Письма в ЖЭТФ, том 82, вып. 7, с. 506 – 508 © 2005 г. 10 октября

Фазовый переход в обобщенной модели Изинга–Костерлица–Таулесса

П. А. Прудковский[1)]

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, физический факультет 119992 Москва, Россия

Поступила в редакцию 17 августа 2005 г.

Рассмотрены особенности фазового перехода в модели, представляющей собой объединение моделей Изинга и Костерлица-Таулесса. Показано, что в такой системе в зависимости от соотношения параметров могут происходить как один, так и два последовательных фазовых перехода. Найдена асимптотическая формула для температуры фазового перехода изинговского типа.

PACS: 77.80.Bh

Возникновение теории ренормгрупповых преобразований [1] существенно расширило класс систем, аналитическое описание критического поведения которых стало возможным. Одной из таких систем является двумерная XY-модель, особенности фазового перехода которой были рассмотрены Костерлицем и Таулессом [2, 3] всего через два года после появления работы Вильсона. Модель Костерлица–Таулесса лежит особняком среди систем, обладающих фазовым переходом второго рода: в этой системе дальний порядок существует лишь при нулевой температуре, при прочих же температурах даже ниже точки Кюри коррелятор фаз спадает с расстоянием [4]. Точка фазового перехода может быть зарегистрирована по резкому изменению закона спадания корреляционной функции, что, однако, представляет собой нетривиальную задачу с экспериментальной точки зрения (в частности, в случае численного эксперимента [5 – 7]). Тем интереснее рассмотреть поведение системы, в которой может одновременно происходить как обычный фазовый переход второго рода, так и фазовый переход по сценарию Костерлица–Таулесса.

Система, рассмотренная в работе, возникла в процессе развития модели, описывающей формирование доменных структур в кристаллах KDP [8], однако представляет интерес сама по себе как пример взаимодействия двух фазовых переходов, имеющих различный характер.

Рассмотрим систему, энергия которой определяется эффективным гамильтонианом

$$H_{\text{eff}}^{(1)} = \frac{1}{2}\sum_{ij}\big[a(1 - s_{ij}s_{i+1j}) + $$
$$+(1 + s_{ij}s_{i+1j})\{1 - \cos(\varphi_{ij} - \varphi_{i+1j})\}\big] + $$
$$\frac{1}{2}\sum_{ij}\big[a(1 - s_{ij}s_{ij+1}) + $$
$$+(1 + s_{ij}s_{ij+1})\{1 - \cos(\varphi_{ij} - \varphi_{ij+1})\}\big], \qquad (1)$$

где суммирование идет по всем узлам квадратной решетки, и в каждом узле ij определены “спин” $s_{ij} = \pm 1$, и “фаза” $|\varphi_{ij}| \le \pi$. Другими словами, взаимодействие между фазами φ_{ij} включается только тогда, когда совпадают спины s_{ij}. Условно энергию системы (1) можно представлять в виде глубокого двухъямного потенциала, на дне одной из ям которого находится стрелка компаса, причем стрелки в соседних узлах взаимодействуют, только если находятся в одинаковых ямах (рис.1). Подобная модель

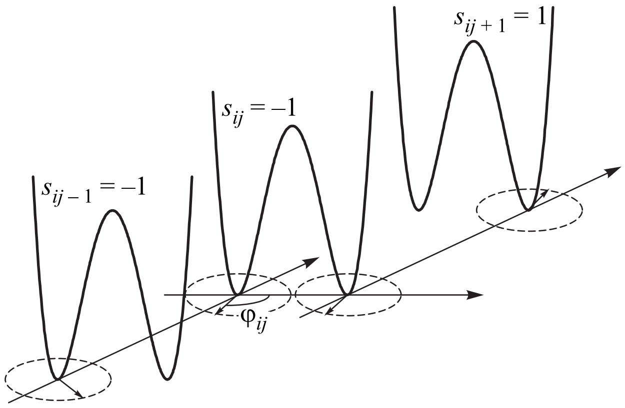

Рис.1. Схематическое представление эффективного потенциала (1)

представляет собой объединение моделей Изинга и Костерлица–Таулесса [2, 3]: в частном случае $s_{ij} = \text{const}$ модель превращается в классическую XY-модель, а при $\varphi_{ij} = \text{const}$ переходит в модель Изинга, температура фазового перехода которой определяется константой взаимодействия спинов a [9]:

