11

Новые следствия гипотезы статического подобия при низких температурах

© В.Н. Удодов

Институт естественных наук и математики Хакасского государственного университета им. Н.Ф. Катанова, Абакан, Россия

E-mail: udodov@khsu.ru

(Поступила в Редакцию 3 февраля 2015 г.
В окончательной редакции 16 апреля 2015 г.)

Предложены общие интерполяционные формулы, обобщающие классические следствия гипотезы статического подобия (скейлинга) для фазовых переходов при изменении температуры и поля. Классические результаты получаются из этих формул как предельный частный случай при асимптотической близости к положительной критической температуре. Показано также, что некоторые следствия гипотезы подобия остаются верными и при нулевой критической температуре, однако, например, равенство Эссама и Фишера в последнем случае изменяет свой вид: в правой части двойка заменяется на единицу.

Работа частично выполнена при федеральном финансировании по тематическому плану ХГУ им. Н.Ф. Катанова по заданию Министерства образования и науки Российской Федерации.

1. Введение

Критические показатели и гипотеза подобия лежат в основе современной теории критических явлений [1–17]. Равенство Эссама и Фишера [4] и неравенство Рашбрука [5] были выведены в 1963 г., и все верили, что эти классические соотношения выполняются. Эти соотношения связывают критические индексы теплоемкости (α, α'), восприимчивости (γ, γ') и параметра порядка (β) (определения всех индексов даны ниже, штрихованные индексы относятся к области устойчивости упорядоченной фазы, β также относится к этой области) [1–3].

В 1965 году появилась гипотеза подобия (скейлинга), в рамках которой равенство Эссама и Фишера выполняется, а неравенство Рашбрука $\alpha' + 2\beta + \gamma' \geq 2$ вырождается в равенство [1]

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' = 2.$$

Однако уже давно известны экспериментальные свидетельства нарушения классических соотношений, на что указывал еще Стэнли [1]. Например, для магнитного перехода в никеле неравенство имеет вид [10]

$$\alpha' + 2\beta + \gamma = 1.89 < 2.$$

Заметим, что в рамках гипотезы скейлинга [1–3] $\gamma = \gamma'$, $\alpha = \alpha'$. Для критической точки в CO_2 [10]

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' = 1.8 < 2.$$

Эти нарушения не получили окончательного теоретического объяснения. Говорили, что недостаточно точно учтены дополнительные факторы (например, сжимаемость решетки [1]), плохо оценены погрешности измерений, измерения проведены недостаточно близко к критической точке [1], наконец, состояния не полностью равновесны. Хотя нарушения следствий гипотезы подобия обсуждались Аарони и Алерс [11], однако они не рассмотрели случай нулевой критической температуры.

С другой стороны, как можно показать, классическое соотношение Эссама–Фишера и остальные следствия гипотезы подобия были получены при допущении, что критическая температура (температура фазового перехода (ФП)) положительна: $T_C > 0$ и $T \to T_C$ (T — температура по шкале Кельвина).

Однако в последние десятилетия значительное внимание привлекали так называемые квантовые ФП [6–17], для которых температура ФП $T_C = 0$ (разумеется, это далеко не единственная специфика квантовых фазовых переходов) [7,13,14,16,17]. Например, это возможно для переходов в сверхпроводящее состояние [8]. Работа посвящена исследованию двух вопросов. 1. Выяснено, как изменяются следствия гипотезы подобия при равенстве нулю температуры ФП. Показано, что если $T_C = 0$, то при положительной температуре классическое равенство Эссама–Фишера изменяется: в правой части двойка заменяется на единицу. Возможно, это объясняет известные кажущиеся нарушения следствий гипотезы подобия. 2. Предложен ряд интерполяционных формул (обобщенное равенство Эссама–Фишера и др.), обобщающих известные следствия гипотезы подобия. Эти новые интерполяционные формулы справедливы при любых температурах: как для положительной критической температуры, так и для случая $T_C = 0$, и классические результаты получаются из них как предельный частный случай. Полученные формулы справедливы также для равновесных ФП любой природы при произвольной размерности пространства. Предложенная теория может быть проверена как для ФП, для которых T_C стремится к нулю или $T_C = 0$ с самого начала, так и для случаев с $T_C > 0$. Критическая температура плавно стремится к нулю при изменении параметров для сверхпроводников [8] или, например, для ферромагнетика $Ce_{2.15}Pd_{1.95}In_{0.9}$ [9]. Представляют особый интерес те ФП, для которых обнаружены отклонения от предсказаний статического термодинамического скейлинга при положительной критической температуре.

