

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ 1-ого и 2-ого РОДА.

Теория самосогласованного поля и теория фазовых переходов II-го рода Ландау. Параметр порядка. Микроскопическая теория магнитного фазового перехода в приближении самосогласованного поля. Уравнения Клапейрона–Клаузиуса и Эренфеста. Флуктуационная теория Орнштейна–Цернике вблизи критической точки. Вычисление флуктуационной теплоемкости в кольцевом приближении. Ограничения на применимость теории фазовых переходов Ландау.

Содержание.

- 8.1. Теория Гинзбурга–Ландау для сверхпроводников
- 8.2. Следствия из уравнений Гинзбурга–Ландау.
- 8.3. Модель Гейзенберга.
- 8.4. Фазовые переходы 1-ого рода.
- 8.5. Фазовые переходы второго рода.
- 8.6. Влияние внешнего поля на фазовый переход.
- 8.7. Флуктуации вблизи точки фазового перехода II рода.
- 8.8. Теория Орнштейна–Цернике.
- 8.9. Теория молекулярного поля Вейсса.
- 8.10. Задачи.

Дополнение . Флуктуации числа частиц в модели БКШ.

8.1. Теория Гинзбурга–Ландау для сверхпроводников.

Вблизи точки перехода из нормальной в сверхпроводящую фазу удается получить регулярное разложение по степеням плотности сверхпроводящих электронов (куперовских пар). Функционал, который требуется минимизировать, имеет следующий общий вид и выражается через произведения операторов импульса:

$$\Phi = \int d\vec{r} \left[\frac{\left(\left(-i\hbar\nabla - \frac{\tilde{q}}{c} \vec{A} \right) \Psi \right)^* \left(-i\hbar\nabla - \frac{\tilde{q}}{c} \vec{A} \right) \Psi}{2\tilde{m}} + \alpha(T - T_c) |\Psi|^2 + \frac{b}{2} |\Psi|^4 + \frac{(\text{rot } \vec{A})^2}{8\pi} \right], \quad (8.1)$$

где \tilde{m} - масса сверхпроводящего электрона, которая после создания микроскопической теории оказалась равной удвоенной массе электрона.

Л.П.Горьков доказал, что величина заряда $\tilde{q} = 2e$ и определил коэффициенты α и b (см. Seminar10):

$$\alpha = \frac{12\pi^2 m T_c}{7\zeta(3) p_F^2} \approx 7.04 \frac{T_c}{\varepsilon_F}, \quad b = \frac{\alpha T_c m}{\rho}. \quad (8.2)$$

Вариация этого функционала по векторному потенциалу \vec{A} определяет уравнения магнетостатики:

$$\begin{aligned}\delta_{\vec{A}} \Phi &= \int d\vec{r} \left[\frac{\frac{\tilde{q}}{c} \delta \vec{A} \Psi^* \left(i\hbar \nabla + \frac{\tilde{q}}{c} \vec{A} \right) \Psi + \left(-i\hbar \nabla + \frac{\tilde{q}}{c} \vec{A} \right) \Psi^* \frac{\tilde{q}}{c} \delta \vec{A} \Psi}{2\tilde{m}} + \frac{2(\text{rot } \vec{A}) \bullet \text{rot } \delta \vec{A}}{8\pi} \right] = \\ &= \int d\vec{r} \left[\frac{\Psi^* (i\hbar \nabla) \Psi - \Psi (i\hbar \nabla) \Psi^* + \frac{2\tilde{q}}{c} \vec{A} |\Psi|^2}{2\tilde{m}} \frac{\tilde{q}}{c} \delta \vec{A} + \frac{\text{rot}(\text{rot } \vec{A}) \bullet \delta \vec{A}}{4\pi} \right],\end{aligned}\quad (8.3)$$

из равенства

$$\delta_{\vec{A}} \Phi = 0$$

получим уравнения магнетостатики:

$$\text{rot rot } \vec{A} = \text{rot } \vec{h} = 4\pi \frac{q^*}{c} \frac{\Psi^* \left(-i\hbar \nabla - \frac{q^*}{c} \vec{A} \right) \Psi}{4m} + \text{к.с.} \quad (8.4)$$

Вариация этого функционала по волновой функции Ψ^* дает уравнение на Ψ и наоборот:

$$\frac{\left(-i\hbar \nabla - \frac{\tilde{q} \vec{A}}{c} \right)^2 \Psi}{2\tilde{m}} + \alpha(T - T_c) \Psi + b |\Psi|^2 \Psi = 0. \quad (8.5)$$

Уравнение (8.4) можно записать в более привычной форме – варьирование интеграла по \vec{A} приводит к уравнению Максвелла:

$$\text{rot } \vec{H} = \frac{4\pi}{c} \vec{j}, \quad (8.6)$$

причем плотность тока \vec{j} дается выражением:

$$\vec{j} = q^* \frac{\Psi^* \left(-i\hbar \nabla - \frac{q^*}{c} \vec{A} \right) \Psi}{4m} + \text{к.с.} = -\frac{ie\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - \frac{2e^2}{mc} \vec{A} |\Psi|^2. \quad (8.7)$$

8.2. Следствия из уравнений Гинзбурга -Ландау.

1). Если система однородная, т.е. нет зависимости от координат, из уравнения (8.5) следует, что

$$\begin{aligned}\alpha(T - T_c) &= -b |\Psi|^2, \text{ т.е.} \\ |\Psi|^2 &= -\frac{\alpha(T - T_c)}{b}.\end{aligned}$$

Волновая функция Ψ нормирована так, что $|\Psi|^2$ равен плотности куперовских пар, т.е.

$$|\Psi|^2 = n_s = \frac{\rho_s}{2m}. \quad \text{Поэтому} \quad \frac{\rho_s}{2m} = -\frac{\alpha(T - T_c)}{b}.$$

При $T = T_c$ имеем

$$\frac{\rho}{m} = \frac{\alpha T_c}{b}. \quad (8.8)$$

При этом свободная энергия запишется в виде

$$F = F_0 + V \left[\alpha(T - T_c) |\Psi|^2 + \frac{b}{2} |\Psi|^4 \right] = F_0 + V \left[-\frac{\alpha^2 (T - T_c)^2}{b} + \frac{\alpha^2 (T - T_c)^2}{2b} \right] =$$

$$= F_0 - V \frac{\alpha^2 (T - T_c)^2}{2b}$$

Разность $F - F_0$ равна разности свободных энергий нормальной и сверхпроводящей фазы. Поэтому

$$S_s - S_n = V \frac{\alpha^2 (T - T_c)}{b},$$

$$C_s - C_n = VT \frac{\alpha^2}{b}.$$

При $T = T_c$ имеем

$$\Delta C = C_s - C_n = VT_c \frac{\alpha^2}{b}. \quad (8.9)$$

Из уравнений (8.8) и (8.9) можно найти коэффициенты α и b :

$$\alpha = \frac{\Delta C}{VT_c} \frac{b}{\alpha}, \quad \frac{\rho}{m} = \frac{\alpha T_c}{b},$$

$$\alpha = \frac{\Delta C}{V} \frac{m}{\rho} = \frac{4m^2 p_F}{\hbar^3 \rho} \frac{T_c}{7\zeta(3)} = \frac{12T_c m \pi^2}{7\zeta(3) p_F^2},$$

$$b = \frac{\alpha T_c m}{\rho} = \frac{12T_c m \pi^2}{7\zeta(3) p_F^2} \frac{T_c m}{\rho} = \frac{36T_c^2 m \pi^4 \hbar^3}{7\zeta(3) p_F^5}.$$

2) В слабом магнитном поле можно пренебречь его влиянием на $|\Psi|^2$ и считать, что

$|\Psi|^2 = \frac{\rho_s}{2m}$, при этом уравнение (8.4) перепишется в виде:

$$\nabla^2 \bar{\mathbf{A}} = \frac{4\pi e^2 \rho_s}{m^2 c^2} \bar{\mathbf{A}}. \quad (8.10)$$

Решения уравнения (8.10) затухают на больших расстояниях как

$$\bar{\mathbf{A}} \sim \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right), \quad r_0 = \sqrt{\frac{m^2 c^2}{4\pi e^2 \rho_s}} = \sqrt{\frac{m c^2 b}{8\pi e^2 \alpha (T_c - T)}}$$

3) Квантование магнитного потока.

Замечание. Факт полного отсутствия сопротивления металла при $T < T_c$ проверяется следующим образом. Возьмем замкнутый кольцевой провод из материала, переходящего при низкой температуре в сверхпроводящее состояние, и поместим его в магнитное поле (см. рис. 8.1).

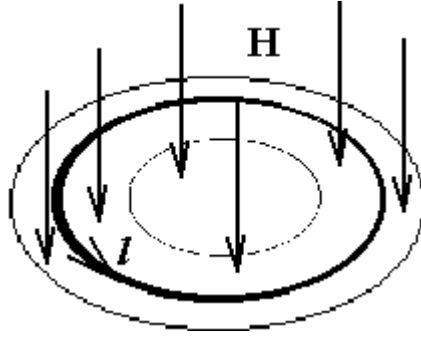


Рис.8.1.