[1)]e-mail: pasha@qopt.phys.msu.su

$$T_I = a/\ln(\sqrt{2}+1). \quad (2)$$

Основным состоянием системы является однородное состояние с постоянными значениями спинов и фаз, реализующееся при нулевой температуре. При достаточно высокой температуре система переходит в полностью хаотическое состояние, причем разрушение дальнего порядка может происходить как через один, так и через два фазовых перехода в зависимости от соотношения критических температур в модели Изинга (2) и в XY-модели. Действительно, рассмотрим разрушение однородного состояния при медленном росте температуры. Как уже было сказано, особенность фазового перехода в двумерной XY-модели заключается в том, что при любой ненулевой температуре настоящего дальнего порядка нет, корреляционная функция фаз спадает по полиномиальному закону с показателем, зависящем от температуры [2–4]:

$$\langle \varphi_{ij}\varphi_{ij+k}\rangle \sim k^{-T/4\pi}. \quad (3)$$

Поэтому однородное по спинам s_{ij} состояние системы (1) можно трактовать как некую "фазовую" жидкость, внутренняя энергия которой возрастает вместе с температурой. Если пренебречь корреляцией между спинами и фазами и усреднить гамильтониан (1) по фазовым переменным, то мы получим, что эффективная константа взаимодействия спинов будет зависеть от температуры:

$$H^{(2)}_{\rm eff} = -\frac{1}{2}\sum_{ij}\{a+1-F(T)\}(s_{ij}+s_{i+1j}+s_{ij}s_{ij+1}), \quad (4)$$

где $F(T)$ – среднее значение энергии связи в модели Костерлица–Таулесса:

$$F(T) = \langle\cos(\varphi_{ij}-\varphi_{ij+1})\rangle. \quad (5)$$

Таким образом, оказывается, что в системе (1) фазовый переход изинговского типа происходит при температуре, удовлетворяющей уравнению

$$T_C = \{a+1-F(T_C)\}/\ln(\sqrt{2}+1). \quad (6)$$

Если эта температура выше температуры Кюри в XY-модели $T_C > T_{KT}$, то в системе происходит последовательно два фазовых перехода. В случае $T_C < T_{KT}$ в системе наблюдается только переход изинговского типа, потому что разрушение связи между спинами немедленно выключает взаимодействие между фазами.

Для проверки описанного выше сценария была проведена серия численных экспериментов, позволившая определить зависимость температуры фазового перехода T_C от величины a. Моделирование производилось на сетке размером 400×400 методом Монте-Карло по алгоритму Метрополиса. Температуры фазовых переходов изинговского и костерлиц-таулессовского типов определялась по поведению "спиновой" и "фазовой" корреляционных функций (рис.2):

$$C_k^{(1)} = \langle s_{ij}s_{ij+k}\rangle,$$
$$C_k^{(2)} = \langle (s_{ij}s_{ij+k}+1)\cos(\varphi_{ij}-\varphi_{ij+k})\rangle. \quad (7)$$

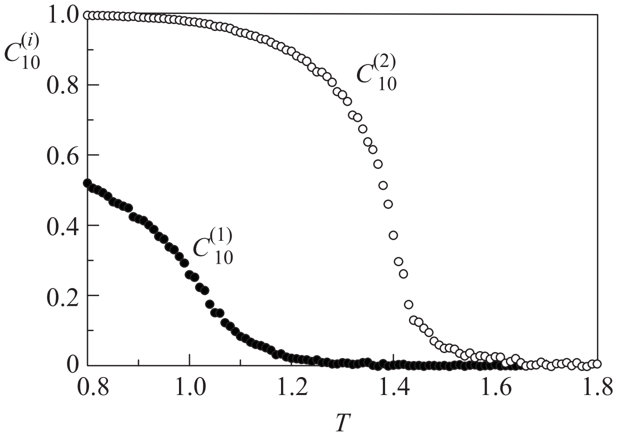

Рис.2. Температурные зависимости k-й компоненты ($k = 10$) "спиновой" и "фазовой" корреляционных функций (7) при значении параметра $a = 2$, позволяющие определить температуры фазовых переходов изинговского ($T_C = 1.49\pm 0.04$) и костерлиц-таулессовского ($T_{KT} = 1.19\pm 0.04$) типов в модели (1)

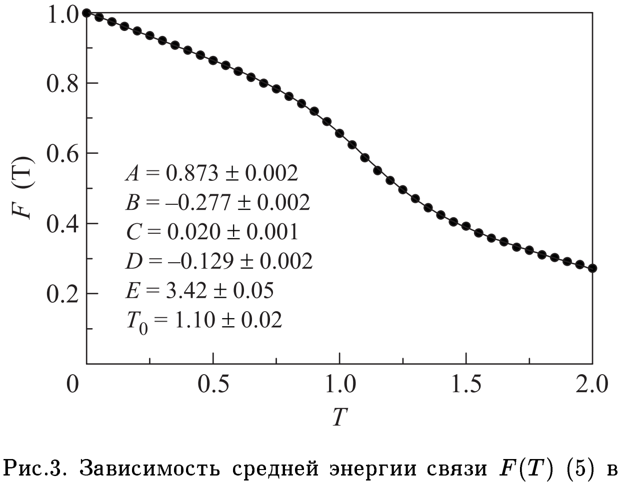

Рис.3. Зависимость средней энергии связи $F(T)$ (5) в XY-модели от температуры: точками показаны результаты численного эксперимента, сплошной линией – результат аппроксимации по формуле (9) (значения параметров показаны на рисунке)

