Метод ренормализационной группы в теории критического поведения

К. Б. Варнашев

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)

k.varnashev@mail.ru

***Аннотация.* В данной статье обсуждается применение метода ренормализационной группы (РГ) и методов квантовой теории поля в исследовании критических явлений в реальных веществах, совершающих различные по своей природе фазовые переходы: магнитные, структурные, сегнетоэлектрические, сверхпроводящие. Универсальность и критический скейлинг являются неотъемлемой частью метода РГ. На примере магнитного упорядочения редкоземельных металлов Tb, Dy и Ho в геликоидальную структуру ниже температуры Нееля демонстрируется алгоритм замены микроскопического гамильтониана физической системы его флуктуационным аналогом, который является отправной точкой для последующего разворачивания всей мощи квантово-полевого подхода, включающего перенормировку, диаграммные ряды Фейнмана, а также пересуммирование расходящихся теоретико-полевых разложений.**

Ключевые слова: критические явления; универсальность; критический скейлинг; флуктуационный гамильтониан; ренормализационная группа

I. Введение: критическое поведение, универсальность и критический скейлинг

Как известно, в критической точке (точке фазового перехода) восприимчивость системы неограниченно возрастает. Другие термодинамические функции, такие как теплоёмкость или намагниченность, также проявляют характерное аномальное поведение в точке магнитного упорядочения. Более того, для различных магнетиков эти аномалии сходны и хорошо описываются степенными законами. Сингулярности различных термодинамических величин являются следствием появления в критической точке сильных взаимодействующих между собой флуктуаций *параметра порядка* (ПП). Эти флуктуации простираются на большие расстояния и крайне медленно затухают. По сути дела, в критической точке фазового перехода мы имеет дело с сильно нелинейными процессами. Область исследования, связанную с изучением описанных выше явлений, называют теорией *критического поведения*. Основной задачей теории критического поведения является описание свойств веществ самой различной природы в области сильно развитых термодинамических или квантовых (при нулевой температуре) флуктуаций ПП. Уместно отметить, что речь идёт не только о правильном описании поведения системы на качественном уровне, но и о вычислении значений критических индексов, определяющих степень расходимости тех или иных термодинамических величин в точке фазового перехода.

В фундаменте теории критических явлений лежит *универсальность*, суть которой заключается в том, что различные по своей природе физические системы демонстрируют одинаковое критическое поведение и сингулярности термодинамических функций этих систем описываются одинаковыми критическими индексами. Вещества, проявляющие одинаковое критическое поведение, объединяют в один *класс универсальности*. Согласно гипотезе универсальности, поведение систем, относящихся к одному классу универсальности, определяется лишь общими свойствами этих систем, такими как размерность пространства, симметрия задачи, природа ПП и общий характер взаимодействий внутри систем, и совершенно не зависит от каких-либо микроскопических деталей.

Первой и простейшей теорией критического поведения, естественно включающей в себя универсальность, была теория самосогласованного поля Ландау [1, 2]. Ландау отметил общую черту всех фазовых переходов II-го рода, а именно, в точке фазового перехода происходит спонтанное нарушение симметрии системы, при этом качественной и количественной характеристикой, определяющей степень нарушения симметрии в несимметричной фазе, является ПП φ – поле упорядочения. Так, например, в магнетиках роль ПП играет намагниченность вещества, а в сегнетоэлектриках – вектор спонтанной поляризации. Роль ПП в сверхпроводниках играет комплексная скалярная функция ψ – волновая функция конденсата сверхпроводящих электронов.

Хотя теория самосогласованного поля Ландау дала определённые предсказания относительно сингулярностей термодинамических функций в критической точке, она, тем не менее, оказалась пригодна лишь в той области вблизи точки фазового перехода, где крупномасштабные флуктуаций ПП незначительны, где они не оказывают заметного влияния на критическое поведение системы. Действительно, ряд экспериментов с газами [3], а также точное решение двумерной модели Изинга, полученное Онзагером [4], отчётливо показали, что количественные предсказания теории Ландау неточны, поскольку аномальное поведение термодинамических функций управляется хотя и степенными законами, но с показателями (критическими индексами) отличными от тех, что предсказывает теория самосогласованного поля.

