

一类相变的 Landau-deGennes 模型 ——高斯近似

林 磊 王 心 宜

(中国科学院物理研究所)

1980 年 2 月 2 日收到

提 要

本文对一类相变的 Landau-deGennes 模型(以下简称 L-deG 模型)进行了高斯近似和平均场近似计算,获得一些“临界指数”的数值。例如,在高斯近似下, $\alpha = 0.5 \neq \alpha'$, $r = 1 \neq r'$, $\nu = 0.5 \neq \nu'$ 等等。我们计算了比热,并与液晶 MBBA 的实验进行了比较,讨论了向列相-各向同性液相相变与三重临界点的关系。文中特别着重讨论了一类与二类相变临界行为的异同。我们认为,二类相变的标度律结果不能简单地挪用到一类相变的情况。

一、引 言

L-deG 模型^[1],由于包含序参数的三次项,给出了一类相变。对于描述液晶向列相-各向同性液相(N-I)相变^[2]、超离子导体^[2] RbAg_4I_5 在 208.5 K 的相变^[3],和 Potts 模型^[4]等,都很有关系。

过去十多年,由于标度律和重整化群方法的发展(参见文献[5]),人们对二类相变的研究和认识,大大加深了。可是,对一类相变一般理论的研究,则只是处于初始阶段。与二类相变不一样,在一类相变中,关联长度并不在相变点 T_c 处发散,而是在高低温两相中,分别在各自的稳定点处发散;再加上亚稳态的存在,导致了一类相变固有的特征^[6]。

用于描述 N-I 相变, L-deG 模型的平均场近似解是起过很重要的作用的^[7]。近年来, N-I 相变点附近的临界行为,日益受到注意^[6],对于如何超越平均场近似来更好地描述一类相变的问题,已经提到日程上来了^[8-10]。

描述 N-I 相变的最简单的模型,一方面是 Maier-Saupe 的^[8,10];另一方面则从 L-deG 模型出发(这两个起步点相当于磁学中的 Ising 模型与 Ginzburg-Landau 模型)。最近, Priest^[11] 用高斯近似处理 L-deG 的模型,意图解释在平均场近似下,

$$r \equiv (T_c - T^*)/T^*$$

和

$$f \equiv \frac{1}{2} h (\partial^2 \bar{S} / \partial h^2)_{h=0} / (\partial \bar{S} / \partial h)_{h=0}$$

与实验不符的事实(这里 T_c 是 N-I 相变温度, T^* 是各向同性液体的稳定点, $\bar{S}$ 是单轴序参数, h 正比于外磁场的平方),可是却没有计算有关的临界指数。

我们在下面将对 L-deG 的模型作高斯近似计算,特别注意到一类与二类相变的区别,

并对 priest^[11] 的工作进行讨论. 此外, 我们把所得结果与 N-I 相变的实验进行比较, 并对 N-I 相变临界行为属于三重临界点 (tricritical point) 这个假说^[12] 作出讨论. 众所周知, 高斯近似在二类相变中是不够准确的^[5], 在一类相变中, 看来也不太可靠. 然而作为最终了解一类相变普遍过程中的一步, 还是很有启发性的.

二、平均场近似

在 L-deG 模型中^[4], 场变量是一个 3×3 对称无迹张量. 为简化计算, 在不影响主要结果的情况下, 只保留张量中与单轴序参数有关的部分, 哈密顿量 $H[S]$ 定义如下:

$$H[S] = \int d^d x \left[\frac{A}{2} S^2(x) - \frac{B}{3} S^3(x) + \frac{D}{4} S^4(x) + \frac{C}{2} (\nabla S(x))^2 - h S(x) \right], \quad (1)$$

式中 d 为空间维数, h 正比于外磁场或外电场的平方, $A = a(T - T^*)$, a, B, D 和 C 是大于零的常数.

在计算配分函数或自由能时, 平均场近似取 $H[S]$ 的最小值, 从 $\delta H/\delta S = 0$, 当 h 相当小时, 得 $S = \bar{S}$ 的两个解 (参看文献[9])

$$\bar{S} = h/A \quad (2)$$

或

$$\bar{S} = S_N + h/\bar{A}, \quad (3)$$

式中

$$S_N \equiv \frac{B}{2D} \left[1 + \left(1 - \frac{4AD}{B^2} \right)^{1/2} \right], \quad (4)$$

