Общероссийский математический портал

А. Н. Васильев, Парные корреляции в низкоразмерной системе, *ТМФ*, 2006, том 147, номер 1, 129–136

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf2028>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 52.90.164.192

26 апреля 2023 г., 17:51:02

© 2006 г.

А. Н. Васильев*

ПАРНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ В НИЗКОРАЗМЕРНОЙ СИСТЕМЕ

Рассматривается система, состоящая из отдельных слоев, слабо взаимодействующих друг с другом. Каждый слой характеризуется скалярным параметром порядка. Изучаются корреляции флуктуаций параметра порядка в зависимости от количества слоев в системе.

Ключевые слова: низкоразмерная система, парные корреляции, критическое состояние

1. ВВЕДЕНИЕ

Системы, имеющие слоистую структуру, представляют существенный интерес и достаточно хорошо изучены [1], [2]. Физическая природа этих систем может быть разной, наиболее примечательными среди них являются, пожалуй, ферромагнетики [3], тонкие пленки [1] и пленочные анизотропные жидкости (различные типы смектических жидких кристаллов) [4]. Для последних получен ряд интересных данных. Однако результаты подобных исследований основаны в конечном итоге на численном анализе. В данной работе рассматривается модельный гамильтониан, с помощью которого описывается корреляционное поведение системы, состоящей из большого числа слоев. Каждый слой характеризуется скалярным параметром порядка. Предлагается метод, позволяющий получить аналитические выражения для парных корреляторов флуктуаций параметра порядка в системе.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Рассмотрим систему, которая состоит из N слоев. В рамках каждого слоя системе будем характеризовать отклонениями $\varphi_i(\vec{r})$ параметра порядка от равновесного значения (индекс i пробегает значения от 1 до N и нумерует слои системы). Часть свободной энергии, зависящую от флуктуации параметра порядка, возьмем в наиболее общем виде:

$$F\{\varphi\} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \int (a_{ij}\varphi_i\varphi_j + b_{ij}\vec{\nabla}\varphi_i\vec{\nabla}\varphi_j) d\vec{r}. \quad (1)$$

*Киевский национальный университет, Киев, Украина. E-mail: vasilev@univ.kiev.ua

Это выражение является обобщением гамильтониана Гинзбурга–Ландау на случай системы, имеющей слоистую структуру. Коэффициенты a_{ij} описывают взаимодействие параметра порядка в слоях с номерами i и j . Взаимодействие неоднородностей распределения параметра порядка в разных слоях определяется коэффициентами b_{ij} . Интегрирование выполняется в плоскости слоев.

Для дальнейшего анализа удобно уравнение (1) записать в матричном виде

$$F\{\varphi\} = \frac{1}{2} \int (\vec{\varphi}^+ \hat{A} \vec{\varphi} + \vec{\nabla} \vec{\varphi}^+ \hat{B} \vec{\nabla} \vec{\varphi}) d\vec{r}. \quad (2)$$

В этой формуле введен вектор-столбец $\vec{\varphi}(\vec{r})$, элементами которого являются отклонения $\varphi_i(\vec{r})$ параметра порядка от равновесного значения в разных слоях. Символом “+” обозначена операция транспонирования, а элементами матриц $\hat{A}$ и $\hat{B}$ являются коэффициенты a_{ij} и b_{ij} , соответственно. Очевидно, что матрицы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ являются симметричными.

Варьируя выражение (2), получаем уравнение, которому должен удовлетворять вектор отклонений параметра порядка от равновесного значения:

$$\hat{A} \vec{\varphi}(\vec{r}) - \hat{B} \Delta \vec{\varphi}(\vec{r}) = -\vec{S}(\vec{r}), \quad (3)$$

где введена функция источника $\vec{S}(\vec{r})$, которая описывает влияние внешнего поля.

3. ПАРНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ

Для определения статистических корреляций функцию источника необходимо взять пропорциональной дельта-функции Дирака. В этом случае решение уравнения (3) определяет реакцию распределения параметра порядка на точечное возмущение. При выборе правильного коэффициента это решение совпадает со статистическим коррелятором [3]. Для большей конкретности в дальнейшем положим $\vec{S}(\vec{r}) = k_B T \delta(\vec{r}) \vec{e}_j$, где через $\vec{e}_j$ обозначен единичный вектор-столбец, все элементы которого, кроме j -го, равны нулю, а ненулевой элемент равен единице. При таком выборе функции источника решение $\varphi_i(\vec{r})$ определяет парную корреляционную функцию флуктуаций параметра порядка $G_{ij}(\vec{r})$ для слоев с номерами i и j .