Феноменологически описать влияние флуктуаций ПП удалось с помощью термодинамической *гипотезы подобия* (гипотезы *критического скейлинга*) [5–6], суть которой заключается в предположении, что ответственные за критические сингулярности части свободной энергии и корреляционных функций являются обобщёнными однородными функциями некоторой комбинации термодинамических переменных, через критические размерности которых выражаются все остальные индексы. Так, например, в случае магнетиков такими переменными можно считать приведённую температуру $\tau = (T - T_c)/ T_c$ и внешнее магнитное поле h:

$$M_S \sim \tau^{\beta},\ T \le T_c;\quad C \sim |\tau|^{-\alpha};\quad \chi \sim |\tau|^{-\gamma};\quad \chi \sim h^{\frac{1}{\delta}-1}.$$

При этом сами критические показатели в критической области связаны друг с другом скейлинговыми соотношениями [7]:

$$\gamma = (2-\eta)\cdot\nu,\quad \alpha = 2 - D\cdot\nu,\quad \alpha + 2\beta + \gamma = 2$$

$$\beta\cdot\delta = \beta + \gamma,\quad \delta = \frac{D+2-\eta}{D-2+\eta}, \qquad (1)$$

где D – пространственная размерность системы.Для нахождения полного набора критических индексов, определяющих степенные законы аномального поведения термодинамических функций в точке фазового перехода, достаточно вычислить какие-либо два из них.

Гипотеза критического скейлинга, имеющая сегодня множество экспериментальных подтверждений [7], позволила естественным образом объяснить широкий круг критических явлений, относящихся к различным областям физики – от физики материалов до физики элементарных частиц и космологии.

II. Микроскопический и флуктуационныйгамильтонианы

Важнейшим постулатом современной теории критических явлений является возможность подмены точной микроскопической модели её флуктуационным аналогом и забывание системой «затравочных» констант взаимодействия в критической области. Действительно, флуктуационная модель уже содержит в себе универсальность (функционал Ландау). Также она учитывает флуктуации, поскольку оперирует не со средним значением ПП, а с некоторым классическим случайным полем $\varphi(\boldsymbol{x})$. С математической точки зрения, теория классического случайного поля полностью эквивалентна квантовой теории поля в евклидовом пространстве, а функционал Ландау на языке теории поля представляет собой функционал действия модели.

Рассмотрим переход от микроскопического гамильтониана модели к флуктуационному на примере геликоидальных магнетиков. Известно, что редкоземельные металлы, такие как Tb, Dy и Ho, кристаллизуются в гексагональную плотно упакованную структуру с пространственной группой симметрии $P6_3/mmc$ в парамагнитной фазе. Ниже температуры Нееля они обнаруживают спиральное магнитное упорядочение с магнитным моментом, лежащим в базовой гексагональной плоскости (ферромагнитное упорядочение), и волновым вектором $\boldsymbol{k}$, направленным вдоль ортогональной базовой плоскости оси кристалла. Геликоидальное упорядочение в упомянутых выше кристаллах может быть описано микроскопическим гамильтонианом взаимодействия следующего вида [8]

$$H_{\text{int}} = -J_1 \sum_{\langle i,j\rangle} \boldsymbol{S}_i \boldsymbol{S}_j - J_2 \sum_{\langle i,j\rangle'} \boldsymbol{S}_i \boldsymbol{S}_j\,. \qquad (2)$$

Первая сумма соответствует внутриплоскостным и межплоскостным ферромагнитным взаимодействиям ближайших соседей (спинов), при этом $J_1 > 0$, вторая – антиферромагнитным взаимодействиям плоскостей, следующих за ближайшими, $J_2 < 0$. Когда отношение констант взаимодействия $|J_2|/J_1$ достигает критического значения, в системе возникает геликоидальное упорядочение спинов вдоль одной из кристаллографических осей. В противном случае спины образуют синусоидальную структуру.

