QPT-1

I. Fázové přechody a jejich modelový popis v rámci statistické mechaniky

§I.1 Dynamika a rovnovážný stav mnohočásticových (makroskopických) soustav

Jeden mol plynu obsahuje $N_0 = 6.022 \times 10^{23}$ částic. Každá z těchto částic se řídí dynamickými zákony buďto klasické nebo kvantové mechaniky. Detailní popis takového makroskopického systému je nemožný. Dynamika mikroskopických objektů, jednotlivých částic, musí být nahrazena dynamikou makroskopického stavu. Makroskopickým stavem pak je soubor mikrostavů, stavů jednotlivých částic, které splňují určitá makroskopická omezení. Makroskopické stavy jsou popisovány pomocí fázového objemu $\Gamma(X)$, který zahrnuje mikroskopické stavy $X = (x_1, p_1, \ldots, x_N, p_N$

které jsou přípustnými realizacemi makroskopického stavu. Přechodem od mikroskopického stavu $X = (\vec{x}_1, \vec{p}_1, \ldots, \vec{x}_N, \vec{p}_N)$ v 6N rozměrném fázovém prostoru k makroskopickému stavu $\Gamma(X)$ přejdeme od mikroskopické Hamiltonovy mechaniky k makroskopické dynamice Liouvilleově. Z Hamiltonových pohybových rovnic dostaneme (v klasické mechanice) Liouvilleovu rovnici pro hustotu $w(X)$ fázové kapaliny:

$$\boxed{\frac{\partial w}{\partial t} = [H, w]} \tag{I.1}$$

kde Poissonova závorka $[X, Y]$ je definována

$$[X, Y] = \sum_{k=1}^{3N} \left[\frac{\partial X}{\partial q_k} \frac{\partial Y}{\partial p_k} - \frac{\partial Y}{\partial q_k} \frac{\partial X}{\partial p_k} \right] \tag{I.2}$$

Hustota $w(t, X)$ fázové kapaliny je úplnou informací o makroskopickém stavu. Charakteristiky makroskoskopického stavu pak jsou vedlejšími podmínkami na rozdělovací funkci $w(t,X)$.

Přechodem od mikroskopických Hamiltonových rovnic k Liouvilleově rovnici pro makroskopický stav charakterizovaný rozdělovací funkcí $w(t,X)$ jsme problém popisu makroskopických stavů příliš nezjednodušili. Liouvilleova rovnice je stejně neřešitelná jako Hamiltonovy rovnice jednotlivých částic. Tzn. dynamiku makroskopických stavů nelze obecně vůbec popsat. V praxi či experimentu se většinou zajímáme o stavy, které se ustaví až po dostatečně dlouhém časovém vývoji. Předpokládáme, že relaxační časy všech procesů uvnitř makroskopického stavu jsou mnohem kratší než charakteristická doba pozorování či daného experimentu makroskopického stavu. Tzn. prakticky nás zajímá pouze asymptotická dlouhočasová limita řešení Liouvilleovy rovnice.

$$w(X) = \lim_{t \to \infty} w(t,X) \tag{I.3}$$

Tuto limitu potom nazýváme rovnovážným stavem, pro který platí

$$[H, w] = 0 \tag{I.4}$$

Jako u každé asymptotické limity očekáváme i od rovnovážných stavů, že popis makroskopických stavů zjednoduší. Jelikož však neumíme Liouvilleovu rovnici řešit v žádném časovém režimu, jedinou možnou cestou, jak získat rovnovážný stav, je použít postuláty o tvaru rovnovážné rozdělovací funkce $w(X)$. Postulováním tvaru rovnovážné rozdělovací funkce $w(X)$ v podstatě zapomeneme na dynamické rovnice a počáteční stav, ve kterém jsme systém připravili a dynamický popis přejde na popis statistický. Tzn. statistická mechanika vznikne z částicové mechaniky postulátem o tvaru rovnovážné rozdělovací funkce, fázového objemu $w(X)$. Obecně platným postulátem pro tvar rovnovážné rozdělovací funkce je tzv. *princip stejných pravděpodobností*, který předpokládá, že v rovnovážném stavu je každý mikroskopický stav, který splňuje daná omezení makroskopického stavu, je stejně pravděpodobný. Fundamentální makroskopickou veličinou, která charakterizuje makroskopický stav je *energie*. Energie je nejpřirozenějším parametrem, který může charakterizovat rovnovážný stav. Je jasné, že pouze integrály pohybu mohou charakterizovat rovnovážný stav. *Ergodická hypotéza* postuluje, že energie je *jediným* makroskopickým parametrem, integrálem pohybu, který charakterizuje rovnovážný makroskopický stav.

Třebaže statistická mechanika vychází z ergodického teoreticky charakterizuje makroskopický parametr určující rovnovážný stav, není apriorně jasné, které vnější a vnitřní parametry charakterizují celkovou energii. Obecně diferenciál vnitřní energie můžeme psát (1. věta termodynamiky)

(I.5) $$\boxed{dE = TdS - \sum_k a_k \, dA_k}$$

kde A_k jsou ~~vnější~~ parametry charakterizující makroskopický stav a a_k jsou zobecněné síly. Typickými vnějšími parametry jsou např. objem V, magnetizace M, odpovídající zobecněné síly jsou tlak p a vnější mag. pole B. Ne vždy však musí být zobecněné síly vnějším polem. Počet vnějších parametrů A_k a jejich zobecněných sil a_k není v rovnovážné statistické mechanice předem stanoven a o jejich počtu musí být rozhodnuto na základě "stability" rovnovážného stavu.

Stabilita rovnovážného stavu vyjadřuje 2. věta termodynamiky, která říká, že entropie, definovaná jako $S = -k \ln \Gamma$, je neklesající funkcí během vývoje. Tzn. entropie rovnovážného stavu je maximální. Tzn.

$$\boxed{T dS = dE + \sum_k a_k dA_k \geq 0} \qquad (I.6)$$

Jelikož však neumíme přímo testovat dynamiku makroskopického systému, musíme se omezit pouze na rovnovážné stavy, kde je splněna rovnost na pravé straně rovnice (I.6). Variací vnějších parametrů A_k však umíme zkoumat, zdali výsledný termodynamický potenciál, v našem případě entropie, je extremální (maximální). Stanovíme tedy podmínku stability vybraného rovnovážného stavu:

$$\boxed{d\left[\frac{1}{T}\left(dE + \sum_k a_k dA_k\right)\right] < 0} \qquad (I.7)$$

Podmínka (I.7) určuje, že rovnovážný stav charakterizovaný vnějšími parametry A_k je lokálně stabilní, tj. jeho entropie je v lokálním maximu. Tato podmínka je zcela fundamentální pro určení stabilního rovnovážného stavu, tj. stavu, který je výsledkem dlouhočasového vývoje řešení Liouvilleovy rovnice. Jestliže v daném rovnovážném stavu najdeme parametry A_k, jejichž variace vede na narušení podmínky stability (I.7), potom dojde k tzv. fázovému přechodu a změně rovnovážného stavu v jiný, který bude charakterizován jinými hodnotami vnějších parametrů.

§I.2 Statistický popis rovnovážných makroskopických stavů - termodynamické potenciály a jejich vlastnosti

Jestliže mluvíme o stabilitě rovnovážných stavů, tak si musíme uvědomit, jakým způsobem rovnovážné stavy

Podmínka (I.7) určuje, že rovnovážný stav charakterizovaný vnějšími parametry A_k je lokálně stabilní, tj. jeho entropie je v lokálním maximu. Tato podmínka je zcela fundamentální pro určení stabilního rovnovážného stavu, tj. stavu, který je výsledkem dlouhočasového vývoje řešení Liouvilleovy rovnice. Jestliže v daném rovnovážném stavu najdeme parametry A_k, jejichž variace vede na narušení podmínky stability (I.7), potom dojde k tzv. fázovému přechodu a změně rovnovážného stavu v jiný, který bude charakterizován jinými hodnotami vnějších parametrů.

§I.2 Statistický popis rovnovážných makroskopických stavů - termodynamické potenciály a jejich vlastnosti

Jestliže mluvíme o stabilitě rovnovážných stavů, tak si musíme uvědomit, jakým způsobem rovnovážné stavy charakterizujeme. Makroskopický stav charakterizujeme pouze pomocí makroskopických veličin a části fázového prostoru, které vyplňují všechny mikroskopické realizace daného makroskopického stavu. Makroskopický stav tedy lze ocejchovat následovně

$$\Phi[S; A_1, \dots, A_n]$$

kde S - je entropie charakterizující velikost fázového objemu, který zaujímají mikroskopické realizace. Veličiny A_k, $k=1,2,\dots,n$ jsou hodnoty vnějších, extenzivních proměnných definovaných na fázovém prostoru. Tj. tyto veličiny jsou funkcemi na 6N rozměrném fázovém prostoru, $A_k = A_k[X]$. Jejich makroskopické, měřené hodnoty pak jsou

$$\boxed{A_k = \langle A_k[X] \rangle = \int d\mu_\Phi A_k(x)} \qquad (\mathrm{I}.8)$$

přičemž $d\mu_\Phi$ je míra na fázovém prostoru vymezujícího makroskopický stav ϕ, tj. $\mu_\phi = 1$ na podprostoru realizace a $\mu_\phi = 0$ mimo.

Počet a charakter proměnných A_ε není předem dán. Rozhodující jsou vnější síly, kterými můžeme ladit hodnoty proměnné A_ε a pak pomocí tohoto pole můžeme stanovit rovnovážnou hodnotu A_ε. Mohou být i situace, kdy takové pole nemáme k dispozici, a přesto je proměnná A_ε relevantní. To je tehdy, pokud její změna může vést na narušení stability (II.7). Obecně či rigorózně nelze určit, které vnější proměnné A_ε je třeba explicitně uvažovat. To je vždy těžká úloha v určení skutečného základního (nejstabilnějšího) rovnovážného stavu.

Obecně však ke každé vnější extenzivní veličině $A_\varepsilon[x]$ existuje vnitřní, intenzivní veličina, zobecněná síla a_ε definovaná tak, že změna energie při změně veličiny A_ε je

(I.9) $$dE = -a_\varepsilon \, dA_\varepsilon$$

Matematicky makroskopický stav můžeme popsat tzv. termodynamickým potenciálem. Nejjednodušším takovým potenciálem je vnitřní energie

(I.10) $$E(S; A_1, \dots, A_n)$$

která je funkcí pouze extenzivních veličin. Rovnovážné stavy můžeme ekvivalentně popsat i jinými termodynamickými potenciály pomocí tzv. Legendreových transformací. Tyto transformace umožňují přechod od popisu makroskopických stavů pomocí jedněch proměnných k popisu pomocí tzv. Legendreovsky sdružených proměnných. Pokud je termodynamický potenciál popsán pomocí proměnné X, tj. termodynamický potenciál závisí explicitně na X, tj. $\Phi = \Phi(X)$, potom Legendreovsky sdružená proměnná $\mathcal{X}$ je definována,

(I.11) $$\boxed{\mathcal{X} = -\frac{\partial \Phi}{\partial X}}$$

Nový potenciál v proměnné x je

(I.12)
$$\boxed{\tilde{\Phi}(x) = \Phi(X) + X \cdot x = \Phi(X) - \frac{\partial \Phi}{\partial X} \cdot X}$$

Tento důležitý vztah udává způsob, jak vytvořit odpovídající termodynamický potenciál ve veličinách vhodných na popis dané fyzikální situace. Obecně Legendreovsky sdružené jsou vždy zobecněná souřadnice A_k a zobecněná síla α_k. Přitom první je extenzivní, druhá je intenzivní veličina. Jelikož termodynamický potenciál je extenzivní veličina, potom z homogenity plyne, že alespoň jedna proměnná musí být extenzivní (Gibbsova-Duhemova věta).

Příklady: Uvedeme zde několik příkladů termodynamických potenciálů. Budeme uvažovat pouze V, N jako vnější (extenzivní) veličiny. Od vnitřní energie $E(S, V, N)$ můžeme dospět Legendreovými transformacemi k těmto potenciálům.

volná energie: $F(T, V, N) = E(S, V, N) - TS$

entalpie $H(S,p,N) = E(S,V,N) + pV$

volná entalpie $K(T,p,N) = E(S,V,N) - TS + pV$

Gibbsův potenciál $\Omega(T,V,\mu) = E(S,V,N) - TS - \mu N$

§I.3 Termodynamická limita a analytické vlastnosti partiční sumy

Dosud jsme diskutovali pouze jednu asymptotickou limitu, kterou provádíme k tomu, abychom získali statistický popis rovnovážného stavu. Ale již z elementární statistické mechaniky víme, že aditivita termodynamické entropie a ekvivalenci statistických souborů získáme pouze v termodynamické limitě. Tato je definována jako limita nekonečného objemu $V \to \infty$ při fixované hustotě částic, tj. $n = N/V = \text{const}$. Tato limita je neméně důležitá i pro existenci fázových přechodů v rigorózním smyslu. Zatím jsme jako fázový přechod charakterizovali změnu entalpie $H(S,p,N) = E(S,V,N) + pV$

volná entalpie $K(T,p,N) = E(S,V,N) - TS + pV$

Gibbsův potenciál $\Omega(T,V,\mu) = E(S,V,N) - TS - \mu N$

§I.3 Termodynamická limita a analytické vlastnosti partiční sumy

Dosud jsme diskutovali pouze jednu asymptotickou limitu, kterou provádíme k tomu, abychom získali statistický popis rovnovážného stavu. Ale již z elementární statistické mechaniky víme, že aditivitu termodynamické entropie a ekvivalenci statistických souborů získáme pouze v termodynamické limitě. Tato je definována jako limita nekonečného objemu $V \to \infty$ při fixované hustotě částic, tj. $n = N/V = \text{const}$. Tato limita je neméně důležitá i pro existenci fázových přechodů v rigorózním smyslu. Zatím jsme jako fázový přechod charakterizovali změnu stabilitu makroskopického stavu spojenou se změnou charakteristiky fázového prostoru tento stav popisujícího. V termodynamické limitě můžeme takové změny matematicky formulovat pomocí neanalytičnosti termodynamických potenciálů. Jestliže úplný mikroskopický fázový prostor nahradíme fázovým prostorem makroskopických parametrů popisujících makroskopický stav, potom nestabilita stavu znamená přechod minima (maxima) v maximum (minimum) či inflexní bod. V takovém případě některá (druhá derivace) termodynamického potenciálu je singulární nebo prochází nulou. Tzn. body nestability v termodynamické limitě jsou totožné s body neanalytičnosti termodynamických potenciálů.

Singularity či neanalytičnosti v termodynamické limitě podléhají rigorózním omezením vyplývajícím z tzv. Yangových a Leeových vět, Předpokládejme, že máme systém složený z N částic uzavřených v objemu V. Dále předpokládejme, že každá částice má minimální objem V_0, do kterého může být stlačena. Tzn. v objemu V můžeme mít maximálně $M(V) = [V/V_0]$ částic. Jestliže $Q_N(V)$ je partiční suma pro systém uzavřený v objemu V skládající se z N částic. Platí

$$Q_N(V) = 0 \qquad \text{pro } N > M(V)$$

Velká kanonická suma se tedy redukuje na konečný polynom

$$\boxed{Z(z,V) = 1 + z\,Q_1(V) + \dots + z^M Q_M(V)} \tag{I.13}$$

kde $z = e^{\beta\mu}$. Jelikož $Q_\ell(V) > 0$, potom $Z(z,V)$ nemá reálné pozitivní kořeny a stavová rovnice

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{P}{kT} &= V^{-1} \ln Z(z,V) \\ n &= V^{-1} z \frac{\partial}{\partial z} \ln Z(z,V) \end{aligned}} \tag{I.14}$$

QPT-16

neobsahuje singularity a P, v jsou analytickými funkcemi proměnné z. Yangovy a Leeovy věty vypovídají o chování termodynamického potenciálu v termodynamické limitě.

YL-1: Limita

$$F_\infty(z) = \lim_{V\to\infty} \frac{1}{V} \ln Z(z,V)$$

existuje pro všechna $z > 0$ a je spojitou a neklesající funkcí z. Tato limita je nezávislá na tvaru objemu V za předpokladu, že povrch je omezen $c V^{2/3}$.

YL-2: Jestliže oblast R v rovině komplexních z obsahuje segment kladné reálné osy s žádnými póly velké kanonické sumy, potom na této oblasti termodynamický potenciál $V^{-1} \ln Z(z,V)$ konverguje stejnoměrně a limita $V\to\infty$ je analytickou funkcí na R.

Z YL teorému plyne, že termodynamický potenciál v termodynamické limitě $V \to \infty$

$$\Omega(T,V,z) = -k_B T \ln Z(T,z,V)$$

je spojitou a nerostoucí funkcí parametru z.

Pokud termodynamický potenciál obsahuje neanalytičnosti, potom to jsou divergence v derivacích termodynamického potenciálu. Tyto neanalytičnosti korespondují s fázovými přechody, kdy (daný) se rovnovážný stav popsaný termodynamickým potenciálem stane nestabilním a termodynamický potenciál již nebude minimem ve fázovém prostoru makroskopických proměnných.

Ehrenfest: Paul Ehrenfest navrhl klasifikaci fázových změn (přechodů) vycházející ze spojitosti chemického potenciálu μ, který je z Gibbsovy-Duhemovy věty termodynamickým potenciálem: $-\mu N = \mathbb{K}(T,p,N)$. Ehrenfest definoval fázový přechod n-tého druhu, jestli

Jestliže n-tá derivace chemického potenciálu vykazuje nespojitost. Tato charakteristika však není úplná, neboť ne nutně se neanalytičnost projeví nespojitostí derivace termodynamického potenciálu. Ve spojitých fázových přechodech n-tá derivace ($n \geq 2$) termodynamického potenciálu diverguje. Skokem se mění až vyšší derivace.

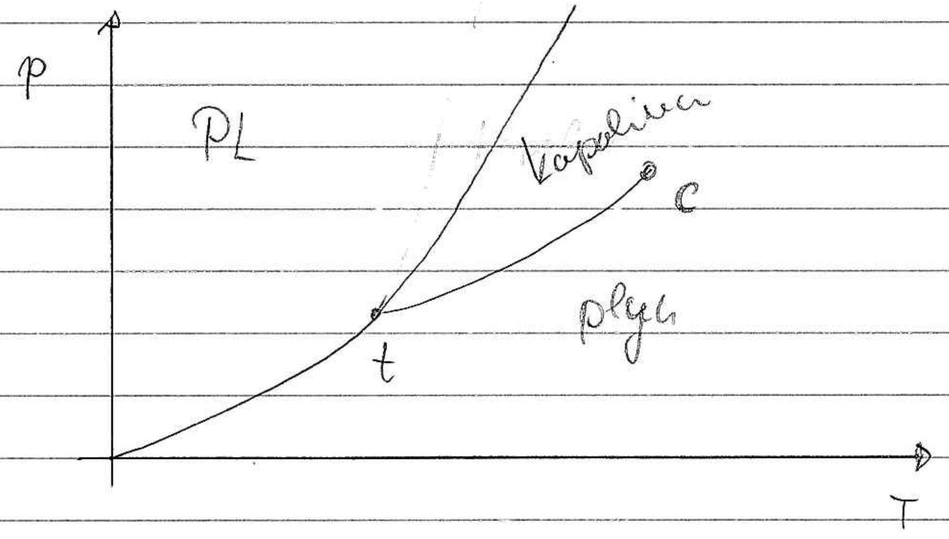
§ I.4 Typy fázových přechodů a jejich charakteristiky

Rovnovážné (meta) stabilní stavy nazýváme fázemi. Tyto fáze jsou charakterizovány specifickými hodnotami určitých vnějších nebo vnitřních proměnných. Fázové přechody jsou pak charakterizovány změnou (skokovou) vybraných parametrů. Nejběžnější charakteristikou fázové změny je existence tzv. parametru uspořádání. Ten je v jedné fázi nulový a v druhé nenulový. Typickým příkladem

Jestliže n-tá derivace chemického potenciálu vykazuje nespojitost. Tato charakteristika však není úplná, neboť ne nutně se neanalytičnost projeví nespojitostí derivace termodynamického potenciálu. Ve spojitých fázových přechodech n-tá derivace ($n \geq 2$) termodynamického potenciálu diverguje. Skokem se mění až vyšší derivace.