После преобразования Фурье из уравнения (3) получаем следующее уравнение:

$$(\hat{A} + q^2 \hat{B}) \vec{\varphi}(q) = k_B T \vec{e}_j, \quad (4)$$

формальное решение которого может быть записано в виде

$$\vec{\varphi}(q) = k_B T (\hat{A} + q^2 \hat{B})^{-1} \vec{e}_j. \quad (5)$$

Для того чтобы найти $\vec{\varphi}(q)$, нужно найти обратную матрицу $(\hat{A} + q^2 \hat{B})^{-1}$. Для этого мы можем воспользоваться подходом, развитым ранее при исследовании парных корреляций в многокомпонентных жидких системах [5]. В частности, представим упомянутую матрицу через спектральное разложение по собственным числам матрицы $\hat{\Lambda} = \hat{B}^{-1} \hat{A}$. Если через λ_i^2 ($i = 1, 2, \dots, N$) обозначить собственные числа

матрицы $\hat{\Lambda}$, то тогда можем записать следующее:

$$\vec{\varphi}(q) = k_B T \hat{B}^{-1} \sum_{n=1}^N \frac{\hat{\alpha}_n \vec{e}_j}{q^2 + \lambda_n^2}, \quad (6)$$

где матрицы спектрального разложения определяются равенствами

$$\hat{\alpha}_n = \prod_{\substack{s=1, \\ s \neq i}}^N \frac{\hat{E} \lambda_s^2 - \hat{\Lambda}}{\lambda_s^2 - \lambda_n^2}, \quad (7)$$

а через $\hat{E}$ обозначена единичная матрица ранга N . Учтем, что у единичного вектора-столбца $\vec{e}_j$ отличным от нуля является только элемент с номером j , тогда из (6) для парной корреляционной функции $G_{ij}(q)$ получаем

$$G_{ij}(q) = k_B T \sum_{n,k=1}^N \frac{\hat{B}_{ik}^{-1} \alpha_{n,kj}}{q^2 + \lambda_n^2}. \quad (8)$$

После перехода в $\vec{r}$ -пространство находим зависимость от координат для парных корреляционных функций:

$$G_{ij}(r) = k_B T \sum_{n,k=1}^N \hat{B}_{ik}^{-1} \alpha_{n,kj} K_0(\lambda_n r), \quad (9)$$

где $K_0(x)$ есть функция Макдональда. Таким образом, парная корреляционная функция флуктуаций параметра порядка является линейной комбинацией базисных функций, аргумент каждой из которых пропорционален соответствующему собственному числу матрицы $\hat{\Lambda}$.

4. АНАЛИЗ И ОЦЕНКИ

Очевидно, что особенность корреляционного поведения системы определяется в первую очередь набором собственных чисел матрицы $\hat{\Lambda}$. Поэтому для выполнения качественной оценки воспользуемся некоторыми приближениями. А именно, будем считать, что матрица $\hat{B}$ является диагональной с элементами $b_{ij} = B \delta_{ij}$, где δ_{ij} есть символ Кронекера. Это приближение соответствует тому, что в модели учитывается взаимодействие флуктуаций параметра порядка только в пределах одного слоя. Кроме того, предположим, что взаимодействие флуктуаций параметра в разных слоях экранируется каждым промежуточным слоем, в силу чего элементы матрицы $\hat{A}$ зависят только от разности индексов (по абсолютной величине). Точнее, рассмотрим случай $A_{ij} = \beta \eta^{|i-j|}$, где β есть константа взаимодействия параметра порядка в одном слое, а η – параметр экранирования, $|\eta| < 1$. При таких предположениях $B_{ij}^{-1} = \delta_{ij}/B$. В этом случае для парной корреляционной функции имеем

$$G_{ij}(r) = \frac{k_B T}{B} \sum_{n=1}^N \alpha_{n,ij} K_0(\lambda_n r). \quad (10)$$

Таким образом, для изучения характера флуктуаций в системе нужно вычислить (или оценить) собственные числа λ_n^2 . Матрица $\hat{\Lambda}$ с точностью до множителя совпадает с матрицей $\hat{A}$:

$$\hat{\Lambda} = \frac{1}{B} \hat{A}, \quad (11)$$

поэтому собственные числа этой матрицы с точностью до того же множителя совпадают с собственными числами матрицы $\hat{A}$. Последнюю можно представить в виде матричного ряда по параметру экранирования:

$$\hat{A} = \beta \sum_{m=0}^{N-1} \hat{A}_m \eta^m, \quad (12)$$

где все симметричные матрицы разложения $\hat{A}_m$ (кроме $\hat{A}_0$) имеют ненулевыми только две диагонали (на которых стоят единицы). Формально элементы этих матриц можно представить в виде

