

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

УДК 537.622

НЕТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ СРЕДНЕГО ПОЛЯ АНСАМБЛЯ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ КВАНТОВЫХ ОБЪЕКТОВ

© 2025 г. Е. В. Розенфельд^а, Н. В. Мушников^{а, *}

^аИнститут физики металлов УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия

*e-mail: mushnikov@imp.uran.ru

Поступила в редакцию 29.11.2024 г.

После доработки 11.12.2024 г.

Принята к публикации 26.12.2024 г.

В приближении среднего поля изучены фазовые переходы в открытой системе, состоящей из ансамбля взаимодействующих квантовых подсистем с дискретным спектром. В рассматриваемой модели изменение внутренней симметрии термодинамической системы при фазовом переходе второго рода обусловлено изменением симметрии распределения зарядовой/спиновой плотности внутри каждой квантовой подсистемы. Последнее может быть вызвано как расщеплением одного из нижних вырожденных энергетических уровней, так и закрытием щели между уровнями и возникновением антикроссинга. Влияние внешних параметров (давление, поле, состав и т. д.) приводит к прямому изменению внутренних управляющих параметров: расстояния между уровнями и/или силы взаимодействия между соседними квантовыми подсистемами. В простейшем случае двухуровневых квантовых подсистем в аналитическом виде получены выражения для свободной энергии как функции внутренних управляющих параметров. Определено поведение теплоемкости и восприимчивости для различных областей низкотемпературной фазовой диаграммы, включая область квантовых флуктуаций.

Ключевые слова: фазовые переходы, квантовые системы, теория среднего поля

DOI: 10.31857/S0015323025020039, **EDN:** AZEGUW

1. ВВЕДЕНИЕ

Теории фазовых переходов, вызванных нарушением симметрии, оказали влияние на все области физики. Согласно Ландау [1, 2], непрерывный фазовый переход между двумя фазами возможен, если группа симметрии одной фазы является подгруппой другой фазы. Теория Ландау основана на предположении, что свободная энергия F системы является аналитической функцией параметра порядка m и может быть разложена в степенной ряд:

$$F = Am^2 + Bm^4 + Cm^6 + \dots \quad (1)$$

Здесь A , B , C и т. д. — коэффициенты, которые могут зависеть от различных степеней свободы. Физическое значение m соответствует минимуму свободной энергии F .

Теория Ландау удивительно универсальна. Она успешно применяется для вызванных изменением температуры фазовых переходов как второго, так и первого рода [3, 4]. Условия существования фазовых переходов достаточно общие. Для переходов второго рода коэффициент

A должен изменять знак в точке перехода, если $B > 0$. Если выполняются условия $B < 0$ и $C > 0$, то переход от $m \neq 0$ к $m = 0$ происходит скачкообразно. Выбрав подходящий набор коэффициентов A , B , C , можно воспроизвести зависимость $F(m)$ для любой точки на линии фазового перехода фазовой диаграммы. Однако для определения самой фазовой диаграммы необходимо ввести зависимость коэффициентов разложения Ландау от параметров, определяющих физическое состояние системы. Результаты расчетов могут принципиально различаться в зависимости от того, какой вид взаимодействий учитывается в расчете.

В последние десятилетия большое внимание уделяется изучению магнитных фазовых переходов, которые происходят при нулевой температуре и управляются нетепловыми параметрами. Одной из интенсивно изучаемых областей является область квантовой неустойчивости [5–7]. Для квантового фазового перехода параметр порядка m может уменьшаться вплоть до нуля при изменении внешнего управляющего параметра,

при этом в квантовой критической точке при $m = 0$ изменяется основное состояние. При конечных температурах вблизи квантовой критической точки основное состояние системы не может быть определено однозначно, и возникает область квантовых флуктуаций, которые сильно влияют на свойства вещества [8, 9]. При описании квантовых фазовых переходов многие теоретические исследования начинаются с применения теории Ландау [4, 9–11]. Примером фазового перехода при нулевой температуре в системе локализованных электронов является спин-кроссовер из высокоспинового в низкоспиновое состояние в диэлектриках Мотта–Хаббарда [12–14]. Метамagnetизм коллективизированных электронов, т. е. переход из парамагнитного в ферромагнитное состояние под действием магнитного поля [15, 16], представляет интерес не только с фундаментальной, но и с практической точки зрения из-за больших магнитотепловых и магнитообъемных эффектов [17, 18]. Метамagnetный переход в зонной системе электронов может быть успешно описан с помощью теории Ландау [19–21].

Основная цель настоящего исследования, исходя из теории Ландау, — получить наиболее общее описание фазовых переходов, происходящих при низкой температуре и управляемых изменением давления, магнитного поля, состава сплава или любых других физических параметров, за исключением температуры. Мы рассматриваем открытую квантовую систему [22], содержащую квантовые подсистемы с дискретным спектром (например, неполную электронную оболочку переходного элемента). Взаимодействие между квантовыми подсистемами рассматривается в приближении среднего поля. Для области низких температур мы ограничиваемся лишь минимальным числом низколежащих уровней в спектре квантовых подсистем. При таком подходе параметрами, вызывающими фазовый переход, являются либо расстояние между уровнями, либо сила взаимодействия между квантовыми подсистемами. Рассматривая только двухуровневые квантовые подсистемы, мы изучили поведение теплоемкости и магнитной восприимчивости вблизи фазового перехода. Выражения для свободной энергии, рассмотренные в аналитической форме, оказались удобными для описания как температурно-индуцированных, так и происходящих при нулевой температуре фазовых переходов второго рода.