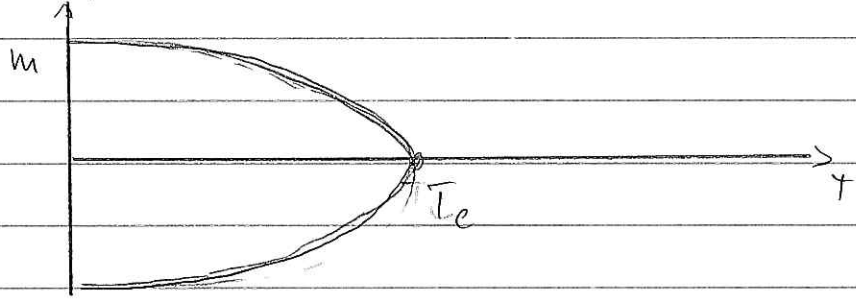
§I.4 Typy fázových přechodů a jejich charakteristiky

Rovnovážné (meta) stabilní stavy nazýváme fázemi. Tyto fáze jsou charakterizovány specifickými hodnotami různých vnějších nebo vnitřních proměnných. Fázové přechody jsou pak charakterizovány změnou (skokovou) vybraných parametrů. Nejběžnější charakteristikou fázové změny je existence tzv. *parametru uspořádání*. Ten je v jedné fázi nulový a v druhé nenulový. Typickým příkladem parametrem uspořádání je spontánní magnetizace v feromagnetiku. Fázovým diagramem zobrazujeme oblasti existence stabilních fází v prostoru makroskopických parametrů. Typickým fázovým diagramem jednokomponentní látky (PVT-diagram) je



Hranice fází jsou line koexistence, tj. linie podél kterých obě fáze jsou v rovnováze. V tomto fázovém diagramu jsou dva význačné body $t = (T_t, P_t)$ a $C = (T_c, P_c)$ charakterizující trikritický a kritický bod. V prvním koexistují všechny tři fáze a v druhém rozdíly mezi fázemi úplně vymizí.

Jiným význačným fázovým diagramem, který později budeme studovat je magnetický:



Tento nejlépe zobrazíme v (m,T) rovině. Zde linie není hranicí mezi fázemi, ale hodnota magnetizace v rovnovážném stavu. Magnetizace je typickým parametrem uspořádání rozlišujícím neuspořádanou fázi $(m=0)$ od magneticky uspořádané $(m\neq 0)$.

Parametrem pro přechod kapalina - plyn je

(I.15) $$\phi(x) = \rho(x) - \rho_{plyn}(x),$$

přičemž $\rho(x)$ není tepelně vystředovaná, ale okamžitá, fluktuující hustota. V případě magnetismu (spinového) potom lokální magnetizace je okamžitá hodnota spinu, tj.

$$\vec{M} = \mu \sum_i \vec{S}_i .$$

Parametr uspořádání je typickou makroskopickou veličinou pomocí které můžeme rozlišit různé fáze. Pokud místo vystředované veličiny, parametru uspořádání přejdeme k jejím okamžitým hodnotám, můžeme jimi i v neuspořádané fázi identifikovat existenci nestabilit. Jestliže parametr uspořádání je veličina

$\langle A \rangle$, potom změna energie spojená se změnou této veličiny je

(I.16) $$\delta E(a) = -\int dx\, a(x)\, \Delta A(x) = -\int dx\, a(x)\, A(x)$$

Tuto změnu energie dodáme systému jako poruchu a budeme uvažovat nový systém:

(I.17) $$F[a] = -\beta^{-1} \ln \mathrm{tr} \exp\{-\beta[H + \Delta E(A)]\}$$

kde nová volná energie je funkcionálem Legendreovy sdružené zobecněné síly k proměnné $A(x)$, která je funkcí na fázovém prostoru dynamických proměnných.

Volná energie $F[a]$ se nazývá vytvořujícím funkcionálem, neboť pomocí derivací podle zobecněné síly $a(x)$ získáme veškerou závislost na parametru $A(a)$.

Parametr uspořádání potom je:

$$\langle A \rangle = -\int dx \, \frac{\delta F[a]}{\delta a(x)}\bigg|_{a=0} \tag{I.18}$$

Druhou variací podle zobecněné síly získáme tzv. korelační funkci

$$\boxed{G^{(2)}(x,y) = \frac{1}{\beta} \frac{\delta^2 F[a]}{\delta a(x)\, \delta a(y)}} \tag{I.19}$$

Tato funkce je významná pro rozpoznání kritického chování a fázového přechodu (2. druhu, spojitého), neboť v kritickém bodě tato funkce diverguje

$$\boxed{T \to T_c \qquad \mathbb{G}^{(2)} = \frac{1}{V}\int dx\,dy \; G^{(2)}(x,y) \to \infty} \tag{I.20}$$

Korelační funkce je důležitým prostředkem, pomocí k určení a charakteristice fázových přechodů. Fázový přechod (spojitý) se projevuje jako divergence korelační funkcí. Divergence se projevuje díky velikosti objemu, tj. pouze v termodynamické limitě. Korelační funkce na velkých vzdálenostech má asymptotiku

$$\boxed{G(x,y) \sim \frac{e^{-|x-y|/\xi}}{|x-y|^{d-2}}} \quad (T > T_c) \tag{I.21}$$

kde ξ je tzv. korelační délka. V kritickém bodě $T = T_c$ potom korelační délka ξ diverguje:

$$\xi = -\frac{|x-y|}{\ln\{|x-y|^{d-2} G(x,y)\}} = \infty \tag{I.22}$$

Jestliže korelační funkci Fourierovou transformujeme do prostoru hybností, potom je její dlouhovlnná asymptotika (tj. $|q| \to 0$) je

$$\boxed{\tilde{G}(q) = \frac{a}{q^2 + m(T)}} \tag{I.23}$$

kde $m(T) = \xi^{-2}$ je efektivní hmota kritických fluktuací. Kritické fluktuace v $T=T_c$ potom ztrácí hmotu a mluvíme o *měkkém módu* s $m=0$.

Fázové přechody tedy indukují divergence v korelačních funkcích. Existence divergencí na jedné straně způsobuje problémy popisu kritických jevů, na druhé straně však popis může zjednodušit. Toto zjednodušení nastává v tom, že divergence umožňují oddělit divergentní veličiny od nedivergentních. Tato idea leží v základu tzv. *škálovací teorie kritických jevů*, které zjednodušují popis tzv. *univerzálních veličin*, které vykazují divergence v kritickém bodě. Univerzální veličiny jsou pak charakterizovány *kritickými exponenty*, které vyjadřují "rychlost" divergence. K zavedení kritických exponentů potřebujeme zavést tzv. *kontrolní parametr*, který kontroluje přechod kritickým bodem. V případě klasických fázových přechodů je tímto bezrozměrným parametrem

(I.23) $\vartheta = |1 - T/T_c|$

Typické kritické exponenty jsou:

korelační fce : $G^{(2)} \sim \vartheta^{-\gamma}$

korelační délka : $\xi \sim \vartheta^{-\nu}$

měrné teplo : $C_V \sim \vartheta^{-\alpha}$

parametr uspořádání : $A \sim \vartheta^{\beta}$ $T < T_c$

Existují ještě další kritické exponenty pro $T = T_c$, kdy kontrolní parametr není ϑ, ale k nim se dostaneme později. Jednotlivé kritické exponenty nejsou nezávislé a platí mezi nimi jisté relace popsané Widomovou a Kadanoffovou škálovací hypotézou.

Poslední charakteristikou fázových přechodů, o které se v této kapitole zmíníme, je tzv. spontánní narušení symetrie. Většina fázových přechodů vykazuje vlastnost, že symetrie základního či rovnovážného stavu je nižší, než symetrie hamiltoniánu. Tzn. existuje transformace U, vůči níž je hamiltonián invariantní, tj. $H = U H U^{-1}$, ale která není identitou, pokud působí na parametr uspořádání, tj. $A' = U A U^{-1}$, pokud $A \neq 0$. Tj. v uspořádané fázi není rovnovážný stav invariantní vůči transformaci U. Symetrie U hamiltoniánu byla spontánně, bez vnějšího působení narušena. Toto spontánní narušení však nemůže nastat úplně bez vnějšího popudu. Úplné středování přes všechny realizace musí zachovávat symetrie hamiltoniánu. Tzn. jestliže jeden rovnovážný stav vykazuje hodnotu parametru uspořádání A, potom stejně pravděpodobný, tj. se stejnou energií je i každý stav $U A U^{-1}$! Ovšem experimentálně se realizuje pouze stav jediný. Proto, abychom získali jednoznačný rovnovážný stav, musíme á priorně narušit symetrii hamiltoniánu, která není splněna v rovnovážném stavu. Tohoto cíle dosáhneme zavedením zobecněné síly, nebo vnějším polem, Legendreovsky sdruženým s parametrem uspořádání. Tj. nahradíme výchozí hamiltonián:

(I.24) $$H \rightarrow H - \int d^3x \, a(x) A(x)$$

Termodynamický potenciál pro "narušený systém" bude

(I.25) $$\boxed{F[a] = -k_B T \ln \operatorname{Tr} \exp\{-\beta(H - \int d^3x \, a(x) A(x))\}}$$

Vnější pole $a(x)$ narušující invarianci hamiltoniánu H vůči transformaci U je pouze pomocnou veličinou, která slouží k odvození potřebných termodynamických veličin a k výběru "preferenčního směru" pro parametr uspořádání. Na konci výpočtu potom položíme $a \to 0$. V uspořádané fázi potom parametr uspořádání zamrzne ve vybraném směru.

QPT-28

§I.5 Modely pro popis fázových přechodů

Pokud budeme mluvit o fázových přechodech, tak budeme mít na mysli výhradně spojité přechody s divergující korelační funkcí. Tj. přechody, ve kterých se mění lokální stabilita dané fáze, daného řešení. Dalším automatickým předpokladem bude pravidelná diskrétní struktura v podobě krystalické mříže. Budeme tedy uvažovat mřížové modely pouze, neboť zde je automaticky vyřešen problém ultrafialových divergencí. Elementární objem připadající na jeden uzel označme $v_0 = 1$. Mříž L^d bude obsahovat právě $N = L^d$ částic nebo elementárních objektů.

A) Model mřížového plynu

Uvažujeme plyn jehož částice jsou nestlačitelné, přičemž každá částice zaujímá elementární objem $v_0 = 1$. Celý prostor rozdělíme na soubor elementárních cel, které buďto obsahují částice nebo ne. Částice vzájemně interagují tak, že energeticky je výhodnější, když dvě sousední cely jsou obsazeny částicemi. Hamiltonián takového systému můžeme zapsat

(I.26)
$$H = 2J \sum_{\langle ij \rangle} e_i e_j \qquad J<0$$

přičemž i, j jsou indexy elementárních cel, $\langle ij \rangle$ jsou nejbližší sousedé, $e_i = 0, 1$ podle toho zda cela je prázdná nebo obsazená. Partiční suma tohoto modelu je

(I.27)
$$\boxed{Z = \sum_{\{e_i\}} \exp\{\beta\mu \sum_i e_i - 2\beta J \sum_{\langle ij \rangle} e_i e_j\}}$$

B. Isingův a (klasický) Heisenbergův model

Isingův model sehrál nejdůležitější roli ve vývoji metod popisu fázových přechodů. Navržen byl W. Lenzem v r. 1920 na popis feromagnetik. V r. 1925 E. Ising vyřešil tento model v $d=1$, Onsager potom r. 1944 pro $d=2$.

V sedmdesátých letech byl Isingův model vzorovým příkladem pro vybudování teorie renormalizační grupy K. Wilsona.

V Isingově modelu předpokládáme, že na každém uzlu mřížky se nachází lokalizovaný spin, jehož průmět do osy kvantování může nabývat pouze hodnot $\pm\mu_B$. Magnetická anisotropie ve směru osy kvantování se předpokládá. Tudíž pouze s_z-komponenty spinu jsou relevantní. Jestliže položíme $\mu_B = 1$ pak Isingův hamiltonián lze psát:

$$\boxed{H = \sum_{\langle ij\rangle} J_{ij} S_i S_j - B\sum_i S_i} \qquad (T.28)$$

Spiny nabývají hodnot $S_i = \pm 1$, J_{ij} je spinová výměna, která je záporná pro feromagnetické a kladná pro antiferomagnetické materiály. Partiční suma potom je

$$\boxed{Z = \sum_{\{S_i\}} \exp\left\{\beta\left(B\sum_i S_i - \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij} S_i S_j\right)\right\}} \qquad (T.29)$$

V třicátých letech Heisenberg zobecnil Isingův model na izotropní systémy, kde spiny na jednotlivých uzlech mohou mířit do libovolného směru. Skalární projekce spinu s_z z Isingova modelu je nahrazena vektorem $\vec{s}$, stejně tak i magnetické pole. Partiční suma Heisenbergova modelu je

$$(I.30) \qquad \boxed{Z = \sum_{\{s_i\}} \exp\left\{\beta\left(\vec{B}\cdot\sum_i \vec{s}_i - \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}\,\vec{s}_i\cdot\vec{s}_j\right)\right\}}$$

přičemž suma přes všechny konfigurace je spojitým integrálem s omezením na velikost spinu:

$$1 = s_x^2 + s_y^2 + s_z^2 .$$

Nekomutativnost projekcí spinu v klasickém modelu není brána do úvahy.

C. Gaussovský a sférický model

Problém Isingova modelu je, že spiny nabývají pouze diskrétních hodnot ± 1. To dělá řešení tohoto modelu užitečným, zvláště později při zavedení renormalizační grupy, je tzv. gaussovský model, který zobecňuje Isingovy spiny na spojité proměnné s reálnými hodnotami z $(-\infty,\infty)$. Partiční suma gaussovského modelu je

$$(I.31)\quad \boxed{Z = \int \mathcal{D}s \exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_i s_i^2 + \frac{\beta}{2}\sum_{ij} J_{ij} s_i s_j + \beta B \sum_i s_i\right\}}$$

kde $-s_i^2/2$ je "gaussovská" míra zaručující, že střední hodnota s_i^2 je 1. $\mathcal{D}s = \prod_{i=1}^{N} \frac{ds_i}{\sqrt{2\pi}}$ je funkcionální diferenciál.

Dalším užitečným zobecněním Isingova modelu je tzv. sférický model vyřešený Kacem a Berlinem v r. 1952. Partiční suma tohoto modelu je

$$(I.32)\quad \boxed{Z = \int_{\sum_i s_i^2 = N} ds_1 \dots ds_N \exp\left\{\beta\left(B\sum_i s_i - \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij} s_i s_j\right)\right\}}$$

Tzn. spiny jsou spojité proměnné, jako v gaussovském modelu, splňující omezení (normalizaci)

$$\sum_i s_i^2 = N.$$

QPT-33

D. Isingův model v příčném magnetickém poli a kvantový Heisenbergův model

Dosud uvažované modely měly čistě klasický charakter. Kvantová statistika začne být významná i tehdy, když nekomutativnost operátorů začne hrát významnou roli. Fluktuace díky nekomutativnosti operátorů mohou být relevantní teprve při nízkých teplotách, když jsou srovnatelné s tepelnými fluktuacemi. Pokud kritické body fázových přechodů leží v oblasti nízkých teplot (řádově Kelviny a jejich zlomky) potom je nutné v modelu explicitně uvážit vliv nekomutativnosti operátorů. V Heisenbergově modelu je to nekomutativnost projekcí spinového operátoru.

Nejjednodušší situace je Isingův model v příčném magnetickém poli. Anisotropie systému vede na vzájemnou interakci složek S_z spinu, kdežto vnější příčné magnetické pole se váže na S_x složku spinu. Spinové proměnné musíme reprezentovat pomocí Pauliho matic. Partiční suma bude mít tvar

(I.33) $$\boxed{Z = \operatorname*{Tr}_{\{\sigma\}} \exp\left\{+\beta\left(B\sum_i \hat{\sigma}_i^x - \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}\,\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z\right)\right\}}$$

kde $\hat{\sigma}^x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$, $\hat{\sigma}^z = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$ a stopa Tr je z celého mřížového prostoru $H_1 \otimes H_2 \otimes \dots \otimes H_N$ pro všechny uzly mříže.

Kvantový Heisenbergův model analogicky je

(I.34) $$\boxed{Z = \operatorname*{Tr}_{\{\sigma\}} \exp\left\{\beta\left(\vec{B}\cdot\sum_i \hat{\vec{\sigma}}_i - \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}\,\hat{\vec{\sigma}}_i\cdot\hat{\vec{\sigma}}_j\right)\right\}}$$

kde se opět projeví nekomutativnost spinových operátorů:

(I.35) $$[\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^y] = 2i\hat{\sigma}^z, \quad [\hat{\sigma}^y, \hat{\sigma}^z] = 2i\hat{\sigma}^x, \quad [\hat{\sigma}^z, \hat{\sigma}^x] = 2i\hat{\sigma}^y$$

Tyto komutační relace lze opět splnit Pauliho maticemi,

kde $\sigma^y = \frac{i}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}$.

QPT-35

E. Andersonův a Hubbardův model

Všechny dosud uvažované modely, ať klasické či kvantové, byly zamýšleny pro popis magnetických vlastností izolátorů a polovodičů, kde spiny, nesené elektrony, jsou dostatečně lokalizované na uzlech mříže, tj. lokálních orbitalech. Vlastní kinetická energie je zanedbatelná, pokud Fermiho energie je uzavřena, tj. neobsahuje volné nosiče náboje. Kvantové fázové přechody, kdy kvantové fluktuace jsou relevantní, nastávají ve většině případů v kovech, tj. v materiálech s volnými nosiči náboje na Fermiho energii.

Pro modely kovů jsou důležité dvě energetické škály, kinetická energie elektronů a dosah elektrostatické interakce. Díky přítomnosti mnoha volných elektronů je coulombická interakce silně stíněná v kovech, takže je stíněná krátkodosahově. Extrémním případem stíněné interakce je Hubbardova + Slaterova lokální výměna, tj. elektrony se odpuzují pouze pokud se nacházejí na některé atomové orbitě stejného uzlu. Dalším významným zjednodušením je tzv. těsnovazebný popis.

V tomto popisu neuvažujeme pohyb elektronu jako spojité šíření částice prostorem, ale soubor „přeskoků" z jedné atomové orbitaly na jinou. Tento „hopping" pohyb popisujeme amplitudami přeskoku mezi jednotlivými uzly. V základu tohoto popisu leží periodická struktura mříže iontů, ve které se elektrony pohybují. Tato periodicita, neboli diskrétní translační invariance, se projevuje v periodicitě potenciálu, ve kterém se elektron pohybuje. Tj. platí:

(I.36) $$V(\vec{R}) = V(\vec{r} + l\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 + n\vec{a}_3) = V(\vec{r})$$

kde $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ jsou tzv. primitivní vektory vyjadřující směry periodicity mříže. Primitivní vektory jsou jednotkové a určují elementární objem primitivní cely

(I.37) $$v_0 = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$

Tzn. každou (periodickou) funkci v přímém prostoru mřížce

* její ireducibilní část, 1/8 úplné BZ

s vektory $|\vec{k}_i \cdot \vec{Q}_i| \le 1$

reprezentovat trojicí celých čísel, $\vec{\lambda} = (l, m, n)$, tj. indexem uzlu mříže a vektorem $\vec{r}$ z elementární primitivní cely, tj.

$$V_{\vec{\lambda}}(\vec{r}) = V(\vec{R}) = V(\vec{r} + l\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 + n\vec{a}_3).$$

Díky periodicitě krystalové mříže i prostor hybností bude mít periodickou strukturu. Tvoří tzv. reciprokou mřížku.