$$\bar{A} \equiv A - 2BS_N + 3DS_N^2, \quad (5)$$

定义

$$T^+ \equiv T^* + B^2/4aD, \quad (6)$$

则 (4), (5) 式可改写为

$$S_N = S_+ + (a/D)^{1/2} (T^+ - T)^{1/2} \quad (7)$$

和

$$\bar{A} = 2a[(T^+ - T) + \alpha_0(T^+ - T)^{1/2}], \quad (8)$$

其中

$$S_+ \equiv S_N(T^+) = B/2D, \quad \alpha_0 \equiv (T^+ - T^*)^{1/2}.$$

在平均场近似中, 自由能 $FL^d = H[\bar{S}]$, L^d 为系统体积, 求得在 $h = 0$ 时的相变温度

$$T_c = T^* + \frac{2}{9} \frac{B^2}{aD}. \quad (9)$$

$T < T_c$ 时, $\bar{S} = S_N$ 为稳定态; $T > T_c$ 时, 则稳定态 $\bar{S} = 0$. T^* , T^+ 分别为过冷与过热温度 (见文献[8]的图 1). 利用能量均分定理, 可得 I 相和 N 相的关联长度^[9]

$$\xi_I \sim A^{-1/2}, \quad \xi_N \sim \bar{A}^{-1/2}. \quad (10)$$

所以关联长度在 I 相则在 T^* 处发散, 而在 N 相则在 T^+ 处发散, 并且各自的临界指数并不一样^[9], 正如实验所表明的^[13].

在二类相变中, $B = 0$, (1) 式退化为 Ginzburg-Landau 哈密顿量. 同时, $T^* = T_c =$

T^+ , 所以 $\alpha_0 = 0$, 关联长度在高、低相有同一发散点 T_c . 我们仿照二类相变的做法, 在一类相变 ($B \neq 0$) 的情况下定义临界指数如下¹⁾:

$$\begin{aligned} \bar{S} - S_+ &\propto (T^+ - T)^\beta & T < T_c; \\ \chi &\propto (T - T^*)^{-\gamma} & T > T_c, \\ &\propto (T^+ - T)^{-\gamma'} & T < T_c; \\ \bar{c} &\propto (T - T^*)^{-\alpha} & T > T_c, \\ &\propto (T^+ - T)^{-\alpha'} & T < T_c; \\ \xi &\propto (T - T^*)^{-\nu} & T > T_c, \\ &\propto (T^+ - T)^{-\nu'} & T < T_c. \end{aligned} \quad (11)$$

这里磁化率 $\chi \equiv (\partial \bar{S} / \partial h)_{h=0}$, $\bar{c}$ 为比热, 假如系统能够进入亚稳区, 那么可以把 (11) 式中的 $T > T_c$ 换作 $T > T^*$, $T < T_c$ 换作 $T < T^+$.

从 (2), (7) 和 (10) 式, 容易看出, 平均场近似给出 $\gamma = 1, \beta = 0.5$. 可是, 从 (3), (10) 式得出 $\gamma' = \gamma'(T)$. 假如 T 十分接近 T^+ ($T^+ - T \ll T^+ - T^*$), 则 (8) 式的 $\bar{A} \sim (T^+ - T)^{1/2}$, 因而 $\gamma' = 0.5$. 所以, 在一类相变中, 一般说来, $\gamma \neq \gamma'$. 实际上, 比如在 N-I 相变, 在 N 相的实验 T 值一般小于 T_c , $T^+ - T \ll T^+ - T^*$, 这个条件不一定能成立. 所测量出来的 γ' 就与实验温度范围有关了^[9,11].

当 $T > T_c$, $S(x) = \bar{S} = 0$, 所以 $H[\bar{S}] = 0$. 得出 $\bar{c} = -T \partial^2 F / \partial T^2 = 0$, $\alpha = 0$. 当 $T < T_c$, 得比热

$$\bar{c} = \bar{c}_c \equiv (a^2/2D)T + \bar{\alpha}T(T^+ - T)^{-1/2}, \quad (12)$$

其中

$$\bar{\alpha} \equiv \frac{1}{4} (a/D)^{3/2} B. \quad (13)$$

由 (11) 和 (12) 式得 $\alpha' = 0.5$.

当 $B = 0$, $\bar{c}_c$ 还原为二类相变的结果^[9], 但在一类相变情况, 平均场近似已给出 $\beta = 0.5, \gamma = 1 \neq \gamma', \alpha = 0, \alpha' = 0.5$. 这显然与二类相变结果 ($\beta = 0.5, \gamma = 1 = \gamma', \alpha = 0 = \alpha'$) 很不一样.

三、高 斯 近 似

在高斯近似中, 我们把 (1) 式中的 $H[S]$ 对 $(S - \bar{S})$ 展开并保留至二阶项, 在本节中, 令 $h = 0$.

