

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P17-86-722

В.И.Юкалов

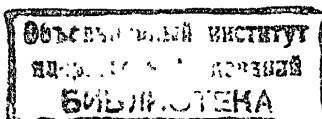
РЕШЕТОЧНЫЕ СМЕСИ ФЛУКТУИРУЮЩИХ ФАЗ

Направлено в журнал "Physica A"

1986

I. Введение

Микроскопическая теория систем с гетерофазными флуктуациями^{/I-4/} наиболее последовательно обосновывается с помощью ансамбля квазиравновесных ансамблей для гетерофазных систем^{/5/} при использовании метода Гиббса разделяющих поверхностей^{/6/}. Этот ансамбль для краткости будем в дальнейшем называть гетерофазным ансамблем. Многочисленные примеры реальных систем, представляющих собой гетерофазные смеси, были приведены в работах^{/5,7/}. В сообщении^{/5/} теория гетерофазных систем формулируется для систем континуального типа. В данной статье теория переформулируется для решеточных систем (параграф 2). При этом даются лишь основные результаты, так как техника доказательств была подробно изложена ранее^{/4,5,7/}. После усреднения по гетерофазным флуктуациям и отыскания ренормированного гамильтониана возникает вопрос, как математически выделить соответствующие термодинамические фазы. В простых случаях, например, для двухуровневых систем, упорядоченную и разупорядоченную фазы можно разделить, явно конструируя характеризующие их пространства состояний (параграф 3). Хорошей иллюстрацией этой ситуации служит модель изинговского типа, обобщенная для учета гетерофазных состояний (параграф 4). В двумерном пространстве при нулевом внешнем поле такая модель решается точно, и оказывается, что гетерофазные состояния могут существовать только как метастабильные в конечной окрестности критической точки. В более сложных случаях выделение фаз можно провести, добавляя к гамильтониану источники, содержащие параметры порядка со свойствами искомым фаз (параграф 5). Как известно, параметры порядка явно появляются при использовании приближения среднего поля, в котором, следовательно, осуществить выделение различных фаз наиболее просто. Гетерофазная модель гейзенберговского типа с произвольным спином даже в приближении среднего поля демонстрирует чрезвычайно разнообразное и нетривиальное поведение (параграф 6). В зависимости от соотношения между константами кристаллического поля и обменного взаимодействия в этой модели возможны любые состояния: стабильные, метастабильные, чистые и смешанные. Некоторые из метастабильных состояний характеризуются аномальными максимумами теплоемкости или намагниченности ниже точки Кюри. В некоторых стабильных системах появляется точка нуклеации, являющаяся точкой фазового перехода между гомофазным и гетерофазным состояниями. В точке нуклеации



термодинамические функции могут иметь скачки. Наличие гетерофазных флуктуаций в четыре раза понижает критическую температуру и может даже привести к срыву перехода второго рода на переход первого рода.

2. Гетерофазные решеточные системы

Пусть на решетке $Z = \{x_i | i = 1, 2, \dots, L\}$ задан гамильтониан

$$H = \sum_n \sum_{i_1, \dots, i_n} H(x_{i_1}, \dots, x_{i_n}) \quad (n=1, 2, \dots),$$

операторная структура которого пока не важна. Возможно, не все узлы решетки заняты частицами, как это имеет место в моделях решеточного газа^{/8/}. Тогда распределение частиц по узлам характеризуется оператором $N(x_i)$, так что сумма $\sum_i N(x_i) = \hat{N}$ дает оператор числа частиц. Операторы H и \hat{N} принадлежат алгебре наблюдаемых \mathcal{A} , определенной на гильбертовом пространстве \mathcal{H} . Допустим, в пространстве \mathcal{H} удастся выделить подпространства $\mathcal{F}_\alpha \subset \mathcal{H}$, при $\alpha=1, 2, \dots, s$, такие, что каждое из \mathcal{F}_α образовано векторами состояний со свойствами, сопоставляемыми некоторой термодинамической фазе. Оставим пока в стороне вопрос, как осуществить такое выделение подпространств \mathcal{F}_α , потому что именно это и будет объясняться в последующих пунктах данной работы. На каждом из \mathcal{F}_α можно задать представление алгебры наблюдаемых $\mathcal{A}_\alpha = \pi_\alpha(\mathcal{A})$. Разделение фаз в реальном пространстве происходит при помощи метода Гиббса^{/6/} разделяющих поверхностей. Для этого задается покрытие $\{Z_\alpha\}$ ^{/4/} решетки $Z = \bigcup Z_\alpha$, $L = \sum_\alpha L_\alpha$. Каждое покрытие описывается набором характеристических функций подмножеств