Jestliže $\vec{R}_i$ je souřadnice uzlu mříže, potom zjistíme význačné vektory v prostoru hybností

$$\vec{K} \cdot \vec{R}_i = 2\pi j$$

Primitivní vektory v reciprokém prostoru mají vyjádření pomocí primitivních vektorů z přímého prostoru:

$$\vec{K}_1 = \frac{2\pi(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}{v_0}, \quad \vec{K}_2 = \frac{2\pi(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)}{v_0}, \quad \vec{K}_3 = \frac{2\pi(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)}{v_0} \qquad (\text{I}.38)$$

Tyto tři vektory v prostoru hybností definují primitivní celu, tzv. Brillouinovu zónu (BZ) tak, že každou hybnost můžeme zapsat

* $\Phi_n(\vec{r})$ jsou periodicky prodlouženy mimo elementární buňku $\underline{V_0}$

$$\vec{K} = \breve{k} + \lambda\breve{K}_1 + \mu\breve{K}_2 + \nu\breve{K}_3 \qquad (\mathrm{I}.39)$$

přičemž $\breve{k} \in BZ$, (λ, μ, ν) jsou tzv. Millerovy indexy, které označují rovinu v reciprokém prostoru s normálou $\breve{K} = \lambda\breve{K}_1 + \mu\breve{K}_2 + \nu\breve{K}_3$.

Těsnovazebný popis využívá periodicity mříže, tj. redukuje přímé souřadnice na uzlové souřadnice $\breve{R}_i$. Dále vnitřní proměnná $\breve{r} \in v_0$ fyzikálních veličin se nahrazuje indexem lokálních vlnových tzv. Wannierových funkcí. Wannierovy funkce jsou vlnové funkce pro lokální orbity, přitom jejich asymptotika je modifikována tak, aby Wannierovy funkce z různých uzlů mohly být ortogonální. Prostor integrovatelných funkcí $L_2(v_0)$ na objemu v_0 můžeme reprezentovat rozkladem do Wannierových funkcí$^{+}$:

$$f(\breve{R}_i;\breve{r}) = \sum_n f_{i,n}\,\varphi_n(\breve{r}). \qquad (\mathrm{I}.40)$$

Tohoto rozkladu využijeme a místo souřadnice $\breve{r}$ budeme pracovat s "pásovým" indexem $\underline{n}$. Tzn. obecnou periodickou funkci $f(\vec{R})$ nahradíme maticovými elementy $f_{i,n} = \langle f | \varphi_n \rangle$. Výhodou tohoto popisu je, že v nízkoenergetické limitě můžeme pracovat jen s několika málo nejnižšími pásovými indexy $\underline{n}$. Pro fixní orbitální nebo pásový index $\underline{n}$ lze potom zjednodušit i popis v reciprokém prostoru. Fourierův obraz na diskrétní mříži definujeme

$$\boxed{\tilde{f}_n(\vec{k}) = N_0 \sum_i f_{i,n}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i}} \tag{I.41}$$

Přitom platí, že funkce $\tilde{f}_n(\vec{k})$ je periodická v reciprokém prostoru, tj: $\tilde{f}_n(\vec{k} + \vec{K}) = \tilde{f}_n(\vec{k})$. Tento fakt je přímým důsledkem relace $\vec{K}\cdot\vec{R}_i = 2\pi j$. Tj. pro popis funkce f_n stačí tedy uvažovat vektory $\vec{k} \in \underline{BZ}$ z první Brillouinovy zóny. Inverzní Fourierova transformace pak je

(I.42) $$\boxed{f_{in} = \frac{1}{N v_0} \sum_{\vec{k} \in BZ} e^{-i\vec{k}_i \vec{R}_i} \tilde{f}_n(\vec{k})}$$

V dalším výkladu položíme $v_0 = 1$, $N v_0 = V$.

S touto elementární znalostí reprezentace těsné vazby můžeme nyní zformulovat fundamentální model korelovaných elektronů. Nejjednodušší a přesto exaktně neřešitelným modelem je tzv. Andersonův model magnetické příměsi v kovové matrici. Jeho hamiltonián v druhém kvantování má tvar:

(I.43) $$\boxed{\begin{aligned} H = {} & \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon(\vec{k}) a^+_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\sigma} E_d a^+_{d\sigma} a_{d\sigma} \\ & + \sum_{\vec{k},\sigma} \left(V_{\vec{k}d} a^+_{\vec{k}\sigma} a_{d\sigma} + V_{d\vec{k}} a^+_{d} a_{\vec{k}\sigma} \right) + U a^+_{d\uparrow} a_{d\uparrow} a^+_{d\downarrow} a_{d\downarrow} \end{aligned}}$$

V tomto modelu neinteragující elektrony kovové matrice $a_{\vec{k}\sigma}$ jsou hybridizovány s lokalizovaným elektronem $a_{d\sigma}$. Pouze elektrony na příměsi cítí coulombickou elektrostatickou interakci. Hybnosti $\vec{k} \in BZ$, $\epsilon(\vec{k})$ je disperzní relace vybraného "pásu" elektronů, index d- pro lokalizované elektrony označuje centrální uzel s jediným Wannierovým orbitalem. $V_{\vec{k}d}$ je amplituda hybridizace mezi lokalizovanými a vodivostními elektrony, Andersonův model magnetické příměsi vykazuje kvantové kritické chování, tzv. Kondův jev, ale kolektivní kvantový fázový přechod v něm nenastává. Nejjednodušším modelem interagujících elektronů, kde kvantový fázový přechod se může realizovat je tzv. Hubbardův model.

$$\boxed{\mathcal{H} = \sum_{\vec{k},\sigma} \epsilon(\vec{k}) a^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma} + U \sum_{i} a^{\dagger}_{i\uparrow} a_{i\uparrow} a^{\dagger}_{i\downarrow} a_{i\downarrow}} \tag{I.44}$$

který popisuje stíněnou interakci vodivostních elektronů v tranzitivních kovech. Je to kanonický model pro popis vzniku magnetického chování a přechod kov-izolátor.

II. Metody výpočtu statistických veličin

§II.1 Exaktní řešení

Všechny modely pro mikroskopický popis fázových přechodů mají společné to, že excitace základního stavu jsou prostorově korelovány, tj. nejedná se o ideální plyn. Pouze korelace mezi excitacemi je schopna za určitých podmínek vyvolat kolektivní makroskopickou (objemovou) odezvu na mikroskopickou (povrchovou) poruchu. Nejedná se tedy o ideální plyn, což dělá výpočet partiční sumy, termodynamických potenciálů a ostatních termodynamických veličin náročnými. Pokud systém nevykazuje kolektivní korelované chování, potom lze použít poruchový rozvoj kolem ideálního plynu. Kolektivní kooperativní chování však nelze postihnout konečným počtem příspěvků poruchové řady. Fázové přechody je nutné popsat neporuchově, tj. sumou nekonečně mnoha poruchových členů. Tento fakt ztěžuje popis kolektivních jevů, neboť částicová korelace již nemůže být chápána jako malý parametr. Výběr tříd členů poruchové řady kvalitativně a eventuálně kvantitativně popisujících kolektivní jev je nejtěžším problémem popisu fázových přechodů a kritických jevů. Zbytek přednášky bude věnován právě tomuto problému.

Jelikož mikroskopické modely jsou ohromným zjednodušením skutečného reálného interagujícího systému, bylo by optimální, kdybychom našli exaktní řešení. V tomto ideálním případě nepotřebujeme ani poruchovou teorii ani žádný malý parametr. Bohužel však exaktní řešení modelů jsme schopni získat pouze ve speciálních situacích či limitách, které v žádném případě nepokrývají celou škálu možných fázových přechodů.

Nejvýznamnějšími exaktními řešeními statistické fyziky jsou řešení Isingova modelu v $d=1,2$.

Řešení Isingova modelu v $d=1$ je poměrně a analyticky snadno dostupné. Řešení Isingova v $d=2$ (Onsagerovo řešení) je ještě mnohem náročnější. Na rozdíl od $d=1$, Isingův model v $d=2$ vykazuje netriviální kritické chování, které fundamentálně změnilo naše chápání kritických jevů.

Pro ilustraci konstrukce exaktní partiční sumy a termodynamických veličin zde uvedeme Isingův model na řetízku. Pro řetízek délky $\underline{N}$ bez započtení "povrchových" či koncových členů dostaneme:

(II.1) $$\mathcal{H} = +J\sum_{i=1}^{N} s_i s_{i+1} - B\sum_{i=1}^{N} s_i \quad .$$

Jestliže budeme uvažovat periodické hraniční podmínky, potom platí $i+N=i$. Rovnici (II.1) lze ještě zapsat

(II.2) $$\mathcal{H} = -\sum_{i=1}^{N}\left(J s_i s_{i+1} - \frac{B}{2}(s_i + s_{i+1})\right)$$

Partiční suma je

(II.3) $$Z_N = \sum_{s_1=\pm1} \dots \sum_{s_N=\pm1} \exp\{\beta \sum_{i=1}^{N} [-J s_i s_{i+1} + \frac{B}{2}(s_i + s_{i+1})]$$

$$= \sum_{\{s_i\}} \prod_{i=1}^{N} \exp\{\beta[-J s_i s_{i+1} + \frac{B}{2}(s_i + s_{i+1})]\}$$

Zavedeme matici přechodu propojující uzly i, $i+1$:

$$\mathbb{P} = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{1-1} \\ P_{-11} & P_{-1-1} \end{bmatrix}$$

kde $P_{11} = e^{\beta(-J+B)}$, $P_{-1-1} = e^{-\beta(J+B)}$, $P_{1-1} = P_{-11} = e^{+\beta J}$,

Pomocí této matice lze zapsat partiční sumu

(II.4) $$Z_N = \sum_{\{s_i\}} P_{s_1 s_2} P_{s_2 s_3} \dots P_{s_N s_1} = \mathrm{Tr}\, \mathbb{P}^N$$

Problém řešení Isingova modelu na řetízku se tedy zredukoval na nalezení vlastních čísel 2×2 matice $\mathbb{P}$. Ty určíme ze sekulární rovnice

$$\det|\mathbb{P} - \lambda \mathbb{I}| = 0$$

Jednoduchým výpočtem zjistíme

(II,5) $$\lambda_{1,2} = e^{-\beta J} \cos \beta B \pm \sqrt{e^{-2\beta J} \sinh^2 \beta B + e^{+2\beta J}}$$

Volná energie Isingova modelu je

(II.6) $$F_N = -k_B T \ln\left(\lambda_1^N + \lambda_2^N\right) = -k_B T\left\{N \ln\lambda_1 + \ln\left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^N\right]\right\}$$

v termodynamické limitě $N \to \infty$ $(\lambda_2 < \lambda_1)$ dostaneme

(II.7) $$F = -k_B T \ln\lambda_1 = -N k_B T \ln\left[e^{-\beta J}\cosh\beta B + \sqrt{e^{-2\beta J}\sinh^2\beta B + e^{2\beta J}}\right]$$

Z volné energie můžeme určit termodynamické veličiny, ale pouze ty, které získáme derivacemi podle spin-spinové vzájemné interakce J nebo homogenního magnetického pole h. Homogenní magnetizace je

(II.8) $$m = \langle\sigma_0\rangle = -\frac{1}{N}\frac{\partial F}{\partial B} = \frac{k_B T}{\lambda_1}\frac{\partial\lambda_1}{\partial h}$$

$$= \frac{\sinh\beta B \; e^{-\beta J}}{\sqrt{\sinh^2\beta B + e^{+4\beta J}}} .$$

Z tohoto vyjádření vidíme, že v limitě $h \to 0$ $m \to 0$, a tedy nevytvoří se spontánní magnetizace. V tomto speciálním řešení tedy neexistuje fázový přechod při konečných teplotách. Ovšem magnetická susceptibilita

(II.9) $$\chi(\beta) = \frac{\partial m}{\partial B} = \beta\cosh\beta B \frac{e^{+4\beta J}}{\left(\sinh^2\beta B + e^{+4\beta J}\right)^{3/2}}$$

V limitě nízkých teplot $\beta \to \infty$ a ve spinově symetrickém případě dostaneme

(II.10) $$\chi(0) \sim \beta e^{-2\beta J} \to \infty , \qquad (J<0)$$

tj. susceptibilita diverguje v absolutní nule exponenciálně. Tento výsledek nám ukazuje, že Isingův model v $d=1$ vykazuje kritické chování pro $T=0$. Tento fázový přechod ovšem nemá příliš velký fyzikální význam, neboť v absolutní nule teplot Isingův model nemá žádný volný parametr. Magnetizace je saturovaná, tj. $m=1$. Všechny fluktuace v nulové teplotě "zamrznou".

Významnou termodynamickou veličinou je korelační funkce, jejíž divergence indikuje existenci spojitého fázového přechodu. Tato funkce pro Isingův model je

(II.11) $$\Gamma(j) = \langle S_0 S_j \rangle - \langle S_0 \rangle \langle S_j \rangle .$$

Tuto funkci nemůžeme odvodit přímo z výrazu (II.7) pro volnou energii. V Isingově modelu však můžeme použít následující postup k určení korelační funkce. Pro jednoduchost položme $h=0$. Dále označme J_l spinovou interakci mezi l-tým a $l+1$-ním uzlem. Tzn.

$$\langle S_i S_{i+j}\rangle = \frac{1}{Z_N}\sum_{\{S_l\}} S_i S_{i+j} \exp\left\{\beta \sum_{l=0}^{N-1} J_l S_l S_{l+1}\right\}$$

kde $Z_N = 2\prod_{l=0}^{N-1}(2\cosh\beta J_l)$.

Jestliže využijeme normalizace délky spinu, $S_i^2=1$, potom

(II.12) $$\langle S_i S_{i+j}\rangle = \frac{1}{Z_N}\sum_{\{\sigma_l\}} (S_i S_{i+1})(S_{i+1}S_{i+2})\ldots(S_{i+j-1}S_{i+j}) \exp\left\{\beta\sum_{l=0}^{N-1} J_l S_l S_{l+1}\right\}$$

$$= \frac{(-1)^j}{Z_N\beta^j}\,\frac{\partial^j Z_N(J_0,\ldots,J_{N-1})}{\partial J_i\,\partial J_{i+1}\ldots\partial J_{i+j-1}}\bigg|_{J_l=J} = (\tanh(-\beta J))^j$$

V nulovém magnetickém poli $\langle\sigma_i\rangle=0$, tzn.

(II.13) $$\Gamma(j) = (\tanh(-\beta J))^j = e^{-j/\xi}$$

kde ξ je korelační délka. V limitě nízkých teplot:

$$\xi = -[\ln(\tanh(-\beta J))]^{-1} = e^{2\beta J}$$

Výsledek, který je ve shodě s homogenní magnetizací.

§II.2 Vysokoteplotní rozvoj

Exaktní řešení modelů interagujících objektů jsou vzácná a většina metod řešení je založena na rozvojích termodynamických veličin. Jelikož kritické jevy vznikají pro silně efektivní interakci, je dobré používat rozvoje, které nemají interakční konstantu jako malý parametr rozvoje. Typickým představitelem je vysokoteplotní rozvoj, který rozvíjí termodynamické veličiny kolem limity nekonečné teploty, $\beta = 0$. Tento rozvoj budeme demonstrovat na příkladu Isingova modelu.

Obecně je vysokoteplotní rozvoj charakterizován rozkladem partiční sumy:

$$(\text{II}.14)\qquad Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta\mathcal{H}(\{S_i\})} = \sum_{\{S_i\}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left[-\beta\mathcal{H}(\{S_i\})\right]^n}{n!}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \sum_{\{S_i\}} \left[\beta\mathcal{H}(\{S_i\})\right]^n .$$

V případě Isingova modelu můžeme explicitně psát

($\epsilon = -J > 0$):

$$Z_{Ising} = \sum_{\{s_i\}} \prod_i e^{\beta B s_i} \prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta \epsilon s_i s_j} .$$

Jestliže využijeme normalizace spinu, tj. $s_i^2 = 1$, a dále

vlastnosti

$$e^{\pm A} = \cosh A \pm \sinh A = \cosh A \, [1 \pm \tanh A] ,$$

potom získáme

(II.15) $$Z_{Ising} = \sum_{\{s_i\}} \prod_{\langle ij \rangle} \cosh \beta\epsilon \, [1 + s_i s_j \tanh(\beta\epsilon)] \prod_k \cosh(\beta B) [1 + s_k \tanh(\beta B)]$$

$$= \cosh^{Nz/2}(\beta\epsilon) \cosh^N(\beta B) \sum_{\{s_i\}} \prod_{\langle ij \rangle} (1 + s_i s_j v) \prod_k (1 + s_k u)$$

kde $v = \tanh(\beta\epsilon)$, $u = \tanh(\beta B)$, z je počet nejbližších sousedů mřížového bodu.

Je jasné, že do partiční sumy přispívají pouze konfigurace se sudými mocninami spinů. Tzn. parametr u vystupuje pouze v sudých mocninách.

Jednotlivým členům vysokoteplotního rozvoje lze přiřadit diagramy. Každému faktoru u přiřadíme prázdný kruh a každému elementu v linii propojující nejbližší sousedy mřížky. Součin přes dvojice nejbližších sousedů ještě rozepíšeme do součtu:

$$\prod_{\langle ij\rangle}(1+v s_i s_j) = 1 + v\sum_{\langle ij\rangle} s_i s_j + v^2 \sum_{\substack{\langle ij\rangle \\ \langle ke\rangle}} s_i s_j s_k s_e + \dots$$

Takže celkovou partiční sumu v přítomnosti vnějšího pole můžeme obecně zapsat:

(II.16) $$Z_{Ising} = \cosh^{Nz/2}(\beta\epsilon)\cosh^{N}(\beta B)\, 2^N \sum_{l,m} g(l,m)\, v^l u^m$$

kde funkce $g(l,m)$ je počet trajektorií na mřížce s m koncovými body a celkovou délkou trajektorií l.

Platí:

A) Otevřené trajektorie končí v bodech s vnějším polem

B) každým vrcholem mřížky prochází sudý počet linií

C) žádná linie se nesmí "vracet" po stejné trajektorii.

Vysokoteplotní rozvoj lze v některých speciálních případech ($d=1,2$ $h=0$) sečíst explicitně. Ve vyšších dimenzích však jen numericky lze sečíst konečný počet členů, z nichž pak lze najít odhady pro kritické exponenty. Třebaže vysokoteplotní rozvoj diverguje v kritickém bodě, lze pomocí Padého approximantů úspěšně využít této metody k určení typu neanalytického chování.

II.3 Spojité fluktuující proměnné – Landauův-Ginzburgův model

Spin v Isingově modelu nabývá pouze hodnot $s=\pm 1$, což vedlo na zjednodušení vysokoteplotního rozvoje. V obecnějších případech diskrétní hodnoty fluktuující proměnné však jsou spíše nevýhodou. Pro poruchové metody s nekonečným počtem fluktuujících proměnných

Vysokoteplotní rozvoj lze v některých speciálních případech ($d=1,2$ $h=0$) explicitně sečíst. Ve vyšších dimenzích však jen numericky lze sečíst konečný počet členů, z nichž pak lze najít odhady pro kritické exponenty. Třebaže vysokoteplotní rozvoj diverguje v kritickém bodě, lze pomocí Padého approximantů úspěšně využít této metody k určení typu neanalytického chování.

