Физика низких температур, 1996, т. 22, № 3, с. 293–295 УДК 539.2

Предельный переход в псевдоспиновой модели структурного беспорядка с барьерами

В. Л. Коварский, А. В. Христов

Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины, Украина, 340114, г. Донецк, ул. Р. Люксембург, 72

Статья поступила в редакцию 28 августа 1995 г.

Рассматривается модель Изинга, учитывающая наличие энергетического барьера U_0 между состояниями. Показано, что предел $U_0 \to \infty$ ведет к обычной модели Изинга. Найдены условия, при которых данная модель эквивалентна трехкомпонентной модели Поттса с эффективным значением относительной кратности вырождения состояний. Найдена область применимости модели.

Розглянуто модель Ізінга, що ураховує наявність енергетичного бар'єра U_0 між станами. Показано, що границя $U_0 \to \infty$ веде до звичайної моделі Ізінга. Знайдено умови, при яких дана модель еквівалентна трьохкомпонентній моделі Поттса з ефективним значенням відносної кратності виродження станів. Знайдено область застосовності моделі.

Теория структурных фазовых переходов порядок—беспорядок и сопутствующих им явлений традиционно базируется на псевдоспиновой модели структурного беспорядка и различных ее обобщениях. Однако ни в самой модели, ни в известных обобщениях не учитывается, что в случае структурного беспорядка многоминимумный энергетический потенциал $U(x)$ предполагает наличие разделяющих энергетических барьеров между минимумами. Ранее была предложена модифицированная модель Изинга (ММИ), учитывающая это обстоятельство [1]. В простейшем случае ММИ представляет собой трехкомпонентную модель Поттса с тремя состояниями в эффективном внешнем поле. Вероятности заселения состояний σ_+, σ_- и σ_0 связаны со структурным параметром порядка η и «параметром динамичности» θ:

$$\eta = \frac{\sigma_+ - \sigma_-}{2}, \qquad \theta = \sigma_0 - \frac{\sigma_+ + \sigma_-}{2}, \tag{1}$$

где индексы «+», «−», «0» обозначают соответственно состояния движения в правой и левой ямах и над барьером.

В случае однородного упорядочения свободная энергия в приведенных единицах имеет вид

$$f = -2j\eta^2 + \tau\left[\varphi\left(\eta + \frac{1-\theta}{3}\right) + \varphi\left(-\eta + \frac{1-\theta}{3}\right) + \varphi\left(\frac{1+2\theta}{3}\right)\right] + \frac{2}{3}\tau\,\theta \ln\frac{z_1}{z_0} + f_0, \tag{2}$$

где $\varphi(x) \equiv x \ln x$; $j \equiv J/(NU_0)$ — приведенная константа парного взаимодействия; $\tau \equiv kT/U_0$ — приведенная температура; U_0 — высота энергетического барьера; N — полное число частиц; парциальные статистические интегралы

$$z_1 = \int_0^1 e^{-\varepsilon/\tau} g(\varepsilon)\, d\varepsilon, \qquad z_0 = \int_1^\infty e^{-\varepsilon/\tau} g(\varepsilon)\, d\varepsilon, \tag{3}$$

$g(\varepsilon)$ — плотность состояний с приведенной энергией $\varepsilon \equiv E/U_0$. Предпоследнее слагаемое в (2) определяет вероятность надбарьерного движения и может быть интерпретировано как эффективное поле. Для кусочно-параболического потенциала в приведенных единицах (рис. 1)

$$u(\xi) = \begin{cases} 1, & |\xi| \le \beta, \\ \left(\dfrac{|\xi| - 1}{\beta - 1}\right)^2, & |\xi| > \beta \end{cases} \tag{4}$$

плотность состояний

$$g(\varepsilon) = \begin{cases} 2\pi(1-\beta)\,, & \varepsilon < 1\,, \\ 2\pi(1-\beta) + 4\left[(1-\beta)\arcsin\dfrac{1}{\sqrt{\varepsilon}} + \dfrac{\beta}{\sqrt{\varepsilon-1}}\right], & \varepsilon > 1\,, \end{cases} \tag{5}$$

где β — параметр, определяющий ширину барьера, $0 \le \beta < 1$. Условие устойчивости потенциала (2) $\partial f/\partial\eta = \partial f/\partial\theta = 0$ дает

$$\left.\begin{aligned} &-4j\eta + \tau \ln \frac{1/3\,(1-\theta)+\eta}{1/3\,(1-\theta)-\eta} = 0 \\ &9\eta^2 - (1-\theta)^2 + (1+2\theta)^2\left(\frac{z_1}{z_0}\right)^2 = 0 \end{aligned}\right\}, \tag{6}$$

