

НОВЫЙ ТИП ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В МОДЕЛИ ИЗИНГА С НЕЭКВИВАЛЕНТНЫМИ ПОДРЕШЕТКАМИ

Э.Э.Торнау, В.Е.Шнейдер

Показано, что в модели взаимодействующих линейных изинговских цепочек спинов, находящихся в асимметричном потенциале, короткодействующие корреляции могут привести к расщеплению непрерывного перехода на два перехода, один из которых является переходом первого рода.

Известно, что кристаллы, у которых упорядочивающиеся "диполи" в высокосимметричной фазе имеют два неэквивалентных (асимметричных) положения равновесия, проявляют разнообразные и нередко уникальные физические свойства. Наиболее удачная микроскопическая модель, отражающая влияние параметра асимметрии на характер фазового перехода, была предложена Мицуи для кристалла сегнетовой соли (см., например, [1]). Однако, исследование свойств различных веществ на основе этой модели проводилось, в основном, в приближении молекулярного поля (МП), которое часто оказывается недостаточным даже для качественного описания опытных данных в кристаллах группы сегнетовой соли [2]. Это важное обстоятельство указывает на то, что вещества с асимметричным расположением упорядочивающихся ионов, относится к редкому и любопытному примеру системы, для которой теория МП не правильно описывает общие термодинамические закономерности. Тем самым желательны попытки более точных методов исследования фазовых переходов в этих системах. В настоящей работе будет показано, что уже простейший учет короткодействующих сил в модели Мицуи, может привести к новому качественному явлению – расщеплению непрерывного фазового перехода на два близких по температуре перехода, не реализующихся в рамках приближения МП.

Рассмотрим модель, состоящую из двух линейных цепочек изинговских спинов, находящихся в асимметричном потенциале. Взаимодействия между цепочками и ближайшими соседями опишем в приближении

МП. Взаимодействие же ближайших соседей в цепочках будем учитывать точно. Гамильтониан задачи запишем в виде

$$H = -V \sum_i (s_i s_{i+1} + \sigma_i \sigma_{i+1}) - H_1 \sum_i s_i - H_2 \sum_i \sigma_i + \frac{J}{2} (\langle s \rangle^2 + \langle \sigma \rangle^2) + K \langle s \rangle \langle \sigma \rangle, \quad (1)$$

где $s_i, \sigma_i = \pm 1$ относятся к первой и второй цепочкам (подрешеткам), V – потенциал взаимодействия в подрешетках. Продольные "поля" $H_{1,2}$ определяются

$$H_1 = J \langle s \rangle + K \langle \sigma \rangle + \Delta; \quad H_2 = J \langle \sigma \rangle + K \langle s \rangle - \Delta. \quad (2)$$

В (1), (2) K и J – константы взаимодействия между цепочками и ближайшими соседями соответственно, $\langle s \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ – средние значения поляризации в единицах дипольного момента, Δ – параметр асимметрии.

Если ввести удобные для дальнейшего безразмерные величины

$$a = (K - J)R, \quad \gamma = \Delta R, \quad t = TR, \quad v = VR, \quad R = (K + J)^{-1},$$

$$L = \exp(-4v/t), \quad \xi = \frac{\langle s \rangle + \langle \sigma \rangle}{2}, \quad \eta = \frac{\langle s \rangle - \langle \sigma \rangle}{2},$$

$$\frac{\xi}{t} = x, \quad z = \frac{\gamma - a\eta}{t},$$

то выражение для свободной энергии принимает вид

$$F = \xi^2 - a\eta^2 - t \{ \ln [\text{ch}(z+x) + (\text{sh}^2(z+x) + L)^{1/2}] + \ln [\text{ch}(z-x) + (\text{sh}^2(z-x) + L)^{1/2}] \}. \quad (3)$$

Равновесные значения поляризации ξ и антиполяризации η находятся из условий минимума

