \left(\frac{\mu_0 [H + \langle \mu \rangle N \lambda]}{T} \right) \quad (1.12)$$

и

$$\langle \mu \rangle = \frac{\mu_0^2 H}{[T - \mu_0^2 N \lambda]}. \quad (1.13)$$

Обозначим $\mu_0^2 N \lambda = \Theta$ - температуру Кюри-Вейсса. Закон Кюри-Вейсса для модели с взаимодействием имеет следующий вид:

$$\langle \mu \rangle = \frac{\mu_0^2 H}{[T - \theta]} . \quad (1.14)$$

Итак, при большой температуре $T > \Theta$ и $\chi > 0$, т.е. реализуется парамагнитное состояние. Как видно из (1.14), в точке $T = \Theta$ магнитный момент μ и восприимчивость χ расходятся (рис.4), и далее (при $T < \Theta$) возможен переход в ферромагнитное состояние. Проанализируем точное уравнение (1.11) при поле $H=0$. Введем безразмерный магнитный момент на узле $R = \langle \mu \rangle / \mu_0$.

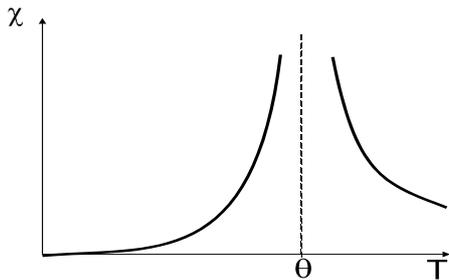


Рис.4. Закон Кюри - Вейсса ($\sim 1/|T - \theta|$) для магнитной восприимчивости в рамках взаимодействующей модели Изинга

Легко видеть, что $-1 < R < +1$. Рассмотрим положительную область значений R . Уравнение (1.11) принимает вид :

$$R = \text{th} \left(\frac{R \theta}{T} \right) . \quad (1.15)$$

Если обозначить $x = R\Theta / T$, то $xT/\Theta = \text{th} x$. Тогда очевидно, что при $T > \Theta$ имеется единственное решение $R=0$ и нет упорядочения. В случае $T < \Theta$ уравнение Вейсса имеет нетривиальное решение $R \neq 0$, описывающее ферромагнитное состояние.

Общий вид зависимости $R(T)$ показан на рис.1,a.

Вблизи области фазового перехода несложно получить

$R^2 = 3(\Theta/T - 1)$, откуда и следует, что при $T > \Theta$ $R=0$, а в случае $T < \Theta$ $R \neq 0$, т.е. решение, подходящее к точке перехода с бесконечной производной ($dR/dT \sim 1/\sqrt{\Theta/T - 1}$). Как дальше будет показано, такое бесконечное возрастание скорости намагниченности связано с расходимостью флуктуаций и корреляционных длин при приближении к точке фазового перехода второго рода.

В другом предельном случае $T \rightarrow 0$ параметр порядка $R \rightarrow 1$ по закону $R = 1 - 2\exp(-2\Theta/T)$. Заметим, что экспоненциально малое отклонение намагниченности от полного насыщения при низких температурах является следствием того, что при низких температурах почти все спины ориентированы вверх(по полю). Энергия, необходимая для поворота одного спина, равна $\Theta - (-\Theta) = 2\Theta$, так как создаваемое остальными спинами поле равно Θ . Приближение молекулярного поля приводит к точному результату при низких температурах, когда спины больше не флуктуируют. При этом вероятность поворота второго спина, дающего вклад в поле, пренебрежимо мала, так как он удерживается, в свою очередь, на месте своими соседями. Таким образом, при низких температурах возбужденные состояния отделены от основного энергетической щелью 2Θ .

Оценим масштаб температуры Кюри-Вейсса. Известно из эксперимента, что $\Theta_{\text{эксп}}=300-1000\text{K}$ (так, для железа $\Theta=1043\text{K}$, для никеля $\Theta=627\text{K}$, для гадолиния $\Theta=293\text{K}$). В системе СГС магнетрон Бора $\mu_0 \sim 10^{-20}$. Отсюда, полагая безразмерную константу взаимодействия λ порядка единицы, а число атомов $N \sim 10^{23}$, имеем $\Theta_{\text{теор}} \sim 0.1\text{K}$. Такое различие связано с тем, что реальный масштаб взаимодействия существенно больше ($\lambda \sim 10^4$), так как в спин-спиновом упорядочении играет основную роль специфическое обменное взаимодействие, которое мы рассмотрим в следующем параграфе.

1.4. Природа обменного взаимодействия.

Модели Изинга и Гейзенберга

Взаимодействие между магнитными моментами носит чисто квантовый характер - это так называемое обменное взаимодействие. Мы покажем, что константа обменного взаимодействия достигает $\lambda \sim 10^4 - 10^5$, что согласуется с экспериментом.

Для ансамбля одинаковых квантовых частиц должен выполняться принцип тождественности - они должны быть неразличимы в силу принципа неопределенности: $p x \sim \hbar$. Если имеются всего две частицы, то состояния системы, получающиеся друг из друга просто перестановкой обеих частиц, должны быть физически полностью эквивалентны. Это значит, что в результате такой перестановки волновая функция системы может измениться только на несущественный фазовый множитель: если $|\Psi(1,2)|^2 = |\Psi(2,1)|^2$, то $\Psi(1,2) = \exp(i\alpha) \Psi(2,1)$, где α - некоторая вещественная постоянная. Повторная перестановка с необходимостью приводит к условию $\exp(2i\alpha) = 1$, т.е. $\Psi(1,2) = \pm \Psi(2,1)$. Поэтому есть всего две возможности: волновая функция либо симметрична (это статистика Бозе), либо антисимметрична (это статистика Ферми).

Данный результат справедлив и для произвольного числа частиц.

Рассмотрим теперь две выделенные частицы, имеющие квантовую статистику и в первом приближении не взаимодействующие (кулоновское и другие взаимодействия учтены неким средним полем). Полную волновую функцию системы можно выразить через одночастичные функции $\Psi_a(1)$ и $\Psi_b(2)$ следующим образом:

$$\Psi(1,2) = 1/\sqrt{2} \{ \Psi_a(1) \Psi_b(2) \pm \Psi_a(2) \Psi_b(1) \}.$$

Соответственно бозонам отвечает знак "+", а фермионам "-", реализующие симметричную и антисимметричную ситуации. Видно, что если состояние a равно b , то для знака "-" волно-

вая функция тождественно равна нулю, что отражает принцип Паули в фермионной статистике, запрещающий двум фермионам находиться в одном состоянии. Наоборот, при знаке “+” для бозонов вероятность нахождения в одном состоянии наибольшая.

Рассмотрим теперь систему электронов, локализованных в поле кристаллической решетки. Учтем также спиновую компоненту волновой функции, так что полная волновая функция (которая должна быть антисимметрична) имеет вид:

$$\Phi(r_1, r_2, \sigma_1, \sigma_2) = \Psi(r_1, r_2) \chi(\sigma_1, \sigma_2),$$

$$\Psi(r_1, r_2) = 1/\sqrt{2} \{ \Psi_a(r_1) \Psi_b(r_2) \pm \Psi_a(r_2) \Psi_b(r_1) \}.$$

При этом антисимметричной ситуации “-” должна соответствовать симметричная спиновая компонента (суммарный спин $S=1$):

$$\chi(\sigma_1, \sigma_2) = \chi(1/2, \sigma_1) \chi(1/2, \sigma_2),$$

$$\chi(\sigma_1, \sigma_2) = \chi(-1/2, \sigma_1) \chi(-1/2, \sigma_2),$$

$$\chi(\sigma_1, \sigma_2) = \chi(1/2, \sigma_1) \chi(-1/2, \sigma_2) + \chi(-1/2, \sigma_1) \chi(1/2, \sigma_2),$$

а симметричной ситуации “+” должна соответствовать антисимметричная спиновая компонента (суммарный спин $S=0$):

$$\chi(\sigma_1, \sigma_2) = \chi(1/2, \sigma_1) \chi(-1/2, \sigma_2) - \chi(-1/2, \sigma_1) \chi(1/2, \sigma_2).$$

Таким образом, симметрия координатной волновой функции зависит от ориентации спинов:

$$\Psi_{\uparrow\uparrow}(r_1, r_2) = 1/\sqrt{2} \{ \Psi_a(r_1) \Psi_b(r_2) - \Psi_a(r_2) \Psi_b(r_1) \}, \quad (1.16)$$

$$\Psi_{\uparrow\downarrow}(r_1, r_2) = 1/\sqrt{2} \{ \Psi_a(r_1) \Psi_b(r_2) + \Psi_a(r_2) \Psi_b(r_1) \}, \quad (1.17)$$

Учтем теперь в первом порядке по теории возмущений кулоновское взаимодействие электронов $U = \frac{e^2}{\left| \begin{matrix} \vec{r}_1 & \vec{r}_2 \\ r_1 - r_2 \end{matrix} \right|}$. Поправка к

энергии системы за счет взаимодействия имеет вид:

$$E = \int \psi(1,2) \frac{e^2}{\left| \begin{matrix} \vec{r}_1 & \vec{r}_2 \\ r_1 - r_2 \end{matrix} \right|} \psi^*(1,2) d^3r_1 d^3r_2. \quad (1.18)$$

Подставляя в (1.18) волновые функции (1.16)-(1.17), имеем

$$E_{\uparrow\uparrow} = E_0 - J_{12}, \quad E_{\uparrow\downarrow} = E_0 + J_{12}, \quad (1.19)$$

где E_0 - энергия, не зависящая от ориентации спинов частиц:

$$E = \frac{1}{2} \int \frac{e^2}{\left| \begin{matrix} \vec{r}_1 & \vec{r}_2 \\ r_1 - r_2 \end{matrix} \right|} \left\{ |\psi_a(r_1)|^2 |\psi_b(r_2)|^2 + |\psi_a(r_2)|^2 |\psi_b(r_1)|^2 \right\} d^3r_1 d^3r_2, \quad (1.20)$$

а J_{12} - обменный интеграл:

$$E = \int \frac{e^2}{\left| \begin{matrix} \vec{r}_1 & \vec{r}_2 \\ r_1 - r_2 \end{matrix} \right|} \left\{ \psi_a(r_1) \psi_b(r_2) \psi_a^*(r_2) \psi_b^*(r_1) \right\} d^3r_1 d^3r_2. \quad (1.21)$$

В случае $J_{12} > 0$ спинам выгодно выстроится параллельно, если $J_{12} < 0$, то антипараллельно. В первом случае упорядочение приводит к ферромагнетизму, во втором - к антиферромагнетизму.

Оценим величину J_{12} . Как видно, масштаб J_{12} определяется кулоновским взаимодействием, т.е. $J_{12} \sim e^2/a \sim 10 \text{ эВ}$, где a - межатомное расстояние. Еще на порядок величину J_{12} может уменьшить множитель $\exp(-2a/a_B)$, где a_B - боровский радиус, из-за перекрытия экспоненциальных "хвостов" волновых функций (см. (1.21)). Таким образом, $J_{12} \sim 1 \text{ эВ} \sim 10^4 \text{ К}$, что согласуется с оценкой величины взаимодействия ($\lambda \sim 10^4$).

Теперь рассмотрим реальные модели, описывающие систему спинов с обменным взаимодействием. Так, если взаимодействие двух выделенных спинов согласно (1.19) имеет вид:

$$E_{\vec{S}_1, \vec{S}_2} = E_0 - J_{12} \vec{S}_1 \vec{S}_2, \quad (1.22)$$

то в реальном твердом теле с решеткой спинов вводим так называемый гамильтониан Гейзенберга:

$$\overline{H} = -1/2 \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j - \vec{H} \sum_i \vec{S}_i. \quad (1.23)$$

Здесь мы учли взаимодействие с внешним полем, а отсчет энергии проводится от той ее части, которая не зависит от ориентации спинов и не влияет на магнитное упорядочение системы. Если $J_{ij} > 0$, то гамильтониан (1.23) описывает ферромагнитную модель Гейзенберга, если $J_{ij} < 0$, то антиферромагнитную.

В модели (1.23) ориентация спинов допускается любой. Если же учесть тот факт, что обменный интеграл J_{ij} может быть различен для различных кристаллографических направлений в реальном анизотропном кристалле, т.е. возможен вид гамильтониана:

$$\overline{H} = -1/2 \sum_{ij} (J_{ij}^x S_i^x S_j^x + J_{ij}^y S_i^y S_j^y + J_{ij}^z S_i^z S_j^z) - \vec{H} \sum_i \vec{S}_i,$$

где J^x , J^y и J^z различны, то степени свободы магнитных моментов могут быть ограничены конкретным видом этих величин. Так, возможна ситуация, когда максимальное взаимодействие реализуется вдоль направления приложенного поля H . Тогда модель упрощается, ограничивается число степеней свободы и остается лишь два возможных состояния - по полю и против ($\mu_i = \pm 1$) - как в п.1.2 и 1.3, и мы получаем модель Изинга:

$$\overline{H} = -1/2 \sum_{ij} V_{ij} \mu_i \mu_j - H \sum_i \mu_i. \quad (1.23)$$

Здесь переобозначено $J_{ij} \rightarrow V_{ij} = V(r_i - r_j)$, $S_i \rightarrow \mu_i$.

Основное состояние модели Изинга совпадает с основным состоянием модели Гейзенберга при нулевой температуре, когда спины “заморожены” и ориентированы либо по полю, либо против, и

$\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow$
 $\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow$

Вблизи области фазового перехода наиболее адекватно описание с помощью модели Гейзенберга, реально учитывающей все степени свободы спиновой системы. Более того, и при низких температурах такие возбуждения, как спиновые волны, невозможно описать (как будет показано ниже) без модели Гейзенберга. Однако модель Изинга наиболее проста, наглядна и достаточно удобна при изложении отдельных проблем теории магнетизма.

З а д а ч и

1.4.1. Дана трехмерная классическая модель Гейзенберга без взаимодействия:

$$\overline{H} = -\mu_0 \sum_i \vec{S}_i \vec{H}, \quad |\vec{S}_i| = S.$$

Определить статистическую сумму Q .

Решение. Степени свободы системы определяются углом θ_i между полем H и спином S_i , поэтому:

$$Q = \prod_i \int d\Omega_i \exp(\beta\mu_0 S H \cos \theta_i) = [4\pi(\text{sh}\{\beta\mu_0 HS\}/\beta\mu_0 HS)]^N.$$

1.4.2. Найти намагниченность невзаимодействующей модели Гейзенберга, исходя из термодинамической формулы $M = -\partial F / \partial H$ и сравнить с результатом, получаемым из определения:

$$M_z = [N / 4\pi] \int d\Omega \mu_0 S \cos \theta \exp(-\beta\mu_0 \vec{S}_i \vec{H}).$$

Ответ:

$$M = -\partial F / \partial H = -\frac{\partial}{\partial \beta H} \ln Q = N \mu_0 F_L(\beta \mu_0 HS), \quad F_L(x) = \text{cth}(x) - 1/x,$$

$F_L(x)$ - функция Ланжевена. Второй результат из определения совпадает с этим выражением.

1.4.3. Исследовать поведение намагниченности в случаях $T \rightarrow 0$ и $T \rightarrow \infty$.

Решение. Функция Ланжевена $F_L(x)$ (см. предыдущую задачу) имеет асимптоты:

$$F_L(x) \approx 1 - 1/x + 2 \exp(-2x), \quad x \rightarrow \infty;$$

$$F_L(x) \approx x/3 - x^3/45 + 2x^5/945, \quad x \rightarrow 0.$$

Отсюда находим: $M = N \mu_0 S$, $T = 0$; $M = N \mu_0^2 S^2 H / 3T$, $T \rightarrow \infty$.

1.4.4. Найти магнитную восприимчивость системы.

Ответ. $\chi = (1/N) dM/dH|_{H \rightarrow 0} = \mu_0^2 S^2 / 3T$.

1.4.5. Рассчитать теплоемкость системы $C(T)$ классических спинов в модели Гейзенберга без взаимодействия. Исследовать предельные случаи $T \rightarrow 0$ и $T \rightarrow \infty$.

Ответ:

$$C = -T \partial^2 F / \partial T^2 = T \partial^2 (T \ln Q) / \partial T^2 = \frac{(\mu_0 HS)^2}{T^2} F_L'(x),$$

$$F_L'(x) = dF_L/dx,$$

$$C = 1 - 4(\beta \mu_0 HS)^2 \exp(-2\beta \mu_0 HS), \quad T \rightarrow 0,$$

$$C \approx (\beta \mu_0 HS)^2 / 3, \quad T \rightarrow \infty.$$

1.4.6. Найти энтропию системы $S(T) = -\partial F / \partial T$. Рассмотреть предельные случаи.

2. МОДЕЛЬ ИЗИНГА

В этой главе мы рассмотрим модель Изинга в приближении молекулярного поля Вейсса и получим основные результаты по теплоемкости и магнитной восприимчивости. Наряду с этим будут изучены точнорешаемые одномерная и двумерная модели Изинга и исследована проблема фазового перехода в них.

2.1. Модель Изинга. Приближение среднего поля

Рассмотрим модель Изинга (1.23):

$$\overline{H} = -1/2 \sum_{ij} V_{ij} \mu_i \mu_j - H \sum_i \mu_i .$$

и используем приближение среднего поля. Покажем, как в данной модели можно получить уравнение Вейсса. Так же, как и в п.1.3, учтем, что на выделенный магнитный момент будет действовать внешнее поле H и поле взаимодействия от всех остальных моментов:

$$H_i = \sum_j V_{ij} \mu_j + H . \quad (2.1)$$

После усреднения суммарное поле будет тогда равно

$$\langle H_i \rangle = \sum_j V_{ij} \langle \mu_j \rangle + H . \quad (2.2)$$

В силу трансляционной инвариантности ($\langle \mu_j \rangle$ не зависит от j) в среднем на выделенный спин действует результирующее эффективное поле:

$$H_{eff} = \langle H_i \rangle = R \sum_j V_{ij} + H . \quad (2.3)$$

где $R = \langle \mu_j \rangle$. Заметим, что величина

$$V(0) = \sum_j V_{ij} = \sum_j V(|r_i - r_j|)$$

является нулевой фурье-компонентой взаимодействия $V(q)$:

$$V(\vec{q}) = \sum_j V(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \exp\{i\vec{q}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)\}. \quad (2.4)$$

Таким образом, имеем:

$$H_{eff} = \langle H_i \rangle = RV(0) + H. \quad (2.5)$$

В случае взаимодействия лишь ближайших соседей вводят обозначение $V(0) = ZJ$, где Z - число ближайших соседей; J - обменный интеграл. Используя приближение среднего поля, заменим истинное поле эффективным (2.5). Тогда средний магнитный момент

$$\langle \mu_i \rangle = \frac{Sp \mu_i \exp[\beta \mu_i \langle H_i \rangle]}{Sp \exp[\beta \mu_i \langle H_i \rangle]} = \frac{\exp[\beta \mu_i \langle H_i \rangle] - \exp[-\beta \mu_i \langle H_i \rangle]}{\exp[\beta \mu_i \langle H_i \rangle] + \exp[-\beta \mu_i \langle H_i \rangle]},$$

($\beta=1/T$), откуда немедленно получаем самосогласованное уравнение Вейсса:

$$R = \text{th}[\beta(H + V(0)R)]. \quad (2.6)$$

Если сравнить его с уравнением (1.11), то легко заметить, что роль температуры Кюри Θ играет величина $V(0)$. Это уравнение мы уже исследовали в п.1.3. Отметим только, что при $V(0) > 0$ и при $\beta V(0) > 1$ ($T < \Theta$) уравнение (2.6) описывает именно ферромагнитное состояние, в соответствии с (1.19).

Еще раз исследуем вопрос, в каком предельном случае можно считать приближение молекулярного поля Вейсса точным. Ответ очевиден: число частиц, вносящих вклад в поле $H_i = \sum_j V_{ij} \mu_j$, действующее на отдельный спин, должно

быть велико. Тогда направление рассматриваемого спина не может сильно влиять на направление спина, дающего вклад в поле, действующее на первый спин, так как этот второй спин удерживается на месте ($Z-1$) остальными спинами, где Z - число спинов в сфере взаимодействия (в приближении ближайших соседей совпадающее с их числом). Таким образом, параметр малости в приближении среднего поля: $1/Z \ll 1$.

Задачи

2.1.1. Дан гамильтониан Изинга с взаимодействием в следующем виде:

$$\bar{H} = -1/2 \mu_0^2 \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - \mu_0 \sum_i S_i H, \quad S_i = \pm 1,$$

$J_{ij} > 0$. Необходимо записать его в приближении среднего поля, пренебрегая квадратичными флуктуациями магнитных моментов ($[\langle S \rangle - S]^2 \rightarrow 0$). Ввести взаимодействие ближайших соседей Z .

Решение. Учитывая разложение, сохраняющее требуемую точность среднего поля, в виде:

$$S_k S_{k'} \approx \langle S_k \rangle S_{k'} + S_k \langle S_{k'} \rangle - \langle S_k \rangle \langle S_{k'} \rangle,$$

получаем:

$$\bar{H} = 1/2 \mu_0 N H_0 R - \mu_0 \sum_i S_i (H + H_0),$$

где $H_0 = \mu_0 \sum_j J_{ij} R = Z \mu_0 J R$ - среднее поле; $R = \langle S_i \rangle$ - пара-

метр порядка, средний магнитный момент.

2.1.2. Рассчитать статистическую сумму Q в приближении среднего поля, исходя из вида гамильтониана, полученного в предыдущей задаче.

Ответ:

$$\begin{aligned} Q &= \prod_i \exp(-\beta \mu_0 H_0 R / 2) \sum_{S_i = \pm 1} \exp[\beta \mu_0 S_i (H + H_0)] = \\ &= \exp(-N \beta \mu_0 H_0 R / 2) [2 \operatorname{ch} \{\beta \mu_0 (H + H_0)\}]^N \end{aligned}$$

2.2. Свободная энергия ферромагнетика в модели Изинга. Метод Брэгга-Вильямса

Для исследования переходов ферромагнетик-парамагнетик в модели Изинга полезно рассмотреть свободную энергию системы и изучить ситуацию с точки зрения энергетической выгоды фазовых состояний. По определению свободная энергия $F = E - TS$, где E - внутренняя энергия системы; S - энтропия. Энергию E можно выразить через термодинамическое среднее от гамильтониана:

$$E = \langle \overline{H} \rangle = -1/2 \sum_{ij} V_{ij} \langle \mu_i \mu_j \rangle - H \sum_i \langle \mu_i \rangle. \quad (2.7)$$

В приближении среднего поля переменные μ_i независимы, поэтому $\langle \mu_i \mu_j \rangle = \langle \mu_i \rangle \langle \mu_j \rangle$. Учитывая, что $\langle \mu_i \rangle = \langle \mu \rangle = R$, получаем:

$$E = -R^2 \Theta N / 2 - R H N, \quad (2.8)$$

где учтено, что $V(0)N = \sum_{i,j} V(r_{ij})$, $V(0) = \Theta$, а также исполь-

зована трансляционная инвариантность. Для вычисления энтропии учтем, что параметр порядка R является термодинамической величиной, поэтому энтропию можно вычислить, подсчитывая число конфигураций при заданном значении $R = 1/N \sum_i \mu_i$. Это несложно сделать (что было показано

Брэггом и Вильямсом), так как все такие конфигурации имеют в приближении Вейсса одну и ту же энергию. Очевидно, что $R = (N\uparrow - N\downarrow)/N$, где $N = N\uparrow + N\downarrow$, $N\uparrow$ - число спинов, направленных по полю, $N\downarrow$ - против поля. Энтропию можно выразить через логарифм статистического веса: $S = \ln W$, при этом статистический вес W при заданном R равен:

$$W = \frac{N!}{N \uparrow !N \downarrow !} \quad (2.9)$$

Используя при больших значениях N асимптотическую формулу Стирлинга: $\ln N! = N \ln N - N$ и учитывая, что

$$N \uparrow / N = (1+R)/2, \quad N \downarrow / N = (1-R)/2,$$

находим окончательно:

$$S = -N/2 \{ (1+R) \ln[(1+R)/2] + (1-R) \ln [(1-R)/2] \}. \quad (2.10)$$

Как и следовало ожидать, при полном упорядочении, когда все магнитные моменты направлены по полю ($R=1$), энтропия $S=0$. Напротив, при полном разупорядочении ($R=0$) энтропия расходится ($S = N \ln 2 \rightarrow \infty$).

Свободная энергия ферромагнетика записывается в результате следующим образом:

$$F/N = -R^2 \Theta/2 - RH + T/2 \{ (1+R) \ln[(1+R)/2] + (1-R) \ln[(1-R)/2] \}. \quad (2.11)$$

Исследуем полученное выражение в пределе малого внешнего поля $H \rightarrow 0$.

В точке равновесия свободная энергия должна быть минимальна, т.е. должно выполняться условие $\partial F / \partial R = 0$:

$$\partial F / \partial R = 0 = N \left\{ -(R\theta + H) + \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+R}{1-R} \right) \right\}, \quad (2.12)$$

откуда немедленно следует уравнение Вейсса (2.6) для параметра порядка R . Кроме того, для анализа нам понадобится вторая производная свободной энергии:

$$\frac{1}{N} \partial^2 F / \partial R^2 = -\theta + \frac{T}{1-R^2}. \quad (2.13)$$

При $T > \Theta$, $R=0$ и из (2.13) $\frac{1}{N} \partial^2 F / \partial R^2 = -\theta + T > 0$,

так что свободная энергия имеет всего один минимум (при $R=0$) (рис.5). В случае $T < \Theta$ возникает еще один экстремум

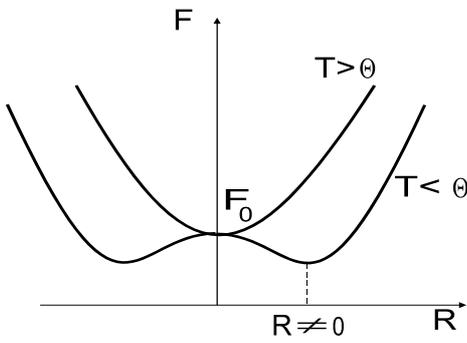


Рис.5. Свободная энергия ферромагнетика в модели Изинга как функция параметра порядка R

(минимум) при $R \neq 0$ (рис.5), при этом значение параметра порядка R является нетривиальным решением уравнения Вейсса (2.6), (2.12). Вблизи точки перехода $T \rightarrow \Theta$ воспользуемся разложением уравнения Вейсса (при $R \rightarrow 0$):

$$R \cong \Theta R/T - 1/3(\Theta^3/T^3)R^3, \text{ откуда } R^2 = 3(\Theta/T-1), \text{ и } \frac{1}{N} \partial^2 F / \partial R^2 = 2(\Theta-T) > 0,$$

т.е. действительно свободная энергия имеет минимум. Как видно из рис.5, точка этого минимума лежит ниже точки экстремума при $R=0$, что говорит о выгодности ферромагнитного состояния $R \neq 0$ при $T < \Theta$.

Убедимся аналитически, что ферромагнетизм выгоден и при низких температурах. В пределе $T \rightarrow 0$ параметр порядка $R = 1 - 2\exp(-2\Theta/T)$. Подставляя это выражение в (2.13), получаем

$$\frac{1}{N} \partial^2 F / \partial R^2 = T \left(-\frac{\Theta}{T} + \frac{1}{4} \exp[2\Theta/T] \right) > 0,$$

т.е. минимум сохраняется.

Заметим, что численно можно показать, что во всем диапазоне $0 < T < \Theta$ выгодно $R \neq 0$.

Таким образом, точка фазового перехода характеризуется появлением глобального минимума свободной энергии с нетривиальным значением параметра порядка, символизирующего ферромагнитное упорядочение.

Задачи

2.2.1. Найти свободную энергию в модели Изинга в приближении среднего поля исходя из полученного в задаче

(2.1.2) выражения для статистической суммы Q . Доказать, что полученный результат совпадает с результатом подхода Брэгга-Вильямса (2.11).

Ответ:

$$F = -T \ln Q = N\beta\mu_0 H_0 R / 2 - TN \ln [2 \operatorname{ch} \{ \beta\mu_0 (H + H_0) \}].$$

Если учесть уравнение Вейсса (2.12), то легко доказать эквивалентность полученного выражения и (2.11).

2.2.2. Из условия минимума свободной энергии $\partial F / \partial R = 0$, полученной в предыдущей задаче, получить уравнение Вейсса на параметр порядка R .

2.2.3. Найти температуру Кюри-Вейсса Θ и исследовать поведение параметра порядка R при $T \rightarrow 0$ и $T \rightarrow \Theta$ в модели Изинга в приближении среднего поля.

Решение. Используем уравнение Вейсса

$R = \operatorname{th} \{ R\Theta / T \}$. Учитываем, что:

$$\operatorname{th} x = x - x^3 / 3 + 2x^5 / 45, \quad x \rightarrow 0, \quad \operatorname{th} x = 1 - 2 \exp(-x), \quad x \rightarrow \infty.$$

Отсюда находим:

$$R = 1 - 2 \exp(-2\theta / T), \quad T \rightarrow 0,$$

$$R^2 = 3y - 12y^2 / 5, \quad y = (\theta - T) / \theta \ll 1, \quad T \rightarrow \theta, \quad \theta = \mu_0^2 ZJ.$$

2.2.4. Исследовать поведение свободной энергии F при $H=0$, $T \rightarrow 0$ и $T \rightarrow \Theta$. Воспользоваться результатом задачи 2.2.1 и доказать устойчивость ферромагнитного состояния в этих случаях. Получить разложение F по параметру порядка в пределе $R \rightarrow 0$.

Ответ:

$$F / N = -\theta / 2 + O(\exp\{-2\theta / T\}), \quad T \rightarrow 0,$$

$$F / N = -T \ln 2 - \theta R^2 y / 2 + \theta R^4 / 12, \quad y = (\theta - T) / \theta, \quad T \rightarrow \theta.$$

Кроме того, $F(R) - F(R=0) = -(3N\theta / 4) [y^2 - y^3 / 5] < 0, \quad T \rightarrow \theta.$

2.3. Теплоемкость в приближении среднего поля в модели Изинга

Рассмотрим важную экспериментально измеряемую физическую величину - теплоемкость C - количество энергии, которую запасает система при повышении температуры на 1К (например, за счет переориентации спинов и возбуждения колебательных степеней свободы). Рассчитаем ее в приближении среднего поля в модели Изинга. Из выражения для энергии (2.8) получаем:

$$C = \partial E / \partial T = -\frac{N\theta}{2} \partial R^2 / \partial T. \quad (2.14)$$

Отсюда, воспользовавшись известными предельными соотношениями для параметра порядка, имеем:

$$C = \begin{cases} \frac{3}{2}N, & T \rightarrow \theta, \\ 4(\theta/T)^2 N \exp(-2\theta/T), & T \rightarrow 0. \end{cases} \quad (2.15)$$

Таким образом, при низких температурах теплоемкость экспоненциально стремится к нулю, так как в системе имеется конечная щель (2θ) между основным и возбужденными состояниями. В точке перехода она конечна (рис.6). Численный множитель $3/2$ не случаен - он связан с числом степеней свободы в трехмерной ситуации ($\sim 1/2 kT$ на каждую). (Отметим, что в приближении среднего поля мерность пространства входит в ответ только через число ближайших соседей Z , с этой точки зрения при $Z \gg 1$ задача всегда как минимум трехмерна.) Следует заметить, что на эксперименте наблюдается особенность вблизи точки перехода (рис.7), что говорит о неприменимости приближения среднего поля в этой области. Далее в главе 3 мы покажем, как можно объяснить этот экспериментальный факт, расширив возможности подхода с учетом флуктуаций.

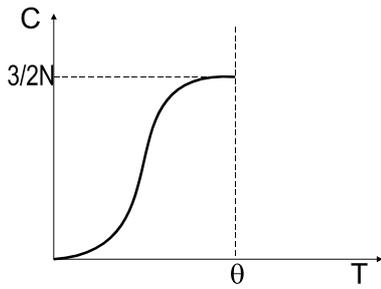


Рис.6. Теплоемкость в модели Изинга в приближении среднего поля

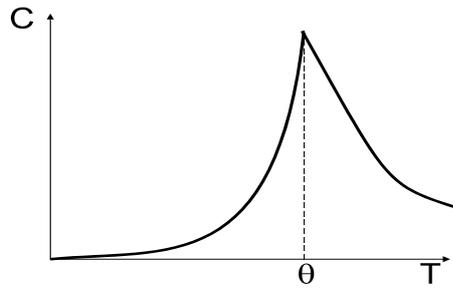


Рис.7. Экспериментально наблюдаемые особенности теплоемкости вблизи точки ферромагнитного перехода (λ - точка)

Задачи

2.3.1. Выразить теплоемкость модели Изинга C через параметр порядка R , используя $C = -T \partial^2 F / \partial T^2$ и свободную энергию из задачи 2.2.1. Рассмотреть предельные случаи $T \rightarrow 0$ и $T \rightarrow \theta$.

Ответ:

$$C/N = -\frac{\theta}{2} \partial R^2 / \partial T,$$

$$C/N = 3/2 [1 - 8(\theta - T)/5\theta], \quad T \rightarrow \theta,$$

$$C/N = 4(\theta/T)^2 \exp(-2\theta/T), \quad T \rightarrow 0.$$

2.4. Магнитная восприимчивость в приближении среднего поля в модели Изинга

Получим закон Кюри-Вейсса для восприимчивости типа (1.14) исходя из уравнения Вейсса (2.6). По определению:

$$\chi = \frac{dM}{dH}_{H \rightarrow 0}, \quad M = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial H} = R\mu_0, \quad (2.16)$$

при этом χ - полная производная от магнитного момента (коэффициент при первой поправке разложения по полю), в то время как магнитный момент - это термодинамическая производная по полю от свободной энергии. В (2.16) учтена также размерность магнитного момента ($\sim \mu_0$). Используя уравнение Вейсса:

$$R = \text{th} [\beta \mu_0 (H + \theta R)] \quad (2.17)$$

и (2.16), продифференцируем (2.17) по полю (полную производную), имея ввиду зависимость $R(H)$. Тогда получим замкнутое уравнение на χ , откуда окончательно

$$\chi = \frac{\mu_0^2 (1 - R^2)}{T - \theta (1 - R^2)}. \quad (2.18)$$

Рассмотрим предельные случаи. Выражение (2.18) с учетом известного разложения параметра порядка R приводит к следующему (учитывая также, что $R=0$ при $T > \theta$):

$$\chi = \begin{cases} \frac{4\mu_0^2}{T} \exp(-2\frac{\theta}{T}), & T \rightarrow 0; \\ \frac{\mu_0^2}{2(T - \theta)}, & T \rightarrow \theta - 0; \\ \frac{\mu_0^2}{\theta - T}, & T \rightarrow \theta + 0. \end{cases} \quad (2.19)$$

График $\chi(T)$ показан на рис.4. Как видно из рисунка и разложений (2.19), вблизи области фазового перехода наблюдается типичный закон Кюри-Вейсса $\chi \sim 1/|T - \theta|$. Обращаем

внимание на различие коэффициентов при подходе слева и справа к точке перехода (см.(2.19)), связанное с различием фазовых состояний - конденсированного и неупорядоченного - и наличием ненулевого магнитного момента при $T < \Theta$, нарушающего симметрию системы.

При низких температурах мы так же, как и в температурной зависимости теплоемкости, наблюдаем экспоненциальную зависимость восприимчивости, связанную с конечной щелью в спектре возбуждений модели Изинга.

Задачи

2.4.1. Рассчитать магнитную восприимчивость для модели Изинга в приближении среднего поля. Рассмотреть предельные случаи $T \rightarrow 0$ и $T \rightarrow \Theta \neq 0$, $T \rightarrow \Theta - 0$.

2.4.2. Выразить магнитную восприимчивость через среднеквадратичную флуктуацию магнитного момента.

Ответ:

$$\begin{aligned} \chi &= (1/N) dM / dH|_{H \rightarrow 0} = \beta / N [\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2] = \\ &= \beta / N \langle [M - \langle M \rangle]^2 \rangle. \end{aligned}$$

2.4.3. Найти флуктуацию магнитного момента $\langle M^2 \rangle$ в приближении среднего поля в модели Изинга при $H \rightarrow 0$. Ответ выразить через параметр порядка R .

Ответ:

$$\begin{aligned} \langle M^2 \rangle &= [1/Q] \partial^2 Q / \partial (\beta H)^2 = \\ &= \beta^2 (\partial F / \partial [\beta H])^2 - \beta \partial^2 F / \partial (\beta H)^2 = \\ &= \mu_0 \{ \mu_0 R^2 + T dR/dH \} = \mu_0^2 R^2 + T \chi = \\ &= \mu_0^2 [R^2 + T(1 - R^2) \{ T - \theta (1 - R^2) \}^{-1}] \end{aligned}$$

(сравни с ответом предыдущей задачи).

Таким образом задача сводится к вычислению статистической суммы Q . Представим ее следующим образом, имея ввиду полный перебор возможных мгновенных реализаций расположений спинов в цепочке:

$$Q = \sum_{\mu_1 = \pm 1} \sum_{\mu_2 = \pm 1} \dots \sum_{\mu_N = \pm 1} \exp(\beta V \mu_1 \mu_2 + \beta \mu_1 H + \beta V \mu_2 \mu_3 + \beta \mu_2 H + \dots + \beta V \mu_N \mu_1 + \beta \mu_N H). \quad (2.22)$$

По виду гамильтониана (2.20) ясно, что удобно перебирать состояния системы не по отдельным узлам, а по парам i и $i+1$. Для удобства введем матрицу 2×2 :

$$P(\mu_j \mu_{j+1}) = \exp\{\beta \mu_j \mu_{j+1} + \beta H \mu_j\},$$

или покомпонентно:

$$P(\mu_j \mu_{j+1}) = \begin{pmatrix} \exp[\beta V + \beta H] & \exp[-\beta V - \beta H] \\ \exp[-\beta V + \beta H] & \exp[\beta V - \beta H] \end{pmatrix}. \quad (2.23)$$

Матрица (2.23) описывает все возможные состояния пары узлов $j, j+1$. Условно можно также записать:

$$P(\mu_j \mu_{j+1}) = \begin{pmatrix} \uparrow \uparrow & \downarrow \uparrow \\ \uparrow \downarrow & \downarrow \downarrow \end{pmatrix}, \quad (2.24)$$

где явно показаны расположения спинов в j -м и $j+1$ -м состояниях.