а линия фазового перехода определяется условием $\partial^2 f/\partial\eta^2 = 0$, которое приводит к

$$j = \frac{1}{2}\tau\left(\frac{z_0}{z_1} + 2\right). \tag{7}$$

Обычной модели Изинга соответствует предел бесконечно больших барьеров. Покажем это. При $U_0 \to \infty$

$$\left.\begin{aligned} &z_1 \approx 2\pi\tau(1-\beta) \\ &z_0 \approx 4e^{-1/\tau}[\pi(1-\beta)\tau + \beta\sqrt{\pi\tau}\,] \end{aligned}\right\}, \tag{8}$$

причем первое слагаемое в z_0 существенно при $\beta = 0$, в противном случае им можно пренебречь. Из (8) получаем

$$\frac{z_1}{z_0} \approx e^{1/\tau} = e^{U_0/kT} \to \infty\,, \quad \theta \to -\frac{1}{2}$$

и выражения (2), (6), (7) переходят в хорошо известные результаты приближения Брэгга—Вильямса. На рис. 2, 3 можно проследить стремление параметров порядка и температуры фазового перехода к предельным значениям по мере роста U_0. Таким образом, принцип соответствия для новой модели соблюдается.

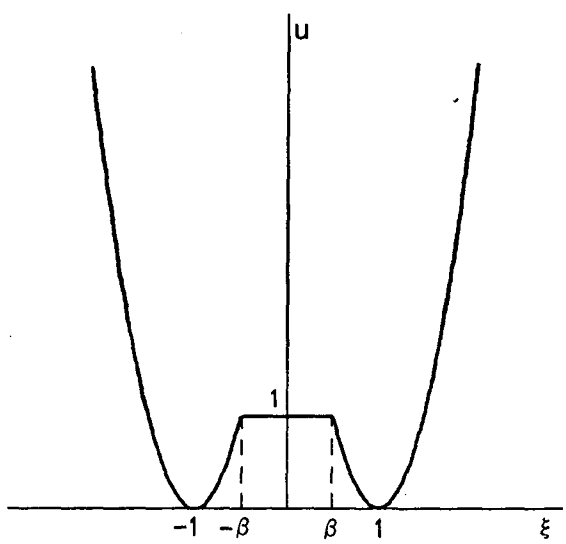

Рис. 1. Кусочно-параболический модельный потенциал.

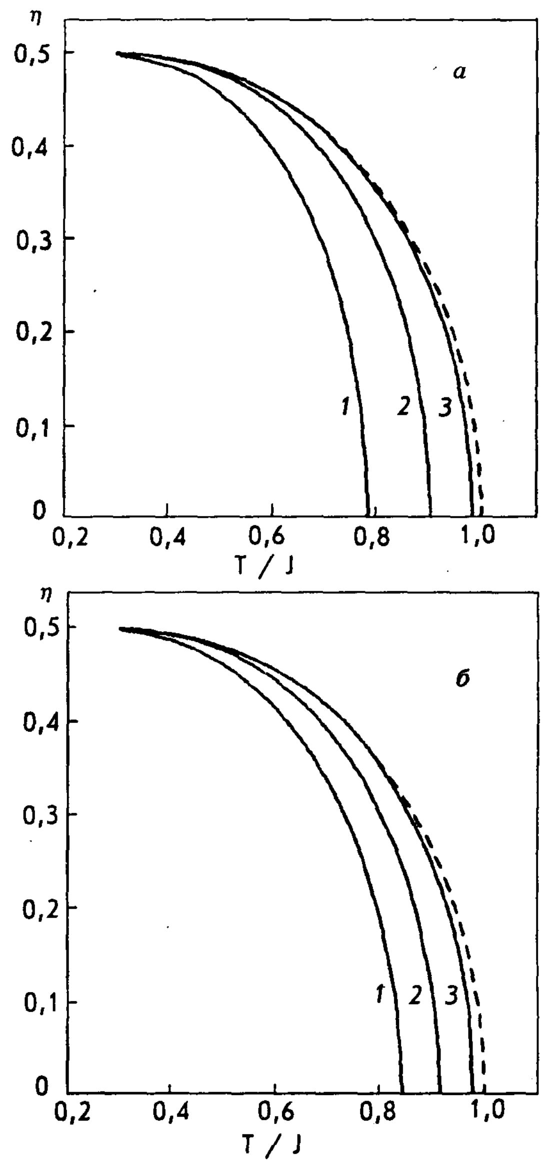

Рис. 2. Температурная зависимость параметра η при разных значениях U_0/J: 1 (*1*), 2 (*2*), 4 (*3*). Предельное поведение при $U_0 \to \infty$ обозначено пунктиром; $\beta = 0$ (*а*); $\beta = 1/2$ (*б*). Увеличение β ускоряет стремление к предельной кривой.