Преобразование Хаббарда–Стратоновича [9, 10] применительно к выражению (2) с последующей заменой вещественных N-компонентных полей модели на соответствующее комплексное векторное поле ПП ψ_i позволяет совершить переход от микроскопического гамильтониана взаимодействия (2) к его флуктуационному аналогу [11, 12]:

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{4}\int d^{\,D}x\,\left\{u_0 \psi_i \psi_i^* \psi_j \psi_j^* + w_0 \psi_i \psi_i \psi_j^* \psi_j^*\right\}. \qquad (3)$$

Здесь $i, j = 1, 2, \ldots, N$, u_0 и w_0 играют роль затравочных («голых») констант взаимодействия, а D – пространственная размерность системы. Полный гамильтониан модели включает в себя, однако, ещё и свободную часть

$$H_0 = \int d^{\,D}x\,\frac{1}{2}\left(m_0^2 \psi_i \psi_i^* + \vec{\nabla}\psi_i \vec{\nabla}\psi_i^*\right),\quad H = H_0 + H_{\text{int}},$$

где затравочная масса $m_0^2 \sim (T - T_c^{(0)})/T_c^{(0)}$ представляет собой отклонение температуры T от температуры фазового перехода в приближении среднего поля. Случаю геликоидального упорядочения отвечает $w_0 > 0$ в выражении (3). При этом число компонент поля ПП равно двум ($N = 2$). Уместно отметить, что модельный гамильтониан (3) при $w_0 > 0$, $N = 2$ (планарные спины) и $N = 3$ (гейзенберговские спины) контролирует также статические критические явления в слоистых треугольных антиферромагнетиках, таких, например, как VCl_2, VBr_2 и $CsMnBr_3$ [11].

III. Перенормировка и РГ разложения

Как указывалось выше, при приближении системы к точке фазового перехода влияние нелинейности среды возрастает. Это означает, что взаимодействие флуктуаций ПП становится всё сильнее и всё чаще происходят акты рассеяния флуктуонов друг на друге. В частности, существенно возрастает роль многократного рассеяния. Поскольку источником рассеяния флуктуонов друг на друге является нелинейность среды, то очевидно рост нелинейности определяется ростом констант взаимодействия в флуктуационном гамильтонеане (3). Вблизи точки фазового перехода нелинейные свойства, скажем, ферромагнетика будут определяться уже не затравочными константами взаимодействия u_0 и w_0, а некоторыми эффективными («одетыми») константами связи u и w, которые учитывают все вклады многоступенчатых промежуточных процессов рассеяния флуктуонов сколь угодно высокой кратности и сколь угодно различные типы их движения между столкновениями. В квантовой теории поля таким константам связи (зарядам) соответствуют одетые вершины и представляются они степенными рядами, состоящие из бесконечного набора диаграмм Фейнмана;

линиям отвечают движущиеся частицы, а точкам – их взаимодействие друг с другом. На рис. 1, в качестве примера, изображено несколько диаграмм Фейнмана, отвечающих многократным рассеяниям флуктуонов друг на друге.

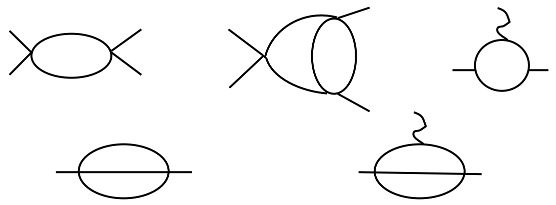

Рис. 1. Пример одно- и двухпетлевых диаграмм Феймана, отвечающих актам многократного рассеяниям квантов критических флуктуаций друг на друге. Линиям соответствуют движущиеся флуктуоны, вершинам – их столкновения (взаимодействия) между собой. Волнистая линия отвечает дифференцированию линии (пропогатора) по m^2

Суть теории *перенормировок* как раз и состоит в замене голых (нефизических) зарядов и массы модели на их одетые аналоги. Только одетые константы взаимодействия и массы имеют физический смысл, только через них в теории критического поведения выражаются основные физические величины.

Сформулируем ниже правила перенормировки затравочных параметров теории u_0, w_0 и m_0^2 через так называемые константы ренормировки, правила нормировки двух и четырёхточечных функций Грина, а также правила вычисления констант ренормировки Z_i методом теории возмущения в фиксированной ($D = 3$) размерности пространства [13, 14].