1. $T > T_c$

定义:

$$S(x) \equiv L^{-d/2} \sum_{k < A} S_k \exp(ikx), \quad (14)$$

1) 另一个办法是参照 Riedel 与 Wegner^[14], 定义有效指数 $\gamma \equiv -d(\ln \chi)/d \ln(T - T^*)$ 等等. 在 (11) 式中, T 相当接近 T^* 或 T^+ , 在 $\bar{c}$ 和 ξ 的情况, $h = 0$.

其中 Λ 为截断. 当 $\bar{S} = 0$, 在高斯近似下,

$$H[S] = \frac{1}{2} \sum_{k < \Lambda} (A + Ck^2) |S_k|^2. \quad (15)$$

上式用到了

$$L^{-d} \int d^d x \exp(ikx) = \delta_{k,0}$$

这个关系, 在计算热平均时的概率分布是一个高斯分布, 因此^[5]

$$\langle S_k \rangle = 0, \quad (16)$$

$$G_k \equiv \langle |S_k|^2 \rangle = k_B T (A + Ck^2)^{-1}, \quad (17)$$

$$FL^d = -\frac{1}{2} k_B T \sum_{k < \Lambda} \ln [2\pi(k_B T / L^d) / (A + Ck^2)], \quad (18)$$

其中 F 为单位体积的自由能, k_B 为 Boltzman 常数.

从 (11) 和 (17) 式, 并利用涨落-耗散定理, 得 $\gamma = 1$. 定义

$$G(k) \propto k^{-2+\eta} \quad T = T^*, \quad (19)$$

则得 $\eta = 0$. 利用

$$\bar{c} = -T \partial^2 F / \partial T^2$$

和

$$\sum_{k < \Lambda} \rightarrow \frac{L^d}{(2\pi)^d} \int_0^\Lambda d^d k$$

得 ($d = 3$)

$$\bar{c} = c_T \equiv A_0 + A_1 T + A_2 T^2 + A_3 T^2 (T - T^*)^{-1/2}, \quad (20)$$

式中

$$\begin{aligned} A_0 &\equiv \frac{k_B \Lambda^3}{12\pi^2}, \\ A_1 &\equiv -\frac{k_B a}{2\pi^2 C} [\Lambda - \xi^{-1} \text{tg}^{-1}(\xi \Lambda)], \\ A_2 &\equiv -\frac{k_B a^2}{8\pi^2 C^2} \cdot \frac{(\Lambda \xi)^2}{1 + (\Lambda \xi)^2} \cdot \frac{1}{\Lambda}, \\ A_3 &\equiv \frac{k_B}{8\pi^2} \left(\frac{a}{C}\right)^{3/2} \text{tg}^{-1}(\Lambda \xi), \\ \xi &\equiv (C/A)^{1/2} = (C/a)^{1/2} (T - T^*)^{-1/2}. \end{aligned} \quad (21)$$

在接近 T^* 时, $\xi \rightarrow \infty$, $\text{tg}^{-1}(\xi \Lambda) \rightarrow \pi/2$. 因此

$$\begin{aligned} A_1 &\simeq -\frac{k_B a \Lambda}{2\pi^2 C}, \\ A_2 &\simeq -\frac{k_B a^2}{8\pi^2 C^2 \Lambda}, \\ A_3 &\simeq \frac{k_B}{16\pi} \left(\frac{a}{C}\right)^{3/2}. \end{aligned} \quad (22)$$

它们均与温度无关. 比较 (11) 与 (20) 式, 得 $\alpha = 0.5$. 从 (21) 式得 $\nu = 0.5$.

2. $T < T_c$

在高斯近似下,得

$$H[S] = H[S_N] + \frac{1}{2} \sum_{k < \Lambda} (\bar{A} + Ck^2) |\Delta S_k|^2, \quad (23)$$

式中 S_N 和 $\bar{A}$ 分别由 (4), (5) 式定义, ΔS_k 为 $S-S_N$ 的傅氏变换. 与 (16)–(18) 式相似,得

$$\langle S_k \rangle = \delta_{k,0} = L^{d/2} S_N, \quad (24)$$

$$\bar{G} \equiv \langle |\Delta S_k|^2 \rangle = k_B T (\bar{A} + Ck^2)^{-1}, \quad (25)$$

$$FL^d = H[S_N] - \frac{1}{2} k_B T \sum_{k < \Lambda} \ln [2\pi(k_B T/L^d)/(\bar{A} + Ck^2)]. \quad (26)$$