При $T_C = 0$ возникает вопрос о двух фазах и о двухфазном равновесии. Так как в статье наиболее подробно рассмотрен случай, когда изменяется (уменьшается) температура при постоянных других параметрах, то ограничимся этим вариантом. Как показано ниже, есть основания считать, что двухфазное равновесие в такой ситуации невозможно, поскольку ФП выше первого рода. Кроме того, при $T_C = 0$ низкотемпературная фаза экспериментально недостижима, поэтому вопрос приобретает несколько умозрительный характер. Однако необходимо отметить, что высокотемпературная (экспериментально достижимая) фаза может быть как неупорядоченной (в большинстве случаев), так и упорядоченной [3]. В качестве примера напомним о традиционной одномерной модели Изинга [1,2], для которой $T_C = 0$ и высокотемпературная фаза является неупорядоченной. В этом случае упорядоченная фаза существует только при абсолютном нуле, когда критические индексы упорядоченной фазы (например, индекс β) экспериментально найти невозможно.

При достаточно низких температурах основную роль начинают играть квантовые флуктуации [7,12,16,17], и тогда рассмотренный подход, возможно, неприменим. Остается открытым вопрос о том, каким образом происходит переход от рассмотренного классического термодинамического поведения к квантовому поведению при абсолютном нуле.

2. Гипотеза статического подобия (скейлинга)

Сначала напомним обычную формулировку гипотезы подобия для ферромагнетика [1] и ее вариант для нулевой температуры ФП. Гипотеза статического подобия состоит в том, что термодинамические потенциалы являются однородными функциями [1], например, для термодинамического потенциала G (в формулах ниже λ — произвольное ненулевое число)

$$G_\lambda \equiv G(y_1, y) = \lambda G(\varepsilon, H), \quad \varepsilon \to 0, \tag{1}$$

здесь [1]

$$y_1 = \lambda^{a_\varepsilon}\varepsilon, \tag{2}$$

$$y = \lambda^{a_H} H, \tag{3}$$

$$\varepsilon = \frac{T - T_C}{T_C}, \tag{4}$$

считается, что критическая температура $T_C > 0$, H — напряженность магнитного поля (точнее, проекция напряженности на некоторую ось), a_ε, a_H — ненулевые параметры скейлинга.

Если $T_C = 0$, то выражением (4) пользоваться нельзя. Естественно перейти от ε к другой переменной [3]

$$t = T - T_C = T \geq 0, \tag{5}$$

тогда гипотеза подобия примет вид

$$G_\lambda \equiv G(y_1, y) = \lambda G(T, H), \quad T \to T_C = 0, \tag{6}$$

где для y останется верной формула (3), а y_1 изменится

$$y_1 = \lambda^{a_\varepsilon} T \equiv \lambda^a T. \tag{7}$$

Новизна ситуации в том, что при $T_C = 0$ абсолютная температура T играет роль расстояния до точки ФП (см. (5)).

Получим теперь простые следствия гипотезы подобия для $T_C = 0$, следуя идеям [1]. Предварительно обратим внимание на то, что при $T_C = 0$ возможно рассмотрение только высокотемпературной фазы $T \geq T_C = 0$, которая в некоторых случаях может быть упорядоченной [3]. Тогда в этой области возможно определение критического индекса β параметра порядка η

$$\eta = M(T, 0) \propto t^\beta, \quad t \geq 0, \quad t \to +0, \tag{8}$$

где $t = T - T_C$, $M(T, 0)$ — спонтанная намагниченность в нулевом поле. В большинстве случаев индекс β определен для упорядоченной фазы ниже точки ФП $T < T_C > 0$, $t < 0$ [1–3].