2. МОДЕЛЬ

Единственное базовое понятие теории Ландау, относящееся к внутренней структуре системы, состоит в том, что при фазовом переходе второго рода изменяется ее внутренняя симметрия. Мы

конкретизировали это понятие, рассматривая систему как ансамбль взаимодействующих квантовых подсистем (КВП) с дискретным спектром. По-видимому, следует рассмотреть два новых элемента: внутренний квантовый параметр, характеризующий спектр системы, и новый параметр порядка, обеспечивающий соответствие структуры КВП состоянию макроскопической физической системы. Тогда воздействие внешних управляющих параметров сводится либо к прямому изменению расстояний между уровнями в спектре, либо к изменению величины взаимодействия между квантовыми подсистемами.

Предположим, что спектр квантовых подсистем известен и что при изменении внутреннего управляющего параметра Δ симметрия квантовых объектов изменяется в точке $\Delta = \Delta_c$. Изменение симметрии волновых функций может происходить в результате гибридизации соседних уровней или расщепления вырожденных уровней.

Предположение о дискретном спектре КВП подразумевает, что их характерный размер мал, так что каждая из квантовых подсистем может взаимодействовать лишь с небольшим числом n ближайших соседей. Тем не менее при описании взаимодействия между КВП мы будем использовать приближение среднего поля, что кардинально упрощает решение. Любые изменения в спектре КВП, приводящие к изменению симметрии распределения плотности заряда/спиновой плотности внутри каждой из них, являются результатом и одновременно приводят к некоторым изменениям эффективного среднего поля, действующего на все КВП в системе. Это поле есть просто сумма полей, создаваемых каждой из КВП, и именно оно может быть использовано в качестве параметра порядка.

Предложенный подход приводит к двум принципиально новым возможностям по сравнению с классической теорией Ландау. Во-первых, теперь мы можем рассматривать квантовые эффекты в рамках феноменологической модели, а во-вторых, свободная энергия оказывается простой аналитической функцией температуры и внутренних управляющих параметров, которую можно использовать вместо выражения (1) для свободной энергии.

Одним из принципиальных моментов в этом приближении является появление в гамильтониане дополнительного члена, описывающего нечто вроде “собственной энергии” молекулярного поля. Он появляется из-за того, что невозможно просто заменить произведение операторов, связанных с различными квантовыми подсистемами, его средним значением, например,

$$\hat{O}_i \cdot \hat{O}_j \Rightarrow \hat{O}_i \langle O_j \rangle + \langle O_i \rangle \hat{O}_j - \langle O_i \rangle \langle O_j \rangle, \quad (2)$$

поскольку необходимо избежать удвоения соответствующего вклада в энергию их взаимодействия:

$$\langle \hat{O}_i \cdot \hat{O}_j \rangle \Rightarrow 2 \langle O_i \rangle \langle O_j \rangle.$$

Поскольку для низкотемпературных эффектов вклад высших состояний пренебрежимо мал из-за их малой заселенности, в теории достаточно рассматривать только самые нижние уровни в спектре КВП. Ниже мы рассмотрим простейшую конфигурацию с двумя нижними уровнями в спектре квантовых подсистем.

3. ДВУХУРОВНЕВЫЕ КВАНТОВЫЕ ПОДСИСТЕМЫ, ВЫРОЖДЕННЫЕ УРОВНИ

В теории Ландау фазовый переход второго рода — это переход между двумя состояниями системы, одно из которых является высокосимметричным, а другое — низкосимметричным. В нашей модели переход такого типа возникает в ансамбле двухуровневых КВП, энергии состояний которых совпадают в высокосимметричной фазе, хотя их волновые функции обладают разной симметрией. Примером такой системы является ферромагнетик со спином $S = 1/2$. В каждом из состояний с $S_z \equiv M = \pm 1/2$ два направления оси \hat{z} неэквивалентны. Однако в высокосимметричной (парамагнитной) фазе вероятности их заселения равны, а направления $+\hat{z}$ и $-\hat{z}$ эквивалентны. Если снять вырождение, вероятности заселения расщепленных уровней становятся различными, симметрия одной из волновых функций внутри КВП преобладает, а вне ее возникает поле, стабилизирующее расщепление уровней в соседней КВП.

Для описания системы, содержащей такие двухуровневые КВП, удобно ввести операторы спина с $S = 1/2$ и использовать гамильтониан Гейзенберга:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \Lambda \sum_i \sum_{j=1}^n (\hat{S}_i \hat{S}_j). \quad (3)$$

Здесь Λ — параметр спинowego взаимодействия, суммирование по j проводится для n КВП, являющихся ближайшими соседями, взаимодействующими с i -й КВП. Подчеркнем, что в (3) и далее рассматривается эффективный спин, так что системы, описываемые соответствующими эффективными спинowymi гамильтонианами, могут иметь любое происхождение.

Заменяя скалярное произведение спинов на произведение их z -компонент и используя уравнение (2) для устранения двойного учета вклада в энергию в приближении среднего поля,

получаем свободную энергию системы на одну КВП:

$$F = -k_B T \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\Theta \mu}{T} \right) \right] + \frac{k_B \Theta}{2} \mu^2, \quad (4)$$

$$\mu = 2 \langle \hat{S}_z \rangle, \quad \Theta = \frac{n \Lambda}{4 k_B}.$$

Разложение свободной энергии в ряд по параметру порядка μ дает выражение:

$$F(\mu) = \frac{\Theta(T - \Theta)}{2T} \mu^2 + \frac{\Theta^4}{12T^3} \mu^4 + \dots, \quad (5)$$

и соответствующая критическая температура перехода определяется из условия $T_c = \Theta$. Точное уравнение, определяющее минимум F , имеет стандартный вид:

$$\mu(t) = \tanh \left(\frac{\mu}{t} \right), \quad t = T/\Theta \quad (6)$$

и дает то же значение критической температуры, что и полученное из разложения (5), но несколько иную температурную зависимость параметра порядка.