从 (25) 式,得 γ', ν' 与平均场近似值相同(见第二节). 由 (26) 式可得比热

$$\begin{aligned} \bar{c} = c_c \equiv & A_0 + \bar{A}_1 T + \bar{A}_2 T^2 + \bar{A}_3 (T^+ - T)^{-1/2} + \bar{A}_4 (T^+ - T)^{-1} \\ & + \bar{A}_5 (T^+ - T)^{-3/2} + A_6, \end{aligned} \quad (27)$$

其中 A_0 由 (21) 式给出,

$$\begin{aligned} \bar{A}_1 &\equiv \frac{a^2}{2D} + \frac{k_B a}{\pi^2 C} [\Lambda - \bar{\xi}^{-1} \text{tg}^{-1}(\Lambda \bar{\xi})], \\ \bar{A}_2 &\equiv -\frac{k_B a^2}{2\pi^2 C^2} \cdot \frac{(\Lambda \bar{\xi})^2}{1 + (\Lambda \bar{\xi})^2} \cdot \frac{1}{\Lambda}, \\ \bar{A}_3 &\equiv \bar{\alpha} T + \frac{k_B T a \alpha_0}{2\pi^2 C} [\Lambda - \bar{\xi}^{-1} \text{tg}^{-1}(\Lambda \bar{\xi})] - \frac{k_B T^2 a^2 \alpha_0}{2\pi^2 C^2} \cdot \frac{(\Lambda \bar{\xi})^2}{1 + (\Lambda \bar{\xi})^2} \cdot \frac{1}{\Lambda}, \\ \bar{A}_4 &\equiv -\frac{k_B T^2}{2} \left(\frac{a \alpha_0}{2\pi C} \right)^2 \frac{(\Lambda \bar{\xi})^2}{1 + (\Lambda \bar{\xi})^2} \cdot \frac{1}{\Lambda}, \\ \bar{A}_5 &\equiv \frac{k_B T^2 a \alpha_0}{8\pi^2 C} [\Lambda - \bar{\xi}^{-1} \text{tg}^{-1}(\Lambda \bar{\xi})], \\ \bar{A}_6 &\equiv \frac{k_B T^2 a^2}{8\pi^2 C^2} \left(2 + \frac{\alpha_0}{(T^+ - T)^{1/2}} \right)^2 [\text{tg}^{-1}(\Lambda \bar{\xi})] \bar{\xi}, \\ \bar{\xi} &\equiv (C/\bar{A})^{1/2}. \end{aligned} \quad (28)$$

当 T 相当接近于 T^+ 时, (28) 式变为

$$\begin{aligned} \bar{A}_1 &\simeq \frac{a^2}{2D} + \frac{k_B a \Lambda}{\pi^2 C}, \\ \bar{A}_2 &\simeq -\frac{k_B a^2}{2\pi^2 C^2 \Lambda}, \\ \bar{A}_3 &\simeq \bar{\alpha} T + \frac{k_B T a \alpha_0 \Lambda}{2\pi^2 C} - \frac{k_B T^2 a^2 \alpha_0}{2\pi^2 C^2 \Lambda}, \\ \bar{A}_4 &\simeq -\frac{k_B T^2}{2} \left(\frac{a \alpha_0}{2\pi C} \right)^2 \frac{1}{\Lambda}, \\ \bar{A}_5 &\simeq \frac{k_B T^2 a \alpha_0 \Lambda}{8\pi^2 C}, \end{aligned}$$

$$\bar{A}_6 \simeq \frac{k_B T^2 a^2}{16\pi C^2} \left[2 + \frac{\alpha_0}{(T^+ - T)^{1/2}} \right]^2 \bar{\xi}. \quad (29)$$

3. 特殊情况

1) C 很大

假如 C 很大, (29) 式中所有有 C 在分母的项可以略去, 则高斯近似的 (27) 式退化为平均场近似的 (12) 式, 因而 $\alpha' = 0.5$. 但在 (20) 式中, 只有 A_3 项在 T^* 处发散, 因此仍然有 $\alpha = 0.5$. 这个结果是与实验^[15,16]符合的(见第四节).

2) $T^+ - T \ll T^+ - T^*$

当 T 十分接近于 T^+ , $\alpha_0^2 \gg T^+ - T$, 则 $\bar{A} \sim (T^+ - T)^{1/2}$, 因而 $\bar{A}_6 \sim (T^+ - T)^{-5/4}$. 在 (27) 式中, 发散项最强的是 $\bar{A}_5$, 假如系数的大小影响不大(见第四节), 则有 $\alpha' = 3/2$. 根据 (20) 式, $\alpha = 0.5 \neq \alpha'$.

