http://pti-nt.ru
2019, №1

О ПОТЕНЦИАЛАХ ЛАНДАУ С СОКРАЩЕННЫМ ЧИСЛОМ ПАРАМЕТРОВ ПОРЯДКА

А.Ю. Гуфан[1, 2], К.Ю. Гуфан[2], Л.А. Кладенок[3], Е.Н. Климова[1, 4]

[1]Отдел теоретической физики Научно-исследовательский институт физики ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет» г. Ростов-на-Дону
[2]ФГАНУ НИИ Спецвузавтоматика, г. Ростов-на-Дону
[3]Академия строительства и архитектуры ФГБОУ ВО «Донской государственный технический университет Ростов-на-Дону.
[4]ФГБОУ ВО «Донской государственный технический университет Ростов-на-Дону.
E-mail: Alexander.gufan@gmail.com

CONCERNING THE LANDAU POTENTIAL WITH REDUCED NUMBER OF ORDER PARAMETERS

A.Yu. Gufan[1, 2], K.Yu. Gufan[2], L.A. Kladenok[3], E.N. Klimova[1, 4]

[1]Department of Theoretical Physics, Scientific Research Institute of Physics, Federal State Self-funded Educational Institution of Higher Education “Southern Federal University”, Rostov-on-Don
[2]Federal State Autonomous Scientific Institution Scientific Research Institute “Spetsvuzavtomatika”, Rostov-on-Don
[3]Academy of Construction and Architecture
[4]Federal State Budget-funded Educational Institution of Higher Education “ Don State Technical University”, Rostov-on-Don.

Потенциал Ландау или неравновесный потенциал был впервые введен в рассмотрение в работах [1-3], как избыточная свободная энергия, соответствующая отклонению (флуктуации) некоторых обобщенных координат, определяющих состояние кристалла вблизи точки фазового перехода. Таким образом, само существование потенциала Ландау, уже по определению, предполагает, что среди коллективных степеней свободы, точно описывающих мгновенное состояние кристалла, есть малое число таких, которые определяют состояние кристалла (вблизи условий фазового перехода) и тех (быстрых), которые успевают «подстроиться» под положение «медленно» флуктуирующих координат, определяющих состояние. Слово «медленно» подразумевает, что скорость изменения этих координат позволяет сформироваться добавке к термодинамической характеристике кристалла, его свободной энергии.

Показано, что если потенциал Ландау, принимаемый в различных моделях, имеет вид полинома аппроксимирующего (9), то очевидно, что коэффициенты аппроксимирующего полинома должны зависеть от температуры. Последнее далеко не очевидно из общего определения.

Landau potential or non-equilibrium potential was first introduced into consideration in works [1-3], as the excess free energy corresponding to the deviation (fluctuation) of some generalized coordinates that define the state of a crystal near the phase transition point. Thus the existence of Landau building itself implies by definition, that among the collective degrees of freedom describing precisely the instantaneous state of the crystal there is a small number of those which determine the state of the crystal (near the phase transition conditions) and those (fast), who manage to "adjust" for the position of "slow" fluctuating coordinates defining the condition. The word "slowly" means that the rate of these coordinates form change allows forming the addition to the thermodynamic characteristics of the crystal, its free energy.

It is shown that if the Landau potential accepted in the various models is given by an approximating polynomial (9), it is obvious that the approximating polynomial coefficients must depend on the temperature. The latter is far from being obvious from the general definition.

Неравновесный потенциал $\Phi(\vec{\eta}_1, \vec{\eta}_2 ...)$ в работах [1-3] предполагается полиномиальной функцией компонент одного (заранее заданного) параметра порядка (ПП). Такое предположение представляется естественным, поскольку свободная энергия определяется средним значением гамильтониана, описывающего состояние кристалла, а гамильтонианы во всех изучаемых моделях предполагаются полиномиальными функциями коллективных обобщенных координат моделируемой системы. Однако, уже в [2] при оценке коэффициентов потенциала Ландау указано на то, что полиномиальная зависимость $\Phi(\eta_{1,1}, \eta_{1,2} ... \eta_{2,1} ... \eta_{2,1,1} ...)$ это всего лишь аппроксимация более сложных (трансцендентных) неравновесных потенциалов, используемых в модельных теориях типа теории упорядочения Горского-Брегга-Вильямса [5], неравновесного потенциала теории самосогласованного поля Вейса [5] и т.п. Таким образом, если строго следовать [1-3], то потенциал Ландау имеет смысл только при малых величинах компонент ПП: $\vec{\eta}^2 = \sum \eta_i^2 << 1$. В таком подходе модельные теории, в том числе и основанные на приближении самосогласованного поля [5-6], представляются, как более адекватные природе фазовых переходов, чем приближение Ландау [6].