II.3 Spojité fluktuující proměnné – Landauův-Ginzburgův model

Spin v Isingově modelu nabýval pouze hodnot $s=\pm 1$, což vedlo na zjednodušený vysokoteplotní rozvoj. V obecnějších případech diskrétní hodnoty fluktuující proměnné však jsou spíše nevýhodou. Pro poruchové metody s nekonečným počtem fluktuujících proměnných je výhodnější přejít na spojité, neomezené fluktuace, tzv. gaussovské proměnné.

Partiční suma zobecněného (klasického) Heisenbergova modelu, tzv. $O(\nu)$ modelu, je

(II.17) $$Z_N = \int \mathcal{D}s\, \rho(s) \exp\left\{-\frac{\beta}{2}\sum_{(i\neq j)} J_{ij}\, \vec{s}_i\cdot\vec{s}_j + \beta\sum_i \vec{B}\cdot\vec{s}_i\right\}$$

kde $\int \mathcal{D}s \equiv \prod_{j,\alpha}\int_{-\infty}^{\infty} ds_j^{\alpha} \qquad (\alpha = 1,2,\dots,\nu)$

$$\rho(s) = \prod_j \delta(\vec{s}_j\cdot\vec{s}_j - 1)\,\Gamma(\nu/2)/\pi^{\nu/2}$$

je hustota stavů ve spinovém prostoru, $\Gamma(x)$ je Γ-funkce. Abychom převedli vyjádření partiční sumy $O(\nu)$ modelu, použijeme tzv. Hubbardovy-stratonovičovy transformace. K tomu účelu však potřebujeme, aby J_{ij} byla invertovatelná matice, a proto přepíšeme partiční sumu do tvaru:

$$Z_N = e^{-\frac{\beta}{2}\mu N}\int \mathcal{D}s\, \rho(s) \exp\left\{\frac{\beta}{2}\sum_{ij} J_{\mu,ij}\, \vec{s}_i\vec{s}_j + \beta\sum_i \vec{B}\cdot\vec{s}_i\right\}$$

kde jsme označili $J_{\mu,ij} = \mu\delta_{ij} - J_{ij}$.

Nyní použijeme vlastnost gaussovské integrace:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{\sqrt{2\pi a}}\, e^{-\frac{y^2}{2a} + xy} = e^{+x^2 a/2}$$

Potom můžeme partiční sumu O(ν) modelu reprezentovat pomocí gaussovských fluktuačních polí:

(II.18) $$Z_\nu = Z_0^{-1} \int \mathcal{D}\varphi\, \mathcal{D}s\, \rho(s) \exp\Big\{-\frac{1}{2\beta}\sum_{ij} (J_\mu)^{-1}_{ij}\, \vec{\varphi}_i \cdot \vec{\varphi}_j + \sum_i \vec{s}_i \cdot (\vec{\varphi}_i + \vec{B}) \Big\}$$

kde $Z_0 = \int \mathcal{D}\varphi \exp\{-\frac{1}{2\beta}\sum_{ij} (J_\mu^{-1})_{ij}\, \vec{\varphi}_i \cdot \vec{\varphi}_j\} \cdot e^{\frac{\beta}{2}\mu N}$

Integraci přes spinové proměnné můžeme explicitně provést a dostaneme partiční sumu reprezentovanou pouze gaussovskými fluktuačními proměnnými:

(II.19) $$Z_\nu = Z_0^{-1} \int \mathcal{D}\varphi \exp\Big\{-\frac{1}{2\beta}\sum_{ij} (J_\mu^{-1})_{ij}\, \vec{\varphi}_i \cdot \vec{\varphi}_j + \sum_i U^\nu(\varphi_i) + \sum_i \vec{H}_i \cdot \vec{\varphi}_i + \sum_{ij} J_{\mu,ij}\, \vec{H}_i \cdot \vec{H}_j \Big\}$$

where $\breve{H}_i = \frac{1}{\beta}\sum_j (J_\mu^{-1})_{ij}\breve{B}$.

Efektivní interakce pole $\breve{\varphi}$ je

$\nu = 1$ $\quad U^1(\varphi) = \ln 2\cosh\varphi$

$\nu \geq 2$ $\quad U^\nu(\varphi) = \ln\{2^{\frac{\nu-2}{2}}\Gamma(\frac{\nu}{2})\, I_{\frac{\nu-2}{2}}(\varphi)/\varphi^{\frac{\nu-2}{2}}\}$

kde I_p je Besselova funkce prvního druhu. Vidíme, že efektivní interakce fluktuujících polí je lokální!

Reprezentace partiční sumy pomocí gaussovských fluktuujících polí je základem tzv. Ginzburgova-Landauova-Wilsonova modelu kritických jevů. Tento model vychází ze škálovacích úvah, které indikují, že v blízkosti kritického bodu lze reprezentovat pouze vedoucími řády rozvoje výměnného a interakčního členu, tj. pouze kvartický člen je relevantní. Tj. partiční suma LGW modelu je

(II.20) $$Z_{LGW} = \int D\varphi \exp\Big\{-\sum_{\langle ij\rangle} w_{ij}\varphi_i\varphi_j - \sum_i \mu^2(T)\varphi_i^2 - \frac{\lambda}{4!}\sum_i \varphi_i^4\Big\}$$

LGW model je základem plné poruchové teorie využívající metody Feynmanových diagramů pro výpočet odchylek od gaussovského modelu. Jelikož v blízkosti kritického bodu $\mu(T) \to 0$ nezáleží na struktuře mřížce a meziatomová vzdálenost $a \ll \xi$ (ξ je korelační délka μ^{-1}), potom dlouhovlnné fluktuace popisuje spojitý LGW hamiltonián:

(II.21) $$\mathcal{H}_{LGW} = \int d^d x \left\{ \frac{\alpha^2}{2} |\nabla \phi(x)|^2 + \frac{\mu^2}{2} |\phi(x)|^2 + \frac{\lambda}{4!} |\phi(x)|^4 \right\}$$

Tzn. že LGW model redukuje makroskopický fázový prostor na tři generující parametry: α, μ, λ, které budou v každém okamžiku popisovat relevantní veličiny v blízkosti fázového přechodu. Volnou energii LGW v okolí kritického bodu nejdříve vyjádříme

(II.22) $$F[J] = -k_B T \ln \int \mathcal{D}\phi \exp\left\{ -\mathcal{H}_{LGW} + \int d^d x\, J(x) \phi(x) \right\}$$

Od vnějšího pole $J(x)$ přejdeme Legendreovou transformací k efektivní "magnetizaci" φ:

$$\Gamma[\varphi] = \int d^d x\, J(x)\varphi(x) + \beta F[J]$$

Wilsonovo řešení LGW modelu je např. reprezentací Gibbsovy volné energie $\Gamma[\varphi]$ ve tvaru

$$\Gamma[\varphi] \approx \int d^d x \left[\frac{\bar\alpha}{2} |\nabla\varphi(x)|^2 + \frac{\bar\mu^2}{2} |\varphi(x)|^2 + \frac{\bar\lambda}{4!} |\varphi(x)|^4 \right] \tag{II.23}$$

kde $\bar\alpha$, $\bar\mu$, $\bar\lambda$ jsou renormalizované veličiny charakterizující kritické chování LGW modelu. Tyto parametry budeme chtít určit z modifikace poruchové teorie.

§ II.4 Poruchová teorie a rozvoj podle počtu uzavřených smyček

LGW model, ať už na mřížce nebo ve spojité limitě, je standardně používán pro generování poruchové

Od vnějšího pole $J(x)$ přejdeme Legendreovou transformací k efektivní "magnetizaci" φ:

$$\Gamma[\varphi] = \int d^d x \, J(x)\varphi(x) + \beta F[J]$$

Cílem řešení LGW modelu je např. reprezentaci Gibbsovy volné energie $\Gamma[\varphi]$ ve tvaru:

$$\Gamma[\varphi] \approx \int d^d x \left[\frac{\bar{\alpha}^2}{2} |\nabla\varphi(x)|^2 + \frac{\bar{\mu}^2}{2} |\varphi(x)|^2 + \frac{\bar{\lambda}}{4!} |\varphi(x)|^4 \right] \quad (\text{II}.23)$$

kde $\bar{\alpha}$, $\bar{\mu}$, $\bar{\lambda}$ jsou renormalizované veličiny charakterizující kritické chování LGW modelu. Tyto parametry budeme chtít určit z modifikace poruchové teorie.

§ II.4 Poruchová teorie a rozvoj podle počtu uzavřených smyček

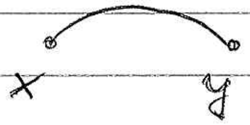
LGW model, ať už na mříži nebo ve spojité limitě, je standardně používán pro generování poruchové teorie. Kvartický člen v hamiltoniánu (II.20), (II.21) dělá problémy a vede na neřešitelnost tohoto modelu. Jestliže položíme $\lambda = 0$, dostaneme gaussovský model, který je exaktně řešitelný, neboť pro partiční funkce představuje mnohonásobný gaussovský integrál. Jestliže označíme

$$\Delta(x-y) = \langle \phi(x)\phi(y) \rangle_G$$

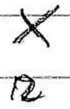
propagátor (korelační funkci) gaussovského modelu, potom partiční funkci LGW modelu $Z[J]$ lze reprezentovat:

$$\frac{Z[J]}{Z_G[0]} = \exp\left\{-\frac{\lambda}{4!}\int d^d x \, \frac{\delta^4}{\delta J(x)^4}\right\} \exp\left\{\frac{1}{2}\int du\, dv\, J(u)\Delta(u-v)J(v)\right\} \qquad \text{(II.24)}$$

kde $Z_G[0]$ je partiční suma gaussovského modelu pro $J=0$. Poruchovou teorii pro LGW model získáme z (II.24) mocninným rozvojem exponenciály s funkcionální derivací. Této poruchové teorii snadno přiřadíme grafickou reprezentaci. Každému propagátoru, korelační funkci gaussovského modelu přiřadíme linii a každé derivaci potom vrchol:



$\simeq \Delta(x-y)$



$\sim \lambda$

Přitom každým vrcholem v diagramatické reprezentaci prochází právě čtyři linie. Při konstrukci diagramů (Feynmanových) a jejich odpovídajících matematických vyjádření platí určitá pravidla. Přitom záleží, jakou veličinu počítáme. Kromě výše uvedených grafických elementů zavedeme ještě vnější vrcholy, prázdná kolečka, která budou odpovídat působení vnějšího pole J. Počet vnějších vrcholů (vnějších polí) vymezuje symetrii přispívajících diagramů. V PT se omezíme pouze na souvislé diagramy, které přispívají do Helmholtzovy volné energie.

QPT-60

Označme $G_c^{(m)}(x_1,\dots,x_m;J)$ sumu všech souvislých diagramů, které mají právě m vnějších vrcholů $x_1,\dots x_m$. $G^{(m)}$ je plná m-bodová Greenova funkce. Pro konstrukci diagramatických reprezentací m-bodových Greenových funkcí můžeme zformulovat Feynmanova pravidla stejně tak jako v kvantové teorii pole.

Feynmanova pravidla v přímém prostoru: $G^{(m)}(\vec{x}_1,\dots,\vec{x}_m;J)\propto O(\lambda^n)$

1. Sestrojíme všechny možné souvislé diagramy s n-vnitřními 4-vrcholy a m-vnějšími zdroji v bodech $\vec{x}_1,\dots,\vec{x}_m$.

   Dva diagramy jsou různé, pokud je nelze na sebe transformovat rotací a posunutím vrcholů a linií.

2. Každému diagramu přiřadíme faktor $(-\lambda)^n$.
3. Každý vnitřní vrchol označme indexem $\vec{z}_i$.
4. Každá linie propojující vrcholy $\vec{z}_i, \vec{z}_j$ reprezentuje propagátor $\Delta(\vec{z}_j-\vec{z}_i)$.
5. Přes souřadnice vnitřních vrcholů se sčítá (integruje).

6. Každá linie tvořící „bublinu", tj. začínající a končící ve stejném bodě obsahuje faktor $1/2$.

7. Jestliže l linií propojuje některé dva body (vrcholy), potom násobíme diagram faktorem $1/l!$.

8. Jestliže mohou být vnitřní vrcholy diagramu přeskupeny v-způsoby tak, že se diagram topologicky nezmění, potom tento diagram přispívá faktorem $1/v$.

Přímá reprezentace poruchové teorie je vhodná pro fyzikální interpretaci elementárních dějů, které jednotlivé diagramy představují. Pro praktické účely je však mnohem výhodnější pracovat ve Fourierově obrazu hybností, vlnových vektorů. Obecně zavedeme následující Fourierovu transformaci a její inverzi:

$$\begin{aligned} \tilde{f}(\vec{k}) &= v_0 \sum_{\vec{x}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} f(\vec{x}) = \int d^d x \, e^{-i\vec{k}\vec{x}} f(\vec{x}) \\ f(\vec{x}) &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} e^{+i\vec{k}\cdot\vec{x}} \tilde{f}(\vec{k}) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} e^{i\vec{k}\vec{x}} \tilde{f}(\vec{k}) \end{aligned} \tag{II.25}$$

Snadno zjistíme, že (formálně)

$$\int d^d x\, J(\vec{x})\,\phi(\vec{x}) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d}\, \tilde{J}(-\vec{k})\,\tilde{\Phi}(\vec{k})$$

m-bodová Greenova funkce na prostoru vlnových vektorů formálně je:

$$\tilde{G}^{(m)}(\vec{k}_1,\dots,\vec{k}_m;\tilde{J}) = \langle \tilde{\Phi}(\vec{k}_1)\dots\tilde{\Phi}(\vec{k}_m)\rangle_c$$

$$= (2\pi)^{dm}\, \frac{\delta}{\delta \tilde{J}(-\vec{k}_1)} \cdots \frac{\delta}{\delta \tilde{J}(-\vec{k}_m)} \ln Z[\tilde{J}]$$

Jelikož model je translačně invariantní, celková hybnost se musí zachovávat a $\tilde{G}^{(m)}(\vec{k}_1,\dots,\vec{k}_m;\tilde{J})$ obsahuje δ-funkci, kterou explicitně eliminujeme:

(II-26) $$\tilde{G}^{(m)}(\vec{k}_1,\dots,\vec{k}_m;\tilde{J}) = (2\pi)^d\,\delta(\vec{k}_1+\dots+\vec{k}_m)\, G_c^{(m)}(\vec{k}_1,\dots,\vec{k}_{m-1};\tilde{J})$$

kde $G_c^{(m)}(\vec{k}_1,\dots,\vec{k}_{m-1};\tilde{J})$ je redukovaná Greenova funkce.

Přednost reprezentace pomocí vlnových vektorů je v tom, že propagátor $\Delta(\vec{x}-\vec{y})$ je diagonální

(II-27) $$\tilde{\Delta}(\vec{k}) = \int d^d x\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}\,\Delta(\vec{x}) = \frac{1}{\alpha^2 \vec{k}^2 + \mu^2}$$

Stejně jako v přímém prostoru můžeme na prostoru vlnových vektorů zformulovat Feynmanova pravidla:

Ta která se liší od přímého prostoru jsou:

a) Externí vrcholy jsou charakterizovány hybnostmi $\tilde{k}_1, \tilde{k}_2, \ldots \tilde{k}_m$.

b) každý diagram obsahuje zákon zachování hybnosti $\delta(\tilde{k}_1 + \tilde{k}_2 \ldots \tilde{k}_m)$

c) každé linii přiřadíme hybnost $\tilde{k}_i$ a propagátor $[\varkappa^2 \tilde{k}_i^2 + \mu^2]^{-1}$.

d) Integrujeme přes všechny vnitřní linie; každá integrace obsahuje faktor $(2\pi)^{-d}$.

Helmholtzova volná energie $F[J]$ je sumou všech souvislých diagramů, přičemž m-tý moment v rozvoji do mocnin J je právě m-bodová Greenova funkce $G^{(m)}(\tilde{x}_1, \ldots, \tilde{x}_m)$. Výhodnější než Helmholtzova volná energie je Gibbsova volná energie $\Gamma(\varphi)$, která je Legendreova transformace $F[J]$.

V reprezentaci vlnových vektorů máme

(II.28) $$\Gamma[\tilde{\varphi}] = \int \frac{d^dk}{(2\pi)^d}\, \tilde{J}(-k)\tilde{\varphi}(k) - \ln Z[\tilde{J}]$$

Funkci $\Gamma[\tilde{\varphi}]$ můžeme opět rozvinout do mocnin pole $\tilde{\varphi}$. Jednotlivé momenty tohoto rozvoje reprezentují tzv. vrcholové funkce. Definujeme pro $T > T_c$

(II.29a) $$\Gamma^{(n)}(k_1, \dots, k_n) = (2\pi)^{dn} \frac{\delta}{\delta\tilde{\varphi}(-k_1)} \cdots \frac{\delta}{\delta\tilde{\varphi}(-k_n)} \Gamma[\tilde{\varphi}]\Big|_{\tilde{\varphi}=0}$$

a pro $T < T_c$

(II.29b) $$\Gamma^{(n)}(k_1, \dots, k_n) = (2\pi)^{dn} \frac{\delta}{\delta\tilde{\varphi}(-k_1)} \cdots \frac{\delta}{\delta\tilde{\varphi}(-k_n)} \Gamma[\tilde{\varphi}]\Big|_{\tilde{\varphi}=\varphi_0}$$

pro n-bodovou vrcholovou funkci. Pro $T < T_c$, φ_0 je parametr uspořádání. Snadno zjistíme z definice (II.28), že

$$\frac{\delta\Gamma[\tilde{\varphi}]}{\delta\tilde{J}(k)} = \frac{\tilde{\varphi}(k)}{(2\pi)^d} - \frac{1}{Z[0]} \frac{\delta Z[\tilde{J}]}{\delta\tilde{J}(-k)}\Big|_{\tilde{J}=0} = 0$$

(II.30) $$\Rightarrow \quad \tilde{\varphi}_0(k) = \langle \tilde{\Phi}(k) \rangle$$

Tj. φ_0 je střední hodnota fluktuačního pole φ.