Введение в (3) энергии взаимодействия с внешним полем сразу приводит к стандартной восприимчивости Кюри–Вейсса. Теплоемкость любой системы с гамильтонианом (3) в приближении молекулярного поля также имеет стандартный вид:

$$C(T) = k_B \Theta \frac{d}{dT} \left[-\mu \tanh \left(\frac{\Theta \mu}{T} \right) + \frac{1}{2} \mu^2 \right]_{\mu = \tanh \left(\frac{\mu}{t} \right)} =$$

$$= -k_B \mu(t) \frac{d}{dt} \mu(t) \Big|_{t=T/\Theta}. \quad (7)$$

Теплоемкость резко падает при $T \rightarrow 0$, зависит от t почти линейно в диапазоне $0.3 < t < 1$ и исчезает при $t > 1$ [23].

Очевидно, что аналогичная свободная энергия (4) будет характерна для упругой матрицы, в которую вставлены центры Яна–Теллера. В этом случае параметр Θ будет контролировать жесткость матрицы. В более широком смысле это утверждение справедливо для систем любой природы, см. [24]. В выражении (4) член $\frac{1}{2} k_B \Theta \mu^2$ определяет “собственную энергию” молекулярного поля. Видно, что с математической точки зрения описание обычного фазового перехода второго рода в нашей модели очень похоже на описание коллективного эффекта Яна–Теллера. В обоих случаях переход происходит при понижении температуры, когда после расщепления уровней разность вероятностей их заселения становится столь существенной, что выигрыш в энергии ансамбля “активных центров”

или квантовых подсистем (логарифмический член в (4)) превышает потерю упругой энергии или энергии молекулярного поля. Ситуация, когда при $T \rightarrow 0$ такой переход не может произойти спонтанно, может реализоваться только для ансамбля невзаимодействующих КВП с $\Lambda = 0$ в (3). Таким образом, в рамках нашей модели существование фазового перехода второго рода при понижении температуры является особенностью систем, имеющих в высокосимметричной фазе настолько высокую симметрию, что два нижних уровня в спектре КВП становятся вырожденными.

4. ДВУХУРОВНЕВЫЕ КВАНТОВЫЕ ПОДСИСТЕМЫ, НЕВЫРОЖДЕННЫЕ УРОВНИ

Если симметрия системы в высокосимметричной фазе не столь высока, то энергии ε_1 и ε_2 состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$, волновые функции которых обладают разной симметрией, будут разными. Внешнее воздействие соответствующей природы может уменьшить расщепление уровней $\Delta = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$ или даже изменить его знак. В последнем случае изменяется основное состояние КВП и произойдет фазовый переход.

Дополнительные особенности появляются, если соседние КВП, находящиеся в разных состояниях, взаимодействуют друг с другом. Примером такой системы может служить ансамбль обменно-связанных магнитных ионов с целым спином $S \geq 1$ и анизотропией типа “легкая плоскость”. Для изменения расстояния Δ между нижними уровнями $S_z = M$ и $M + 1$ достаточно изменить напряженность внешнего магнитного поля, направленного вдоль оси трудного намагничивания z [25]. Принципиальное отличие от рассмотренного выше случая состоит в том, что при расщеплении вырожденного уровня одно из его собственных состояний становится основным. При сокращении расстояния между взаимодействующими уровнями $|1\rangle$ и $|2\rangle$ должен возникать антикроссинг, приводящий к гибридизации этих уровней, так что волновые функции новых основного $|g\rangle$ и возбужденного $|e\rangle$ состояний, являясь линейными комбинациями функций $|1\rangle$ и $|2\rangle$, обладают более низкой симметрией, чем каждая из них.

4.1. Гамильтониан и свободная энергия

Предполагая для простоты, что между соседними КВП, находящимися в одинаковых состояниях, нет взаимодействия, запишем гамильтониан в виде:

$$\hat{H} = \sum_i \left\{ \varepsilon_1 |i1\rangle \langle i1| + \varepsilon_2 |i2\rangle \langle i2| - \frac{1}{2} \Lambda \sum_{j=1}^n \left(\hat{O}_i \hat{O}_j^\dagger + \hat{O}_i^\dagger \hat{O}_j \right) \right\},$$

$$\hat{O}_i = |i1\rangle \langle i2|. \quad (8)$$

Легко видеть, что гамильтониан (8) аналогичен гамильтониану модели Изинга в поперечном магнитном поле [26]. Предположим также, что при гибридизации уровней, которая в приближении молекулярного поля сопровождается спонтанным нарушением симметрии, параметр порядка m будет определяться как

$$m = \langle \hat{O}_i + \hat{O}_i^\dagger \rangle, \quad \langle \hat{O}_i - \hat{O}_i^\dagger \rangle = 0. \quad (9)$$

Тогда гамильтониан приобретает вид:

$$\hat{H} = \sum_i \left\{ \varepsilon_1 |i1\rangle \langle i1| + \varepsilon_2 |i2\rangle \langle i2| - \left(\frac{1}{2} \Lambda n m + h \right) \left(\hat{O}_i + \hat{O}_i^\dagger \right) + \frac{1}{4} \Lambda n m^2 \right\}, \quad (10)$$

