Механическая модель фазового перехода II рода

Яков Фоминов

Последнее редактирование: 14 октября 2025 г.

Оглавление

Оглавление **1**
1 Фазовые переходы в физике. 1
1.1 Переходы I и II рода 2
1.2 Параметр порядка 2
2 Механическая модель. 3
2.1 Шарики на стержнях с пружинками. 3
2.2 Волны и мягкая мода. 4
2.3 Перестройка равновесного состояния системы. 5
3 Вопрос для самопроверки. 6

Литература:

[1] Г.Л. Коткин, В.Г. Сербо, «Сборник задач по классической механике» (РХД, 2001), задача 7.8.
[2] Модификация задачи [1] Н.А. Степановым в рамках «Серии неформальных лекций по физике для студентов младших курсов (2020-2021)» от кафедры проблем теоретической физики МФТИ: https://youtu.be/H9goPqn7Wf4

1 Фазовые переходы в физике.

В физике известно много фазовых переходов, имеющих место при изменении температуры:

- Переход вода–лёд.
- Переход парамагнетик–ферромагнетик.
- Переход металл–сверхпроводник.
- Структурные переходы в кристаллах.

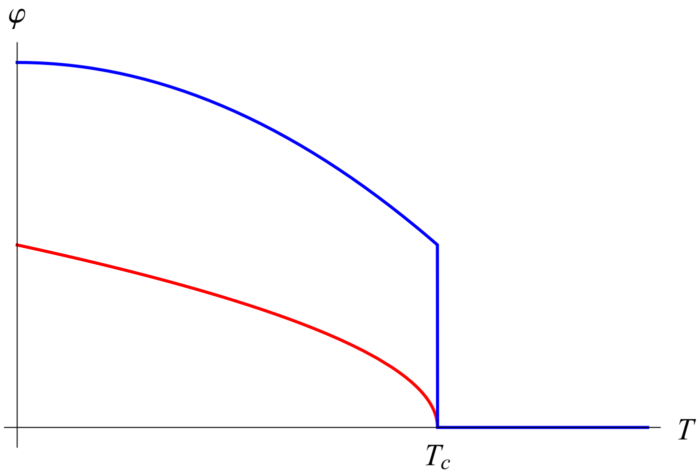

Рис. 0.1: Характерный вид зависимости параметра порядка от температуры. Синяя кривая — переход I рода, красная — II рода.

1.1 Переходы I и II рода

В зависимости от ситуации нужно рассматривать правильный термодинамический потенциал (свободная энергия F, энергия Гиббса G, функционал Ландау Ω и т.д.). Термодинамический потенциал в точке перехода непрерывен, а вот его производные могут быть разрывны.

- Переход I рода: разрывна первая производная $\partial F/\partial T$ [имеют скачок величины типа энтропии $S = -(\partial F/\partial T)_V$, объёма $V = -(\partial G/\partial P)_T$, давления $P = -(\partial F/\partial V)_T$].

- Переход II рода: разрывна вторая производная $\partial^2 F/\partial T^2$ [имеют скачок величины типа «отклика»: теплоёмкость $c = T(\partial S/\partial T)_V$, проводимость σ, магнитная восприимчивость μ].

1.2 Параметр порядка

В рамках теории фазовых переходов Ландау состояние системы характеризуется параметром порядка φ. В «высокотемпературной» фазе параметр порядка равен нулю ($\varphi = 0$, симметричная фаза), в «низкотемпературной» фазе $\varphi \neq 0$ (несимметричная фаза). Переход рассматривается как изменение симметрии системы.

Пример: трансформация квадратной кристаллической решётки со стороной a_x в прямоугольную со сторонами a_x и a_y. Параметр порядка можно определить как $\varphi = (a_y - a_x)/a_x$. Нулевой параметр порядка соответствует высокой симметрии (система переходит в себя при вращениях на угол $\pi/2$), а ненулевой — пониженной симметрии (система переходит в себя при вращениях на вдвое больший угол π).

При фазовом переходе I рода φ в точке перехода ($T = T_c$) возникает скачком при понижении температуры, при фазовом переходе II рода — непрерывно. Теоретическое описание фазовых переходов II рода оказывается проще, т.к. вблизи перехода параметр порядка очень мал, по нему можно раскладывать как по малому параметру.

2 Механическая модель.

2.1 Шарики на стержнях с пружинками.