Druhou derivace potom má vyjádření

$$(2\pi)^{2d} \frac{\delta^2 \Gamma(\tilde\varphi)}{\delta\tilde\varphi(-\vec k_2)\,\delta\tilde\varphi(-\vec k_1)} = (2\pi)^d \frac{\delta}{\delta\tilde\varphi(-\vec k_2)} \tilde J(\vec k_1)$$

Dále použijeme identitu:

$$\delta(\vec k_1+\vec k_2) = \frac{\delta\tilde\varphi(k_1)}{\delta\tilde\varphi(-\vec k_2)} = (2\pi)^d \frac{\delta}{\delta\tilde\varphi(-\vec k_2)} \frac{\delta}{\delta\tilde J(-\vec k_1)} \ln Z(\tilde J) =$$

$$= (2\pi)^{2d} \int d^d k' \, \frac{\delta\tilde J(\vec k')}{\delta\tilde\varphi(-\vec k_2)} \frac{\delta^2 \ln Z(\tilde J)}{\delta\tilde J(\vec k')\,\delta\tilde J(-\vec k_1)}$$

$$= \int d^d k' \, \frac{\delta\tilde J(\vec k')}{\delta\tilde\varphi(-\vec k_2)} \delta(\vec k'-\vec k_1)\, G_c^{(2)}(\vec k')$$

$$= \frac{\delta\tilde J(\vec k_1)}{\delta\tilde\varphi(-\vec k_2)} G_c^{(2)}(\vec k_1)$$

Odtud dostaneme pro dvoubodovou vrcholovou funkci

$$\Gamma^{(2)}(\vec k_1, \vec k_2) = \frac{\delta(\vec k_1+\vec k_2)}{G_c^{(2)}(\vec k_1)} \tag{II.31}$$

Redukovaná vrcholová funkce je

$$\Gamma_c^2(\vec k) = \alpha^2 \vec k^2 + \mu^2 - \Sigma(\vec k)$$

kde $\Sigma(\vec k)$ je vlastní energetická část, suma všech 1P ireducibilních diagramů. Všimneme si, že dvoubodový vrchol lze zapsat:

$$\tilde{\Gamma}^{(2)}(\vec{k}) = \tilde{G}_c^{(2)-1}(\vec{k}) \cdot \tilde{G}_c^{(2)}(\vec{k}) \cdot \tilde{G}_c^{(2)-1}(\vec{k})$$

což znamená, že $\Gamma^{(2)}(\vec{k})$ je "amputovaná" dvoubodová Greenova funkce. Analogicky můžeme odvodit vyšší vrcholové funkce $\tilde{\Gamma}^{(n)}(\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_{n-1})$, které jsou vždy sumou všech 1PI příspěvků. Vyšší vrcholové odvodíme pomocí následující definice

$$\Gamma^{(n+1)}(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \dots, \vec{k}_n, \vec{k}; J) = (2\pi)^{nd} \frac{\delta}{\delta\tilde{\varphi}(-\vec{k}_n)} \cdots \frac{\delta}{\delta\tilde{\varphi}(-\vec{k}_1)} J(\vec{k})$$

a identity:

$$\frac{\delta}{\delta\tilde{\varphi}(-\vec{k})} = \int \frac{d^d k'}{(2\pi)^d} \tilde{G}_J^{(2)-1}(-\vec{k}, \vec{k}') \frac{\delta}{\delta\tilde{J}(\vec{k}')} \qquad \text{(II.32)}$$

Derivace $G_c^{(2)}(\vec{k}, \vec{k}'; J)$ podle zdroje J generují vyšší Greenovy funkce.

Poruchová teorie ve vysokoteplotní fázi, $T > T_c$, je přirozeným rozvojem kolem gaussovského modelu. Pro $T < T_c$ a $\varphi_0 \neq 0$ lze poruchovou teorii přeskajít tak, že rozvíjíme podle počtu uzavřených smyček Feynmanových diagramů. Tento rozvoj získáme formálně zavedením parametru b, pomocí kterého reprezentujeme partiční sumu

$$Z(b) = \int \mathcal{D}\phi \, \exp\left\{-\frac{1}{b}\mathcal{H}(\phi)\right\} \tag{II.33}$$

Fyzikální případ je $b=1$. Rozvoj do počtu uzavřených smyček získáme rozvojem v malém parametru b. Limita $b \to 0$ v integrálu (II.33), kde $\mathcal{H}(\phi) \geq 0$, způsobí, že hlavní příspěvek do integrálu je stacionární bod, tj.:

$$\frac{\delta}{\delta\phi}\mathcal{H}(\phi) = 0 \tag{II.34a}$$

při podmínce stability

$$\frac{\delta^2}{\delta\phi^2}\mathcal{H}(\phi)\Big|_{\phi=\phi_0} > 0 \tag{II.34b}$$

kde ϕ_0 je řešení (II.34a).

QPT-68

V dalším kroku ukážeme, že každý diagram s L uzavřenými smyčkami (L nezávislými integracemi přes vnitřní proměnné) přispívá do fyzikálních veličin (vrcholových funkcí) řádu b^{L-1}.

Jestliže I je počet vnitřních linií, V je počet vnitřních vrcholů a L je počet uzavřených smyček, potom platí

(II.35) $$I - V = L - 1 .$$

Každá vnitřní linie obsahuje faktor b, neboť v hamiltoniánu vystupuje inverzní propagátor. Každý vrchol přispívá faktorem b^{-1}. Potom diagram s I liniemi, V vrcholy a L uzavřenými smyčkami díky (II.35) přispívá

$$D_{I,V} \sim b^{I-V} = b^{L-1}.$$

Stromové diagramy $(L=0)$ (sedlový bod) přispívají ve vedoucím řádu b^{-1}. Rozvoj do uzavřených smyček je poruchovým rozvojem kolem sedlového bodu v parametru b.

III. Teorie středního pole pro kritické jevy

§ III.1 Weissovo řešení Isingova modelu

Kritické jevy v statistických soustavách vedou na neanalytické chování a singularity v dvoubodové Greenově funkci, propagátoru. To tedy znamená, že v kritické oblasti, tj. v blízkosti kritického bodu, poruchová teorie selhává a nekonverguje. V kritické oblasti tedy buď'to najdeme přesné řešení, nebo alespoň se nám podaří najít nějaké neporuchové řešení, které alespoň kvalitativně správně popíše kritické chování kolem kritického bodu. Jelikož exaktní řešení je nedostupné pro realistické modely a situace, potom nám zůstává pouze druhá možnost, tj. konstrukce neporuchového přibližného řešení. Nejjednodušším takovým řešením statistických modelů je tzv. teorie středního pole. První takovou teorii pro spinový magnetismus

(Isingův model) navrhnul P. E. Weiss. Tato teorie rozšířená L. D. Landauem byla po dlouhou dobu jedinou teorií fázových přechodů. Dodnes tato teorie slouží jako první krok v systematickém popisu 'klasických kritických jevů a fázových přechodů.

Existuje několik způsobů odvození Weissova řešení (středního pole) pro Isingův model. V tomto paragrafu použijeme limitu nekonečně dosahové interakce, kde předpokládáme, že teorie středního pole se stane přesnou.

Isingův hamiltonián zapíšeme v následujícím tvaru:

$$\mathcal{H} = -\frac{\epsilon}{2N}\sum_{i\neq j} S_i S_j - B\sum_i S_i$$

a partiční sumu

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \exp\left\{\frac{\beta\epsilon}{2N}\left(\sum_i S_i\right)^2 - \frac{\beta\epsilon}{2} + \beta B\sum_i (S_i)\right\}.$$

Kvadrát celkového spinu linearizujeme pomocí vztahu

$$e^{a^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dy\, \exp\left\{-\frac{1}{2}y^2 + \sqrt{2}\,a y\right\}$$

Tzn.

(III.1)
$$Z = \frac{e^{-\beta\epsilon/2}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy\, e^{-\frac{y^2}{2}} \sum_{\{S_i\}} \exp\{(y\left(\frac{\beta\epsilon}{N}\right)^{1/2} + \beta B) \sum_i S_i\}$$

$$= e^{-\frac{\beta\epsilon}{2}} \sqrt{\frac{\beta N\epsilon}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \exp\{N\{-\frac{\beta\epsilon}{2}\lambda^2 + \ln 2\cosh[\beta(B+\lambda\epsilon)]\}\} + O(N^{-1})$$

kde jsme použili substituci $\lambda = \frac{y}{\sqrt{\beta N\epsilon}}$.

V termodynamické limitě $N \to \infty$ je hlavním a jediným příspěvkem do partiční sumy hodnota integrandu v sedlovém bodě, tj. volná energie v sedlovém bodě je

(III.2)
$$\boxed{F(\lambda) = \frac{\epsilon}{2}\lambda^2 - \beta^{-1} \ln 2\cosh[\beta(B+\lambda\epsilon)]}$$

Toto je volná energie Weissova řešení, neboli středního pole, Isingova modelu. Parametr λ je magnetizace modelu a splňuje rovnici středního pole:

(III.3)
$$\lambda = \tanh[\beta(B+\lambda\epsilon)].$$

Tato rovnice vede na vznik spontánní magnetizace a tedy fázového přechodu z para do feromagnetického stavu jestliže $(h=0)$

$$1 \le \beta\epsilon \qquad (\text{II}.4)$$

Kritické chování v přiblížení teorie středního pole budeme analyzovat později v rámci Landauovy teorie středního pole. Zde jen připomeneme, že Weissovo střední pole odpovídá v rozvoji do uzavřených smyček nultému přiblížení, tj. sumě všech stromových diagramů.

§II.2 Hartreeho-Fockovo variační střední pole

Kromě toho, že střední pole je prvním a nejjednodušším přiblížením pro popis kritických jevů, má střední pole ještě jednu význačnou vlastnost. Volná energie středního pole je exaktní horní mez pro volnou energii (Isingova) modelu. Variační odvození teorie středního a tedy fázového přechodu z para do feromagnetického stavu jestliže (h=0)

$$1 \le \beta\epsilon \tag{II.4}$$

Kritické chování v přiblížení teorie středního pole budeme analyzovat později v rámci Landauovy teorie středního pole. Zde jen připomeneme, že Weissovo střední pole odpovídá v rozvoji do uzavřených smyček nultému přiblížení, tj. sumě všech stromových diagramů.

§II.2 Hartreeho-Fockovo variační střední pole

Kromě toho, že střední pole je prvním a nejjednodušším přiblížením pro popis kritických jevů, má střední pole ještě jednu význačnou vlastnost. Volná energie středního pole je exaktní horní mezí pro volnou energii (Isingova) modelu. Variační odvození teorie středního je obecné a není specifické pro Isingův model.

Ve variačním odvození teorie středního pole, které je totožné s Hartreeho-Fockovou aproximací v mnohočásticových modelech, předpokládáme, že celkový hamiltonián lze zapsat ve tvaru

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I$$

přičemž termodynamika generovaná „neporušeným" hamiltoniánem $\mathcal{H}_0$ je explicitně známa. Označme

$$\langle X \rangle_0 = \frac{1}{\mathrm{Tr}\, e^{-\beta \mathcal{H}_0}} \mathrm{Tr}\{ e^{-\beta \mathcal{H}_0} X \}$$

Z konvexnosti exponenciály plyne

$$\langle \exp\{-\beta(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I)\} \exp\{\beta \mathcal{H}_0\} \rangle_0 \geq$$

$$\geq \exp\{-\beta \langle \mathcal{H}_I \rangle_0\}$$

Logaritmováním této nerovnosti dostaneme

$$\ln \langle \exp\{-\beta(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I)\} \exp\{\beta \mathcal{H}_0\} \rangle_0 \geq -\beta \langle H_I \rangle$$

Po snadné úpravě a z definice volné energie dostaneme

(III.5) $$F \leq F_0 + \langle \mathcal{H}_I \rangle_0$$

Tato Gibbsova-Bogoljubovova nerovnost ještě není teorií středního pole. Ta se získá tím, že pomocí parametrizace pravé strany a minimalizací nerovnosti (III.5) dostaneme nejlepší horní mez na volnou energii v rámci systému volných parametrů, které definují makroskopický pozorovaný prostor. Weissovo řešení získáme z minimalizace pravé strany (III.5) s následující volbou

(III.6)
$$\mathcal{H}_0 = +\frac{\epsilon}{2} N m^2 - BNm - \epsilon m z \sum_i \sigma_i - B \sum_i \sigma_i$$

$$\mathcal{H}_I = -\epsilon \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

kde $0 \leq m \leq 1$ je variační parametr a nové spiny $\hat{\sigma}_i$ mají velikost $1-m$. Rozklad (III.6) použít v (III.5) a minimalizovat vzhledem k možné volbě parametru m vede na Weissovo řešení.

Rozklad na neporuchový hamiltonián H_0 a poruchu H_I a zanedbání termodynamických fluktuací generovaných H_I je Hartreeho-Fockova aproximace. Zde je názorný význam středního pole, tj. aktivní spin interaguje pouze s termodynamicky vystředovanými $\underline{m}$.

§II.3 Limita nekonečně rozměrné mřížky

Moderní pojetí teorie středního pole charakterizuje tato aproximaci jako asymptotickou limitu statistického modelu s nekonečným počtem nejbližších sousedů. V tomto přístupu teorie středního pole neodpovídá modelu s nekonečnědosahovou interakcí. Interakce je sice krátkodosahová, pouze nejbližší sousedé, ale počet nejbližších sousedů roste nade vše meze. Tato definice teorie středního pole je nejobecnější a zahrnuje v sobě i zobecnění na kvantové modely, kde se poukazuje, že tato definice není identická

Rozklad na neporuchový hamiltonián H_0 a poruchu H_I a zanedbáním termodynamických fluktuací generovaných H_I je Hartreeho-Fockova aproximace. Zde je názorný význam středního pole, tj. aktivní spin interaguje pouze s termodynamicky vystředovanými $\underline{m}$.

§ III.3 Limita nekonečně rozměrné mřížky

Moderní pojetí teorie středního pole charakterizuje tuto aproximaci jako asymptotickou limitu statistického modelu s nekonečným počtem nejbližších sousedů. V tomto přístupu teorie středního pole neodpovídá modelu s nekonečnědosahovou interakcí. Interakce je stále krátkodosahová, pouze nejbližší sousedé, ale počet nejbližších sousedů roste nade vše meze. Tato definice teorie středního pole je nejobecnější a zahrnuje v sobě i zobecnění na kvantové modely, kde se poukazuje, že tato definice není identická s aproximací Hartreeho-Focka.

Abychom mohli provést limitu nekonečně rozměrné mříže, je nutné přeškálovat nelokální veličiny v hamiltoniánu. Toto přeškálování je potřebné z důvodu, aby energie systému zůstala úměrná objemu, tj. byla konečná pro konečné objemy. Toto škálování nelokálních veličin není univerzální, neboť závisí na způsobu, jakým nelokální veličiny přispívají do totální energie. Proto konstrukce modelu v limitě nekonečně rozměrné mříže je analýza nelokálního příspěvku totální energie. V případě Isingova modelu máme:

(III.7) $$U \propto -\epsilon z m^2 N - \epsilon^2 z N \chi_1$$

kde z je počet nejbližších sousedů, m je střední magnetizace a χ_1 je projekce susceptibility na nejbližší soused. Ve feromagnetické fázi, $m>0$, přispívá první člen na pravé straně. Abychom zabránili divergenci energie s $n \to \infty$, musíme přeškálovat spinovou výměnu $\epsilon = -J \to \epsilon^*/n$, kde ϵ^* je fixní v limitním procesu $n \to \infty$. V některých modelech (itinerantní fermionové modely) první člen z pravé strany (IV.7) je identicky nulový, a proto netriviální škálování v limitě $n \to \infty$ vede na $\epsilon \to \epsilon/\sqrt{n}$. Takové škálování by např. bylo možné ve vysokoteplotní fázi. Ale vznik dalekodosahového uspořádání, či zapnutí magnetického pole by vedly na nekonečné změny totální energie, což je evidentně nefyzikální. Proto jediným možným škálováním v Isingově modelu je $\epsilon \to \epsilon^*/n$. V tomto škálování potom analýzou diagramů přispívajících do fyzikálních veličin (vrcholových funkcí) snadno zjistíme, že stromové diagramy přispívají faktorem $O(1)$, kdežto uzavřené smyčky faktory $O(n^{-1})$ a nižšími: Suma všech stromových diagramů vede na Weissovo řešení, neboť po transformaci $S_i \to \sigma_i + m$ dostaneme, že $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \propto O(z^{-1})$ pro $i \neq j$. Tudíž Hartreeho aproximace dává dominantní příspěvek do volné energie, $\langle H_I \rangle_0 = 0$. Limita $d \to \infty$ ($z \to \infty$) je identická s Hartreeho aproximací pouze tehdy, pokud nelokální členy se škálují ϵ^*/z. Netriviální teorie středního pole vznikne, jestliže nelokálnosti mohou škálovat $\epsilon^*/\sqrt{z}$. To nastává např. v modelech spinových skel ($\langle J_{ij} \rangle = 0$) nebo v Hubbardově modelu.

§ III.4 Landauova teorie středního pole a kritické chování v přiblížení středního pole

Teorie středního pole odvozené v předchozích paragrafech jsou globální teorie, které dávají hrubý obraz termodynamického chování statistického modelu v celém rozsahu parametrů. Naším cílem v tomto přiblížení nyní je popsat celkový neboť po transformaci $S_i \to \sigma_i + m$ dostaneme, že $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \propto O(z^{-1})$ pro $i \neq j$. Tudíž Hartreeho aproximace dává dominantní příspěvek do volné energie, $\langle H_I \rangle_0 = 0$. Limita $d \to \infty$ ($z \to \infty$) je identická s Hartreeho aproximací pouze tehdy, pokud nelokální členy se škálují ϵ^*/z. Netriviální teorie středního pole vznikne, jestliže nelokálnosti musí škálovat $\epsilon^*/\sqrt{z}$. To nastává např. v modelech spinových skel ($\langle J_{ij} \rangle = 0$) nebo v Hubbardově modelu.

§ II.4 Landauova teorie středního pole a kritické chování v přiblížení středního pole

Teorie středního pole odvozené v předchozích paragrafech jsou globální teorie, které dávají hrubý obraz termodynamického chování statistického modelu v celém rozsahu parametrů. Naším cílem v tomto okamžiku však není řešit celkový obraz o statistickém modelu, nýbrž popsat kvalitativně správně kritické chování modelu a singularity s ním spojené. Jak jsme viděli na příkladu Isingova modelu v $d=1$, v kritickém bodě diverguje magnetická susceptibilita, neboli korelační funkce. Z definice vrcholových funkcí potom plyne, že dvoubodová vrcholová funkce prochází nulou, tj. efektivní hmota kritických excitací μ^2 vymizí v bodě přechodu. Pokud chceme získat obraz chování modelu pouze v blízkosti fázového přechodu, není nutné uvažovat teorii středního pole se všemi kvantitativními detaily. Kritické chování a kritické exponenty stejně tak dobře vidíme z Landauovy teorie středního pole. V této teorii uvažujeme pouze rozvoj Gibbsovy volné energie $\Gamma[\varphi]$ do nejnižších mocnin parametru uspořádání. Prvním krokem Landauovy teorie středního pole je znalost parametru uspořádání, který v našem případě je pole φ. Volná energie závisí pouze na sudých mocninách parametru uspořádání, neboť $\delta\Gamma(\varphi)/\delta\varphi = 0$. Abychom vůbec mohli získat rovnici pro parametr uspořádání, musíme rozvinout $\Gamma[\varphi]$ do dvou nejnižších mocnin φ, tj. musíme zachovat kvadratický a kvartický příspěvek do volné energie. Tj. volná energie v Landauově teorii má tvar:

(III.8) $$\Gamma_L[\varphi] \approx \Gamma_0 + \Gamma_2 \varphi^2 + \Gamma_4 \varphi^4$$

kde $\Gamma_0, \Gamma_2, \Gamma_4$ jsou parametry, které známe buď to z mikroskopické teorie nebo z fenomenologických úvah. Z předchozího víme, že Γ_2 a Γ_4 jsou hodnoty vrcholových funkcí, kde všechny hybnosti jsou rovny nule, pokud se jedná o homogenní uspořádání.