где h — внешнее поле соответствующей природы, которое способствует гибридизации. Теперь гамильтониан можно легко диагонализировать:

$$|g\rangle = \alpha |1\rangle + \beta |2\rangle, \quad |e\rangle = -\beta |1\rangle + \alpha |2\rangle,$$

$$E_{e,g} = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2 \pm K}{2};$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{K + \Delta}{2K}}, \quad \beta = \sqrt{\frac{K - \Delta}{2K}}, \quad (11)$$

$$K = \sqrt{\Delta^2 + (\Lambda n m + 2h)^2}, \quad \Delta = \varepsilon_2 - \varepsilon_1.$$

Если при $T = 0$ и $h = 0$ будет происходить адиабатическое изменение Δ , то в любой момент времени система будет находиться в основном состоянии и, согласно (9),

$$m = \langle g | \hat{O} + \hat{O}^\dagger | g \rangle = 2\alpha\beta = \frac{\Lambda n m}{K} \leq 1. \quad (12)$$

Следовательно, $K \equiv \Lambda n$, если $m \neq 0$. Максимальное значение $m = 1$ достигается при $\Delta = 0$, и это как раз соответствует критической точке фазового перехода. Однако это ни в коем случае не означает, что слева от точки фазового перехода основное состояние будет $|1\rangle$, а справа $|2\rangle$. Одно из этих состояний становится основным только при $|\Delta| > \Lambda n$, когда самосогласованное уравнение (12) имеет только тривиальное решение $m = 0$. В противном случае имеем:

$$m^2 = 1 - \left(\frac{\Delta}{\Lambda n} \right)^2, \quad (13)$$

и $|g\rangle$ и $|e\rangle$ являются суперпозициями состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$. Согласно терминологии, введенной

Ландау [6, 27], это область квантовых флуктуаций. При определении, остается ли в этой области система в состоянии $|1\rangle$ или $|2\rangle$, оба решения были получены с разными, но конечными вероятностями, поскольку функция основного состояния является суперпозицией двух состояний, а не из-за тепловых флуктуаций системы.

При конечных температурах выражение для свободной энергии принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \theta &= \Lambda n / 2k_B, \quad \vartheta = \Delta / k_B, \\ F &= \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} - \\ &- k_B T \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\sqrt{\vartheta^2 + 4 \left(\theta m + \frac{h}{k_B} \right)^2}}{2T} \right) \right] + (14) \\ &+ \frac{1}{2} k_B \theta m^2 \approx \text{const} + A m^2 + B m^4 \dots; \\ A &= \frac{k_B \theta^2}{\vartheta} \left[\frac{\vartheta}{2\theta} - \tanh \left(\frac{\vartheta}{2T} \right) \right]. \end{aligned}$$

Последующие члены этого разложения не имеют особенностей. Экстремумы F являются корнями уравнения

$$\frac{K}{\Lambda n} m = \left(m + \frac{2h}{\Lambda n} \right) \tanh \left(\frac{K}{\Lambda n t} \right), \quad t = T/\theta. \quad (15)$$

Это означает, что при отсутствии поля выражение для свободной энергии F (14) всегда имеет тривиальный экстремум в точке $m = 0$, который достигается только в “чистых” состояниях $|1\rangle$ и $|2\rangle$, и еще один нетривиальный минимум возникает при $T < T_C = \theta$:

$$K(m) = 2k_B \theta \mu \left(\frac{T}{\theta} \right) \Rightarrow m^2 = \mu^2 \left(\frac{T}{\theta} \right) - \left(\frac{\vartheta}{2\theta} \right)^2, \quad (16)$$

для сравнения см. выражения (6) и (13).

Таким образом, в окрестности критической точки ($\vartheta = 0$, $T = 0$) на фазовой диаграмме системы (рис. 1) существует область фазы с квантовыми флуктуациями, на границе которой возникает фазовый переход второго рода, сопровождающийся изменением симметрии системы и обращением в нуль параметра порядка. Если в эксперименте температура изменяется при постоянном значении $\Delta = k_B \vartheta$, то в диапазоне температур $0 < T < \infty$ возникает только один переход. Однако если Δ изменяется при $T = \text{const}$, то возникают два последовательных фазовых перехода. Из (16) и из разложения Ландау для A (14)

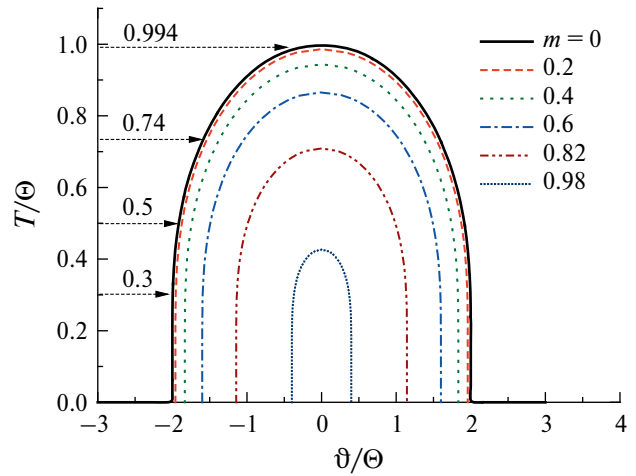


Рис. 1. Фазовая диаграмма в координатах (ϑ , T). Стрелками показаны температуры, для которых на рис. 2 приведены кривые теплоемкости.