3) $T^+ - T \gg T^+ - T^*$

当 T 距离 T^+ 比较远, $T^+ - T \gg \alpha_0^2$ 时, $\bar{A} \sim (T^+ - T)$. 从 (29) 式, 得 $\bar{A}_6 \sim (T^+ - T)^{-1/2}$. 注意到 $\bar{A}_4 \sim \alpha_0^2$, $\bar{A}_5 \sim \alpha_0$, 并且假设这两项可以略去, 则在 (27) 式只有 $\bar{A}_3$ 和 $\bar{A}_6$ 项发散, 并且都是 $\sim (T^+ - T)^{-1/2}$ 的形式, 因而 $\alpha' = 0.5 (= \alpha)$.

这个结果还可以从另一个途径来考虑. 从 α_0 的定义和 (6) 式, 得

$$\alpha_0 = (B/2)(aD)^{-1/2}.$$

所以 α_0 很小的一个理由是 B 很小; 换句话说, 这个一类相变很弱, 很接近于二类相变. 而在二类相变, Ginzburg-Landau 模型的高斯近似, 正好 $\alpha = \alpha' = 0.5$ ^[5].

1) 和 3) 的情况并不一样, 但都有 $\alpha = \alpha' = 0.5$, 与实验相符.

四、数值计算

为了说明情况, 并与实验对比, 我们以液晶 MBBA 为例, 进行数值计算. 利用

$$\sum_{k < \Lambda} = \frac{L^3}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \int_0^\Lambda k^2 dk = N,$$

得

$$\Lambda = (6\pi^2 \rho)^{1/3},$$

其中 ρ 为液晶密度, 对于 MBBA, $\rho = 1 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ^[17], 克分子量 = 267g, 所以 $\Lambda = 2.367 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$. 采用 Poggi 等^[18]的数据,

$$a = 9 \times 10^5 \text{ erg} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{K}^{-1},$$

$$B = 5.91 \times 10^6 \text{ erg} \cdot \text{cm}^{-3},$$

$$D = 1.228 \times 10^7 \text{ erg} \cdot \text{cm}^{-3}.$$

参考文献[19],

$$C = 0.38 \times 10^{-6} \text{ erg} \cdot \text{cm}^{-1},$$

由此得

$$\alpha_0 = 0.889 \text{ K}^{1/2}.$$

从(13)式,得

$$\bar{\alpha} = 2.932 \times 10^4 \text{erg} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{K}^{-3/2}.$$

从(21)和(29)式,得

$$\begin{aligned} A_0 &= 1.546 \times 10^7 \text{erg} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}, \\ \bar{A}_1 &= 4.082 \times 10^1 \text{erg} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{K}^{-2}, \\ \bar{A}_2 &= -1.658 \times 10^{-1} \text{erg} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{K}^{-3}, \\ \bar{A}_3 &= 3.276 \times 10^4 \text{erg} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{K}^{-3/2}, \\ \bar{A}_4 &= -3.276 \times 10^{-2} T^2 \text{erg} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{K}^{-2}, \\ \bar{A}_5 &= 8.712 \times 10^2 T^2 \text{erg} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{K}^{-3/2} \end{aligned}$$

和

$$\bar{A}_6 = 1.541 \times 10^7 T^2 [2 + 0.889(T^+ - T)^{-1/2}]^2 \text{erg} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{K}^{-3}.$$

参照文献[16],取 $T_c = 318.25\text{K}$, 从(9)式,得

$$T^* = T_c - 0.702\text{K} = 317.548\text{K}.$$

从(6)式得

$$T^+ = T_c + 0.088\text{K} = 318.34\text{K}.$$

当 $T = T_c$ 时, 在(27)式中的 $\bar{A}_2$ 和 $\bar{A}_4$ 均 $\sim 10^4 \text{erg} \cdot \text{cm}^{-3}$, 而 $A_0, \bar{A}_1, \bar{A}_3, \bar{A}_6$ 等则 $\sim 10^7 \text{erg} \cdot \text{cm}^{-3}$, $\bar{A}_5$ 项 $\sim 10^9 \text{erg} \cdot \text{cm}^{-3}$. 我们发觉, 在 T_c 以下 20K 范围内, $\bar{A}_2$ 和 $\bar{A}_4$ 项均可略去, (27)式变为

$$c_c \simeq A_0 + \bar{A}_1 T + \bar{A}_3 (T^+ - T)^{-1/2} + \bar{A}_5 (T^+ - T)^{-3/2} + \bar{A}_6. \quad (30)$$