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \xi} \right)_{\eta} = \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right)_{\xi} = 0. \quad (4)$$

Результаты исследования уравнений (4) и свободной энергии (3) в зависимости от энергетических параметров a , γ представлены на рис. 1 (кривая AC соответствует $v = 2,5$; AD – приближению МП [1] с $V = 0$ в (1). В областях I, II, III сегнетофаза ($\xi \neq 0$) сохраняется до температур абсолютного нуля; в III переходы в полярное состояние – первого, а в I, II – второго рода, в IV сегнетофаза существует при промежуточных температурах, в V состояние с $\xi \neq 0$ не возникает. Сравнительно с результатами МП, учет короткодействующих корреляций, во-первых, "деформирует" фазовую диаграмму, расширяя область III и сужая область IV (очевидно, что граница AP остается прежней); во-вторых, при-

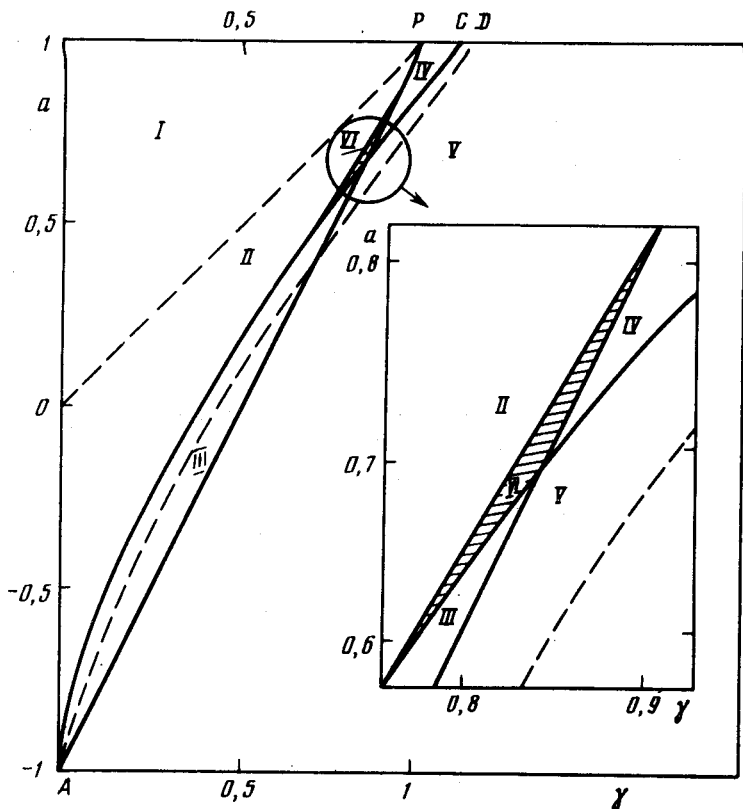


Рис.1. Диаграмма состояния для модели (1) в координатах a, γ

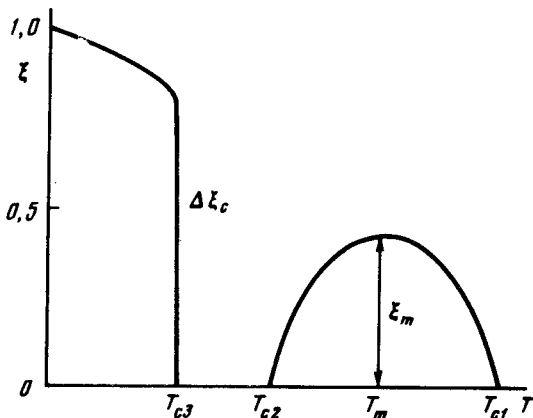


Рис.2. Схематическое изображение температурной зависимости $\xi(T)$ в области VI ($T_{c1} > T_{c2} > T_{c3}$). При $a = 0,7$, $\gamma = 0,841$, $v = 2,5$ отношения $T_{c3}/T_{c1} = 0,66$, $T_{c2}/T_{c1} = 0,76$, $r = 0,07$ и $\Delta\xi_c = 0,87$, $\xi_m = 0,3$

