ГОСУДАРСТВЕННЫЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

ИФВЭ 98–52
ОЛУ

Г.А. Шулаев

МОДЕЛЬ ГИНЗБУРГА – ЛАНДАУ

Протвино 1998

УДК 538.953 М–24

Аннотация

Шулаев Г.А. Модель Гинзбурга–Ландау: Препринт ИФВЭ 98–52. – Протвино, 1998. – 4 с., библиогр.: 4.

В работе представлены вычисления свободной энергии для гамильтониана Гинзбурга–Ландау. Показано, что путём введения комплексной температуры и разбиения объёма можно представить свободную энергию в виде обычной квадратуры.

Abstract

Shulaev G.A. Ginzburg–Landau Model: IHEP Preprint 98–52. – Protvino, 1998. – p. 4, refs.: 4.

This paper represents calculation of free energy for Ginzburg - Landau hamiltonian. It has been shown that by the complexification of temperature and divisision of volume it is posible to represent free energy as ordinary integral.

Проблема вычисления свободной энергии в статистической механике является одной из наиважнейших. Как правило, её вычисление связано с большими математическими трудностями, которые обусловлены очень большим числом переменных, описывающих систему. Поэтому лишь очень небольшое число задач поддаётся точному решению, а для остальных приходится искать различные приближённые методы. По определению, свободная энергия имеет вид [1]

$$F = -(T/V) log Z, \tag{1}$$

где Z — так называемая статистическая сумма, обычно представляющая собой многократный интеграл

$$Z = \int e^{-H/T} dq, \tag{2}$$

здесь $H(q)$ — гамильтониан как функция переменных q, характеризующих систему.

Вообще говоря, интеграл для Z обычно представляет собой многократный интеграл, который не может быть точно вычислен. Как будет видно из дальнейшего, для гамильтониана Гинзбурга–Ландау статистическая сумма Z может быть вычислена точно.

Основной задачей этой работы является вычисление свободной энергии системы с гамильтонианом

$$H/T = \int dv(\alpha\sigma^2 + \beta\sigma^4 + \gamma(\nabla\sigma)^2, \tag{3}$$

где

$$\sigma^2 = \sum_{i=1}^{n} (\sigma_i(x))^2, \tag{4}$$

$$\sigma^4 = (\sigma^2)^2, \tag{5}$$

$$(\nabla\sigma)^2 = \sum_{\alpha=1}^{d} \sum_{i=1}^{n} (\partial\sigma_i/\partial x_\alpha)^2, \tag{6}$$

n — число компонент спина; d — размерность пространства; $a = a'(T - T_c)$. Этот гамильтониан с некоторыми дополнительными членами был предложен для построения феноменологической теории сверхпроводимости (см. работу [2]). По существу, он представляет собой осцилляторный гамильтониан с дополнительным слагаемым, учитывающим ангармоничность осцилляторов. В присутствие магнитного поля к нему добавляется член линейный как по полю h, так и по переменным σ, которые выполняют роль спиновых переменных в теории ферромагнетиков. Такого рода гамильтонианы, возможно, не вполне отражают структуру макроскопических тел, но, являясь следующими по сложности после чисто осцилляторных (полностью решаемых), они представляют определённый интерес в различного рода исследованиях по статистической механике а также в квантовой теории поля.

Если бы не член $(\sigma)^4$, то гамильтониан был бы удобен для вычислений, поскольку он диагонализируется с помощью преобразования Фурье [3]

$$\sigma(x) = V^{-\frac{1}{2}} \sum_{k \leq K} \sigma(k) e^{ikx}. \tag{7}$$

Для вычислений удобнее использовать переменные $\sigma(k)$, чем переменные $\sigma(x)$. Таким образом, в новых переменных гамильтониан (без члена $(\sigma)^4$) имеет вид

$$H/T = \sum_{k \leq K} \sum_{i=1}^{n} (\alpha + \gamma k^2) |\ \sigma_i(k)\ |^2. \tag{8}$$

А для свободной энергии имеем

$$FV = (Tn/2) \sum_{k \leq K} log((\alpha + \gamma k^2)/\pi), \tag{9}$$

где F — свободная энергия на единицу объёма. Ввиду того, что образец достаточно большой, суммирование по κ можно заменить на интеграл по формуле

$$\sum_k \longrightarrow V(2\pi)^{-d} \int d^d k. \tag{10}$$

Тогда

$$F = (Tn/2)(2\pi)^{-d} \int_0^K log((\alpha + \gamma k^2)/\pi) d^d k. \tag{11}$$

Здесь K — максимальный модуль волновых векторов.

Теперь рассмотрим случай $\beta \neq 0$. Для этого нужно будет разбить весь объём образца на N (очень большое число) частей и посчитать для каждой части её свободную энергию. Но для этого нужно будет преобразовать член с $(\sigma)^4$. Итак, имеем

$$e^{-H/T} = e^{-\int (\alpha\sigma^2 + \gamma(\nabla)^2 + \beta(\sigma)^4) dv}. \tag{12}$$

Интеграл в показателе экспоненты можно переписать в виде

$$e^{-\sum_x (\alpha\sigma^2 + \gamma(\nabla)^2 + \beta(\sigma)^4)\delta}, \tag{13}$$

где положено $\delta = V/N$. Теперь используем формулу

$$e^{-x^2} = \pi^{-1/2} \int e^{-\psi^2 + 2i\psi x} d\psi. \tag{14}$$

Здесь и далее интегралы с неуказанными пределами берутся от $-\infty$ до ∞. Таким образом, получим

$$e^{-H/T} = \pi^{-N/2} \int e^{-\sum_x (\alpha\sigma^2 + \gamma(\nabla)^2)\delta - \psi_x^2 + 2i\psi_x \sqrt{\beta\delta}\sigma^2} \prod d\psi_x. \tag{15}$$