Тогда статистическая сумма будет иметь вид суммы большого числа произведений матриц (2.23):

$$Q = \sum_{\mu_1 = \pm 1} \sum_{\mu_2 = \pm 1} \dots \sum_{\mu_N = \pm 1} P(\mu_1 \mu_2) P(\mu_2 \mu_3) \dots P(\mu_N \mu_1). \quad (2.25)$$

При этом если учесть, что

$$\sum_{\mu_2} P(\mu_1 \mu_2) P(\mu_2 \mu_3) = P^2(\mu_1 \mu_3), \quad (2.26)$$

и применить это свойство ко всем матрицам в (2.25), то

$$Q = \sum_{\mu_1} P^N(\mu_1 \mu_1), \quad (2.27)$$

т.е. статистическая сумма равна сумме диагональных элементов (шпуру) N -го произведения матриц P .

То, что на главных диагоналях при перемножении матриц P собираются все возможные реализации расположений спинов, т.е. статистическая сумма, видно уже при однократном умножении. Так, если воспользоваться (2.24), имеем

$$\begin{pmatrix} \uparrow \uparrow & \downarrow \uparrow \\ \uparrow \downarrow & \downarrow \downarrow \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \uparrow \uparrow & \downarrow \uparrow \\ \uparrow \downarrow & \downarrow \downarrow \end{pmatrix} = \\ \begin{pmatrix} \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow + \downarrow \uparrow \uparrow \downarrow & \uparrow \uparrow \downarrow \uparrow + \downarrow \uparrow \downarrow \downarrow \\ \uparrow \downarrow \uparrow \uparrow + \downarrow \downarrow \uparrow \downarrow & \uparrow \downarrow \downarrow \uparrow + \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \end{pmatrix}$$

Видно, что на главных диагоналях уже перебраны все возможные реализации двух узлов (если $N=2$, то $\mu_3=\mu_1$ из-за периодических граничных условий).

Известно, что шпур матрицы не меняется при ее преобразовании к другому представлению в пространстве 2×2 . Если матрицу P представить в диагональном виде, то

$$Q = \sum_{\mu_1} P^N (\mu_1 \mu_1) = \sum_{k=1}^2 \lambda_k^N, \quad (2.28)$$

где λ_k - собственные значения матрицы P . Диагонализуем матрицу P . Для этого решим секулярное уравнение

$$\begin{vmatrix} e^{\beta V + \beta H} - \lambda & e^{-\beta V - \beta H} \\ e^{-\beta V + \beta H} & e^{\beta V - \beta H} - \lambda \end{vmatrix} = 0. \quad (2.29)$$

Отсюда

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta V} \operatorname{ch} \beta H \pm \sqrt{e^{2\beta V} \operatorname{sh}^2 \beta H + e^{-2\beta V}}. \quad (2.30)$$

Заметим, что $\lambda_1 > \lambda_2$. Поэтому статистическая сумма в пределе больших N выражается только через одно собственное число λ_1 :

$$Q = \lambda_1^N \left(1 + \left\{ \lambda_2 / \lambda_1 \right\}^N \right) = \lambda_1^N \Big|_{N \rightarrow \infty}, \quad \ln Q = N \ln \lambda_1. \quad (2.31)$$

Из (2.31), используя соотношение (2.21), можно получить выражение для средней намагниченности:

$$\langle \mu \rangle = \frac{\text{sh } \beta H}{\sqrt{\text{sh}^2 \beta H + \exp[-4 \beta V]}}. \quad (2.32)$$

Проанализируем полученное *точное* выражение. В отсутствие взаимодействия ($V=0$) из (2.32) получаем обычное выражение для намагниченности системы невзаимодействующих спинов (см.(1.3)): $\langle \mu \rangle = \text{th } \beta H$. С другой стороны, в пределе слабого поля $H \rightarrow 0$ имеем:

$$\text{sh } \beta H \sim \beta H \rightarrow 0, \quad \langle \mu \rangle = 0.$$

Намагниченность не имеет особенностей ни по взаимодействию, ни по полю, исчезает при выключении поля, т.е. проявляет явные парамагнитные свойства. Фазового перехода нет.

Таким образом, в одномерной цепочке в приближении ближайших соседей флуктуации настолько сильны, что препятствуют установлению спонтанной намагниченности, и фазовый переход парамагнетик - ферромагнетик отсутствует.

Задачи

2.5.1. Найти свободную энергию ферромагнитной одномерной модели Изинга исходя из выражения для статистической суммы (2.31). Рассчитать предельный случай $H \rightarrow 0$.

Ответ:

$$\begin{aligned} F &= -T \ln \lambda_1 = \\ &= -TN \ln[\exp(\beta V) \text{ch } \beta H + \sqrt{\exp(2\beta V) \text{sh}^2 \beta H + \exp(-2\beta V)}] = \\ &= -TN \ln[2 \text{ch } \beta V] \Big|_{H \rightarrow 0}. \end{aligned}$$

2.5.2. Найти статистическую сумму и свободную энергию антиферромагнитной одномерной модели Изинга.

Решение. Следует просто заменить V на $-V$ в решении предыдущей задачи.

2.5.3. Найти теплоемкость при поле $H=0$. Рассмотреть случай $V>0$ и $V<0$ (ферромагнетик и антиферромагнетик).

Ответ: оба случая совпадают:

$$C = N[V/T]^2 \operatorname{ch}^{-2} \{ \beta V \}.$$

2.5.4. Определить энергию при поле $H=0$. Рассмотреть случай $V>0$ и $V<0$.

Ответ: оба случая совпадают: $E = -NV \operatorname{th} \beta V$.

2.5.5. Найти магнитную восприимчивость $V = \pm \mu_0 J$.

Ответ: $\chi = [\mu_0^2 / T] \exp(\pm 2\beta \mu_0^2 / T)$.

2.5.6. Записать статистическую сумму на случай конечной цепочки $N \gg 1$. Рассчитать поправку к восприимчивости одномерной цепочки за счет конечности системы.

Двумерная модель Изинга; решение Онзагера. В 1944 г. Онзагером было предложено точное решение задачи о фазовом переходе в модели Изинга на двумерной квадратной решетке. Основным выводом - существует переход в ферромагнитное состояние, причем Онзагеру удалось точно рассчитать статистическую сумму. Для подробного ознакомления с этим известным результатом мы отсылаем читателей к книгам [16,17]. Мы коснемся здесь конспективно лишь основных этапов расчета и обсудим полученные Онзагером *точные* результаты.

Рассмотрим двумерную квадратную решетку с периодическими граничными условиями и N узлами, каждый из которых имеет единичный спин $\mu = \pm 1$. Тогда удобно ввести нумерацию узлов по их координатам $x = ka$, $y = la$, где a - период решетки; k, l - целые числа $1 < k, l < L$, $L^2 = N$. В этом случае гамильтониан Изинга в приближении ближайших соседей и в отсутствии внешнего поля на такой решетке имеет вид:

$$\overline{H} = -V \sum_{k,l=1}^L (\mu_{kl} \mu_{kl+1} + \mu_{kl} \mu_{k+1l}). \quad (2.33)$$

Статистическая сумма такой системы:

$$Q = \sum_{\{n\}} \exp \left\{ \theta \sum_{k,l=1}^L (\mu_{kl} \mu_{kl+1} + \mu_{kl} \mu_{k+1l}) \right\}, \quad (2.34)$$

где $\Theta = \beta V$, а $\{n\}$ означает суммирование по всем возможным состояниям системы. Воспользуемся тем фактом, что $\mu_{kl}^2 = 1$. Тогда несложно получить следующее тождество:

$$\exp\{\Theta \mu_{kl} \mu_{k'l'}\} = \text{ch} \Theta + \mu_{kl} \mu_{k'l'} \text{sh} \Theta = \text{ch} \Theta (1 + \mu_{kl} \mu_{k'l'} \text{th} \Theta). \quad (2.35)$$

Используя (2.35), представим статистическую сумму следующим образом:

$$Q = (1 - x^2)^{-N} S, \quad (2.36)$$

$$S = \sum_{\{n\}} \prod_{k,l=1}^L (1 + x \mu_{kl} \mu_{kl+1}) (1 + x \mu_{kl} \mu_{k+1l}), \quad x = \text{th} \Theta. \quad (2.37)$$

Таким образом, искомая статистическая сумма является суммой большого числа полиномов по степеням x и μ_{kl} . Поскольку каждый узел (k,l) связан с четырьмя соседями, то каждое μ_{kl} может встретиться в полиноме в степенях от нулевой до четвертой. После суммирования по всем $\mu_{kl} = \pm 1$ члены, содержащие нечетные степени μ_k , обратятся в нуль, так что ненулевой вклад дадут только члены, содержащие μ_k в степенях 0, 2 и 4. Более того, поскольку $\mu_{kl}^0 = \mu_{kl}^2 = \mu_{kl}^4 = 1$, то каждый член полинома, содержащий все переменные μ_{kl} в четных степенях, даст вклад в сумму, пропорциональный полному числу конфигураций 2^N .

После этого Онзагер предложил, пожалуй, один из первых вариантов диаграммной техники для суммирования (2.36)-(2.37), которая в настоящее время широко используется в теории конденсированного состояния. Он заметил, что каждому члену полинома можно однозначно поста

вить в соответствие совокупность линий (графиков), соединяющих некоторые пары соседних узлов решетки. Так, изображенным на рис.8 графикам соответствуют члены полинома:

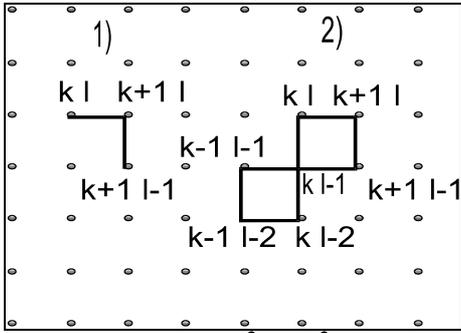


Рис.8. Диаграммная техника Онзагера на плоской квадратной решетке для модели Изинга

$$1) x^2 \mu_{kl}^2 \mu_{k+1l}^2 \mu_{k+1l-1}$$

$$(2.38)$$

$$2) x^8 \mu_{kl}^2 \mu_{k+1l}^2 \mu_{k+1l-1}^2 \mu_{kl-1}^4 \mu_{kl-2}^2 \mu_{k-1l-1}^2 \mu_{k-1l-2}^2$$

Каждой линии графика сопоставляется множитель x , а каждому ее концу - множитель μ_{kl} . Так как отличный от нуля вклад в статистическую сумму дают лишь члены полинома, содержащие четные степени μ_{kl} , то в каждом узле графика должны оканчиваться либо две, либо четыре связи. Другими словами, суммирование ведется только по замкнутым графикам, причем допускается самопересечение.

Окончательно, сумма Q может быть представлена в следующем виде:

$$Q = 2^N \sum_{\{r\}} x^r g_r . \quad (2.39)$$

где g_r - число замкнутых графиков, составленных из четного числа r связей.

Далее Онзагер разработал способ перебора графиков из суммы (2.39) с помощью специальной их классификации по длине связей r и использовал подход "блуждающей" шаг за шагом по решетке точки с вероятностью перехода, определяемой специальной матрицей перехода. Из-за экономии места мы приведем уже окончательный результат, а все подробности

расчета изложены в книге [16]. Окончательное *точное* выражение для статистической суммы имеет вид:

$$Q = 2^N (1 - x^2)^{-N} \times \prod_{p,q=1}^L \left[(1 + x^2)^2 - 2x(1 - x^2) \left(\cos \frac{2\pi p}{L} + \cos \frac{2\pi q}{L} \right) \right]^{1/2}. \quad (2.40)$$

З а д а ч и

2.5.7. Рассчитать свободную энергию двумерной модели Изинга $F = -1/\beta \ln Q$.

Решение. Используя выражение (2.40), находим:

$$F = -NT \ln 2 + NT \ln(1 - x^2) - \frac{1}{2} T \sum_{p,q=0}^L \left[(1 + x^2)^2 - 2x(1 - x^2) \left(\cos \frac{2\pi p}{L} + \cos \frac{2\pi q}{L} \right) \right].$$

Перейдем от суммирования к интегрированию в пределе $L, N \rightarrow \infty$:

$$F = -NT \ln 2 + NT \ln(1 - x^2) - \frac{NT}{2 (2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln \left[(1 + x^2)^2 - 2x(1 - x^2) (\cos \omega_1 + \cos \omega_2) \right] d\omega_1 d\omega_2.$$

2.5.8. Исследовать свободную энергию вблизи критической температуры и рассчитать критическую температуру.

Решение. Функция $F(T)$ имеет особую точку при том значении x ($x = \text{th}(V/T)$), при котором аргумент логарифма под знаком интеграла может обратиться в нуль. Как функция ω_1 и ω_2 этот аргумент минимален при $\cos \omega_1 = \cos \omega_2 = 1$, в этом случае он равен $(1 + x^2)^2 - 4x(1 - x^2)$. Это выражение имеет минимум, в котором оно обращается в нуль при $x = x_c = \sqrt{2} - 1$, при этом соответствующая температура T_c ($\text{th} V/T_c = x_c$) и является точкой фазового перехода. Можно показать, что

свободная энергия понижается при $T < T_c$, непрерывна при $T = T_c$, а теплоемкость испытывает логарифмическую особенность в точке перехода, т.е. это - типичный термодинамический переход второго рода. Таким образом, в двумерной модели Изинга наблюдается фазовый переход парамагнетик-ферромагнетик при конечной температуре.

2.5.9. Сравнить критическую температуру, полученную Онзагером, с результатом теории среднего поля.

Решение. Исходя из уравнения $\text{th}V/T_c = \sqrt{2} - 1$, находим $T_c = 2V / \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 2J$. Результат теории среднего поля: $T_c = ZV = 4V$. Таким образом, точное решение меньше приближенного “среднеполевого” примерно на величину $\sim 1/Z$. Интересно отметить, что с этой точки зрения в одномерном случае результат теории среднего поля дает также “завышенный результат” ($T_c = 2V$) по сравнению с *точным* ($T_c = 0$).

2.5.10. Используя выражение для свободной энергии, показать, что вблизи критической температуры зависимость свободной энергии непрерывна, а теплоемкость расходится логарифмически.

Решение. Необходимо разложиться по степеням $T - T_c$ и рассматривать только последний интегральный член в свободной энергии, имеющий особенности. После разложения аргумента логарифма вблизи его минимума по степеням $\omega_{1,2}$ и $T - T_c$ имеем:

$$F \sim \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln[At^2 + B(\omega_1^2 + \omega_2^2)] d\omega_1 d\omega_2, \quad t = T - T_c,$$

где A, B - постоянные. Расчитывая это выражение при $t \rightarrow 0$, находим: $F \sim -|T - T_c|^2 \ln|T - T_c|$, $C \sim \ln|T - T_c|$.

3. ФЛУКТУАЦИИ В ФЕРРОМАГНЕТИКАХ

Теория среднего поля неадекватно описывает область по температуре в непосредственной близости точки фазового перехода из-за того, что не учитывает флуктуации, резко возрастающие именно в окрестности этой точки при фазовом переходе второго рода. В этой главе мы учтем флуктуации и покажем, как это позволяет лучше описать экспериментальные данные по теплоемкости и восприимчивости в ферромагнетиках.

3.1. Ближний и дальний порядок. Функция корреляции

Введем понятие дальнего и ближнего порядка в спиновых моделях.

Типичный дальний порядок имеет место в случае упорядоченной ферромагнитной фазы, когда $\langle \mu_j \rangle \neq 0$, не зависит от номера узла и не спадает даже на большом расстоянии от узла j . Дальний порядок спонтанно исчезает в точке перехода.

Ближний порядок связан с локальными флуктуациями спинов на близких расстояниях. В теории среднего поля такие флуктуации не учитываются, поэтому в приближении Вейсса с исчезновением спонтанной намагниченности исчезает и энергия взаимодействия спинов, т.е. ближний порядок: $\langle \mu_i \mu_j \rangle = \langle \mu_i \rangle \langle \mu_j \rangle = 0$, если $\langle \mu_i \rangle = \langle \mu \rangle = 0$.

Однако если такое упорядочение имеет место, то $\langle \mu_i \mu_j \rangle \neq 0$, даже если $\langle \mu \rangle = 0$, т.е. корреляции возможны и за точкой фазового перехода. Исследуем возможность реализации ближнего порядка в спиновой системе и оценим функцию корреляции $\langle \mu_i \mu_j \rangle$. Рассмотрим ситуацию выше точки фазового перехода $T > \Theta$. В этом случае спонтанная намагниченность $\langle \mu \rangle = 0$. Выделим два спина и оценим сначала корреляцию

$\langle \mu_1 \mu_2 \rangle$ в пренебрежении флуктуациями остальных спинов. Пусть внешнее поле равно нулю. Тогда

$$\begin{aligned} \langle \mu_1 \mu_2 \rangle &= \frac{Sp \mu_1 \mu_2 \exp(\beta V_{12} \mu_1 \mu_2)}{Sp \exp(\beta V_{12} \mu_1 \mu_2)} = \\ &= \left(e^{\beta V_{12}} + e^{\beta V_{12}} - e^{-\beta V_{12}} - e^{-\beta V_{12}} \right) / \left(2e^{\beta V_{12}} + 2e^{-\beta V_{12}} \right) = \text{th} \beta V_{12}. \end{aligned}$$

Учтем, что $V_{12} \cong V$ - взаимодействие с ближайшими соседями, а также $\text{th}[\beta V] (T > \Theta) \geq \text{th} [V/\Theta]$. Кроме того,

$$V(0) = \sum_j V_{ij} = \sum_j V(|r_i - r_j|) = VZ, \text{ где } Z - \text{ число ближай-}$$

ших соседей, а также $\Theta = V(0) \cong VZ$. Отсюда несложно оценить масштаб ближних корреляций: $\langle \mu_1 \mu_2 \rangle \sim \text{th} 1/Z \sim 1/Z$ при $Z \gg 1$. Значит, чем больше число ближайших соседей, тем слабее корреляции, тем лучше работает приближение среднего поля.

Отметим, что граничное значение Z_c , когда корреляции начинают существенно разрушать дальний порядок, зависит от модели. Как мы видели в предыдущей главе, в одномерной модели Изинга при $Z=2$ переход отсутствует, а в двумерной решетке с $Z=4$ флуктуации уже не разрушают дальний порядок. Таким образом, можно оценить, что для модели Изинга с взаимодействием только ближайших соседей критическое значение $Z_c \sim 3$.

3.2. Функция корреляции магнитных моментов в модели Изинга

Определим более точно функцию парной корреляции $\langle \mu_1 \mu_2 \rangle$, которая, вообще говоря, не обращается в нуль при исчезновении дальнего порядка. Мы уже оценили ее порядок величины $\langle \mu_1 \mu_2 \rangle \sim 1/Z$. Чтобы получить количественный результат, используем ту же идею самосогласованного поля. Рассмотрим модель Изинга при $T > \Theta$, $T \rightarrow \Theta$. Пусть имеется

выделенный момент со значением $\mu_j=+1$. Тогда функция корреляции есть просто среднее $\langle \mu_2 \rangle$ в удовлетворяющем этому условию ансамбле:

$$\langle \mu_1 \mu_2 \rangle = \frac{\langle \mu_2 \rangle}{\mu_1 = 1} = \frac{Sp \mu_2 \exp(-\beta H_{eff})}{Sp \exp(-\beta H_{eff})}. \quad (3.1)$$

Здесь H_{eff} - эффективный гамильтониан, соответствующий этому ансамблю.

Полагая внешнее поле нулевым, учтем, что действующее на спин 2 внутреннее поле, создаваемое спином 1, а также и остальными спинами, равно

$$H_2 = V_{21} + \sum_{j \neq 1} V_{2j} \mu_j. \quad (3.2)$$

Среднее поле соответственно, имеет вид

$$\langle H_2 \rangle = V_{21} + \sum_{j \neq 1} V_{2j} \langle \mu_j \rangle = V_{21} + \sum_{j \neq 1} V_{2j} \langle \mu_1 \mu_j \rangle. \quad (3.3)$$

Учитывая уравнение Вейсса (1.11), немедленно получаем

$$\langle \mu_1 \mu_2 \rangle = \text{th} \beta \langle H_2 \rangle = \text{th} \beta \left\{ V_{21} + \sum_{j \neq 1} V_{2j} \langle \mu_1 \mu_j \rangle \right\}. \quad (3.4)$$

Обозначим функцию корреляции $\langle \mu_1 \mu_j \rangle = g(\vec{R}_1 - \vec{R}_j)$. Перепишем уравнение (3.4):

$$g(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) = \text{th} \beta \left\{ V(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) + \sum_{j \neq 1} V(\vec{R}_2 - \vec{R}_j) g(\vec{R}_1 - \vec{R}_j) \right\}. \quad (3.5)$$

В приближении Вейсса функция $g(\vec{R}_1 - \vec{R}_j) = 0$. Ищем нетривиальное решение и положим

$$g(\vec{R}_1 - \vec{R}_j) \ll 1, \quad V(\vec{R}_2 - \vec{R}_j) \ll \Theta.$$

Последнее неравенство справедливо в пределе большого числа ближайших соседей $1/Z \ll 1$ ($\Theta = ZV$). Отсюда:

$$g(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) = \beta \left\{ V(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) + \sum_{j \neq 1} V(\vec{R}_2 - \vec{R}_j) g(\vec{R}_1 - \vec{R}_j) \right\}. \quad (3.6)$$

Уравнение (3.6) решаем преобразованием Фурье:

$$\begin{aligned} g(\vec{R}) &= \frac{1}{N} \sum_q g(\vec{q}) \exp(i \vec{q} \vec{R}), \\ g(\vec{q}) &= \sum_{i \neq j} g(\vec{R}_i - \vec{R}_j) \exp(i \vec{q} [\vec{R}_i - \vec{R}_j]), \\ V(\vec{q}) &= \sum_{i \neq j} V(\vec{R}_i - \vec{R}_j) \exp(i \vec{q} [\vec{R}_i - \vec{R}_j]). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Проинтегрировав уравнение (3.6) с множителем $\exp(-i \vec{q} \vec{R})$ по координате, получаем для фурье-компоненты корреляционной функции:

$$g(\vec{q}) = \beta \left\{ V(\vec{q}) + g(-\vec{q}) V(\vec{q}) \right\}. \quad (3.8)$$

Ввиду однородности и изотропности пространства

$$g(\vec{R}) = g(|\vec{R}|), \quad V(\vec{R}) = V(|\vec{R}|),$$

откуда следует, что $g(\vec{q}) = g(-\vec{q})$ (это несложно показать прямо из (3.7)). Окончательно получаем:

$$g(\vec{q}) = \frac{\beta V(\vec{q})}{1 - \beta V(\vec{q})}, \quad T > \theta. \quad (3.9)$$

В длинноволновом пределе функция $V(q) = V(0) = \theta$. В свою очередь

$$g(\vec{q}) = \frac{\beta \theta}{1 - \theta/T} \rightarrow \infty, \quad T \rightarrow \theta.$$

Таким образом, видно, что фурье-компонента расходится при приближении к точке фазового перехода. Исследуем пространственную зависимость функции корреляции:

$$g(\vec{R}) = \frac{1}{N} \sum_q \frac{\beta V(\vec{q})}{1 - \beta V(\vec{q})} \exp(i \vec{q} \vec{R}) . \quad (3.10)$$

Рассмотрим длинноволновый предел $q \rightarrow 0$ (т.е. исследуем ситуацию в пределе больших корреляционных длин $R \rightarrow \infty$ около точки фазового перехода). Тогда фурье-компонента взаимодействия приближенно может быть представлена следующим образом:

$$\begin{aligned} V(\vec{q})_{q \rightarrow 0} &= \sum_r V(|r|) \left(1 - i \vec{q} \vec{r} - \frac{(\vec{q} \vec{r})^2}{2} \right) = \\ &= V(0) - \alpha q^2, \quad \alpha = \sum_r V(|r|) \frac{r^2}{3}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Параметр α по порядку величины равен $\alpha \sim V(0)/\Gamma_{\text{хар}}^2 \sim \Theta/\Gamma_{\text{хар}}^2$, где $\Gamma_{\text{хар}}$ - характерная длина, на которой действует взаимодействие (можно показать, что представление (3.11) приводит к экспоненциальному спаду

$V(r) \sim (1/r) \exp(-r/\Gamma_{\text{хар}})$ - см. задачу 3.2.1).

Подставляя (3.11) в (3.10), находим пространственную зависимость корреляционной функции в пределе $\alpha \rightarrow 0$ (интеграл (3.10) берется в сферических координатах по q , так что

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_q &= \frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} \int_0^\infty q^2 dq \int_{-1}^1 d \cos \theta \int_0^{2\pi} d\varphi : \\ g(\vec{r}) &\cong \frac{\exp[-r/d]}{r}, \\ d &= \frac{1}{\sqrt{\frac{1 - \beta V(0)}{\beta \alpha}}} \approx \frac{1}{\sqrt{\frac{T - \theta}{\alpha}}}, \end{aligned} \quad (3.12)$$

где d - характерная корреляционная длина; Ω_0 - объем элементарной ячейки.

Видно, что корреляционная длина расходится именно в точке фазового перехода по закону $d \approx \frac{1}{\sqrt{T - \theta}}$. Таким образом, магнитные моменты начинают выстраиваться в блоки с бесконечно большими размерами. Пока не наступил фазовый переход, эти блоки (возникающие флуктуационным образом) ориентированы беспорядочно, так что средний магнитный момент $\langle \mu \rangle$ по-прежнему равен нулю. Эти флуктуационные проявления дальнего порядка на фоне ближнего завершаются в точке перехода, когда все блоки коррелированно ориентируются по полю.

З а д а ч и

3.2.1. Показать, что длинноволновое представление взаимодействия $V(\vec{q})_{q \rightarrow 0} = V(0) - \alpha q^2$ приводит к экспоненциальному спаду его в координатном представлении.

Ответ:

$$V(q) \approx \frac{V(0)}{1 + \alpha' q^2}, \quad \alpha' = \alpha / V(0) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \sum_q \frac{V(0)}{1 + \alpha' q^2} \exp(i \vec{q} \cdot \vec{r}) = \frac{V(0)\Omega_0}{4\pi r \alpha'} \exp(-r / \sqrt{\alpha'}).$$

3.2.2. Рассчитать координатную зависимость функции корреляции $g(r)$, исходя из вида фурье-компоненты взаимодействия (3.11).

3.3. Флуктуации магнитных моментов вблизи фазового перехода

Определим компоненты Фурье плотности спинов:

$$\mu_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i \mu_i \exp(-i \vec{q} \vec{R}_i). \quad (3.13)$$

В отсутствие внешнего поля при температурах выше критической $\langle \mu_q \rangle = 0$. Представляют интерес, однако, флуктуации величины $\langle \mu_q \rangle$, определяемые как средний квадрат модуля фурье-компоненты:

$$\begin{aligned} \langle |\mu_q|^2 \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{ij} \langle \mu_i \mu_j \rangle \exp\{i \vec{q} (\vec{R}_i - \vec{R}_j)\} = \\ &= \frac{1}{N} \left[\sum_i \langle \mu_i^2 \rangle + \sum_{i \neq j} \langle \mu_i \mu_j \rangle \exp\{i \vec{q} (\vec{R}_i - \vec{R}_j)\} \right]. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Учитывая, что в первом слагаемом (3.14) $\mu_i^2 = 1$, а второе слагаемое - фурье-компонента корреляционной функции $g(r)$, умноженная на N , имеем

$$\langle |\mu_q|^2 \rangle = 1 + g(\vec{q}) = \frac{1}{1 - \beta V(\vec{q})}. \quad (3.15)$$

При $T \rightarrow \Theta$ флуктуации расходятся (так как $V(q) \sim V(0) = \Theta$), что и способствует появлению ориентированных доменов большого размера вблизи точки перехода.

При $T < \Theta$ в ферромагнитной фазе ($R \neq 0$) можно также получить корреляции магнитных моментов

$$\langle |\mu_q|^2 \rangle = \frac{1 - R^2}{1 - \beta V(\vec{q}) (1 - R^2)}. \quad (3.15a)$$

3.4. Теплоемкость в модели Изинга с учетом флуктуаций

В п.2.3 главы 2 мы уже рассматривали теплоемкость системы в приближении среднего поля. Результаты вблизи точки перехода резко отличаются от эксперимента (см. рис.6 и 7): расходимость (λ -точка), наблюдаемая в эксперименте, рез-

ко контрастирует с результатом среднего поля (2.15), согласно которому теплоемкость C в точке перехода конечна (и равна в модели Изинга $3/2kN$). Учтем флуктуации магнитных моментов, играющие существенную роль именно вблизи точки перехода, и рассчитаем их вклад в теплоемкость системы. По определению при нулевом внешнем поле

$$C = dE / dT, \quad E = \langle \bar{H} \rangle = -1/2 \sum_{i \neq j} V_{ij} \langle \mu_i \mu_j \rangle. \quad (3.16)$$

Учитывая, что

$$V_{ij} = 1/N \sum_q V(\vec{q}) \exp(iq[\vec{R}_i - \vec{R}_j]),$$

получаем:

$$E = -1/2 \sum_q V(\vec{q}) g(q) = -1/2 \sum_q \frac{V(\vec{q})}{1 - \beta V(\vec{q})}. \quad (3.17)$$

Рассчитываем удельную (на 1 спин) теплоемкость вблизи фазового перехода, учитывая вклад только длинноволновых поправок ($V(q) = V(0) - \alpha q^2$):

$$\begin{aligned} C &= 1/2N \sum_q \frac{\beta^2 V^2(\vec{q})}{(1 - \beta V(\vec{q}))^2} \approx \\ &\approx_{\substack{q \rightarrow 0 \\ T \rightarrow \theta}} \frac{\Omega_0 V^2(0)}{4(\pi\alpha)^2} \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{(q^2 + \aleph^2)^2} \propto \frac{1}{\aleph}, \quad \aleph^2 = \frac{T - \theta}{\alpha}. \end{aligned} \quad (3.17a)$$

Окончательно теплоемкость расходится вблизи области фазового перехода по закону:

$$C \sim \frac{1}{\sqrt{T - \theta}}, \quad T > \theta. \quad (3.18)$$

Это согласуется с экспериментом (см. рис.7).

Заметим, что при $T < \theta$ также можно показать, что теплоемкость расходится по закону:

$$C \sim \frac{1}{\sqrt{\theta - T}}. \quad (3.19)$$

Таким образом, наблюдаемую на эксперименте λ -расходимость около точки фазового перехода (см. рис.7) можно объяснить вкладом флуктуаций в теплоемкость.

Задачи

3.4.1. Рассчитать теплоемкость модели Изинга с учетом корреляций, учитывая выражение для энергии (3.17) через флуктуации.

Ответ:

$$C = 1/2N \sum_q \frac{\beta^2 V^2(\vec{q})}{(1 - \beta V(\vec{q}))^2} \approx \underset{T \rightarrow \theta}{q \rightarrow 0} \frac{\Omega_0 V^2(0)}{16\pi\alpha^2 \mathfrak{N}}, \quad \mathfrak{N}^2 = \frac{T - \theta}{\alpha}.$$

3.5. Магнитная восприимчивость в модели Изинга с учетом флуктуаций

Рассчитаем восприимчивость системы с точки зрения флуктуаций магнитных моментов также вблизи точки перехода при $T > \theta$. Сначала выведем полезную формулу, связывающую восприимчивость системы с флуктуациями магнитного момента.

Статистическая сумма в присутствии внешнего поля равна:

$$Q = Sp \exp\{-\beta(W - \sum \mu_i H)\}. \quad (3.20)$$

где W - оставшая часть гамильтониана, связанная с взаимодействием спинов.

Дифференцируя это выражение по полю H , получаем:

$$\begin{aligned} \partial \ln Q / \partial \beta H &= \langle \sum \mu_i \rangle = NR, \\ \partial^2 \ln Q / \partial (\beta H)^2 &= N \partial R / \partial \beta H = \quad (3.21) \\ &= \langle (\sum \mu_i)^2 \rangle - \langle \sum \mu_i \rangle^2. \end{aligned}$$

В отсутствии дальнего порядка $\langle \mu_i \rangle = 0$, и из (3.21) находим восприимчивость (в безразмерном виде - $\chi \equiv \chi / \mu_0^2$):

$$\begin{aligned} \chi &= \partial R / \partial H = \frac{\beta}{N} \langle (\sum \mu_i)^2 \rangle - \langle \sum \mu_i \rangle^2 = \\ &= \frac{\beta}{N} \langle (\sum \mu_i)^2 \rangle = \lim_{q \rightarrow 0} \langle |\mu_q|^2 \rangle / T. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Отсюда, учитывая (3.15), находим, что восприимчивость расходится в точке фазового перехода по закону Кюри-Вейсса

$$\chi = \frac{1}{T - V(0)} = \lim_{T \rightarrow \theta} \frac{1}{T - \theta}. \quad (3.23)$$

Результат (3.23) совпадает с расчетами среднего поля (2.18)-(2.19), что говорит о том, что приближение, использованное нами для вычисления флуктуаций, тесно связано с приближением молекулярного поля, которое мы использовали для вычисления намагниченности. Более того, если учесть выражение для флуктуации (3.15а), справедливое при $T < \theta$, то можно получить выражение для восприимчивости, полностью совпадающее со среднеполевым результатом (2.18).

Отметим, что соотношение (3.22), связывающее восприимчивость и квадрат среднего момента и среднее от квадрата момента, - общее, и оно справедливо во всем диапазоне температур (см. также задачу 2.4.2).

3.6. Нарушение симметрии при фазовом переходе ферромагнетик-парамагнетик

Как отмечалось во введении, фазовые переходы характеризуются нарушением симметрии. Исследуем с этой точки

зрения фазовый переход ферромагнетик-парамагнетик в модели Изинга. Для простоты внешнее поле положим равным нулю. Заметим, что Гамильтониан модели

$$\overline{H} = -1/2 \sum_{ij} V_{ij} \mu_i \mu_j \quad (3.24)$$

инвариантен относительно преобразования:

$$\mu_1 \rightarrow -\mu_1, \mu_2 \rightarrow -\mu_2, \dots, \mu_N \rightarrow -\mu_N.$$

Это так называемая “зеркальная” симметрия. Причем гамильтониан удовлетворяет этой симметрии в любом состоянии: как в упорядоченном, так и в разупорядоченном. Однако самому состоянию системы не обязательно присуща эта группа симметрии, и она может не сохраняться по разные стороны фазового перехода. Покажем, что после точки перехода, в упорядоченной ферромагнитной фазе эта симметрия нарушается. В этой области справедливо уравнение Вейсса: $R = \text{th } R\theta/T$. В принципе, оно имеет решение как $R > 0$, так и $R < 0$, т.е. оно инвариантно относительно инверсии параметра порядка $R \rightarrow -R$. Рассмотрим средний момент на узле:

$$\begin{aligned} \langle \mu_i \rangle &= \frac{Sp \mu_i \exp(\beta / 2 \sum_{ij} V_{ij} \mu_i \mu_j)}{Sp \exp(\beta / 2 \sum_{ij} V_{ij} \mu_i \mu_j)} = \\ &= \frac{Sp \mu_i \exp(\beta / 2 \sum_{ij} V_{ij} \mu_i \mu_j)}{Sp \exp(\beta / 2 \sum_{ij} V_{ij} \mu_i \mu_j)} = -\langle \mu_i \rangle. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Из (3.25) следует, что $\langle \mu_i \rangle = 0$. Однако в упорядоченной фазе $\langle \mu_i \rangle \neq 0$, и есть выделенное направление, нарушающее это преобразование. Этот парадокс связан с нарушением этой группы симметрии при переходе в ферромагнитное состояние, поэтому “зеркальная” симметрия $\mu_1 \rightarrow \mu_1, \mu_2 \rightarrow \mu_2, \dots, \mu_N \rightarrow \mu_N$ отсутствует, когда система находится в конденсированной фазе.

4. СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ В ФЕРРОМАГНЕТИКАХ В МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА

Модель Изинга удобна для расчета и позволяет в первом приближении описать как конденсированную фазу при низких температурах, так и флуктуационную область вблизи области фазового перехода. Однако малое число степеней свободы магнитного момента на узле не позволяет адекватно отразить все многообразие свойств системы магнитных моментов. Для реальных систем наиболее предпочтительна модель Гейзенберга. Только с ее помощью удастся описать специфические спиновые возбуждения в ферро- и антиферромагнетиках - магноны. В данной главе мы рассмотрим квантовую модель Гейзенберга и исследуем основное состояние и возбуждения системы в ферромагнитном состоянии.