водит к появлению новой области VI, в которой с понижением температуры последовательно осуществляются три перехода: в полярную фазу с колокообразным поведением поляризации, в состояние с отсутствием поляризации и в фазу, где сегнетоэлектрические свойства сохраняются до $T = 0$. Зависимость $\xi(T)$ в области VI приведена на рис.2. Как показывает анализ, наши результаты почти не зависят от v , начиная с $2v/T_{c1} \gtrsim 1$. Важным при этом является то, что при уточнении прибли-

жения, осуществляемом, например, добавлением в (1) члена $u \sum_i s_i \sigma_i$, где u соответствует взаимодействию между цепочками, а K описывает уже взаимодействие между ближайшими цепочками, область VI сохраняется. Появление своеобразного поведения $\xi(T)$ в области VI связано, видимо, со следующими причинами. Как известно [1], в приближении МП при $a < \gamma$ существуют две точки T_{01} и T_{02} , в которых производная $(\partial^2 F / \partial \xi^2)_{\xi=0}$ обращается в нуль. Однако, в области II исчезновение поляризации при $T = T_{02}$ в приближении МП не происходит, вследствие того, что при этих T существует более глубокий минимум свободной энергии $F(\xi \neq 0)$ сравнительно с $F(\xi = 0)$ и системе не выгодно оказаться в состоянии с $\xi = 0$. Короткодействующие корреляции, как нетрудно убедиться, приводят к тому, что в узком интервале параметров a, γ величина $F(\xi = 0, T_{02})$ становится меньше $F(\xi \neq 0, T_{02})$ и спонтанная поляризация при $T_{02} = T_{c2}$ исчезает. При низких T устойчивым состоянием является фаза с $\xi \rightarrow 1, \eta \rightarrow 0$, и тогда при понижении $T < T_{c2}$ в точке T_{c3} происходит фазовый переход первого рода. Таким образом, короткодействие приводит к тому, что фазовый переход в сегнетофазу ($\xi = 1$) осуществляется через промежуточное состояние, энергетически невыгодное с точки зрения теории МП, причем "температур-

ный интервал расщепления" $\tau = \frac{T_{c2} - T_{c3}}{T_{c2} + T_{c3}} \ll 1$ при любых v . Изло-

женная модель, видимо, достаточно полно описывает квазиодномерные структуры, в которых поперечные взаимодействия малы по сравнению с продольными. Однако, можно думать, что она будет полезной для качественного исследования особенностей термодинамики и в трехмерном случае. Так в кристалле $(ND_4)_3 D(SO_4)_2$, принадлежащем группе сегнетовой соли, наблюдалась [3] температурная зависимость спонтанной поляризации отвечающая именно области VI: $\xi_m / \xi_s \approx 0,42$, $\Delta \xi_c / \xi_s \approx 0,8$, $\tau \approx 0,06$, где ξ_s — экспериментальное значение поляризации насыщения. При полной замене D на H $\tau = 0$ и поведение $\xi(T)$ становится характерным уже для области II [3].

Авторы благодарны В.Г.Ваксу и А.П.Леванюку за ценные советы и обсуждение работы.

Институт физики полупроводников
Академии наук Литовской ССР

Поступила в редакцию
23 января 1980 г.

Литература

- [1] В.Г.Вакс. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. М., 1973, §23.
 [2] В.Р.Белослудов, А.А.Власова, В.М.Набутовский, В.Е.Шнейдер. ЖЭТФ, 77, 270, 1979.
 [3] Т.Осака, У.Макига, К.Геси. J. Phys. Soc. Jap., 43, 933, 1977; K.Gesi. J. Phys. Soc. Jap., 43, 1941, 1949, 1977.