Landauova teorie středního pole má přirozené odvození v LGW formulaci. V tomto přístupu je Landauova teorie středního pole přiblížením sedlového bodu. Tj. v Landauově teorii zanedbáme všechny fluktuace parametru uspořádem. Tj. partiční funkci v Landauově aproximaci můžeme zapsat

(III.9) $$Z_{LG} = \int \mathcal{D}\phi \, \exp\{-\int d^d x \, \mathcal{H}_{LG}[\phi]\} \approx A \exp\{-\int d^d x \, \mathcal{H}_{LG}[\phi_0]\}$$

kde A je nepodstatná konstanta a ϕ_0 hodnota parametru uspořádání. Jelikož ani efektivní hmota, ani interakce nezávisí na souřadnicích, $\vec{\nabla}\phi_0 = 0$. Můžeme tudíž psát

$$\int d^d x \, \mathcal{H}_{LG}[\phi_0] = V\left(\frac{1}{2}\mu^2\phi_0^2 + \frac{\lambda}{4!}\phi_0^4 - H\phi_0\right)$$

kde V je objem vzorku. Ze stacionarity volné energie dostaneme rovnici pro parametr uspořádání:

(III.10) $$\mu^2\phi_0 + \frac{\lambda}{3!}\phi_0^3 - H = 0$$

V blízkosti kritického bodu máme $\mu^2 = \frac{1}{\beta\epsilon}(1-\beta\epsilon)$. Pro případ $H=0$ dostaneme:

(III.11) $$\phi_0^2 = \begin{cases} 0 & \text{pro } \beta J < 1 \\ -\frac{6\mu^2}{\lambda} & \text{pro } \beta J > 1 \end{cases}$$

V teplotní závislosti dostaneme

(III.12) $$\phi_0 = \sqrt{\frac{6 k_B}{\lambda\epsilon}(T_c - T)} \, , \quad T_c = \frac{\epsilon}{k_B}$$

Volná energie v blízkosti kritického bodu je

(III.13) $$\beta f = f_0 - \theta(T_c - T)\,\frac{3\mu^4}{2\lambda} = f_0 - \theta(T_c - T)\,\frac{3k_B^2}{2\lambda^2}(T_c - T)^2$$

Z volné energie odvodíme vnitřní energii:

(III.14) $$U = -\theta(T_c - T)\left[\frac{3\mu^2}{\lambda}\frac{d\mu^2}{d\beta} - \frac{3\mu^4}{2\lambda^2}\frac{d\lambda}{d\beta}\right]$$

Měrné teplo je v kritickém bodě

(III.15) $$k_B c_V\Big|_{\mu^2=0} = -\beta^2 \frac{dU}{d\beta}\Big|_{\mu^2=0} = \begin{cases} 0 & T = T_{c+} \\ \dfrac{3\beta^2}{\lambda}\left(\dfrac{d\mu^2}{d\beta}\right)^2 = \dfrac{3}{\lambda} & T = T_{c-} \end{cases}$$

Diferencováním rovnice (III.10) podle vnějšího pole H

dostaneme susceptibilitu $\chi = \partial\phi/\partial H$:

$$\left(\mu^2 + \frac{\lambda}{2}\phi_0^2\right)\chi = 1$$

Tj.

(III.16) $$\chi_{H=0} = \begin{cases} \dfrac{1}{\mu^2} = \dfrac{1}{k_B}\,\dfrac{1}{T - T_c} & T > T_c \\ \dfrac{1}{-2\mu^2} = \dfrac{1}{2k_B}\,\dfrac{1}{T_c - T} & T < T_c \end{cases}$$

Posledním kritickým chováním je závislost parametru uspořádání na vnějším poli v kritickém bodě. Z (III.10) pro $\mu^2 = 0$ dostaneme:

(III.17) $$\phi_0 \approx \left(\frac{6}{\lambda} H\right)^{1/3}$$

Z výše uvedených vztahů získáme následující kritické exponenty:

Parametr uspořádání : $\beta = \frac{1}{2}$, $\phi \propto \theta^{\beta}$

korelační délka : $\nu = \frac{1}{2}$, $\chi \sim \xi^{2} \sim \theta^{-1}$

korelační funkce : $\gamma = 1$, $\chi \sim \theta^{-\gamma}$

měrné teplo $\alpha = 0$, $C_v \approx \theta^{-\alpha}$

magnetické pole $\delta = 3$, $H \approx m^{\delta}$

Tímto výčtem kritických exponentů jsme úplně vyčerpali kritické chování, tj. neanalytičnost, teorie středního pole. Obecně existuje ještě jeden kritický exponent, anomální dimenze, která charakterizuje závislost korelační funkce $G^{(2)}(k) \sim k^{\eta-2}$. Jelikož střední pole, magnetizace, ϕ_0 nezávisí na souřadnici, hybnosti, potom anomální dimenze je nula v teorii středního pole. Snadno se přesvědčíme, že globální (úplná) teorie středního pole nemění kritické exponenty Landauovy teorie.

IV. Škálovací hypotéza a teorie renormalizace

§IV.1 Škálovací hypotéza a spojitý limit

Kritické body jakožto singularity v korelační funkci komplikují popis kritického chování a fázových přechodů. Na druhé straně existence divergencí vede na zjednodušené chování, neboť fyzikální veličiny v blízkosti kritických bodů závisí pouze na dlouhovlnných fluktuacích a nezávisí na "mikroskopické" struktuře mříže. Zjednodušená závislost fyzikálních veličin na vnějších parametrech v kritické oblasti vedou na menší počet relevantních parametrů charakterizujících kritické chování. Snížený počet relevantních parametrů má za následek tzv. škálovací chování fyzikálních veličin. Takové chování bylo nejdříve pozorováno experimentálně, pak bylo formulováno jako hypotéza a později odvozeno z prvních principů mikroskopických modelů. My budeme akceptovat škálovací chování bez důkazu.

Widomova škálovací hypotéza říká, že hustota volné energie v blízkosti kritického bodu $T \to T_c$ se chová

(IV.1) $$f(T,B) = \theta^{1/y}\varphi\left(\frac{B}{\theta^{x/y}}\right)$$

kde $\theta = (T-T_c)/T_c$, x, y jsou kritické exponenty.

Kadanoffova škálovací hypotéza zase říká, že dvoubodová korelační funkce v blízkosti kritického bodu má tvar:

(IV.2) $$G_c^{(2)}(r,\theta) = \frac{\psi(r^d\theta^{2-\alpha})}{r^{d-2+\eta}}$$

kde opět α, η jsou kritické exponenty. Funkce φ a ψ jsou vhodné funkce závislé na modelu.

Tyto dvě škálovací hypotézy omezují nezávislost kritických exponentů. Pomocí (IV.1) a (IV.2) odvodíme vztahy mezi některými exponenty. Nejdříve určíme chování parametru uspořádání:

$$m|_{B=0} = -\left(\frac{\partial f}{\partial B}\right)_T = -\left(\frac{t^{1/y}}{t^{x/y}}\right)\varphi'(0)$$

Odtud získáme kritický exponent β:

(IV.3) $$\beta = \frac{1-x}{y},$$

Podobně susceptibilita je

$$\chi\Big|_{B=0} = -\left(\frac{\partial^2 f}{\partial B^2}\right)_T = \theta^{(1-2x)/y}\,\varphi''(0)$$

tzn.,

(IV.4) $$\gamma = \frac{2x-1}{y}.$$

Dále můžeme ještě určit měrné teplo:

$$C_B = -T\left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2}\right)_B \simeq -\frac{1}{T_c}\,\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\left[\theta^{1/y}\,\varphi\left(\frac{B}{\theta^{x/y}}\right)\right]$$

$$= -\frac{\varphi(0)}{T_c}\,\frac{1}{y}\left(\frac{1}{y}-1\right)\theta^{(1/y-2)}$$

Odtud

(IV.5) $$\alpha = 2 - \frac{1}{y}$$

Parametr δ získáme ze závislosti magnetizace na B o $T=T_c$:

$$m\Big|_{T=T_c} = -\left(\frac{\partial f}{\partial B}\right)_T = \frac{\partial}{\partial B}\left[B^{1/x}\,\tilde\varphi\left(B/\theta^{x/y}\right)\right], \quad \tilde\varphi(z) \equiv z^{-x}\varphi(z).$$

$$= \frac{\tilde\varphi(\infty)}{x}\,B^{\left(\frac{1}{x}-1\right)}$$

(IV.6) $$\delta = \frac{x}{1-x}$$

Kombinací rovnic (IV.3) – (IV.6) dostaneme

Rushbrookův a Griffithův vztah

(IV.7) $$\boxed{\alpha + 2\beta + \gamma = 2}$$

(IV.8) $$\boxed{\alpha + \beta(\delta+1) = 2}$$

Z Kadanoffova škálovacího chování získáme další vztahy mezi kritickými exponenty. Platí:

$$r^d \theta^{2-\alpha} \sim r^d \xi^{-d} \sim r^d \theta^{+\nu d}$$

(IV.9) $$\boxed{2-\alpha = \nu d}$$

Dále

$$\chi = \int G_c^{(2)}(r)\, d^d r \propto \xi^{(2-\eta)} \int d^d x \, \frac{\psi(\cancel{x}\sigma)}{x^{d-2+\eta}} \propto \theta^{-\gamma}$$

tzn.

(IV.10) $$\boxed{\gamma = \nu(2-\eta)}$$

Rovnice (IV.9) a (IV.10) jsou Josephsonův a Fisherův vztah.

Kadanoffův škálovací zákon je významný ještě z jednoho důvodu. Říká vlastně, že souřadnice $\vec{r}$ vystupuje v kritické oblasti pouze ve formě $x = r/\xi$. Tzn. v kritické oblasti jednotkou délky tedy není meziatomová vzdálenost, ale korelační délka ξ. Všechny divergence v teorii jsou potom obsaženy v závislosti na korelační délce ξ. Existuje tedy jediný parametr $\xi = m^{-1}$, pomocí kterého můžeme faktorizovat všechny divergence spojené s kritickým bodem. Taková teorie se nazývá jednoparametrické kritické chování.

§IV.2 Renormalizace parametrů LGW modelu

Cílem teorie středního pole bylo popsat neporuchové kritické chování a fázové přechody statistických modelů. Motivací k tomuto přístupu je reformulace PT tak, abychom rozvíjeli pouze regulární veličiny, pro které poruchová řada konvergují. Problémem teorie středního pole však je, že tato aproximace nepostihuje všechny divergence modelu, a tudíž rozvoj (do konečných součtů) za teorii středního pole je stále singulární. Proto je potřeba provést další reorganizaci jednotkou délky tedy není meziatomová vzdálenost, ale korelační délka ξ. Všechny divergence v teorii jsou potom obsaženy v závislosti na korelační délce ξ. Existuje tedy jediný parametr $\xi = m^{-1}$, pomocí kterého můžeme faktorizovat všechny divergence spojené s kritickým bodem. Taková teorie se nazývá jednoparametrické kritické chování.

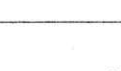
§IV.2 Renormalizace parametrů LGW modelu

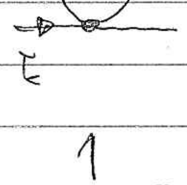
Cílem teorie středního pole bylo popsat neporuchové kritické chování a fázové přechody statistických modelů. Motivací k tomuto přístupu je reformulace PT tak, abychom rozvíjeli pouze regulární veličiny, pro které poruchová řada konverguje. Problémem teorie středního pole však je, že tato aproximace nepostihuje všechny divergence modelu, a tudíž rozvoj (do uzavřených smyček) za teorii středního pole je stále singulární. Proto je potřeba provést další reorganizaci poruchového rozvoje, abychom opět dostali divergentní členy pod kontrolu. Tato reorganizace PT je obsažena v renormalizaci parametrů LGW modelu, tj. nahrazení holých parametrů renormalizovanými.

Ve spojité limitě LGW modelu se v PT za Landauovu teorií středního pole vyskytují dva typy divergencí: ultrafialové spojené s velkými hybnostmi a infračervené spojené s malými hybnostmi v kritickém bodě $\mu^2=0$. Tyto divergence závisí různým způsobem na prostorové dimenzi modelu.

Ultrafialové divergence:

Typickým příkladem ultrafialové divergence je jednosmyčkový příspěvek do dvoubodové vrcholové funkce:

$\Gamma^{(2)}(\vec{k}) = ($ 

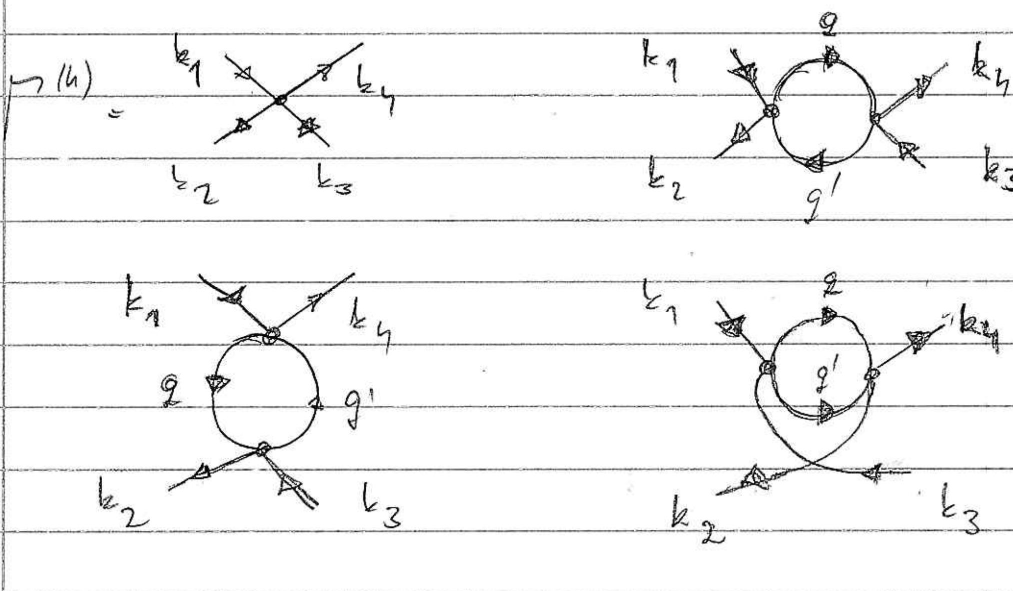
$)^{-1} +$ 

$$\Gamma^{(2)}(\vec{k}) = \mu^2 + \alpha^2 \vec{k}^2 + \frac{\lambda}{2}\int_0^{\Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d}\,\frac{1}{\alpha^2 q^2 + \mu^2} + O(\lambda^2) \qquad \text{(IV.11)}$$

Ze vztahu (IV.11) snadno zjistíme, že v $d \geq 2$ integrál přes hybnost q diverguje jestliže $\Lambda \to \infty$. Tj. abychom se vyhnuli ultrafialovým divergencím, musíme v PT pracovat s konečným "cutoffem", který efektivně ořezává vysoké hybnosti. Tj. LGW model je mřížkový model pouze s rotačně invariantní Brillouinovou zónou a s Brillouinovou hybností Λ. Smysl spojitého LGW modelu tkví v tom, že výsledná teorie, relevantní fyzikální veličiny nezávisí na výběru ořezávací velikosti hybnosti. Tuto nezávislost nazýváme univerzálním chováním. Dále v tomto paragrafu ukážeme, že pro $d \leq 4$ se zbavíme závislosti na ultrafialovém ořezání zbavíme renormalizací parametrů LGW modelu, tj. přechodem $\mu^2 \to m^2$, $\alpha^2 \to a^2$, $\lambda \to g$.

Infračervené divergence:

Na rozdíl od ultrafialových divergencí, které vzniknou díky zanedbání krátkodosahové struktury mřížky a jsou tedy fyzikem, infračervené divergence jsou reálné a nelze se jich zbavit žádnou transformací či renormalizací PT. Typickým příkladem infračervené divergence jsou jednosmyčkový příspěvek do čtyřbodové vrcholové funkce $\Gamma^{(4)}$:



Tři jednosmyčkové diagramy odpovídají třem rozptylovým kanálům mnohočásticové teorie. Matematická reprezentace těchto příspěvků je

$$\Gamma_c^{(4)}(\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3) = \lambda\left\{1 - \frac{\lambda}{2}\int^{\Lambda}\frac{d^d q}{(2\pi)^d}\,\frac{1}{\alpha^2 q^2+\mu^2}\left[\frac{1}{\alpha^2(\vec{q}-\vec{k}_1+\vec{k}_2)^2+\mu^2} + \frac{1}{\alpha^2(\vec{q}+\vec{k}_3-\vec{k}_2)^2+\mu^2} + \frac{1}{\alpha^2(\vec{k}_1+\vec{k}_3-\vec{q})^2+\mu^2}\right]\right\} \tag{IV.12}$$

V kritickém bodě, $\mu \to 0$, integrál (IV.12) diverguje pro $\xi_1, \xi_2, \xi_3 \to 0$ v rozměrech $d \le 4$. Tato fyzikální divergence není obsažena v teorii středního pole, Tzn. teorie středního pole nemůže popisovat správně kritické chování pro $d \le 4$, tj. pod horní kritickou dimenzí. Tato neúplnost teorie středního pole v popisu kritického chování vede na nutnost renormalizace parametrů LGW modelu, tj. na systematické nahrazení holých parametrů jejich fyzikálními konstantami. Renormalizací parametrů modelu se zbavíme ultrafialových divergencí. Infračervené divergence dostaneme pod kontrolu faktorizací divergentního příspěvku.

A) Renormalizace hmoty

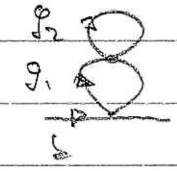
Renormalizovaná hmota LGW modelu je definována z dvoubodové vrcholové funkce

(IV.13) $$m^2 = \Gamma^{(2)}(0) = \mu^2 + O(\lambda)$$

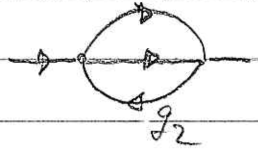
Cílem renormalizace hmoty je nahradit ve všech výrazech holý parametr μ^2 renormalizovanou hmotou m^2. Tuto renormalizaci budeme provádět člen po členu v rozvoji do uzavřených smyček, což je ekvivalentní rozvoji v interakční konstantě. Explicitně provedeme renormalizaci hmoty do dvou smyček.

V řádu $O(\lambda^2)$ máme

$\Gamma^{(2)}(k) = \dots +$



$+$



což po započtení kolečka a jednosmyčkového příspěvku dává

$$\Gamma^{(2)}(k) = \mu^2 + \alpha^2 k^2 + \frac{\lambda}{2}\int_0^1 \frac{d^d q}{(2\pi)^d}\,\frac{1}{\alpha^2 q^2 + \mu^2} \tag{V.14}$$

$$- \frac{\lambda^2}{4}\int_0^1 \frac{d^d q_1}{(2\pi)^d}\,\frac{d^d q_2}{(2\pi)^d}\,\frac{1}{(\alpha^2 q_1^2 + \mu^2)^2(\alpha^2 q_2^2 + \mu^2)}$$

$$- \frac{\lambda^2}{6}\int_0^1 \frac{d^d q_1\, d^d q_2}{(2\pi)^{2d}}\,\frac{1}{(\alpha^2 q_1^2 + \mu^2)(\alpha^2 q_2^2 + \mu^2)\left[\alpha^2(k - q_1 + q_2)^2 + \mu^2\right]}$$

$$= \mu^2 + \alpha^2 k^2 - \frac{\lambda^2}{6}\,\mathcal{S}A(k)$$

kde jsme použili definici renormalizované hmoty, tj. výsledek z k-nezávislých členů. Přitom

(IV.15)
$$\Delta A(k) = \int_0^\Lambda \frac{d^d q_1\, d^d q_2}{(2\pi)^{2d}} \frac{1}{\alpha^2 q_1^2 + \mu^2} \frac{1}{\alpha^2 q_2^2 + \mu^2} \left[\frac{1}{\alpha^2 (\vec{k} - \vec{q}_1 + \vec{q}_2)^2 + \mu^2} - \frac{1}{\alpha^2 (\vec{q}_1 - \vec{q}_2)^2 + \mu^2} \right]$$

$$\Delta A(k) = \int_0^\Lambda \frac{d^d q_1\, d^d q_2}{(2\pi)^{2d}} \frac{\left(-\alpha^2 k^2 + 2\alpha^2 \vec{k}\cdot\vec{Q} \right)}{(\alpha^2 q_1^2 + \mu^2)(\alpha^2 q_2^2 + \mu^2)(\alpha^2 Q^2 + \mu^2)\left[\alpha^2 (\vec{k} - \vec{Q})^2 + \mu^2\right]}$$

kde jsme označili $\vec{Q} = \vec{q}_1 - \vec{q}_2$.