Согласно уравнению Максвелла

$$\text{rot } \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}$$

для изменения магнитного потока через площадь кольца S имеем:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \int_S \vec{H} d\vec{S} = - \int_S c \text{rot } \vec{E} d\vec{S} = -c \oint_l \vec{E} d\vec{l},$$

причем интегрирование распространяется по замкнутому контуру, проходящему внутри проводника. При понижении температуры ниже T_c сопротивление металла исчезает и, следовательно, исчезает электрическое поле внутри сверхпроводника. Таким образом, получаем

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0.$$

Это значит, что теперь можно выключить магнитное поле или изогнуть кольцо – магнитный поток внутри кольца из сверхпроводника будет оставаться постоянным, поддерживаемым незатухающими кольцевыми токами, текущими по кольцу из сверхпроводника. Постоянство потока через кольцо неизменной формы можно контролировать, измеряя магнитное поле, создаваемое кольцевым сверхпроводником. Если магнитное поле не изменяется со временем, то ток в кольце действительно является незатухающим. Максимальное время проведения такого опыта свыше двух лет! За это время не было обнаружено сколь-нибудь заметного уменьшения магнитного поля.

Плотность тока в сверхпроводнике выражается следующей формулой:

$$\vec{j} = -\frac{ie\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - \frac{2e^2}{mc} \vec{A} |\Psi|^2.$$

В сверхпроводнике можно считать, что плотность сверхпроводящих электронов не меняется от точки к точке, меняется лишь фаза волновой функции, т.е.

$$\Psi = \sqrt{\frac{\rho_S}{2m}} e^{i\varphi(\vec{r})}.$$

Следовательно,

$$\vec{j} = \left[\frac{e\hbar}{m} \nabla \varphi - \frac{2e^2}{mc} \vec{A} \right] \frac{\rho_S}{2m},$$

поэтому интегрируя ток по кольцу в толще сверхпроводника, имеем

$$\begin{aligned}
0 &= \oint_l \mathbf{j} d\mathbf{l} = \frac{\rho_S}{2m} \oint_l \left[\frac{e\hbar}{m} \nabla \varphi - \frac{2e^2}{mc} \mathbf{A} \right] d\mathbf{l} = \frac{\rho_S}{2m} \frac{e\hbar}{m} \left[\Delta \varphi - \frac{2e}{\hbar c} \int_S \text{rot} \mathbf{A} d\mathbf{S} \right] = \\
&= \frac{\rho_S}{2m} \frac{e\hbar}{m} \left[\Delta \varphi - \frac{2e}{\hbar c} \int_S \mathbf{H} d\mathbf{S} \right] = \frac{\rho_S}{2m} \frac{e\hbar}{m} \left[\Delta \varphi - \frac{2e}{\hbar c} \Phi \right]
\end{aligned}$$

Изменение фазы волновой функции при обходе по контуру равно $2\pi n$, поэтому магнитный поток квантуется

$$\Phi = \frac{\pi n \hbar c}{e} = n \Phi_0,$$

где $\Phi_0 = \frac{\pi \hbar c}{e} = 2 \times 10^{-7} \text{ Гс} \cdot \text{см}^2$ -элементарный квант магнитного потока.

4) Размер куперовской пары.

Рассмотрим уравнение (8.5):

$$\frac{\left(-i\hbar \nabla - \frac{\tilde{q} \mathbf{A}}{c} \right)^2 \Psi}{2\tilde{m}} + \alpha(T - T_c) \Psi + b|\Psi|^2 \Psi = 0.$$

Пусть магнитное поле отсутствует, т.е. векторный потенциал \mathbf{A} равен нулю. В этом случае можно линеаризовать уравнение, если заменим $\Psi = \Psi_0 + \Psi_1$, где Ψ_0 - равновесная функция, $|\Psi_0|^2 = \frac{\rho_S}{2m} = -\frac{\alpha(T - T_c)}{b}$, Ψ_1 -малая добавка. Имеем:

$$-\frac{\hbar^2}{2\tilde{m}} \nabla^2 \Psi_1 + \alpha(T - T_c) \Psi_1 + 2b|\Psi_0|^2 \Psi_1 + b\Psi_1^* \Psi_0^2 = 0.$$

В отсутствии магнитного поля равновесная функция Ψ_0 действительная, Ψ_1 - также действительная. Поэтому имеем

$$\frac{\hbar^2}{2\tilde{m}} \nabla^2 \Psi_1 + 2\alpha(T - T_c) \Psi_1 = 0,$$

на больших расстояниях функция убывает как $\Psi_1 \sim \exp(-r/r_0)$, где

$$r_0 = \sqrt{\frac{\hbar^2}{4\alpha\tilde{m}(T - T_c)}}.$$

8.3. Модель Гейзенберга.

К уравнениям типа Гинзбурга-Ландау приводятся многие задачи, описывающие фазовые переходы в различного рода системах.

Рассмотрим пример.

Наложим на систему внешнее магнитное поле вдоль оси z и будем считать, что соседние спины взаимодействуют изотропными образом через обменное взаимодействие - $J(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= -\sum_{\mathbf{r}} \mathbf{H} \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}' (\mathbf{r} \neq \mathbf{r}')} J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}'} = -\sum_{\mathbf{r}} \mathbf{H} \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}} - \\
&- \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}' (\mathbf{r} \neq \mathbf{r}')} J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{s}_{\mathbf{r}}^z \hat{s}_{\mathbf{r}'}^z - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}' (\mathbf{r} \neq \mathbf{r}')} J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{s}_{\mathbf{r}}^+ \hat{s}_{\mathbf{r}'}^-
\end{aligned} \tag{8.11}$$

Здесь и ниже магнитное поле измеряется в энергетических переменных, используются поперечные переменные $\hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^{\pm} = \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^x \pm i\hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^y$, для которых в каждой ячейке выполняются известные перестановочные соотношения, а в разных ячейках все компоненты спин-овых операторов считаются независимыми, т.е. коммутируют.

Для нахождения среднего спина вдоль оси z $\langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle$ выделим продольную флуктуационную часть $\Delta \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z = \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z - \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle$, а затем пренебрежем произведениями флуктуаций (как продольных, так и поперечных):

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\sum_{\mathbf{r}} \mathbf{H} \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}' (\mathbf{r} \neq \mathbf{r}')} J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \left[2\Delta \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}'}^z \rangle - \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}'}^z \rangle \right] - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}' (\mathbf{r} \neq \mathbf{r}')} J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \left[\Delta \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \Delta \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}'}^z + \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^+ \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}'}^- \right] \approx -\sum_{\mathbf{r}} \mathbf{H} \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}} - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}' (\mathbf{r} \neq \mathbf{r}')} J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \left[2\Delta \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}'}^z \rangle - \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}'}^z \rangle \right] \end{aligned} \quad (8.12)$$

Иначе можно сказать, что приближение состоит в следующем. Гамильтониан заменяется на следующий:

$$\hat{H} = -\sum_{\mathbf{r}} \mathbf{H} \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}' (\mathbf{r} \neq \mathbf{r}')} J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}'}^z \rangle = -\sum_{\mathbf{r}} (\mathbf{H} + \tilde{\mathbf{H}}) \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}},$$

где поле $\tilde{\mathbf{H}}$ определяется условием:

$$\tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}' (\mathbf{r} \neq \mathbf{r}')} J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}'}^z \rangle. \quad (8.13)$$

В уравнении (8.13) среднее значение спина $\langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}'}^z \rangle$ слабо зависит от координат, взаимодействие же $J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ имеет конечный радиус действия. Поэтому можно разложить $\langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}'}^z \rangle$ около точки \mathbf{r} по степеням расстояния до этой точки.

Имеем

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}) = & \frac{1}{2} \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle \sum_{\mathbf{r}'} J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) + \frac{1}{2} \langle \nabla \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle \sum_{\mathbf{r}'} J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) (-\mathbf{r} + \mathbf{r}') + \\ & + \frac{1}{4} \sum_{i,j} \left\langle \frac{\partial^2 \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z}{\partial x_i \partial x_j} \right\rangle \sum_{\mathbf{r}'} J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) (-x_i + x'_i) (-x_j + x'_j) \end{aligned}$$

Вследствие изотропии взаимодействия

$$\frac{1}{2} \langle \nabla \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle \sum_{\mathbf{r}'} J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) (-\mathbf{r} + \mathbf{r}') = 0,$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{i,j} \left\langle \frac{\partial^2 \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z}{\partial x_i \partial x_j} \right\rangle \sum_{\mathbf{r}'} J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) (-x_i + x'_i) (-x_j + x'_j) = \\
& = \sum_{i,j} \delta_{ij} \left\langle \frac{\partial^2 \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z}{\partial x_i^2} \right\rangle \sum_{\mathbf{r}'} J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) (-x_i + x'_i) (-x_j + x'_j) = \frac{1}{3} \frac{\partial^2 \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle}{\partial \bar{\mathbf{r}}^2} \sum_{\mathbf{r}'} J(|\mathbf{r}'|) |\bar{\mathbf{r}}|^2 =, \\
& = \frac{U r_0^2}{3} \frac{\partial^2 \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle}{\partial \bar{\mathbf{r}}^2}
\end{aligned}$$