Возьмём много одинаковых вертикальных стержней, на которые нанизаны шарики массой m, движение которых управляется вертикальными пружинами жёсткости k. Пусть положение равновесия — $y = 0$. Вертикальное движение каждого отдельного шарика определяется уравнением Ньютона

$$m\frac{d^2y}{dt^2} = -ky \tag{1}$$

(в правой части — линейная возвращающая сила, соответствующая закону Гука для малых отклонений от равновесия). Решение имеет вид

$$y(t) = A\cos(\omega_0 t + \beta), \qquad \omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}, \tag{2}$$

где фаза β определяется начальными условиями. Фазу можно устранить сдвигом начала отсчёта времени, и решение удобно тогда писать в комплексном виде

$$y(t) = Ae^{-i\omega_0 t}. \tag{3}$$

При такой записи настоящая физическая координата — это $\operatorname{Re} y(t)$, скорость — это $\operatorname{Re} dy/dt$ и т.д.

Пусть теперь мы расставили эти стержни на расстоянии a друг от друга (это расстояние вдоль x). В равновесии все шарики находятся при $y = 0$, и мы их соединяем пружинами жёсткости $\varkappa$, никак не растянутыми в равновесии. Теперь у нас каждый шарик движется по вертикали под управлением пружин k и все они связаны между собой «горизонтальными» пружинами $\varkappa$ (горизонтальные они в равновесии, а при отклонении от него будут наклоняться).

- Утверждение (пока не очевидное): добавление нерастянутых горизонтальных пружин не меняет малых колебаний наших шариков. А вот если мы эти пружины растянем или сожмём, то это будет влиять. По системе тогда может проходить волна, в которой все шарики движутся согласованно. Наиболее интересные явления имеют место при сжатии.

Постановка задачи: считаем, что мы сжали горизонтальные пружины, так что вместо расстояния a теперь будет расстояние b. Управляющий параметр нашей задачи (не путать с параметром порядка, который сам собой возникнет в системе) можно определить как

$$\alpha = \frac{a-b}{a}. \tag{4}$$

В нашей механической задаче этот параметр играет роль, аналогичную температуре в термодинамических фазовых переходах: мы меняем α, и оказывается, что при некотором значении α_c в системе нарушится симметрия и возникнет ненулевой параметр порядка. Это всё мы сейчас получим.

Поделим систему на «блоки». Блок с номером n — это стержень и шарик с номером n плюс горизонтальная пружина, идущая вправо (к шарику номер $n+1$). Кинетическая, потенциальная и полная энергия такого блока

$$K_n = \frac{m}{2}\left(\frac{dy_n}{dt}\right)^2, \tag{5}$$

$$U_n = \frac{m\omega_0^2 y_n^2}{2} + \frac{m\omega_{\|}^2}{2}\left(\sqrt{b^2 + (y_{n+1} - y_n)^2} - a\right)^2. \tag{6}$$

Полная энергия всей системы:

$$E = \sum_n (K_n + U_n)\,. \tag{7}$$

Уравнения движения (уравнения Ньютона):

$$m\frac{d^2 y_n}{dt^2} = -\frac{\partial U}{\partial y_n} \tag{8}$$

(в левой части — масса на ускорение, в правой — сила, которая равна минус градиенту потенциальной энергии). Будем рассматривать малые колебания, при которых $|y_n| \ll a, b$. Раскладываем по Тейлору:

$$\left(\sqrt{b^2+\Delta y^2}-a\right)^2 \approx \left[b\left(1+\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta y}{b}\right)^2-\frac{1}{8}\left(\frac{\Delta y}{b}\right)^4\right)-a\right]^2 \approx (b-a)^2 - \frac{a-b}{b}\Delta y^2 + \frac{a}{4b^3}\Delta y^4. \tag{9}$$

Константа здесь не важна — это просто сдвиг начала отсчёта потенциальной энергии. В то же время, мы видим, что при $\alpha = 0$ квадратичный по Δy вклад пропадает, а остаётся лишь вклад четвёртого порядка. Именно поэтому для малых колебаний можно считать, что нерастянутые горизонтальные пружины не влияют на колебания шариков (в главном порядке).