Vztah mezi holým parametrem μ^2 a renormalizovanou hmotou m^2 v řádu $O(\lambda^2)$ tedy je

(IV.16)
$$m^2 = \mu^2 + \frac{\lambda}{2} \int_0^\Lambda \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{\alpha^2 q^2 + \mu^2} - \frac{\lambda^2}{4} \left[\int_0^\Lambda \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{\alpha^2 q^2 + \mu^2} \right]^2 - \frac{\lambda^2}{6} \int_0^\Lambda \frac{d^d q_1\, d^d q_2}{(2\pi)^{2d}} \frac{1}{(\alpha^2 q_1^2 + \mu^2)(\alpha^2 q_2^2 + \mu^2)\left[\alpha^2 (\vec{q}_1 - \vec{q}_2)^2 + \mu^2\right]}$$

Rozvoj na pravé straně můžeme invertovat a rozvinout do řádu λ^2 μ^2 v závislosti na m^2.

(IV.17)
$$\mu^2 = m^2 - \frac{\lambda}{2} \int_0^\Lambda \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{\alpha^2 q^2 + m^2} + \frac{\lambda^2}{6} \int_0^\Lambda \frac{d^d q_1\, d^d q_2}{(2\pi)^{2d}} \frac{1}{(\alpha^2 q_1^2 + m^2)(\alpha^2 q_2^2 + m^2)(\alpha^2 Q^2 + m^2)}$$

Analogicky získáme pro dvoubodovou vrcholovou funkci:

$$\Gamma^{(2)}(k) = m^2 + \alpha^2 k^2 - \frac{\lambda^2}{6}\int_0^{\Lambda}\frac{d^d q_1 d^d q_2}{(2\pi)^{2d}}\,\frac{(-\alpha^2 k^2 + 2\alpha^2 \vec{k}\cdot\vec{Q})}{(\alpha^2 q_1^2+\mu^2)(\alpha^2 q_2^2+m^2)(\alpha^2 Q^2+m^2)[\alpha^2(\vec{k}-\vec{Q})^2+m^2]} \qquad \text{(IV.18)}$$

Výhodou nové reprezentace (IV.18) pro dvoubodovou vrcholovou funkci je, že pro $d<4$ integrál nediverguje ani v limitě $\Lambda\to\infty$. V renormalizované PT pro $\Gamma^{(2)}(k)$ lze tedy volit $\Lambda=\infty$. Explicitně výpočet jsme sice provedli pouze do řádu $O(\lambda^2)$, ale totéž platí i o vyšších řádech rozvoje do počtu uzavřených smyček.

B) Renormalizace kinetického členu

Renormalizace hmoty, tj. systematické nahrazení $\mu^2\to m^2$ ve všech výrazech PT potlačilo závislost fyzikálních veličin v kritické oblasti na parametru ořezání Λ, pro $d<4$. V dimenzi $d=4$ integrál v (IV.18) stále ještě obsahuje logaritmickou ultrafialovou singularitu. Té se zbavíme renormalizací kinetického členu, tj. nahrazením $\alpha^2\to a^2$. Renormalizovaný kinetický člen je definován:

(IV, 19) $$a^2 = \frac{d\Gamma^{(2)}}{dk^2}\Big|_{k=\kappa}$$

kde $\vec{\kappa}$ je libovolný zvolený vektor ve kterém budeme provádět renormalizaci kinetického členu. V tomto kroku nelze zvolit $\vec{\kappa}=\vec{0}$, neboť dvoubodová vrcholová funkce má chování $\Gamma^{(2)}(k) \propto k^{2-\eta}$ $\eta>0$ pro $d<4$ a tudíž derivace v (IV.19) diverguje v $d\leq 4$.

Obdobně jako při renormalizaci hmoty nahradíme systematicky všude holý parametr α renormalizovaným a.

Do druhého řádu v interakční konstantě a s použitím renormalizace hmoty dostaneme:

(IV. 20) $$a^2 = \alpha^2 + \frac{\lambda^2}{6}\int_0^\Lambda \frac{d^dq_1\,d^dq_2}{(2\pi)^{2d}}\,\frac{\alpha^2\kappa^2 - \alpha^2\vec{\kappa}\cdot\vec{Q}}{(\alpha^2q_1^2+m^2)(\alpha^2q_2^2+m^2)\,\kappa^2\left[\alpha^2(\vec{\kappa}-\vec{Q})^2+m^2\right]^2}$$

Dvoubodová vrcholová funkce pak v renormalizované podobě má tedy tvar

(IV. 21) $$\Gamma^{(2)}(k) = m^2 + k^2\left(a^2 - \frac{\lambda^2}{6}B(k,\kappa)\right)$$

$$B(k,\kappa) = \frac{1}{k^2}\,\Delta A(k) - \frac{dA}{dq^2}\Big|_{\kappa^2,\alpha^2=a^2}$$

$$B(k,\kappa) = \int_0^\Lambda \frac{d^d q_1 d^d q_2}{(2\pi)^{2d}} \frac{1}{(a^2 q_1^2 + m^2)(a^2 q_2^2 + m^2)} \left[\frac{-a^2 k^2 + 2a^2 \vec{k}\cdot\vec{Q}}{[a^2(\vec{k}-\vec{Q})^2 + m^2][a^2 Q^2 + m^2]} \frac{1}{k^2} \right.$$

$$\left. - \frac{a^2 \kappa^2 - a^2 \vec{\kappa}\cdot\vec{Q}}{[a^2(\vec{\kappa}-\vec{Q})^2 + m^2]^2 \kappa^2} \right]$$

Integrál $B(k,\kappa)$ již nemá ultrafialovou divergenci pro $d<6$ a lze tedy položit $\Lambda=\infty$ ve vyjádření pro $\Gamma^{(2)}(k)$.

C) Renormalizace náboje (interakční konstanty)

Poslední veličinou v poruchovém rozvoji, kterou musíme renormalizovat je interakční konstanta λ. Fyzikální interakční konstanta je přitom definována z čtyřbodové vrcholové funkce

(IV.22) $$g = \Gamma^{(4)}(0,0,0)$$

Rozvoj vrcholové funkce do řádu $O(\lambda^2)$ byl vyjádřen v (IV.12). Tento integrál diverguje logaritmicky $(k\to\infty)$ v $d=4$ stejně jako integrál $\delta A(k)$. Proto nahradíme rozvoj v λ rozvojem v renormalizované interakční konstantě g. Výraz pro $\Gamma^{(4)}$

napíšeme ve tvaru:

$$\Gamma^{(4)}(\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3) = \Gamma^{(4)}(\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3) - \Gamma^{(4)}(0,0,0) + g$$

přičemž pravou stranu rozvineme do mocnin interakční konstanty. V řádu $O(\lambda^2)$ z (IV.12) dostaneme:

(IV.23)
$$\Gamma^{(4)}(\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3) = g - \frac{\lambda^2}{2}\int_0^{\Lambda}\frac{d^dq}{(2\pi)^d}\,\frac{1}{(a^2q^2+m^2)^2}\left[\frac{2a^2\vec{q}\cdot\vec{K}-a^2\vec{K}^2}{a^2(\vec{K}-\vec{q})^2+m^2} + 2\ \text{permut}\right]$$

kde $\vec{K}=\vec{k}_1+\vec{k}_2$. Nyní položíme $\vec{k}_1=\vec{k}_2=\vec{k}_3=0$ a rozvoj invertujeme tak, abychom vyjádřili λ pomocí g:

(IV.24)
$$\lambda = g\left(1 + \frac{3g}{2}\int_0^{\Lambda}\frac{d^dq}{(2\pi)^d}\,\frac{1}{(a^2q^2+m^2)^2}\right) + O(g^3)$$

Což dává pro čtyřbodovou vrcholovou funkci:

(IV.25)
$$\Gamma^{(4)}(\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3) = g - \frac{g^2}{2}\int_0^{\Lambda}\frac{d^dq}{(2\pi)^d}\,\frac{1}{(a^2q^2+m^2)^2}\left[\frac{2a^2\vec{q}\cdot\vec{K}-a^2\vec{K}^2}{a^2(\vec{K}-\vec{q})^2+m^2} + 2\text{permut.}\right]$$

Integrál ve vyjádření pro $\Gamma^{(4)}$ nediverguje s $\Lambda\to\infty$ pro $d<6$. Můžeme tedy položit $\Lambda=\infty$ v tomto renormalizovaném rozvoji.

Obdobným způsobem můžeme pokračovat systematicky v renormalizaci celého poruchového rozvoje člen po členu.

§IV.3 Výpočet kritických exponentů ($T \geq T_c$)

Renormalizací poruchového rozvoje jsme odstranili všechny ultrafialové divergence z jednotlivých příspěvků do fyzikálních veličin. Kritické chování je však charakterizováno infračervenými singularitami, které nelze z teorie úplně odstranit, neboť fázový přechod je reálně existující jev. Jeho správný popis je naším skutečným cílem. První krok k jeho zvládnutí byl učiněn teorií středního pole. Jak jsme již ale ukázali, teorie středního pole nezachycuje všechny divergence, které s sebou kritický bod přináší. Proto zůstává poruchový rozvoj kolem přiblížení středního pole singulární. V teorii klasických kritických jevů je význačné, že všechny divergence jsou škálovatelné s jedinou divergentní škálou odvozenou z korelační funkce: korelační délkou, nebo jedinou inverzní škálou; efektivní hmotou, Škálování singulárního chování odpovídá novému výběru jednotkové délky. Za jednotku délky v kritické oblasti zvolíme korelační délku a tudíž hybnost v korelační funkci původního rozvoje přeškálujeme: $a^2 q^2 = m^2 x^2$, kde x je nová bezrozměrná hybnost měřená v délkových jednotkách korelační délky. Tzn. korelační funkce po přeškálování bude:

$$\frac{1}{a^2 q^2 + m^2} \to \frac{1}{m^2} \frac{1}{x^2 + 1}$$

Výhodou tohoto škálování je transformace divergentních integrálů s korelačními funkcemi ve výraz s regulárními integrály a divergentním škálovacím faktorem. Např. integrál ve výrazu (IV.12) pro čtyřbodovou vrcholovou funkci má po přeškálování tvar:

$$\int_0^1 \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{a^2 q^2 + m^2} \frac{1}{a^2 (\vec{k} - \vec{q})^2 + m^2} \to m^{d-4} \int_0^{a1/m} \frac{d^d x}{(2\pi)^d} \frac{1}{(x^2+1)[(k-y)^2 + 1]}$$

Jelikož díky renormalizaci integrálů v renormalizovaném

Další vztah je $L = I - V + 1$

poruchovém rozvoji nezávisí na 1, jediná závislost na hmotě, která vymizí v kritickém bodě, je faktor $m^{d-4} \to \infty$.

K tomu, abychom všechny divergentní integrály odškálovali s nějakou mocninou m, musíme najít závislost libovolného diagramu na m. Celkový faktor v diagramu s L uzavřenými smyčkami a I interními liniemi je m^P, kde

$$P = dL - 2I$$

neboť za každou integraci získáme objemový faktor m^d. V diagramu s n vnějšími liniemi a V vrcholy navíc platí jednoduchý vztah

$$2I + n = 4V$$

kterého využijeme k nalezení mocniny P:

$$P = (d-4)V + d + n - \frac{1}{2}dn = -\epsilon V + \delta_n \qquad (IV.26)$$

kde δ_n je faktor závisející pouze na počtu vnějších linií a geometrickém rozměru prostoru. Jelikož každý vrchol obsahuje interakční konstantu, je výhodné zavést bezrozměrnou interakční konstantu ve které budeme rozvíjet jednotlivé fyzikální veličiny:

(IV,27) $$\hat{\lambda} = \frac{\lambda m^{-\epsilon}}{(2\pi a)^d}$$

kde jsme ještě vydělili objemový faktor z vnitřních integrálů.

Analogicky místo renormalizované interakční konstanty g přejdeme na bezrozměrnou

(IV.28) $$\hat{g} = \frac{g m^{-\epsilon}}{(2\pi a)^d} ,$$

Výše uvedenou renormalizací a škálováním se nám podařilo přeformulovat poruchový rozvoj do bezrozměrných veličin, kde všechny integrály jsou nyní regulární. Z poruchového rozvoje musíme určit hodnoty škálovaných veličin v kritickém bodě. Z jejich hodnot potom určíme kritické exponenty fyzikálních veličin.

A) Výpočet kritického exponentu γ

Z definice víme, že $\chi \propto \theta^{-\gamma}$. Dále pak susceptibilita je určena z korelační funkce:

$$\chi = \tilde{G}^{(2)}(0) \propto m^{-2}$$

Kontrolní parametr $\theta = (T-T_c)/T_c$ určíme z [illegible]:

$$\Delta\mu^2 = \mu^2 - \mu_c^2 = \frac{T-T_c}{T_c} = \theta$$

Proto kritický exponent γ určíme z rovnice

$$\frac{1}{\gamma} = \lim_{m\to 0} \frac{\partial \log \Delta\mu^2}{\partial \log m^2} \tag{IV.29}$$

Tj. k určení kritického exponentu γ použijeme

renormalizovaný rozvoj $\mu^2(a^2, m^2, \bar{g})$. Do prvního

řádu v interakční konstantě (jednosmyčkové přiblížení)

dostaneme:

$$\Delta\mu^2 = m^2 \left\{ 1 + \frac{\hat{\lambda}}{2} \int_0^{a^{-1}/m} d^d x \, \frac{1}{x^2(x^2+1)} + O(\hat{\lambda}^2) \right\} \tag{IV.30}$$

Tento vztah použijeme v (IV.29), přičemž musíme mít

na paměti, že bezrozměrná interakční konstanta $\hat{\lambda}$

závisí na škále. Rozlišme dva případy:

A) d>4: Integrál ve vztahu (IV.30) diverguje

$$I = A + B\left(\frac{a\Lambda}{m}\right)^{d-4} = A + B\left(\frac{a\Lambda}{m}\right)^{-\epsilon}$$

Dále platí:

(IV.31) $$\mu^2 \frac{\partial \hat{\lambda}^n}{\partial \mu^2} = -\frac{1}{2} n \epsilon \hat{\lambda}^n$$

Odkud snadno zjistíme

$$\frac{1}{\gamma} = 1 - \frac{1}{4} \epsilon A \lim_{m \to 0} \hat{\lambda} = 1$$

což je předpokládaný výsledek, tj. teorie středního pole.

B) $\underline{d<4}$: Integrál v (IV.30) nezávisí na ořezávacím faktorem Λ a tudíž

(IV.32) $$\frac{1}{\gamma} = 1 - \frac{1}{4} \epsilon \lim_{m \to 0} \hat{\lambda} \int_0^\infty d^d x \, \frac{1}{x^2(1+x^2)}$$

Nyní holou bezrozměrnou interakční konstantu nahradíme renormalizovanou ze vztahu:

$$\hat{\lambda} = \hat{g} + \frac{3}{2} \hat{g}^2 \int_0^\infty d^d x \, \frac{1}{(x^2+1)^2}$$

přičemž předpokládáme, že $\hat{g}_c < 1$. Potom

(IV.33) $$\frac{1}{\gamma} = 1 - \frac{1}{4} \epsilon \hat{g}_c \int_0^\infty \frac{d^d x}{x^2(x^2+1)}$$

kde $\hat g_c$ je je hodnota bezrozměrné renormalizované interakční konstanty v kritickém bodě. Ze vztahu (IV.26) plyne, že $g \propto m^{\delta_4} f(\hat g)$. Pokud $\hat g_c < 1$, potom renormalizovaná interakce g, neboť $\Gamma^{(4)}(0,0,0) \to 0$.

Výslednou hodnotu bezrozměrné interakční konstanty $\hat g_c$ známe pomocí tzv. β-funkce. Definujeme

(IV.34) $$\beta(\hat g) \equiv \left(\frac{\partial \hat g}{\partial \log m^2} \right)_{\lambda,\Lambda}$$

Tzn. $\beta(\hat g_c) = 0$, pokud $g \to g_c < 1$, neboť $m^2 \to 0$.

Při výpočtu β-funkce musíme vyjít ze vztahu svazujícího renormalizovanou a nerenormalizovanou interakční konstantu $\hat g$ a $\hat\lambda$. Použijeme tedy (IV.24) a přejdeme k bezrozměrným interakčním konstantám:

(IV.35) $$\hat\lambda = \hat g \left(1 + \frac{3}{2} \hat g \int_0^{a\Lambda/m} d^d x \, \frac{1}{(x^2+1)^2} \right) + \mathcal{O}(\hat g^3)$$

Jelikož v $d<4$ integrál v (IV.35) nezávisí na ořezávajícím faktorem Λ, lze položit $\Lambda = \infty$. Při derivování podle renormalizované hmoty když interakční konstanta je fixována a tedy

$$\frac{\partial \hat{\lambda}}{\partial \log m^2} = -\frac{\epsilon}{2}\hat{\lambda} = -\frac{\epsilon}{2}\left[\hat{g} + \frac{3}{2}\hat{g}^2\int_0^\infty \frac{d^dx}{(x^2+1)^2}\right].$$

derivováním pravé strany dostaneme:

$$\beta(\hat{g})\left[1 + 3\hat{g}\int_0^\infty \frac{d^dx}{(x^2+1)^2}\right]$$

Porovnáním obou výrazů a přečtením nejnižších mocnin v $\hat{g}$ dostaneme:

(IV.36) $$\beta(\hat{g}) = -\frac{\epsilon}{2}\hat{g}\left[1 - \frac{3}{2}\hat{g}\int_0^\infty \frac{d^dx}{(x^2+1)^2}\right]$$

Z této rovnice získáme hodnotu kritické hodnoty bezrozměrné renormalizované interakční konstanty:

(IV.37) $$\hat{g}_c = \frac{2}{3}\left[\int_0^\infty \frac{d^dx}{(x^2+1)^2}\right]^{-1} \underset{d=3}{=} \frac{2}{3\pi^2} \doteq 0{,}0675$$

Jestliže použijeme tento výsledek v (IV.33) dostaneme hodnotu kritického exponentu ν:

$$\frac{1}{\nu} = 1 - \frac{\epsilon}{6}\,\frac{\int_0^\infty \frac{d^dx}{x^2(x^2+1)}}{\int_0^\infty \frac{d^dx}{(x^2+1)^2}} \underset{d=3}{=} 1 - \frac{1}{6}\,\frac{2\pi^2}{\pi^2} = \frac{2}{3}.$$

Z výše uvedených výsledků vyplývá, že $\hat{g}_c \ll 1$, a tudíž rozvoj v bezrozměrné renormalizované interakční konstantě je oprávněný, alespoň pro malé hodnoty ϵ.

B) Výpočet kritického exponentu η

Kritický exponent η je definován v kritickém bodě $T=T_c$ a charakterizuje dlouhodosahové chování korelační (vrcholové) funkce. Platí:

(IV.38) $$G_c^{(2)}(k) \sim k^{-2+\eta} \quad \text{nebo} \quad \Gamma^{(2)}(k) \sim k^{2-\eta}$$

Neanalytický příspěvek malých hybností do vrcholové funkce $\Gamma^{(2)}$ je dán:

$$\Gamma^{(2)}_{non}(k) = -\frac{\lambda^2}{6}\int_0^{\Lambda} \frac{d^dq_1\, d^dq_2}{(2\pi)^{2d}}\, \frac{1}{a^2q_1^2}\, \frac{1}{a^2q_2^2}\left[\frac{1}{a^2(\vec{Q}-\vec{k})^2} - \frac{1}{a^2Q^2}\right]$$

kde $\vec{Q} = \vec{q}_1 - \vec{q}_2$. Označme ještě $\vec{x}_1 = \vec{q}_1/k$, $\vec{x}_2 = \vec{q}_2/k$, $X = \vec{Q}/k$. Potom

$$\log \Gamma^{(2)}(k) = 2\log(ak) - \frac{\lambda^2}{6a^2k^2}\,\Delta A(k)$$

$$= 2\log(ak) - \frac{1}{6}\hat{\lambda}^2\int_0^{\Lambda/k} \frac{d^dx_1\, d^dx_2}{x_1^2x_2^2}\left[\frac{1}{(\vec{X}-\hat{\vec{k}})^2} - \frac{1}{X^2}\right]$$

kde jsme opět přešli na bezrozměrnou interakční konstantu

(IV.39) $$\hat{\lambda} = \frac{\lambda (ak)^{-\epsilon}}{(2\pi a)^{d}}$$

Analogicky jako v případě kritického exponentu γ lze snadno ukázat, že pro $d>4$, $\eta=0$, tj. Landauova teorie je úplná.