$$\xi_\alpha(x_i) = \begin{cases} 1, & x_i \in Z_\alpha, \\ 0, & x_i \notin Z_\alpha. \end{cases}$$

Фиксированный набор этих функций обозначим посредством

$$\xi = \left\{ \xi_\alpha(x) \mid \alpha=1, 2, \dots, s; \sum_i \xi_\alpha(x_i) = L_\alpha \right\}.$$

Множество таких наборов $\{\xi\}$, задающих всевозможные покрытия решетки, образуют топологическое пространство $\mathcal{X}^c = \{\xi \mid \forall Z_\alpha, L_\alpha; \alpha=1, 2, \dots\}$. Это топологическое пространство метризуемо^{/4,5/} с помощью соответствующей меры $m(\xi)$.

При всяком выборе разделяющих поверхностей, то есть при каждом покрытии с фиксированным ξ , рассматриваемая гетерофазная система безусловно, неоднородна, так как между фазами всегда имеются переходные слои. Нужный тип неоднородности может быть задан^{/5/} функциями

обратной температуры $\beta_\alpha(x, \xi)$ и химического потенциала $\mu_\alpha(x, \xi)$. Нас интересует ситуация, когда флуктуационные зародыши конкурирующих фаз возникают случайным образом, так что за время наблюдения в системе не происходит пространственной локализации доменов. Следовательно, в среднем система представляется однородной, а наблюдаемые обратная температура β и химический потенциал μ являются ренормированными величинами соответствующих затравочных функций:

$$\int \beta_\alpha(x, \xi) dm(\xi) = \beta, \quad \int \mu_\alpha(x, \xi) dm(\xi) = \mu. \quad (1)$$

Равенства (1) означают, что система равновесна в среднем, именно в среднем, тогда как при каждом фиксированном выборе разделяющих поверхностей обычные условия равновесия^{/9/} не выполняются. Система, в которой имеется пространственное разделение фаз, квазиравновесна^{/5/}. Статистический оператор при заданном ξ имеет вид

$$\rho(\xi) = e^{-\Gamma(\xi)} / \mathcal{Z}, \quad (2)$$

где квазиравновесный гамильтониан

$$\Gamma(\xi) = \bigoplus_\alpha \Gamma_\alpha(\xi),$$

$$\Gamma_\alpha(\xi) = \sum_i \beta_\alpha(x_i, \xi) \left[\sum_n \sum_{i_2, \dots, i_n} H_\alpha(x_i, x_{i_2}, \dots, x_{i_n}) \times \right. \\ \left. \times \xi_\alpha(x_{i_2}) \dots \xi_\alpha(x_{i_n}) - \mu_\alpha(x_i, \xi) N_\alpha(x_i) \right] \xi_\alpha(x_i)$$

задан на пространстве $\mathcal{F} = \bigotimes \mathcal{F}_\alpha$; причем $N_\alpha(x_i)$ - это представление оператора $N(x_i)$ на пространстве \mathcal{F}_α . Статистическая сумма равна $\mathcal{Z} = \int \exp[-\Gamma(\xi)] dm(\xi)$.