следует, что граница фазы с квантовыми флуктуациями определяется уравнением

$$\vartheta = 2\theta \mu \left(\frac{T}{\theta} \right) \quad (17)$$

и в некотором смысле может быть названа линией квантового фазового перехода.

4.2. Почему в фазе с квантовыми флуктуациями щель между основным и возбужденным состояниями не зависит от величины Δ ?

Из выражения (15) видно, что при $h = 0$ расщепление уровней (т. е. величина $K / \Lambda n$) в фазе с квантовыми флуктуациями зависит от температуры, а не от Δ . Причину возникновения такой особенности в поведении системы легко понять, если проанализировать зависимость минимума F от Δ при очень низких температурах, см. [28]. В этом случае минимизация свободной энергии, эквивалентная самосогласованной процедуре (12), сводится к минимизации функции:

$$f(x) = \theta x^2 - \sqrt{\vartheta^2 + 4(\theta x)^2}. \quad (18)$$

В случае $\vartheta > 2\theta$ минимум функции f достигается при $x = 0$. Для случая $\vartheta < 2\theta$ значение квадратного корня оказывается постоянным в точке минимума x_{\min} : $\sqrt{\vartheta^2 + 4(\theta x_{\min})^2} \equiv 2\theta$. В результате для расщепления уровней Δ в окрестности фазового перехода в диапазоне $-\Lambda n \leq \Delta \leq \Lambda n$ степень гибридизации уровней постоянно “подстраивается” таким образом, чтобы щель между основным и возбужденным состоянием оставалась неизменной, $K = \Lambda n$.

Такая же математическая особенность существует и в случае минимизации свободной энергии при конечной температуре, когда

вместо функции (18) минимизируется функция $\theta x^2 - \tilde{f}(\sqrt{\vartheta^2 + 4(\theta x)^2})$. В результате, корнем (15)

теперь является m , а K снова не зависит от Δ . При этом зависимость (16) от t получается несколько более сложной.

4.3. Теплоемкость

Поведение теплоемкости в области фазы с квантовыми флуктуациями и вне этой области совершенно различно. Поскольку щель между основным и возбужденным состояниями остается неизменной при фиксированной температуре, теплоемкость C не зависит от ϑ в области фазы с квантовыми флуктуациями (рис. 2). Кроме того, в верхней части области фазы с квантовыми флуктуациями на фазовой диаграмме, рис. 1, теплоемкость C практически линейно зависит от температуры. Дело в том, что температурная зависимость внутренней энергии U_{QF} системы с гамильтонианом (10) и температурная зависимость обменной энергии ферромагнетика со спином $1/2$ подобны друг другу:

$$\begin{aligned} U_{QF}(T) - \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} &= \\ &= -\frac{1}{4k_B\theta} K^2 \Big|_{K=2k_B\theta\mu(T/\theta)} + \frac{1}{2} k_B\theta\mu(T/\theta)^2 = (19) \\ &= -\frac{1}{2} k_B\theta\mu^2. \end{aligned}$$

Следовательно, теплоемкость системы также должна совпадать с (7).

За пределами области фазы с квантовыми флуктуациями система представляет собой ансамбль обычных двухуровневых квантовых подсистем, обладающих теплоемкостью Шоттки.

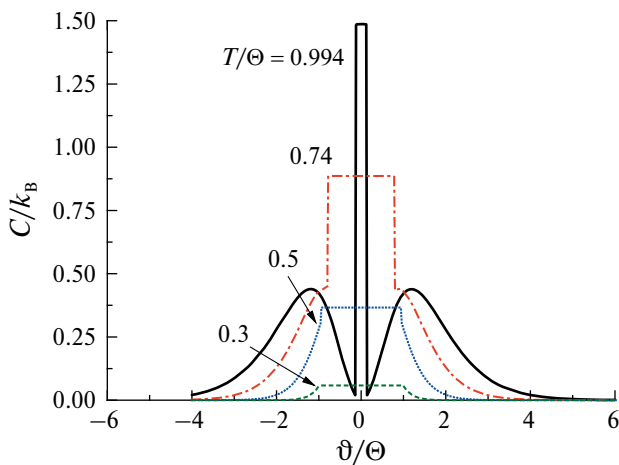


Рис. 2. Зависимость теплоемкости C (20) в системе двухуровневых квантовых подсистем (10) от расщепления уровней $\Delta = k_B\vartheta$ для различных температур.

Исходя из этого, для теплоемкости справедливо соотношение:

$$C(h, T) = k_B \begin{cases} \frac{x^2 e^{-x}}{(1 + e^{-x})^2} \Big|_{x=\vartheta/T}, & \vartheta > 2\theta\mu(T/\theta) \\ -\mu(y) \frac{d}{dy} \mu(y) \Big|_{y=T/\theta}, & \vartheta \leq 2\theta\mu(T/\theta) \end{cases}. \quad (20)$$

Таким образом, в приближении среднего поля вдоль всей границы области фазы с квантовыми флуктуациями (рис. 1) должен наблюдаться скачок теплоемкости, величина которого увеличивается с ростом температуры [29]. Поскольку $\lim_{x \rightarrow 1} [\mu(x)\mu'(x)] = 3/2$, в фазе с квантовыми флуктуациями теплоемкость, приходящаяся на одну квантовую подсистему, стремится к значению $1.5 k_B$ при $T \rightarrow \theta$. Как видно из рис. 2, этот предел достигается только в узкой области значений $|\vartheta| \ll \theta$.