Zajímavější je situace pro $d<4$, tj. $\epsilon>0$. Rovnice pro kritický exponent η je

(IV.40) $$2-\eta = \lim_{k\to 0} \frac{\partial \log \Gamma^{(2)}}{\partial \log k}$$

Opět se vedoucím řádem hlavní příspěvek do derivace v (IV.40) pochází od interakční konstanty $\hat{\lambda}$. Z reprezentace pro $\Gamma^{(2)}(k)$ a z (IV.39) dostaneme:

(IV.41) $$\eta = \frac{\epsilon}{3} \lim_{k\to 0} \hat{\lambda}^{2} \int_{0}^{\infty} \frac{d^{d}x_1\, d^{d}x_2}{x_1^{2}\, x_2^{2}} \left[\frac{1}{X^{2}} - \frac{1}{(\vec{X}-\hat{k})^{2}} \right]$$

Naším předpokladem bylo, že integrál na pravé straně (IV.41) v limitě malých hybností nezávisí na velikosti vektoru k. Vzhledem k tomu, že $\hat{\lambda} \to \infty$ pro $k\to 0$, musíme provést opět nahrazení $\hat{\lambda}$ renormalizovanou konstantou $\hat{g}$.

Jelikož $m=0$ v $T=T_c$, musíme renormalizovanou interakční konstantu vybrat z čtyřbodové vrcholové funkce v některém bodě $\vec k$, T;

$$g = \Gamma^{(4)}(\vec k_1, \vec k_2, \vec k_3)$$

Přitom volíme hybnosti $\vec k_i$ tak, aby směřovaly dovnitř interakce. Regularizační bod $(\vec k_1, \vec k_2, \vec k_3)$ lze vybrat s jistou libovůlí. Obvyklou volbou je tzv. symetrický bod:

$$\vec k_i \cdot \vec k_j = (4\delta_{ij} - 1)\frac{\kappa^2}{4}$$

což vede na $(\vec k_i + \vec k_j)^2 = \kappa^2$.

K dalšímu postupu je výhodné zvolit $\kappa = \varepsilon$, tak abychom dostali co nejjednodušší limitu $\varepsilon \to 0$. V tomto případě

$$g = \lambda - \frac{3\lambda^2}{2}\int_0^\Lambda \frac{d^d q}{(2\pi)^d}\,\frac{1}{a^2 q^2}\,\frac{1}{a^2(\vec k_1 + \vec k_2 - \vec q)^2}$$

Invertováním tohoto vztahu a přechodem na bezrozměrné veličiny dostaneme:

$$\hat\lambda = \hat g + \frac{3}{2}\hat g^2 \int_0^{\Lambda/\kappa} \frac{d^d x}{x^2(\hat k_1 + \hat k_2 - \vec x)^2} \qquad \text{(IV.42)}$$

kde jsme označili

$$\hat{g} = \frac{g(a\kappa)^{-\epsilon}}{(2\pi a)^d}$$

$x = \vec{q}/\kappa$, $\hat{k}_1 = \vec{k}_1/\kappa$, $\hat{k}_2 = \vec{k}_2/\kappa$. V symetrickém bodě $(\vec{k}_i \cdot \vec{k}_j = (4\delta_{ij}-1)\kappa^2/4)$ vektory $\hat{k}_1$, $\hat{k}_2$ nejsou jednotkové, ale mají délku $\sqrt{3/4}$.

Kritický exponent η nyní můžeme zapsat z (IV.41):

(IV.43) $$\eta = \frac{\epsilon}{3}\hat{g}_c^2 \int_0^\infty \frac{d^dx_1\, d^dx_2}{x_1^2\, x_2^2}\left\{\frac{1}{X^2} - \frac{1}{(\vec{X}-\hat{k})^2}\right\}$$

Ve výrazu (IV.43) již můžeme provést limitu $\epsilon \to 0$, neboť renormalizovaná hodnota interakční konstanty je konečná v limitě nulové hybnosti, nebo lépe v limitě $\kappa \to 0$.

Stejně jako v případě exponentu η určíme i nyní hodnotu renormalizované interakční konstanty g_c z nulové hodnoty β-funkce:

(IV.44) $$\beta(\hat{g}) = \frac{\partial \hat{g}}{\partial \log\kappa}\Big|_{\lambda,\Lambda}$$

Derivováním rovnice (IV.42) dostaneme:

(IV.45) $$\beta(\hat{g}) = -\epsilon \hat{g} + \frac{3}{2}\epsilon \hat{g}^2 \int_0^\infty \frac{d^d x}{x^2(\hat{k}_1+\hat{k}_2-\vec{x})^2}$$

odkud potom

(IV.46) $$\hat{g}_c = \frac{2}{3}\left[\int_0^\infty \frac{d^d x}{x^2(\hat{k}_1+\hat{k}_2-\vec{x})^2}\right]^{-1}$$

Dosazením výrazu (IV.46) do výrazu pro exponent y dostaneme nejnižší příspěvek do anomální dimenze pro $d<4$. Integrály (IV.46) a (IV.41) lze provést explicitně např. ve třech prostorových rozměrech. Tam ale zjistíme, že integrál v (IV.43) diverguje! Tj. náš rozvoj, přestože rozvíjíme v malé konstantě $\hat{g}_c = \frac{2}{3\pi^3} \doteq 0.0215$, výsledek na pravé straně (IV.43) není tak malý, neboť koeficienty rozvoje jsou singulární. Musíme proto náš rozvoj ještě dále modifikovat.

§IV.4 Dimenzionální regularizace a ε-rozvoj

Derivováním rovnice (IV.42) dostaneme:

(IV.45) $$\beta(\hat g) = -\epsilon \hat g + \frac{3}{2}\epsilon \hat g^2 \int_0^\infty \frac{d^d x}{x^2(\hat k_1+\hat k_2-\vec x)^2}$$

odkud potom

(IV.46) $$\hat g_c = \frac{2}{3}\left[\int_0^\infty \frac{d^d x}{x^2(\hat k_1+\hat k_2-\vec x)^2}\right]^{-1}$$

Dosazením výrazu (IV.46) do výrazu pro exponent γ dostaneme nejnižší příspěvek do anomální dimenze pro $d<4$. Integrály (IV.46) a (IV.41) lze provést explicitně např. ve třech prostorových rozměrech. Tam ale zjistíme, že integrál v (IV.43) diverguje! Tj. náš rozvoj, přestože rozvíjíme v malé konstantě $\hat g_c = \frac{2}{3\pi^3} \doteq 0.0215$, výsledek na pravé straně (IV.43) není [illegible], neboť koeficienty rozvoje jsou singulární. Musíme proto náš rozvoj ještě dále modifikovat.

§IV.4 Dimenzionální regularizace a ε-rozvoj

Chyba, kterou jsme udělali při výpočtu anomální dimenze η, bylo prodloužení platnosti renormalizovaného poruchového rozvoje až do kritického bodu v libovolné dimenzi $d<4$. Obecně můžeme rozvíjet v renormalizované interakční konstantě v $d<4$ pouze pro $T>T_c$. Jestliže položíme $T=T_c$, potom ztratíme hmotovou regularizaci. Tuto regularizaci nelze nahradit ani regularizací hybností k umožňující renormalizaci kinetického členu. Tato je vhodná pro regularizaci ultrafialových, ale ne infračervených divergencí. Hmotovou regularizaci musíme v T_c nahradit jiným mechanismem a tím je tzv. ϵ-rozvoj. Víme totiž, že v $d=4$ všechny integrály v T_c jsou konečné a kritické exponenty jsou určeny teorií středního pole. Tohoto faktu využijeme k tomu, abychom všechny potřebné integrály v dimenzích $d<4$ rozvíjeli kolem hodnot v $d=4$ s malým rozvojovým parametrem $\epsilon=4-d$. Takže v $T=T_c$ spojíme rozvoj do vazebných konstant (v $\hat{g}$) s rozvojem do ϵ ve

QPT-113

výpočtu koeficientů rozvoje.

A) Dimenzionální regularizace

K tomu, abychom mohli provést rozvoje divergentních integrálů kolem kritické dimenze d=4, musíme nejdříve zobecnit hodnoty integrálů do neceločíselné dimenze. Toto je možné, pokud pracujeme pouze s malými mocninami hybnosti v blízkosti pólu integrandu (kritického bodu). Obecně máme vypočítat následující sumu:

$$I_0(d) = \int d^d k \left[f_1(k) - f_2(k) \right]$$

kde rozdíl je zvolen tak, aby příspěvky od f_1 a f_2 kompenzovaly vzájemně příspěvky od velkých hybností. Idea dimenzionální regularizace je počítat jednotlivé integrály v dostatečně nízkých prostorových rozměrech d, tak že při jednotlivé integrály jsou dobře definovány. Potom získané výsledky analyticky prodloužíme ve (spojité) veličině d do požadovaného tj. fyzikálního rozměru. Tím získáme požadovanou hodnotu potřebných integrálů.

B) Feynmanova parametrizace integrálů

K tomu abychom mohli vhodně převést integrály jako funkce prostorového rozměru, použijeme tzv. Feynmanovy parametrizace integrálů s produkty propagátorů. Tato parametrizace využívá následující identity:

(IV.47) $$\frac{1}{a_1^{\alpha_1} a_2^{\alpha_2}} = \frac{1}{(\alpha_1-1)!\,(\alpha_2-1)!} \int_0^\infty dt_1 dt_2\, e^{-(a_1 t_1 + a_2 t_2)}\, t_1^{+\alpha_1-1}\, t_2^{+\alpha_2-1}$$

což je vlastně integrální vyjádření pro Γ-funkci. V této reprezentaci použijeme substituci

$$t_1 = s u_1, \qquad t_2 = s u_2$$

přičemž ještě použijeme podmínku

$$u_1 + u_2 = 1$$

Pomocí této substituce přepíšeme integrál (IV.47):

(IV.48) $$\frac{1}{a_1^{\alpha_1} a_2^{\alpha_2}} = \frac{1}{(\alpha_1-1)!\,(\alpha_2-1)!} \int_0^1 du_1 du_2\, u_1^{\alpha_1-1} u_2^{\alpha_2-1} \delta(u_1+u_2-1)$$

$$\times \int_0^\infty ds\, e^{-(a_1 u_1 + a_2 u_2) s}\, s^{\alpha_1+\alpha_2-1}$$

$$= \frac{(\alpha_1+\alpha_2-1)!}{(\alpha_1-1)!\,(\alpha_2-1)!} \int_0^1 du_1 du_2\, \delta(u_1+u_2-1) \frac{u_1^{\alpha_1-1} u_2^{\alpha_2-1}}{(a_1 u_1 + a_2 u_2)^{\alpha_1+\alpha_2}}$$

K výpočtu kritických veličin budeme ještě potřebovat následující identity:

(IV.49a) $$\int_0^1 du\, u^\mu (1-u)^\nu = \frac{\mu!\,\nu!}{(\mu+\nu+1)!}$$

(IV.49b) $$\int_0^\infty \frac{d^d x}{(x^2+2\vec{x}\cdot\vec{p}+c^2)^\alpha} = \pi^{d/2}\,\frac{(\alpha-\frac{1}{2}d-1)!}{(\alpha-1)!}\,(c^2-p^2)^{d/2-\alpha}$$

Nyní máme připraveny všechny ingredience pro výpočet kritického exponentu y. Integrál z (IV.43) označme:

$$I_2(0)-I_2(1)=\int_0^\infty \frac{d^d x_1\, d^d x_2}{x_1^2\, x_2^2}\left\{\frac{1}{X^2}-\frac{1}{(\vec{X}-\hat{k})^2}\right\}$$

dále ještě

$$I_2(k)=\int_0^\infty \frac{d^d x_1\, d^d x_2}{x_1^2 x_2^2(\vec{X}-\vec{k})^2}$$

který nyní vypočteme s pomocí Feynmanovy parametrizace.

Nejdříve integrujeme přes x_2 v integrálu $I_2(k)$, označme

$$J(k)=\int_0^\infty \frac{d^d x}{x^2(\vec{x}-\vec{k})^2}$$

a použijeme Feynmanovu parametrizaci

$$a_1=x^2,\quad a_2=(\vec{x}-\vec{k})^2,\quad \alpha_1=\alpha_2=1,$$

$$J(k) = \int_0^1 du_1 du_2\, \delta(u_1+u_2-1) \int_0^\infty \frac{d^d x}{(x^2 u_1 + (\breve{x}-\breve{k})^2 u_2)^2}$$

$$= \int_0^1 du_2 \int_0^\infty \frac{d^d x}{(x^2 - 2\breve{x}\cdot\breve{k}\, u_2 + k^2 u_2)^2}$$

Dále použijeme (IV.49) a dostaneme:

$$J(k) = \pi^{d/2} k^{-\epsilon} (\tfrac{1}{2}\epsilon-1)! \int_0^1 du_2 \left[u_2(1-u_2)\right]^{-\epsilon/2}$$

$$= \pi^{d/2} k^{-\epsilon} \frac{(\frac{1}{2}\epsilon-1)!\left[(-\frac{1}{2}\epsilon)!\right]^2}{(1-\epsilon)!}$$

Dosazením do $I_2(k)$ se substitucí $\breve{x} \to \breve{x}_2$, $\breve{k} \to \breve{k}-\breve{x}_1$

dostaneme

(IV.50) $$I_2(k) = \pi^{d/2} \frac{(\frac{1}{2}\epsilon-1)!\left[(-\frac{1}{2}\epsilon)!\right]^2}{(1-\epsilon)!} \int_0^\infty \frac{d^d x_1}{x_1^2\left[(\breve{x}_1-\breve{k})^2\right]^{\epsilon/2}}$$

$$= (k^2)^{1-\epsilon} \pi^d \frac{\left[(-\frac{1}{2}\epsilon)!\right]^3 (\epsilon-2)!}{(2-\frac{3}{2}\epsilon)!}$$

V těchto vzorcích neceločíselné faktoriály jsou chápány jako Γ funkce. Vztah (IV.50) můžeme konečně použít pro určení kritického exponentu η:

$$\eta = \frac{1}{3}\epsilon \hat{g}_c^2 \left[I_2(0) - I_2(1)\right].$$

Pro úplné vyjádření musíme ještě vyjádřit i hodnotu

⊛ Právě tento potenciál působí problémy v přímém výpočtu integrálu v $d=3$, neboť tehdy tato funkce diverguje!

renormalizovanou interakční konstantu pomocí ε-rozvoje.

Ze vztahu

$$g_c = \frac{2}{3}\left[\int_0^\infty \frac{d^dx}{x^2(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{x})^2}\right]^{-1}$$

stejným postupem dostaneme:

(IV.51) $$\hat{g}_c = \frac{2(1-\epsilon)!}{3\pi^{d/2}\left[(-\frac{1}{2}\epsilon)!\right]^2(\frac{1}{2}\epsilon-1)!} = \frac{1}{3\pi^2}\epsilon + O(\epsilon^2)$$

Rozvojem výrazu (IV.50) do vedoucího řádu v ε dostaneme

$$(b^2)^{1-\epsilon} = b^2 e^{-\epsilon\log b^2} = b^2(1-\epsilon\log b^2 + O(\epsilon^2))$$

$$(\epsilon-2)! \approx \frac{1}{\epsilon} + O(1) \quad (*)$$

Tudíž výraz $I_2(b)$ je ve vedoucím řádu ε nepodstatný pro míru q_1, neboť

(IV.52) $$I_2(b) = -\frac{1}{2}\pi^2 b^2\frac{1}{\epsilon} + O(1)$$

Spojením (IV.51) a (IV.52) nakonec dostaneme:

(IV.53) $$\eta = \frac{\epsilon^2}{54} + O(\epsilon^3)$$

což pro třírozměrný systém dává

$$\eta_{(3)} \doteq \frac{1}{54} \doteq 0.0185$$

Hodnota anomální dimenze je tedy konečná a malá v ε-rozvoji

QPT-118

§IV.5 Shrnutí klasického kritického chování

Na závěr této kapitoly zrekapitulujeme postup kvalitativního popisu divergentních příspěvků do termodynamických veličin v kritické oblasti klasického fázového přechodu:

1) V prvním kroku je potřeba zjistit makroskopické veličiny jejichž fluktuace jsou dominantní v kritické oblasti. Tj. je třeba najít charakter a symetrii parametru uspořádání. Toto zjistíme z divergencí odpovídajících korelačních funkcí.

2) Sestrojíme teorii středního pole popisující kvalitativně vznik nové uspořádané fáze, tj. generování nenulových hodnot parametru uspořádání, eventuálně vznik narušení symetrie. Podstatné je aby teorie středního pole obsahovala kritický bod spojený s fázovým přechodem a definovala korelační délku divergující v kritickém bodě (efektivní hmota nějakého módu vymizející v bodě přechodu).

QPT-119

3) Existuje systematický rozvoj kolem teorie středního pole. Snaha je rozvíjet pouze regulární veličiny s dobrým analytickým chováním.

4) V prostorových dimenzích $d < d_4(=4)$ ovšem MFT nepostihuje všechny divergence v teorii a poruchový rozvoj kolem řešení středního pole je singulární. Ke správnému započtení těchto dodatečných singularit je třeba

A) Transformovat poruchový rozvoj na renormalizovaný, tj. takový, který pracuje výhradně s fyzikálními, měřitelnými parametry modelu: hmota, kinetický člen a interakční konstanta. Teorie je renormalizovatelná, pokud poruchové výrazy nezávisí na mřížkové konstantě, tj. je možné provést spojitou limitu původního mřížkového modelu.

B) Pomocí změny jednotky délky v teorii – od meziatomové vzdálenosti přejdeme ke korelační délce – můžeme v renormalizovatelné teorii faktorizovat všechny divergentní výrazy do mocnin korelační délky, přičemž všechny dynamické integrály jsou konečné. Tzv. jednoparametrické škálování.

5) Speciální postup je nutný v kritickém bodě, kdy korelační délka je nekonečná, tj. neexistuje délková škála, pomocí které bychom mohli divergence v teorii faktorizovat. Tedy je nutné použít dimenzionální regularizaci k provedení renormalizace v teorii a ϵ-rozvoj vyjadřující všechny divergentní veličiny v mocninách $\epsilon = 4-d$, tj. kolem kritického bodu teorie středního pole.

6) Bezrozměrná renormalizovaná interakční konstanta $\hat{g} \propto g\, m^{-\epsilon}$ zůstává v kritickém bodě $T=T_c$ konečná tak že, $\hat{g}_c \ll 1$ pro $\epsilon \leq 1$. Odtud vyplývá, že renormalizovaná interakční konstanta, $g_c = \hat{g}_c \cdot m^{\epsilon} \to 0$, efektivně vymizí v kritickém bodě. Tento výsledek nakonec opravňuje použití renormalizované PT i v kritické oblasti.