4.1. Квантовая модель Гейзенберга

Рассмотрим гамильтониан Гейзенберга:

$$\overline{H} = -1/2 \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j - \vec{H} \sum_i \vec{S}_i. \quad (4.1)$$

Здесь J_{ij} - обменный интеграл; S_l - оператор спина на l -м узле: $\vec{S}_l = \{S_l^X, S_l^Y, S_l^Z\}$. Для компонент спина выполняются обычные коммутационные соотношения:

$$\begin{aligned} S_l^X S_l^Y - S_l^Y S_l^X &= i \delta_{ll'} S_l^Z; \\ S_l^Z S_l^X - S_l^X S_l^Z &= i \delta_{ll'} S_l^Y; \\ S_l^Y S_l^Z - S_l^Z S_l^Y &= i \delta_{ll'} S_l^X. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Компоненты спина можно выразить также через матрицы Паули (для спина $S=1/2$):

$$\sigma^X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

Матрицы Паули действуют на двухкомпонентные волновые функции:

$$\psi^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Вводят также матрицы $\sigma^+ = \sigma^X + i\sigma^Y$ и $\sigma^- = \sigma^X - i\sigma^Y$, которые переворачивают спины в состояниях $\psi^{1,2}$:

$$\sigma^+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv 0, \quad \sigma^- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma^- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv 0. \quad (4.4)$$

Аналогичные свойства и у операторов S^+ и S^- :

$$S^+ = S^X + iS^Y; \quad S^- = S^X - iS^Y. \quad (4.5)$$

Задачи

4.1.1. Исходя из определения механического момента $\vec{M} = [\vec{r}, \vec{p}]$ и коммутационных соотношений для оператора координаты и импульса $[p_i, x_j] = -i\hbar\delta_{ij}$, показать, что $\vec{M} = \hbar\vec{S}$, где \vec{S} - оператор спина с коммутационными соотношениями (4.2).

Введение к задачам 4.1.2-4.1.15. Прежде, чем исследовать далее квантовую модель, полезно рассмотреть классическую модель Гейзенберга с взаимодействием (4.1) в виде (введем явно размерность μ_0):

$$\bar{H} = -\mu_0^2 / 2 \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j - \mu_0 \vec{H} \sum_i \vec{S}_i.$$

Рассчитаем ее в приближении среднего поля для ферромагнитной ситуации ($J > 0$) и получим термодинамические величины: статистическую сумму, свободную энергию, параметр порядка, теплоемкость, намагниченность, восприимчивость.

4.1.2. Получить гамильтониан классической ферромагнитной модели Гейзенберга в приближении среднего поля, пренебрегая квадратичными флуктуациями магнитных моментов ($[\langle S \rangle - S]^2 \rightarrow 0$). Ввести взаимодействие ближайших соседей Z .

Решение. Учитывая сохраняющее требуемую точность среднего поля разложение взаимодействующего члена в виде $S_k S_{k'} \approx \langle S_k \rangle S_{k'} + S_k \langle S_{k'} \rangle - \langle S_k \rangle \langle S_{k'} \rangle$, получаем:

$$\vec{H} = -\mu_0 \sum_i \vec{S}_i (\vec{H} + \vec{H}_0) + \frac{1}{2} \mu_0 \vec{H}_0 \vec{R} S N, \quad \vec{H}_0 = \mu_0 \sum_j J_{ij} \vec{R} S$$

- среднее поле, в приближении ближайших соседей $\vec{H}_0 = ZJ\mu_0 S \vec{R}$, где $\vec{R} = \langle \vec{S}_i \rangle / S$ - параметр порядка. В дальнейшем введем $\mu_0 S$ в определение R так, что $\vec{R} = \mu_0 \langle \vec{S}_i \rangle$ имеет смысл среднего магнитного момента на узле, и среднее поле будет иметь вид $\vec{H}_0 = ZJ \vec{R}$.

4.1.3. Вычислить статистическую сумму Q в приближении среднего поля для классической ферромагнитной модели Гейзенберга.

Решение. Степени свободы системы определяются углом θ_i между полем $H+H_0$ (поле \vec{H}_0 также направлено по полю \vec{H}) и спином S_i , поэтому:

$$Q = \prod_i \exp\{-\beta R H_0 / 2\} \int d\Omega_i \exp\{\beta \mu_0 S (H + H_0) \cos \theta_i\} = \exp\{-\beta N R H_0 / 2\} [4\pi (\text{sh}\{\beta \mu_0 (H + H_0) S\} / \beta \mu_0 (H + H_0) S)]^N.$$

4.1.4. Рассчитать свободную энергию системы F .

Ответ:

$$F = -T \ln Q = \frac{1}{2} N H_0 R - N T \ln [4\pi (\text{sh}\{\beta \mu_0 (H + H_0) S\} / \beta \mu_0 (H + H_0) S)].$$

4.1.5. Найти уравнение для равновесного значения R , т.е. уравнение на параметр порядка в приближении среднего поля в классической модели Гейзенберга.

Ответ:

$\partial F / \partial R = 0 \Rightarrow R = \mu_0 S F_L \{ \beta \mu_0 S (H + H_0) \}$, $F_L(x) = \text{cth}(x) - 1/x$, $F_L(x)$ - функция Ланжевена (см. задачи 1.4.2-1.4.3).

4.1.6. Определить критическую температуру перехода в ферромагнитное состояние исходя из самосогласованного уравнения для параметра порядка.

Решение. Пользуясь асимптотами функции Ланжевена (см. задачу 1.4.3), при $R \rightarrow 0$ имеем $\theta = ZJ(\mu_0 S)^2 / 3$.

4.1.7. Разложить свободную энергию по параметру порядка вблизи критической температуры и получить ее температурную зависимость с точностью до $|(T - \theta)/\theta|^3$.

Решение. Используем следующие полезные разложения:

$$\text{sh}x/x = 1 + x^2 / 6 + x^4 / 120 + x^6 / 5020,$$

$$\ln(\text{sh}x/x) = x^2 / 6 - x^4 / 180 + x^6 / 2835.$$

Разлагаем полученную в задаче 4.1.4 свободную энергию по параметру порядка:

$$F / N = -T \ln(4\pi) - \frac{1}{2} ZJy(1+y)R^2 + \frac{1}{20\theta} Z^2 J^2 (1+3y)R^4 + \\ + \frac{1}{105\theta^2} Z^3 J^3 R^6, \quad y = \frac{\theta - T}{\theta} \ll 1.$$

Варьируя F по R , находим температурную зависимость R :

$R^2 = \frac{5\theta}{ZJ} y(1 - \frac{4}{7}y)$. Подставляя ее в свободную энергию, окончательно находим:

$$F(R) / N - F(R=0) / N = -\frac{5\theta}{4} \left(\frac{\theta - T}{\theta} \right)^2 + \frac{5\theta}{84} \left(\frac{\theta - T}{\theta} \right)^3.$$

4.1.8. Исследовать поведение теплоемкости при $T \rightarrow \Theta$.

Ответ: $C/N = -[T/N] \partial^2 F / \partial T^2 = 5/2 - 20(\theta - T)/7\theta$.

4.1.9. Найти выражение для продольной намагниченности исходя из свободной энергии.

Ответ: $M = -\partial F / \partial H = NR$.

4.1.10. Выразить продольную магнитную восприимчивость χ через производную от функции Ланжевена $F_L'(x) = dF_L/dx$.

Ответ: $\chi = dR / dH|_{H=0} = \frac{(\mu_0 S)^2 F_L'(\beta \mu_0 H_0 S)}{T - (\mu_0 S)^2 Z F_L'(\beta \mu_0 H_0 S)}$.

4.1.11. Найти магнитную восприимчивость при $T > \Theta$.

Ответ: $\chi(R = H_0 = 0) = \frac{\mu_0^2 S^2}{3(T - \theta)}$.

4.1.12. Найти продольную магнитную восприимчивость при $T \rightarrow \Theta - 0$.

Решение. Пользуясь асимптотами функции Ланжевена (см. задачу 1.4.3), получаем: $\chi = (\mu_0^2 S^2) / 6(\theta - T)$.

4.1.13. Найти продольную магнитную восприимчивость при $T \rightarrow 0$.

Ответ: $\chi \approx T / (ZJ\mu_0^2 S^2)$.

4.1.14. Исследовать поведение параметра порядка $R(T)$ при $T \rightarrow \Theta - 0$ и $T \rightarrow 0$.

Ответ:

$$R = \begin{cases} \mu_0 S(1 - T/3\theta), & T \rightarrow 0; \\ R^2 = 5\theta/ZJ[y - 4y^2/7 + 4y^3/49], y = (\theta - T)/\theta, & T \rightarrow \theta - 0. \end{cases}$$

4.1.15. Выразить теплоемкость классической модели Гейзенберга C через параметр порядка R , используя $C = -T \partial^2 F / \partial T^2$. Рассмотреть предельные случаи $T \rightarrow 0$ и $T \rightarrow \Theta$.

Ответ:

$$C / N = - \frac{ZJ}{2} \partial R^2 / \partial T,$$

$$C / N = 5 / 2 [1 - 8(\theta - T) / 7\theta], T \rightarrow \theta,$$

$$C / N = 1 + \theta / 3T, T \rightarrow 0.$$

Анализ результатов расчетов в приближении среднего поля модели Гейзенберга по задачам 4.1.2 - 4.1.15. Как мы видим, приближение среднего поля хорошо описывает фазовый переход и закон Кюри-Вейсса для восприимчивости (задачи 4.1.11, 4.1.12). Однако в отличие от модели Изинга восприимчивость линейно спадает при низких температурах (задача 4.1.13), что связано с отсутствием щели в спектре за счет большого числа степеней свободы у классического спина и вырождения по углу вращения ϕ вокруг оси z). Более того, теплоемкость не стремится к нулю при $T \rightarrow 0$ (задача 4.1.15), что является нарушением теоремы Нернста и связано с упомянутым вырождением основного состояния (напомним, что теорема Нернста справедлива для невырожденного основного состояния системы). С другой стороны, далее покажем, что при низких температурах все степени свободы у спина “вымерзают”, кроме двух изинговских: по полю и против, так что хорошим приближением для Гейзенберговского ферромагнетика является в этом случае модель Изинга. Поэтому при $T \rightarrow 0$ нельзя классическим подходом адекватно описать поведение системы и необходимо корректно использовать квантовое описание, чему и будут посвящены следующие параграфы.

4.2. Основное состояние ферромагнетика

в модели Гейзенберга

Рассмотрим модель Гейзенберга при нулевой температуре. Пусть обменный интеграл $J > 0$, т.е. исследуем ферромагнитную ситуацию. Положим для упрощения изложения внешнее поле равным нулю. Обозначим $|S^z\rangle_l$ волновую функцию спина на узле l с проекцией S^z на ось z . Теперь значение проекции спина S^z на узле (в отличие от модели Изинга) может принимать целый ряд значений. В основном состоянии все спины направлены в одну сторону (например, по оси z) с максимальным значением проекции. Тогда оператор z -й проекции спина: $S_l^z |S^z\rangle_l = S_l^z |S^z\rangle_l$ сохраняет спин на узле, и его собственное число $S = S_{\max}$, т.е. модулю полного спина (обычно $S_{\max} \sim 2-3$).

$\uparrow \uparrow \uparrow$
 $\uparrow \uparrow \uparrow$
 $\uparrow \uparrow \uparrow$

Введем соответствующую полную волновую функцию основного состояния:

$$|0\rangle = |S^z\rangle_1 |S^z\rangle_2 \dots |S^z\rangle_l \dots |S^z\rangle_N. \quad (4.6)$$

Отметим, что оператор z -й проекции спина коммутирует с гамильтонианом: $\overline{H} S_l^z - S_l^z \overline{H} = 0$, т.е. полная проекция на ось z сохраняется.

Покажем, что $\overline{H}|0\rangle = E_0|0\rangle$, где E_0 - энергия основного состояния гамильтониана с повернутыми в сторону оси z спинами, и рассчитаем E_0 . Используя определения (4.5), перепишем гамильтониан в следующем виде:

$$\overline{H} = -1/2 \sum_{i \neq j} J_{ij} \{ S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \}. \quad (4.7)$$

Рассчитаем прежде всего действие операторов S^+ и S^- на $|0\rangle$. Покажем, что они увеличивают (уменьшают) z -проекцию спина на узле на единицу. Для этого, учитывая, что

$S_l^z |S\rangle_l = S |S\rangle_l$, получим для какого-либо узла (его индекс не будем писать) следующее:

$$S^z S^+ |S'\rangle = [S'(S^x + iS^y) + S^x + iS^y] |S'\rangle = (S'+1)S^+ |S'\rangle, \quad (4.8)$$

т.е. z-проекция состояния $S^+ |S'\rangle$ равна $S'+1$. Отсюда $S^+ |S'\rangle = |S'+1\rangle$. Аналогично можно показать $S^- |S'\rangle = |S'-1\rangle$. Отсюда немедленно следует, что состояние $S^+ |S'\rangle = 0$ при $S'=S=S_{\max}$, так как больше значение спина быть не может. Тогда при действии на волновую функцию $|0\rangle$ гамильтониана (4.7) вклад даст только член с z-проекцией:

$$\overline{H}|0\rangle = -\frac{1}{2} \sum_{l,l'} J_{ll'} S^2 |0\rangle; \quad E_0 = -\frac{1}{2} \sum_{l,l'} J_{ll'} S^2. \quad (4.9)$$

Мы получили согласно (4.9) энергию основного состояния, представляющего собой систему сонаправленных (по оси z) спинов.

4.3. Возбуждения в гейзенберговском ферромагнетике. Магноны

Рассмотрим теперь низшие возбужденные (над основным) состояния ферромагнетика. Пусть температура $T \neq 0$, и $T \ll \Theta$. В этом случае z-проекция спина на узле уже не обязательно равна максимальному значению S . Операторы S^+ и S^- теперь могут “перемещать” спины (вернее, уменьшать и увеличивать на единицу) с узла на узел, не выходя за предельное значение. Так, если на узле l была проекция S'_l , а на узле l' - проекция $S_{l'}$, то

$$S_l^+ S_{l'}^- \left| \begin{array}{cc} \uparrow & \uparrow \\ \uparrow S_{l'} & \uparrow S'_l \\ \uparrow & \uparrow \end{array} \right\rangle = \left| \begin{array}{cc} \uparrow & \uparrow \\ \uparrow S_{l'} - 1 & \uparrow S'_l + 1 \\ \uparrow & \uparrow \end{array} \right\rangle.$$

Спины перемещаются с узла l' на узел l . Для такого “движения” (спиновой волны) можно ввести элементарные возбужде-

ния магнитного момента - магноны. Эти возбуждения можно считать невзаимодействующими при их малой плотности вблизи нулевой температуры. Удобно новые квазичастицы (магноны) ввести как разницу между возбужденным и невозбужденным состоянием узла, т.е. их плотность $n_l = S - S_l^z$, при этом $n_l \ll 1$. На языке возбуждений оператор S^+ теперь уничтожает возбуждение на узле, S^- - рождает его. Соответственно, и волновую функцию можно отсчитывать от основного состояния, т.е. рассматривать только число возбуждений на узлах:

$$|\psi\rangle = |n_1\rangle |n_2\rangle \dots |n_l\rangle \dots |n_N\rangle. \quad (4.10)$$

Введем операторы рождения и уничтожения на узлах: $a_l^+ = AS_l^-, a_l^- = AS_l^+$, где A - некая нормировочная постоянная, требующая определения. Кроме того, нас интересует действие этих операторов на узельную функцию: $a_l^+ |n\rangle = ?$, $a_l^- |n\rangle = ?$

Рассмотрим коммутатор:

$$aa^+ - aa^+ = \frac{1}{A^2} (S^+ S^- - S^- S^+) = \frac{2i}{A^2} (S^Y S^X - S^X S^Y) = \frac{2S^Z}{A^2}. \quad (4.11)$$

Из (4.11) следует, что если положить $A = \sqrt{2S^Z}$, то получаем соотношение коммутации, соответствующее операторам статистики Бозе: $aa^+ - a^+a = 1$, если учесть также, что проекция на ось z - хорошее квантовое число, то при условии $n_l \ll 1$ она равна максимальному значению S , т.е. $S^z \approx S$. Немедленно следует также полезное соотношение между оператором числа возбуждений n_l и проекцией спина на ось z :

$$S_l^Z = S - a_l^+ a_l = S - n_l.$$

Таким образом, мы ввели новые бозевские возбуждения - магноны:

$$a_i^+ = \frac{S_i^-}{\sqrt{2S}}, \quad a_i^- = \frac{S_i^+}{\sqrt{2S}}, \quad a_i^+ a_i = n_i = S - S_i^z. \quad (4.12)$$

Операторы (4.12) действуют на узельные функции обычным образом в соответствии со статистикой Бозе:

$$a_i^- |n_i\rangle = \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle, \quad a_i^+ |n_i\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_i + 1\rangle, \quad a_i^+ a_i |n_i\rangle = n_i |n_i\rangle. \quad (4.13)$$

Покажем, что в представлении магнонов при переходе из локальных операторов 'S' к операторам спиновых волн 'a' гамильтониан диагонализуетя, т.е. представляется в виде гамильтониана невзаимодействующих частиц. Такое представление обязательно должно быть, если магноны - истинные квазичастицы над основным состоянием. Подставим новые операторы в гамильтониан (4.7):

$$\bar{H} = -\frac{1}{2} \sum_{l \neq l'} J_{ll'} \{ (S - a_l^+ a_l) (S - a_{l'}^+ a_{l'}) + S (a_l a_{l'}^+ + a_l^+ a_{l'}) \}. \quad (4.14)$$

Раскрывая скобки в (4.14) и учитывая соотношения коммутации и малость числа возбуждений (т.е. пренебрегая членами $a^+ a a^+ a \ll 1$), а также то, что $J_{ll'} = J(|\vec{r}_l - \vec{r}_{l'}|) = J_{l'l}$, получаем:

$$\bar{H} = E_0 + S \sum_{l \neq l'} J_{ll'} \{ a_l^+ a_l - a_l^+ a_{l'} \}. \quad (4.15)$$

В (4.15) мы выделили энергию основного состояния (4.9). Далее используем преобразование Фурье операторов:

$$a_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q a_q \exp(i \vec{q} \cdot \vec{R}_l),$$

$$a_l^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q a_q^+ \exp(-i \vec{q} \cdot \vec{R}_l).$$

Подставив эти преобразования в (4.15), и учитывая, что

$$\sum_l \exp(i[\vec{q} - \vec{q}'] \vec{R}_l) = N \delta_{\vec{q}\vec{q}'},$$

находим после некоторых переобозначений:

$$\bar{H} = E_0 + \sum_q \hbar \omega_q a_q^+ a_q, \quad \hbar \omega_q = \sum_l SJ(|\vec{R}_l|) \{1 - \exp(i \vec{q} \vec{R}_l)\}. \quad (4.16)$$

Таким образом, если $n_q = a_q^+ a_q$ - оператор числа возбуждений с волновым вектором q , а $\hbar \omega_q$ - спектр возбуждений, то гамильтониан является суммой основного состояния и гамильтониана газа невзаимодействующих бозонных возбуждений - магнов:

$$\bar{H} = E_0 + \sum_q \hbar \omega_q n_q.$$

Такое представление удобно для вычислений.

З а д а ч и

4.3.1. Записать уравнения движения для спиновых операторов в представлении Гейзенберга, взаимодействующих в соответствии с гамильтонианом (4.1), в нулевом внешнем поле.

Решение. Уравнения движения:

$$\frac{dS_l^\alpha}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\bar{H}, S_l^\alpha], \quad \alpha = X, Y, Z.$$

Отсюда

$$\frac{dS_l^X}{dt} = \frac{\mu_0^2}{\hbar} \sum_{i \neq l} [J_{il} S_i^Z S_l^Y - J_{il} S_i^Y S_l^Z],$$

остальные уравнения получаются циклической перестановкой.

4.3.2. Записать уравнения движения в приближении среднего поля, полагая $S^Z = S$ числом, равным модулю спина, а остальные операторы - малыми. Учесть взаимодействие только с ближайшими соседями.

Решение. Разложив произведения операторов

$$S_i^\alpha S_i^\beta \approx \langle S_i^\alpha \rangle S_i^\beta + S_i^\alpha \langle S_i^\beta \rangle, \quad S_i^Z \approx \langle S_i^Z \rangle = S,$$

и полагая $\langle S_i^X \rangle, \langle S_i^Y \rangle$ малыми, получаем:

$$\frac{dS_i^Z}{dt} = 0, \quad \frac{dS_i^X}{dt} = \frac{\mu_0^2 SJ}{\hbar} \sum_{i \neq l} [S_i^Y - S_l^Y],$$

$$\frac{dS_i^Y}{dt} = \frac{\mu_0^2 SJ}{\hbar} \sum_{i \neq l} [S_i^X - S_l^X].$$

4.3.3. Исходя из полученных в задаче 4.3.2 уравнений движения найти спектр магновов.

Решение. Перепишем сначала уравнения движения, введя операторы S^+ и S^- :

$$S^+ = S^X + iS^Y \quad \text{и} \quad S^- = S^X - iS^Y,$$

тогда уравнения имеют вид:

$$\frac{dS_i^+}{dt} = -\frac{i\mu_0^2 SJ}{\hbar} \sum_{i \neq l} [S_i^+ - S_l^+],$$

$$\frac{dS_i^-}{dt} = \frac{i\mu_0^2 SJ}{\hbar} \sum_{i \neq l} [S_i^- - S_l^-].$$

Используя фурье-преобразование, ищем решение в виде

$$S_l = S_q \exp(i \vec{q} \cdot \vec{r}_l - i\omega t). \quad \text{Тогда имеем} \quad -i\omega S_q^\pm = \frac{-i\mu_0^2 SJ}{\hbar} S_q^\pm A_q,$$

где $A_q = \sum_{i \neq l} \{1 - \exp[i \vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_l)]\}$. Окончательно спектр магнов-

нов $\hbar\omega_q = \mu_0^2 S J A_q$. Заметим, что результат совпадает со спектром (4.16), полученным диагонализацией гамильтониана (с точностью до наших переобозначений $\mu_0^2 J \rightarrow J$).

4.4. Свойства магнонов. Спектр возбуждений.

Эффективная масса

Рассчитаем сначала энергию магнонов $\hbar\omega_q$. Рассмотрим взаимодействие только ближайших соседей и исследуем простейший случай трехмерной кубической решетки. В кубическом кристалле ближайших соседей всего шесть: $J(\pm a_x) = J(\pm a_y) = J(\pm a_z) = J$, где a - период решетки. Тогда имеем:

$$\begin{aligned} \hbar\omega_q &= \sum_l SJ(|\vec{R}_l|) \{1 - \exp(i\vec{q} \cdot \vec{R}_l)\} = \\ &= 2SJ \{3 - \cos q_x a - \cos q_y a - \cos q_z a\}. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Рассмотрим длинноволновый предел $|q|a \ll 1$. В этом случае закон дисперсии (4.17) имеет вид $\hbar\omega_q = SJa^2 q^2$, совпадающий по форме с законом дисперсии для свободной частицы ($\varepsilon_q = \hbar^2 q^2 / 2m$).

Таким образом, можно говорить о массе магнона (конечно, как об эффективной массе m^*):

$$\hbar\omega_q = \hbar^2 q^2 / 2m^* \Rightarrow \frac{1}{m^*} = \frac{2SJa^2}{\hbar^2}. \quad (4.18)$$

Исходя из (4.18) оценим масштаб эффективной массы. Полагая $S \sim 3$, $a \sim 3 \cdot 10^{-8}$ см, $J \sim k\Theta$, $\Theta \sim 300$ К, получаем $m^* \approx 5 m_e$ - около пяти электронных масс, т.е. магноны - достаточно тяжелые локализованные квазичастицы.

Так как магноны подчиняются статистике Бозе, то их функция распределения есть обычное распределение Бозе-Эйнштейна:

$$n_q(T) = \langle n_q \rangle = \langle a_q^+ a_q \rangle = \frac{1}{\exp([\hbar\omega_q - \mu]/T) - 1}, \quad (4.19)$$

где μ - химический потенциал. Так как число бозонов нефиксировано, то химический потенциал $\mu = \partial E / \partial n_q = 0$. Таким образом, окончательно функция распределения магнонов

$$n_q(T) = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_q/T) - 1}. \quad (4.20)$$

В заключение отметим, что магноны можно наблюдать при рассеянии нейтронов, так как нейтроны обладают магнитным моментом. Используя закон сохранения энергии и импульса при одномагнонном рассеянии нейтрона

$\vec{p} - \vec{p}' = \vec{q}$, $E_p - E_{p'} = \hbar\omega_q$, где E_p и p - энергия и импульс падающего нейтрона, $E_{p'}$ и p' - рассеянного, можно рассчитать энергию и импульс магнона.

Задачи

4.4.1. Найти спектр магнонов в ГЦК решетке в приближении ближайших соседей.

Ответ:

$$\hbar\omega_q = SJ \left\{ 12 - 4 \left[\cos \frac{q_z a}{2} \cos \frac{q_x a}{2} + \cos \frac{q_z a}{2} \cos \frac{q_y a}{2} + \cos \frac{q_x a}{2} \cos \frac{q_y a}{2} \right] \right\},$$

где a - период решетки. При $q \rightarrow 0$ $\hbar\omega_q = JSa^2 q^2$, т.е. результат совпадает со случаем простой кубической решеткой.

4.4.2. Найти критическую температуру ферромагнетика из условия бозе-конденсации магнонов и сравнить с критической температурой в приближении среднего поля.

Решение. Для идеального бозе-газа (см. главу 9) температура конденсации $T_0 = 3.31 \frac{\hbar^2}{m^*} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3}$. Для магнонов

$S_z = S - 1 / N \sum_q [\exp(\hbar\omega_q / T) - 1]^{-1}$. Точка перехода будет соответствовать нулевой проекции спина на ось z , отсюда условие: $S = 1 / N \sum_q [\exp(\hbar\omega_q / T) - 1]^{-1}$, совпадающее с условием на температуру бозе-конденсации с переобозначением $(N/V)^{2/3} = S^{2/3} a^{-2}$, a - период решетки. Учтем, что в длинноволновом пределе $\hbar\omega_q = JSa^2 q^2 \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m^*} = JSa^2$. Окончательно $T_c = 6.62JS^{5/2}$. При $S \sim 1$ результат не сильно отличается от полученного в приближении среднего поля $\theta = ZJS^2 / 3$ ($Z \sim 10$).

4.4.3. Оценить эффективную массу магнонов в железе, $\Theta = 1043\text{K}$, намагниченность насыщения $M_0 = 1752$ Гс, решетка ОЦК, $a = 2.87$ А. Найти отношение m^*/m .

Решение. Удельный магнитный момент насыщения в железе $M_0 = n\mu_0 S$. Здесь плотность $n = 2/a^3$ для ОЦК решетки. Отсюда $\mu_0 S = 2.1 \cdot 10^{-20}$ эрг/Гс. Для сравнения

$\mu_B = 9.3 \cdot 10^{-21}$ эрг/Гс, $\mu_0 S / \mu_B = 2.2$. Далее: $\frac{\hbar^2}{2m^*} = JSa'^2$, где $a' = a\sqrt{3/2}$ - расстояние между ближайшими соседями в ОЦК решетке. Учитывая $\theta = S^2 ZJ / 3$, $Z = 8$ (для ОЦК), отсюда находим:

$$m^* = \frac{8\hbar^2}{9\theta a^2} = 9.1 \cdot 10^{-27} \text{ г},$$

откуда $m^*/m \approx 10$.

4.4.4. Найти магнитный момент иона Ni в ферромагнитном состоянии. Намагниченность насыщения $M_0 = 510$ Гс, решетка ГЦК, $a = 3.52$ А. Выразить магнитный момент в магнетронах Бора μ_B .

Ответ: $\mu_0 S / \mu_B = 0.6$.

4.4.5. Получить явный вид спектра спиновых волн для ОЦК решетки в приближении ближайших соседей. Показать, что в длинноволновом пределе спектр возбуждений квадратичен по импульсу.

4.5. Термодинамика магнонов

Покажем, как, воспользовавшись видом функции распределения магнонов $n_q(T)$ (4.20), определить вклад магнонных возбуждений в средний магнитный момент $\mu(T)$ и теплоемкость $C(T)$. Рассмотрим длинноволновый предел $qa \ll 1$, так как исходя из вида (4.20) именно в этом случае вклад максимален. Используем закон дисперсии $\hbar\omega_q = Sa^2q^2$.

Рассмотрим магнитный момент. Если температура равна нулю, возбуждений нет, и $\langle M \rangle = SN$. При увеличении температуры необходимо учесть возбуждения:

$$\langle M \rangle = SN - \sum_l \langle a_l^+ a_l \rangle. \quad (4.21)$$

Рассчитаем:

$$\begin{aligned} \sum_l \langle a_l^+ a_l \rangle &= \sum_q \langle a_q^+ a_q \rangle = \sum_q n_q(T) = \\ &= \frac{Na^3}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 \vec{q}}{\exp(\beta\omega_q) - 1}, \quad \hbar \equiv 1. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Учитывая, что основной вклад в интеграле (4.22) набирается при малых q , а также что $J \sim \Theta$, имеем

$$\begin{aligned} \langle M \rangle &= SN[1 - (T/\Theta)^{3/2} \eta], \\ \eta &= \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{\exp[x^2] - 1} = \frac{3\zeta(5/2)}{16\pi^{3/2}} \sim 1, \end{aligned} \quad (4.23)$$

где $\zeta(x)$ - дзета-функция Римана ($\zeta(5/2)=1.341$). Здесь учтено, что $\int_0^\infty \frac{x^{Z-1} dx}{\exp[x] - 1} = \Gamma(Z)\zeta(Z)$, $\Gamma(Z)$ - гамма-функция

$(\Gamma(5/2)=3/4\Gamma(1/2)=3\sqrt{\pi}/4)$. Из (4.23) видно, что температурный спад магнитного момента ($\sim T^{3/2}$) степенной, в отличие от экспоненциального ($\sim \exp(-2\Theta/T)$, см. главу 2), который предсказывает приближение среднего поля в модели Изинга.

Степенной закон (4.23) - так называемый закон Блоха. Следует также отметить, что описание возбужденного состояния ферромагнетика с помощью магнонов справедливо при условии их малого числа в среднем на узле ($n_i \ll 1$), что с учетом (4.22)-(4.23) приводит к условию $T \ll \Theta$. Таким образом только в низкотемпературном пределе корректно введение квазичастиц - магнонов.

Исследуем поведение теплоемкости $C(T)$. Так как $C = \partial E / \partial T$, рассмотрим температурную зависимость энергии:

$$E = \frac{Na^3}{(2\pi)^3} \int \frac{\omega_q d^3 q}{\exp[\beta\omega_q] - 1} = N \frac{T^{5/2}}{2\pi^2 \theta^{5/2} a^2} \int \frac{x^4 dx}{\exp[x^2] - 1} \quad (4.24)$$

$$= N \frac{15T^{5/2}}{32\pi^{3/2} \theta^{5/2} a^2} \zeta(7/2) \sim T^{5/2}.$$

Отсюда $C \sim T^{3/2}$, т.е. вклад магнонов приводит к степенной зависимости теплоемкости от температуры. Так как эта зависимость резко отличается от экспоненциального спада, предсказываемого средним полем при малых температурах

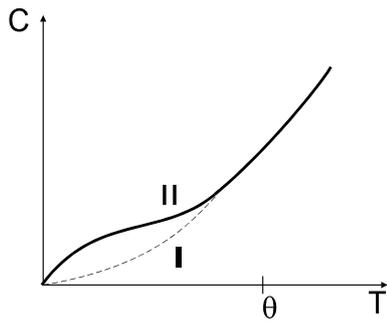


Рис.9. Вклад магнонов в теплоемкость: I - результат среднего поля ($\sim \exp[-2\Theta/T]$); II - добавка за счет спиновых возбуждений - магнонов ($\sim T^{3/2}$)

(см. главу 2), то этот вклад можно наблюдать на эксперименте (рис.9).

4.6. Плоский ферромагнетик. Анизотропная модель Гейзенберга

В этом параграфе мы обсудим гамильтониан Гейзенберга с анизотропным взаимодействием, а именно: сильное взаимодействие спинов между собой в плоскости xy и слабое по оси z . Будем также полагать, что внешнее поле взаимодействует только с z -проекцией. Это интересная ситуация, когда для реализации ферромагнитного упорядочения в плоскости xy необходимо сильное стабилизирующее поле по оси z , приведет нас к самосогласованному уравнению на параметр порядка, совпадающему с аналогичным уравнением в теории Бардина, Купера и Шриффера (БКШ) для сверхпроводников. Кроме того, мы покажем так называемую спиновую аналогию для сверхпроводников (см. задачи в конце параграфа), когда из гамильтониана БКШ для спаренных сверхпроводящих электронов можно, в свою очередь, получить гейзенберговскую анизотропную модель. Эти аналогии из достаточно далеких областей физики конденсированного состояния связаны единой концепцией приближения среднего поля, в рамках которого работают и теория БКШ, и теория ферромагнетизма.

Рассмотрим гамильтониан Гейзенберга, учитывающий взаимодействие между спинами в плоскости xy и взаимодействие с внешним полем по оси z :

$$\overline{H} = -\mu_0 \sum_k \sigma_k^z H - \frac{1}{2} \mu_0^2 \sum_{kk'} V_{kk'} \vec{\sigma}_k^\perp \cdot \vec{\sigma}_{k'}^\perp. \quad (4.25)$$

Здесь

$$\vec{\sigma}_k^\perp = \{ \sigma_k^x, \sigma_k^y, 0 \},$$

$\sigma_k^x, \sigma_k^y, \sigma_k^z$ - матрицы Паули (4.3).

Разрежем взаимодействие в плоскости в приближении среднего поля по правилу

$$\sigma_k \sigma_{k'} \approx \langle \sigma_k \rangle \sigma_{k'} + \sigma_k \langle \sigma_{k'} \rangle - \langle \sigma_k \rangle \langle \sigma_{k'} \rangle. \quad (4.26)$$

Последний член в (4.26) обычно опускают, так как это аддитивная константа, однако для сохранения точности среднеполевого разложения его полезно оставить.

Легко оценить, что выражение (4.26) справедливо с точностью до квадратичных поправок к отклонению спина от среднего:

$$\{\sigma_k - \langle \sigma_k \rangle\} \{\sigma_{k'} - \langle \sigma_{k'} \rangle\} \ll 1.$$

Введем среднее поле в виде

$$\vec{\Delta}_k = \sum_{kk'} \mu_0 V_{kk'} \langle \vec{\sigma}_{k'}^\perp \rangle. \quad (4.27)$$

Величина (4.27) пропорциональна степени упорядочения в плоскости xu и ее удобно будет взять в качестве параметра порядка в нашем подходе. Тогда гамильтониан (4.25) с учетом (4.26)-(4.27) представляется следующим образом:

$$\bar{H} = -\mu_0 \sum_k \{\sigma_k^Z H + \vec{\sigma}_k^\perp \vec{\Delta}_k\} + \frac{1}{2} \mu_0 \sum_k \vec{\Delta}_k \langle \vec{\sigma}_k^\perp \rangle. \quad (4.28)$$

В первом операторном члене (4.28) под знаком суммы находится матрица 2×2 в пространстве матриц Паули. Учтя их определение (4.3), запишем в явном виде

$$\hat{\Delta} = \sigma_k^Z H + \vec{\sigma}_k^\perp \vec{\Delta}_k = \begin{pmatrix} H & \Delta_k^X - i\Delta_k^Y \\ \Delta_k^X + i\Delta_k^Y & -H \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

Видно, что если бы взаимодействие $V_{kk'}$ отсутствовало, то (4.29) было бы обычным изинговским членом $\sigma^Z H$, и уравнение Вейсса можно было бы записать сразу. В общем случае выражение (4.29) необходимо диагонализировать, т.е. решить

секулярное уравнение вида $\hat{\Delta} - \lambda \hat{I} = 0$. Несложно найти собственные числа

$$\lambda_{1,2} = \pm \sqrt{H^2 + |\Delta|^2}, |\Delta|^2 = (\Delta^X)^2 + (\Delta^Y)^2.$$

Отсюда (4.29) в диагональном виде представляется следующим:

$$\hat{\Delta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} H_k = \sigma_k^Z H_k, \quad H_k = \sqrt{H^2 + |\Delta_k|^2}. \quad (4.30)$$

Соответственно, диагонализированный гамильтониан (4.28) имеет вид обычного гамильтониана Изинга (процедура диагонализации в геометрическом смысле эквивалентна “отклонению” проекции z под некоторым углом относительно старого положения, так что под новым углом взаимодействие с эффективным полем H_k диагонально)

$$\overline{H} = -\mu_0 \sum_k \sigma_k^Z H_k + \frac{1}{2} \mu_0 \sum_k \vec{\Delta}_k \langle \vec{\sigma}_k^\perp \rangle \quad (4.31)$$

без взаимодействия. Учтем, что $\sigma^Z = \pm 1$, т.е. суммирование в статистической сумме с гамильтонианом (4.31) будет иметь вид $\exp(-V) + \exp(+V) = 2\text{ch}(V)$, несложно записать статистическую сумму:

$$Q = \exp\left\{-\frac{\beta}{2} \mu_0 \sum_k \vec{\Delta}_k \langle \vec{\sigma}_k^\perp \rangle\right\} \prod_k \{2\text{ch}(\beta \mu_0 H_k)\}. \quad (4.32)$$

Свободная энергия F получается из (4.32):

$$F = -T \ln Q = \frac{1}{2} \mu_0 \sum_k \vec{\Delta}_k \langle \vec{\sigma}_k^\perp \rangle - T \sum_k \{2\text{ch}(\beta \mu_0 H_k)\}. \quad (4.33)$$

Варьируя F по проекции $\langle \vec{\sigma}_k^\perp \rangle$ с фиксированным узлом l : $\partial F / \partial \langle \vec{\sigma}_k^\perp \rangle = 0$, получаем самосогласованное интегральное уравнение:

$$\Delta_k = \mu_0 \sum_{k'} V_{kk'} \text{th}\{\beta \mu_0 \sqrt{H^2 + \Delta_{k'}^2}\} \frac{\Delta_{k'}}{\sqrt{H^2 + \Delta_{k'}^2}}. \quad (4.34)$$

Уравнение (4.34) совпадает по виду с уравнением БКШ (Бардина, Купера и Шриффера) в теории сверхпроводимости, причем роль внешнего поля H там играет энергия электрона, отсчитанная от уровня Ферми. В задачах 4.6.3-4.6.5 после этого параграфа мы покажем, как из гамильтониана БКШ получить спиновый гамильтониан (4.25).