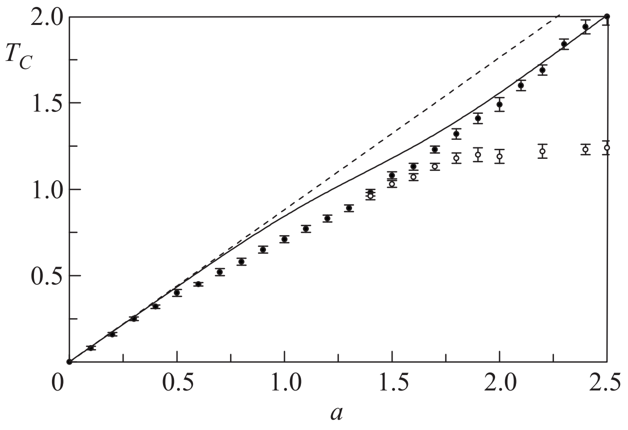

Рис.4. Зависимость температуры фазового перехода в обобщенной модели Изинга–Костерлица–Таулесса. Точками показаны результаты численного эксперимента, сплошной линией – теоретическая зависимость (6), а штриховой – зависимость температуры фазового перехода от константы взаимодействия a в модели Изинга (2). Светлыми точками показана температура фазового перехода костерлиц-таулессовского типа

Аналогичным способом в результате моделирования эволюции обычной XY-модели с эффективным гамильтонианом

$$H_{\text{eff}}^{(3)} = -\frac{1}{2}\sum_{ij}\{\cos(\varphi_j - \varphi_{i+1j}) + \cos(\varphi_{ij} - \varphi_{ij+1})\} \tag{8}$$

определялась зависимость $F(T)$. Оказывается, эта зависимость очень хорошо аппроксимируется формулой

$$F(T) \approx A + BT + CT^2 + D\,\text{th}\,\{E(T - T_0)\}, \tag{9}$$

как показано на рис.3, где $T_0 \approx T_{KT}$ – приблизительная температура фазового перехода.

На рис.4 показаны зависимости $T_C(a)$, полученные как в результате численного эксперимента, так и на основе решения уравнения (6) с учетом аппроксимации (9). Теоретическая кривая (6) хорошо описывает результаты численного эксперимента как при малых, так и при больших значениях a. Однако соответствие оказывается заметно хуже в области тройной точки, в которой зависимость $T_C(a)$ пересекается с дополнительной ветвью, соответствующей фазовому переходу костерлиц-таулессовского типа. Этого следовало ожидать, так как в этой области флуктуации спиновых и фазовых переменных сильно скоррелированы, и усреднение, произведенное в (4), некорректно. Положение тройной точки на фазовой диаграмме приблизительно определяется значением a, при котором $T_C(a) \approx T_{KT}$, однако уточнение ее положения требует точного измерения температуры Кюри в XY-модели путем анализа критических зависимостей [5 – 7]. Характер фазового перехода в окрестности тройной точки, судя по всему, представляет собой отдельную интересную задачу.

Автор признателен А.Н. Рубцову, сделавшему ряд ценных замечаний. Работа выполнена при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований # 02-02-16843 и гранта Президента РФ # НШ-166.2003.2.

1. К. Дж. Вильсон, УФН **141**, 193 (1983).
2. J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C: Solid State Phys. **6**, 1181 (1973).
3. D. J. Thouless, J. Phys. C: Solid State Phys. **7**, 1046 (1974).
4. В. Л. Березинский, ЖЭТФ **59**, 907 (1970).
5. R. Gupta and C. F. Baillie, Phys. Rev. B **45** 2883 (1992).
6. P. Olsson, Phys. Rev. B **52**, 4526 (1995).
7. W. Janke, Phys. Rev. B **55**, 3580 (1997).
8. А. А. Жуков, П. А. Прудковский, Вестник МГУ, сер. физ. **4**, 55 (2002).
9. Л. Д. Ландау, Е. М. Лившиц, *Статистическая физика*, ч. 1, М.: Наука, 1976.