Письма в ЖЭТФ, том 35, вып.4, стр. 151 – 152 20 февраля 1982 г.

ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В ДВУМЕРНОЙ СИСТЕМЕ ДИПОЛЕЙ

В.М.Розенбаум, В.М.Огенко

Показано, что задача о фазовом переходе в квадратной решетке диполей (с диполь-дипольным взаимодействием), обладающих осью симметрии четвертого порядка, сводится к двумерной модели Изинга, а потому допускает точное аналитическое решение.

Примером двумерной системы диполей с конечной коммутативной группой симметрии может служить система поверхностных групп, обладающих поворотной степенью свободы. Если число ближайших к группе симметрично расположенных атомов поверхности равно m, то группа будет обладать осью симметрии m-го порядка и фазовый переход будет происходить на фоне случайных поворотных переориентаций между азимутальными потенциальными ямами[1)].

Известно, что в двумерных системах с непрерывной группой симметрии при переходе к термодинамическому пределу исчезает дальний порядок, в то время как дипольное взаимодействие стабилизирует последний[1]. Поэтому не удивительно наличие дальнего порядка и в рассматриваемой ниже конкретной модели с диполь-дипольным взаимодействием:

$$
\begin{aligned}
U_{nm,\,n+1m} &= J\,[\,\mathbf{e}_{nm}\cdot\mathbf{e}_{n+1m} - 3\,(\mathbf{e}_{nm}\cdot\mathbf{i})(\mathbf{e}_{n+1m}\cdot\mathbf{i})\,],\\
U_{nm,\,nm+1} &= J\,[\,\mathbf{e}_{nm}\cdot\mathbf{e}_{nm+1} - 3\,(\mathbf{e}_{nm}\cdot\mathbf{j})(\mathbf{e}_{nm+1}\cdot\mathbf{j})\,].
\end{aligned}
\tag{1}
$$

Здесь J – энергия диполь-дипольного взаимодействия, $\mathbf{e}_{nm}$ – единичный вектор, указывающий каждое их четырех возможных направлений ориентации диполя, находящегося в узле (nm) квадратной решетки (см. рис.1), $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$ – орты вдоль осей x и y. Разложим вектор $\mathbf{e}_{nm}$ на компоненты

$$
\mathbf{e}_{nm} = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\sigma^x_{nm}\,\mathbf{i} + \sigma^y_{nm}\,\mathbf{j}),
\tag{2}
$$

тогда каждое из четырех направлений ориентаций можно задавать парой независимых компонент $\sigma^x_{nm} = \pm 1$, $\sigma^y_{nm} = \pm 1$. Подставляя (2) в (1), получим следующее выражение для полного гамильтониана системы:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \mathcal{H}^x + \mathcal{H}^y,\\
\mathcal{H}^x &= -J\sum_{nm}\sigma^x_{nm}\sigma^x_{n+1m} + \frac{1}{2}J\sum_{nm}\sigma^x_{nm}\sigma^x_{nm+1},\\
\mathcal{H}^y &= \frac{1}{2}J\sum_{nm}\sigma^y_{nm}\sigma^y_{n+1m} - J\sum_{nm}\sigma^y_{nm}\sigma^y_{nm+1}.
\end{aligned}
\tag{3}
$$

Видно, что исходная система распалась на две невзаимодействующие подсистемы, каждая из которых описывается двумерной моделью Изинга с различающимися константами связи внутри столбца (n) и строки (m)[2]. Конфигурация ориентаций диполей в упорядоченной фазе, отвечающая минимуму гамильтониана (3), изображена на рис.2. Критическая температура T_c перехода в эту фазу определяется уравнением

$$
\operatorname{sh}\frac{2J}{kT_c}\,\operatorname{sh}\frac{J}{kT_c} = 1,
\tag{4}
$$

откуда $kT_c \cong 1{,}641\,J$.

1) Фазовый переход в конкретной системе гидроксильных групп поверхности кремнезема рассматривался в[3]

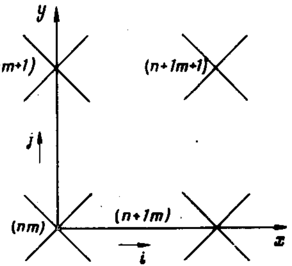

Рис. 1

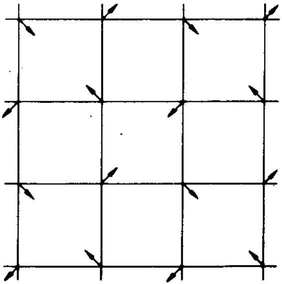
Рис. 2

Заметим, что если угол между ориентациями e_{nm} и осями x, y отличается от 45°, то в (3) появилось бы слагаемое $\mathcal{H}^{xy}$, описывающее взаимодействие двух изинговских подсистем. Проведенное выше рассмотрение можно обобщить и на n-мерные прямоугольные решетки с числом ориентаций диполей (вдоль главных диагоналей) равным 2^n.

Литература

1. *Pokrovsky V.L.* Advances in Physics, 1979, 28, 595.
2. *Маттис Д.* Теория магнетизма, 1967, М.: гл.9.
3. *Огенко В.М., Розенбаум В.М.* Теор. и эксперим. химия, 1981, 17, 66.

Институт физической химии
Академии наук Украинской ССР

Поступила в редакцию
25 декабря 1981 г.