Термодинамическое поведение ММИ может быть интерпретировано также в терминах трехкомпонентной модели Поттса с эффективными кратностями вырождения состояний. Действительно, в этом случае плотность состояний выражается через сумму δ-функций

$$g(\varepsilon) = 2g_1\,\delta(\varepsilon) + g_0\,\delta(\varepsilon - 1)\,, \tag{9}$$

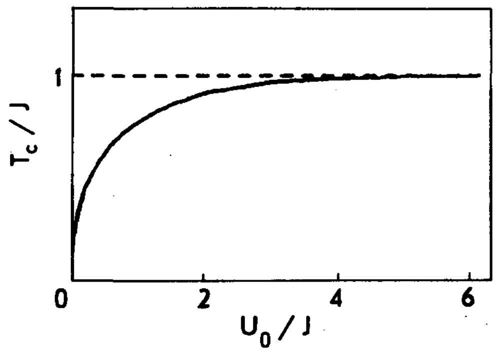

Рис. 3. Зависимость температуры фазового перехода T_c от U_0/J.

где g_1, g_0 — соответственно кратности вырождения состояния «в яме» и «над барьером». Статистические интегралы имеют вид

$$z_1 = g_1 + \frac{1}{2} g_0\, e^{-1/\tau}, \qquad z_0 = \frac{1}{2} g_0\, e^{-1/\tau}, \tag{10}$$

поэтому модель (2) эквивалентна трехкомпонентной модели Поттса с зависящей от температуры эффективной относительной кратностью вырождения

$$\frac{g_1}{g_0} = \left[\frac{z_1(\tau)}{z_0(\tau)} - 1\right] e^{-1/\tau} . \tag{11}$$

Очевидно, в этих терминах предел бесконечно высоких барьеров $U_0 \to \infty$ соответствует пределу бесконечно больших кратностей вырождения $g_1/g_0 \to \infty$.

В заключение определим область применимости модели. Развиваемый подход основан на представлении об энергии ε одночастичного движения [1]. Такое представление возможно, если невелико межузельное взаимодействие j. В противном случае одночастичные энергии ε нельзя рассматривать как интегралы движения. Поэтому молекулярное поле $\simeq j\eta$ должно быть значительно меньше высоты барьера:

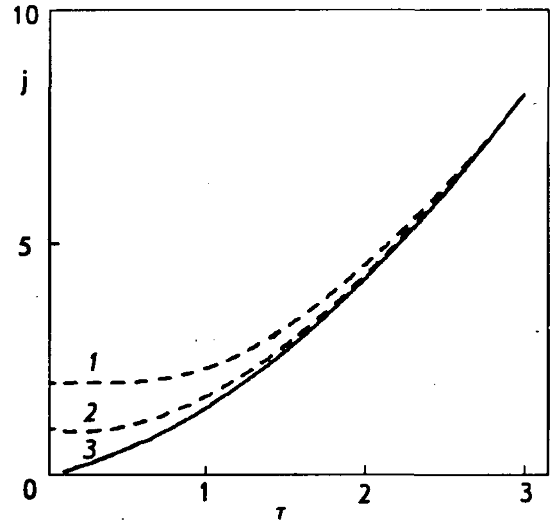

Рис. 4. Область выполнения критерия (12): $j\eta = 1$ (*1*); $j\eta = 0{,}5$ (*2*); линия фазового перехода (*3*).

$$j\eta \ll 1 . \tag{12}$$

Как видим из рис. 4, критерий (12) выполняется во всей области существования разупорядоченной фазы и в окрестности фазового перехода в упорядоченной фазе, причем тем точнее, чем ближе к линии фазового перехода.

1. В. Л. Коварский, Б. Я. Сухаревский, *ФНТ* **18**, 1274 (1992).

Limiting passage in a pseudo-spin model of structural disordering with barriers

V. L. Kovarskii and A. V. Khristov

The Ising model is considered which takes into account the energy barrier U_0 between states. The limit $U_0 \to \infty$ is shown to lead to ordinary Ising model. The conditions are found when this model is the equivalent to the ternary Potts model with effective value of relative multiplicity of states degeneration. The field of the model applicability has been defined.