Если взаимодействие $V_{kk'} = V_0 = \text{const}$ и ограничено числом ближайших соседей Z , то Δ также не зависит от индекса k , и уравнение (4.34) упрощается:

$$\Delta = Z \mu_0 V_0 \text{th}\{\beta \mu_0 \sqrt{H^2 + \Delta^2}\} \frac{\Delta}{\sqrt{H^2 + \Delta^2}}. \quad (4.35)$$

Видно, что при нулевом поле уравнение (4.35) есть обычное уравнение Вейсса с критической температурой $T_c = \mu_0^2 Z V_0$.

Задачи

4.6.1. Проварьировав свободную энергию плоского ферромагнетика (4.33) по выделенному поперечному спину $\langle \sigma_i^\perp \rangle$, получить самосогласованное уравнение для параметра порядка.

4.6.2. Рассчитать в приближении ближайших соседей при конечном поле H и нулевой температуре параметр порядка для плоского ферромагнетика исходя из самосогласованного уравнения (4.35). Получить критическое поле, при котором исчезает h_u упорядочение.

Ответ: $\Delta_0^2 = (\mu_0^2 Z V_0)^2 - H^2 \Rightarrow H_c = \mu_0^2 Z V_0$.

Введение к задачам 4.6.3 - 4.6.5 (спиновая аналогия для сверхпроводника). Полезно показать связь гамильтониана теории сверхпроводимости в рамках приближения БКШ и спинового гамильтониана (4.25).

Как известно, во вторичном квантовании гамильтониан БКШ имеет вид:

$$\bar{H} = \sum_{k\sigma} \xi_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} - \sum_{kk'} \bar{V}_{kk'} a_{k\uparrow}^+ a_{-k\downarrow}^+ a_{-k'\downarrow} a_{k'\uparrow}, \quad (4.36)$$

где $a_{k\sigma}^+$ - оператор рождения электрона с импульсом k и спином σ , $\xi_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_f$ - энергия электрона, отсчитываемая от уровня Ферми. Первый член в (4.36) - кинетическая энергия свободного ферми-газа, второй - притягивающее взаимодействие $[-\bar{V}_{kk'}]$, приводящее к образованию куперовских пар. Так, операторы рождения пары электронов b_k^+ с противоположными импульсами и спинами ($k\uparrow, -k\downarrow$) и уничтожения b_k имеют вид:

$$b_k^+ = a_{k\uparrow}^+ a_{-k\downarrow}^+; \quad b_k = a_{-k\downarrow} a_{k\uparrow}. \quad (4.37)$$

Именно второй член в гамильтониане БКШ (4.36), описывающий притяжение пар и перемещение их из состояний с импульсом k' в состояния с импульсом k , приводит к конденсации куперовских пар и сверхпроводимости.

Выберем для каждого импульса k парный базис $|0, 0\rangle, |k\uparrow, -k\downarrow\rangle$, описывающий состояния электронов в куперовской паре. Первый вектор означает отсутствие электронов в этих состояниях, а во втором базисном векторе эти состояния заполнены. Легко видеть, что для данного гамильтониана этот базис является полным, с его помощью мы можем перебрать все состояния системы.

Задачи

4.6.3. Разложить оператор числа частиц и операторы рождения и уничтожения куперовских пар по базису $|00\rangle, |k\uparrow, -k\downarrow\rangle$ в пространстве $2\Gamma_2$ для конкретного k .

Решение. Рассмотрим, чему равны матричные элементы интересующих нас операторов в этом базисе. Так,

$$\begin{aligned} \langle 00|a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow}|00\rangle &= 0; & \langle 00|a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow}|k\uparrow -k\downarrow\rangle &= 0; \\ \langle k\uparrow -k\downarrow|a_{k\uparrow}^+ a_{-k\downarrow}^+|00\rangle &= 1; & \langle 00|a_{k\uparrow}^+ a_{-k\downarrow}^+|k\uparrow -k\downarrow\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (4.38)$$

Тогда можно операторам рождения и уничтожения пары и оператору числа частиц в этом базисе сопоставить матрицы $2\Gamma_2$:

$$\begin{aligned} n_{k\uparrow} &= a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & n_{k\downarrow} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ b_k^+ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & b_k &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Операторы (4.39) можно выразить через матрицы Паули (4.3) :

$$\begin{aligned} \hat{I} - n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \sigma^z, \\ b^+ &= \frac{1}{2}(\sigma^x - i\sigma^y), & b &= \frac{1}{2}(\sigma^x + i\sigma^y). \end{aligned} \quad (4.40)$$

4.6.4. Исходя из фермионных соотношений коммутации, показать, что введенные с помощью преобразования (4.40) спиновые операторы подчиняются коммутационным соотношениям для матриц Паули.

4.6.5. Исходя из преобразования фермионных операторов в спиновые (4.40), показать, что гамильтониан БКШ преобразуется в спиновый, а уравнение для параметра порядка совпадает с ранее полученным (4.34).

Решение. Подставив (4.40) в гамильтониан (4.36), получаем:

$$\bar{H} = \sum_k \xi_k (1 - \sigma_k^Z) - \frac{1}{4} \sum_{kk'} \bar{V}_{kk'} \{ \sigma_k^X \sigma_{k'}^X + \sigma_k^Y \sigma_{k'}^Y \}. \quad (4.41)$$

Если переобозначить в (4.41)

$$H = \frac{\xi_k}{\mu_0}, \quad 2\mu_0^2 V_{kk'} = \bar{V}_{kk'}, \quad \bar{\Delta}_k = \frac{1}{2\mu_0} \sum_{k'} \bar{V}_{kk'} \langle \sigma_{k'}^{\rightarrow \perp} \rangle, \quad (4.42)$$

$$H_k^2 = \frac{1}{\mu_0^2} [\xi_k^2 + \bar{\Delta}_k^2], \quad \bar{\Delta}_k = \mu_0 \Delta_k,$$

то, во-первых, с точностью до несущественной постоянной получаем спиновый гамильтониан (4.25) и уравнение на параметр порядка Δ_k (4.34) и, во-вторых, для перенормированного параметра $\bar{\Delta}_k$ имеем следующее самосогласованное уравнение:

$$\bar{\Delta}_k = \frac{1}{2} \sum_{k'} \bar{V}_{kk'} \text{th}[\beta \sqrt{\xi_k^2 + \bar{\Delta}_{k'}^2}] \frac{\bar{\Delta}_{k'}}{\sqrt{\xi_k^2 + \bar{\Delta}_{k'}^2}}. \quad (4.43)$$

Уравнение (4.43) является основным уравнением БКШ в теории сверхпроводимости.

Таким образом, в задачах 4.6.3 - 4.6.5 мы показали полную аналогию между спиновой анизотропной моделью Гейзенберга (4.25) и моделью БКШ для сверхпроводников. Заметим, что роль внешнего стабилизирующего поля, на фоне которого разыгрывается сверхпроводящее (и ферромагнитное) упорядочение, в сверхпроводнике играет энергия электрона ξ_k , отсчитанная от уровня Ферми.

5. ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД ПАРАМАГНЕТИК-АНТИФЕРРОМАГНЕТИК. СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ В АНТИФЕРРОМАГНЕТИКАХ

Если обменный интеграл $J < 0$, то, как видно из гамильтониана

$$\overline{H} = -1 / 2 \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j, \quad (5.1)$$

спинам выгодно выстроиться так, чтобы соседние спины были направлены в противоположные стороны. Тогда имеет место так называемое антиферромагнитное упорядочение:

$$\dots \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \dots$$

Возникают как бы две подрешетки, в каждой из которых спины сонаправлены, а сами они ориентированы в противоположные стороны. В результате средний суммарный магнитный момент равен нулю, однако упорядочение тем не менее имеет место, и существует точка перехода, в которой антиферромагнитное упорядочение исчезает (ее обычно называют температурой Нееля T_N , а основное состояние антиферромагнетика - неелевским состоянием). В этой главе мы обсудим фазовый переход парамагнетик - антиферромагнетик и исследуем спиновые возбуждения в антиферромагнитной фазе.

5.1. Антиферромагнетизм в приближении Вейсса

Рассмотрим для простоты модель Изинга (хотя этот подход можно использовать и для модели Гейзенберга, см. задачи к этому параграфу). Разделим мысленно систему на две

вложенные друг в друга подрешетки, направленные в противоположные стороны:

$$\begin{array}{cccc} \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow \\ \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{array} \Rightarrow \begin{array}{cccc} \uparrow & & \uparrow & \\ \uparrow & & \uparrow & \end{array} (\mu_+) + \begin{array}{cccc} & & & \downarrow \\ & & & \downarrow \\ & & & \downarrow \end{array} (\mu_-)$$

Взаимодействие предполагаем только с ближайшими соседями, так что подрешетки в результате взаимодействуют только друг с другом (отметим, что это мгновенные состояния системы, поэтому конкретные расположения спинов (конкретные узлы, принадлежащие данной подрешетке) могут меняться; не меняется только тот факт, что ближайшим соседом каждого спина в одной подрешетке является спин из другой подрешетки).

Тогда средним полем для спинов μ_+ является поле, созданное спинами μ_- (и наоборот). Используя приближение Вейсса, аналогично (1.10) введем два эффективных поля H_+ и H_- :

$$H_+ = J \langle \mu_- \rangle Z + H, H_- = J \langle \mu_+ \rangle Z + H. \quad (5.2)$$

Отсюда согласно уравнению Вейсса (1.11) находим, что ситуация описывается системой уравнений:

$$\langle \mu_+ \rangle = \text{th} \left\{ \frac{H + \langle \mu_- \rangle ZJ}{T} \right\}, \quad \langle \mu_- \rangle = \text{th} \left\{ \frac{H + \langle \mu_+ \rangle ZJ}{T} \right\}. \quad (5.3)$$

При внешнем поле $H=0$ исследуем систему (5.3). Учитывая, что $J < 0$ в антиферромагнетике, несложно увидеть, что существует решение $\langle \mu_+ \rangle = -\langle \mu_- \rangle = \langle \mu \rangle$, где $\langle \mu \rangle$ удовлетворяет такому же уравнению для параметра порядка, как и в ферромагнетике:

$$\langle \mu \rangle = \text{th} \left\{ \frac{\langle \mu \rangle Z |J|}{T} \right\}. \quad (5.4)$$

При этом температура Нееля $|J|Z$ совпадает по виду с температурой Кюри-Вейсса Θ . Таким образом, температурная зависи-

мость средних магнитных моментов на подрешетках такая же, как и в случае ферромагнетика. Суммарный магнитный момент антиферромагнетика равен нулю:

$$M = \langle \mu_+ \rangle + \langle \mu_- \rangle = 0.$$

Другая ситуация с намагниченностью. Рассчитаем ее при больших температурах. Пусть $T > \Theta$, $H \neq 0$. Тогда система (5.3) примет вид

$$\langle \mu_+ \rangle = \frac{H + \langle \mu_- \rangle ZJ}{T}, \quad \langle \mu_- \rangle = \frac{H + \langle \mu_+ \rangle ZJ}{T}. \quad (5.4)$$

Отсюда в слабых полях:

$$\begin{aligned} \chi &= dM / dH_{H \rightarrow 0} = \langle \mu_+ \rangle + \langle \mu_- \rangle, \\ \langle \mu_+ \rangle + \langle \mu_- \rangle &= (\langle \mu_+ \rangle + \langle \mu_- \rangle) \frac{JZ}{T} + \frac{2H}{T}, \\ \chi &= \frac{2}{T + |J|Z} = \frac{2}{T + \Theta}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Из (5.5) видно, что в точке фазового перехода в отличие от ферромагнетика расходимости восприимчивости нет (хотя есть излом производной (см. задачи к параграфу), т.е. фазовый переход тем не менее должен чувствоваться при измерении температурной зависимости восприимчивости), что связано с взаимной компенсацией спинов в подрешетках.

Заметим, что в реальных веществах спины на подрешетках могут отличаться (например, в случае разных сортов атомов), так что $|\langle \mu_+ \rangle| \neq |\langle \mu_- \rangle|$ даже не в нулевом поле. Тогда суммарный средний спин системы не равен нулю. Такие вещества называют **ферримагнетиками** (несколько задач к этому параграфу им посвящены).

В модели Гейзенберга взаимная ориентация спинов и внешнего поля не обязательно совпадает. Появляется понятие оси легкого намагничивания - преимущественного кристаллографического направления, по которому располагаются вектора спонтанной намагниченности $\vec{R}^+ = -\vec{R}^-$ при нулевой

температуре и в пределе слабого поля $H \rightarrow 0$. Оно в общем случае не совпадает с направлением поля. Несколько задач к этому параграфу посвящены такой системе.

Задачи

Задачи 5.1.1-5.1.9 - описание в рамках приближения среднего поля антиферромагнитной модели Изинга.

5.1.1. Рассмотрим антиферромагнитный гамильтониан Изинга с взаимодействием в следующем виде:

$$\overline{H} = 1 / 2 \mu_0^2 \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - \mu_0 \sum_i S_i H, \quad S_i = \pm 1, \quad J_{ij} > 0.$$

Необходимо записать его в приближении среднего поля, пренебрегая квадратичными флуктуациями магнитных моментов ($[\langle S \rangle - S]^2 \rightarrow 0$). Ввести взаимодействие ближайших соседей Z .

Решение. Учитываем сохраняющее требуемую точность среднего поля разложение взаимодействующего члена в виде

$$S_k S_{k'} \approx \langle S_k \rangle S_{k'} + S_k \langle S_{k'} \rangle - \langle S_k \rangle \langle S_{k'} \rangle.$$

Разбивая на две подрешетки l_+ и l_- , получаем с учетом ближайших соседей

$$\overline{H} = \sum_{\pm} \left[-\frac{1}{2} \mu_0 \sum_{i\pm} R^{\pm} H_0^{\mp} - \mu_0 \sum_{i\pm} S_{i\pm} (H - H_0^{\mp}) \right],$$

где $H_0^{\pm} = ZJR^{\pm} \mu_0$ - среднее поле; $R^{\pm} = \langle S_{i\pm} \rangle$ - параметр порядка, средний магнитный момент на подрешетках.

5.1.2. Найти свободную энергию в антиферромагнитной модели Изинга в приближении среднего поля, исходя из результата предыдущей задачи. Учесть, что $\sum_{i+} = \sum_{i-} = N/2$.

Ответ:

$$F = \frac{N}{2} \sum_{\pm} \left[-\beta \mu_0 H_0^{\pm} R^{\mp} / 2 - T \ln \left[2 \operatorname{ch} \left\{ \beta \mu_0 (H - H_0^{\mp}) \right\} \right] \right].$$

5.1.3. Из условия минимума свободной энергии $\partial F / \partial R^\pm = 0$, полученной в предыдущей задаче, получить уравнения на параметры порядка R^\pm .

Ответ:

$$R^+ = -\text{th}[\beta\mu_0(H_0^- - H)], \quad R^- = -\text{th}[\beta\mu_0(H_0^+ - H)]$$

5.1.4. Найти критическую температуру при нулевом поле.

Решение.

$$R^\pm = -\beta\mu_0^2 ZJ R^\mp \Rightarrow \begin{vmatrix} -\beta\mu_0^2 ZJ & -1 \\ 1 & \beta\mu_0^2 ZJ \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow T_c = \theta = \mu_0^2 ZJ.$$

5.1.5. Исследовать поведение $R^+(T)$ и $R^-(T)$ при $T \rightarrow 0$ и $T \rightarrow \Theta$. $H=0$.

Решение. Существуют два решения: $R^- = R^+$ и $R^- = -R^+$, причем можно показать, что первое решение неустойчиво. Второе решение $R^+ = -R^- = \text{th}R\Theta/T$ - обычное уравнение Вейсса, оно подробно с предельными разложениями исследовано в задаче 2.2.3.

5.1.6. Получить общее выражение для теплоемкости через параметр порядка R . Исследовать предельные случаи $T \rightarrow 0$ и $T \rightarrow \Theta$.

Ответ:

$$C = \frac{\mu_0 N}{2} \sum_{\pm} H_0^\pm \partial R^m / \partial T =_{H=0} -\frac{\mu_0^2 NZJ}{2} \partial R^2 / \partial T.$$

Для исследования предельных случаев см. задачу 2.3.1.

5.1.7. Получить общее выражение для магнитной восприимчивости.

Ответ: $\chi = \mu_0^2 \frac{(1 - R^2)}{T + (1 - R^2)\theta}$ (по сравнению с результатами параграфа 2.4 по ферромагнитной модели есть разли-

чие в знаке в знаменателе, так что χ не расходится в точке перехода - см. следующую задачу).

5.1.8. Рассчитать магнитную восприимчивость в предельных случаях $T \rightarrow 0$ и $T \rightarrow \theta + 0$, $T \rightarrow \theta - 0$.

$$\text{Ответ: } \chi = \begin{cases} \frac{4\mu_0^2}{T} \exp(-2\frac{\theta}{T}), & T \rightarrow 0; \\ \frac{\mu_0^2}{2\theta}(1-y), y = \frac{\theta-T}{\theta}, & T \rightarrow \theta - 0; \\ \frac{\mu_0^2}{\theta+T}, & T \rightarrow \theta + 0. \end{cases}$$

5.1.9. Найти зависимость $R^+(H)$ и $R^-(H)$ при малых H (первые поправки по H).

$$\text{Ответ: } R^\pm(H) = \pm R(T) + [TH/\mu_0^2]\chi(T).$$

Задачи 5.1.10-5.1.22 - описание в рамках приближения среднего поля антиферромагнитной модели Гейзенберга.

5.1.10. Получить гамильтониан антиферромагнитной модели Гейзенберга

$$\bar{H} = \mu_0^2/2 \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j - \mu_0 \vec{H} \sum_i \vec{S}_i$$

в приближении среднего поля, пренебрегая квадратичными флуктуациями магнитных моментов ($[\langle S \rangle - S]^2 \rightarrow 0$). Ввести взаимодействие ближайших соседей Z . Количество узлов в подрешетках $\sum_{i+} = \sum_{i-} = N/2$.

Решение. Учитывая разложение взаимодействующего члена в виде

$$S_k S_{k'} \approx \langle S_k \rangle S_{k'} + S_k \langle S_{k'} \rangle - \langle S_k \rangle \langle S_{k'} \rangle$$

с необходимой точностью, получаем:

$$\bar{H} = \sum_{\pm} \left[-\mu_0 \sum_{i\pm} \vec{S}_{i\pm} (\vec{H} - \vec{H}_0^{\mp}) - \frac{N}{4} \vec{H}_0^{\pm} \vec{R}^{\mp} \right], \quad \text{где } \vec{H}_0^{\pm} = ZJ \vec{R}^{\pm} -$$

среднее поле в приближении ближайших соседей;

$\vec{R}^{\pm} = \mu_0 < \vec{S}_{i\pm} >$ - параметр порядка.

5.1.11. Рассчитать свободную энергию системы F в продольном магнитном поле.

Ответ:

$$F = \frac{N}{2} \sum_{\pm} \left\{ -\frac{1}{2} H_0^{\pm} R^m - T \ln \left[4\pi (\text{sh} \{ \beta \mu_0 (H - H_0^m) S \} / [\beta \mu_0 (H - H_0^m) S]) \right] \right\}.$$

5.1.12. Получить уравнения для параметров порядка.

Ответ:

$$R^+ = \mu_0 S F_L [\beta \mu_0 (H - H_0^-)], \quad R^- = \mu_0 S F_L [\beta \mu_0 (H - H_0^+)],$$

где F_L - функция Ланжевена (см. задачи 4.1.2-4.1.3).

5.1.13. Рассчитать критическую температуру в нулевом поле.

Ответ:

$$R^+ = -R^- = \mu_0 S F_L [\beta \mu_0 S Z J R^+], \quad \Rightarrow \quad \theta = ZJ (\mu_0^2 S)^2 / 3.$$

5.1.14. Получить общее выражение для теплоемкости через параметр порядка R . Исследовать предельные случаи $T \rightarrow 0$ и $T \rightarrow \theta$.

Ответ:

$$C = \frac{N}{2} \sum_{\pm} H_0^{\pm} \partial R^m / \partial T =_{H=0} - \frac{NZJ}{2} \partial R^2 / \partial T.$$

Для исследования предельных случаев см. решение задачи 4.1.15.

5.1.15. Получить выражение для продольной магнитной восприимчивости. Выразить χ через производную от функции Ланжевена $F_L'(x) = dF_L/dx$.

Ответ: $\chi = \frac{(\mu_0 S)^2 F_L'(\beta \mu_0 H_0 S)}{T + (\mu_0 S)^2 Z J F_L'(\beta \mu_0 H_0 S)}$ (если сравнить с

ответом задачи 4.1.10 по ферромагнитной модели, то легко видеть, что есть различие в знаке в знаменателе, приводящее к отсутствию расходимости χ в точке перехода - см. следующую задачу).

5.1.16. Исследовать χ в предельных случаях $T \rightarrow 0$ и $T \rightarrow \theta \neq 0$, $T \rightarrow \theta - 0$.

Ответ:

$$\chi = \begin{cases} \frac{\mu_0^2 S^2}{9\theta^2} T, & T \rightarrow 0; \\ \frac{\mu_0^2 S^2}{6\theta} (1 - y), y = \frac{\theta - T}{\theta}, & T \rightarrow \theta - 0; \\ \frac{\mu_0^2 S^2}{3(\theta + T)}, & T \rightarrow \theta + 0. \end{cases}$$

5.1.17. Найти зависимость $R^+(H)$ и $R^-(H)$ при малых H с точностью до членов, пропорциональных H .

Ответ: $R^\pm(H) = \pm R(T) + [TH/\mu_0^2]\chi(T)$.

5.1.18. Найти статистическую сумму и свободную энергию антиферромагнитной модели Гейзенберга в магнитном поле произвольного направления. $\sum_{i^+} = \sum_{i^-} = N/2$.

Решение. Эта задача существенно отличается от задачи 5.1.11, так как поле H и средние поля H_0^{+-} уже не сонаправлены. Тогда вводим вектора $\vec{H}'_{\pm} = \vec{H} - \vec{H}_0^{\pm}$ - новые "средние" поля, повернутые относительно исходных полей \vec{H}_0^{\pm} . Тогда можно проводить суммирование по углам относительно этих новых векторов так же, как в задаче 4.1.3, и отдельно по подрешеткам. Используем гамильтониан, полученный в задаче 5.1.10:

$$Q = \prod_{\pm} \left[\prod_{i\pm} \exp \{ \beta R^{\pm} H_0^{\pm} / 2 \} \int d\Omega_i \exp \{ \beta \mu_0 S H'_m \cos \theta_{i\pm} \} \right] =$$

$$= \prod_{\pm} \left[\exp \{ \beta R^{\pm} H_0^{\pm} / 2 \} [4\pi (\text{sh} \{ \beta \mu_0 H'_m S \} / [\beta \mu_0 H'_m S])]^{N/2} \right].$$

Отсюда получаем свободную энергию:

$$F = -T \ln Q =$$

$$= \frac{N}{2} \sum_{\pm} \left[-\frac{1}{2} \vec{R}^{\pm} \cdot \vec{H}_0^{\pm} - T \ln [4\pi (\text{sh} \{ \beta \mu_0 H'_m S \} / [\beta \mu_0 H'_m S])] \right].$$

5.1.19. Найти уравнения для равновесных намагниченностей $\vec{R}^{\pm} = \mu_0 \langle \vec{S}_{i\pm} \rangle$.

$$\text{Ответ: } \vec{R}^{\pm} = -\mu_0 S \left[\frac{\vec{H}_0^{\mp} - \vec{H}}{|\vec{H}_0^{\mp} - \vec{H}|} \right] F_L [\beta \mu_0 S |\vec{H}_0^{\mp} - \vec{H}|].$$

Из вида решения появляется понятие оси легкого намагничивания - преимущественного кристаллографического направления, по которому располагаются векторы спонтанной намагниченности $\vec{R}^+ = -\vec{R}^-$ при нулевой температуре и в пределе слабого поля $H \rightarrow 0$. Оно в общем случае не совпадает с направлением поля.

5.1.20. Получить тензор магнитной восприимчивости в антиферромагнитной модели Гейзенберга в поле произвольного направления.

Решение. Ответ можно получить, дифференцируя по полю полученные в предыдущей задаче уравнения на параметр порядка:

$$\vec{M} = -\partial F / \partial \vec{H} = \frac{1}{2N} \{ \vec{R}^+ + \vec{R}^- \} \Rightarrow$$

$$\chi_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \frac{d}{dH_\beta} \{ R_\alpha^+ + R_\alpha^- \} |_{H=0},$$

$$\alpha, \beta = x, y, z;$$

$$\hat{\chi} = \chi_t \hat{P}_t + \chi_l \hat{P}_l,$$

$$P_l^{\alpha\beta} = \frac{H_+^{\alpha} H_+^{\beta}}{H_+^2} = \frac{H_-^{\alpha} H_-^{\beta}}{H_-^2},$$

$$\vec{H}'_{\pm} = -\vec{H}_0^{\pm} |_{H=0}, \quad \hat{P}_t = \hat{I} - \hat{P}_l,$$

$$\chi_t = 1/2 ZJ, \quad \chi_l = \frac{(\mu_0 S)^2 F_L'(\beta \mu_0 H_0 S)}{T + (\mu_0 S)^2 ZJ F_L'(\beta \mu_0 H_0 S)},$$

$$H_0 = H_0^{\pm} |_{H=0} = ZJR.$$

Отметим, что в случае ориентации оси легкого намагничивания в плоскости xu (например, по оси x) тензор χ диагонален (см. ниже случай 1). Это же наблюдается, если ось легкого намагничивания направлена по оси z (случай 2):

$$1) \hat{\chi} = \begin{pmatrix} \chi_t & 0 & 0 \\ 0 & \chi_t & 0 \\ 0 & 0 & \chi_l \end{pmatrix}, \quad 2) \hat{\chi} = \begin{pmatrix} \chi_t & 0 & 0 \\ 0 & \chi_t & 0 \\ 0 & 0 & \chi_l \end{pmatrix}.$$

Это известное свойство тензора в кристалле с кубической симметрией: тензор в главных осях должен быть диагонален. Заметим, что χ_l совпадает с полученной ранее продольной

восприимчивостью (см. задачу 5.1.15) и зависит от температуры, в то время как компонента $\chi_t = 1/2ZJ$ температурно независима.

5.1.21. Определить температуру, при которой все компоненты тензора магнитной восприимчивости (в главных осях) совпадают ($\chi_{\alpha\beta} = \chi_0 \delta_{\alpha\beta}$).

Ответ: $T = \theta = (\mu_0^2 S^2 ZJ)/3, \chi_0 = 1/2ZJ = \chi_t$.

5.1.22. Найти равновесное значение угла ϕ между \vec{R}^\pm и \vec{H} при нулевой температуре, если поле \vec{H} направлено перпендикулярно оси легкого намагничивания.

Решение. Задачу можно решать двумя способами.

1. Необходимо положить температуру равной нулю в уравнениях для параметров порядка, выведенных в задаче 5.1.19, и воспользоваться асимптотами функции Ланжевена (см. задачу 1.4.3). Тогда получим:

$$\sin \phi = \frac{H}{\mu_0 S 2ZJ}.$$

2. Можно исходить из выражения для энергии системы при $T=0$, воспользовавшись видом гамильтониана, полученного в задаче 5.1.10 в приближении среднего поля:

$$E = \langle \bar{H} \rangle = \sum_{\pm} \left[-\mu_0 \sum_{i\pm} \langle \vec{S}_{i\pm} (\vec{H} - \vec{H}_0^\mp) \rangle - \frac{N}{4} \langle \vec{H}_0^\pm \vec{R}^\mp \rangle \right] =$$

$$= HNS\mu_0 \sin \phi - \frac{1}{2} zJN\mu_0^2 S^2 \cos 2\phi.$$

Дифференцируя энергию по углу, находим его равновесное значение, совпадающее с полученным в случае 1.

Задачи 5.1.23-5.1.29, исследование в рамках среднего поля ферримагнитной модели Изинга. Представим гамильтониан ферримагнетика в следующем виде:

$$\overline{H} = \frac{1}{2} J \mu_+ \mu_- \sum_{ij} S_i S_j - \mu_+ \sum_{i+} S_{i+} H - \mu_- \sum_{i-} S_{i-} H,$$

$$S_i = \pm 1, \mu_+ \neq \mu_-.$$

5.1.23. Записать гамильтониан ферримагнетика в приближении среднего поля.

Ответ:

$$\overline{H} = \sum_{\pm} \left[-\frac{1}{2} \mu_{\pm} \sum_{i\pm} R^{\pm} H_0^{\mp} - \mu_{\pm} \sum_{i\pm} S_{i\pm} (H - H_0^{\mp}) \right], \quad H_0^{\pm} = ZJR^{\pm} \mu_{\pm}.$$

5.1.24. Найти статистическую сумму и свободную энергию ферримагнетика в приближении среднего поля.

Ответ:

$$Q = \prod_{\pm} \left[\exp \left\{ \beta N \mu_{\pm} H_0^{\mp} R^{\pm} / 4 \right\} \left\{ 2 \operatorname{ch} \left\{ \beta \mu_{\pm} (H - H_0^{\mp}) \right\} \right\}^{N/2} \right]$$

$$F = \frac{N}{2} \sum_{\pm} \left[-\mu_{\pm} H_0^{\mp} R^{\pm} / 2 - T \ln \left[2 \operatorname{ch} \left\{ \beta \mu_{\pm} (H - H_0^{\mp}) \right\} \right] \right].$$

5.1.25. Найти уравнения для равновесных значений параметра порядка.

Ответ:

$$R^+ = -\operatorname{th}[\beta \mu_+ (H_0^- - H)], \quad R^- = -\operatorname{th}[\beta \mu_- (H_0^+ - H)].$$

5.1.26. Определить критическую температуру ферримагнетика - температуру Нееля при нулевом поле.

Ответ: $T_c = \mu_+ \mu_- ZJ$.

5.1.27. Найти общее выражение для теплоемкости через параметр порядка в нулевом внешнем поле.

Ответ:

$$C = -\frac{1}{2} \mu_- \mu_+ ZJ \frac{\partial R^2}{\partial T}, \quad R = R^+|_{H=0} = -R^-|_{H=0} = \operatorname{th} \left[\frac{T_c}{T} R \right].$$

5.1.28. Найти общее выражение для магнитной восприимчивости ферримагнетика через параметр порядка.

$$\text{Ответ: } \chi = \frac{1-R^2}{4} \left[\frac{(\mu_+ - \mu_-)^2}{T - T_c(1-R^2)} + \frac{(\mu_+ + \mu_-)^2}{T + T_c(1-R^2)} \right].$$

5.1.29. Исследовать поведение восприимчивости ферромагнетика вблизи критической температуры при $T > T_c$ и $T = T_c - 0$.

$$\text{Ответ: } \chi = \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{T(\mu_+^2 + \mu_-^2) - 2\mu_+\mu_-T_c}{T^2 - T_c^2}; & T > T_c; \\ \frac{1}{8T_c} \left[\frac{P_{\mu_+\mu_-}(2)}{(1-T/T_c)} + P_{\mu_+\mu_-}(4) - \frac{2}{5}(1-T/T_c)P_{\mu_+\mu_-}(22) \right]; & T \rightarrow T_c - 0, \end{cases}$$

$$P_{\mu_+\mu_-}(\eta) = \mu_+^2 + \mu_-^2 - \eta\mu_+\mu_-.$$

5.2. Возбуждения в антиферромагнетиках в модели Гейзенберга

Рассмотрим антиферромагнитный гамильтониан Гейзенберга ($J < 0$) в нулевом внешнем поле:

$$\overline{H} = -1/2 \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j, \quad J_{ij} < 0. \quad (5.6)$$

Очевидно, что основное состояние этой модели не отличается от рассмотренного в предыдущем разделе антиферромагнитного (неелевского) упорядочения. Возбужденные состояния, аналогично гейзенберговскому ферромагнетика, можно описать введением понятия спиновых волн - возбуждений (так называемых "антиферромагнитных магнонов").

Распишем гамильтониан покомпонентно:

$$\overline{H} = -1/2 \sum_{i \neq j} J_{ij} \{ S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y + S_i^Z S_j^Z \}. \quad (5.7)$$

Так же, как и в предыдущем параграфе, введем две подрешетки, для которых переход к возбуждениям будет несколько различен:

$$a_l = \frac{S_l^+}{\sqrt{2S}}; \quad a_l^+ = \frac{S_l^-}{\sqrt{2S}} \Rightarrow "+"; \quad a_l = \frac{S_l^-}{\sqrt{2S}}; \quad a_l^+ = \frac{S_l^+}{\sqrt{2S}} \Rightarrow "-". \quad (5.8)$$

Таким образом, если оператор a увеличивает проекцию спина на единицу на подрешетке "+", уничтожая возбуждение, то он же уменьшает ее на подрешетке "-" (но, уменьшая по абсолютному значению, увеличивает по величине, стремясь перевернуть вверх):

$$a \begin{pmatrix} \uparrow \\ \uparrow \\ \uparrow \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \uparrow \\ \uparrow \\ \uparrow \end{pmatrix}; \quad a \begin{pmatrix} \downarrow \\ \downarrow \\ \downarrow \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \downarrow \\ \downarrow \\ \downarrow \end{pmatrix}$$

Введем индекс σ_l , равный +1, если узел l относится к подрешетке "+", и -1, если подрешетка "-". Тогда из (5.8) получаем обобщающие соотношения (используя определения S^+ и S^-):

$$S_l^X = \sqrt{\frac{S}{2}}(a_l + a_l^+); \quad S_l^Y = -i\sqrt{\frac{S}{2}}\sigma_l(a_l - a_l^+); \quad S_l^Z = \sigma_l(S - a_l^+ a_l). \quad (5.9)$$

Подставляя (5.9) в гамильтониан (5.7) и учитывая малость возбуждений (пренебрегая членами $a^+ a a^+ a \ll 1$), после алгебраических преобразований и учета соотношений коммутации имеем:

$$\begin{aligned} \bar{H} = & -1/2 \sum_{l \neq l'} J_{ll'} S^2 \sigma_l \sigma_{l'} + S/2 \sum_{l \neq l'} \{ 2a_l^+ a_l \sigma_l \sigma_{l'} - \frac{1}{2}(a_l a_{l'} + a_l^+ a_{l'}^+ + 2a_l^+ a_{l'}) + \\ & + \frac{\sigma_l \sigma_{l'}}{2}(a_l a_{l'} + a_l^+ a_{l'}^+ - 2a_l^+ a_{l'}) \}. \end{aligned}$$

Первое слагаемое при условии, что $\sigma_l \sigma_{l'} = -1$ (так как узлы l и l' принадлежат разным подрешеткам), равно энергии основного состояния антиферромагнетика:

$$E_0 = 1/2 \sum_{l \neq l'} J_{ll'} S^2.$$

Оставшееся слагаемое (обозначим его δH) связано с возбуждениями. Рассчитаем его, введя фурье-преобразование операторов:

$$a_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q a_q \exp(i \vec{q} \vec{R}_l), \quad a_l^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q a_q^+ \exp(-i \vec{q} \vec{R}_l). \quad (5.10)$$

Подставив их в гамильтониан, после некоторых преобразований, имеем:

$$\begin{aligned} \delta H &= 1/2 \sum_q \left\{ A_q (a_q^+ a_q + a_{-q}^+ a_{-q}) + B_q (a_q a_{-q} + a_q^+ a_{-q}^+) \right\}; \\ A_q &= S \sum_h J(\vec{R}_h) \left\{ \sigma_h - \frac{1 + \sigma_h}{2} \cos \vec{q} \vec{R}_h \right\}; \\ B_q &= S / 2 \sum_h J(\vec{R}_h) (\sigma_h - 1) \cos \vec{q} \vec{R}_h. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Здесь $J > 0$. Из (5.11) видно, что если взять только ферромагнитную ситуацию, т.е. решетки сделать одинаковыми, то для любого узла h параметр $\sigma_h \equiv 1$, и $B_q = 0$. В этом случае гамильтониан сразу диагонален, и из величины A_q мы немедленно получаем спектр магнонов для ферромагнетика (ср. с (4.15)). В общем же случае необходимо диагонализировать гамильтониан (5.11), введя какие-либо канонические преобразования для операторов, например:

$$\begin{aligned} a_q &= C_q \operatorname{ch} \theta_q + C_{-q}^+ \operatorname{sh} \theta_q; \quad a_q^+ = C_q^+ \operatorname{ch} \theta_q + C_{-q} \operatorname{sh} \theta_q; \\ a_{-q} &= C_{-q} \operatorname{ch} \theta_q + C_q^+ \operatorname{sh} \theta_q; \quad a_{-q}^+ = C_{-q}^+ \operatorname{ch} \theta_q + C_q \operatorname{sh} \theta_q. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Канонические преобразования (5.12) не меняют статистики. Так, можно из соотношения $a_q a_q^+ - a_q^+ a_q = \delta_{qq}$, убедиться в том, что новые операторы - также имеют статистику Бозе:

$$C_q C_q^+ - C_q^+ C_q = 1.$$

Подставив (5.12) в гамильтониан (5.11), после довольно громоздких преобразований находим:

$$\delta H = \sum_q \left\{ \hbar \omega_q C_q^+ C_q + \frac{1}{2} Z_q (C_q C_{-q} + C_q^+ C_{-q}^+) + \frac{1}{2} P_q \right\}; \quad (5.13)$$

где

$$\hbar \omega_q = (\operatorname{ch}^2 \theta_q + \operatorname{sh}^2 \theta_q) A_q + 2 B_q \operatorname{ch} \theta_q \operatorname{sh} \theta_q;$$

$$Z_q = (\operatorname{ch}^2 \theta_q + \operatorname{sh}^2 \theta_q) B_q + 2 A_q \operatorname{ch} \theta_q \operatorname{sh} \theta_q;$$

$$P_q = \operatorname{sh}^2 \theta_q A_q + B_q \operatorname{ch} \theta_q \operatorname{sh} \theta_q.$$

Результат состоит из трех слагаемых: первое (с ω_q) - диагональное, и дает спектр возбуждений; второе (с Z_q) - недиагональное и для диагонализации подлежит занулению, третье (с P_q) - свободный неоператорный член, так называемые нулевые колебания.