здесь U – характерное значение энергии взаимодействия, а r_0 – радиус взаимодействия. Таким образом, находим

$$\tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}) = \mathfrak{T} \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle + \frac{1}{4} \frac{U r_0^2}{3} \nabla^2 \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle. \quad (8.14)$$

Из условия самосогласования среднее значение спина $\langle S_z \rangle$, направленного вдоль магнитного поля, вычисляется через известную функцию Бриллюэна $B(y)$:

$$y = \frac{\bar{H}}{T} = \frac{H + \mathfrak{T} \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle + \frac{1}{4} \frac{U r_0^2}{3} \frac{\partial^2 \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle}{\partial \bar{\mathbf{r}}^2}}{T} = \frac{H + B(y) \mathfrak{T}}{T} + \frac{1}{4T} \frac{U r_0^2}{3} \frac{\partial^2 \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle}{\partial \bar{\mathbf{r}}^2}, \quad (8.15)$$

где

$$B(y) = \langle S_z \rangle = \frac{\text{Sp}(S_z e^{S_z y})}{\text{Sp}(e^{S_z y})} = \left(S + \frac{1}{2} \right) \text{cth} \left(S + \frac{1}{2} \right) y - \frac{1}{2} \text{cth} \frac{y}{2}.$$

При выключенном поле H и вблизи от точки перехода правая сторона (8.15) может

быть разложена по степеням безразмерного отношения $y = \frac{\mathfrak{T} \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle + \frac{1}{4} \frac{U r_0^2}{3} \frac{\partial^2 \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle}{\partial \bar{\mathbf{r}}^2}}{T}$:

$$\begin{aligned}
B(y) &= \left(S + \frac{1}{2} \right) \frac{\text{ch} \left(S + \frac{1}{2} \right) y}{\text{sh} \left(S + \frac{1}{2} \right) y} - \frac{1}{2} \frac{\text{ch} \frac{y}{2}}{\text{sh} \frac{y}{2}} \cong \left[\frac{1 + \frac{1}{2} \left(S + \frac{1}{2} \right)^2 y^2 + \frac{1}{24} \left(S + \frac{1}{2} \right)^4 y^4}{1 + \frac{1}{6} \left(S + \frac{1}{2} \right)^2 y^2 + \frac{1}{120} \left(S + \frac{1}{2} \right)^4 y^4} - \right. \\
&\quad \left. - \frac{1 + \frac{1}{8} y^2 + \frac{1}{24 \cdot 16} y^4}{1 + \frac{1}{24} y^2 + \frac{1}{120 \cdot 16} y^4} \right] \frac{1}{y} \cong \frac{1}{3} \left(S + \frac{1}{2} \right)^2 y - \frac{1}{45} \left(S + \frac{1}{2} \right)^4 y^3 - \frac{1}{12} y + \frac{1}{45 \cdot 16} y^3 = \\
&= \frac{S(S+1)}{3} y - \frac{S(S+1)(S^2 + S + 1/2)}{45} y^3 \cong \frac{S(S+1)}{3T} \mathfrak{T} \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle + \frac{S(S+1)}{12T} \frac{U r_0^2}{3} \frac{\partial^2 \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle}{\partial \bar{\mathbf{r}}^2} - \\
&\quad - \frac{S(S+1)(S^2 + S + 1/2)}{45} \left[\frac{\mathfrak{T} \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle}{T} \right]^3,
\end{aligned}$$

таким образом возникает уравнение типа Гинзбурга-Ландау:

$$\langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle \Im \left[1 - \frac{\Im S(S+1)}{3T} \right] - \frac{S(S+1)}{12T} \frac{\Im U_0 r_0^2}{3} \frac{\partial^2 \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle}{\partial \vec{\mathbf{r}}^2} + \frac{S(S+1)(S^2 + S + 1/2)}{45} \Im \left[\frac{\Im \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle}{T} \right]^3 = 0. \quad (8.16)$$

Сравнивая с (8.5), получим, что уравнение (8.16) отвечает условию минимума по параметру порядка $\Psi = \langle \hat{\mathbf{s}}_{\mathbf{r}}^z \rangle$ функционала

$$\Phi = \int d\vec{\mathbf{r}} \left[g \left[\frac{\partial \Psi}{\partial \vec{\mathbf{r}}} \right]^2 + \alpha (T - T_c) |\Psi|^2 + \frac{b}{2} |\Psi|^4 \right] \quad (8.17)$$

со следующими значениями параметров

$$g = \frac{T_c r_0^2}{12T} \cong \frac{r_0^2}{12}, \quad T_c = \frac{\Im S(S+1)}{3}, \quad \alpha = \frac{\Im}{T} \cong \frac{1}{S(S+1)}, \quad (8.18)$$

$$b = \frac{S(S+1)(S^2 + S + 1/2)}{45} \left[\frac{\Im}{T} \right]^4 \cong \frac{81(S^2 + S + 1/2)}{45[S(S+1)]^3} \left[\frac{T_c}{T} \right]^4 \cong \frac{9(S^2 + S + 1/2)}{5[S(S+1)]^3}.$$

8.4. Фазовые переходы 1-ого рода.

Равновесное состояние однородного тела определяется заданием каких-либо двух термодинамических величин, например, p и T . Однако нет никаких оснований утверждать, что при всякой заданной паре значений этих величин тепловому равновесию будет соответствовать именно однородное состояние тела. Может оказаться, что при тепловом равновесии тело разбивается на соприкасающиеся однородные части, находящиеся в различных состояниях.

Такие состояния вещества, которые могут существовать одновременно в равновесии с друг другом, соприкасаясь между собой, называются различными **фазами** вещества.

Условия равновесия фаз $T_1 = T_2$, $p_1 = p_2$, $\mu_1 = \mu_2$.

Получим формулу Клайперона-Клаузиуса.

Продифференцируем по температуре условие равенства химических потенциалов:

$$\mu_1(p, T) = \mu_2(p, T),$$

$$\frac{\partial \mu_1(p, T)}{\partial T} + \frac{dp}{dT} \frac{\partial \mu_1(p, T)}{\partial p} = \frac{\partial \mu_2(p, T)}{\partial T} + \frac{dp}{dT} \frac{\partial \mu_2(p, T)}{\partial p}.$$

Поскольку термодинамический потенциал $\Phi = E - TS + pV = \mu N$, $d\Phi = -SdT + Vdp + \mu dN = \mu dN + Nd\mu$, имеем

$$-SdT + Vdp = Nd\mu,$$

$$\frac{\partial \mu_1(p, T)}{\partial T} = -\frac{s_1}{N}, \quad \frac{\partial \mu_2(p, T)}{\partial T} = -\frac{s_2}{N}, \quad \frac{\partial \mu_1(p, T)}{\partial p} = \frac{V_1}{N}, \quad \frac{\partial \mu_2(p, T)}{\partial p} = \frac{V_2}{N},$$

следовательно,

$$\frac{dp}{dT} = \frac{s_1 - s_2}{V_1 - V_2},$$

или

$$\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta q}{\Delta V} \text{ -уравнение Клайперона-Клаузиуса.} \quad (8.19)$$

8.5. Фазовые переходы второго рода.

Количественная теория фазовых переходов второго рода исходит из рассмотрения термодинамических величин тела при заданных отклонениях от симметричного состояния

(т.е. при заданных значениях параметра порядка η . Непрерывность изменения состояния при фазовом переходе второго рода математически выражается в том, что вблизи от точки перехода параметр порядка η принимает сколь угодно малые значения. Рассматривая окрестность точки перехода, разложим термодинамический потенциал $\Phi(p, T, \eta)$ по степеням η :

$$\Phi(p, T, \eta) = \Phi_0 + \xi_1 \eta + A \eta^2 + \xi_2 \eta^3 + B \eta^4 + \dots \quad (8.20)$$

Будем считать, что имеется симметрия относительно замены знака параметра порядка. Такое свойство присуще, например, переходам, связанным с появлением или исчезновением магнитной структуры. Это обстоятельство связано с симметрией относительно изменения знака времени. Термодинамический потенциал тела при таком преобразовании не может измениться, а магнитный момент, играющий роль параметра порядка меняет знак. Ясно, что в этом случае в разложении (8.19) отсутствуют все нечетные степени η . Коэффициент $A(p, T)$ при члене второго порядка обращается в нуль в самой точке перехода. Действительно, в симметричной фазе минимуму термодинамического потенциала $\Phi(p, T, \eta)$ должно соответствовать значение $\eta = 0$, для этого, очевидно, необходимо, $A(p, T) > 0$. Напротив, в несимметричной фазе, минимуму термодинамического потенциала должны отвечать значения $\eta \neq 0$, что возможно, лишь при $A(p, T) < 0$ (см. рис.8.2).