在图(1)中标出比热 $\bar{c}$ 和 T 曲线的计算结果. R 为气体常数, $\bar{c}/R$ 无量纲. 图1中的虚线是从(12)式所得的平均场近似结果, $T > T_c$ 时, $\bar{c} = 0$, 与二类相变不一样; $T < T_c$ 时, $\bar{c}$ 是在 T^+ 处发散的, $\alpha' = 0.5$, 不过在 T_c 处, $\bar{c}$ 仍为有限值, $\bar{c}$ 在 T_c 处的改变

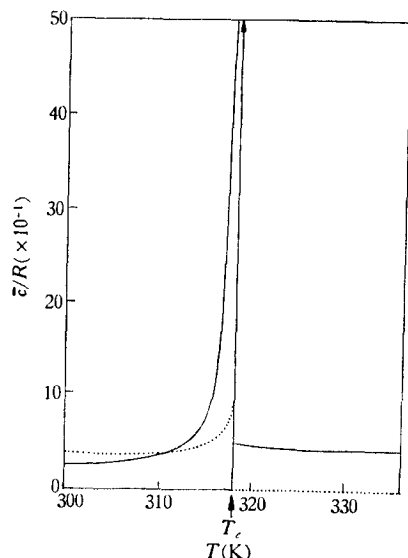


图1 比热 $\bar{c}$ 和温度 T 关系的计算结果
(实线的顶部为 111.1)

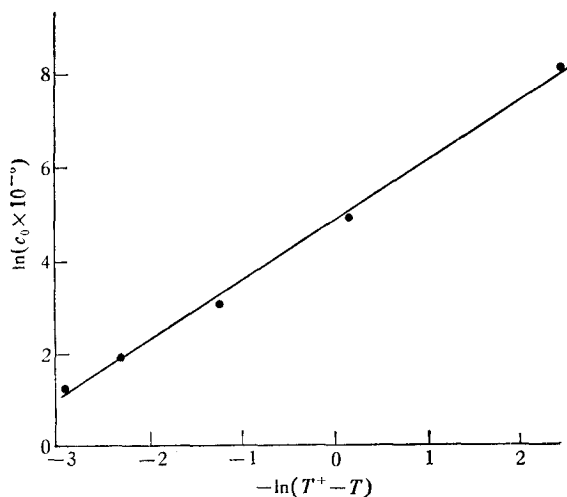


图2 高斯近似下, 比热发散部分 c_0 与温度关系
 $T < T_c$, 直线斜率给出有效 α' .

$$\Delta\bar{c}/R = 134.78.$$

实线为依照 (20) 和 (27) 式所得高斯近似的计算结果. 在 (20) 式中, A_2 项也很小, 可以略去. 在 $T > T_c$ 部分, $\bar{c}$ 事实上 (在 T^* 处) 发散, $\alpha' = 0.5$, 虽然在图 1 中表现得不够明显; $T < T_c$ 时, $\bar{A}_5$ 项占主导地位, 所以 α' 接近于 1.5.

在图 2 中, $c_0 = \bar{A}_3(T^+ - T)^{-1/2} + \bar{A}_4(T^+ - T)^{-1} + \bar{A}_5(T^+ - T)^{-3/2} + \bar{A}_6$, 它是 (27) 式 c_c 的发散部分, 从 $\ln c_0$ 与 $\ln(T^+ - T)$ 的曲线斜率, 求得 $T_c > T > 300\text{K}$ 内的有效临界指数 $\alpha' = 1.28$. 因此在高斯近似下, $\alpha' \approx \alpha = 0.5$, 而实验值^[15]是 $\alpha' = \alpha = 0.5$.

值得指出, 高斯近似给出在 T_c 处 $\bar{c}$ 的改变是 $\Delta\bar{c}/R = 1064.15$, 比平均场近似的结果高出一个数量级.

从上述计算, 我们注意到:

1. 在 (27) 式中, 虽然 $\bar{A}_4$ 项的发散度比 $\bar{A}_3$ 项强, 但由于 $\bar{A}_4$ 系数过小, $\bar{A}_4$ 项在 c_c 中的贡献反而比 $\bar{A}_3$ 项小得多. 这是因为在一类相变中, 我们所考虑的温度区 $T < T_c < T^+$ 或甚至在 $T = T_c$ 处的温度, 与发散点 T^+ 还有一些距离, 所以不能单凭发散度的大小对 c_c 的各项作取舍, 这是与二类相变的情况有所不同的.