Из (5.13) видно, что для диагонализации необходимо положить параметр $Z_q=0$. Из этого уравнения находим, что на параметр θ_q накладываются условия: $\operatorname{th} 2\theta_q = -B_q/A_q$. Выразив из этого условия параметр θ_q , получаем окончательно из (5.13):

$$\delta H = \sum_q \left\{ \sqrt{A_q^2 - B_q^2} \left(C_q^+ C_q + \frac{1}{2} \right) - \frac{A_q}{2} \right\}. \quad (5.14)$$

Последнее слагаемое в (5.14) - аддитивная константа, ее можно внести в энергию основного состояния. Отметим, что $\langle C_q^+ C_q \rangle = n_q(T)$ - функция распределения Бозе с нулевым хим-потенциалом (число возбуждений не сохраняется), как и у

магнонов в ферромагнетике. Окончательно энергию антиферромагнетика получаем из $\langle H \rangle = E_0 + \langle \delta H \rangle$:

$$E = E_0 + \sum_q \left\{ \hbar \omega_q \left(n_q + \frac{1}{2} \right) \right\}; \quad (5.15)$$

$$\hbar \omega_q = \sqrt{A_q^2 - B_q^2}.$$

Задачи

5.2.1. Доказать, что операторы C , введенные каноническими преобразованиями (5.12), являются бозе-операторами.

5.2.2. Преобразовать гамильтониан (5.11) через операторы C , т.е. получить выражения (5.13) для гамильтониана антиферромагнетика в каноническом виде.

5.2.3. Получить уравнения движения для спиновых операторов S в представлении Гейзенберга, взаимодействующих в соответствии с гамильтонианом (5.6), в нулевом внешнем поле для случая антиферромагнетика. Использовать взаимодействие только ближайших соседей.

Решение. Уравнения движения:

$$\frac{dS_l^\alpha}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\bar{H}, S_l^\alpha], \quad \alpha = X, Y, Z.$$

Вводим две подрешетки l_+ и l_- , взаимодействие будет только между ними. Отсюда для S_{l_+} и S_{l_-} :

$$\frac{dS_{l_\pm}^X}{dt} = \frac{\mu_0^2}{\hbar} \sum_{\substack{i \\ i \neq l}} [J_{il} S_{i\mp}^Z S_{l_\pm}^Y - J_{il} S_{i\mp}^Y S_{l_\pm}^Z],$$

остальные уравнения получаются циклической перестановкой.

5.2.4. Записать уравнения движения в приближении среднего поля, полагая $S^Z = S$ числом, равным модулю спина, а

остальные операторы - малыми. Учесть взаимодействие только с ближайшими соседями.

Решение. Разложив произведения операторов:

$$S_l^\alpha S_i^\beta \approx \langle S_l^\alpha \rangle S_i^\beta + S_l^\alpha \langle S_i^\beta \rangle$$

и полагая $\langle S_l^X \rangle, \langle S_i^Y \rangle$ малыми, а также учитывая, что средние проекции спинов на ось z на узлах подрешеток направлены в разные стороны:

$$S_{l_+}^Z \approx \langle S_{l_+}^Z \rangle = S, \quad S_{l_-}^Z \approx \langle S_{l_-}^Z \rangle = -S,$$

получаем:

$$\begin{aligned} \frac{dS_{l_\pm}^Z}{dt} &= 0, \\ \frac{dS_{l_\pm}^X}{dt} &= \frac{\mu_0^2 SJ}{\hbar} \sum_{\substack{i \\ i \neq l}} [\mp S_{l_\pm}^Y \mp S_{i\mp}^Y], \\ \frac{dS_{l_\pm}^Y}{dt} &= \frac{\mu_0^2 SJ}{\hbar} \sum_{\substack{i \\ i \neq l}} [\pm S_{i\mp}^X \pm S_{l_\pm}^X]. \end{aligned}$$

5.2.5. Исходя из полученных уравнений движения найти спектр возбуждений - антиферромагнитных магнонов в приближении взаимодействия только с ближайшими соседями.

Решение. Перепишем уравнения движения, введя операторы S^+ и S^- : $S^+ = S^X + iS^Y$ и $S^- = S^X - iS^Y$, тогда уравнения движения имеют вид

$$\frac{dS_{l_\pm}^+}{dt} = \pm \frac{i\mu_0^2 SJ}{\hbar} \sum_{\substack{i\mp \\ i \neq l}} [S_{l_\pm}^+ + S_{i\mp}^+], \quad \frac{dS_{l_\pm}^-}{dt} = \mp \frac{i\mu_0^2 SJ}{\hbar} \sum_{\substack{i\mp \\ i \neq l}} [S_{i\mp}^- + S_{l_\pm}^-].$$

Используя фурье-преобразование, ищем решение в виде: $S_{l_\pm} = S_{q\pm} \exp(i \vec{q} \cdot \vec{r}_{l_\pm} - i\omega t)$. Тогда уравнения одинаковы для S_q^+ и S_q^- и приобретают вид:

$$-i\omega S_{q\pm} = \pm i \frac{\mu_0^2 S}{\hbar} J \sum_{i \neq l} [S_{q\pm} + S_{q\mp} \exp\{i \vec{q}(\vec{r}_i - \vec{r}_l)\}].$$

Имея в виду ненулевое решение для $S_{q\pm}$, находим секулярное уравнение для спектра

$$\begin{vmatrix} -\frac{\mu_0^2 S}{\hbar} ZJ - \omega & -\frac{\mu_0^2 S}{\hbar} JB(q) \\ \frac{\mu_0^2 S}{\hbar} JB(q) & \frac{\mu_0^2 S}{\hbar} ZJ - \omega \end{vmatrix} = 0, \quad B(q) = \sum_{i \neq l} \exp[i \vec{q}(\vec{r}_i - \vec{r}_l)].$$

Решая их, находим спектр возбуждений

$$(\hbar\omega_q)^2 = [\mu_0^2 SJ]^2 [Z^2 - B^2(q)].$$

Результат совпадает со спектром (5.15), полученным каноническим преобразованием с последующей диагонализацией гамильтониана (с точностью до переобозначений $\mu_0^2 J \rightarrow J$).

5.3. Свойства антиферромагнитных магнонов. Термодинамика

Исследуем спектр антиферромагнитных магнонов и рассмотрим, какой вклад вносят эти возбуждения в теплоемкость антиферромагнетика.

Если учесть взаимодействие $Z=6$ ближайших соседей $J(\pm a_x) = J(\pm a_y) = J(\pm a_z) = J$ в трехмерной кубической решетке, то получим

$$A_q = -ZSJ, \quad B_q = -S(\cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z a), \quad (5.16)$$

так что в пределе $|q|a \ll 1$ имеем

$$\hbar\omega_q = S\sqrt{Z^2 - Z^2 \langle \cos qa \rangle^2} \approx \xrightarrow{q \rightarrow 0} \frac{SZJqa}{\sqrt{3}}. \quad (5.17)$$

Таким образом, в антиферромагнетике спектр возбуждений линеен по импульсу в отличие от квадратичного спектра магнонов в случае ферромагнетика. Такой спектр аналогичен час-

тицам без массы (например, квантам колебаний решетки (фононам) в твердом теле, фотонам). Исходя из спектра, можно получить вклад антиферромагнитных магнонов в теплоемкость и магнитный момент. Так, полагая $\frac{SZJ}{\sqrt{3}} \sim \theta$, т.е. температуре перехода, оценим энергию

$$E = \frac{Na^3}{(2\pi)^3} \int \frac{\omega_q d^3 q}{\exp[\beta\omega_q] - 1} = N \frac{T^4}{2\pi^2 \theta^3} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{\exp[x] - 1} = N \frac{\pi^2 T^4}{30\theta^3} \sim T^4. \quad (5.18)$$

Отсюда теплоемкость $C \sim T^3$, т.е. имеется существенное отличие от закона $\sim T^{3/2}$, как в ферромагнетике (см.(4.24)). Это различие можно наблюдать на эксперименте.

Магнитный момент (на отдельной подрешетке), который выражается через число возбуждений $\langle n_l \rangle$

($M = SN(1 - \langle n_l \rangle)$), можно также оценить. Используя (5.12), находим

$$\begin{aligned} \langle n_l \rangle &= 1 / N \sum_{q, q'} \exp[i(q - q')l] \langle a_q^+ a_q \rangle = \\ &= 1 / N \sum_q \left\{ \frac{A_q}{\omega_q} (n_q + 1/2) - 1/2 \right\}. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Отсюда, при $T \gg 0$ получим

$$M \sim SN(1 - n_l) \sim (1 - fT^2), \quad f \sim 1,$$

что также отличается от случая ферромагнетика ($\sim T^{3/2}$, см.(4.23)). Отметим, что строго при нулевой температуре магнитный момент на подрешетке не равен SN , т.е. наблюдается слабое отклонение благодаря “нулевым колебаниям” (члены, не зависящие от температуры в (5.19)).

Задачи

5.3.1. Получить явный вид спектра антиферромагнитных спиновых волн для простой кубической решетки. Перейти к длинноволновому пределу.

Ответ:

$$(\hbar \omega_q)^2 = 16 \mu_0^2 S J \left[\sin^2 \frac{q_x a}{2} + \sin^2 \frac{q_y a}{2} + \sin^2 \frac{q_z a}{2} \right] \times \\ \times \left[\cos^2 \frac{q_x a}{2} + \cos^2 \frac{q_y a}{2} + \cos^2 \frac{q_z a}{2} \right],$$

$\hbar \omega_q \approx 2\sqrt{3} \mu_0^2 S J q a \Big|_{q \rightarrow 0}$ (что совпадает с формулой (5.17) при $Z=6$, $\mu_0^2 J \otimes J$).

5.3.2. Получить явный вид спектра антиферромагнитных спиновых волн для ОЦК и ГЦК решеток. Показать, что в длинноволновом пределе спектр возбуждений линеен по импульсу.

5.4. Неустойчивость антиферромагнитного состояния относительно нулевых колебаний и спиновых возбуждений

Рассчитаем среднее число возбуждений на узле: $\langle n_l \rangle = \langle a_l^+ a_l \rangle$, отвечающее отклонению полной проекции спина на ось z от максимального значения (насыщения). Дело в том, что, как окажется, эта величина имеет особенности в одномерном и двумерном случае, зависящие от температуры. Так, наличие нулевых колебаний может привести к распаду антиферромагнитного состояния.

Переходя в фурье-компоненты и подставляя преобразования (5.12), имеем

$$\langle n_l \rangle = 1 / N \sum_{q, q'} \exp[i(q - q')l] \langle a_q^+ a_q \rangle = \\ = 1 / N \sum_q \left\{ \frac{A_q}{\omega_q} (n_q + 1 / 2) - 1 / 2 \right\}. \quad (5.20)$$

В (5.20) учтено, что $\langle C_q^+ C_q \rangle = \delta_{qq} n_q$, $\langle C_q C_q^+ \rangle = \delta_{qq} (1 - n_q)$, а также что следующие недиагональные средние можно поло-

жить равными нулю, если полагать возбуждения не взаимодействующими в пределе их малой плотности:

$$\langle C_q^+ \cdot C_{-q}^+ \rangle = \langle C_{-q} \cdot C_q \rangle = 0.$$

Проанализируем (5.20), выбросив несущественную константу (последний член с “-1/2”). Положим сначала $T=0$. Тогда число возбуждений $n_q=0$. Остаются только нулевые колебания

$$\langle n_l \rangle = 1 / 2N \sum_q \left\{ \frac{A_q}{\omega_q} \right\}. \quad (5.21)$$

Рассмотрим одномерную ситуацию. Тогда нулевые колебания

$$\langle n_l \rangle \sim A \int \frac{dq}{q} \rightarrow \infty, \text{ т.е. расходятся.}$$

Таким образом, при нулевой температуре в одномерной ситуации антиферромагнитное упорядочение неустойчиво (относительно нулевых колебаний). Заметим, что из (5.21) следует, что двумерный и трехмерный антиферромагнетик реализуются при нуле температур, т.е. нулевые флуктуации подавляются упорядочением в этом случае.

Пусть G - размерность пространства. Положим $T \neq 0$, $n_q \neq 0$. Если учесть, что существенный вклад в среднее число возбуждений на узле набирается только на малых импульсах q , получим (в этом случае можно пренебречь нулевыми колебаниями):

$$\langle n_l \rangle \sim A \int \frac{d^G q}{q^2} \sim \begin{cases} \int \frac{dq}{q^2} \rightarrow \infty, & G = 1; \\ \int \frac{dq}{q} = \ln q \rightarrow \infty, & G = 2; \\ \int dq \sim \text{const } T, & G = 3. \end{cases} \quad (5.22)$$

т.е. только трехмерный антиферромагнетик устойчив относительно возбуждений при ненулевой температуре, а в двумерии и одномерии при отличии температуры от нуля антиферромагнитное состояние неустойчиво.

6. ДЕЛОКАЛИЗОВАННЫЕ МАГНИТНЫЕ МОМЕНТЫ.

До сих пор мы исследовали системы с локализованными на узлах кристаллической решетки магнитными моментами. Поэтому хорошим квантовым числом являлось значение магнитного момента (или его проекции на выделенную ось) *на узле*. В данной главе мы рассмотрим противоположную ситуацию, когда носитель магнитного момента - электрон - делокализован в объеме кристалла, и хорошим квантовым числом является его *импульс*. Такая ситуация может возникнуть, например в ферромагнитных металлах и сплавах.

6.1. Дисперсия электрона в кристалле в модели сильной связи. Эффективная масса

Электрон в твердом теле ведет себя как квазичастица: в отсутствие примесей он не рассеивается, имеет определенный квазиимпульс (не являющийся собственным числом оператора импульса), закон дисперсии, отличный от закона дисперсии свободной частицы ($\varepsilon_q \neq \hbar^2 q^2 / 2m$) и, соответственно, не имеет определенной координаты (“размазан” по кристаллу).

Рассмотрим идеальный (в отсутствие дефектов и примесей) кристалл в приближении сильной связи. Пусть сначала атомы решетки находятся на большом расстоянии друг от друга. Электроны полностью локализованы каждый на своем узле. Затем начинаем сближать узлы, и на расстоянии порядка борковского радиуса электроны начинают чувствовать соседние атомы и слабо туннелируют от одного атома (i) к другому (j) (обычно это ближайший сосед) с вероятностью $t(|r_i - r_j|) = t_{ij}$, однако волновая функция таких слабо делокализованных частиц имеет все еще хорошо выраженный максимум на коорди-

натах узлов. Тогда хорошим квантовым числом в приближении сильной связи электрона с узлом является номер узла l . Если ввести узельные операторы рождения $a_{l\sigma}^+$ и уничтожения $a_{l\sigma}$ электрона (на узле l со спином σ) (фермиевские операторы $a_{l\sigma}a_{l\sigma}^+ + a_{l\sigma}^+a_{l\sigma} = \delta_{ll\sigma\sigma'}$), то гамильтониан системы через них запишется следующим образом:

$$\overline{H} = \sum_{i\sigma} \varepsilon_0 a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} + \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}. \quad (6.1)$$

Первый член в (6.1) (потенциальный) описывает “затравочную” (нулевую) энергию электронов, локализованных на узлах с узельной энергией ε_0 . Второй член гамильтониана (кинетическая энергия) описывает перескоки на соседние узлы с амплитудой t_{ij} . Перейдем к фурье-представлению:

$$a_{l\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p a_{p\sigma} \exp(i\vec{p}\vec{R}_l), \quad a_{l\sigma}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p a_{p\sigma}^+ \exp(-i\vec{p}\vec{R}_l). \quad (6.2)$$

Подставив (6.2) в (6.1), после некоторых переобозначений представим гамильтониан в диагональном виде:

$$\overline{H} = \sum_{p\sigma} \varepsilon_p a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma}; \quad \varepsilon_p = \varepsilon_0 + \sum_{R_l} t(|\vec{R}_l|) \exp(-i\vec{p}\vec{R}_l). \quad (6.3)$$

Исследуем закон дисперсии электрона ε_p с учетом взаимодействия только ближайших соседей и определим амплитуду перескока через $-t$ (знак перескока выбираем из удобства отсчета низа зоны проводимости от центра зоны Бриллюэна, см. ниже) в трехмерном кубическом кристалле. Тогда имеем:

$$\varepsilon_q = \varepsilon_0 - 2t(\cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z a). \quad (6.4)$$

Рассмотрим теперь для простоты одномерный случай:

$$\varepsilon_q = \varepsilon_0 - 2t \cos qa. \quad (6.4a)$$

Этот закон дисперсии описывает полосу энергии, равную $2Zt$, (Z - число ближайших соседей, $Z=2$ для одномерия) (рис.10), так называемую зону проводимости. Как видим, ее

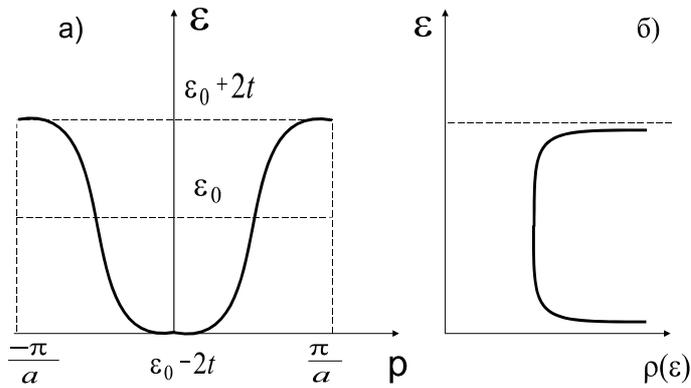


Рис.10. Дисперсия электрона в кристалле (а) и зонная картина (б) в приближении сильной связи (одномерный случай)

ширина пропорциональна вероятности перескока. Вид плотности состояний показан также на этом рисунке (чуть ниже мы ее рассчитаем). При увеличении концентрации электронов зона может последовательно заполняться в соответствии с принципом Паули. На рис.10,а интервал импульсов ограничен областью $-\pi/a < p < \pi/a$ - так называемой первой зоной Бриллюэна, так как закон дисперсии далее по импульсу периодичен (отметим, что в кристалле при периодических граничных условиях импульс дискретен, число неэквивалентных значений импульса равно N ($p = (2\pi/aN)gn$, где $n = -N/2, \dots, N/2$, N - число узлов), и с высоким разрешением (при $N \gg 1$) он заполняет всю первую зону Бриллюэна).

Оценим эффективную массу электрона. В пределе малого импульса (вблизи дна зоны проводимости) закон дисперсии квадратичен: $\epsilon_p - \epsilon_0 = ta^2 p^2$, поэтому, исходя из определения эффективной массы $1/m^* = \partial^2 \epsilon / \partial p^2$ получаем $m^* = \frac{\hbar^2}{2ta^2}$.

Эффективная масса, вообще говоря, не равна массе свободного электрона m_e . Если $t \sim 0.1 - 10 \text{ эВ}$,
 $a \sim 3 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, то получаем $m^* = 0.1 - 10 m_e$.

Групповая скорость электрона вводится как $v = \partial \varepsilon / \partial p$. Оценки ее дают $\sim 10^7 - 10^8 \text{ см/с}$.

Напомним еще несколько необходимых нам в дальнейшем определений.

Функция распределения по импульсам электронов (распределение Ферми-Дирака)

$$f_{p\sigma}(T) = \langle n_{p\sigma} \rangle = \langle a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} \rangle = \frac{1}{\exp[(\varepsilon_p - \mu)/T] + 1}. \quad (6.5)$$

Число электронов в системе сохраняется, поэтому химический потенциал $\mu \neq 0$. При нулевой температуре распределение (6.5) - фермиевская ступенька: $f_{p\sigma} = 1$, $\varepsilon_p < \mu = E_f$; $f_{p\sigma} = 0$, $\varepsilon_p > E_f$, где E_f - граничная энергия Ферми (совпадающая в этом случае с химическим потенциалом μ) отделяет занятые состояния от пустых. Ее несложно получить из нормировочного соотношения $n = N/V$, $N = \sum_{p\sigma} f_{p\sigma}$, при нулевой температуре вблизи дна

зоны в приближении эффективной массы и связать с плотностью электронов n : $E_f = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 n)^{2/3}$. Оценки величины

энергии Ферми приводят к $E_f \sim 1 - 10 \text{ эВ}$. Отсюда видно, что при обычных температурах вплоть до комнатной ($T \sim 300 \text{ К} \sim 0.01 \text{ эВ}$) электронный газ с хорошей точностью вырожден, и его распределение - фермиевская ступенька при $T \ll E_f$:

$f_{p\sigma} = \Theta(\mu - \varepsilon)$, где Θ - тета функция Хевисайда.

Напомним еще одну важную физическую величину - плотность электронных состояний $\rho(\varepsilon)$, определяемую при переходе из суммирования по импульсам к интегрированию по

энергии: $\sum_{p\sigma} f_{p\sigma} = \int \rho(\varepsilon) d\varepsilon f(\varepsilon)$. Она полезна, когда по-

дынтегральное выражение зависит только от энергии. Ее можно определить так же, как число электронных состояний, приходящихся на интервал энергий $\varepsilon - (\varepsilon + d\varepsilon)$. Несложно получить

исходя из $\sum_{p\sigma} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 \vec{p}$ соотношение для плотности со-

стояний (в единичном объеме) для свободного электронного газа (просуммированной по спинам):

$$\rho(\varepsilon) = \sum_{p\sigma} \delta(\varepsilon - \varepsilon_p) = \frac{m^{*3/2} \sqrt{2\varepsilon}}{\pi^2 \hbar^3}. \quad (6.6)$$

Отметим еще полезное соотношение между плотностью состояний и энергией Ферми (также для свободного электронного газа):

$$\rho(\varepsilon) = \frac{3n}{2E_f}. \quad (6.7)$$

Для приближения сильной связи и закона дисперсии (6.4а) в одномерном случае получим точное выражение для плотности состояний

$$\rho(\varepsilon) = \sum_{p\sigma} \delta(\varepsilon - \varepsilon_p) = \frac{N}{2\pi a \hbar} \frac{\theta(|\varepsilon_0 - \varepsilon| < 2t)}{\sqrt{4t^2 - (\varepsilon_0 - \varepsilon)^2}}, \quad (6.7a)$$

т.е. плотность состояний имеет корневые особенности (ван Хофа) у границ зон (рис.10,б).

Задачи

6.1.1. Рассчитать энергию Ферми для свободного электронного газа при $T=0$, и показать, что выполняется следующее соотношение между плотностью состояний и энергией Ферми: $\rho(\varepsilon) = 3n/2E_f$.

6.1.2. Получить плотность состояний для приближения сильной связи в одномерном и двумерном случае, исследовать особенности ван-Хофа.

Указание: в двумерной ситуации привести решение к эллиптическому интегралу и показать логарифмическую расходимость при точно половинном заполнении зоны.

6.2. Парамагнетизм Паули

Рассмотрим газ свободных электронов в слабом магнитном поле. Рассчитаем восприимчивость системы, учитывая, что собственный магнитный момент электрона взаимодействует с полем (энергия взаимодействия $V = -\vec{\mu} \vec{H}$). Тогда суммарная энергия электрона будет зависеть от ориентации его спина относительно внешнего поля H : $\varepsilon_{p\uparrow} = \varepsilon_p - \mu_0 H$; $\varepsilon_{p\downarrow} = \varepsilon_p + \mu_0 H$, где ε_p - энергия в отсутствии поля. По определению суммарный магнитный момент системы есть сумма магнитных моментов электронов со спином вверх минус магнитный момент электронов со спином вниз:

$$M = (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})\mu_0; \tag{6.8}$$

$$n_{\sigma} = \sum_p f(\varepsilon_p - \sigma\mu_0 H) = 1/2 \int \rho(\varepsilon) d\varepsilon f(\varepsilon - \sigma\mu_0 H), \quad \sigma = \pm 1.$$

Подставляя в (6.8) функцию распределения и разлагая по слабому полю, имеем:

$$M = \mu_0^2 H \int d\varepsilon \rho(\varepsilon) (-\partial f / \partial \varepsilon). \tag{6.9}$$

Учитывая, что при низких температурах производная от функции распределения с хорошей точностью есть дельта-функция с особенностью при энергии Ферми

$$-\partial f / \partial \varepsilon = \delta(\varepsilon - E_f),$$

находим:

$$\begin{aligned}
 M &= \mu_0^2 H \rho(E_f); \\
 \chi &= \mu_0^2 \rho(E_f).
 \end{aligned}
 \tag{6.10}$$

Видно, что при нулевом поле магнитный момент исчезает. Таким образом, электронный газ проявляет парамагнитные свойства. Кроме того, его намагниченность не зависит от температуры в отличие от случая локализованных моментов (при $T \ll E_f$).

Оценим восприимчивость Паули. Исходя из выражений для плотности состояний (6.6)-(6.7), находим для удельной восприимчивости (на один электрон):

$$\chi / n = \mu_0^2 \rho(E_f) / n = 3 \mu_0^2 / 2 E_f. \tag{6.11}$$

Если сравнить ее с результатом теории Вейсса для локализованных моментов ($\chi = \mu_0^2 / T$), то величина (6.11) существенно меньше (так как $T \ll E_f$). Итак, можно заключить, что движение электронов (и магнитных моментов) существенно ослабляет намагниченность.

6.3. Ферромагнетизм в модели Стонера

Рассмотрим газ делокализованных электронов с кулоновским взаимодействием. Как мы уже видели на моделях с локализованными спинами, взаимодействие обычно приводит к появлению упорядоченной фазы и возможности фазового перехода при конечной температуре. Исследуем на этот предмет и делокализованную систему.

Кулоновское взаимодействие между электронами вводим во вторичном квантовании четырехфермионным оператором, который соответствует фейнмановской диаграмме второго порядка

$$\begin{array}{l} \vec{p} \sigma \Rightarrow \quad \vdots \quad \Rightarrow \quad \vec{p} + \vec{q} \sigma \\ \vec{p}' \sigma' \Rightarrow \quad \vdots \quad \Rightarrow \quad \vec{p}' - \vec{q} \sigma' \end{array}$$

при виртуальном обмене фотоном двух электронов. Соответствующее взаимодействие имеет вид:

$$V = 1/2 \sum_{pp'q\sigma\sigma'} V(q) \langle a_{p-q,\sigma}^+ a_{p'+q,\sigma'}^+ a_{p'\sigma'} a_{p\sigma} \rangle, \quad (6.12)$$

где $V(q) = 4\pi e^2/q^2$ - матричный элемент кулоновского взаимодействия.

Разобьем (6.12) в приближении среднего поля на двухфермионные сомножители, учитывая, что $\langle aa \rangle = \langle a^+ a^+ \rangle = 0$, и $\langle a_{p\sigma}^+ a_{p'\sigma'} \rangle = \delta_{pp'} f_p$:

$$\begin{aligned} V &= 1/2 \sum_{pp'q\sigma\sigma'} V(q) \{ \langle a_{p-q,\sigma}^+ a_{p\sigma} \rangle \langle a_{p'+q,\sigma'}^+ a_{p'\sigma'} \rangle - \\ &\quad - \langle a_{p-q,\sigma}^+ a_{p'\sigma'} \rangle \langle a_{p'+q,\sigma}^+ a_{p\sigma} \rangle \} = \quad (6.13) \\ &= 1/2 \sum_{pp'\sigma\sigma'} (V(0) - V(|\vec{p} - \vec{p}'| \delta_{\sigma\sigma'})) f_{p\sigma} f_{p'\sigma'}. \end{aligned}$$

Тогда (6.13) можно представить как взаимодействие с неким внешним полем $V_{p\sigma}$ электронного газа:

$$V = \sum_{p\sigma} V_{p\sigma} f_{p\sigma}; \quad V_{p\sigma} = \sum_{p'\sigma'} (V(0) - V(|\vec{p} - \vec{p}'| \delta_{\sigma\sigma'})) f_{p'\sigma'}. \quad (6.14)$$

(Здесь множитель 1/2 скомпенсировался при учете дважды по внешней и по внутренней суммам, т.е. мы учли следующее правило при расщеплении суммы в приближении среднего поля - $n_1 n_2 = \langle n_1 \rangle n_2 + \langle n_2 \rangle n_1 = 1 \leftrightarrow 2 = 2 \langle n_1 \rangle n_2$.)

Таким образом, исходя из (6.14) мы имеем теперь свободный электронный газ со следующим законом дисперсии

$$\varepsilon_{p\sigma} = \varepsilon_p + 1/N \sum_{p'\sigma'} (V(0) - V(|\vec{p} - \vec{p}'| \delta_{\sigma\sigma'})) f_{p'\sigma'}. \quad (6.15)$$

В (6.15) учтена нормировка на 1 электрон (множитель $1/N$). Пренебрежем аддитивной постоянной (слагаемым с $V(0)$), ее можно убрать в отсчет энергии. Учтем, что кулоновое взаимодействие сильно экранировано, и поэтому при малых импульсах можно пренебречь зависимостью матричного элемента от импульса:

$$V(|\vec{q}|) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + k_0^2} \approx \frac{4\pi e^2}{k_0^2} = V = \text{const},$$

где k_0 - импульс обрезания Томаса-Ферми ($k_0^2 = 4\pi e^2 \rho(E_f)$).

Тогда окончательно закон дисперсии

$$\varepsilon_{p\sigma} = \varepsilon_p - V/N \sum_{p'} f_{p'\sigma}. \quad (6.16)$$

Введем среднюю намагниченность системы:

$$R = \frac{1}{N} \{N_\uparrow - N_\downarrow\}, \quad N_\sigma = \sum_p f_{p\sigma}, \quad N = N_\uparrow + N_\downarrow. \quad (6.17)$$

Теперь закон дисперсии выражается через намагниченность R следующим образом:

$$\varepsilon_{p\uparrow} = \varepsilon_p - \frac{VR}{2} - V/2, \quad \varepsilon_{p\downarrow} = \varepsilon_p + \frac{VR}{2} - V/2. \quad (6.18)$$

Убирая в отсчет энергии аддитивную константу $V/2$, подставив (6.18) в (6.17), находим самосогласованное уравнение Стонера для намагниченности электронного газа с кулоновским взаимодействием:

$$R = \frac{1}{N} \sum_p \left\{ f\left(\beta, \varepsilon_p, -\frac{VR}{2}, \mu\right) - f\left(\beta, \varepsilon_p, \frac{VR}{2}, \mu\right) \right\}, \quad (6.19)$$

$$f(\beta, \varepsilon_p, x, \mu) = \{\exp[\beta(\varepsilon_p + x - \mu)] + 1\}^{-1}.$$

Кроме того, для полной замкнутости уравнения (6.19) имеет место дополнительное условие - нормировка на число частиц:

$$N = \sum_p \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon_p - \mu)] + 1}. \quad (6.20)$$

Из (6.19) можно получить случай полной локализации электронов (т.е. локализованные спины - модель Изинга). Если положить эффективную массу большой и $(\varepsilon_p - \mu) \rightarrow 0$ (локализация около уровня Ферми по энергии), то из (6.19)-(6.20) при $\varepsilon_p - \mu \ll T$ получаем: $R = \text{th}\{\beta VR / 4\}$, т.е. обычное уравнение Вейсса для параметра порядка в модели Изинга в нулевом поле. Таким образом, уже в этом пределе в модели Стонера существует критическая температура $\Theta = V/4$ и фазовый переход в упорядоченную ферромагнитную фазу.

Исследуем в общем случае условия существования фазового перехода. Разложим (6.19) в пределе $R \rightarrow 0$ вблизи искомой точки фазового перехода. При разложении до первой производной фермиевской функции распределения по энергии имеем

$$1 = - \frac{V}{N} \sum_p \frac{\partial f_p}{\partial \varepsilon_p}. \quad (6.21)$$

Учитывая, что при низких температурах $-\partial f / \partial \varepsilon = \delta(\varepsilon - \mu)$, из (6.21) получаем:

$$1 = V \rho(\mu). \quad (6.22)$$

Выражение (6.22) можно уточнить, и привести к условию Стонера для существования при ненулевой температуре спонтанной намагниченности $R \neq 0$:

$$V \rho(\mu) > 1. \quad (6.23)$$

Обоснуем его более корректно. Разложим уравнение Стонера (6.19) до второй (она сокращается) и третьей производных функции распределения по энергии:

$$1 - \frac{V}{N} \sum_p \left(- \frac{\partial f_p}{\partial \varepsilon_p} \right) = \frac{V^3 R^2}{24} \sum_p \left(- \frac{\partial^3 f_p}{\partial \varepsilon_p^3} \right). \quad (6.24)$$

Можно показать исходя из вида функции распределения, что в наиболее существенной области интегрирования $\varepsilon \sim \mu$:

$$\frac{\partial^3 f_p}{\partial \varepsilon_p^3} > 0.$$

Это становится понятно из вида третьей производной

$$\frac{\partial^3 f_p}{\partial \varepsilon_p^3} = \frac{1}{8 T^3} \frac{(1 - 2 \operatorname{sh}^2 [\frac{\varepsilon - \mu}{2 T}])}{\operatorname{ch}^4 [\frac{\varepsilon - \mu}{2 T}]} > 0$$

при $\varepsilon \sim \mu$. Окончательно условие Блоха - Стонера для существования при ненулевой температуре спонтанной намагниченности имеет вид:

$$1 - \frac{V}{N} \sum_p \left(- \frac{\partial f_p}{\partial \varepsilon_p} \right) < 0 \text{ или } \left| \frac{V}{N} \sum_p \frac{\partial f_p}{\partial \varepsilon_p} \right| > 1. \quad (6.25)$$

Из условия (6.25) при низких температурах получаем (6.23), откуда с учетом определения плотности состояний (6.6)-(6.7) находим условие на параметр взаимодействия

$$V > \frac{2}{3} E_f. \quad (6.26)$$

Таким образом, ферромагнетизм Стонера возникает только при достаточно большом параметре кулоновского взаимодействия. Причина такого ограничения снизу в том, что для подавления флуктуаций, создаваемых делокализацией электронов с кинетической энергией масштаба E_f , необходимо

такого же масштаба (по крайней мере) расщепление энергии при различной ориентации спина за счет кулоновского взаимодействия для реализации противодействующего флуктуациям ферромагнитного упорядочения.

З а д а ч и

6.3.1. Получить поправку по температуре к химическому потенциалу μ при низких температурах ($\mu = E_f - \pi^2 T^2 / 12 E_f$), воспользовавшись уравнением нормировки (6.20).

Указание : при расчете пренебречь экспоненциальными поправками $\sim \exp(-\mu/T)$.

6.3.2. Найти критическую температуру в модели Стонера ($T_c \ll E_f$), учитывая температурную зависимость химического потенциала μ (см. предыдущую задачу).

Указание: разложить правую часть уравнения Стонера при $R \rightarrow 0$.

Ответ: $T_c = E_f \sqrt{24/\pi^2 (1 - 2E_f/3V)}$.

6.3.3. Получить точное трансцендентное уравнение на параметр порядка R в модели Стонера при $T = 0$ и найти его, полагая $R \ll E_f/V$.

Ответ:

$$R = [E_f 4\sqrt{6}/V] \sqrt{1 - 2E_f/3V}$$

при условии $R \ll E_f/V$.

7. КОНДЕНСАЦИЯ И ОТВЕРДЕВАНИЕ

Исследования модели Изинга представленные в предыдущих главах, позволяют глубже развить теорию таких фазовых переходов, как конденсация и отвердевание (кристаллизация), ввести в них понятие флуктуаций, получить основные уравнения состояния. В этой главе мы рассмотрим фазовые превращения вещества, приводящие к перестройке пространственного упорядочения атомов с изменением температуры. До сих пор мы исследовали термодинамические фазовые переходы второго рода. Здесь мы рассмотрим примеры фазовых переходов первого рода, познакомимся с типичными моделями, описывающими их - с моделью Ван-дер-Ваальса и решеточного газа.

7.1. Фазовый переход газ - жидкость. Конденсация. Уравнение Ван-дер-Ваальса

Основное отличие жидкой фазы вещества от газообразной - ее практически идеальная несжимаемость, т.е. газ заполняет весь предоставленный ему объем, а жидкость - только часть в соответствии с ее плотностью. Для идеального газа его сжимаемость под внешним давлением P и температурой T описывается известным уравнением состояния:

$$P V = R T,$$

$R = Nk$, k - постоянная Больцмана. Отсюда давление:

$$P = k T N / V = k T \rho.$$

При давлении $P=0$ плотность ρ также равна нулю, и все молекулы разлетаются, равномерно заполняя объем. Однако для описания фазового перехода из газообразного состояния в конденсированную фазу (жидкость) необходимо учесть взаимодействие частиц, которое может удерживать частицы друг около друга, препятствуя их разлету на большое расстояние. Тогда в уравнении состояния необходимо ввести понятие

внутреннего давления, связанного с этим взаимодействием, и учесть существование конечного объема, меньше которого система не может занимать.