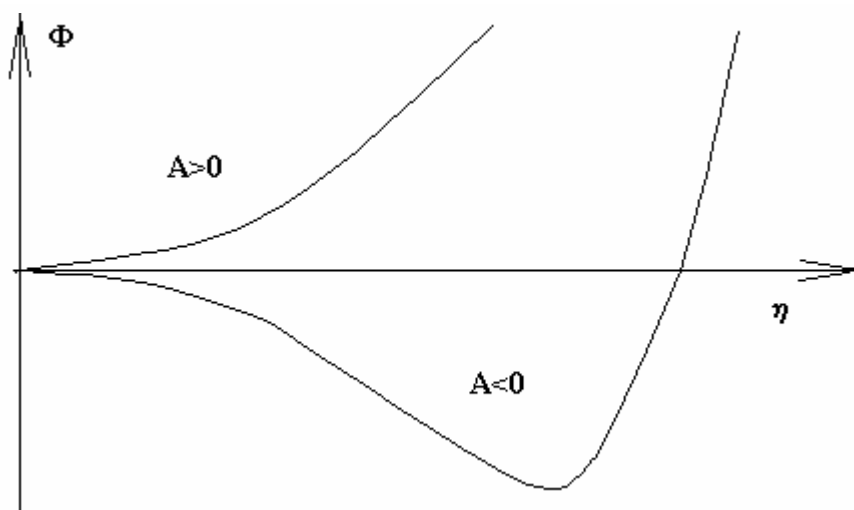


Рис.8.2

Для того чтобы точка перехода была устойчивой, т.е. чтобы и в ней термодинамический потенциал как функция параметра порядка имел минимум, необходимо, чтобы в этой точке член четвертого порядка был положителен. Таким образом, должно быть:

$$A(p, T_c) = 0, \quad B(p, T_c) > 0,$$

$$\Phi(p, T, \eta) = \Phi_0 + A(p, T) \eta^2 + B(p, T) \eta^4. \quad (8.21)$$

В излагаемой теории предполагается, что функция $A(p, T_c)$ не имеет особенностей в точке перехода, так что вблизи нее она разложима по целым степеням “расстояния” до точки перехода, т.е. будем считать, что

$$A(p, T_c) = a(p)(T - T_c), \quad (8.22)$$

где $T_c = T_c(p)$ - температура перехода. Коэффициент же $B(p, T_c)$ можно считать не зависящим от температуры, т.е. $B(p, T_c) = B(p)$.

Таким образом, разложение термодинамического потенциала принимает вид

$$\Phi(p, T, \eta) = \Phi_0 + a(p)(T - T_c)\eta^2 + B(p)\eta^4, \quad (8.23)$$

причем $B(p) > 0$, $a(p) > 0$ (будем считать для определенности, что симметричная фаза реализуется при температурах выше точки перехода).

Ниже точки перехода зависимость параметра порядка определяется из условия минимума термодинамического потенциала:

$$\frac{\partial \Phi(p, T, \eta)}{\partial \eta} = 0, \quad \eta^2 = \frac{a(p)(T_c - T)}{2B(p)}. \quad (8.24)$$

Для энтропии имеем

$$\begin{aligned} S &= - \left(\frac{\partial \Phi(p, T, \eta)}{\partial T} \right)_\eta - \left(\frac{\partial \Phi(p, T, \eta)}{\partial \eta} \right)_T \frac{d\eta}{dT} = - \left(\frac{\partial \Phi(p, T, \eta)}{\partial T} \right)_\eta = S_0 - a(p)\eta^2 = \\ &= S_0 + \frac{a^2(p)}{2B}(T - T_c) \\ C_p &= T \left(\frac{\partial S(p, T)}{\partial T} \right)_p = C_{p0} + \frac{a^2(p)T_c}{2B}. \end{aligned} \quad (8.25)$$

Для симметричной фазы

$$C_p = C_{p0}.$$

Таким образом, в точке фазового перехода второго рода теплоемкость испытывает скачок:

$$\Delta C_p = \frac{a^2(p)T_c}{2B}. \quad (8.26)$$

Наряду с C_p скачок испытывают в точке перехода и другие величины: C_V , коэффициент теплового расширения, сжимаемость и т.д. Не представляет труда выразить скачки всех этих величин через друг друга. Исходим из того, что вдоль перехода объем и энтропия непрерывны, т.е.

$$\Delta S = 0, \quad \Delta V = 0.$$

Дифференцируя эти равенства по температуре вдоль кривой перехода, т.е. считая давление функцией температуры, имеем:

$$\Delta \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p + \Delta \left(\frac{\partial S}{\partial p} \right)_T \frac{dp}{dT} = 0, \quad \Delta \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p + \Delta \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T \frac{dp}{dT} = 0.$$

Учитывая, что

$$\left(\frac{\partial S}{\partial p} \right)_T = - \frac{\partial \Phi}{\partial p \partial T} = - \frac{\partial \Phi}{\partial T \partial p} = - \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p,$$

получим

$$\begin{aligned} \Delta C_p - \Delta \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p \frac{dp}{dT} &= 0, \\ \Delta \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p &= \frac{\Delta C_p}{\frac{dp}{dT}}, \quad \Delta \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T = - \frac{\Delta C_p}{\left(\frac{dp}{dT} \right)^2}. \end{aligned} \quad (8.27)$$

Эти равенства, связывающие скачки в точке фазового перехода второго рода теплоемкости C_p , коэффициента теплового расширения и сжимаемости, называются соотношениями Эренфеста (W.Keesom, P.Ehrenfest, 1933).

Так как что вдоль перехода давление непрерывно, т.е. $\Delta p = 0$, дифференцируя равенства $\Delta S = 0$, $\Delta p = 0$ по температуре вдоль кривой перехода, т.е. считая объем функцией температуры, имеем:

$$\Delta \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V + \Delta \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_T \frac{dV}{dT} = 0, \quad \Delta \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V + \Delta \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T \frac{dV}{dT} = 0.$$

Учитывая, что

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_T = - \frac{\partial F}{\partial V \partial T} = - \frac{\partial F}{\partial T \partial V} = - \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V,$$

получим

$$\Delta C_V - \Delta \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \frac{dV}{dT} = 0, \quad \Delta \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V = \frac{\Delta C_V}{\frac{dV}{dT}}, \quad \Delta \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T = - \frac{\Delta C_V}{\left(\frac{dV}{dT} \right)^2}.$$

Таким образом, скачки теплоемкости и сжимаемости имеют одинаковый знак:

8.6. Влияние внешнего поля на фазовый переход.

Наложение внешнего поля приводит к появлению в гамильтониане дополнительного члена:

$$\hat{H}_h = -\hat{\eta} h V.$$

Если термодинамический потенциал определен как функция переменных p, T, η , то среднее (равновесное значение) η вычисляется по формуле:

$$V\bar{\eta} = - \frac{\partial \Phi}{\partial h} - \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial h} = - \frac{\partial \Phi}{\partial h}, \quad \text{т.е. } V\bar{\eta} = - \frac{\partial \Phi}{\partial h}.$$

Чтобы обеспечить выполнение этого соотношения в теории Ландау нужно добавить разложение термодинамического потенциала (8.22) член вида $-\eta h V$:

$$\Phi(p, T, \eta) = \Phi_0 + a(p)(T - T_c)\eta^2 + B(p)\eta^4. \quad (8.28)$$

8.7. Флуктуации вблизи точки фазового перехода II рода.

Можно заметить, что для малых значений параметра порядка, когда можно пренебречь нелинейным слагаемым, уравнение Гинзбурга-Ландау имеет вид произведения суммы оператора кинетической и потенциальной энергии на флуктуирующий параметр порядка. Такой же вид, но с другими коэффициентами, имеет уравнение (8.16). Таким образом, для рассмотрения флуктуаций параметра порядка, достаточно рассмотреть уравнение типа Шредингера с оператором кинетической энергии $-g\nabla^2$ и оператором потенциальной энергии $\alpha(T - T_c)$:

$$E\Psi = -g\nabla^2\Psi + \alpha(T - T_c)\Psi.$$

Энергию колебаний, E_q , которую находим из этого уравнения, называют энергией критических колебаний. В результате подстановки $\Psi = \exp(i\vec{q}\vec{r})$ получаем простой закон дисперсии:

$$E_q = gq^2 + \alpha(8.T - T_c).$$

Подставляя этот результат в выражение для свободной энергии длинноволновых колебаний, находим:

$$\Delta F = T \sum_{\vec{q}} \ln \left(1 - e^{-E_q/T} \right) \cong T \sum_{\vec{q}} \ln E_q / T. \quad (8.29)$$

С учетом того обстоятельства, что наибольший вклад дает область малых q^2 , когда $T \rightarrow T_c$, сингулярную часть энтропии находим с помощью дифференцирования температурно-зависящей части энергии критических колебаний. Таким же способом вычисляем сингулярную часть теплоемкости:

$$S_{\sin g} = \alpha T \sum_{\vec{q}} \frac{1}{E_q} ; C_{\sin g} = \alpha^2 T^2 \sum_{\vec{q}} \frac{1}{E_q^2}. \quad (8.30)$$

После перехода к интегрированию в сферической системе координат дело сводится к вычислению простого интеграла:

$$\begin{aligned} C_{\sin g} &= \frac{4\pi\alpha^2 T^2 V}{8\pi^3} \int_0^\infty q^2 dq \frac{1}{(gq^2 + \alpha(T - T_c))^2} = \frac{\alpha^2 T^2 V}{4\pi^2 g} \int_0^\infty dq \frac{1}{(gq^2 + \alpha(T - T_c))} = \\ &= \frac{\alpha^2 T^2 V}{8\pi^2 g} \int_{-\infty}^\infty dq \frac{1}{(gq^2 + \alpha(T - T_c))} = \frac{\alpha^2 T^2 V}{8\pi g} \frac{1}{\sqrt{\alpha g(T - T_c)}} \end{aligned} \quad (8.31)$$