С другой стороны, хорошо известно, что потенциал Ландау позволяет описывать термодинамику реконструктивных фазовых переходов [7-9], при которых $\vec{\eta}^2$=1. В противоположность теории Ландау, модельные теории опираются на не реалистичные предположения о виде потенциалов взаимодействий [10] и, зачастую, внутренне противоречивы [10-11].

Такое положение заставило обратить внимание на более строгий вывод потенциала Ландау и привело к статистическому определению потенциала Ландау через недоинтегрированную статистическую сумму. Если равновесный потенциал Гельмгольца:

$$G = -kT \ln Z_G \equiv -(1/\beta) \ln \int \prod_1^N dq_i \exp[-E(\{q_i\})/\beta)] \qquad (1)$$

то потенциал Ландау определяется аналогично, но через недоинтегрированную статистическую сумму $Z_L(\eta)$:

$$\Phi = -(1/\beta) \ln \int \prod_k^N dq_i \exp[-E(q_1, ... q_{k-1}, q_k ... q_N)\beta] \qquad (2)$$

Подчеркнем, что формально правильная запись (2) скрывает многие особенности аналитической зависимости потенциалов Ландау от компонент параметра порядка $\{\eta_i\} \equiv \eta_1 ... \eta_k \equiv q_i ... q_{k-1}$, обусловленные интегрированием по быстрым координатам.

В докладе на простом примере проиллюстрирован механизм возникновения сложных (трансцендентных) зависимостей потенциалов Ландау от $\eta_1 ... \eta_{k-1}$ за счет взаимодействия $\{\eta_i\}$ с быстрыми координатами, по которым в (2) проводится интегрирование.

Следуя Ландау, предположим, что при фазовом переходе только ограниченное число степеней свободы “существенно” вовлечено в фазовый переход. От этих нескольких степеней свободы $\{q_r\} \equiv (q_1 ... q_r)$, где $r << N$ гамильтониан системы $E(q_1 ... q_N)$ зависит существенно не линейно. Например, в простейшем случае $E(q_1 ... q_N)$ может зависеть от третьих, четвертых и т.д. степеней обобщенных координат $(q_1 ... q_r)$. Ландау предположил, что зависимость $E(q_1 ... q_N)$ от остальных обобщенных координат квадратичная, типа той, которая, по определению, характерна для газов. Если принять это предположение Ландау, то вычисления статистической суммы можно разделить на две части и соответственно потенциал Гельмгольца F распадется на два слагаемых. Для простоты и определенности предположим, что E зависит не линейно только от одной обобщенной координаты q_1.Обозначим эту координату η и назовем параметром порядка Ландау: $q_1 = \eta$.

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln \int \prod_2^N dq_i' e^{-\beta \sum_i \chi_i q_i'^2} \int d\eta \, e^{-\beta E_n(\eta)} \qquad (3)$$

При записи (3) предположено, что с помощью ортонормированных преобразовании мы перешли от координат q_i к координатам q_i', в которых полином второй степени превратится в сумму квадратичных слагаемых. Поскольку $lnAB = lnA + lnB$, мы получаем:

$$F = -\frac{1}{2\beta}\ln(\prod_{i=2}^{N}\frac{\pi}{\beta\chi_i}) - \frac{1}{\beta}\ln\int d\eta e^{-\beta\Phi(\eta)} \tag{4}$$

Здесь $\Phi(\eta)$ - по определению (2) потенциал Ландау. В гамильтониане $E(q_1 \ldots q_N)$ могут присутствовать слагаемые следующего вида:

$$E \sim \alpha_1\eta^2 + \beta\eta^4 + cq^2 + d_1\eta q + d_2\eta^2 q + d_3\eta^3 q + d_4\eta^2 q^2 \tag{5}$$

Вообще говоря, если строго следовать рассуждениям Ландау, то в теории фазовых переходов с нарушением симметрии, в которых параметр порядка η преобразуется по не инвариантному представлению группы симметрии высокосимметричной фазы G_0, слагаемые гамильтониана E, вводимые феноменологическими параметрами d_1 и d_3 с одной стороны, и параметром d_2 с другой, не совместимы. Однако в (5) мы использовали формально записанный вид $E(q_1 \ldots q_N)$, чтобы прояснить важный для нас аспект задачи.