С понижением температуры ширина области фазы с квантовыми флуктуациями быстро растет, так что интервал значений, в которых C постоянна, также увеличивается, рис. 2. Более того, для $\vartheta/\theta = 0$ теплоемкость практически линейно зависит от температуры в диапазоне температур от 0.4θ до 1θ (рис. 3). При повышении температуры интервал линейной зависимости $C(T)$ постепенно сужается.

4.4. Восприимчивость

В малом внешнем поле h зависимость (15) внутри области фазы с квантовыми флуктуациями и за ее пределами будет различной. Внутри области при $|\Delta| < \Lambda\eta\mu(t \equiv T/\theta)$ имеем:

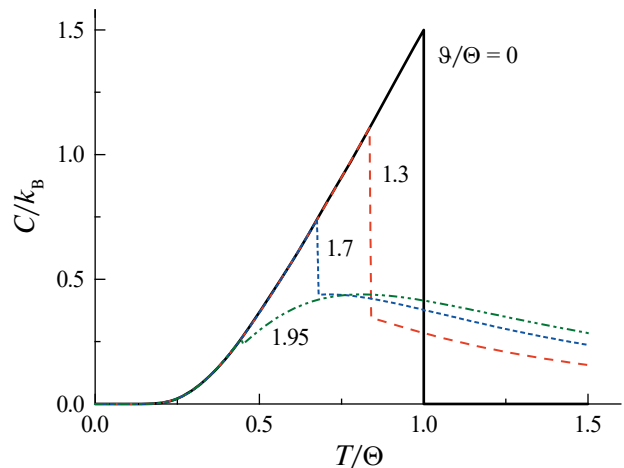


Рис. 3. Температурная зависимость теплоемкости при различных значениях ϑ/θ .

$$\chi_{QF}(t) \equiv \frac{\partial m}{\partial h} = \frac{1}{\theta} \frac{\left[\mu(t)^2 - \left(\frac{\vartheta}{2\theta} \right)^2 \right] \left[1 - \mu(t)^2 \right] + t \left(\frac{\vartheta}{2\theta} \right)^2}{\left[\mu(t)^2 - \left(\frac{\vartheta}{2\theta} \right)^2 \right] \left[t + \mu(t)^2 - 1 \right]} \quad (21)$$

С ростом температуры в этой области восприимчивость монотонно возрастает и расходится на ее границе. За пределами области фазы с квантовыми флуктуациями при минимизации свободной энергии (14) следует учитывать изменение тривиального корня $m = 0$ при изменении знака магнитного поля h , и в результате при $|\Delta| > \Lambda n$ ($t \equiv T/\theta$) получаем

$$\chi = \frac{2x}{\Delta - \Lambda n x} \Big|_{x=\tanh(\Delta/\Lambda n t)} \quad (22)$$

Это выражение также расходится на внешней границе области фазы с квантовыми флуктуациями, и при $T \rightarrow \infty$ восприимчивость монотонно убывает пропорционально обратной степени температуры. При $T \rightarrow 0$ восприимчивость остается конечной всюду, кроме точек $\Delta = \pm \Lambda n$:

$$\chi(T \rightarrow 0) = \begin{cases} \frac{2}{\Lambda n} \frac{\Delta^2}{(\Lambda n)^2 - \Delta^2}, & |\Delta| < \Lambda n \\ \frac{2}{\Delta - \Lambda n}, & |\Delta| > \Lambda n \end{cases} \quad (23)$$

На рис. 4 показан контурный график восприимчивости как функции T и ϑ . Для ясности

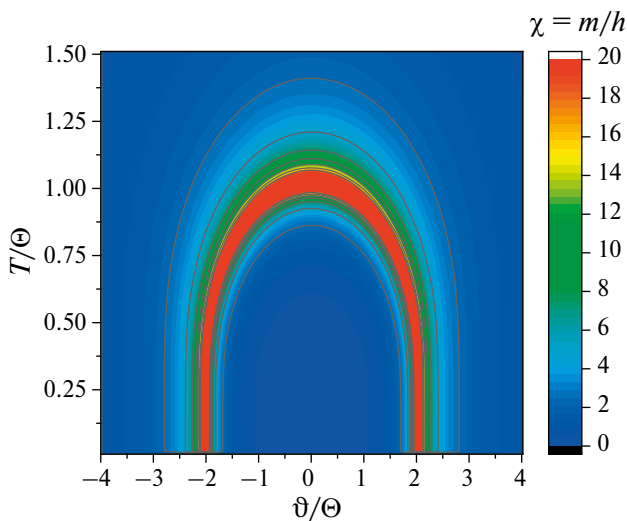


Рис. 4. Контурный график восприимчивости в координатах (ϑ, T) .

максимальное значение χ ограничено величиной 20. Чувствительность m к слабым изменениям Δ отлична от нуля только в области существования фазы с квантовыми флуктуациями. Дифференцируя (16), получаем

$$\frac{\partial m}{\partial \Delta} = - \frac{\Delta}{(\Lambda n)^2 - \mu^2(T/\theta)} \quad (24)$$

Восприимчивость также расходится на границе области фазы с квантовыми флуктуациями и отрицательна, поскольку согласно (11) и (16) величина K не должна изменяться при изменении величины расщепления уровней Δ .

5. ОБСУЖДЕНИЕ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В термодинамической системе, представляющей собой ансамбль взаимодействующих квантовых подсистем с дискретным спектром, могут возникать некоторые специфические типы фазовых переходов при нулевой температуре. Феноменологическое описание этих переходов можно вывести из теории Ландау, дополнив ее предположением о взаимодействии между квантовыми подсистемами и о структуре их энергетического спектра. В такой модели, рассматривая только низшие уровни в спектре, вместо разложения Ландау для свободной энергии можно получить простые аналитические выражения, удобные для описания как термодинамических (проходящих при изменении температуры), так и нетермодинамических фазовых переходов.