Множество систем со всевозможными конфигурациями разделяющих поверхностей и образует гетерофазный ансамбль^{/5/}. Интегрирование по мере $dm(\xi)$ соответствует усреднению по гетерофазным флуктуациям^{/2/}. Это интегрирование в случае континуальных систем определяет функциональные интегралы по характеристическим функциям множеств^{/4,5/}. Континуальные модели являются самыми общими. В частных случаях они описывают и решеточные системы полностью локализованных частиц, и промежуточные ситуации, когда соседствуют локализованные и делокализованные частицы, как, например, в соединениях со смешанной валентностью^{/10-13/}. Поэтому можно ограничиться рассмотрением усреднения по гетерофазным флуктуациям для непрерывного пространства, переходя к дискретному случаю лишь на заключительном

этапе. Однако аналогичное усреднение нетрудно провести и непосредственно для решеточной модели. Для этого характеристические функции представляются в форме $\xi_\alpha(x_i) = \sum_{j=1}^L \Delta(x_i - \alpha_j)$, где $\Delta(x) = \begin{cases} 1, & x=0, \\ 0, & x \neq 0, \end{cases}$, а функциональное интегрирование заменяется

функциональным суммированием /7/, так что $\int dm(\xi) = \sum_P \sum_{\xi}^L$, второе суммирование происходит при фиксированном наборе $P = \{P_\alpha = L_\alpha / L \mid \alpha = 1, 2, \dots, S\}$, причем $\sum_{\xi}^L = \frac{1}{L!} \sum_{\alpha_1 \in \mathbb{Z}} \sum_{\alpha_2 \in \mathbb{Z}} \dots \sum_{\alpha_L \in \mathbb{Z}}$, а первая сумма обозначает $\sum_P = \sum_{P_1} \sum_{P_2} \dots \sum_{P_S} \Delta(\sum P_\alpha - 1)$. В результате такого усреднения доказывается следующая теорема:

$$\int e^{-\Gamma(\xi)} dm(\xi) \simeq e^{-\tilde{\Gamma}} \quad (L \rightarrow \infty); \quad (3)$$

перенормированный квазигамильтониан имеет вид

$$\tilde{\Gamma} = \beta(\tilde{H} - \mu \tilde{N}), \quad \tilde{H} = \bigoplus_{\alpha} \tilde{H}_{\alpha}, \quad \tilde{N} = \bigoplus_{\alpha} \tilde{N}_{\alpha},$$

$$\tilde{H}_{\alpha} = \sum_n w_{\alpha}^n \sum_{i_1, \dots, i_n} H_{\alpha}(x_{i_1}, \dots, x_{i_n}),$$

$$\tilde{N}_{\alpha} = w_{\alpha} \sum_i N_{\alpha}(x_i);$$

фазовые вероятности w_{α} определяются минимизацией термодинамического потенциала

$$\psi = -\frac{1}{L} \ln Z \simeq -\frac{1}{L} \ln \overline{\text{Tr}} \exp[-\beta(\tilde{H} - \mu \tilde{N})] \quad (4)$$

при условии нормировки $\sum_{\alpha} w_{\alpha} = 1$, то есть находятся из уравнений

$$\frac{\partial \psi}{\partial w_{\alpha}} = 0, \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial w_{\alpha}^2} > 0 \quad \left(\sum_{\alpha} w_{\alpha} = 1 \right). \quad (5)$$

Всякий оператор \hat{A} из алгебры наблюдаемых \mathcal{A} при усреднении по гетерофазным флуктуациям преобразуется аналогично гамильтониану и оператору числа частиц. Поясним сказанное на примере n -частичного оператора $\hat{A} = \sum_{i_1, \dots, i_n} A(x_{i_1}, \dots, x_{i_n})$. Его представление на пространстве $\tilde{\mathcal{F}} = \bigotimes_{\alpha} \tilde{\mathcal{F}}_{\alpha}$ для гетерофазной системы с фиксированными разделяющими поверхностями имеет структуру $\hat{A}(\xi) = \bigoplus_{\alpha} \hat{A}_{\alpha}(\xi)$, в которой $\hat{A}_{\alpha}(\xi) = \sum_{i_1, \dots, i_n} A_{\alpha}(x_{i_1}, \dots, x_{i_n}) \xi_{\alpha}(x_{i_1}) \dots \xi_{\alpha}(x_{i_n})$.