Прежде всего рассмотрим неперенормированные корреляционные функции (функции Грина) $\Gamma^{(2)}(0;m_0^2,u_0,w_0)$, $\Gamma^{(4)}(0;m_0^2,u_0,w_0)$ и $\Gamma^{(1,2)}(\mathbf{q};0;m_0^2,u_0,w_0)$ на нулевых внешних импульсах, которые представляются суммами одночастично неприводимых диаграмм Фейнмана с двумя и четырьмя внешними линиями и со вставкой φ^2, соответственно. Перенормированные одночастично неприводимые корреляционные функции Γ_R связаны с неперенормированными функциями Γ соотношениями:

$$\Gamma_R^{(N)} = Z_\psi^{N/2}\Gamma^{(N)}\,,\; \Gamma_R^{(1,2)} = Z_{\psi^2}\Gamma^{(1,2)}\,. \qquad (4)$$

Константы перенормировки Z_ψ, Z_{ψ^2}, Z_U и Z_W, равно как и зависимости исходных параметров модели u_0, w_0 и m_0^2 от ренормированных констант связи u, w и массы m^2, определяются из нормировочных условий массивной теории поля при нулевых внешних импульсах:

$$\begin{gathered}
\Gamma_R^{(2)}(\boldsymbol{p},-\boldsymbol{p};m^2,u,w)\Big|_{p^2=0} = m^2\,,\\
\frac{\partial}{\partial p^2}\Gamma_R^{(2)}(\boldsymbol{p},-\boldsymbol{p};m^2,u,w)\Big|_{p^2=0} = 1\,,\\
\Gamma_{U\,R}^{(4)}(\boldsymbol{p};m^2,u,w;D)\Big|_{\boldsymbol{p}=0} = m^{4-D}u\,,\\
\Gamma_{W\,R}^{(4)}(\boldsymbol{p};m^2,u,w;D)\Big|_{\boldsymbol{p}=0} = m^{4-D}w\,,\\
\Gamma_R^{(1,2)}(\boldsymbol{p};\boldsymbol{q},-\boldsymbol{q};m^2,u,w)\Big|_{\boldsymbol{q}=\boldsymbol{p}=0} = 1\,,\\
\Gamma^{(1,2)}(\boldsymbol{q},0) = \frac{\partial}{\partial\tau}\Gamma^{(2)}(\boldsymbol{q})\,,
\end{gathered} \qquad (5)$$

где $\tau \sim m^2 = (T - T_c)/\, T_c$ – приведённая температура.

Ренормировочные константы Z_U^{-1}, Z_W^{-1}, которые входят в систему уравнений РГ, определяются как:

$$\begin{gathered}
Z_U^{-1} = u_0^{-1}\Gamma_U^{(4)}(\boldsymbol{p};m_0^2,u_0,w_0)\,,\\
Z_W^{-1} = w_0^{-1}\Gamma_W^{(4)}(\boldsymbol{p};m_0^2,u_0,w_0)\,.
\end{gathered} \qquad (6)$$

Из второго нормировочного условия системы уравнений (5) вычисляется функция Z_ψ :

$$Z_\psi^{-1} = \frac{\partial}{\partial p^2}\Gamma^{(2)}(\boldsymbol{p},-\boldsymbol{p};m_0^2,u_0,w_0)\Big|_{p^2=0}\,, \qquad (7)$$

а из пятого – функция Z_{ψ^2} :

$$Z_{\psi^2}^{-1} = \Gamma^{(1,2)}(\boldsymbol{p};\boldsymbol{q},-\boldsymbol{q};m_0^2,u_0,w_0)\Big|_{\boldsymbol{q}=\boldsymbol{p}=0}\,. \qquad (8)$$

Аналогично предыдущему, из первого нормировочного условия системы уравнений (5) определяется перенормированная масса

$$m_0^2 - \delta m_0^2 = m^2\,,\; m^2 = Z_\psi\Gamma^{(2)}(\boldsymbol{p},-\boldsymbol{p};m_0^2,u_0,w_0)\Big|_{p^2=0}\,.$$

Сдвиг массы производится в выражениях для корреляционных функций, входящих в уравнения (6–8).