Возьмем от (6) частную производную по напряженности поля H

$$\frac{\partial G(y_1, y)}{\partial H} = \frac{\lambda^{a_H}\partial G_\lambda}{\partial y} = \lambda\,\frac{\partial G(T, H)}{\partial H}. \tag{9}$$

В то же время [1,3]

$$\frac{\partial G}{\partial H} = -M, \tag{10}$$

где $M = M(T, H)$ — намагниченность (спонтанная намагниченность), которая для ферромагнетика играет роль параметра порядка [1–3]. Далее, следуя идеям [1], получим

$$\beta = \frac{1 - a_H}{a_\varepsilon} \quad (T_C = 0,\ T > 0), \tag{11}$$

что совпадает с известной формулой для $T_C > 0$ [1]. Заметим, что (11) верно только для той редкой ситуации, когда упорядоченная фаза является высокотемпературной.

Разберем теперь экспериментально не реализуемый асимптотический случай (меняется поле H)

$$t = T = 0 \Rightarrow y_1 = \lambda^{a_\varepsilon} T \equiv \lambda^a T = 0 \quad (\lambda^a \neq 0). \tag{12}$$

Проведя выкладки, найдем

$$\delta = \frac{a_H}{1 - a_H} \quad (T_C = 0), \tag{13}$$

что снова совпадает с известной формулой для $T_C > 0$ [1]. Может сложиться впечатление, что все следствия гипотезы подобия при $T_C = 0$ совпадают с известными, однако это не так, хотя можно показать, что

$$\gamma = \beta(\delta - 1) \quad (T_C = 0,\ T > 0). \tag{14}$$

Это известное равенство Уидома, которое верно и для случая $T_C > 0$ [1–3].

3. Новые следствия гипотезы подобия при нулевой критической температуре

Покажем, что для критического индекса теплоемкости получается новый результат. Для этого от (6) возьмем частную производную по температуре, используя определение энтропии [1–3] $S = -\partial G/\partial T$

$$\frac{\partial G_\lambda}{\partial T} = \lambda\,\frac{\partial G(T,H)}{\partial T} = -\lambda S(T,H),\ \ T \to T_C = 0, \tag{15}$$

что может быть переписано в виде

$$\frac{\partial G_\lambda}{\partial T} = \frac{\lambda^a \partial G_\lambda}{\partial y_1} = -\lambda^a S_y = -\lambda S(T,H). \tag{16}$$

Берем от полученного выражения еще одну производную по температуре:

$$\lambda^a\,\frac{\partial S_y}{\partial T} = \frac{\lambda^{2a}\partial S_y}{\partial y_1} = \lambda^{2a} f_y(y_1, y) = \lambda\,\frac{\partial S(T,H)}{\partial T}. \tag{17}$$

Умножим (17) на абсолютную температуру и учтем определение теплоемкости

$$\lambda^{2a} T f_y(y_1, y) = \lambda T\,\frac{\partial S(T,H)}{\partial T} = \lambda C_H(T,H), \tag{18}$$

откуда следует

$$C_H(T,H) = \lambda^{2a-1} T f_y(y_1, y). \tag{19}$$

Здесь f_y — некоторая функция двух переменных. Теперь пусть поле $H = 0 \Rightarrow y = 0$,

$$\lambda = T^{\frac{-1}{a}}, \tag{20}$$

тогда $y_1 = +1$ и (19) перепишется в виде

$$C_H(T,0) = (T^{\frac{-1}{a}})^{2a-1} T f_y(1,0) \propto T^{-(1-\frac{1}{a})} \propto T^{-\alpha}, \tag{21}$$

где использовано определение критического индекса теплоемкости для высокотемпературной фазы в слабом или нулевом поле [1–3]

$$C_H \propto t^{-\alpha},\ \ t > 0,\ \ t = T - T_C = T. \tag{22}$$

Из (21) следует, что индекс теплоемкости равен

$$\alpha = 1 - \frac{1}{a} = 1 - \frac{1}{a_\varepsilon} \quad (T_C = 0, T > 0). \tag{23}$$

Это отличается от известной формулы [1]

$$\alpha' = \alpha = 2 - \frac{1}{a_\varepsilon} \quad (T_C > 0). \tag{24}$$

Если $T_C > 0$, то формула (21) примет вид

$$C_H(T,0) = (t^{\frac{-1}{a}})^{2a-1} T f_y(1,0) \propto T_C t^{-(2-\frac{1}{a})} \propto T_C t^{-\alpha},$$

откуда и получается (24). В этом случае множитель $T \approx T_C = \mathrm{const} > 0$ не играет существенной роли.