Используя методы интегрирования по характеристическим функциям /4,5,7/, можно показать, что математическое ожидание рассматриваемого оператора имеет вид

$$\overline{\text{Tr}} \int_{\tilde{\mathcal{F}}} \rho(\xi) \hat{A}(\xi) dm(\xi) = \overline{\text{Tr}} \tilde{\rho} \tilde{A}, \quad (6)$$

где

$$\tilde{\rho} = \bigotimes_{\alpha} \tilde{\rho}_{\alpha}, \quad \tilde{\rho}_{\alpha} = \frac{\exp[-\beta(\tilde{H}_{\alpha} - \mu \tilde{N}_{\alpha})]}{\overline{\text{Tr}}_{\tilde{\mathcal{F}}_{\alpha}} \exp[-\beta(\tilde{H}_{\alpha} - \mu \tilde{N}_{\alpha})]},$$

$$\tilde{A} = \bigoplus_{\alpha} \tilde{A}_{\alpha}, \quad \tilde{A}_{\alpha} = w_{\alpha}^n \sum_{i_1, \dots, i_n} A_{\alpha}(x_{i_1}, \dots, x_{i_n}).$$

В дальнейшем будем также применять обозначение

$$\langle \tilde{A} \rangle = \overline{\text{Tr}} \tilde{\rho} \tilde{A} = \sum_{\alpha} \langle \tilde{A}_{\alpha} \rangle_{\alpha}, \quad \langle \tilde{A}_{\alpha} \rangle_{\alpha} = \overline{\text{Tr}}_{\tilde{\mathcal{F}}_{\alpha}} \tilde{\rho}_{\alpha} \tilde{A}_{\alpha}.$$

При наличии разделяющих поверхностей должна существовать и поверхностная энергия /6/. Ее среднее значение находится /5/ по формуле

$$E_{\text{surf}} = E - \sum_{\alpha} w_{\alpha} E_{\alpha}(1), \quad (7)$$

$$E \equiv \langle \tilde{H} \rangle, \quad E_{\alpha}(1) \equiv \left[\langle \tilde{H}_{\alpha} \rangle_{\alpha} \right]_{w_{\alpha} \equiv 1}.$$

Фазовые вероятности определяются из условия экстремальности термопотенциала (4). Это дает уравнение

$$\sum_n n \left[w_{\alpha}^{n-1} E_{\alpha}^{(n)} - w_{\beta}^{n-1} E_{\beta}^{(n)} \right] = \mu (R_{\alpha} - R_{\beta}), \quad (8)$$

в котором

$$E_{\alpha}^{(n)} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i_1, \dots, i_n} \langle H_{\alpha}(x_{i_1}, \dots, x_{i_n}) \rangle_{\alpha}, \quad N \equiv \langle \tilde{N} \rangle,$$

$$R_{\alpha} \equiv \frac{1}{N} \sum_i \langle N_{\alpha}(x_i) \rangle_{\alpha}, \quad s \equiv \text{sup } \alpha.$$

Химический потенциал как функцию плотности числа частиц N/L и

обратной температуры β можно найти из уравнения

$$\sum_x w_x R_x = 1. \quad (9)$$

В случае двух фаз ($s=2$) вместо (8) получаем

$$\sum_n \left[w_1^{n-1} E_1^{(n)} - (1-w_1)^{n-1} E_2^{(n)} \right] = \mu (R_1 - R_2),$$

а вместо (9) имеем $w_1 R_1 + w_2 R_2 = 1$. Если каждый узел решетки занят одной частицей, то есть $N(x_i) = 1$, тогда $R_x = 1$ и $N=L$. Если гамильтониан содержит не более чем двухчастичные взаимодействия ($n \leq 2$), то в двухфазном случае

$$w_1 = \frac{2E_2^{(2)} + E_2^{(1)} - E_1^{(1)} + \mu(R_1 - R_2)}{2[E_1^{(2)} + E_2^{(2)}]}, \quad w_2 = 1 - w_1. \quad (10)$$