$$A_{m,ij} = \delta_{i,j-m} + \delta_{i,j+m}. \quad (13)$$

Эта формула справедлива для таких значений индексов в символах Кронекера, которые лежат в диапазоне от 1 до N включительно. Формула (13) определяет матрицы разложения для $m = 1, 2, \dots, N-1$. Матрица с нулевым индексом является единичной,

$$\hat{A}_0 = \hat{E}. \quad (14)$$

Собственные числа матрицы $\hat{A}$ будем искать в виде разложения по параметру экранирования. Для этого найдем матрицу перехода $\hat{U}$ такую, что матрица $\hat{U}^+ \hat{A} \hat{U}$ диагональна. Матрицу перехода также представим в виде разложения по параметру η :

$$\hat{U} = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{U}_k \eta^k. \quad (15)$$

Таким образом, задача сводится к поиску матриц $\hat{U}_k$. Помимо условия диагональности матрицы $\hat{U}^+ \hat{A} \hat{U}$ (этого условия для однозначного определения матрицы $\hat{U}$ недостаточно), воспользуемся еще и условием унитарности матрицы перехода:

$$\hat{U}^+ \hat{U} = \hat{E}. \quad (16)$$

Из уравнения (16) получаем, в частности, что

$$\hat{U}_0^+ \hat{U}_0 = \hat{E} \quad (17)$$

и для $s > 0$ выполняется соотношение

$$\sum_{n=0}^s \hat{U}_n^+ \hat{U}_{s-n} = \hat{O}, \quad (18)$$

где $\hat{O}$ есть матрица размера $N \times N$, все элементы которой равны нулю. Условие диагональности матрицы $\hat{U}^+ \hat{A} \hat{U}$ трансформируется в условие диагональности матриц $\hat{A}_m^*$:

$$\hat{A}_m^* = \sum_{\substack{n,k \\ n+k \leq s}} \hat{U}_n^+ \hat{A}_k \hat{U}_{m-n-k}. \quad (19)$$

Принимая во внимание выражения (14) и (17), приходим к выводу, что

$$\hat{A}_0^* = \hat{E}. \quad (20)$$

Взаимодействие параметра порядка в разных слоях оценим с точностью до матрицы $\hat{A}_1^*$. Другим словами, ограничимся линейными слагаемыми по параметру η . Такое приближение соответствует ситуации, когда взаимодействуют только соседние слои

Рис. 1. Зависимость собственных чисел a_i от количества слоев в системе N .

(рассмотрение общего случая существенно усложнило бы процедуру анализа, качественно не влияя на конечный результат). Из уравнений (18) и (19) после упрощений получаем, что

$$\hat{A}_1^* = \hat{U}_0^+ \hat{A}_1 \hat{U}_0. \quad (21)$$

Как уже отмечалось, эта матрица должна быть диагональной. Очевидно, что в этом случае матрица перехода может быть получена прямой суммой нормированных на единицу собственных векторов $\vec{l}_i$ ($i = 1, 2, \dots, N$) матрицы $\hat{A}_1$:

$$\hat{U}_0 = \vec{l}_1 \oplus \vec{l}_2 \oplus \dots \oplus \vec{l}_N. \quad (22)$$

При этом матрица $\hat{A}_1^*$ диагональна, и ее диагональные элементы являются собственными числами a_i матрицы $\hat{A}_1$. Таким образом, для определения вида матрицы $\hat{A}_1^*$

необходимо найти собственные числа матрицы $\hat{A}_1$. В рамках использованных приближений, искомые собственные числа матрицы $\hat{\Lambda}$ будут выражаться следующим образом:

$$\lambda_i^2 \approx \frac{\beta}{B}(1 + a_i \eta), \quad (23)$$

где параметры a_i являются решениями (относительно a) уравнения

$$\det |\hat{A}_1 - a\hat{E}| = 0. \quad (24)$$

Для системы, состоящей из N слоев, последнее выражение является полиномом относительно переменной a степени N . Его корни можно искать разными методами. В данном случае прибегнем к численному анализу. Так, если обозначить $F_N(a) = \det |\hat{A}_1 - a\hat{E}|$ для матриц ранга N , то несложно проверить, что имеет место рекуррентное соотношение $F_N(a) = -aF_{N-1}(a) - F_{N-2}(a)$ при условии, что $F_1(a) = -a$ и $F_2(a) = a^2 - 1$. Используя эти соотношения, можно проследить, как решения уравнения (24) зависят от количества слоев в системе. Такая зависимость показана на рис. 1. Как несложно заметить, с увеличением количества слоев увеличивается плотность распределения собственных чисел. Это является следствием двух обстоятельств. Во-первых, с увеличением количества слоев увеличивается количество собственных чисел, поскольку растет степень характеристического полинома и соответственно увеличивается количество корней (оно совпадает с числом слоев). Во-вторых, собственные числа лежат в пределах значений от -2 до 2 . Очевидно, что при фиксированном числе слоев особенности корреляционного поведения

Рис. 2. Зависимость максимального по модулю собственного числа из набора $\{a_i\}$ от количества слоев в системе N .