7.1.1. Теория Ван-дер-Ваальса

Введем парное взаимодействие частиц $V(|r_i-r_j|)$ в виде, показанном на рис. 11. Как видно из рисунка, на малых расстояниях взаимодействие отталкивающее, препятствующее

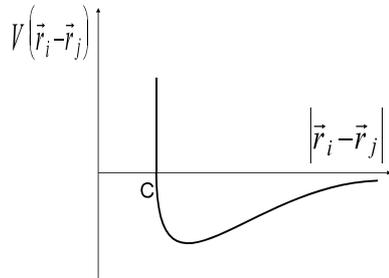


Рис.11. Парное взаимодействие частиц при описании конденсации (точка $|r|=C$ соответствует диаметру частиц в модели твердых шаров)

взаимопроникнуть частицам друг в друга, моделирующее твердые шары, занимающие конечный объем (с радиусом C , см.рис.11). Роль твердых шаров состоит в том, что они приводят к насыщенной жидкости, объем которой не может быть меньше объема плотной упаковки твердых ядер. На больших расстояниях имеет место область притяжения, что не дает разойтись частицам на большое расстояние. Причиной конденсации как раз и является

та часть потенциала, которая соответствует притяжению.

Теория конденсации Ван-дер-Ваальса, которую мы рассмотрим в этом параграфе, играет ту же роль в общей теории конденсации, что и теория молекулярного поля Вейсса в общей теории ферромагнетизма.

Рассмотрим среднее полное взаимодействие N частиц в каноническом ансамбле:

$$\langle V \rangle = \frac{\int V \exp[-\beta V] d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N}{\int \exp[-\beta V] d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N}, \quad (7.1)$$

где

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}, \quad V_{ij} = V(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|).$$

Так как все члены этой суммы идентичны, учитывая, что их число равно $N(N-1)/2$, несложно получить

$$\langle V \rangle = \frac{N(N-1)}{2} \frac{\int V_{12} \exp[-\beta V] d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N}{Z}, \quad (7.2)$$

$$Z = \int \exp[-\beta V] d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N.$$

Введем вероятность обнаружить частиц 1 и 2 соответственно в элементарных объемах dr_1 и dr_2 :

$$\rho^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{\int \exp[-\beta V] d\vec{r}_3 d\vec{r}_4 \dots d\vec{r}_N}{Z}. \quad (7.3)$$

Величина $\rho^{(2)}$ имеет порядок $1/\Omega^2$, где Ω - объем. Из-за трансляционной симметрии $\rho^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ зависит только от разности $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$. Введем парную корреляционную функцию

$$\rho^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\Omega^2} g(\vec{r}_1 - \vec{r}_2). \quad (7.4)$$

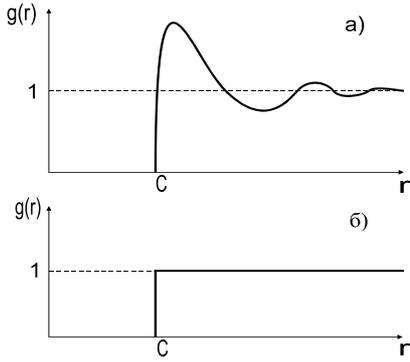


Рис.12. Парная корреляционная функция в модели взаимодействующих твердых шаров: а - общий вид; б - идеальные твердые шары

Величина g зависит от взаимодействия. В идеальном газе при $V = 0$ (классические твердые шары) $g = 1$ при $|r| > C$, и $g = 0$ при $|r| < C$. В общем случае вид g показан на рис.12. Подставив (7.4) в (7.2), выразим взаимодействие через корреляционную функцию:

$$\begin{aligned}
 \langle V \rangle &= \frac{N(N-1)}{2\Omega^2} \iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 g(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \\
 &= \frac{\rho N}{2} \int d\vec{r} g(\vec{r}) V(\vec{r}) \Bigg|_{\substack{N \rightarrow \infty, \rho = N/\Omega \\ \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2}}
 \end{aligned} \tag{7.5}$$

Для центральных сил коррелятор g зависит только от модуля r : $g(\vec{r}) = g(|r|)$. При $r \rightarrow \infty$ функция $g \rightarrow 1$ (см. рис.12). Кроме того, корреляционная функция в общем случае должна зависеть от плотности ρ . В теории Ван-дер-Ваальса этой зависимостью пренебрегают. Тогда окончательно записываем взаимодействие:

$$\langle V \rangle / N = -a\rho = -a / \nu, \quad \nu = \Omega / N = 1 / \rho, \quad (7.6)$$

$$a = -\frac{1}{2} \int d\vec{r} g(r)V(r) > 0.$$

В (7.6) константа $a > 0$ (имеющая размерность энергии, умноженной на объем) в силу того, что $g = 0$ при $|r| < C$ и $V(r) < 0$, $g \sim 1$ при $|r| > C$ (т.е. фактически мы выбираем почти идеальную корреляционную функцию (см. рис.12,б) и соответствующий потенциал).

Уравнение (7.6) - это фактически гипотеза о молекулярном поле, действующем на частицу в точке r от других частиц в точках r' : $\int d\vec{r}' \rho(r')V(\vec{r}-\vec{r}')$. Если положить плотность ρ не зависящей от координаты, то средний потенциал будет иметь вид

$$\rho \int d\vec{r}' V(\vec{r}-\vec{r}') \approx -2a / \nu. \quad (7.7)$$

Как видим, “среднеполевое” выражение (7.7) полностью идентично (с учетом множителя 2) соотношению Ван-дер-Ваальса (7.6). Из уравнения (7.6) вытекает существование “внутреннего” давления, которое стремится сжать газ:

$$P_{\text{int}} = \partial \langle V \rangle / \partial \Omega = a / \nu^2. \quad (7.8)$$

Полное давление равно сумме внутреннего и внешнего:

$$P + P_{\text{int}} = P + a / \nu^2. \quad (7.9)$$

Суммарное давление (7.9) уравнивается тепловым давлением kT / ν , которое стремится расширить газ. В теории Ван-дер-Ваальса в тепловом давлении необходимо учесть существование минимального объема шаров. Если обозначить объем одного шара b , то эффективный объем, приходящийся на один шар:

$$\nu_{\text{eff}} = \Omega / N = \nu - b. \quad (7.10)$$

Окончательно, учитывая (7.9) и (7.10), получаем уравнение Ван-дер-Ваальса

$$P + \frac{a}{v^2} = \frac{kT}{v - b} . \quad (7.11)$$

Уравнение (7.11) описывает фазовый переход первого рода “газ - жидкость” и имеет “петлю” на изотермах при температурах, меньших критической температуры конденсации T_c (рис.13). Реально петля неустойчива, и в обведенной пунктирной линией области имеет место равновесие жидкой и газообразной фаз с постоянным давлением, т.е. реализуется отмеченная на рис.13 линия $P=\text{const}$.

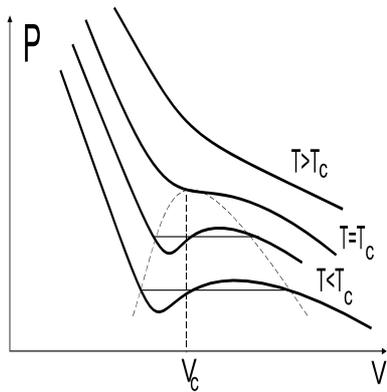


Рис.13. Изотермы Ван-дер-Ваальса. v_c - критический объем

Из уравнения (7.11) и рис.13 следует, что точка перехода T_c имеет место, когда на изотермах точка перегиба совпадает с экстремумом зависимости $P(V)$, и эта трикритическая точка, за которой при больших температурах остается только газообразная фаза, определяется следующими соотношениями

$$\partial P / \partial v = 0, \quad \partial^2 P / \partial v^2 = 0 . \quad (7.12)$$

Используя (7.11) и (7.12), получим, что критическая температура и соответствующий ей минимальный единичный объем, занимаемый жидкой фазой, равны:

$$T_c = \frac{8}{27} \frac{a}{kb}, \quad v_c = 3b . \quad (7.13)$$

Задача

7.1.1.1. Исходя из уравнения Ван-дер-Ваальса, рассчитать критическую температуру T_c , критический объем v_c , и критическое давление P_c , определяющие точку на фазовой диаграмме, за которой имеет место только газообразное состояние.

7.1.2. Модель решеточного газа

Покажем как, используя модель Изинга, можно описать конденсацию и получить уравнение состояния, аналогичное уравнению Ван дер Ваальса (Ли, Янг, 1952г.). Этот подход называется моделью решеточного газа.

Разобьем весь объем на ячейки (узлы), образующие правильную кристаллическую решетку, заполняющую все пространство. Пусть число ячеек равно N_0 . Частицы передвигаются по этому пространству, занимая и покидая узлы (ячейки) в каждый момент времени. Сопоставим направленному вверх спину занятой частицей узел, а направленному вниз - пустой узел и введем величину ε_i , равную 1, если узел i занят, и равную нулю, если он пуст:

$$\varepsilon_i = \frac{1 + \mu_i}{2} = \begin{cases} +1, & \mu_i = +1; \\ 0, & \mu_i = 0. \end{cases} \quad (7.14)$$

Тогда гамильтониан Изинга со спинами μ_i по такой решетке можно выразить через ε_i :

$$\begin{aligned} \bar{H} = & -1/2 \sum_{ij} V_{ij} \mu_i \mu_j - \sum \mu_i H = -1/2 \sum_{ij} 4V_{ij} \varepsilon_i \varepsilon_j + \sum_{ij} V_{ij} (\varepsilon_i + \varepsilon_j) + \\ & + 1/2 \sum_{ij} V_{ij} - H \sum_{ij} (2\varepsilon_i - 1). \end{aligned} \quad (7.15)$$

Переобозначим параметр взаимодействия и введем его нулевую фурье-компоненту

$$V(0) = \sum_{ij} V_{ij} = V(q=0) = \sum_i V_{ij} \exp(i\vec{r}_i \cdot \vec{q})|_{q=0}, \quad u_{ij} = 4V_{ij}. \quad (7.16)$$

Используя (7.16), из (7.15) получаем:

$$\bar{H} = -1/2 \sum_{ij} u_{ij} \varepsilon_i \varepsilon_j - \sum_i 2\varepsilon_i \{H - V(0)\} + C, \quad C = -N_0 V(0)/2 + N_0 H.$$

Заметим, что это выражение с точностью до несущественной константы является также обычным гамильтонианом Изинга, но только по большому каноническому ансамблю (число ненулевых “спинов” ε_i не фиксировано) с химическим потенциалом $\mu = 2\{H - V(0)\}$:

$$\bar{H} = -1/2 \sum_{ij} u_{ij} \varepsilon_i \varepsilon_j - \mu N, \quad N = \sum_i \varepsilon_i. \quad (7.17)$$

Таким образом, статистическая сумма для системы спинов переходит в большую статистическую сумму для решеточного газа. Теперь можно продолжить аналогию дальше и получить уравнение состояния. Намагниченность R в модели Изинга связана с плотностью решеточного газа ρ :

$$\rho = \frac{\langle N \rangle}{N_0} = \frac{1}{N_0} \sum_i \varepsilon_i = \frac{1}{N_0} \sum_i \left\{ \frac{1}{2} + \frac{\varepsilon_i}{2} \right\} = \frac{1+R}{2}. \quad (7.18)$$

Мы можем теперь, используя для (7.15) приближение Вейсса, записать самосогласованное уравнение для намагниченности $R = \text{th}[\beta(V(0)R + H)]$ и получить из него уравнение для плотности решеточного газа ρ в терминах перенормированного потенциала u и химического потенциала μ :

$$2\rho - 1 = \text{th}\left[\frac{\beta}{2}(\rho u(0) + \mu)\right], \quad (7.19)$$

или

$$-\beta\mu = \beta\rho u(0) + \ln \frac{1-\rho}{\rho}. \quad (7.20)$$

Получим давление P и уравнение состояния, учитывая соотношения

$$\frac{\partial\mu}{\partial\rho} = N_0 \frac{\partial\mu}{\partial N}; \quad \frac{\partial\mu}{\partial N} = \frac{1}{N_0} \left(\frac{\partial\mu}{\partial P} \right) \frac{\partial P}{\partial\rho} \Rightarrow \left(\frac{\partial\mu}{\partial\rho} \right)_T = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial\mu}{\partial\rho} \right)_T. \quad (7.21)$$

Используя (7.21), получаем окончательно из (7.20) уравнение состояния в модели решеточного газа

$$P = -\frac{\rho^2}{2} u(0) - kT \ln(1-\rho). \quad (7.22)$$

Уравнение (7.22) имеет качественно одинаковые изотермы с уравнением Ван-дер-Ваальса (см. рис.13). Сравним его с уравнением Ван-дер-Ваальса (7.11), переписав (7.11) в следующем виде:

$$P = -\frac{\rho^2}{2} u(0) + kT \frac{\rho}{1-\rho}; \quad a = u(0)/2, b = 1. \quad (7.23)$$

Заметим, что асимптоты последних членов (тепловое давление) в (7.22) и (7.23) при $\rho \rightarrow 0$ (предел идеального газа) одинаковы и при $\rho \rightarrow 1$ (случай бесконечного давления) близки.

Определим критические характеристики решеточной модели (7.22). Учитывая, что критическая точка из модели Изинга определяется как $R=0$, имеем:

$$\rho = \frac{1+R}{2}, \quad R=0 \Rightarrow \rho_c = 1/2 \Rightarrow \rho = 1/\nu \Rightarrow \nu_c = 2 \quad (7.24)$$

(из уравнения Ван-дер-Ваальса $\nu_c = 3$ ($b=1$)). Заметим, что значение $\nu_c = 2$ для решеточной модели можно также получить непосредственно из условий (7.12).

Обсудим важный вопрос о роде фазового перехода. Несложно проверить, что из равенства химических потенциалов μ и давлений P находящихся в равновесии фаз (жидкости и

пара) следует: $\mu = -u(0)/2 \Rightarrow H = 0$. Таким образом, аналог решеточного газа (ферромагнетик) находится в нулевом внешнем поле. Для ферромагнетика при $T < T_c$ намагниченность меняется скачком от $+R$ до $-R$ при бесконечно малом изменении поля H от $+0$ до -0 . Таким образом, это фазовый переход первого рода, при котором терпит разрыв первая производная свободной энергии F .

Задачи

7.1.2.1. Показать совпадение (или близость) асимптот уравнения Ван-дер-Ваальса и уравнения решеточного газа в пределах плотностей $\rho \rightarrow 0$ (идеальный газ) и $\rho \rightarrow 1$ (бесконечное давление). Получить критическую температуру и критическое давление в модели решеточного газа.

7.1.2.2. Доказать, что из равенства химических потенциалов μ и давлений P находящихся в равновесии фаз (жидкости и пара) в решеточной модели следует, что химический потенциал $\mu = -u(0)/2$.

7.1.3. Флуктуации в модели решеточного газа

По аналогии с моделью Изинга найдем флуктуации в решеточной модели. Воспользуемся соотношением (3.15а) для флуктуаций магнитных моментов вблизи точки фазового перехода:

$$\langle |\mu_q|^2 \rangle = \frac{1 - R^2}{1 - \beta V(\vec{q})(1 - R^2)}. \quad (7.25)$$

Перепишем его в терминах решеточной модели. Учитывая соотношения (7.14), (7.16) и (7.18), получаем:

$$\langle |\varepsilon_q|^2 \rangle = \frac{1}{4} \langle |\mu_q|^2 \rangle = \frac{\rho(1-\rho)}{1 - \beta u(\vec{q}) \rho(1-\rho)}. \quad (7.26)$$

Роль твердых ядер отражается на появлении в знаменателе (7.26) множителя $(1-\rho)$. Видим, что в жидкой фазе, когда $\rho \approx 1$, этот множитель подавляет флуктуации, приводя к устойчивой жидкости.

7.2. Переход жидкость - твердое тело. Кристаллизация

Переход “жидкость-твердое тело” это переход из полной симметрии жидкой фазы в периодическую симметрию твердого тела. Пусть частицы взаимодействуют с парным взаимодействием $v(|r_i - r_j|)$ в виде, показанном на рис. 11. Предположим, что число ближайших соседей велико, так что можно использовать приближение среднего поля. Характерной чертой, отличающей твердое состояние от жидкого является периодичность плотности $\rho(r)$. Тогда потенциал, действующий на частицу в точке r от поля других частиц, также будет периодической функцией:

$$V(r) = \int d\vec{r}' \rho(r') v(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (7.27)$$

Учтем, что для модели твердых шаров (см. рис.11), заложенной во взаимодействии $v(r)$, оно меньше нуля при $r > C$, где C - радиус шаров (см. параграф 7.1.1), а в противном случае корреляционная функция g равна нулю (см. рис.12). Отсюда тогда вместо потенциала (7.27) пишем:

$$V(r) = \int d\vec{r}' \rho(r') g(\vec{r} - \vec{r}') v(\vec{r} - \vec{r}') = - \int d\vec{r}' \rho(r') \bar{v}(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (7.28)$$

где $\bar{v}(r)$ - перенормированное с учетом знака парное взаимодействие. В твердом теле $\rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r} + \vec{a}n)$, т.е. плотность периодична с периодом решетки a . Ее в этом случае можно разложить в ряд Фурье по векторам обратной решетки:

$$\rho(\vec{r} + \vec{a}) = \sum_q \rho_q \exp[i\vec{q}(\vec{r} + \vec{a})] = \sum_q \rho_q \exp[i\vec{q}\vec{r}] = \rho(\vec{r}). \quad (7.29)$$

Отсюда и следует, что $\exp(i\vec{q}\vec{a}) = 1 \Rightarrow \vec{q} = \vec{G}$ - вектор обратной решетки, и

$$\rho(\vec{r}) = \sum_G \rho_G \exp[i\vec{G}\vec{r}]. \quad (7.30)$$

Доказательство, что самосогласованный потенциал (7.28) имеет ту же периодичность, что и ρ , следует из преобразования Фурье:

$$V(q) = \rho(q)\bar{v}(\vec{q}) = 0; \quad \vec{q} \neq \vec{G}, \quad (7.30a)$$

так как в этом случае легко показать, что $V(r) = V(r+a)$.

Для простоты рассмотрим одномерную ситуацию. Тогда вектор обратной решетки $G = \{2\pi/2a\}n = (\pi/a)n$, где через $2a$ обозначим период решетки. Отсюда

$$\rho(x) = \sum_n \rho_n \exp\left[i\frac{\pi n}{a}x\right], \quad (7.31)$$

$$\rho_n = \frac{1}{2a} \int_{-a}^a dx \exp\left[-i\frac{\pi n}{a}x\right] \rho(x). \quad (7.32)$$

Фазовый переход будет характеризоваться существованием ненулевых фурье-компонент плотности $\rho_n \neq 0$ при $n \neq 0$, так как если $\rho_n = 0$, $n \neq 0$, то остается только нулевая компонента $\rho_0 = \text{const}$, т.е. жидкая фаза.

Самосогласованное уравнение для $\rho(r)$ получим из распределения Больцмана частиц в поле с потенциалом $V(r)$:

$$\rho(x) = \frac{\exp[-\beta V(x)]}{\int \exp[-\beta V(x)] dx}, \quad (7.33)$$

где интегрирование идет по элементарной ячейке $(-a, a)$. Перепишем потенциал $V(x)$ (7.28):

$$V(x) = -\int dx' \bar{v}(x-x') \rho(x') = -\sum_n \rho_n \bar{v}(-n) \exp[i \frac{\pi}{a} nx]. \quad (7.34)$$

при этом несложно показать, что из $\bar{v}(x) = \bar{v}(-x)$ следует $\bar{v}(n) = \bar{v}(-n)$. Аналогичная четность имеет место и для ρ . Тогда:

$$V(x) = -\sum_n \rho_n \bar{v}_n \cos(\frac{\pi}{a} nx), \quad (7.35)$$

$$\rho_n = \int dx \rho(x) \cos(\frac{\pi}{a} nx).$$

Подставив (7.33) в (7.35), имеем для фурье-компоненты:

$$\rho_n = \frac{\int_{-a}^a dx \cos(\frac{\pi}{a} nx) \exp\{\beta \sum_m \rho_m \bar{v}_m \cos(\frac{\pi}{a} mx)\}}{\int_{-a}^a dx \exp\{\beta \sum_m \rho_m \bar{v}_m \cos(\frac{\pi}{a} mx)\}}. \quad (7.36)$$

Полагаем, что вблизи температуры перехода, когда кристалл еще не стал регулярной решеткой, основной вклад дают компоненты ρ_0 и ρ_1 . Наличие перехода можно тестировать по отличию от нуля компоненты ρ_1 , которая в этом случае удовлетворяет уравнению

$$\rho_1 = \frac{\int_{-a}^a dx \cos(\frac{\pi}{a} x) \exp\{2\beta \rho_1 \bar{v}_1 \cos(\frac{\pi}{a} x)\}}{\int_{-a}^a dx \exp\{2\beta \rho_1 \bar{v}_1 \cos(\frac{\pi}{a} x)\}} \quad (7.37)$$

(в (7.37) мы оставили только ρ_0 и ρ_1 , при этом член с ρ_0 сократился, а коэффициент “2” в экспоненте - из-за положительной и отрицательной части суммы по m : $\rho_1 + \rho_{-1} = 2\rho_1$). Это уравнение совпадает с уравнением Вейсса для намагниченности R в молекулярном поле $\bar{v}_1 R$ (если R сопоставить с ρ_1) в двумерном случае в пределе непрерывного классического спина S . Действительно, если классический Гейзенберговский гамильтониан имеет вид

$$\bar{H} = -1 / 2 \sum_{i \neq j} v_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j, \quad (7.38)$$

то молекулярное поле Вейсса в точке i равно

$$\sum_j v_{ij} \langle \vec{S}_j \rangle,$$

а энергия взаимодействия спина $\langle S_i \rangle$ с этим полем равна:

$$V = - \sum_j v_{ij} \langle \vec{S}_i \rangle \cdot \vec{S}_j = v_1 \rho_1 |\vec{S}_i| \cos \theta,$$

где θ - угол между S_i и полной намагниченностью. Тогда уравнение Вейсса для $\rho_1 = |\langle S_i \rangle|$ совпадает с (7.37).

Рассчитаем критическую температуру. Если устремить в (7.36) к нулю ρ_n , то

$$\rho_n = \beta \rho_n \bar{v}_n, \quad T_c = \bar{v}_n. \quad (7.39)$$

Выражение для критической температуры записано в том смысле, что ее приравнивают к максимальной по величине фурье-компоненте (исключая нулевую) потенциала.

Таким образом, если бы объем системы не уменьшался при отвердевании, мы имели бы дело с обычным фазовым переходом второго рода. А так как кристаллизация обязательно сопровождается уменьшением объема, то фазовый переход “жидкость-кристалл” - это фазовый переход *первого* рода.

Задачи

7.2.1. Показать, что если периодическую (с периодом a) величину ρ , разложить в одномерный ряд Фурье

$$\rho(x) = \sum_n \rho_n \exp\left[i \frac{\pi n}{a} x\right], \text{ то обратное преобразование}$$

будет иметь вид $\rho_n = \frac{1}{2a} \int_{-a}^a dx \exp\left[-i \frac{\pi n}{a} x\right] \rho(x)$, и из четности $\rho(x) = \rho(-x)$ следует $\rho(n) = \rho(-n)$.

7.2.2. Показать, что самосогласованное уравнение (7.37) на Фурье-компоненту ρ_l представляется в виде $\rho_l = I_1(2\beta\rho_l \bar{v}_1) / I_0(2\beta\rho_l \bar{v}_1)$, где I_0 и I_1 - функции Бесселя мнимого аргумента. Пользуясь асимптотами $I_0(x)$, $I_1(x)$ при $x \rightarrow 0$ и $x \rightarrow \infty$, получить температурную зависимость ρ_l при $T \rightarrow 0$ ($\sim 1 - \eta \exp(-\bar{v}_1 / T)$) и $T \rightarrow T_c$, ($\rho_l = \sqrt{2(T_c / T - 1)}$, $T_c = \bar{v}_1$).

7.2.3. Доказать из уравнения (7.36) на фурье-компоненты ρ_n , что точка перехода удовлетворяет соотношению $\rho_n = \beta \rho_n \bar{v}_n$ при любом n .

Указание: воспользоваться соотношением (и доказать его):

$$\int_{-1}^1 dx \cos \pi n x \cos \pi m x = \delta_{n,m} + \delta_{n,-m}.$$

8. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ МЕТАЛЛ - ИЗОЛЯТОР

Рассмотрим фазовые переходы, происходящие в переходных металлах и сплавах. Эти вещества испытывают переход в диэлектрическое состояние под действием различных причин: примесей, кулоновского взаимодействия и т.д. Мы исследуем переход Мотта, переход Келдыша-Копаева, модель Андерсона и модель Хаббарда. Ключевым в понимании перехода из металлического проводящего состояния в диэлектрическое состояние является то, что переход происходит из-за локализации электронов в результате перестройки их спектра в силу различных причин.

8.1. Переход Мотта

У ряда переходных соединений наблюдается следующее: с увеличением температуры происходит скачок проводимости, который может достигать многих порядков величины. Возможное объяснение состоит в том, что с увеличением температуры величина постоянной решетки переходит через пороговое значение, при котором локализованные электроны становятся делокализованными. Этот аргумент, выдвинутый Моттом, может объяснить резкое увеличение проводимости. Очевидно, что с приложением давления также можно изменить постоянную решетки, так что наблюдаемое резкое увеличение проводимости в этих соединениях при достижении некоего критического значения внешнего давления можно также объяснить механизмом Мотта.

Рассмотрим на простой модели возможность реализации перехода Мотта, не интересуясь конкретным способом изменения постоянной решетки (и, соответственно, плотности электронного газа).

Пусть сначала вещество находится в состоянии изолятора. Валентный электрон движется вокруг своего иона, находясь в его кулоновском поле, с энергией:

$$E = -\frac{e^2}{r} + \frac{p^2}{2m}. \quad (8.1)$$

Несложно из соотношения неопределенности оценить координатную зависимость кинетического члена в энергии

$pr \sim \hbar \Rightarrow p \sim \hbar / r$, откуда

$$E = -\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2mr^2}. \quad (8.2)$$

Минимальное значение энергии в равновесии дает условие на боровский радиус орбиты a_B :

$$\frac{\partial E}{\partial r} = 0 \Rightarrow r = r_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = a_B. \quad (8.3)$$

В свою очередь значение энергии в точке минимума

$$E = -\frac{e^2}{2a_B} < 0. \quad (8.4)$$

Таким образом, электрон находится в связанном состоянии, не проводит ток, и состояние - изолятор.

Теперь учтем, что в электронном газе кулоновское взаимодействие сильно экранировано. Это можно получить из следующих соображений.

Рассмотрим слабый потенциал $e\phi$, приложенный к системе электронов. Рассчитаем отклик на него электронного газа. Пусть приложенный потенциал индуцирует поправку к плотности электронов $\delta\rho = e\phi \rho(E_f)$, где $\rho(E_f)$ - плотность состояний на уровне Ферми. Действительно:

$$\begin{aligned} \delta\rho &= n(e\phi) - n(0) = \\ &= \sum_{k\sigma} \left\{ \frac{1}{1 + \exp[\beta(\varepsilon_k - e\phi - \mu)]} - \frac{1}{1 + \exp[\beta(\varepsilon_k - \mu)]} \right\} \approx \quad (8.5) \\ \phi \rightarrow 0 &\approx \sum_{k\sigma} -e\phi \frac{\partial f_k}{\partial \varepsilon_k} = e\phi \sum_{k\sigma} \delta(\varepsilon - E_f) \Big|_{T \ll E_f} = e\phi \rho(E_f). \end{aligned}$$

Рассмотрим уравнение Пуассона

$$\nabla^2 \phi = 4\pi e(\rho_0 + \delta\rho), \quad \rho_0 = \delta(r). \quad (8.6)$$

Переходя к фурье-компонентам

$$\phi(\vec{r}) = \int d^3q e^{i\vec{q}\vec{r}} \phi_q, \quad (8.7)$$

находим из (8.5), (8.6)

$$\phi_q = \frac{4\pi e}{q^2 + 1/r_D^2}, \quad r_D^2 = \frac{1}{4\pi e^2 \rho(E_f)}. \quad (8.8)$$

Здесь r_D - дебаевский радиус экранирования, характеризующий пространственный масштаб кулоновского взаимодействия в электронном газе. Действительно, получим координатную зависимость потенциала

$$\phi(\vec{r}) = 4\pi e \int d^3q \frac{\exp[i\vec{q}\vec{r}]}{q^2 + r_D^{-2}} = e \frac{\exp[-r/r_D]}{r}. \quad (8.9)$$

Дебаевский радиус экранирования зависит от концентрации электронов n : $\frac{1}{r_D^2} = \frac{6\pi e^2 n}{E_f} \sim n^{1/3}$, так что при $n=0$ (разреженный газ) $r_D \rightarrow \infty$ и экранировка исчезает. Величина r_D в металлах $\sim 10^{-8}$ см ($\sim a_B$). Подставим зависимость (8.9) в выражение для энергии (8.2)

$$E = -\frac{e^2 \exp[-r/r_D]}{r} + \frac{\hbar^2}{2mr^2}. \quad (8.10)$$

Экранирование ослабляет энергию связи, и при определенном значении r_D может наступить делокализация электро-

на, и переход Мотта в металлическое состояние. Получим точку перехода исходя из (8.10). Условие на равновесие (8.3) приводит к

$$E = \frac{a_B e^2}{2r_0^2} \left\{ \frac{r_0 - r_D}{r_0 + r_D} \right\}, \quad (8.11)$$

где $r_0 \sim a_B$ - решение следующего уравнения (уравнения равновесия $\partial E / \partial r = 0$)

$$\exp[-r_0 / r_D] = \frac{a_B}{r_0} \frac{r_D}{r_0 + r_D}. \quad (8.12)$$

Из (8.11) следует, что при $r_D < r_0 \sim a_B$ - энергия равновесия больше нуля, т.е. нет связанного состояния, и система делокализуется, становясь металлической. Это условие с учетом определения a_B переписывается следующим образом:

$$n^{1/3} a_B > \frac{1}{4} \left(\frac{\pi}{3} \right)^{1/3} \approx \frac{1}{4}. \quad (8.13)$$

Таким образом, при возрастании плотности электронного газа (т.е. увеличении давления и уменьшении межатомного расстояния) до величины, когда на каждый электрон приходится сфера с радиусом порядка боровского радиуса, система переходит из диэлектрического состояния в металлическое, т.е. реализуется переход Мотта.

Задачи

8.1.1. Исходя из фурье-компоненты потенциала ϕ_q (8.8) в электронном газе, рассчитать координатную зависимость $\phi(r)$.

8.1.2. Минимизировать энергию электрона с учетом экранировки в поле иона (8.10) и найти дебаевский радиус r_D , при котором исчезает связанное состояние при переходе Мотта.

8.2. Фазовый переход полуметалл - изолятор в модели Келдыша-Копаева. Экситоны

Рассмотрим металл с малой концентрацией носителей. Если валентная зона такого вещества перекрывается с более высокой зоной проводимости (рис.14,*a*), то система ведет себя как металл. В такой системе возможны как электронная, так и дырочная проводимость, и кроме того, свободные носители

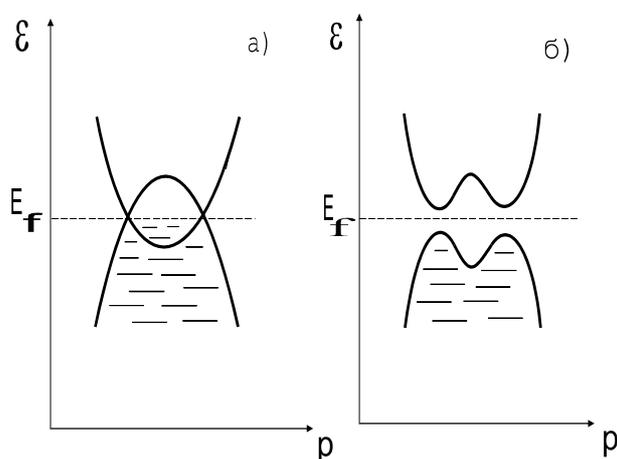


Рис.14. Зонная картина полуметалла для перехода металл - диэлектрик в модели Келдыша - Копаева:
a) - металлическое состояние, *б*) - диэлектрическое состояние (появляется кулоновская щель в спектре)

могут конденсироваться в электрон-дырочные пары - экситоны, приводя к локализации и к фазовому переходу в диэлектрическое состояние, что отражается на зонной картине (рис.14,*б*) - появляется кулоновская щель в спектре, разделяющая зоны. Увеличение температуры может разрывать эк-

ситонную связь, т.е. переход может происходить по температуре.

Рассмотрим сначала качественно электрон-дырочную пару в приближении эффективной массы вблизи дна зоны проводимости и верха валентной зоны с энергиями

$$E_e = p_1^2/2m_e - E_f, \quad E_h = -p_2^2/2m_h - E_f, \quad m_2 = -m_h.$$

Учитывая взаимное кулоновское притяжение, запишем суммарную энергию экситона - электрон-дырочной пары (за вычетом отсчета от уровня Ферми $2E_f$), разделяя импульсы на импульс относительного движения p и импульс движения центра инерции системы P :

$$\begin{aligned} E &= E_e + E_h = p_1^2/2m_e + p_2^2/2m_h - e^2/r = \\ &= p^2/2m + P^2/2M - e^2/r, \\ m &= \frac{m_e m_h}{m_e + m_h}, \quad M = m_e + m_h, \end{aligned} \quad (8.14)$$

$$\vec{p} = [m_2 \vec{p}_1 - m_1 \vec{p}_2] / [m_e + m_h], \quad \vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2.$$

Пренебрегая движением центра инерции ($P=0$), видим, что система может иметь связанное состояние (см., например, анализ (8.1)-(8.4)), так что энергия отдельно электрона и дырки больше, чем суммарная энергия пары.

Рассчитаем теперь корректно (в подходе Келдыша-Копалева) фазовый переход диэлектрик - металл, учитывая существование электрон-дырочных пар в системе.

Рассмотрим гамильтониан полуметалла, учитывая только валентную зону и зону проводимости вблизи уровня Ферми:

$$\bar{H} = \sum_p \{a_p^+ a_p E_1(p) + b_p^+ b_p E_2(p)\} + \sum_{p,p'} U_{pp'} a_p^+ b_p^+ b_{p'} a_{p'}. \quad (8.15)$$

Здесь оператор a^+ (b^+) - оператор рождения электрона (дырки) в зоне проводимости (валентной зоне), E_1, E_2 - соответствующие

щие энергии. Первый член в (8.15) - кинетическая энергия электронов и дырок, второй - рождение (оператор $\mu_p^+ = a_p^+ b_p^+$) и уничтожение (оператор $\mu_p = b_p a_p$) экситонов за счет кулоновского взаимодействия (притяжения) $U_{pp'}$. Для простоты положим $m_e = m_h, E_1 = E_2 \equiv \xi_p = p^2/2m - E_f$. Перепишем гамильтониан

$$\bar{H} = \sum_p \xi_p \{a_p^+ a_p + b_p^+ b_p\} + \sum_{p,p'} U_{pp'} \mu_p^+ \mu_{p'}. \quad (8.16)$$

Второе слагаемое $\sum_p \mu_p^+ \sum_{p'} U_{pp'} \mu_{p'}$ имеет вид взаимодействия со средним полем:

$$\Delta_p = \sum_{p'} U_{pp'} \langle b_{p'} a_{p'} \rangle. \quad (8.17)$$

Отсюда, разрезая взаимодействующую часть гамильтониана по среднему полю

$$a_p^+ b_p^+ b_{p'} a_{p'} \approx \langle a_p^+ b_p^+ \rangle b_{p'} a_{p'} + a_p^+ b_p^+ \langle b_{p'} a_{p'} \rangle,$$

имеем

$$\bar{H} = \sum_p \xi_p \{a_p^+ a_p + b_p^+ b_p\} + \sum_p \{a_p^+ b_p^+ \Delta_p + b_p a_p \Delta_p^*\}. \quad (8.18)$$

Модель (8.18) можно диагонализировать, если ввести канонические преобразования операторов

$$\begin{aligned} a_p &= u_p \alpha_p + v_p \beta_p^+, & b_p &= u_p \beta_p - v_p \alpha_p^+, \\ a_p^+ &= u_p \alpha_p^+ + v_p \beta_p, & b_p^+ &= u_p \beta_p^+ - v_p \alpha_p, \end{aligned} \quad (8.19)$$

при этом новые операторы также фермионы:

$$\alpha_q \alpha_{q'}^+ + \alpha_{q'}^+ \alpha_q = \delta_{qq'}, \text{ если } u_p^2 + v_p^2 = 1.$$

Подставив (8.19) в (8.18), получаем, используя соотношения коммутации:

$$\begin{aligned} \bar{H} = & \sum_p \{ \alpha_p^+ \alpha_p + \beta_p^+ \beta_p \} \{ [u_p^2 - v_p^2] \xi_p - 2u_p v_p \Delta_p \} + \\ & + \sum_p \{ \alpha_p^+ \beta_p^+ + \beta_p \alpha_p \} \{ [u_p^2 - v_p^2] \Delta_p + 2u_p v_p \xi_p \}. \end{aligned} \quad (8.20)$$

Зануляя коэффициент при недиагональном слагаемом $(\alpha^+ \beta^+, \alpha \beta)$, получаем уравнения для определения u, v :

$$[u_p^2 - v_p^2] \Delta_p + 2u_p v_p \xi_p = 0, \quad u_p^2 + v_p^2 = 1. \quad (8.21)$$

Решая (8.21), находим

$$v_p^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_p}{\varepsilon_p} \right), \quad u_p^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_p}{\varepsilon_p} \right), \quad \varepsilon_p = \sqrt{\xi_p^2 + \Delta_p^2}. \quad (8.22)$$

Гамильтониан (8.20) представляется при этом в диагональном виде

$$\bar{H} = \sum_p \varepsilon_p \{ \alpha_p^+ \alpha_p + \beta_p^+ \beta_p \}. \quad (8.23)$$

Таким образом, величина ε_p имеет смысл спектра возбуждений над поверхностью Ферми и говорит о появлении конечной кулоновской щели ($\sim 2\Delta$) на уровне Ферми между валентной зоной и зоной проводимости (рис. 14,б).