2. 在计算中所取有关 MBBA 参数 (a, B, D, C) 的数值, 并不符合于第三节中 1)–3) 三种特殊情况中的任何一种.

3. 要符合第三节中 1) 的情况, C 起码要比这里所选的数值大三个数量级, 亦即 $C \sim 10^{-4}\text{erg} \cdot \text{cm}^{-1}$, 这是不符合实际情况的.

因此, 我们认为高斯近似应用在 L-deG 模型, 所计算出来有关 MBBA (或其它向列相) 的 α' , 并不等于 0.5, 这与实验^[15,16]是有矛盾的. 另一方面, 这是所选用的有关参数的数值, 一部分是通过把实验与理论值比较而得出来的, 假设改用高斯近似的理论结果作对比, 这些参数值显然会有所修正. 这就需要进一步的探讨了.

五、讨 论

1. 方程 (1) 的 L-deG 模型给出一类相变. 当 $B = 0$ 时, (1) 式退化为二类相变的 Ginzburg-Landau 模型^[5], 在表 1 中, 给出临界指数在两种近似下的结果.

表 1 临界指数计算结果

		η	β	ν	ν'	r	r'	α	α'
$B = 0$	平均场近似		0.5					0	0
	高斯近似	0	0.5	0.5	0.5			0.5	0.5
$B \neq 0$	平均场近似		0.5					0	0.5
	高斯近似	0	0.5	0.5	$\neq 0.5$	1	$\neq 1$	0.5	$\neq 0.5$

值得注意的是, 当 $B \neq 0$ 时, 平均场近似已给出 $\alpha' = 0.5 \approx \alpha = 0$. 而高斯近似则更给出 $\nu' \approx \nu = 0.5$, $\alpha' \approx \alpha = 0.5$. 可见一类相变与二类相变有很大的差别. 在一类相变中, 临界指数在高、低温两相并不相同. 在上面所用高斯近似下, 似乎是一个普遍规律. 这一个结论是与实验有所矛盾的. 例如, 液晶 N-I 相变实验结果有 $\alpha = \alpha' = 0.5$ ^[15,16]. 利

用经典耗散-涨落定理, χ 与 G_0 成正比, 容易看出, 对 $B = 0$ 和 $B \neq 0$ 的情况, 上述两种近似给出同样的 γ 与 γ' 值.

2. 高斯近似的确比平均场近似进了一步, 给出 $\alpha = 0.5$, 这点是与 N-I 相变结果^[15,16]符合的. Imura 和 Okano^[20] 的 $\alpha = 0.5$ 结果, 基本上是高斯近似, $\gamma = 1$ 的高斯近似结果则是与实践^[21-23]有矛盾的^[24]. 从 Muta 等^[21]和 Keyes 和 Shane^[22] 的实验, 分别获得^[25] $\gamma \simeq 0.8$ 和 $\gamma = 0.97 \pm 0.10$, 与从 Maier-Saupe 的模型所获得的理论值^[24] $\gamma = 0.92$ 或 0.94 比较接近. 所以, 不管高斯近似能否如 Priest^[11] 所估计的, 给出与实验比较符合的 r 值和 f 值(见第一节), 从临界指数的计算来看, 高斯近似还是不能令人满意的.

3. 高斯近似的内容, 是把序参数的关联影响包括进去, 这一点与 Sheng 和 Wojtowicz^[26] 以及其它工作^[27] 在精神上是一致的, 从 Maier-Saupe 模型出发, 依照 Vertogen 和 Van der Meer^[27] 的做法去计算临界指数, 所得结果与表 1 中最后一行的结果没有什么根本差别.

4. 由于 $\bar{A}(T_c) = A(T_c)$, 有 $\bar{\xi}(T_c) = \xi(T_c)$, 这里, T_c 由 (9) 式定义. 比较 (18) 和 (26) 式, 可见高斯近似并不改变平均场近似的相变温度 T_c . 假如依照文献[11], 把序参数张量其它分量都加到 (1) 式右边去, 那么高斯近似与平均场近似的 T_c 是不相等的. 可是这个做法不会改变表 1 的结果, 因而不影响本文的结论.

5. 高斯近似给出 $\nu \simeq \nu'^{[9]}$ 是与实验^[13]一致的, 再加上 $\gamma = 1$ 这个实验结果^[21-25], 显然与三重临界点理论结果 ($\gamma = 1$ $\nu = \nu' = 0.5$) 有矛盾^[24], 因此, N-I 相变的三重临界点假设^[12]是不能成立的.