Подобные задачи решаются в недавних исследованиях других авторов. Так, в работе [30] проведен анализ применимости приближения среднего поля для двухуровневых открытых диссипативных систем. В работе [26] с использованием стандартных методов статистической механики развита теория среднего поля для модели Изинга со спинами $1/2$ в поперечном магнитном поле с отрицательным тепловым расширением решетки.

Простейший ансамбль двухуровневых квантовых подсистем, в котором уровни в высокосимметричной фазе вырождены, обладает свободной энергией в виде уравнения (4). В таком ансамбле при температурах ниже критической $T < T_c$ возникает спонтанное расщепление уровней, аналогичное коллективному эффекту Яна-Теллера. Поскольку волновые функции расщепленных уровней имеют разную симметрию и вероятность их заселения также различается, симметрия распределения зарядовой/спиновой плотности внутри каждой квантовой подсистемы понижается. В результате возникает поле, действующее на соседние квантовые подсистемы

и уменьшающее их энергию, что стабилизирует возникающие изменения в их спектре. При этом функция распределения квантовых подсистем по уровням контролируется обычными тепловыми флуктуациями. Волновая функция основного состояния в низкосимметричной фазе является одной из функций изначально вырожденного уровня, так что квантовые флуктуации отсутствуют.

Другой случай – ансамбль двухуровневых подсистем, где уровни энергии ε_1 и ε_2 в высокосимметричной фазе различны, так что $\varepsilon_2 - \varepsilon_1 = \Delta \neq 0$, и симметрия распределения плотности спина/заряда внутри квантовой подсистемы не может быть выше симметрии для каждого состояния $|\psi_1\rangle$ & $|\psi_2\rangle$. Теперь свободная энергия системы определяется уравнением (14), а фазовый переход второго рода происходит только тогда, когда расщепление уровней $|\Delta|$ достаточно мало. При сближении уровней происходит их гибридизация, степень которой характеризуется параметром порядка m (12), и возникает антикроссинг. В результате волновая функция основного состояния в низкосимметричной фазе оказывается суперпозицией волновых функций двух “затравочных” состояний $|g\rangle = \alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle$ (11). И при любых температурах, включая $T = 0$, внутри области существования на фазовой диаграмме (рис. 2) фазы с квантовыми флуктуациями некоторые квантовые подсистемы находятся в состоянии $|1\rangle$, а другие – в состоянии $|2\rangle$. Поскольку одно из этих состояний является основным при положительных значениях Δ , а другое – при отрицательных значениях Δ , то можно видеть, что в системе, находящейся в низкосимметричной фазе, существуют квантовые флуктуации. При изменении Δ или T параметр порядка m непрерывно устремляется к нулю на границе области квантовых флуктуаций, что соответствует фазовому переходу второго рода.

В любой точке внутри области фазы с квантовыми флуктуациями величина m самосогласованно подстраивается так, что ширина щели K (11) между основным и возбужденным состояниями не изменяется с изменением Δ и зависит только от температуры. В результате в фазе с квантовыми флуктуациями появляется заметная (до $1.5 k_B$ на одну квантовую подсистему) теплоемкость C (20), величина которой практически линейно зависит от температуры и не зависит от Δ . Более того, вблизи границы области существования фазы с квантовыми флуктуациями на зависимости $C(\Delta)$ возникают характерные резкие особенности, показанные на рис. 2. Внешнее поле h стремится увеличить степень гибридизации уровней (21). Восприимчивость

χ , характеризующая отклик системы на внешнее поле h , также расходится на границе области с квантовыми флуктуациями.

Все результаты получены всего лишь при двух предположениях: (i) система состоит из квантовых подсистем с дискретным спектром и (ii) взаимодействие между квантовыми подсистемами может быть описано в приближении молекулярного поля. Эти предположения вполне естественны для твердых тел, для которых коллективизированные электроны слабо влияют на их электронный спектр. Поэтому разработанная теория может быть применена к широкому семейству оксидов переходных металлов, пниктидов, халькогенидов, включая низкоразмерные системы с низкой концентрацией коллективизированных электронов.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН при поддержке Российского научного фонда, проект № 23-12-00265 (<https://rscf.ru/project/23-12-00265/>), ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Свердловская обл.).

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ландау Л.Д. К теории фазовых переходов I // ЖЭТФ. 1937. Т. 7. С. 19.
2. Ландау Л.Д. К теории фазовых переходов II // ЖЭТФ. 1937. Т. 7. С. 627.
3. Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления. М.: Мир, 1973.
4. Belitz D., Kirkpatrick T.R., Vojta T. How generic scale invariance influences quantum and classical phase transitions // Rev. Mod. Phys. 2005. V. 77. P. 579.
5. Hertz J.A. Quantum critical phenomena // Phys. Rev. B. 1976. V. 14. P. 1165.
6. Vojta M. Quantum phase transitions // Rep. Prog. Phys. 2003. V. 66. P. 2069.
7. Brando M., Belitz D., Grosche F., Kirkpatrick T. Metallic quantum ferromagnets // Rev. Mod. Phys. 2016. V. 88. P. 025006.
8. Coleman P., Schofield A.J. Quantum criticality // Nature. 2005. V. 433. P. 226.
9. Belitz D., Kirkpatrick T.R., Rollbühler J. Tricritical behavior in itinerant quantum ferromagnets // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 94. P. 247205.
10. Zaharias M., Garst M. Quantum criticality in itinerant metamagnets // Phys. Rev. B. 2013. V. 87. P. 075119.
11. Silva N.L.Jr., Continento M.A., Barci D.G. Quantum corrections for the phase diagram of systems with competing order // J. Phys.: Condens. Matter. 2018. V. 30. P. 225402.