Введем функции распределения возбуждений в зонах:

$$n_p^\alpha = \langle \alpha_p^+ \alpha_p \rangle, \quad n_p^\beta = \langle \beta_p^+ \beta_p \rangle. \quad (8.24)$$

Пусть $m_e = m_h \text{ ® } n_p^\alpha = n_p^\beta = n_p$, при этом распределение электронов:

$$f_p = \langle a_p^+ a_p \rangle = u_p^2 \langle \alpha_p^+ \alpha_p \rangle + v_p^2 \langle \beta_p \beta_p^+ \rangle = u_p^2 n_p + v_p^2 (1 - n_p). \quad (8.25)$$

В (8.25) учтено, что вклад недиагональных членов равен нулю:

$$\langle \alpha_p^+ \beta_p^+ \rangle = \langle \beta_p \alpha_p \rangle = 0.$$

Функция распределения n_p фермиевская с нулевым химпотенциалом μ , так как число квазичастиц не сохраняется :

$$n_p = \frac{1}{\exp[\varepsilon_p / T] + 1}. \quad (8.26)$$

Определим уравнение для параметра порядка (и щели в спектре) Δ . Для этого подставим в определение (8.17) соотношения (8.19), (8.22) и (8.24). После некоторых преобразований имеем

$$\begin{aligned} \Delta_p &= - \sum_{p'} U_{pp'} u_{p'} v_{p'} (1 - 2n_{p'}) = \\ &= - \sum_{p'} U_{pp'} \frac{\Delta_{p'}}{2\sqrt{\xi_{p'}^2 + \Delta_{p'}^2}} (1 - 2n_{p'}). \end{aligned} \quad (8.27)$$

В (8.27) учтено, что из (8.21)-(8.22) следует

$$u_p v_p = - \frac{\Delta_p}{2\sqrt{\xi_p^2 + \Delta_p^2}}.$$

Пусть взаимодействие $U_{pp'}$ меньше нуля в некотором диапазоне $|\xi_p - \xi_{p'}| < \bar{\omega}$ (где осуществляется электрон-дырочное притяжение). Если положить $U_{pp'} = -V$ в диапазоне $(-\bar{\omega}, \bar{\omega})$ и равным нулю вне этого диапазона по энергии, то из (8.27) получаем, учитывая, что Δ в этом случае не зависит от p :

$$\Delta = V \int_{-\bar{\omega}}^{\bar{\omega}} d\xi N(\xi) \Delta \text{th} \left[\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2T} \right] \frac{1}{2\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}. \quad (8.28)$$

Уравнение (8.28) совпадает с уравнением БКШ для сверхпроводников. Здесь $N(\xi) = \rho(\xi) / 2 \sim \sqrt{\xi + E_f} \approx \sqrt{E_f} = \text{const}$ - односпиновая плотность состояний, вблизи уровня Ферми слабо зависящая от энергии. Определив как константу связи величи-

ну $\lambda = N(0)V$, окончательно получаем интегральное уравнение на Δ :

$$1 = \lambda \int_0^{\bar{\omega}} d\xi \operatorname{th} \left[\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2T} \right] \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}. \quad (8.29)$$

Проанализируем (8.29). При нулевой температуре интеграл берется точно, и мы получаем параметр порядка

$$\Delta = \frac{\bar{\omega}}{\operatorname{sh}(1/\lambda)} \approx 2\bar{\omega} \exp[-1/\lambda], \quad \lambda \ll 1, \quad T = 0. \quad (8.30)$$

В пределе $\Delta \rightarrow 0$ найдем критическую температуру. В этом случае

$$\begin{aligned} 1 &= \lambda \int_0^{\bar{\omega}} d\xi \frac{\operatorname{th}(\xi/2T_c)}{\xi} = \operatorname{th} x \ln x \Big|_0^{\bar{\omega}/2T_c} - \int_0^{\bar{\omega}/2T_c} dx \frac{\ln x}{\operatorname{ch}^2 x} = \\ &= \ln \left\{ \frac{2\bar{\omega}\gamma}{\pi T_c} \right\} \Big|_{\bar{\omega}/2T_c \gg 1}, \end{aligned} \quad (8.31)$$

$$\gamma = \exp[C], \quad C = 0.577 = \ln[\pi/4] - \int_0^{\infty} dx \frac{\ln x}{\operatorname{ch}^2 x}.$$

Из (8.31) следует соотношение на критическую температуру:

$$T_c \approx 1.14 \bar{\omega} \exp[-1/\lambda]. \quad (8.32)$$

Общий вид температурной зависимости Δ показан на рис.1,б.

Таким образом, мы получили конечную температуру, выше которой кулоновская щель в спектре схлопывается, и происходит переход из диэлектрического в металлическое состояние. Масштаб критической температуры определяется частотой обрезания $\bar{\omega}$ и константой связи λ , но в любом случае он существенно больше чем в сверхпроводниках. Если частота обрезания $\bar{\omega} \sim 1$ эВ (порядок кулоновских энергий),

то из-за перенормировки за счет константы связи критическая температура может быть порядка нескольких сотен кельвин: $T_c \sim 100 - 500 \text{ K}$.

Задачи

8.2.1. Преобразовать гамильтониан модели Келдыша-Копеева (8.16) в спиновый гамильтониан в соответствии со спиновой аналогией для сверхпроводников (см. главу 4), поставив в соответствие операторы дырок и электронов матрицам Паули:

$$\begin{aligned}\hat{I} - a_p^+ a_p - b_p^+ b_p &= \sigma^Z, \\ \mu^+ &= b_p^+ a_p^+ = \frac{1}{2}(\sigma^X - i\sigma^Y), \\ \mu^- &= a_p b_p = \frac{1}{2}(\sigma^X + i\sigma^Y).\end{aligned}$$

Получить в приближении среднего поля уравнение на параметр порядка.

8.2.2. Доказать, что квазичастицы α, β , вводимые соотношением (8.19), являются фермионами.

8.2.3. Исходя из уравнения для параметра порядка (8.29) рассчитать Δ при нулевой температуре и первую экспоненциальную поправку к нему $\sim \exp(-\Delta/T)$.

8.2.4. Рассчитать параметр порядка $\Delta(T)$ вблизи критической температуры и показать расходимость производной $d\Delta/dT|_{T_c}$.

8.3. Модель Хаббарда

Для объяснения фазовых переходов металл-изолятор в переходных металлах с узкими зонами Хаббард в 1964г. предложил модель, которая в режиме сильной связи, учитывая перескоки электронов на соседние атомы и кулоновское отталкивание на узле, позволила описать переход из проводящего в диэлектрическое состояние. Эта модель (и ее расширенные аналоги) в настоящее время стала популярной в связи с исследованием высокотемпературных сверхпроводников, так как в них имеют место сильные кулоновские корреляции.

8.3.1. Гамильтониан модели Хаббарда.

Основные свойства

Для вывода модели Хаббард исходил из стандартного гамильтониана ферми-газа с кулоновским взаимодействием:

$$\begin{aligned} \overline{H} = & \sum_{p\sigma} \varepsilon_p a_{p,\sigma}^+ a_{p\sigma} + \\ & + 1/2 \sum_{p_1 p_2 p_1' p_2' \sigma \sigma'} V_{p_1 p_2 p_1' p_2'} a_{p_1,\sigma}^+ a_{p_2,\sigma}^+ a_{p_2'\sigma'} a_{p_1'\sigma}. \end{aligned} \quad (8.33)$$

Кулоновское взаимодействие в (8.33) выписано в существенно более общем виде, чем, например, мы рассматривали при исследовании модели Стонера в главе 6 (см. (6.12)). Здесь учтено и прямое кулоновское отталкивание (как в модели Стонера), и обменные процессы; рассматриваются системы с узкими зонами ($\sim 0.1-1$ эВ), т.е. электроны имеют большую эффективную массу и почти локализованы. Поэтому хорошим квантовым числом является номер узла. Перейдем от импульсного представления к узельным операторам:

$$a_{p\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i a_{i\sigma} \exp\{i \vec{p} \vec{r}_i\}.$$

Здесь под “ $\exp\{i \vec{p} \vec{r}_i\}$ ” - мы понимаем не обязательно плоские волны, а волновые функции Ваннье в кристалле, совпадающие с узельными функциями точно на узле и имеющие асимптотами плоские волны вдали от атома. Они ортонормированы и образуют полную систему, как и плоские волны. Тогда кинетическая часть гамильтониана имеет вид:

$$\overline{H}_{kin} = \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma},$$

$$t_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{p\sigma} \varepsilon_p \exp(i \vec{p} [\vec{r}_i - \vec{r}_j]) \sim \exp(-|\vec{r}_i - \vec{r}_j|/a_B). \quad (8.34)$$

Амплитуда перескока быстро затухает в узкозонном веществе с сильно локализованными носителями, и обычно достаточно учесть в (8.34) перескоки только на ближайшие соседи.

Подставив преобразование операторов к узельному виду в потенциальную часть гамильтониана, получим, что в узельном представлении она имеет следующий вид:

$$\overline{H}_{int} = \frac{1}{2} \sum_{ijkl\sigma\sigma'} V_{ijkl} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma'} a_{l\sigma}^+ a_{k\sigma'},$$

$$V_{ijkl} = \frac{1}{N^2} \sum_{p_1 p_2 p_1' p_2'} V_{p_1 p_2 p_1' p_2'} \exp[-i\{\vec{p}_1 \vec{r}_i - \vec{p}_2 \vec{r}_j + \vec{p}_2' \vec{r}_l - \vec{p}_1' \vec{r}_k\}]. \quad (8.35)$$

Полагая, что главный вклад дает взаимодействие на одних и тех же узлах с $i=j=k=l$ ($V_{ijkl} \equiv V_{iiii} = V(|r|=0) = U$), а на больших расстояниях V много меньше, получаем окончательно гамильтониан Хаббарда

$$\overline{H} = \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} U a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} a_{i-\sigma}^+ a_{i-\sigma}. \quad (8.36)$$

Здесь первый член гамильтониана (кинетическая энергия) описывает перескоки на соседние узлы с амплитудой t_{ij} . Второй член описывает кулоновское отталкивание на узле с потенциалом U и учитывает, что одновременно на узле могут находиться частицы только с противоположным спином. Гамильтониан

записывают в более удобной форме с использованием приближения ближайших соседей Z

$$(t_{ij} = -t, i, j = Z)$$

$$\overline{H} = -t \sum_{i \neq j, \sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}. \quad (8.37)$$

Во взаимодействующей части (8.37) коэффициент $1/2$ скомпенсировался за счет суммирования по спинам. Таким образом, в модели всего два параметра: матричный элемент перескока на соседний узел t и кулоновское отталкивание на узле U . Более того, если отсчитывать все энергии в единицах t , то остается единственный параметр t/U .

Знак перескока (минус) выбирается из удобства отсчета получающихся зон симметрично от центра зоны Бриллюэна. Такая вольность в выборе знака связана со следующим свойством гамильтониана (8.37): замена $t \rightarrow -t$ не меняет спектр модели Хаббарда, если перескок происходит только между ближайшими соседями (см. задачи к параграфу).

Можно доказать также, что гамильтониан коммутирует с оператором полного числа частиц N и полной проекции спина на ось z - S^Z :

$$\hat{N} = \sum_{i\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}, \quad \hat{S}^Z = \frac{1}{2} \sum_i (a_{i\uparrow}^+ a_{i\uparrow} - a_{i\downarrow}^+ a_{i\downarrow}) = \frac{1}{2} \sum_i (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}), \quad (8.38)$$

т.е. задачу можно решать при конкретном заполнении и проекции спина независимо, так как они сохраняются в модели Хаббарда.

Пусть число узлов равно N_a . При половинном заполнении, т.е. когда $N=N_a$, и большом кулоновском взаимодействии $U/t \gg 1$ все электроны практически “заперты” на своих узлах, образуя антиферромагнитное упорядочение:

$$\dots \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \dots$$

В этом случае гамильтониан Хаббарда эквивалентен гейзенберговскому антиферромагнитному гамильтониану (см. соответствующую задачу ниже).

Заметим, что модель Хаббарда симметрична относительно преобразования электрон-дырка ($a^+ \textcircled{R} b, a \textcircled{R} b^+$). Поэтому, пользуясь свойством ($t \textcircled{R} -t$) и этими преобразованиями, можно показать следующие свойства энергии системы.

Пусть M - число спинов вверх; M' - число спинов вниз, $M+M'=N$. Тогда имеют место следующие соотношения (первые полученные Либом и Ву в 1968 г. [19]):

$$\begin{aligned} E(M, M', U) &= -(N_a - M - M')U + E(N_a - M, N_a - M', U), \\ E(M, M', U) &= MU + E(M, N_a - M', -U), \\ E(M, M', U) &= M'U + E(N_a - M, M', -U). \end{aligned} \quad (8.39)$$

Получим, например, первое из соотношений (8.39). Подставив в (8.37) дырочные преобразования $a^+ \textcircled{R} b, a \textcircled{R} b^+$, имеем:

$$\begin{aligned} \bar{H} &= t \sum_{i \neq j, \sigma} b_{i\sigma}^+ b_{j\sigma} + \sum_i U b_{i\uparrow}^+ b_{i\uparrow} b_{i\downarrow}^+ b_{i\downarrow} + \\ &+ \sum_i U - \sum_i U b_{i\uparrow}^+ b_{i\uparrow} - \sum_i U b_{i\downarrow}^+ b_{i\downarrow}. \end{aligned} \quad (8.40)$$

Учитывая, что число дырок со спином вверх

$$\sum_i b_{i\uparrow}^+ b_{i\uparrow} = N_a - M,$$

а число дырок со спином вниз

$$\sum_i b_{i\downarrow}^+ b_{i\downarrow} = N_a - M',$$

получаем первое соотношение (8.39) ($E = \langle H \rangle$).

Задачи

8.3.1.1. Доказать операторные тождества:

$$\exp\{-i\phi a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}\} a_{i\sigma} \exp\{i\phi a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}\} = a_{i\sigma} \exp(i\phi),$$

$$\exp\{-i\phi a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}\} a_{i\sigma}^+ \exp\{i\phi a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}\} = a_{i\sigma}^+ \exp(-i\phi).$$

Указание: продифференцировать левую часть тождеств по переменной ϕ .

8.3.1.2. Показать, что замена $t \rightarrow -t$ не меняет спектр модели Хаббарда, если перескок происходит только между ближайшими соседями.

Решение. Разобьем узлы на две подрешетки A и B , вложенные одна в другую, так что ближайшим соседом узла A обязательно является узел B и наоборот. Для всех узлов A сделаем унитарное преобразование

$$U = \exp\{i\pi \sum_{\sigma} \sum_{i_A} a_{i\sigma}^{+A} a_{i\sigma}^A\},$$

которое меняет знак операторов A : $a_{i\sigma}^+ \rightarrow -a_{i\sigma}^+, a_{i\sigma} \rightarrow -a_{i\sigma}$. Это следует из операторного тождества:

$$\exp\{-i\varphi a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}\} a_{i\sigma} \exp\{i\varphi a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}\} = a_{i\sigma} \exp(i\varphi),$$

которое несложно доказать непосредственным дифференцированием по параметру φ (см. предыдущую задачу). Применим оператор U к гамильтониану Хаббарда: $U^{-1} \bar{H} U$. Рассмотрим перескоковый член. Тогда заметим, что всегда имеем в нем комбинацию $a^{+A} a^B$ или $a^{+B} a^A$. Очевидно, что унитарное преобразование, изменяя знак только оператора A , изменит и весь знак перед членом. Легко понять, что в кулоновском члене число изменений знаков всегда четно:

$$U^1 a^{+A} a^A a^{+A} a^A U = U^1 a^{+A} U U^1 a^A U U^1 a^{+A} U U^1 a^A U = \\ = a^{+A} a^A a^{+A} a^A.$$

Таким образом, взаимодействующий член инвариантен относительно такого унитарного преобразования. А так как

$$U^{-1} \bar{H} U U^{-1} \psi U = U^{-1} E U U^{-1} \psi U = E U^{-1} \psi U \Rightarrow \\ \Rightarrow U^{-1} \bar{H} U \Psi = E \Psi, \quad \Psi = U^{-1} \psi U,$$

то спектр E не изменился, но при этом t изменился на $-t$, что и требовалось доказать.

8.3.1.3. Показать, что гамильтониан Хаббарда (8.37) коммутирует с оператором полного числа частиц и полной проекции спина на ось z .

8.3.1.4. Пусть N_a - число узлов; M - число спинов вверх; M' - число спинов вниз; $N = M + M'$ - число электронов. Доказать следующие соотношения для энергии в модели Хаббарда:

$$E(M, M', U) = MU + E(M, N_a - M', -U),$$

$$E(M, M', U) = M'U + E(N_a - M, M', -U).$$

Указание: перейти к дырочному представлению для электронов со спином вниз в первом случае и со спином вверх во втором.

8.3.1.5. Чему равна энергия основного состояния модели Хаббарда при половинном заполнении $N = N_a$ и в пределе $U \rightarrow \infty$?

8.3.1.6. Рассчитать число возможных узельных состояний (размер гильбертова пространства) в модели Хаббарда при:

- 1) числе узлов $N_a = 12$, числе электронов со спином вверх $M = 4$, со спином вниз $M' = 3$;
- 2) $N_a = 12$, $M = 3$, $M' = 3$;
- 3) $N_a = 8$, $M = 4$, $M' = 4$;
- 4) $N_a = 8$, $M = 2$, $M' = 3$.

8.3.1.7. Показать эквивалентность антиферромагнитной модели Гейзенберга и модели Хаббарда вблизи половинного заполнения при $U/t \gg 1$.

Решение. Разделим гамильтониан Хаббарда на несколько слагаемых:

$$\bar{H} = T_d + T_h + T_{mix} + V, \quad (8.41)$$

где

$$\begin{aligned}
V &= \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad T_d = -t \sum_{i \neq j, \sigma} (n_{i-\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} n_{j-\sigma} + k.c.), \\
T_h &= -t \sum_{i \neq j, \sigma} \{(1 - n_{i-\sigma}) a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} (1 - n_{j-\sigma}) + k.c.\}, \\
T_{mix} &= -t \sum_{i \neq j, \sigma} \{(1 - n_{i-\sigma}) a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} n_{j-\sigma} + \\
&\quad + n_{i-\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} (1 - n_{j-\sigma}) + k.c.\}.
\end{aligned} \tag{8.42}$$

T_d описывает коррелированные перескоки с узла на узел со спином σ , когда узлы заняты электронами с противоположным спином $-\sigma$, член T_h , наоборот, описывает перескоки с узлами, незаполненными электронами с противоположным спином, а T_{mix} - процессы перескока, когда либо один, либо другой (но не два одновременно) узла, участвующих в перескоке, заняты электроном с противоположным спином.

В пределе $U/t \gg 1$ самый малый вклад дает член T_d , так как этот процесс связан с большой добавкой к энергии электрона $\sim U$.

Рассмотрим некоторое унитарное преобразование гамильтониана, не меняющее его спектра:

$$H_{eff} = \exp(-iS) \bar{H} \exp(iS).$$

Предположим, что S мало по параметру t/U , и в первом приближении:

$$H_{eff} = (1 - iS) \bar{H} (1 + iS) = \bar{H} - i[S, \bar{H}]. \tag{8.43}$$

Определим эффективный гамильтониан и унитарное преобразование. Ищем S , удовлетворяющее соотношению

$$i[S, T_d + T_h + V] = T_{mix}. \tag{8.44}$$

Отсюда

$$H_{eff} = T_d + T_h + V - i[S, T_{mix}]. \tag{8.45}$$

Членом V можно пренебречь, так как при больших U вероятность нахождения на одном узле двух электронов мала. По этой же причине пренебрежем и T_d . Тогда имеем

$$H_{eff} \cong T_h - i[S, T_{mix}]. \quad (8.46)$$

Предположим, что $|n\rangle$ - собственные волновые функции оператора $T_d + T_h + V$, а ε_n - собственные энергии. Тогда из (8.44) получаем:

$$\begin{aligned} i \langle n | S (T_d + T_h + V) | m \rangle - i \langle n | (T_d + T_h + V) S | m \rangle = \\ = \langle n | T_{mix} | m \rangle \Rightarrow \\ \Rightarrow i \langle n | S | m \rangle \varepsilon_m - i \langle n | S | m \rangle \varepsilon_n = \langle n | T_{mix} | m \rangle \Rightarrow \\ \Rightarrow \langle n | S | m \rangle = \frac{\langle n | T_{mix} | m \rangle}{i(\varepsilon_m - \varepsilon_n)}. \end{aligned} \quad (8.47)$$

Просуммируем последнее выражение в (8.47) и воспользуемся полнотой собственных функций, тогда для S получим

$$\begin{aligned} \sum_{n,m} |n\rangle \langle n | S | m \rangle \langle m| = \sum_{n,m} |n\rangle \frac{\langle n | T_{mix} | m \rangle}{i(\varepsilon_m - \varepsilon_n)} \langle m|, \\ \sum_n |n\rangle \langle n| \Rightarrow S = \sum_{n,m} |n\rangle \frac{\langle n | T_{mix} | m \rangle}{i(\varepsilon_m - \varepsilon_n)} \langle m|. \end{aligned} \quad (8.48)$$

Вблизи половинного заполнения при большом U любые возбуждения системы над основным с точностью до t/U будут $\varepsilon_m - \varepsilon_n = \pm U$. Отсюда

$$\begin{aligned} S = \frac{1}{iU} \sum_{n>m} |n\rangle \langle n | T_{mix}^1 | m \rangle \langle m| + \\ + \frac{1}{-iU} \sum_{n<m} |n\rangle \langle n | T_{mix}^2 | m \rangle \langle m|. \end{aligned} \quad (8.49)$$

Здесь T_{mix}^1 и T_{mix}^2 - части оператора T_{mix} , соответствующие увеличению (уменьшению) энергии.

Определим правильно знаки в выражении (8.49). В выражении для T_{mix} (8.42) первое слагаемое $[\sim(1 - n_{i-\sigma})a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} n_{j-\sigma}]$ понижает энергию на U (т.е. совпадает с T_{mix}^2), так как электрон уходит с дважды заполненного узла j на пустой узел i . Второе слагаемое $[n_{i-\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} (1 - n_{j-\sigma})]$, наоборот, повышает энергию на U (т.е. совпадает с T_{mix}^1). Несложно доказать, что эрмитово-сопряженная часть T_{mix} совпадает с первой с точностью до замены $T^1 \leftrightarrow T^2$ и дополняет до полного суммирования ($n \langle m + n \rangle m = n, m$) в (8.49). Поэтому в итоге из (8.49) имеем, используя полноту волновых функций:

$$S = -\frac{it}{U} \sum_{i \neq j, \sigma} \{ n_{i-\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} (1 - n_{j-\sigma}) - (1 - n_{i-\sigma}) a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} n_{j-\sigma} \}. \quad (8.50)$$

Учитывая (8.46), найдем коммутатор $i[S, T_{mix}]$. Если обозначить

$$\begin{aligned} A &= -t \sum_{i \neq j, \sigma} n_{i-\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} (1 - n_{j-\sigma}), \\ B &= -t \sum_{i \neq j, \sigma} (1 - n_{i-\sigma}) a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} n_{j-\sigma}, \end{aligned} \quad (8.51)$$

то согласно (8.42) и (8.50) находим:

$$\begin{aligned} T_{mix} &= A + B, S = \frac{i}{U}(A - B), \\ i[S, T_{mix}] &= -\frac{2}{U}[A, B] = \\ &= -\frac{2t^2}{U} \left[\sum_{i \neq j, \sigma} n_{i-\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} (1 - n_{j-\sigma}), \sum_{i \neq j, \sigma} (1 - n_{i-\sigma}) a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} n_{j-\sigma} \right]. \end{aligned} \quad (8.52)$$

Введем теперь спиновые операторы с полной проекцией спина 1/2 следующим образом:

$$S_i^+ = a_{i\uparrow}^+ a_{i\downarrow}, \quad S_i^- = a_{i\downarrow}^+ a_{i\uparrow}, \quad S_i^Z = \frac{1}{2}(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}), \quad (8.53)$$

$$S_i^+ = S_i^X + iS_i^Y, \quad S_i^- = S_i^X - iS_i^Y.$$

Легко проверить, что введенные таким образом операторы являются обычными операторами спина 1/2, подчиняются всем коммутационным соотношениям и выражаются через матрицы Паули: $S^X = 1/2\sigma^X$, $S^Y = 1/2\sigma^Y$, $S^Z = 1/2\sigma^Z$.

Используя (8.53), после громоздких преобразований из (8.52) получаем:

$$i[S, T_{mix}] = -\frac{2t^2}{U} \sum_{ij} (\vec{S}_i \vec{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j). \quad (8.54)$$

Окончательно, учитывая (8.46), находим эффективный гамильтониан

$$H_{eff} = -t \sum_{i \neq j, \sigma} \{(1 - n_{i-\sigma}) a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} (1 - n_{j-\sigma}) + k.c.\} + \frac{2t^2}{U} \sum_{ij} (\vec{S}_i \vec{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j). \quad (8.55)$$

Гамильтониан (8.55) - предельный случай гамильтониана Хаббарда при больших U вблизи половинного заполнения. Ровно при половинном заполнении, когда на каждый узел приходится один электрон, перескоковый член зануляется, и модель (8.55) становится антиферромагнитной моделью Гейзенберга (с точностью до несущественной постоянной):

$$H_{eff} = \frac{2t^2}{U} \sum_{ij} (\vec{S}_i \vec{S}_j - \frac{1}{4}) \quad (8.56)$$

с эффективным обменным интегралом $J = t^2/U$. Заметим, что величина $J \sim 0.1-0.5$ эВ (так как $t \sim 1$ эВ, $U \sim 3-10$ эВ), что вполне согласуется с оценками обменного интеграла. Таким образом, антиферромагнитный гамильтониан Гейзенберга является предельным случаем модели Хаббарда при больших U и половинном заполнении.

8.3.1.8. Показать, что введенные соотношениями (8.53) операторы являются спиновыми операторами $S=1/2$.

8.3.1.9. Выразить коммутатор $i[S, T_{mix}]$ (8.52) через спиновые операторы, т.е. получить соотношение (8.54).

8.3.2. Переход металл - диэлектрик в модели Хаббарда

Рассмотрим сначала предел сильного кулоновского взаимодействия $U \gg t$. Пусть имеется половинное заполнение $N=N_a$. В этом случае электроны заперты сильным кулоном каждый на своем узле. Тогда в гамильтониане Хаббарда (8.37) можно пренебречь перескоковым членом. Гамильтониан диагонален, и энергия равна

$$E = \sum_i \{E_0(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + Un_{i\uparrow}n_{i\downarrow}\} = N_1E_0 + N_2(2E_0 + U), \quad (8.57)$$

где N_1 - число узлов с одним электроном; N_2 - с двумя. В (8.41) мы неявно добавили отсчет энергии от E_0 (что эквивалентно добавке к гамильтониану (8.37) члена

$$\sum_{i\sigma} E_0 a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}).$$

E_0 - энергия, необходимая, чтобы связать электрон в изолированном атоме. $U + E_0$ - энергия, необходимая для присоединения второго электрона с противоположно направленным спином. Зонная картина такой системы состоит из двух зон с энергиями E_0 и $U + E_0$. В основном состоянии N имеющихся электронов обладают энергией E_0 , и в каждом атоме размещено по одному электрону ($N_1=N, N_2=0$). В этом предельном случае имеет место строгая локализация электронов.

Если мы начинаем “включать” перескок t , то эти локализованные состояния начинают расщепляться в зоны шири-

ной порядка $2Zt$, где Z - число ближайших соседей (это так называемые нижняя и верхняя Хаббардовские зоны, рис.15).

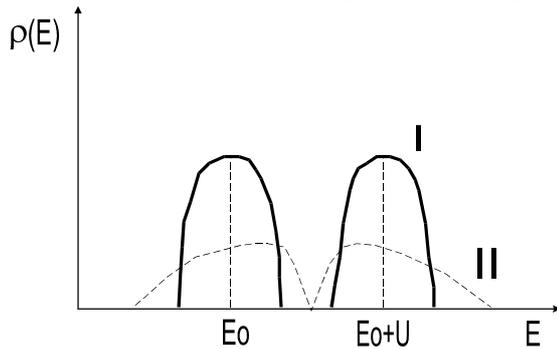


Рис.15. Расщепление зоны за счет кулоновского взаимодействия в модели Хаббарда:
 $(t/U)_{II} > (t/U)_I$

Пока зоны не слились, вещество остается диэлектриком. При критической величине расщепления (критическом значении параметра $t/U \sim Z$), определяемого постоянной решетки (через t) и кулоновским узельным взаимодействием, щель исчезает. В таком случае имеет место переход от локализованного описания к зонной модели, т.е. от диэлектрика к металлу.

Итак, в модели Хаббарда возможен фазовый переход металл - диэлектрик в зависимости от соотношения амплитуды перескока t и кулоновского отталкивания U .

Амплитуда перескока чувствительна к постоянной решетки a , так как из соотношения (8.34) в приближении ближайших соседей: $t \sim \exp(-a/a_B)$, поэтому переход может происходить, например, при изменении внешнего приложенного давления, или из-за структурной перестройки с изменением постоянной решетки, или из-за температурного расширения.

Следует отметить, что в *одномерной* ситуации получено *точное* решение модели Хаббарда (Либ, Ву, 1964). Основной вывод - отсутствие перехода металл - диэлектрик при любом параметре $U/t > 0$ (см. ниже).

Введение к задачам 8.3.2.1-8.3.2.2. (отсутствие фазового перехода металл - диэлектрик в одномерной модели Хаббарда; точное решение Либа и Ву). В 1968г. Либом и Ву (Lieb, Wu) было продемонстрировано *точное* решение одномерной модели Хаббарда. Они исследовали модель методом анзаца Бете, основываясь на ранее решенной Янгом проблеме одномерной системы многих частиц с дельтафункциональным отталкиванием и на квантовом методе обратной задачи рассеяния (КМОЗ). Было показано, что одномерная система, описываемая гамильтонианом Хаббарда, не переходит в металлическое состояние ни при каком значении параметра t/U , т.е. всегда является диэлектриком.

Гамильтониан одномерной периодической Хаббардовской цепочки с взаимодействием только с ближайшими соседями имеет вид:

$$\overline{H} = -t \sum_{i,\sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{i+1\sigma} + a_{i\sigma}^+ a_{i-1\sigma}) + \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (8.58)$$

Учитывая соотношения (8.39), достаточно рассмотреть менее чем наполовину заполненную зону. Мы не будем подробно описывать громоздкие вычисления Либа и Ву, и исследуем окончательный результат (достаточно подробно решение Либа и Ву изложено в книге [6]). Окончательный ответ Либа и Ву в интегральном виде имеет вид:

$$\begin{aligned} 2\pi\rho(p) &= 1 + \int_{-B}^B d\lambda \sigma(\lambda) \frac{8U}{U^2 + 16(\lambda - \sin p)^2}; \\ 2 \int_{-Q}^Q dp \rho(p) \frac{8U}{U^2 + 16(\lambda - \sin p)^2} &= 2\pi\sigma(\lambda) + \\ &+ \int_{-B}^B d\lambda' \sigma(\lambda') \frac{4U}{U^2 + 4(\lambda - \lambda')^2}. \end{aligned} \quad (8.59)$$

($U=U/t$). Входящие в полученные уравнения величины Q и B определяются нормировкой на число спинов вверх M и полное число электронов N :

$$\int_{-B}^B d\lambda \sigma(\lambda) = M / N_a, \quad \int_{-Q}^Q dp \rho(p) = N / N_a. \quad (8.60)$$

В таком континуальном представлении энергия основного состояния системы

$$E_0 = -2N_a \int_{-Q}^Q dp \rho(p) \cos p. \quad (8.61)$$

Естественно, энергия системы будет зависеть от M и N через параметр Q с учетом (8.60), так что

$$E_0 = E_0(M, M', U), \quad M' = N - M.$$

Либ и Маттис доказали, что основное состояние фермионной системы - синглетное. Это означает, что все числа λ заполняют весь интервал $(-\infty, +\infty)$, т.е. всюду в интегралах надо положить $B = \infty$, а исходя из соотношения (8.60) для λ и p следует также, что $Q = \pi$. Тогда уравнения (8.59) можно решить методом Фурье и получить

$$\begin{aligned} \sigma(\lambda) &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\cos(\omega\lambda) J_0(\omega)}{\exp(\omega U/4) + \exp(-\omega U/4)} d\omega, \\ \rho(p) &= \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{\pi} \cos p \int_0^\infty \frac{\cos(\omega \sin p) J_0(\omega)}{1 + \exp(\omega U/2)} d\omega. \end{aligned} \quad (8.62)$$

Для синглетного основного состояния ($M=M'=N_a/2$) энергию можно рассчитать из (8.61):

$$E_0\left(\frac{1}{2}N_a, \frac{1}{2}N_a, U\right) = -4N_a \int_0^\infty \frac{J_0(\omega)J_1(\omega)}{\omega[1 + \exp(\omega U/2)]} d\omega. \quad (8.63)$$

В формулах (8.62)-(8.63) J_0 и J_1 - функции Бесселя нулевого и первого порядка.

Исследуем теперь с помощью полученных *точных* результатов, является ли основное состояние проводящим или

диэлектрическим. Для этого необходимо вычислить следующие химические потенциалы ($M=N_a/2$):

$$\begin{aligned}\mu_+ &= E_0(M+1, M, U) - E_0(M, M, U), \\ \mu_- &= E_0(M, M, U) - E_0(M-1, M, U).\end{aligned}\quad (8.64)$$

В одночастичном спектре величина $\mu_+ - \mu_-$ является щелью между верхней и нижней хаббардовскими подзонами (см. рис.15). Поэтому при половинном заполнении (заполнена нижняя подзона), если $\mu_+ > \mu_-$, то состояние диэлектрическое, в противном случае - металлическое. Из результатов (8.62)-(8.63) можно получить:

$$\begin{aligned}\mu_+ &= U - \mu_-, \\ \mu_- - 2 &= -4 \int_0^\infty \frac{J_1(\omega)}{\omega [1 + \exp(\omega U/2)]} d\omega = \\ &= -4 \sum_{n=1}^\infty (-1)^n \left[\left(1 + \frac{1}{4} n^2 U^2\right)^{1/2} - \frac{1}{2} n U \right].\end{aligned}\quad (8.65)$$

Из (8.65) в предельных случаях получаем:

$$\mu_+ - \mu_- = \begin{cases} U - 4 - \frac{16}{U} \ln 2 \rightarrow \infty, & U \gg 1; \\ \frac{4}{\pi} \sqrt{\frac{U}{2}} \sum_{n=0}^\infty \frac{\exp\{-4\pi / U[2n+1]\}}{(2n+1)^3} \rightarrow +0, & U \rightarrow 0. \end{cases}\quad (8.66)$$

Таким образом, $\mu_+ > \mu_-$, т.е. одномерная модель Хаббарда всегда находится в состоянии изолятора. Это состояние, когда имеются две подзоны, расщепленные кулоновским взаимодействием U и с заполненной нижней подзоной, называют “хаббардовский диэлектрик”.

Задачи

8.3.2.1. Решить интегральные уравнения Либя и Ву методом Фурье для плотностей распределения $\rho(p)$ и $\sigma(\lambda)$ в основном состоянии одномерной модели Хаббарда.

8.3.2.2. Получить асимптотические соотношения для разности химических потенциалов μ_+ - μ_- в пределе $U \rightarrow 0$ и $U \rightarrow \infty$ для одномерной модели Хаббарда исходя из точного соотношения (8.65).

Указание: в одном предельном случае брать интегральный вариант (8.65), в другом - выражение (8.65) в виде суммы.

8.4. Фазовый переход металл - изолятор для неупорядоченной системы. Модель Андерсона. Локализация

Локализовать носители можно не только перестройкой спектра за счет кулоновского взаимодействия и изменения постоянной решетки, но и с помощью введения примесей. Покажем это на примере модели Андерсона.

Начнем обсуждение с понятия *длины локализации* электрона в кристалле при наличии неупорядоченного потенциала примесей. Если кристалл идеален, то проводимость и подвижность электрона будут бесконечными, т.е. носители могут диффундировать по решетке без рассеяния до бесконечности. Нарушения идеальной решетки (т.е. фононы, точечные дефекты и примеси) ограничивают *среднюю длину свободного пробега* электрона, т.к. он начинает отражаться и рассеиваться от дефектов решетки и сбивать фазу своей волновой функции. Иначе говоря, в результате возмущения фазовая когерентность волновой функции ограничена конечной *длиной когерентности*. По мере возрастания степени разупорядочения длина свободного пробега и длина когерентности уменьшаются. Несмотря на это, состояние остается все еще нелокализованным. Но дальнейший рост неупорядоченности может привести к локализованным состояниям, т.е. к состояниям, ограниченным

конечными областями. Их протяженность может быть описана количественно определенной *длиной локализации*.