Этот результат необходимо сравнить со скачком теплоемкости в теории Ландау

$\Delta C_1 = VT_c \alpha^2 / 2b$. В результате получаем условие применимости метода самосогласованного поля:

$$\alpha T_c \gg \alpha(T - T_c) \gg \frac{T_c^2 b^2}{16\pi^2 g^3}. \quad (8.32)$$

Для сверхпроводника это условие дает весьма широкую область применимости, в основном по причине малости коэффициента b .

$$1 \gg \frac{T - T_c}{T_c} \gg \frac{(2mT_c)^4}{p_F^8}. \quad (8.33)$$

Однако в случае гейзенберговского ферромагнетика условие применимости существенно зависит от величины R_0^3 , обезразмеренной на объем элементарной ячейки v_0 :

$$1 \gg \frac{T - T_c}{T_c} \gg \frac{(v_0)^2}{R_0^6}. \quad (8.34)$$

Таким образом, если радиус действия потенциала совпадает с размером элементарной ячейки, тогда область применимости метода самосогласованного поля отсутствует, а вместо скачка теплоемкости наблюдается сингулярный рост.

8.8. Теория Орнштейна-Цернике.

Флуктуационная часть Ω -потенциала представляется в виде разложения по степеням действительного, скалярного параметра порядка $\eta(\vec{r})$:

$$\Omega = \int dV \left[\frac{1}{2} \alpha (T - T_c) \eta^2 + \frac{1}{4} b \eta^4 + \frac{1}{2} g (\nabla \eta)^2 \right]. \quad (8.35)$$

Коэффициенты α , b являются положительными функциями температуры, вычисленными при $T=T_c$, а отношение $\frac{g}{\alpha T_c} = R_0^2$ имеет размерность квадрата длины, пропорциональной радиусу действия потенциала R_0 , приводящего к возникновению параметра порядка. Вариация функционала (8.35) приводит к уравнению:

$$-g\nabla^2\eta + \alpha(T - T_c)\eta + b\eta^3 = 0 \quad (8.36)$$

8.9. Теория молекулярного поля Вейсса.

Коэффициенты α , b нетрудно вычислить по теории самосогласованного поля. Так в теории гейзенберговского магнетизма молекулярное поле $\bar{H} = H + \langle S_z \rangle V_0$, где

$V_0 = \sum_{\vec{r}} J(\vec{r})$, - нулевая компонента Фурье от обратной по знаку величины обменного взаимодействия $-J(\vec{r})$, H - величина внешнего магнитного поля, среднее значение спина $\langle S_z \rangle$, направленного вдоль магнитного поля, вычисляется через известную функцию Бриллюэна $B(y)$:

$$y = \frac{\bar{H}}{T} = \frac{H + \langle S_z \rangle V_0}{T} = \frac{H + B(y)V_0}{T}, \quad (8.37)$$

где

$$B(y) = \langle S_z \rangle = \frac{\text{Sp}(S_z e^{S_z y})}{\text{Sp}(e^{S_z y})} = \left(S + \frac{1}{2}\right) \text{cth}\left(S + \frac{1}{2}\right)y - \frac{1}{2} \text{cth} \frac{y}{2}.$$

При выключенном поле H и вблизи от точки перехода правая сторона (8.37) может быть разложена по степеням безразмерного отношения $y = \langle S_z \rangle V_0 / T$, так что в конечном случае возникает разложение :

$$\begin{aligned} B(y) &= \left(S + \frac{1}{2}\right) \frac{\text{ch}\left(S + \frac{1}{2}\right)y}{\text{sh}\left(S + \frac{1}{2}\right)y} - \frac{1}{2} \frac{\text{ch} \frac{y}{2}}{\text{sh} \frac{y}{2}} \cong \\ &\cong \left[\frac{1 + \frac{1}{2}\left(S + \frac{1}{2}\right)^2 y^2 + \frac{1}{24}\left(S + \frac{1}{2}\right)^4 y^4}{1 + \frac{1}{6}\left(S + \frac{1}{2}\right)^2 y^2 + \frac{1}{120}\left(S + \frac{1}{2}\right)^4 y^4} - \frac{1 + \frac{1}{8}y^2 + \frac{1}{24 \cdot 16}y^4}{1 + \frac{1}{24}y^2 + \frac{1}{120 \cdot 16}y^4} \right] \frac{1}{y} \cong \\ &\cong \frac{1}{3}\left(S + \frac{1}{2}\right)^2 y - \frac{1}{45}\left(S + \frac{1}{2}\right)^4 y^3 - \frac{1}{12}y + \frac{1}{45 \cdot 16}y^3 = \frac{S(S+1)}{3}y - \\ &- \frac{S(S+1)(S^2 + S + 1/2)}{180}y^3 = \frac{S(S+1)}{3} \frac{\langle S_z \rangle V_0}{T} - \frac{S(S+1)(S^2 + S + 1/2)}{45} \left(\frac{\langle S_z \rangle V_0}{T}\right)^3 \end{aligned}$$

таким образом

$$V_0 \langle S_z \rangle = V_0 \frac{S(S+1)}{3} \frac{\langle S_z \rangle V_0}{T} - V_0 \frac{S(S+1)(S^2 + S + 1/2)}{45} \left(\frac{\langle S_z \rangle V_0}{T}\right)^3.$$

Разлагая коэффициенты вблизи точки перехода при $T = T_c = V_0 S(1+S)/3$, находим коэффициенты:

$$g = \alpha V_0 R_0^2; \quad \alpha = \frac{V_0}{T_c}; \quad b = V_0^4 \frac{S(S+1)(S^2 + S + 1/2)}{45 T_c^3}$$

8.10. Корреляционные поправки в модели Изинга

Вычислим поправки к теории молекулярного поля, возникающие вблизи точки фазового перехода. Заметим, что отброшенная часть гамильтониана имеет вид:

$$V = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \left[\Delta \hat{S}_{\mathbf{r}}^z \Delta \hat{S}_{\mathbf{r}'}^z + \hat{S}_{\mathbf{r}}^+ \Delta \hat{S}_{\mathbf{r}'}^- \right] \quad (8.38)$$

Для простоты изучим так называемую модель Изинга, когда обменный интеграл сильно анизотропен, так что вторая сумма равна нулю. Умножим гамильтониан взаимодействия V на постоянный множитель λ , который в дальнейшем положим равным единице.

Используя известное соотношение $\frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} = \left\langle \frac{\partial V}{\partial \lambda} \right\rangle$, получим

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Delta \hat{S}_{\mathbf{r}}^z \Delta \hat{S}_{\mathbf{r}'}^z = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} D(\mathbf{k}) J(\mathbf{k}). \quad (8.39)$$

Вычислим коррелятор

$$D(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}'} \left\langle \Delta \hat{S}_{\mathbf{r}}^z \Delta \hat{S}_{\mathbf{r}'}^z \right\rangle$$

в предположении о дальнедействующем характере потенциала обменного взаимодействия $J(\mathbf{r})$ - так называемое кольцевое приближение. При этом мы суммируем цепочку диаграмм, изображенную на рис.8.3.

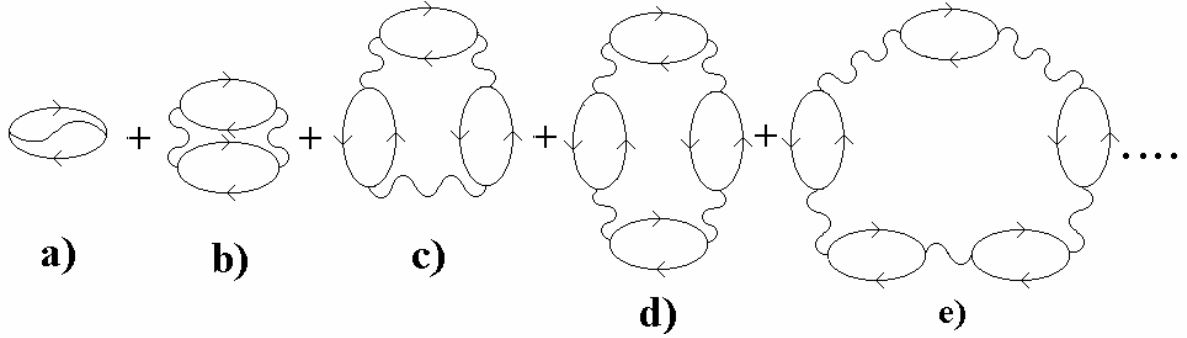


Рис. 8.3.

Графическое изображение кольцевого суммирования.