Далее, можно показать, что (см. (11) и (13))

$$\alpha = 1 - \beta(\delta + 1) \quad (T_C = 0, \quad T > 0) \tag{25}$$

или

$$\alpha + \beta(\delta + 1) = 1 \quad (T_C = 0, \quad T > 0). \tag{26}$$

Это новый вид неравенства Гриффитса для рассматриваемого случая, который существенно отличается от известного следствия из гипотезы скейлинга [1–3]

$$\alpha + \beta(\delta + 1) = 2 \quad (T_C > 0). \tag{27}$$

Если вспомнить равенство Уидома (14), то из (26) получим новую формулу [15,18]

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 1 \quad (T_C = 0,\ T > 0). \tag{28}$$

Это равенство Эссама–Фишера для случая нулевой критической температуры, которое также отличается от известной формулы (в рамках гипотезы подобия $\alpha = \alpha'$, $\gamma = \gamma'$ [1–3])

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (T_C > 0). \tag{29}$$

Это — классическое равенство Эссама и Фишера [1,3,4,15]. Мы еще раз убеждаемся, что все известные неравенства между индексами, выведенные из термодинамических условий устойчивости [1], в рамках гипотезы подобия вырождаются в равенства как при $T_C > 0$, так и при $T_C = 0$. Необходимо подчеркнуть, что при $T_C = 0$ индекс теплоемкости α не может быть положительным, что следует из третьего начала термодинамики [3]. В связи с этим отметим ошибочное утверждение Р. Бэкстера [2], что для традиционной одномерной модели Изинга (для которой $T_C = 0$) индекс теплоемкости $\alpha = +1$. Как показано в [2], гипотеза подобия для одномерной модели Изинга выполняется (в ограниченном виде, т.к. $T_C = 0$), однако, видимо, Р. Бэкстер полагал, что классическое равенство Эссама и Фишера (29) верно и в этом случае. На самом деле для одномерной традиционной модели Изинга индекс теплоемкости подчиняется неравенству [18]

$$\alpha \le 0.$$

Вышеизложеннное дает основания высказать гипотезу: при $T_C = 0$, в отличие от обычного случая $T_C > 0$, изменяются те скейлинговые равенства, которые содержат критический индекс теплоемкости α. Приведем еще несколько примеров в пользу этого. Из приведенных выше формул вытекает еще одна

$$\delta = \frac{1-\alpha+\gamma}{1-\alpha-\gamma} \quad (T_C = 0,\ T > 0). \tag{30}$$

Известна аналогичная формула [1]

$$\delta = \frac{2-\alpha+\gamma}{2-\alpha-\gamma} \quad (T_C > 0). \tag{31}$$

Еще одна формула связана с критическим индексом ψ, который определяется через энтропию следующим образом [1]:

$$S(H) \propto H^{\psi}(T = T_C). \tag{32}$$

Используя гипотезу подобия, можно вывести равенство

$$\psi\beta\delta = -\alpha \quad (T_C = 0,\ T > 0). \tag{33}$$

Аналогичное равенство имеет вид [1]

$$\psi\beta\delta = 1-\alpha \quad (T_C > 0). \tag{34}$$

Рассмотрим еще два равенства

$$\nu d = 2-\alpha \quad (T_C > 0), \tag{35}$$

$$\alpha = \varepsilon(\beta+\gamma) \quad (T_C > 0), \tag{36}$$

следующие из гипотезы подобия [1,3] (d — размерность пространства, ν — индекс корреляционной длины [1–3]), критический индекс ε определяется из формулы [3]

$$C_H \propto h^{-\varepsilon}, \quad T = T_C, \quad h \to 0. \tag{37}$$

При нулевой критической температуре (35) и (36) также изменяют свой вид (см. ниже).