Проведем замену переменных:

$$q = y - \frac{d_1\eta - d_2\eta^2 - d_3\eta^3}{2(c + d_4\eta^2)} \tag{6}$$

Подставив выражение (6) в $E(\eta,q)$ (5), получим:

$$E \sim \alpha_1\eta^2 + \beta\eta^4 + y^2(c + d_4\eta^2) - \frac{1}{2}\frac{(d_1\eta + d_2\eta^2 + d_3\eta^3)^2}{c + d_4\eta^2} \tag{7}$$

Подстановка (7) в (3) позволяет увидеть многие особенности вычисления неравновесного потенциала Ландау. Даже в простейшем случае системы, зависящей всего от двух координат η и q, и относительно простой, (полиномиальной) зависимости (5) гамильтониана системы $E(\eta,q)$ от этих координат приводит к сложному виду $\Phi(\eta)$ определенному по (4).Действительно,

$$\begin{aligned} F &= -\frac{1}{\beta}\ln\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{-\beta E(\eta,q)} = \\ &= -\frac{1}{\beta}\ln\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-\beta E(\eta,y)} = \\ &-\frac{1}{\beta}\ln\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta\left\{\sqrt{\frac{\pi kT}{c + d_4\eta^2}}\cdot e^{-\beta[\alpha_1\eta^2 + \alpha_2\eta^4 - \frac{(d_1\eta + d_2\eta^2 + d_3\eta^4)^2}{2(c + d_4\eta^2)}]}\right\} \end{aligned} \tag{8}$$

и неравновесный потенциал Ландау принимает вид:

$$\Phi = \alpha_1\eta^2 + \alpha_2\eta^4 - \frac{(d_1\eta + d_2\eta^2 + d_3\eta^4)^2}{2(c + d_4\eta^2)} + \frac{1}{2\beta}\ln[\frac{c + d_4\eta^2}{kT}] \tag{9}$$

Таким образом, полиномиальный гамильтониан привел к сложной трансцендентной зависимости потенциала Ландау от компонент параметра порядка. Более того, если потенциал Ландау, принимаемый в различных моделях имеет вид полинома аппроксимирующего (9), то из (9) очевидно, что коэффициенты аппроксимирующего полинома должны зависеть от температуры. Последнее далеко не очевидно из общего определения (4).

Таким образом, оперируя со всеми обобщенными координатами $q_1 \ldots q_N$ мы получим, уравнение (4), где $\Phi(\eta)$ достаточно сложная функция координат.

Список использованных источников:

1. *Ландау Л.Д.* Собрание трудов. М.:Наука, 1969. С.97-102.
2. *Ландау Л.Д.* Собрание трудов. М.:Наука, 1969. С.123-128.
3. *Ландау Л.Д.* Собрание трудов. М.:Наука, 1969. С.234-253.
4. *Бэкстер Р.* Точнорешаемые модели в статистической механике. М.:Мир, 1985. 486с.
5. *Браут Р*. Фазовые переходы. М.:Мир, 1967. 288с.
6. *Вакс В.Г*. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. - М.:Наука, 1973. 230с.
7. *Гуфан Ю.М., Дмитриев В.П., Толедано П.* //ФТТ. 1988. Т.30.№ 4. С.1057.
8. *Гуфан Ю.М., Мощенко И.Н., Снежков В.И.* //ФТТ. 1993. Т.35. № 8. С.2086.
9. *Dmitriev V.P., Gufan Yu.M., Toledano P.* // Phys.Rev.B. 1991. V.44. №14. P.7248.
10. *Гуфан Ю.М*. Структурные фазовые переходы. М: Наука, 1982. 302 с.
11. *Смоленский Г.А.., Пасынков Р.Е.* // ЖЭТФ. 1953. Т. 25. №1. С.57.