Перенормированные константы взаимодействия u и w связаны с затравочными параметрами u_0 и w_0 следующими соотношениями:

$$u_0 = \frac{u}{Z_U^{-1}Z_\psi^2}\,,\; w_0 = \frac{w}{Z_W^{-1}Z_\psi^2}\,, \qquad (9)$$

которые следуют из соотношений (4) и (5).

Отметим, что в формулах (9) приняты обозначения $u_0 = u_0 m^{4-D}J$ и $w_0 = w_0 m^{4-D}J$, где $J = \int d^D p/(1+p^2)^2$ – интеграл, отвечающий простейшей четырёххвостой диаграмме Фейнмана («петле», рис. 1).

Для вычисления ренормировочных констант в каждом порядке перенормированной теории возмущений в уравнениях (6)–(8) производится переход от затравочных параметров u_0 и w_0 к эффективным u и w с помощью формул (9). В результате для констант Z_U^{-1}, Z_W^{-1}, Z_ψ и Z_{ψ^2} получаются ряды по степеням переменных u и w.

Ренормгрупповые функции $\beta_u(u,w)$ и $\beta_w(u,w)$ – функции Гелл-Манна–Лоу – являются решениями следующей системы уравнений:

$$\begin{gathered}
\frac{\partial \ln u_0}{\partial u}\beta_u + \frac{\partial \ln u_0}{\partial w}\beta_w = D-4\,,\\
\frac{\partial \ln w_0}{\partial u}\beta_u + \frac{\partial \ln w_0}{\partial w}\beta_w = D-4\,,
\end{gathered}$$

где $\beta_g \equiv \dfrac{\partial g}{\partial|\ln m|}$, $g = \{u,w\}$.

Через найденные β-функции и константы ренормировки Z_ψ и Z_{ψ^2} определяются далее разложения для критических индексов η и η_2:

$$\eta = \frac{\partial \ln Z_\psi}{\partial u}\beta_u + \frac{\partial \ln Z_\psi}{\partial w}\beta_w ,$$

$$\eta_2 = \frac{\partial \ln Z_{\psi^2}}{\partial u}\beta_u + \frac{\partial \ln Z_{\psi^2}}{\partial w}\beta_w . \qquad (10)$$

Индекс магнитной восприимчивости γ (рассматривается случай слабого внешнего магнитного поля) вычисляется по формуле: $\gamma^{-1} = 1 + \eta_2/(2-\eta)$. Значения остальных критических индексов находятся из скейлинговых соотношений (1).

В качестве примера, ниже приводятся РГ разложения для β-функций модели (3) как функций перенормированных инвариантных зарядов u и w в рамках двухпетлевого приближения [11] в случае, когда число компонент поля ПП равно двум, N=2 (случай геликоидального упорядочения спинов в Tb, Dy и Ho):

$$\beta_u = u - u^2 - \frac{2}{3}(u\,w + w^2) + \frac{1}{144}(52.444444u^3$$
$$+59.259259u^2w + 91.259259uw^2 + 42.666667w^3)$$
$$+\cdots , \qquad (11)$$
$$\beta_w = w - \frac{1}{3}(3u\,w + w^2) + \frac{1}{144}(68.444445u^2w$$
$$+59.259259uw^2 + 5.9259262w^3) + \cdots .$$

Аналогично, двухпетлевые разложения для индексов η и γ^{-1} имеют следующий вид:

$$\eta = \frac{0.5925926}{144}\left(3u^2 + 4u\,w + 4w^2\right) + \cdots , \qquad (12)$$

$$\gamma^{-1} = 1 - \frac{1}{12}\left(3u + 2w\right) + \frac{1}{72}\left(3u^2 + 4u\,w + 4\,w^2\right) + \cdots .$$

Условие одновременного обращения в нуль β-функций (11) даёт координаты фиксированных (особых) точек уравнений РГ, подстановка которых в выражения (12) дают значения индексов η и γ^{-1}, а, следовательно, всех остальных критических индексов модели (3).