3. Явное построение пространств

Подход, изложенный в предыдущем пункте, предполагает, что в пространстве состояний рассматриваемой системы существуют подпространства \mathcal{F}_x , характеризующие конкретные термодинамические фазы. В некоторых исключительных случаях эти подпространства удается построить явно. Прежде всего это относится к решеточным системам с переменными, принимающими конечное число дискретных значений. Поясним сказанное на примере системы с двухуровневыми решеточными переменными. Тогда базис пространства, ассоциированного с узлом i , состоит из двух функций $\varphi_{i+} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_i$ и $\varphi_{i-} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_i$. Пусть индекс $i = 1, 2, \dots, N$ нумерует лишь узлы, занятые частицами. Одночастичное пространство представляет собой линейную оболочку $C_i^2 = \mathcal{L}\{\varphi_{i+}, \varphi_{i-}\}$. Полное пространство состояний N -частичной системы образуется прямым произведением

$$\mathcal{H}_N = \bigotimes_i^N C_i^2. \quad (11)$$

Абсолютно упорядоченным состояниям соответствуют функции

$$\varphi_+^N = \bigotimes_i^N \varphi_{i+}, \quad \varphi_-^N = \bigotimes_i^N \varphi_{i-}. \quad (12)$$

Абсолютно разупорядоченные состояния описываются функциями

$$\varphi_0^N = \bigotimes_i^N \text{rand}\{\varphi_{i+}, \varphi_{i-}\}, \quad (13)$$

в которых на место i -го представителя случайным образом выбирается либо φ_{i+} , либо φ_{i-} . Функции вида (13) образуют класс эквивалентности $\{\varphi_0^N\}$.

Назовем псевдовакуумом тот из векторов пространства состояний, из которого с помощью элементарных возбуждений можно построить полный базис данного пространства. В конечномерном пространстве (11) роль псевдовакуума может играть любая из принадлежащих ему функций. На языке спиновых переменных элементарные возбуждения допустимо называть флиппонами. Они генерируются лестничными операторами $S_i^{\pm} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_i$, обладающими свойствами

$$S_i^+ \varphi_{i+} = 0, \quad S_i^+ \varphi_{i-} = \varphi_{i+}, \quad S_i^- \varphi_{i+} = \varphi_{i-}, \quad S_i^- \varphi_{i-} = 0,$$

$$[S_i^-, S_j^+]_+ = \hat{1}, \quad [S_i^-, S_j^+]_- = 0 \quad (i \neq j).$$

Однофлиппонные возбуждения над упорядоченными состояниями определяются векторами $\varphi_+^N(i) = S_i^- \varphi_+^N$, $\varphi_-^N(i) = S_i^+ \varphi_-^N$. Соответствующие многофлиппонные возбуждения описываются функциями

$$\varphi_{\pm}^N(i_1, \dots, i_n) = S_{i_1}^{\mp} \dots S_{i_n}^{\mp} \varphi_{\pm}^N. \quad (14)$$

Аналогично задаются флиппонные возбуждения над разупорядоченными состояниями, характеризуемыми функциями (13): в качестве однофлиппонного вектора имеем $\varphi_0^N(i) = S_i^{\pm} \varphi_0^N$, а в качестве многофлиппонного

$$\varphi_0^N(i_1, \dots, i_n) = S_{i_1}^{\pm} \dots S_{i_n}^{\pm} \varphi_0^N. \quad (15)$$

Всякие две функции пространства (11) могут быть преобразованы одна в другую через последовательность флиппонных возбуждений. Например, $\varphi_+^N(i_1, \dots, i_N) = \varphi_-^N$, $\varphi_-^N(i_1, \dots, i_N) = \varphi_+^N$.