Делая элементарную замену, приводим интеграл по ψ_x к виду

$$(\pi\beta\delta)^{-1/2} \int e^{-\psi_x^2/\beta\delta + 2i\psi_x \sigma_x^2} d\psi_x. \tag{16}$$

Таким образом, имеем

$$e^{-H/T} = (\pi\delta\beta)^{-N/2} \int e^{-\psi^2\delta\beta - \sum_x \sigma^2 \delta 2i\psi_x/\delta - \sum_x (\alpha\sigma^2 - \gamma(\nabla\sigma)^2)\delta} \prod d\psi_x. \tag{17}$$

Но нетрудно заметить, что если проинтегрировать правую и левую части по переменным σ, то в результате справа получится

$$(\pi\delta\beta)^{-N/2} \left(\int e^{-\psi^2\delta\beta - \delta F_0(\alpha + 2i\psi/\delta)/T} d\psi \right)^N. \tag{18}$$

Здесь F_0 есть свободная энергия чисто осцилляторного потенциала как функция от α. Таким образом, для ангармонического потенциала вычисление свободной энергии сводится к вычислению определённого интеграла, в котором параметр α уже не вещественный, а имеет мнимую часть.

Нуждается в доказательстве тот факт, что

$$e^{-F_0/T} = \left(\int e^{-\sum_x (\alpha\sigma^2 - \gamma(\nabla\sigma)^2)\delta} \prod d\sigma_x \right)^N. \tag{19}$$

Доказательство этого факта весьма простое. Для этого разобъём объём на большое число одинаковых частей, каждая объёмом δ. Тогда экспонента от гамильтониана всей системы факторизуется и становится равной произведению экспонент от гамильтонианов маленьких объёмов δ. После этого нужно проинтегрировать по переменным σ, которые возле каждой точки x свои, и в итоге получится нужный результат. И, наконец, после очевидной замены переменной окончательно получаем

$$e^{-F\delta/T} = \sqrt{\delta/\beta} \int e^{-\psi^2\delta/\beta - \delta F_0(\alpha + 2i\psi)/T} d\psi. \tag{20}$$

Отсюда получаем свободную энергию:

$$F = (-T/\delta) log \sqrt{\delta/\beta\pi} \int e^{-\psi^2\delta/\beta - \delta F_0(\alpha + 2i\psi)/T} d\psi. \tag{21}$$

При $\beta = 0$, как нетрудно заметить, $F = F_0$. Теперь необходимо сказать несколько слов о том, как выбирается величина δ. Кажется естественным выбрать δ как можно меньше, но при конечном (хотя и очень большом) объёме необходимо учесть тот факт, что если в большом объёме у нас имеется N переменных интегрирования (гармоник), то делить его на число частей большее, чем N нельзя, так как в каждом маленьком объёме δ будет меньше чем одна переменная интегрирования. Отсюда легко определить величину δ. Она равна $(2\pi/K)^d$.

Перейдем к вопросу о вычислении свободной энергии в случае присутствия магнитного поля. Аналогичные вычисления показывают, что в случае, когда образец помещён в однородное магнитное поле, его свободная энергия равна

$$-(T/\delta)log\sqrt{\delta/\beta\pi}\int\frac{e^{-\psi^2\delta/\beta+\frac{h^2\delta}{4(\alpha+2i\psi)}-\delta F_0(\alpha+2i\psi)/T}}{(\alpha+2i\psi)^{\delta/2V}}d\psi. \tag{22}$$

Здесь F_0 — свободная энергия в отсутствие магнитного поля. Таким образом, в случае гамильтониана Гинзбурга–Ландау свободная энергия может быть вычислена точно, а вместе с нею и все остальные термодинамические характеристики. Единственным параметром системы является величина K, но она также является параметром и в классической модели. Этот метод вычисления может быть применён к модели квантовой теории поля. В этом случае размерность пространства равна не трём, а четырём. Но в данной работе этот вопрос рассматриваться не будет, как не имеющий непосредственного отношения к делу.

Заключение

В заключение нужно отметить, что все проделанные в данной работе вычисления по модели Гинзбурга–Ландау имеют, на мой взгляд, довольно “естественный” характер. Кроме того, примечательным кажется тот факт, что вычисления свободной энергии не ограничиваются случаем малых β, когда возможно разложение экспоненты в ряд (хотя и в этом случае такого рода вычисления не кажутся бесспорными). Также не предполагается малой величина α, пропорциональная $T - T_c$, и вообще, нет той громоздкой техники разложений, которая обычно присутствует в такого рода задачах. Задача в данной постановке решается однозначно и для всех значений присущих ей параметров.

Список литературы

[1] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. – М.: Наука, 1978.

[2] Гинзбург В.Л. Ландау Л.Д. // ЖЭТФ. 1950, 20, с.1064.

[3] Ма Ш. Современная теория критических явлений. – М.: Мир, 1980.

[4] Вильсон К., Когут Дж. Ренормализационная группа и ε–разложение. – М.: Мир, 1975.

Рукопись поступила 5 августа 1998 г.

Г.А. Шулаев.
Модель Гинзбурга–Ландау.

Оригинал-макет подготовлен с помощью системы LaTeX.
Редактор Н.В.Ежела. Технический редактор Н.В.Орлова.

Подписано к печати 7.08.98. Формат $60 \times 84/8$. Офсетная печать.
Печ.л. 0,5. Уч.-изд.л. 0,4. Тираж 120. Заказ 254. Индекс 3649.
ЛР №020498 17.04.97.

ГНЦ РФ Институт физики высоких энергий
142284, Протвино Московской обл.

Индекс 3649

П Р Е П Р И Н Т 98–52, И Ф В Э, 1998