6. 在一类相变中, 有关物理量在高温相是在 T^* 处发散, 而在低温相则在 T^+ 处发散. 由于 $T^* \simeq T_c \simeq T^+$, 所以实验上观察到在 T_c 处的量并不会无穷大, 与二类相变情况不一样. 此外, 从 (29) 和 (27) 式看来, $c_<$ 的发散项并不完全能用关联长度 $\bar{\xi}$ 来表示. 而 $\bar{\xi} \simeq \xi$ 也是一类相变的一个特点, 所以二类相变中的标度律结果^[5]不能直接挪用到一类相变的情况. 从本文高斯近似的结果来看, 特别是在 $T < T_c$ 相, 普适律的存在也是很有问题的. 最后, 我们重述一下, 经由 (11) 式定义的临界指数, 以及表 1 中 $B \simeq 0$ 时的指数, 都是有效临界指数^[9].

参 考 文 献

- [1] P. C. deGennes, *Phys. Lett.*, **30A**(1969), 454, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **12**(1971), 193.
- [2] 林磊, 物理, **9**(1980), 135.
- [3] M. B. Salamon, *Phys. Rev.*, **B15**(1977), 2236.
- [4] R. B. Potts, *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **48**(1952), 106;
R. G. Priest, T. C. Lubensky, *Phys. Rev.*, **B13**(1976), 4159.
- [5] S. K. Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, Benjamin, London, (1976).
- [6] 林磊, 印度 Bangalore 1979 年 12 月国际液晶会议录.
- [7] P. G. deGennes, *Physics of Liquid Crystals*, Oxford U. Press, London, (1974).
- [8] 林磊, 科学通报, **23**(1978), 715.
- [9] 林磊, 蔡俊道, 中国科学, 1979, 10, 947.
- [10] Lin Lei (林磊), *Phys. Rev. Lett.*, **43**(1979), 1604.
- [11] R. G. Priest, 印度 Bangalore 1979 年 12 月国际液晶会议录.
- [12] P. H. Keyes, *Phys. Lett.*, **67A**(1978), 132; M. A. Anisimov et al., *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **72**(1977), 1983.
- [13] R. Y. Dong, E. Tomchuk, *Phys. Rev.*, **A47**(1978), 2062.

- [14] E. Riedel, F. Wegner, *Phys. Rev.*, **B9**(1974), 294.
- [15] H. Arnold, *Z. Phys. Chem.*, **226**(1964), 146.
- [16] M. A. Anisimov *et al.*, *Zh. Eksp. Teor. Fiz. Lett.*, **30**(1979), 523.
- [17] E. Gulari, B. Chu, *J. Chem. Phys.*, **62**(1975), 795.
- [18] Y. Poggi, J. C. Filippini, R. Aleonard, *Phys. Lett.*, **57A**(1976), 53.
- [19] H. Imura, K. Okano, *Chem. Phys. Lett.*, **19**(1973), 387.
- [20] H. Imura, K. Okano, *Chem. Phys. Lett.*, **17**(1972), 111.
- [21] K. Muta *et al.*, *Jap. J. Appl. Phys.*, **18**(1979), 2073.
- [22] P. H. Keyes, J. R. Shane, *Phys. Rev. Lett.*, **42**(1979), 722.
- [23] T. W. Stinson, J. D. Litster, *Phys. Rev. Lett.*, **25**(1970), 503.
- [24] 林磊, 科学通报, **25**(1980), 479.
- [25] 林磊、刘家冈, 自然杂志, **3**(6)(1980), 478.
- [26] P. Sheng, P. J. Wojtowicz, *Phys. Rev.*, **A14**(1976), 1883.
- [27] G. Vertogen, B. W. van der Meer, *Phys. Rev.*, **A19**(1979), 370.

LANDAU-DEGENNES MODEL OF FIRST ORDER PHASE TRANSITIONS — GAUSSIAN APPROXIMATION

LIN LEI WANG XIN-YI

(*Institute of Physics, Academia Sinica*)

ABSTRACT

Calculations in Gaussian approximation and mean-field approximation are performed with the Landau-deGennes model of first order phase transitions. Some "critical exponents" are obtained. For example, in the Gaussian approximation, $\alpha = 0.5 \neq \alpha'$, $\gamma = 1 \neq \gamma'$, $\nu = 0.5 \neq \nu'$, etc. Specific heat is calculated and compared with experimental results of liquid crystal MBBA. The nematic-isotropic phase transition is discussed in relation to tricritical points. In this paper, the similarities and differences of the critical properties between first and second order phase transitions are emphasized and discussed. In our opinion, results from scaling laws of second order transitions cannot be simply applied to the case of first order transitions.