4. Общий случай

В общем случае может быть предложена интерполяционная формула (обобщенное равенство Эссама–Фишера) [12,15,19]

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 1 + S_I, \tag{38}$$

где S — функция имеет вид [14,15,19]

$$S_I = \left(\frac{T_C}{T}\right)^n. \tag{39}$$

Здесь n — положительная константа, которая может быть найдена из сопоставления с экспериментом или из микроскопической теории, или путем компьютерного моделирования. Действительно, если $T_C = 0$ $(T > 0)$, мы придем к формуле (28). Если $T_C > 0$, $T \to T_C$, мы придем к классическому равенству Эссама и Фишера (29) [1–4]. В (39) две независимые переменные: абсолютная температура и критическая температура. В зависимости от соотношения между ними S-функция может быть как больше единицы, так и меньше ее. Отсюда следует принципиальный результат: правая часть равенства типа Эссама–Фишера не является константой (двойка в классическом варианте), а зависит от температуры и критической температуры T_C и может принимать значения от 1 до $2+\Delta$ $(\Delta > 0)$, то есть, правая часть теоретически может быть и больше двойки. Это будет, если $T < T_C$ (см. (39)). Для квантового фазового перехода T_C может зависеть от электронной плотности [16], и в квантовой критической точке $T_C = 0$.

Приведем еще несколько новых интерполяционных формул

$$\alpha + \beta(\delta+1) = 1 + S_I, \tag{40}$$

$$\delta = \frac{1+S_I-\alpha+\gamma}{1+S_I-\alpha-\gamma}, \tag{41}$$

$$\psi\beta\delta = S_I - \alpha, \tag{42}$$

$$\nu d = 1 + S_I - \alpha = r, \tag{43}$$

$$1 - S_I + \alpha = \varepsilon(\beta+\gamma). \tag{44}$$

Здесь r — род ФП в смысле Бэкстера [2], эти формулы согласуются с гипотезой статического подобия (скейлинга), причем в пространстве любой размерности, в том числе для низкоразмерных систем. В формулах (40)–(44) учтено, что из гипотезы подобия следует, что индексы выше и ниже точки ФП одинаковы [1–3]: $\alpha = \alpha'$, $\gamma = \gamma'$, $\nu = \nu'$. Из (43) получим, что род фазового перехода в большинстве случаев является дробным. В простых случаях род ФП по Бэкстеру совпадает с традиционным результатом. Например, в классической теории ФП Ландау [3] при $T_C > 0$ $(S_I = 1)$ из (43) получим

$$\nu d = 2 - \alpha = r \quad (T_C > 0).$$

В теории Ландау индекс корреляционной длины равен 0.5, а индекс теплоемкости равен нулю [3]. Учитывая, что эта теория верна в четырехмерном пространстве, найдем

$$\frac{1}{2}\cdot 4 = 2 - 0 = r = 2.$$

Если $T_C = 0$, то из определения (39) следует, что S-функция равна нулю. Тогда из (43) следует

$$\nu d = 1 - \alpha = r \quad (T_C = 0,\ T > 0). \tag{45}$$

Так как в этом случае индекс $\alpha < 0$ (в подавляющем большинстве случаев), то род перехода r больше единицы. Отсюда вытекает, что при $T_C = 0$, скорее всего, двухфазное равновесие невозможно (речь идет о переходах при понижении температуры при постоянных других параметрах), отвлекаясь даже от того обстоятельства, что абсолютный ноль недостижим. Кроме того, в этих рассуждениях не учтены квантовые флуктуации [7,16,17]. Заметим также, что предложенный подход не позволяет исследовать природу двухфазного равновесия, которое возможно при положительной критической температуре.