Обсудим это в рамках модели Андерсона. Он рассматривал трехмерную точечную решетку, заполненную узлами с энергией E_n . При наличии перескоков с амплитудой t_{nm} и равенстве узельных энергий возникает энергетическая зона с шириной $B \sim 2Zt$, где Z - число ближайших соседей; t - амплитуда перескока на соседний узел. Такую модель мы уже рассматривали в приближении сильной связи (см. выражение (6.1)) с равными энергиями на узлах $E_n = E_0 = \text{const}$. Для рассмотрения разупорядочения Андерсон вводит статистический разброс энергий E_n по области с шириной W , которая является степенью разупорядочения системы (пропорциональной концентрации примесей), т.е. E_n распределены случайным образом равномерно по интервалу $(-W/2, W/2)$. Тогда гамильтониан Андерсона в узельном представлении имеет вид:

$$\overline{H} = \sum_n E_n a_n^+ a_n + \sum_{i \neq j} t_{nm} a_n^+ a_m. \quad (8.67)$$

Здесь для простоты рассматриваются бесспиновые частицы, и учитывается взаимодействие только с ближайшими соседями ($t_{nm} = t$). Рассмотрим вероятность P возвращения электрона в некоторый узел i через бесконечное время, если сначала он находился на этом узле. Если электрон был исходно локализован, то его диффузия по кристаллу ограничена конечным объемом, и $P \neq 0$. При полной делокализации электрон не вернется, и $P = 0$. Андерсон смог показать, что параметром, величина которого определяет переход между этими двумя альтернативами, является отношение степени разупорядочения к ширине зоны: W/B (оценки Андерсона дают, что при $W/B > (W/B)_c$, $(W/B)_c \sim 5$ состояние электрона в центре зоны становится локализованным).

Качественно полученный результат можно объяснить следующим образом. Известно, что отдельный дефект кристаллической решетки приводит к отщеплению (и локализации) состояния от края зоны проводимости. С ростом числа

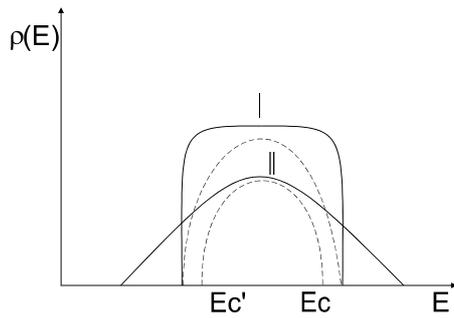


Рис. 16. Плотность состояний (сплошные линии) в модели Андерсона; пунктиром внутри зон ограничена область делокализованных состояний; E_c , $E_{c'}$ - граница между локализованными и делокализованными состояниями

дефектов число локализованных состояний вне зоны объединяется в зону (примесная зона), которая может перекрываться с зоной делокализованных состояний (зоной проводимости). В случае андерсоновского разупорядочения наблюдаются аналогичные явления, т.е. при увеличении степени разупорядочения состояния у краев энергетической зоны первыми становятся локализованными и одновременно сдвигаются в энергетическую щель (рис. 16). Зона приобретает хвосты с локализованными состояниями у верхнего и нижнего краев. С ростом неупорядоченности границы E_c и $E_{c'}$ (точки разделения локализованных и делокализованных состояний) приближаются

друг к другу и встречаются в центре зоны. В этом случае зону заполняют только локализованные состояния. Это происходит именно при $W/B \sim (W/B)_c$.

Можно определить условие локализации Андерсона также из следующих соображений. Пусть в модели сильной связи зона (с шириной $B \sim 2Zt$, см.рис.10) почти заполнена, т.е.

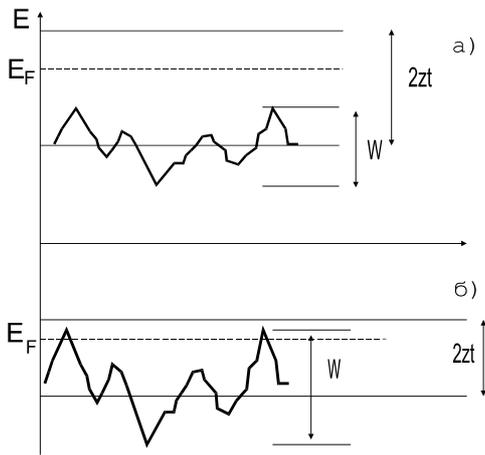


Рис. 17. Переход металл - изолятор в модели Андерсона:

$$a - W < E_f,$$

$$б - W > E_f$$

$E_f \sim B$. Тогда условие $W >$

B переходит в $W > E_f$, т.е. при степени беспорядка больше энергии Ферми наступает делокализация. Это можно объяснить тем, что электроны проводимости, имеющие кинетическую энергию $\sim E_f$, не чувствуют беспорядок, пока величина случайного потенциала меньше их кинетической энергии, и они могут свободно двигаться над случайными потенциальными барьерами (рис.17). Как только величина степени разупорядочения W (максимальная величина случайного потенциала, рис. 17) достигает E_f , появляется сильное рассеяние электрона на этом потенциале и конечная длина локализации.

Таким образом, переход металл - изолятор в неупорядоченном веществе по модели Андерсона происходит из-за локализации электронов (андерсоновской локализации) при возрастании разупорядочения системы (концентрации примесей) до тех пор, пока амплитуда разупорядочения W не становится больше энергии Ферми: $W > E_f$.

9. КОНДЕНСАЦИЯ И СВЕРХТЕКУЧЕСТЬ В БОЗЕ-ГАЗЕ

Рассмотрим теперь фазовые переходы, происходящие в системах с исходно бозонными степенями свободы. До сих пор мы имели дело с бозе-статистикой при исследовании термодинамики спиновых возбуждений - магнонов. Исследуем в этой главе статистические свойства идеального и слабо неидеального бозе-газа, бозе-конденсацию при низких температурах, критерий сверхтекучести Ландау. Отметим, что из реальных систем с бозе-статистикой можно выделить фононы (колебания кристаллической решетки) в твердом теле, сверхтекучий гелий, фотоны, куперовские пары в сверхпроводниках, бозе-конденсацию экситонных возбуждений в полупроводниках, спиновые возбуждения в магнетиках и т.д.

9.1. Бозе-конденсация в идеальном газе - фазовый переход второго рода

Как отмечалось при выводе обменного взаимодействия в гл. 1, для ансамбля одинаковых квантовых частиц должен выполняться принцип тождественности, т.е. состояния системы, получающиеся друг из друга просто перестановкой координат частиц, должны быть физически полностью эквивалентны. Это значит, что в результате такой перестановки волновая функция системы может измениться только на несущественный фазовый множитель. Другими словами, если $|\Psi(1,2)|^2 = |\Psi(2,1)|^2$, то $\Psi(1,2) = \exp(i\alpha)\Psi(2,1)$, где α - вещественная постоянная. Повторная перестановка дает $\exp(2i\alpha) = 1$, то есть $\Psi(1,2) = \pm \Psi(2,1)$. Поэтому волновая функция либо симметрична (это статистика Бозе), либо антисимметрична (это статистика Ферми). Этот факт отражается на соотношениях коммутации при описании системы в терминах вторично-квантованных операторов, а также на виде функции распре-

ления. Рассмотрим газ частиц с симметричной волновой функцией, описываемых во вторичном квантовании операторами рождения a^+ и уничтожения a и подчиняющихся следующим коммутационным соотношениям (Бозе):

$$a_k a_{k'}^+ - a_{k'}^+ a_k = \delta_{kk'}, \quad a_k^+ a_{k'}^+ - a_{k'}^+ a_k^+ = 0, \quad a_k a_{k'} - a_{k'} a_k = 0. \quad (9.1)$$

Таким образом, в отличие от фермионов волновая функция симметрична по перестановкам координат (и импульсов) частиц. На волновую функцию в представлении чисел заполнения $|n_{k1} \dots n_{kN}\rangle$, где n_{ki} - числа заполнения в состоянии с импульсом k_i , они действуют соответственно

$$a_k |n_k \rangle \approx \sqrt{n_k} |n_k - 1\rangle, \quad a_k^+ |n_k \rangle \approx \sqrt{n_k + 1} |n_k + 1\rangle, \quad a_k^+ a_k |n_k \rangle \approx n_k |n_k \rangle. \quad (9.2)$$

Числа заполнения квантовых состояний при симметричных волновых функциях ничем не ограничены (в отличие от принципа Паули в фермионах) и могут иметь произвольные значения. Функцию распределения бозе-частиц несложно получить, рассмотрев термодинамический потенциал системы $\Omega = -T \ln Q$, где статистическая сумма Q в большом каноническом ансамбле (с учетом химического потенциала μ) и для системы невзаимодействующих частиц имеет вид:

$$Q = \sum_N \exp\{\mu N / T\} \left[\sum_n \exp\{-E_{nN} / T\} \right] = \sum_{n_k} (\exp[\beta(\mu - \varepsilon_k)])^{n_k}, \quad (9.3)$$

так как энергия n_k частиц в состоянии k равна $\varepsilon_k n_k$. Отметим, что мы интересуемся конкретным состоянием k и его заполнением, так как в отсутствие взаимодействия все состояния статистически независимы. Заметим, что мы получили в (9.3) геометрическую прогрессию, и для ее сходимости необходимо, чтобы $\exp[\beta(\mu - \varepsilon_k)] < 1$. Это условие должно выполнять-

ся для всех состояний ε_k , в том числе и для $\varepsilon_k=0$. Отсюда хим-потенциал должен быть отрицателен: $\mu < 0$. Суммируем геометрическую прогрессию и находим:

$$\Omega_k = T \ln(1 - \exp[\frac{\mu - \varepsilon_k}{T}]). \quad (9.4)$$

Теперь можно найти средние числа заполнения $\langle n_k \rangle = -\partial \Omega_k / \partial \mu$:

$$n_k(T) = \langle n_k \rangle = \langle a_k^+ a_k \rangle = \frac{1}{\exp[\frac{\varepsilon_k - \mu}{T}] - 1}. \quad (9.5)$$

Энергия одной частицы $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$. Полное число частиц N в газе получаем, суммируя (9.5):

$$N = \sum_k \frac{1}{\exp[\frac{\varepsilon_k - \mu}{T}] - 1} = \frac{Vm^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\exp[\frac{\varepsilon - \mu}{T}] - 1}. \quad (9.6)$$

Уравнение нормировки (9.6) определяет неявно химический потенциал μ как функцию температуры T и плотности $n = N/V$. Энергия бозе-газа

$$E = \sum_k \varepsilon_k \frac{1}{\exp[\frac{\varepsilon_k - \mu}{T}] - 1} = \frac{Vm^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon\sqrt{\varepsilon}}{\exp[\frac{\varepsilon - \mu}{T}] - 1}. \quad (9.7)$$

Рассмотрим случай низких температур. При низких температурах свойства бозе-газа кардинально отличаются от свойств ферми-газа хотя бы потому, что основное состояние системы имеет энергию $E=0$ (т.е. все частицы сконденсированы в состоянии с $\varepsilon_k=0$). Согласно нормировочному уравнению (9.6) при понижении температуры химический потенциал μ возрастает, будучи отрицательным, и достигает значения $\mu=0$ при температуре T_0 , удовлетворяющей соотношению:

$$N/V = \frac{(mT_0)^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty dz \frac{\sqrt{z}}{\exp[z] - 1} = \frac{(mT_0)^{3/2}}{2\sqrt{2}\pi^{3/2}\hbar^3} \zeta(3/2). \quad (9.8)$$

Здесь учтено, что $\int_0^{\infty} \frac{x^{Z-1} dx}{\exp[x]-1} = \Gamma(Z)\zeta(Z)$, $\zeta(Z)$ - дзета-функция Римана ($\zeta(3/2)=2.612$), $\Gamma(Z)$ - гамма-функция ($\Gamma(3/2)=1/2\Gamma(1/2)=\sqrt{\pi}/2$). Из (9.8) получаем температуру (как мы увидим ниже, температуру конденсации)

$$T_0 = \frac{2\pi}{[\zeta(3/2)]^{2/3}} \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} = 3.31 \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}. \quad (9.9)$$

Заметим, что при более низких температурах $T < T_0$ уравнение нормировки (9.6) не имеет решений $\mu < 0$, хотя это должно быть для бозе-статистики. Это связано с тем, что нельзя в этом случае переходить формально от суммирования к интегрированию в (9.6). Необходимо более аккуратно учитывать член с $\varepsilon_k = 0$, так как он умножается на $\sqrt{\varepsilon}$ и выпадает из суммы. Однако именно он важен при низких температурах, так как именно в это состояние конденсируются все частицы. Формально из (9.6) можно заметить, что при переходе к пределу $\mu \rightarrow 0$ этот член расходится. Устремляя μ не к нулю, а к некоторому конечному малому значению, можно его привести к конечной величине. Однако можно формально обойти этот момент, рассчитав сначала число частиц при $\varepsilon > 0$ (при $T < T_0$), так как эта величина, определяемая (9.6) с $\mu = 0$, конечна:

$$N_{\varepsilon > 0} = \frac{V (mT)^{3/2}}{\sqrt{2} \pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} dz \frac{\sqrt{z}}{\exp[z]-1} = N \left\{ \frac{T}{T_0} \right\}^{3/2} \quad (9.10)$$

(здесь мы использовали определение T_0 (9.8)). Остальные сконденсированные при $\varepsilon = 0$ частицы определяются из нормировки

$$N_{\varepsilon=0} = N_0 = N[1 - (T/T_0)^{3/2}]. \quad (9.11)$$

Таким образом, при температуре $T = T_0$ начинается конденсация бозе-частиц в наинизшее энергетическое состояние

$\varepsilon=0$, и число сконденсированных частиц N_0 определяется степенной зависимостью (9.11).

Определим термодинамические величины бозе-газа в условиях наличия конденсата ($T < T_0$). Естественно, они определяются только частицами с $\varepsilon > 0$. Полагая везде $\mu=0$, находим энергию E , теплоемкость C , энтропию S и свободную энергию F :

$$\begin{aligned}
 E &= \frac{Vm^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon\sqrt{\varepsilon}}{\exp[\varepsilon/T]-1} = \frac{3V(mT)^{3/2}T}{4\sqrt{2}\pi^{3/2}\hbar^3} \zeta(5/2) = \\
 &= 0.770NT[T/T_0]^{3/2}, \\
 C &= \partial E/\partial T = 5E/2T \sim T^{3/2}, \\
 S &= \int [C/T] dT = 5E/3T, \\
 F &= E - TS = -\frac{2}{3}E.
 \end{aligned}
 \tag{9.12}$$

В точке $T=T_0$ все величины (9.12) непрерывны. Однако производная теплоемкости испытывает в этой точке конечный скачок (см. ниже задачу), т.е. теплоемкость имеет при $T=T_0$ излом и равна $1.92N$. Таким образом, явление бозе-конденсации - типичный фазовый переход второго рода.

Задачи

9.1.1. Рассчитать скачок производной теплоемкости dC/dT в точке $T=T_0$ для бозе-газа, т.е. значение dC/dT при $T=T_0 - 0$ и $T=T_0 + 0$.

Указание: при $T=T_0+0$ следует разложить энергию при малых $T-T_0$, а также найти зависимость от температуры химического потенциала при $T-T_0 \ll T_0$, полагая его малым отрицательным числом $-\mu \sim (T-T_0)^\alpha \ll T_0$.

9.2. Возбуждения в слабо неидеальном бозе-газе

Обсудим сначала качественно возможные возбуждения в бозе-газе в длинноволновом пределе $p \rightarrow 0$. В квантовой бозе-системе элементарные возбуждения должны иметь целочисленный спин, так как момент импульса всякой квантовомеханической системы может меняться только на целое число. Поэтому в квантовой бозе-жидкости элементарными возбуждениями с малыми импульсами p являются обычные гидродинамические волны, т.е. фононы (квазичастицы с нулевым спином). Таким образом, закон дисперсии возбуждений должен быть линейен:

$$\varepsilon_p = u p, \quad (9.13)$$

где размерный коэффициент u имеет смысл скорости звука. Число этих возбуждений стремится к нулю при $T \rightarrow 0$, и при низких температурах, когда их число мало, и они практически не взаимодействуют, их можно считать идеальным бозе-газом с нулевым химпотенциалом $\mu=0$ (число возбуждений не фиксировано), и функция распределения возбуждений

$$n(p) = \frac{1}{\exp\left[\frac{\varepsilon_p}{T}\right] - 1}. \quad (9.14)$$

Можно, зная распределение (9.14) и закон дисперсии (9.13), рассчитать термодинамические величины жидкости при низких температурах, аналогично тому, как мы рассчитали термодинамику идеального бозе-газа:

$$E = V \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty d^3 p \frac{up}{\exp[up/T] - 1} = \frac{\pi^2}{30u^3} VT^4, \quad (9.15)$$

где

$$C = \partial E / \partial T = 4E/T \sim T^3,$$

$$S = \int [C/T] dT = 4E/3T,$$

$$F = E - TS = -\frac{1}{3}E.$$

При увеличении импульса закон дисперсии отличается от линейного (9.13), и дальнейший ход зависимости определяется взаимодействием между частицами бозе-газа.

Получим более корректно закон возбуждений над основным состоянием взаимодействующего бозе-газа. Рассмотрим слабо неидеальный бозе-газ с одинаковым взаимодействием U между парами частиц, описываемый гамильтонианом:

$$\overline{H} = \sum_p \varepsilon_p a_p^+ a_p + \frac{U}{2V} \sum_{\substack{p_1 p_2 p_3 p_4 \\ p_1 + p_2 = p_3 + p_4}} a_{p_4}^+ a_{p_3}^+ a_{p_2} a_{p_1}, \quad (9.16)$$

где $\varepsilon_p = p^2/2m$, а взаимодействие U связано с амплитудой рассеяния a (имеющей величину порядка межчастичного расстояния $[a^3 \sim V/N]$) между двумя одинаковыми частицами соотношением

$$U = 4\pi a/m. \quad (9.16a)$$

Боголюбов (1947 г.) показал, что для описания основного и низших возбужденных состояний удастся диагонализировать гамильтониан (9.16) и получить энергетический спектр. Упростим взаимодействующую часть гамильтониана, учитывая, что в основном состоянии частицы находятся в конденсате, и ввиду слабости взаимодействия основное состояние взаимодействующего газа будет слабо отличаться от основного состояния идеального газа, поэтому число частиц над конденсатом будет много меньше числа конденсатных частиц N_0 :

$$N - N_0 \ll N_0.$$

Так как матричные элементы бозевских операторов равны $\sqrt{N} \sim \sqrt{N_0} \gg 1$ (см. (9.2)), то в (9.16) можно оставить только взаимодействие конденсатных частиц между собой и с возбуждениями, пренебрегая взаимодействием надконденсатных частиц между собой:

$$H_{\text{int}} = \frac{U}{2V} \{a_0^+ a_0^+ a_0 a_0 + \sum_{p \neq 0} (2a_p^+ a_0^+ a_p a_0 + 2a_{-p}^+ a_0^+ a_{-p} a_0 + a_p^+ a_{-p}^+ a_0 a_0 + a_0^+ a_0^+ a_p a_{-p})\}. \quad (9.17)$$

В (9.17) учтены процессы рождения (уничтожения) пары возбуждений из конденсата (в конденсат) - последние два члена (с сохранением суммарного импульса $p+(-p)=0$), а также одночастичное рассеяние возбуждений на конденсатной частице (первые два члена).

Так как $\sqrt{N_0} \gg 1$, операторы a_0^+ и a_0 являются простыми числами, равными $\sqrt{N_0}$. Отсюда взаимодействующая часть гамильтониана переписывается в виде

$$H_{\text{int}} = \frac{U}{2V} \left[N_0^2 + N_0 \sum_{p \neq 0} (2a_p^+ a_p + 2a_{-p}^+ a_{-p} + a_p^+ a_{-p}^+ + a_p a_{-p}) \right]. \quad (9.18)$$

Учтем выражение для полного числа частиц:

$$N = N_0 + \frac{1}{2} \sum_{p \neq 0} (a_p^+ a_p + a_{-p}^+ a_{-p}). \quad (9.19)$$

Выразим все числа N_0 через N в (9.18), ограничиваясь членами, содержащими не менее первой степени N . С учетом (9.19) и (9.18) полный гамильтониан (9.16) переписывается в виде:

$$\begin{aligned} \overline{H} = & \frac{UN^2}{2V} + \frac{1}{2} \sum_{p \neq 0} \left[\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{UN}{V} \right) (a_p^+ a_p + a_{-p}^+ a_{-p}) + \right. \\ & \left. + \frac{UN}{V} (a_p^+ a_{-p}^+ + a_p a_{-p}) \right]. \end{aligned} \quad (9.20)$$

Диагонализуем гамильтониан (9.20). Для этого введем линейные преобразования операторов:

$$a_p = \frac{1}{\sqrt{1-A_p^2}}(\alpha_p + A_p \alpha_{-p}^+), \quad a_p^+ = \frac{1}{\sqrt{1-A_p^2}}(\alpha_p^+ + A_p \alpha_{-p}). \quad (9.21)$$

Несложно убедиться, что операторы α также удовлетворяют бозевским соотношениям коммутации. Подставив их в гамильтониан (9.20) и обозначив

$$S=UN/V, \quad S_p=p^2/2m+S, \quad \Delta_p=1+A_p^2, \quad W_p=1-A_p^2, \quad (9.22)$$

получим

$$\begin{aligned} \bar{H} = & SN/2 + \sum_{p \neq 0} \frac{1}{W_p} [S_p A_p^2 + SA_p] + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{p \neq 0} \frac{1}{W_p} [\{S_p \Delta_p + 2SA_p\}(\alpha_p^+ \alpha_p + \alpha_{-p}^+ \alpha_{-p})] + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{p \neq 0} \frac{1}{W_p} [\{2S_p A_p + S\Delta_p\}(\alpha_p^+ \alpha_{-p}^+ + \alpha_p \alpha_{-p})]. \end{aligned} \quad (9.23)$$

Зануляя коэффициент при недиагональном члене, находим A_p :

$$2S_p A_p + S\Delta_p = 0 \Rightarrow A_p = \frac{1}{S}(-S_p + \sqrt{S_p^2 - S^2}). \quad (9.24)$$

В (9.24) перед корнем поставлен знак “+” из-за положительности энергии возбуждений относительно основного состояния $\varepsilon=0$. Подставив (9.24) в (9.23), находим окончательно:

$$\bar{H} = SN/2 + \frac{1}{2} \sum_{p \neq 0} SA_p + \frac{1}{2} \sum_{p \neq 0} \sqrt{S_p^2 - S^2} (\alpha_p^+ \alpha_p + \alpha_{-p}^+ \alpha_{-p}). \quad (9.25)$$

Видно, что (9.25) состоит из некоторой константы E_0 , имеющей смысл энергии основного состояния бозе-жидкости, и энергии возбуждений со спектром E_p , так что полная энергия системы имеет вид

$$E = \langle \bar{H} \rangle = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{p \neq 0} E_p \langle \alpha_p^+ \alpha_p + \alpha_{-p}^+ \alpha_{-p} \rangle = E_0 + \sum_{p \neq 0} E_p n_p,$$

$$\langle \alpha_p^+ \alpha_p \rangle = n_p,$$

$$E_0 = SN / 2 + \frac{1}{2} \sum_{p \neq 0} SA_p, \quad (9.26)$$

$$E_p = \sqrt{S_p^2 - S^2} = \sqrt{\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{UN}{V} \right)^2 - \left(\frac{UN}{V} \right)^2}.$$

Здесь n_p - функция распределения возбуждений (9.14), имеющая вид бозе-функции с нулевым химпотенциалом. В предельных случаях спектр возбуждений имеет вид:

$$E_p = \begin{cases} up, & u = \sqrt{UN/mV}, \quad p \rightarrow 0; \\ p^2/2m, & p \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (9.27)$$

При малых импульсах мы получаем, как и следовало ожидать, звуковой закон дисперсии со скоростью звука u . При больших импульсах имеем спектр свободной частицы, так как взаимодействие перестает играть существенную роль.

Из вида спектра возбуждений видно, что локальных минимумов на нем нет, так как смене линейной на квадратичную зависимость соответствует только точка перегиба (рис.18,а). Однако мы рассматривали слабо неидеальный газ. В реальном же случае при возрастании взаимодействия возможен локальный минимум (рис.18,б) (что наблюдается у жидкого гелия). Вблизи точки минимума p_0 ($\sim 1/a$, a - межатомное расстояние), которая соответствует новым квазичастичным возбуждениям, можно разложить реальный спектр E_p в виде

$$E_p = \Delta + \frac{(p - p_0)^2}{2m^*}, \quad (9.28)$$

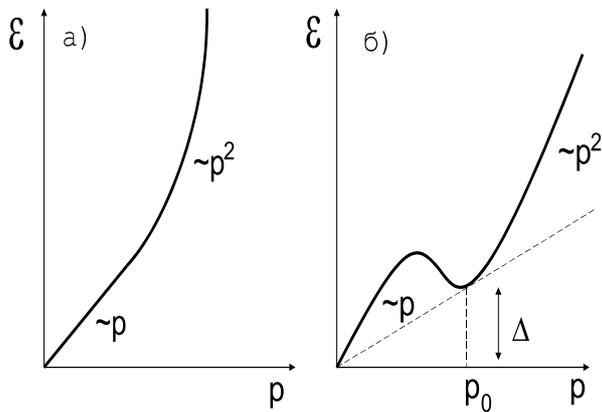


Рис. 18. Спектр возбуждений взаимодействующего бозе-газа: а) - слабое взаимодействие; б) - сильное взаимодействие. Штриховая прямая показывает, что точка p_0 (ротонные возбуждения) соответствует критерию Ландау $d\varepsilon/dp = \varepsilon/p$, т.е. сверхтекучесть имеет место, если скорость движения жидкости $v < \Delta/p_0$

где $\Delta = E(p_0)$, m^* - эффективная масса этих возбуждений, называемых *ротонами*.

Пользуясь законом дисперсии (9.28), получим вклад в термодинамические величины ротонных возбуждений. При низких температурах, полагая $\Delta \gg T$ (реальные оценки для жидкого гелия $\Delta = 8.7\text{К}$), можем считать, что распределение ротонов - бoльцмановское: $n_p = \exp(-E_p / T)$. Отсюда находим в этом пределе (учитывая также, что $p_0^2 \gg m^*T$ и при интегрировании удобно перейти к переменной $x = p - p_0$, $-\infty < x < \infty$):

$$\begin{aligned}
E &= V \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty d^3 p E_p \exp[-E_p / T] = N_p \left(\frac{1}{2} T + \Delta \right), \\
C &= \partial E / \partial T = N_p \left(\frac{3}{4} + \frac{\Delta}{T} + \frac{\Delta^2}{T^2} \right), \\
S &= \int [C/T] dT = N_p \left(\frac{3}{2} + \frac{\Delta}{T} \right), \\
F &= E - TS = -TN_p, \\
N_p &= \frac{2(m^* T)^{1/2} p_0^2 V}{(2\pi)^{3/2} \hbar^3} \exp[-\Delta/T].
\end{aligned} \tag{9.29}$$

Здесь

$$N_p = V \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty d^3 p \exp[-E_p / T]$$

- число ротонов. Видно, что зависимость от температуры термодинамических величин в отличие от случая фононных возбуждений экспоненциальная: $\sim \exp(-\Delta/T)$.

Итак, неидеальный бозе-газ имеет два вида возбуждений - фононы и ротоны, отвечающих различным участкам по импульсу q одной и той же ветви возбуждений. При низких температурах $\Delta > T$ ротонная часть меньше фононной и, наоборот при высоких превалирует над фононной, так что теплоемкость имеет сначала степенную зависимость ($\sim T^3$), а затем экспоненциальную ($\sim \exp(-\Delta/T)$).

Вернемся теперь к слабо неидеальному газу и закону дисперсии (9.26). Ответим на вопрос: все ли частицы в этом случае испытывают бозе-конденсацию, как это имеет место в идеальном газе? Подставляя в (9.19) выражения (9.5) и (9.21), имеем для среднего числа частиц

$$\langle N \rangle = N_0 + \sum_{p \neq 0} \frac{n_p + A_p^2 (n_p + 1)}{1 - A_p^2}. \tag{9.30}$$

Полагая $T=0$, $n_p=0$, из (9.30) находим с учетом (9.24):

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &\equiv N = N_0 + \frac{(2m^* S)^{3/2}}{8\pi^2} \int_1^\infty dz \frac{(z - \sqrt{z^2 - 1})}{\sqrt{z + 1}} \Rightarrow \\ &\Rightarrow N_0 / N = 1 - \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{Na^3}{V}}, \end{aligned} \quad (9.31)$$

где учтено соотношение (9.16а) между взаимодействием U и амплитудой рассеяния a . Итак, в неидеальном бозе-газе далеко не все частицы находятся в конденсате при нулевой температуре.

Задачи

9.2.1. Получить вклад фононных возбуждений в энергию E , энтропию S , свободную энергию F , число возбуждений N_p .

9.2.2. Рассчитать вклад ротонных возбуждений в энергию E , энтропию S , свободную энергию F , используя больцмановское распределение и закон дисперсии ротонов. Получить число ротонов N_p . Учесть, что $T \ll \Delta$.

Указание: учесть, что импульс ротона удовлетворяет условию $p_0^2 \gg m^* T$, и при интегрировании удобно перейти к переменной $x = p - p_0$, $-\infty < x < \infty$.

9.2.3. Доказать, что операторы α , введенные соотношениями (9.21), являются бозе-операторами.

9.2.4. Найти среднее число частиц $\langle N \rangle$ при $T=0$ в слабо неидеальном бозе-газе с законом дисперсии возбуждений (9.26), используя соотношение (9.19) для числа частиц. Рассчитать число частиц в конденсате.

9.3. Критерий сверхтекучести Ландау

При низких температурах наиболее интересным свойством бозе-жидкости является свойство сверхтекучести, т.е. способность протекать по капиллярным трубкам без трения (Л.Д.Ландау, 1941 г.). Покажем, что это свойство следует из рассмотренного выше спектра возбуждений (и показанного на рис.18,б).

Рассмотрим бозе-жидкость при $T=0$, текущую по капилляру со скоростью \vec{v} . В системе, связанной с жидкостью, она покоится, а капилляр движется со скоростью $-\vec{v}$. Если между жидкостью и стенками капилляра имеется трение, это может привести к увлечению жидкости стенками капилляра. Это приводит к появлению элементарных возбуждений и диссипации энергии.

Пусть имеется возбуждение с энергией ε_p и импульсом p . Вернемся в систему координат, связанную с капилляром. Тогда энергия жидкости, связанная с этим возбуждением, имеет вид

$$\varepsilon(p) + \vec{p} \vec{v} + \frac{M v^2}{2}, \quad (9.32)$$

где M - масса жидкости. Таким образом, появление возбуждения меняет первоначальную энергию жидкости $\frac{Mv^2}{2}$, причем добавка $\varepsilon(p) + \vec{p} \vec{v}$. Для того, чтобы такое возбуждение появилось, необходимо, чтобы энергия за его счет стала меньше, т.е.

$$\varepsilon(p) + \vec{p} \vec{v} < 0. \quad (9.33)$$

Эта величина имеет минимальное значение при антипараллельных скорости и импульсе. Таким образом, (9.33) можно переписать в условие

$$v > \frac{\varepsilon}{p} . \quad (9.34)$$

Наконец, для того чтобы вообще могло родиться возбуждение, необходимо, чтобы:

$$v > (\varepsilon/p)_{\min} . \quad (9.35)$$

Условие (9.35) называется *критерием сверхтекучести* Ландау.

Минимальному значению ε/p соответствует точка кривой $\varepsilon(p)$, в которой

$$\frac{d\varepsilon}{dp} = \frac{\varepsilon}{p} , \quad (9.36)$$

т.е. точка, где прямая, проведенная из начала координат, касается кривой $\varepsilon(p)$ (см. рис. 18,б). Производная $d\varepsilon/dp$ есть скорость элементарного возбуждения. Поэтому критерий Ландау (9.35) означает, что сверхтекучее движение может иметь место, только если скорость жидкости меньше скорости элементарного возбуждения в точках, удовлетворяющих (9.36). Как видно из рис.18,б, опасная точка лежит правее ротонного минимума. Несложно оценить из спектра (9.28), что скорость сверхтекучего движения должна быть

$$v < \frac{1}{m^*} (\sqrt{p_0^2 + 2m^* \Delta} - p_0) \Big|_{p_0^2 \gg 2m^* \Delta} = \frac{\Delta}{p_0} . \quad (9.37)$$

Рассмотрим качественную картину движения бозе-жидкости, когда выполняется критерий Ландау. При нулевой температуре возбуждения отсутствуют, и движение сверхтекучее. Как только $T \neq 0$, появляются возбуждения, которые сталкиваются со стенками капилляра, и участвуют в вязком движении жидкости с диссипацией энергии. В таком движении участвует лишь часть массы жидкости. Дело в том, что движение газа возбуждений относительно жидкости сопровождается

переносом массы. Так, пусть v - относительная скорость такого движения. Тогда импульс газа возбуждений в единице объема:

$$\vec{P} = \int \vec{p} n(\varepsilon_p - p v) \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \Big|_{v \rightarrow 0} \approx -v / 3 \int p^2 \partial n / \partial \varepsilon \frac{d^3 p}{(2\pi)^3}. \quad (9.38)$$

Так как импульс пропорционален скорости, то происходит перенос массы (он и есть коэффициент пропорциональности).

Оставшаяся часть массы жидкости будет по-прежнему двигаться без диссипации. Таким образом, бозе-жидкость при $T \neq 0$ представляет собой смесь двух жидкостей - "сверхтекучей" и "нормальной", движущихся без трения относительно друг друга. Конечно, на самом деле просто есть два движения в единой жидкости, каждое обладает соответствующей плотностью и эффективной массой. Из (9.38), например, можно получить фононную и ротонную части нормальной плотности, если учесть, что $P = m v = \rho V v$, $V=1$. Подставив линейный закон дисперсии (9.13) и бозе-распределение (9.14), а затем спектр ротонов (9.28) и распределение Больцмана в (9.38), получим

$$\rho_{nf} = \frac{2\pi^2 T^4}{45u^5}, \quad \rho_{np} = \frac{2m^{*1/2} p_0^4 \exp(-\Delta/T)}{3(2\pi)^{3/2} T^{1/2}}. \quad (9.39)$$

Оставшаяся часть плотности ρ_s соответствует сверхтекучему движению. Итак, в сверхтекучей жидкости имеет место двухжидкостное движение с плотностью

$$\rho = \rho_n + \rho_s. \quad (9.40)$$

Пусть скорость сверхтекучей компоненты \vec{v}_s . Следует отметить важное свойство: если жидкость помещена во вращающийся цилиндр, то нормальная часть будет увлечена стенками и станет вращаться с ним. Напротив, сверхтекучая часть будет покоиться, ее нельзя привести во вращение, так как движение

сверхтекучей компоненты всегда потенциально. Это свойство можно записать математически:

$$\text{rot } \vec{v}_s = 0.$$

В заключение параграфа следует отметить также следующее.

Двухкомпонентная гидродинамика бозе-жидкости во многом отличается от обычной гидродинамики. Так, в бозе-жидкости могут происходить колебания двух различных типов с разными скоростями. Колебания первого типа - обычный звук, или первый звук, со скоростью u . В этом движении сверхтекучая и нормальная компоненты не разделяются и движутся как единое целое. Колебания второго типа - это так называемый второй звук, распространяется с другой скоростью $u_2 = \sqrt{\rho_s TS^2 / \rho \rho_n C}$, где S - энтропия, C - теплоемкость (при $T \rightarrow 0$ $u_2 = u / \sqrt{3}$). В такой волне нормальная и сверхтекучая компоненты колеблются в противофазе, так что полный поток жидкости равен нулю:

$$\vec{j} = \rho_n \vec{v}_n + \rho_s \vec{v}_s = 0.$$

Задачи

9.3.1. Рассчитать нормальную составляющую плотности в сверхтекучей жидкости за счет фононных ρ_{nf} и ротонных ρ_{nr} возбудений.

Указание: использовать соотношение для импульса газа возбудений P (9.38) и учесть, что $P = mv = \rho V v$ при единичном объеме. Расчет ротонных возбудений проводить в соответствии с указанием к задаче 9.2.2.

ЛИТЕРАТУРА

1. Браут Р. Фазовые переходы. М.: Мир, 1967.
2. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1966.
3. Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления. М.: МГУ, 1973.
4. Марч Н., Паринелло М. Коллективные эффекты в твердых телах и жидкостях. М.: Мир, 1986.
5. Уайт Р., Джебелл Т. Дальний порядок в твердых телах. М.: Мир, 1982.
6. Изюмов Ю.А., Скрябин Ю.Н. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. М.: Наука, 1987.
7. Мотт Н.Ф. Переходы металл-изолятор. М.: Наука, 1979.
8. Паташинский Д.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. М.: Наука, 1982.
9. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. В двух томах. М.: Мир, 1979.
10. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978.
11. Уэрт Ч., Томсон Р. Физика твердого тела. М.: Мир, 1969.
12. Маделунг О. Теория твердого тела. М.: Наука, 1980.
13. Маделунг О. Физика твердого тела. Локализованные состояния. М.: Наука, 1985.
14. Электронная теория неупорядоченных полупроводников. /Под ред. Бонч-Бруевича В.Л. и др. М.: Наука, 1981.
15. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Т.3. М.: Наука, 1974.
16. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Т.5. М.: Наука, 1976.
17. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Часть 2. Т.9. М.: Наука, 1978.

18. Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: Наука, 1962.

19. Lieb E.H., Wu F.Y. Absence of Mott transition in an exact solution on the short-range, one-band model in one dimension. //Phys.Rev.Lett., 1968. V.20. P.1445-1448.

20. Fisher M.P.A., Weichman P.B., Grinstein G. and Fisher D.S. Boson localization and the superfluid-insulator transition. //Phys.Rev. B, 1989. V.40. N 1. P.546-570.

Елесин Владимир Федорович
Кашурников Владимир Анатольевич

ФИЗИКА ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

Редактор и технический редактор Е. Н. Кочубей

ЛР №020676 от 09.12.1992. Тем. план 1997 г.

Подписано в печать Формат 60Г84 1/16.
Уч.-изд.л. 11.5 П.л. 11.25 Тираж 120 экз. Изд.№004-1. Заказ

Московский государственный инженерно-физический институт
(технический университет).
Осетрадоу ИЕОЕ. 115409, Инеаа. Еаөдñеа õппа, 31.