Производя разложение статистического оператора по степеням обратной температуры, в данном случае получим:

$$\exp \frac{\lambda}{2T} \left(\sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Delta \hat{S}_{\mathbf{r}}^z \Delta \hat{S}_{\mathbf{r}'}^z \right) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Delta \hat{S}_{\mathbf{r}}^z \Delta \hat{S}_{\mathbf{r}'}^z \right)^k. \quad (8.40)$$

Для нахождения искомого коррелятора каждое слагаемое умножаем на произведение $\Delta \hat{S}_{\mathbf{r}}^z \Delta \hat{S}_{\mathbf{r}'}^z$, а затем усредняем по состояниям с невзаимодействующих спинов находящихся в заданном молекулярном поле \bar{H} :

$$\left\langle \hat{B} \exp \frac{\bar{H} \sum \hat{S}_{\mathbf{r}}^z}{T} \right\rangle_0 = \frac{Sp \left[\hat{B} \exp \frac{\bar{H} \sum \hat{S}_{\mathbf{r}}^z}{T} \right]}{Sp \left[\exp \frac{\bar{H} \sum \hat{S}_{\mathbf{r}}^z}{T} \right]}. \quad (8.41)$$

В нулевом приближении коррелятор отличен от нуля только для одинаковых ячеек:

$$D^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \Delta \hat{S}_{\mathbf{r}}^z \Delta \hat{S}_{\mathbf{r}'}^z \rangle_0 = \delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \langle (\Delta \hat{S}_{\mathbf{r}}^z)^2 \rangle_0. \quad (8.42)$$

Среднеквадратичная флуктуация спина, входящая в правую сторону (8.42), без труда вычисляется через производную от среднего спина $S_z(\bar{H})$ по величине молекулярного поля. Соответственно этому в компонентах Фурье вместо (8.42):

$$D^0 = b'(\bar{H}/T), \bar{H} = H + \langle \hat{S}^z \rangle \sum_{\mathbf{r}} J(\mathbf{r}), \quad (8.43)$$

где $b(y)$ - известная функция Бриллюэна:

$$b(y) = (S + 1/2) \text{cth}(S + 1/2)y - 1/2 \text{cth } y/2. \quad (8.44)$$

В следующих приближениях по параметру λ/T будем учитывать только кольцевые диаграммы, т.е. в каждом k -порядке просуммируем $k! 2^k$ топологически эквивалентных диаграмм, когда последовательно включается суммирование по координатам всех ячеек.

$$\sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_k} \frac{\lambda}{T} D^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \frac{\lambda}{T} D^0(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \dots \frac{\lambda}{T} D^0(\mathbf{r}_{k-1} - \mathbf{r}_k) \frac{\lambda}{T} D^0(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}). \quad (8.45)$$

В аналитической форме после перехода к импульсному представлению получим

$$D(\mathbf{k}) = D^0 + \frac{\lambda}{T} D^0 J(\mathbf{k}) D(\mathbf{k}) = \frac{D^0}{1 - \frac{\lambda}{T} D^0 J(\mathbf{k})} \quad (8.46)$$

После подстановки решения (8.46) в дифференциальное соотношение (8.39) и интегрирования по параметру λ от нуля до единицы, находим флуктуационную поправку:

$$\Delta \Omega = -\frac{T}{2} \sum_{\mathbf{k}} \ln \frac{D(\mathbf{k})}{D^0}. \quad (8.47)$$

Разложим D^0 по степеням молекулярного поля.

$$D^0(y) \approx \frac{S(S+1)}{3} - \frac{S(S+1)(S^2 + S + 1/2)}{5} y^2. \quad (8.48)$$

Далее используем уравнение самосогласования вблизи температуры перехода $T_c = J(0)S(S+1)/3$:

$$y = \frac{H}{T} + \frac{J(0)}{T} b(y) \approx \frac{H}{T} + \frac{J(0)}{T} \left[y \frac{S(S+1)}{3} - y^3 \frac{S(S+1)(S^2 + S + 1/2)}{15} \right] \quad (8.49)$$

и разложим результат по степеням $\tau = \frac{T - T_c}{T_c}$ и k^2 . В результате при $H=0$ и $\lambda=1$ вместо (8.49) можно написать

$$[D(k)]^{-1} = \frac{J(0)}{T_c} \begin{cases} \tau + k^2 R^2 / 6, & \tau > 0 \\ 2|\tau| + k^2 R^2 / 6, & \tau < 0 \end{cases}. \quad (8.50)$$

Здесь $R^2 = -6 \frac{J'(0)}{J(0)}$ - среднеквадратичный радиус корреляции

$$R^2 = \frac{\sum_{\mathbf{r}} r^2 J(\mathbf{r})}{\sum_{\mathbf{r}} J(\mathbf{r})}. \quad (8.51)$$

Подставляя (8.50) в (8.49), а затем в общее выражение для поправки кольцевого приближения (8.47), получим :

$$\Delta\Omega = \frac{T}{2} \sum_k \ln \left\{ \begin{array}{ll} \tau + k^2 R^2 / 6, & \tau > 0 \\ 2|\tau| + k^2 R^2 / 6, & \tau < 0 \end{array} \right\} + const. \quad (8.52)$$

Записанная в таком виде флуктуационная поправка имеет вид длинноволновой колебательной части Ω - потенциала, а также для фотонного газа в приближении Рэлея-Джинса $\hbar\omega \ll T$:

$$\Omega = 2T \sum_{\mathbf{k}} \ln[1 - \exp(-\hbar c k / T)] \approx 2VT \sum_{\mathbf{k}} \ln(\hbar c k / T). \quad (8.52a)$$

В этом смысле полученные колебания точно соответствуют теории Орнштейн-Цернике, применимой для флуктуаций вблизи критической точки. Полученные формулы обобщают теорию критических колебаний с энергией $E_{\mathbf{q}} \approx T_c (s|\tau| + R^2 q^2)$ для ферромагнитных соединений как выше, так и ниже точки перехода при нулевом внешнем магнитном поле (точнее при $H \ll \tau T_c$).

С учетом того обстоятельства, что наибольший вклад дает область малых q^2 , когда $T \rightarrow T_c$, сингулярную часть энтропии находим с помощью дифференцирования температурно-зависящей части энергии критических колебаний. Таким же способом вычисляем сингулярную часть теплоемкости:

$$\Delta S_{\sin g} = -\frac{T}{2} s \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{E_{\mathbf{q}}} ; \quad \Delta C_{\sin g} = \frac{T^2}{2} s^2 \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{E_{\mathbf{q}}^2}. \quad (8.53)$$

Здесь и ниже введено обозначение:

$$E_{\mathbf{q}} = T_c (s|\tau| + q^2 R^2 / 6), \quad s = \begin{cases} 1, & \tau > 0 \\ 2, & \tau < 0 \end{cases}. \quad (8.54)$$

После перехода к интегрированию в сферической системе координат дело сводится к вычислению простого интеграла:

$$\Delta C_{\sin g} = \frac{VT^2 s^2}{4\pi^2} \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{[gq^2 + s|T - T_c|]^2} = V \frac{T^2 s^2}{16\pi g^{3/2} \sqrt{s|T - T_c|}}, \quad (8.55)$$

где $g = T_c R^2$.

Этот результат необходимо сравнить со скачком теплоемкости в теории Ландау

$\Delta C_L = V \frac{T_c s^2}{2b}$. В результате получаем условие применимости метода самосогласованного поля:

$$sT_c \gg s|T - T_c| \gg \frac{T_c^2 b^2}{32\pi^2 g^3}. \quad (8.56)$$

Дифференцируя дважды по параметру τ , получаем аномальную часть теплоемкости (на одну ячейку при $\tau > 0$)

$$\Delta C_V = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(s\tau + \frac{k^2 R^2}{6} \right)^{-2}. \quad (8.57)$$

Условие применимости метода молекулярного поля есть малость поправки (8.57) по сравнению с величиной скачка теплоемкости в теории Ландау. Легко проверить, что скачок теплоемкости порядка единицы и не зависит от радиуса корреляции. В результате простых вычислений для числа измерений $d < 4$ получаем следующее условие:

$$|\tau|^{2-d/2} \gg R^4. \quad (8.58)$$

При $d=4$ область применимости значительно шире $\ln \frac{R}{|\tau|} \ll R^4$.

Мы видим, что с ростом радиуса корреляции R , а также с ростом числа измерений область применимости метода самосогласованного поля возрастает. С другой стороны, теория Ландау справедлива в достаточной близости к точке перехода $|\tau| \ll 1$. По этой причине при $R=1$ (приближение ближайших соседей) теория Ландау вообще несправедлива. Аналогичная ситуация имеет место в одномерном случае.

8.11. Задачи.

1. Найти флуктуационную поправку к теплоемкости в области применимости теории фазовых переходов Ландау.

Решение.

В отсутствии поля при $T \rightarrow T_c + 0$ (симметричная фаза) имеем

$$\Omega = \Omega_0 - T_c \sum_{k < k_0} \ln \frac{\pi T_c}{\alpha(T - T_c) + gk^2}.$$

Двукратное дифференцирование дает поправку к теплоемкости

$$\begin{aligned} \Delta C &= \frac{T_c^2 V \alpha^2}{4\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{[\alpha(T - T_c) + gk^2]^2} = \frac{T_c^2 V \alpha^2}{8g\pi^2} \int_0^\infty \frac{dk}{[\alpha(T - T_c) + gk^2]} = \frac{T_c^2 V \alpha^2}{16g\pi^2} \int_{-\infty}^\infty \frac{dk}{[\alpha(T - T_c) + gk^2]} = \\ &= \frac{T_c^2 V \alpha^{3/2}}{16g^{3/2} \pi \sqrt{T - T_c}} \end{aligned}$$

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

Решение.