Видно, что уравнения (11) представляют собой систему нелинейных алгебраических уравнений, решать которую приходится численно, используя, например, хорошо известный метод Монте–Карло. При этом необходимо учитывать, что РГ разложения (11) и (12) представляют собой части расходящихся рядов. Асимптотика таких рядов в больших порядках хорошо известна [15–17]:

$$F(g) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n g^n ,\; f_n = (-a)^n n! n^b \left[1 + O\left(\frac{1}{n}\right)\right], \quad n \to \infty ,$$

где g, параметр разложения в ряд, – обобщённая константа связи; a и b – асимптотические параметры. Чтобы извлечь из них физическую информацию, они должны быть обработаны надлежащими методами суммирования. Такая методика существует и активно применяется в теориях без малого параметра (например, работы [17–21]).

В заключение отметим, что численно найденные фиксированные точки уравнений РГ (11) проверяются на устойчивость. Если среди них на глобальной фазовой диаграмме РГ потоков окажутся устойчивые узлы, то с такими решениям будут ассоциироваться наиболее интересные с физической точки зрения непрерывные фазовые переходы. Если решения уравнений РГ окажутся неустойчивыми, то система будет претерпевать фазовый переход I-го рода или проявлять сложное трикритическое поведение с эффективными критическими индексами.

Список литературы

[1] Ландау Л.Д. К теории фазовых переходов. I.// ЖЭТФ. 1937. V. 7. P. 19.

[2] Ландау Л.Д. К теории фазовых переходов. II.// ЖЭТФ. 1937. V. 7. P. 627.

[3] Guggenheim E.A. Principle of corresponding States. // J. Chem. Phys. 1945. V. 13. P. 253.

[4] Onsager L. Cristal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition. // Phys. Rev. 1944. V. 65. P. 117.

[5] Kadanov L.P. Scaling laws for ising models near Tc. // Physics. 1966. V. 2. P. 263.

[6] Паташинский А.З. Гипотеза подобия корреляций в теории фазовых переходов второго рода. // ЖЭТФ. 1967. V. 53. P. 1987.

[7] Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. Москва: Наука. 1982.

[8] Kawamura H. Renormalization-group analysis of chiral transitions. // Phys. Rev. B. 1988. V. 38, P. 4916.

[9] Стратонович Р.Л. Об одном методе вычисления квантовых функций распределения. // ДАН СССР. 1957. V. 115, P. 1097.

[10] Hubbard J. Calculation of Partition Functions. // Phys. Rev. Lett. 1959. V. 3. P. 77.

[11] Antonenko S.A., Sokolov A.I. Phase transitions in anisotropic superconducting and magnetic systems with vector order parameters: Three-loop renormalization-group analysis. // Phys. Rev. B. 1994. V. 49. P. 15901.

[12] Antonenko S.A., Sokolov A.I., Varnashev K.B. Chiral transitions in three-dimensional magnets and higher order ϵ expansion. // Phys. Lett. A. 1995. V. 208. P. 161.

[13] Parisi G. Field-theoretic approach to phase transitions. // J. Stat. Phys. 1980. V. 23. P. 49.

[14] Zinn-Justin J. Quantum field theory and critical phenomena. Oxford: Clarenden. 2002.

[15] Baker G.A. Jr., Nickel B.G., Meiron D.I. Critical indices from perturbation analysis of the Callan-Symanzik equation. // Phys. Rev. B. 1978. V. 17. P. 1365.

[16] Le Guillou J.C., Zinn-Justin J. Critical exponents for the n-vector model in three dimensions from field theory. // Phys. Rev. Lett. 1977. V. 39. P. 95.

[17] Владимиров А.А., Казаков Д.И., Тарасов О.В. О вычислении критических индексов методами квантовой теории поля. // ЖЭТФ. 1979. V. 77. P. 1035.

[18] Guida R., Zinn-Justin J. Critical exponents of the N-vector model. // J. Phys. A. 1998. V. 31. P. 8103.

[19] Mudrov A.I., Varnashev K.B. Modified Borel summation of divergent series and critical exponent estimates for an N-vector cubic model in three dimensions from five-loop ε expansions. // Phys. Rev. E. 1998. V. 58. V. 5371.

[20] Varnashev K.B. Stability of a cubic fixed point in three dimensions: Critical exponents for generic N. // Phys. Rev. B. 2000. V. 61. P. 14660.

[21] Pelessetto A., Vicari E. Critical phenomena and renormalization-group theory. // Phys. Rep. 2002. V. 368. P. 549.