Теперь начнём с того, что забудем на время про вклад четвёртого порядка. Тогда

$$U_n = \frac{m}{2}\left[\omega_0^2 y_n^2 - \alpha\omega_\parallel^2 (y_{n+1}-y_n)^2\right]. \tag{10}$$

Нам надо будет дифференцировать по y_n полную потенциальную энергию U, поэтому надо учесть, что y_n входит ещё в U_{n-1}:

$$U_{n-1} = \frac{m}{2}\left[\omega_0^2 y_{n-1}^2 - \alpha\omega_\parallel^2 (y_n-y_{n-1})^2\right]. \tag{11}$$

В результате уравнение движения (8) даёт

$$\frac{d^2 y_n}{dt^2} = -\omega_0^2 y_n - \alpha\omega_\parallel^2 (y_{n+1}+y_{n-1}-2y_n). \tag{12}$$

Комбинация в последней скобке — это дискретное представление для второй производной по координате x.

2.2 Волны и мягкая мода.

Будем искать решение в виде волны с частотой ω и волновым вектором k:

$$y_n(t) = Ae^{-i\omega t + ikn}. \tag{13}$$

Уравнение (12) тогда даёт зависимость частоты от волнового вектора (которую в физике называют законом дисперсии):

$$\omega_k^2 = \omega_0^2 - 4\alpha\omega_\parallel^2 \sin^2(k/2). \tag{14}$$

Минимальное значение частоты ω_k достигается при $k = \pi$. А при критическом значении нашего управляющего параметра

$$\alpha_c = \frac{\omega_0^2}{4\omega_\parallel^2} \tag{15}$$

эта минимальная частота обращается в ноль. Возникает, как говорят, «мягкая мода» (колебание, не требующее энергии). Почему это так? Дело в том, что мы можем посчитать полную энергию

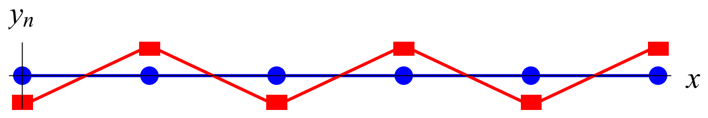

Рис. 0.2: Решение типа пилы, возникающее при $\alpha = \alpha_c$.

(7) для нашего решения [подставляя вещественные функции $y_n(t) = \mathrm{Re}(Ae^{-i\omega t+ikn})$ и $dy_n/dt = \mathrm{Re}(-i\omega Ae^{-i\omega t+ikn})$], и тогда окажется, что

$$E = \frac{m}{2}A^2\omega^2 N. \tag{16}$$

Таким образом, действительно, возникновение в системе колебания с частотой $\omega = 0$ не требует никакой энергии. То есть система может легко перейти в какое-то другое состояние.

Какой наглядный смысл найденной нами мягкой моды? Её пространственная зависимость — это просто чередующийся знак:

$$y_n(t) = A(-1)^n e^{-i\omega t}. \tag{17}$$

То есть это решение типа пилы.

А какая амплитуда реализуется? Из формулы (16) следует, что при ненулевой частоте зависимость $E(A)$ имеет вид параболы и любая конечная амплитуда стоит энергии. Поэтому если систему не заставлять, она выберет $A = 0$ для минимизации энергии. Но при $\omega = 0$ (что становится возможным при $\alpha = \alpha_c$) зависимость станет плоской, неясно, какое A надо выбирать. И тем более пока непонятно, как быть при $\alpha > \alpha_c$, когда формально возникают решения с отрицательными ω^2. На самом деле это всё указания на то, что в системе возникает неустойчивость и происходит перестройка равновесного состояния системы (в отсутствие зависимости от времени, ведь эта зависимость как раз пропадает при $\omega = 0$).

2.3 Перестройка равновесного состояния системы.

Найдём теперь равновесное состояние системы при различных α. Оказывается, что при достижении значения α_c надо вспомнить про слагаемое четвёртого порядка в разложении (9) (почему это важно, увидим ниже). Тогда вместо (10) и (11) получаем более точные разложения:

$$U_n = \frac{m}{2}\left[\omega_0^2 y_n^2 - \alpha\omega_\parallel^2(y_{n+1}-y_n)^2 + \frac{a}{4b^3}\omega_\parallel^2(y_{n+1}-y_n)^4\right], \tag{18}$$
$$U_{n-1} = \frac{m}{2}\left[\omega_0^2 y_{n-1}^2 - \alpha\omega_\parallel^2(y_n-y_{n-1})^2 + \frac{a}{4b^3}\omega_\parallel^2(y_n-y_{n-1})^4\right]. \tag{19}$$

Поэтому условие равновесия имеет вид

$$0 = \frac{\partial U}{\partial y_n} = m\left[\omega_0^2 y_n + \alpha\omega_\parallel^2(y_{n+1}+y_{n-1}-2y_n) + \frac{a}{b^3}\omega_\parallel^2\left((y_n-y_{n+1})^3 + (y_n-y_{n-1})^3\right)\right]. \tag{20}$$

Нам надо найти решение y_n разом для всех n.