5. Заключение

Показано, что некоторые следствия гипотезы подобия справедливы только, если критическая температура T_C положительна (и $T \to T_C$). Если критическая температура равна нулю, то скейлинговые соотношения, содержащие критический индекс теплоемкости, меняют свой вид (нарушаются). Однако это не говорит о нарушении гипотезы статического скейлинга. Предложен ряд интерполяционных формул (обобщенное равенство Эссама–Фишера и др.), справедливых для равновесных фазовых переходов любой природы при изменении температуры или поля как при $T_C > 0$, так и при $T_C = 0$. Эти формулы верны для любой размерности пространства, и проверить их, разумеется, проще для случая $T_C > 0$.

Проверка полученных результатов возможна также для любых ФП [7] при $T_C \to 0$, например, для сверхпроводников или для ферромагнетика $Ce_{2.15}Pd_{1.95}In_{0.9}$ [9], для систем с тяжелыми фермионами [17], а также путем численных расчетов на моделях. Проверка полученных интерполяционных формул при $T_C > 0$ возможна для тех ФП, для которых обнаружены отклонения от классических предсказаний гипотезы подобия.

Необходимо отметить, что полученные результаты верны только для равновесных процессов и состояний, откуда следует, что значение S-функции, равное нулю, вряд ли экспериментально достижимо. Это связано с тем, что время релаксации (перехода в равновесное состояние) при $T \to T_C = 0$ стремится к бесконечности. Отметим также, что полученные результаты согласуются с гипотезой статического термодинамического скейлинга, более того — они, возможно, ее спасают при нарушении классических соотношений. Связь полученных результатов с квантовыми фазовыми переходами заслуживает отдельного рассмотрения. В квантовых ФП статику (равновесную термодинамику), скорее всего, невозможно отделить от динамики (важную роль играет динамический индекс z) [7,12,16,17], в связи с чем возникает вопрос о расширении рассмотренного подхода на неравновесные процессы.

Автор выражает благодарность И. Наумову за стимулирующие вопросы и поддержку.

Список литературы

[1] Г. Стенли. Фазовые переходы и критические явления. М. Мир (1973). 425 с.
[2] Р. Бэкстер. Точно решаемые модели в статистической механике. М. Мир (1985). 488 с.
[3] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Ч. 1. Наука, М. (1995). 608 с.
[4] J.W. Essam, M.E. Fisher. J. Chem. Phys. **38**, 802 (1963).
[5] G.S. Rushbrooke. J. Chem. Phys. **39**, 842 (1963).
[6] A.B. Rechester. JETP **33**, *2*, 782 (1971).
[7] S. Sachdev. Quantum phase transitions. Yale University, New Haven, USA (1999). 488 p.
[8] A.A. Abrikosov. Fundamentals of the Theory of Metals. Amsterdam, North-Holland (1988).
[9] J.G. Sereni, M. Giovannini, M. Gormez Berisso, A. Saccone. J. Phys: Conf. Ser. **391**, 012 062 (2012).
[10] H.B. Movahed. E-print: http://www.chem.utoronto.ca /∼hbayat /HanifBayat-Inequalities.
[11] A. Aharony, G. Ahlers. Phys. Rev. Lett. **44**, 782 (1980).
[12] A. Cano, A.P. Levanyuk. Phys. Rev. B **70**, 064 104 (2004).
[13] V. Udodov. Bulletin of the APS. March Meeting. **58**, *1*, 17. 00003 (2013).
[14] В.Н. Удодов. Моделирование неравновесных систем. Материалы XII Всерос. семинара. ИВМ СО РАН, ИПК СФУ, Красноярск (2009). С. 175.
[15] В.Н. Удодов. Моделирование неравновесных систем. Материалы XV Всерос. семинара. ИВМ СО РАН, ИПК СФУ, Красноярск (2012). С. 204.
[16] В.Ф. Гантмахер, В.Т. Долгополов. УФН. **180**, *1*, 3 (2010).
[17] С.М. Стишов. УФН **174**, 853 (2004).
[18] В.Н. Удодов. Фундаментальные проблемы современного материаловедения. **10**, *1*, 154 (2013).
[19] V. Udodov. E-print: http: //arXiv:1404.0585v1 [cond-mat.stat-mech].