12. *Gütlich P., Goodwin H.A.* Spin crossover — An overall perspective. In: *Gütlich P., Goodwin H.* (eds) *Spin crossover in transition metal compounds I. Topics in Current Chemistry*. V. 233. Springer, Berlin, Heidelberg, Germany. 2004. P. 1.
13. *Lyubutin I.S., Ovchinnikov S.G.* Spin crossovers in Mott–Hubbard insulators at high pressures // *J. Magn. Magn. Mater.* 2012. V. 324. P. 3538.
14. *Овчинников С.Г., Орлов Ю.С., Николаев С.В., Нестеров А.И., Овчинникова Т.М.* Влияние межатомного обменного взаимодействия на магнитные фазовые переходы в условиях спинового кроссовера при высоких давлениях // *ФТТ*. 2018. Т. 80. С. 1166.
15. *Shimizu M.* Itinerant electron metamagnetism // *J. Phys. France*. 1982. V. 43. P. 155.
16. *Yamada H., Fukamichi K., Goto T.* Itinerant-electron metamagnetism and strong pressure dependence of the Curie temperature // *Phys. Rev. B*. 2001. V. 65. P. 024413.
17. *Yamada H., Goto T.* Itinerant-electron metamagnetism and giant magnetocaloric effect // *Phys. Rev. B*. 2003. V. 68. P. 184417.
18. *Fujita A., Fujieda S., Fukamichi K., Mitamura H., Goto T.* Itinerant-electron metamagnetic transition and large magnetovolume effects in $\text{La}(\text{Fe}_x\text{Si}_{1-x})_{13}$ compounds // *Phys. Rev. B*. 2001. V. 65. P. 014410.
19. *Yamada H.* Metamagnetic transition and susceptibility maximum in an itinerant-electron system // *Phys. Rev. B*. 1993. V. 47. P. 11211.
20. *Mushnikov N.V., Goto T., Andreev A.V., Sechovsky V., Yamada H.* Effect of external pressure on the magnetism of $\text{UCo}_{0.98}\text{Fe}_{0.02}\text{Al}$ // *Phys. Rev. B*. 2002. V. 66. P. 064433.
21. *Mushnikov N.V., Andreev A.V., Arnold Z.* Pressure-induced itinerant electron metamagnetism in $\text{UCo}_{0.995}\text{Os}_{0.005}\text{Al}$ ferromagnet // *Physica B*. 2018. V. 536. P. 522.
22. *Rotter I., Bird J.P.* A review of progress in the physics of open quantum systems: theory and experiment // *Rep. Progr. Phys.* 2015. V. 78. P. 114001.
23. *Смарт Дж.* Эффективное поле в теории магнетизма. М.: Мир, 1968.
24. *Rosenfeld E.V.* First order phase transitions resulted from collective Jahn-Teller effect // *Solid State Commun.* 2017. V. 269. P. 64.
25. *Розенфельд Е.В.* О квантовых скачках намагниченности в магнетиках с анизотропией типа “легкая плоскость” // *Письма в ЖЭТФ*. 1976. Т. 24. С. 60.
26. *Rončík M., Balcerzak T., Szałowski K., Jaščur M.* Mean-field theory of the spin-1/2 transverse field Ising model with a negative thermal expansion // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2022. V. 34. P. 485802.
27. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Курс теоретической физики. Т. 5. Статистическая физика. Гл. XIV. М.: Физматлит, 2010.
28. *Rosenfeld E.V.* Jahn–Teller effect and adiabatic cooling in the vicinity of crossover point // *Solid State Commun.* 2016. V. 243. P. 55.
29. *Rosenfeld E.V.* Crossover and splitting of the heat capacity peak // *Solid State Commun.* 2013. V. 153. P. 23.
30. *Huybrechts D., Minganti F., Nori F., Wouters M., Shammah N.* Validity of mean-field theory in a dissipative critical system: Liouvillian gap, PT-symmetric antigap, and permutational symmetry in the XYZ model // *Phys. Rev. B*. 2020. V. 101. P. 214302.

MEAN-FIELD THEORY OF NON-THERMODYNAMIC PHASE TRANSITIONS FOR AN ENSEMBLE OF INTERACTING QUANTUM OBJECTS

E. V. Rozenfeld¹ and N. V. Mushnikov^{1,*}

¹*Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch, Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, 620108 Russia*

*e-mail: mushnikov@imp.uran.ru

Phase transitions for an open system consisting of an ensemble of interacting quantum subsystems with discrete spectrum are studied in the mean-field approximation. In the considered model, the change of an internal symmetry of a thermodynamic system upon the second-order phase transition is due to changing symmetry of distribution of charge/spin density inside each quantum subsystem. The latter can be caused by either splitting of one of lowest degenerated energy level or closing a gap between the levels and appearance of avoided crossing. The effect of external parameters (pressure, field, composition, etc.) results in direct change of internal control parameters: level spacing and/or the strength of interaction between adjacent quantum subsystems. Considering a simplest case of the two-level quantum subsystems, expressions for the free energy as a function of the internal control parameters were obtained in analytical form. The behavior of the heat capacity and susceptibility for different regions of the low-temperature phase diagram including the area of quantum fluctuations was determined.

Keywords: phase transitions, quantum systems, mean-field theory