Очевидно, существует тривиальное решение $y_n = 0$. Наше предыдущее рассмотрение подсказывает посмотреть на возможность нетривиального решения

$$y_n = (-1)^n A. \tag{21}$$

Подставим это в наше условие равновесия. Получаем

$$0 = \omega_0^2(-1)^n A + \alpha\omega_\parallel^2(-1-1-2)(-1)^n A + \frac{a}{b^3}\omega_\parallel^2 \cdot 2(-1)^{3n}A^3\left(-1-(-1)\right)^3. \tag{22}$$

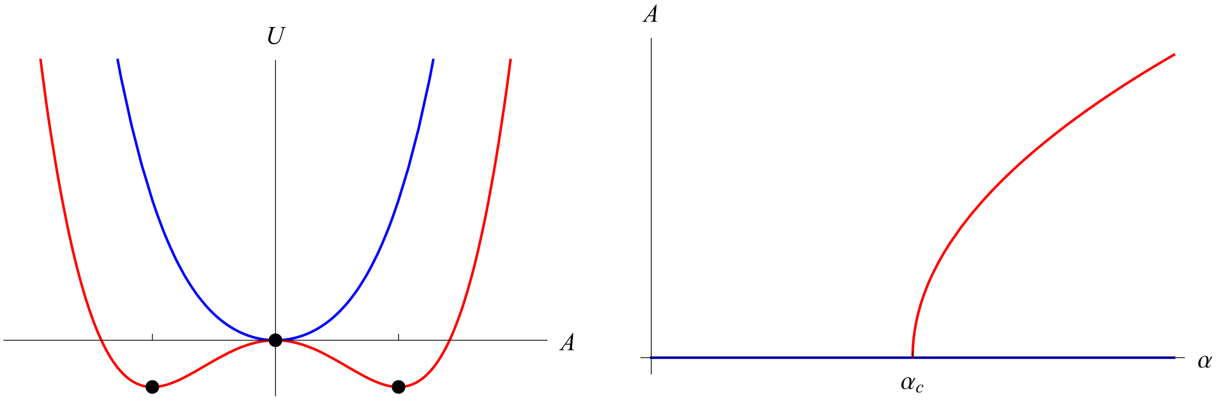

Рис. 0.3: Слева: зависимость потенциала от A. Синяя кривая — при $\alpha < \alpha_c$, красная — при $\alpha > \alpha_c$. Справа: зависимость равновесного значения A (отвечающего минимуму потенциала) от α. Синяя кривая — тривиальное решение, красная — нетривиальное (существует при $\alpha > \alpha_c$).

Выражая ω_0 с помощью (15) и упрощая, находим

$$A^2 = \frac{b^3}{4a}(\alpha - \alpha_c). \tag{23}$$

Таким образом, при $\alpha > \alpha_c$ в дополнение к тривиальному решению (которое существует всегда) появляется ещё и нетривиальное. И теперь, с учётом отброшенных ранее вкладов в разложение, мы можем найти его амплитуду.

Подведём итоги:

- При переходе α через критическое значение, нетривиальное решение появляется непрерывным образом. Это аналогично фазовому переходу второго рода. A играет в нашей задаче роль параметра порядка (а управляющий параметр α аналогичен температуре). Тривиальное решение $A = 0$ остаётся экстремумом, но теперь это максимум, поэтому это неустойчивое решение.
- Зависимость $A \propto (\alpha - \alpha_c)^{1/2}$ неаналитична. Такие степени представляют интерес при изучении фазовых переходов, их называют критическими индексами.
- До появления нетривиального решения мы имеем дело с симметричной фазой, т.к. тривиальное решение имеет симметрию $y \mapsto -y$. Нетривиальное решение такую симметрию нарушает. Это иллюстрация общего принципа нарушения симметрии при фазовом переходе.
- При температурных фазовых переходах симметричная фаза реализуется при высоких T. А у нас — при низких α. Но это непринципиальное различие, просто особенность нашей механической задачи.

3 Вопрос для самопроверки.

1. При фазовом переходе какая фаза имеет ненулевой параметр порядка?
   а) симметричная (фаза высокой симметрии)
   б) несимметричная (фаза пониженной симметрии)
   в) ни один из ответов выше не годится, т.к. возникновение ненулевого параметра порядка не связано с изменением симметрии