системы определяются тем слагаемым, которое соответствует минимальному собственному числу из набора $\{\lambda_i^2\}$. Поэтому интерес представляют максимальные (по

абсолютной величине) значения собственных чисел $\{a_i\}$. Другими словами, имеет смысл рассмотреть $a = \max_{i=1,2,\dots,N} |a_i|$. Зависимость этой величины от количества слоев в системе показана на рис. 2.

Если количество слоев больше десяти, дальнейшее их увеличение существенно-го влияния на корреляционное поведение системы практически не имеет. Однако здесь следует учесть одно немаловажное обстоятельство: данный результат получен в предположении о малости межслоевого взаимодействия. Если такое предположение для конкретной физической системы неприемлемо, следует проводить более точные оценки.

Приведенная на рис. 2 зависимость может служить критерием размерности системы: ее можно использовать для определения того, является ли система трехмерной или квазидвумерной.

Рис. 3. Соотношение вкладов в корреляционные функции основного слагаемого для системы из одного слоя, к вкладу аналогичного слагаемого для систем из нескольких слоев (сплошная линия для $N = 2$, штрихпунктирная линия для $N = 3$, штриховая линия для $N = 5$ и пунктирная линия для $N = 20$). Все величины безразмерные, значение $\eta = 0.1$.

Рис. 3 дает представление о соотношении вклада основного слагаемого (без учета линейного коэффициента) системы из одного слоя к вкладу аналогичного слагаемого для системы из нескольких слоев. На этом графике единице соответствует значение корреляционной функции (точнее, отдельного слагаемого) на разных расстояниях для одного слоя. С увеличением количества слоев в системе корреляции, как и следовало ожидать, усиливаются. Тем не менее такое усиление корреляций в связи с добавлением к системе очередного слоя существенно только на начальном этапе, т.е. для небольшого числа слоев.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подведем итоги. Получено общее выражение для парных корреляционных функций флуктуаций параметра порядка системы, состоящей из произвольного числа слоев. Качественные оценки для таких систем позволяют заключить, что в зависимости от количества слоев в системе последняя может менять свою размерность, переходя от квазидвумерной к трехмерной. Очевидно, в этом случае должен иметь место кроссовер критических параметров (по меньшей мере, должна меняться температура фазового перехода) [3]. Однако исследование этого вопроса подразумевает использование несколько иного методологического подхода и выходит за рамки данной статьи. Тем не менее можно утверждать, что несмотря на довольно сложную структуру корреляционных функций в них присутствует слагаемое, вносящее главный вклад в парные корреляции. Влияние этого слагаемого наиболее существенно сказывается на больших расстояниях, а также с увеличением количества слоев в системе.

Список литературы

- [1] В. Я. Антонченко, А. С. Давыдов, В. В. Ильин, *Основы физики воды*, Наукова думка, Киев, 1991.
- [2] P. G. de Gennes, J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals*, Oxford Univ. Press, Oxford; Clarendon, N.Y., 1993; P. Sens, M. S. Turner, *Eur. Phys. J. E*, **4** (2001), 115; Y. Lyatskaya, Y. Liu, S. Tristram-Nagle, J. Katsaras, J. Nagle, *Phys. Rev. E*, **63** (2000), 011907; B. Rovšek, M. Čepič, B. Žekš, *Phys. Rev. E*, **66** (2002), 051701.
- [3] А. З. Паташинский, В. Л. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов*, Наука, М., 1982.
- [4] S. Shibahara, J. Yamamoto, Y. Takanishi, K. Ishikawa, H. Takezoe, *Phys. Rev. E*, **62** (2000), R7599; I. N. de Olivera, M. L. Lyra, *Phys. Rev. E*, **65** (2002), 051711; M. A. Glaser, N. A. Clark, *Phys. Rev. E*, **66** (2002), 021711.
- [5] А. Н. Васильев, *ТМФ*, **135** (2003), 315.

Поступила в редакцию 25.VII.2005 г.