Плотность термодинамического потенциала во внешнем поле имеет вид:

$$\Omega = \Omega_0 + \alpha(T - T_c)\eta^2 + b\eta^4 + g \left(\frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{r}} \right)^2 - \eta h.$$

Равновесное значение η определяется условием:

$$\alpha(T - T_c)\bar{\eta} + 4b\bar{\eta}^3 = h.$$

При $T = T_c$ имеем

$$\bar{\eta} = \sqrt[3]{\frac{h}{4b}}.$$

Вблизи равновесия для термодинамического потенциала получим

$$\Omega = \Omega_0 + 6b\bar{\eta}^2 (\Delta\eta)^2 + g \left(\frac{\partial \Delta\eta}{\partial \vec{r}} \right)^2.$$

Поэтому для корреляционного радиуса получим

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

3. Найти флуктуационную поправку к теплоемкости вблизи точки фазового перехода II – рода:

а) в теории Гинзбурга –Ландау – для модели БКШ;

б) для модели Гейзенберга с обменным взаимодействием $J(r)$ конечного радиуса действия R .

Решение.

Решение задачи основывается на ранее полученной формуле для флуктуационной поправки к теплоемкости

$$\Delta C = \frac{T_c^2 V \alpha^{3/2}}{16 g^{3/2} \pi \sqrt{T - T_c}}.$$

Следует только правильно выразить в каждом случае величины α и g через параметры модели.

а) В теории Гинзбурга –Ландау – для модели БКШ

$$g = \frac{\hbar^2}{4m}, \quad \alpha = \frac{12 T_c m \pi^2}{7 \zeta(3) p_F^2}.$$

б) Для модели Гейзенберга с обменным взаимодействием $J(r)$ конечного радиуса действия R :

$$g = \frac{T_c r_0^2}{12T} \cong \frac{r_0^2}{12}, \quad T_c = \frac{\Im S(S+1)}{3}, \quad \alpha = \frac{\Im}{T} \cong \frac{1}{S(S+1)}.$$

ДОПОЛНЕНИЕ

ФЛУКТУАЦИИ ЧИСЛА ЧАСТИЦ В МОДЕЛИ БКШ

А. Функция распределения.

Рассмотрим оператор числа частиц во вторичном квантовании.

$$N = \sum_{\vec{p}, \sigma} \hat{a}_{\vec{p}\sigma}^+ \hat{a}_{\vec{p}\sigma}.$$

После перехода к операторам рождения $\hat{\alpha}_{\vec{p}\sigma}^+$ и уничтожения $\hat{\alpha}_{\vec{p}\sigma}$ квазичастиц с импульсом \vec{p} и проекцией спина σ :

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\vec{p}\uparrow} &= u_p \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow} + v_p \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow}^+, \quad \hat{a}_{-\vec{p}\downarrow}^+ = u_p^* \hat{\alpha}_{\vec{p}\downarrow}^+ - v_p^* \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow} \\ \hat{a}_{-\vec{p}\downarrow} &= u_p \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow} - v_p \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow}^+, \quad \hat{a}_{\vec{p}\uparrow}^+ = u_p^* \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow}^+ + v_p^* \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow} \end{aligned}$$

произведем усреднение по состоянию невзаимодействующих квазичастиц согласно общему соотношению:

$$\left\langle \hat{\alpha}_{\vec{p}\sigma}^+ \hat{\alpha}_{\vec{p}\sigma} \right\rangle = n_F(\varepsilon), \quad \left\langle \hat{\alpha}_{\vec{p}\sigma} \hat{\alpha}_{\vec{p}\sigma}^+ \right\rangle = 1 - n_F(\varepsilon).$$

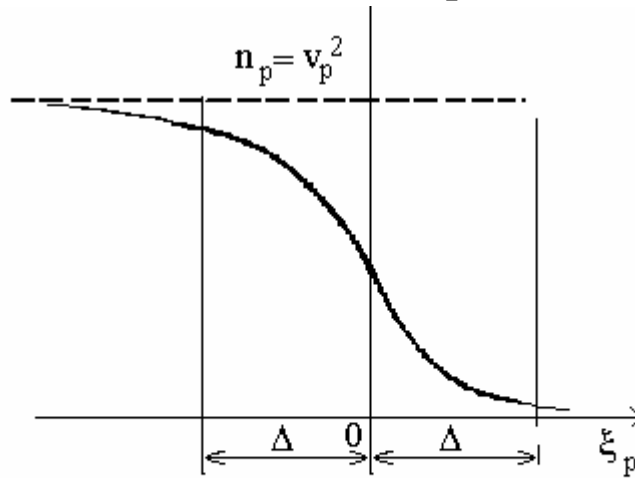
Здесь и ниже $n_F(\varepsilon)$ - распределения Ферми с нулевым химпотенциалом;
 $E_p = \sqrt{\Delta^2 + \xi_p^2}$ -энергия возбуждений.

После подстановки и усреднения получим:

$$\langle N \rangle = \sum_{\vec{p}, \sigma} u_p^2 n_F(\varepsilon_p) + v_p^2 [1 - n_F(\varepsilon_p)] = 2 \sum_{\vec{p}} \{ u_p^2 n_p + v_p^2 [1 - n_p] \}. \quad (d.1)$$

В пределе $T \rightarrow 0$ правая сторона отлична от нуля:

$$\langle N \rangle_{T=0} = 2 \sum_{\vec{p}} v_p^2 = \sum_{\vec{p}, \sigma} \left[1 - \frac{\xi_p}{\sqrt{|\Delta|^2 + \xi_p^2}} \right]. \quad (d.2)$$



Функция распределения частиц
при $T = 0$.

Рис.8.1D

В. Флуктуации числа частиц в модели БКШ.

Вычисления флуктуации числа частиц произведем по аналогичной схеме.

Сначала выразим оператор флуктуации частиц

$$\hat{\Phi} = \langle N^2 \rangle - \bar{N}^2 = \left\langle \sum_{\vec{p}, \sigma} \hat{a}_{\vec{p}\sigma}^+ \hat{a}_{\vec{p}\sigma} \sum_{\vec{p}', \sigma'} \hat{a}_{\vec{p}'\sigma'}^+ \hat{a}_{\vec{p}'\sigma'} \right\rangle - \left\langle \sum_{\vec{p}, \sigma} \hat{a}_{\vec{p}\sigma}^+ \hat{a}_{\vec{p}\sigma} \right\rangle^2$$

через операторы рождения и уничтожения квазичастиц с помощью соотношений.

Имеем:

$$\begin{aligned}
\hat{\Phi} &= \left\langle \sum_{\vec{p}, \sigma} \hat{a}_{\vec{p}\sigma}^+ \hat{a}_{\vec{p}\sigma} \sum_{\vec{p}', \sigma'} \hat{a}_{\vec{p}'\sigma'}^+ \hat{a}_{\vec{p}'\sigma'} \right\rangle - \left\langle \sum_{\vec{p}, \sigma} \hat{a}_{\vec{p}\sigma}^+ \hat{a}_{\vec{p}\sigma} \right\rangle^2 = \left\langle \sum_{\vec{p}, \sigma} \hat{a}_{\vec{p}\sigma}^+ \hat{a}_{\vec{p}\sigma} \sum_{\vec{p}', \sigma} \hat{a}_{\vec{p}'\sigma}^+ \hat{a}_{\vec{p}'\sigma} \right\rangle + \\
&+ \left\langle \sum_{\vec{p}, \sigma} \hat{a}_{\vec{p}\sigma}^+ \hat{a}_{\vec{p}\sigma} \sum_{\vec{p}', -\sigma} \hat{a}_{\vec{p}'-\sigma}^+ \hat{a}_{\vec{p}'-\sigma} \right\rangle - \left\langle \sum_{\vec{p}, \sigma} \hat{a}_{\vec{p}\sigma}^+ \hat{a}_{\vec{p}\sigma} \right\rangle^2 = \left\langle \sum_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}\uparrow}^+ \hat{a}_{\vec{p}\uparrow} \sum_{\vec{p}'} \hat{a}_{\vec{p}'\uparrow}^+ \hat{a}_{\vec{p}'\uparrow} \right\rangle + \\
&+ \left\langle \sum_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}\downarrow}^+ \hat{a}_{\vec{p}\downarrow} \sum_{\vec{p}'} \hat{a}_{\vec{p}'\downarrow}^+ \hat{a}_{\vec{p}'\downarrow} \right\rangle + 2 \left\langle \sum_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}\uparrow}^+ \hat{a}_{\vec{p}\uparrow} \sum_{\vec{p}'} \hat{a}_{\vec{p}'\downarrow}^+ \hat{a}_{\vec{p}'\downarrow} \right\rangle - \left\langle \sum_{\vec{p}, \sigma} \hat{a}_{\vec{p}\sigma}^+ \hat{a}_{\vec{p}\sigma} \right\rangle^2 \\
&= 2 \sum_{\vec{p}} \left\{ \mu_p^2 n_F(\epsilon_p) + v_p^2 [1 - n_F(\epsilon_p)] \right\} \sum_{\vec{p}' \neq \vec{p}} \left\{ \mu_{p'}^2 n_F(\epsilon_{p'}) + v_{p'}^2 [1 - n_F(\epsilon_{p'})] \right\} + \bar{N} - \bar{N}^2 + \\
&+ 2 \sum_{\vec{p}} \left\{ \mu_p^2 n_F(\epsilon_p) + v_p^2 [1 - n_F(\epsilon_p)] \right\} \sum_{\vec{p}' \neq -\vec{p}} \left\{ \mu_{p'}^2 n_F(\epsilon_{p'}) + v_{p'}^2 [1 - n_F(\epsilon_{p'})] \right\} + \\
&+ 2 \left\langle \sum_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}\uparrow}^+ \hat{a}_{\vec{p}\uparrow} \hat{a}_{-\vec{p}\uparrow}^+ \hat{a}_{-\vec{p}\downarrow}^+ \right\rangle = 4 \left(\sum_{\vec{p}} \left\{ \mu_p^2 n_F(\epsilon_p) + v_p^2 [1 - n_F(\epsilon_p)] \right\} \right)^2 + \bar{N} - \bar{N}^2 + \quad , \\
&+ 2 \left\langle \sum_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}\uparrow}^+ \hat{a}_{\vec{p}\uparrow} \hat{a}_{-\vec{p}\downarrow}^+ \hat{a}_{-\vec{p}\downarrow}^+ \right\rangle - 4 \sum_{\vec{p}} \left\{ \mu_p^2 n_F(\epsilon_p) + v_p^2 [1 - n_F(\epsilon_p)] \right\}^2 = \\
&= \bar{N} - 4 \sum_{\vec{p}} \left\{ \mu_p^2 n_F(\epsilon_p) + v_p^2 [1 - n_F(\epsilon_p)] \right\}^2 + 2 \left\langle \sum_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}\uparrow}^+ \hat{a}_{\vec{p}\uparrow} \hat{a}_{-\vec{p}\downarrow}^+ \hat{a}_{-\vec{p}\downarrow}^+ \right\rangle \\
&\left\langle \sum_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}\uparrow}^+ \hat{a}_{\vec{p}\uparrow} \hat{a}_{-\vec{p}\downarrow}^+ \hat{a}_{-\vec{p}\downarrow}^+ \right\rangle = \left\langle \sum_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}\uparrow}^+ \hat{a}_{-\vec{p}\downarrow}^+ \hat{a}_{-\vec{p}\downarrow} \hat{a}_{\vec{p}\uparrow} \right\rangle = \\
&= \left\langle \sum_{\vec{p}} \left[u_p^* \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow}^+ + v_p^* \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow} \right] \left[u_p \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow} + v_p \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow}^+ \right] \left[u_p^* \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow}^+ - v_p^* \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow} \right] \times \right. \\
&\times \left. \left[u_p \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow} - v_p \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow}^+ \right] \right\rangle = \left\langle \sum_{\vec{p}} |u_p|^4 \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow} \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow} \right\rangle + \left\langle \sum_{\vec{p}} |v_p|^4 \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow} \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow} \right\rangle \\
&+ \left\langle \sum_{\vec{p}} |u_p|^2 |v_p|^2 \left[\hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow} \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow} + \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow} \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow} \right] \right\rangle = \\
&\left\langle \sum_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}\uparrow}^+ \hat{a}_{\vec{p}\uparrow} \hat{a}_{-\vec{p}\downarrow}^+ \hat{a}_{-\vec{p}\downarrow} \right\rangle = \left\langle \sum_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}\uparrow}^+ \hat{a}_{-\vec{p}\downarrow}^+ \hat{a}_{-\vec{p}\downarrow} \hat{a}_{\vec{p}\uparrow} \right\rangle = \\
&\left\langle \sum_{\vec{p}} |u_p|^4 \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow} \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow} \right\rangle + \left\langle \sum_{\vec{p}} |v_p|^4 \left(1 - \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow} \right) \left(1 - \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow} \right) \right\rangle +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left\langle \sum_{\vec{p}} |u_p|^2 |v_p|^2 \left[\hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow} \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow} + \left(1 - \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow} \right) \left(1 - \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow} \right) \right] \right\rangle = \\
& = \left\langle \sum_{\vec{p}} \left[|u_p|^4 + |v_p|^4 + 2|u_p|^2 |v_p|^2 \right] \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow} \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow} \right\rangle + \sum_{\vec{p}} |v_p|^2 \left(|u_p|^2 + |v_p|^2 \right) - \\
& - 2 \sum_{\vec{p}} |v_p|^2 \left(|u_p|^2 + |v_p|^2 \right) n_p = \left\langle \sum_{\vec{p}} \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow}^+ \hat{\alpha}_{\vec{p}\uparrow} \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow}^+ \hat{\alpha}_{-\vec{p}\downarrow} \right\rangle + \sum_{\vec{p}} |v_p|^2 (1 - 2n_p) = \\
& = \sum_{\vec{p}} \frac{1 - 2n_p}{e^{2\varepsilon_p/T} - 1} + \sum_{\vec{p}} |v_p|^2 (1 - 2n_p) \\
\Phi & = 2 \sum_{\vec{p}} \left\{ u_p^2 n_p + v_p^2 [1 - n_p] \right\} - 4 \sum_{\vec{p}} \left\{ u_p^4 n_p + v_p^4 [1 - n_p] \right\} - 2 u_p^2 n_p v_p^2 [1 - n_p] + \\
& + 2 \left[\sum_{\vec{p}} \frac{1 - 2n_p}{e^{2\varepsilon_p/T} - 1} + \sum_{\vec{p}} |v_p|^2 (1 - 2n_p) \right] = 4 \sum_{\vec{p}} (v_p^2 - v_p^4) + 2 \sum_{\vec{p}} \frac{1 - 2n_p}{e^{2\varepsilon_p/T} - 1} + \\
& + \sum_{\vec{p}} n_p^2 (v_p^4 + 2u_p^2 v_p^2) + 2 \sum_{\vec{p}} (u_p^2 - 3v_p^2 - 2u_p^4 + 4v_p^4 + 4u_p^2 v_p^2) n_p = \\
& = 4 \sum_{\vec{p}} v_p^2 (1 - v_p^2) + 2 \sum_{\vec{p}} (-u_p^2 + v_p^2 + u_p^2 v_p^2) n_p + \sum_{\vec{p}} n_p^2 (1 - u_p^4) + 2 \sum_{\vec{p}} \frac{1 - 2n_p}{e^{2\varepsilon_p/T} - 1} = \\
& = 4 \sum_{\vec{p}} v_p^2 u_p^2 + 2 \sum_{\vec{p}} (-u_p^2 + v_p^2 + u_p^2 v_p^2) n_p + \sum_{\vec{p}} n_p^2 (1 - u_p^4) + 2 \sum_{\vec{p}} \frac{1 - 2n_p}{e^{2\varepsilon_p/T} - 1}
\end{aligned}$$

В пределе $T=0$ находим:

$$\begin{aligned}
\Phi & = 4 \sum_{\vec{p}} v_p^2 u_p^2 = \frac{4\pi V}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty \left(1 - \frac{\xi_p^2}{\xi_p^2 + \Delta_0^2} \right) p^2 dp = \frac{4\pi V}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty \frac{\Delta_0^2}{\xi_p^2 + \Delta_0^2} p^2 dp \cong \\
& \cong \frac{4\pi V p_F^2}{(2\pi\hbar)^3 v_F} \int_{-\infty}^\infty \frac{\Delta_0^2}{\xi^2 + \Delta_0^2} d\xi = \frac{4\pi^2 V \Delta_0 p_F^2}{(2\pi\hbar)^3 v_F} = \frac{V \Delta_0 p_F^2}{2\pi\hbar^3 v_F}
\end{aligned} \tag{d.3}$$

Как и следовало ожидать, флуктуация пропорциональна первой степени объема системы V , однако она отлична от нуля и при $T=0$ по причине существования надконденсатных частиц (в согласии с формулой (d.2)).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика Ч.I. – М.: Наука, 1995.
2. *Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Статистическая физика II. – М.: Наука, 1978.
3. *Хуанг К.* Статистическая механика. – М.: Мир, 1966.
4. *Кубо Р.* Статистическая механика. – М.: Мир, 1967.
5. *Беляев С.Т.* Теория конденсированного состояния: Учеб. пособие. – М.: МФТИ, 1982.
6. *Леонтович М.А.* Введение в статистическую физику и термодинамику. – М.: Гостехиздат, 1982.
7. *Хилл Т.* Статистическая физика. – М.: ИЛ, 1960.
8. *Займан Дж.* Принципы теории твердого тела. – М.: Мир, 1974.
9. *Киттель Дж.* Квантовая теория твердых тел. – М.: Мир, 1968.