Разделение состояний на упорядоченные и разупорядоченные может быть проведено более четко, если определить наблюдаемую величину, называемую параметром порядка. Этой наблюдаемой в рассматриваемом случае соответствует оператор $\hat{\sigma}_N = \frac{1}{N} \sum_i^N \sigma_i^z$, $\sigma_i^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_i$, по собственным значениям которого можно попытаться отличить упорядоченные состояния от неупорядоченных. Псевдовакуумы (12) и (13) являются собственными функциями этого оператора:

$$\hat{\sigma}_N^{\pm} \varphi_{\pm}^N = \varphi_{\pm}^N, \quad \hat{\sigma}_N^{\pm} \varphi_{\mp}^N = -\varphi_{\mp}^N,$$

$$\hat{\sigma}_N^{\pm} \varphi_0^N = \frac{a_N}{N} \varphi_0^N \quad (|a_N| < \infty, \forall N),$$

ограниченность a_N здесь вытекает из закона больших чисел. Полный набор собственных функций оператора $\hat{\sigma}_N^{\pm}$ задается всеми флиппонными векторами, для которых

$$\hat{\sigma}_N^{\pm} \varphi_{\pm}^N(i_1, \dots, i_n) = \pm \left(1 - \frac{2n}{N}\right) \varphi_{\pm}^N(i_1, \dots, i_n),$$

$$\hat{\sigma}_N^{\pm} \varphi_0^N(i_1, \dots, i_n) = \frac{1}{N} (a_N \pm 2n) \varphi_0^N(i_1, \dots, i_n).$$

Математическое ожидание оператора порядка $\hat{\sigma}_N^{\pm}$ приобретает смысл параметра порядка только при $N \rightarrow \infty$. Лишь в термодинамическом пределе, как известно, можно строго определить понятие термодинамической фазы и соответствующего ей параметра порядка. Введем обозначения для предельных псевдовакуумов (12) и (13):

$$\varphi_{\pm} = \lim_{N \rightarrow \infty} \varphi_{\pm}^N, \quad \varphi_0 = \lim_{N \rightarrow \infty} \varphi_0^N. \quad (16)$$

Под предельным переходом $N \rightarrow \infty$, как обычно, понимается переход, при котором $N \rightarrow \infty$, $L \rightarrow \infty$, $N/L \rightarrow const$. Пределы флиппонных векторов (14) и (15) определены неоднозначно — необходимо наложить дополнительные условия на число флиппонных возбуждений. В частности, при $N \rightarrow \infty$ число n может быть или ограниченным, или может расти вместе с N . Определяя пределы

$$\varphi_{\pm}(i_1, \dots, i_n; \delta^{\pm}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \varphi_{\pm}^N(i_1, \dots, i_n) \quad \left(\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{n}{N} = \delta < \frac{1}{2}\right), \quad (17)$$

$$\varphi_0(i_1, \dots, i_n) = \lim_{N \rightarrow \infty} \varphi_0^N(i_1, \dots, i_n) \quad \left(\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{n}{N} = 0\right)$$

и рассматривая действие оператора порядка на соответствующие функции при $N \rightarrow \infty$,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \hat{\sigma}_N^{\pm} \varphi_{\pm}^N(i_1, \dots, i_n) = \pm (1 - 2\delta^{\pm}) \varphi_{\pm}(i_1, \dots, i_n; \delta^{\pm}) \neq 0, \quad (18)$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \hat{\sigma}_N^{\pm} \varphi_0^N(i_1, \dots, i_n) = 0,$$

убеждаемся, что векторы $\varphi_{\pm}(\dots)$ описывают упорядоченные состояния, а $\varphi_0(\dots)$ — разупорядоченные. Составляя линейные оболочки над базисами (17), получаем пространства

$$\mathcal{H}_{\pm} = \mathcal{L}\{\varphi_{\pm}(i_1, \dots, i_n; \delta^{\pm})\}, \quad \mathcal{H}_0 = \mathcal{L}\{\varphi_0(i_1, \dots, i_n)\}. \quad (19)$$

Предел пространства (11) можно теперь задать как $\mathcal{H} = \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{H}_N = \mathcal{H}_+ \oplus \mathcal{H}_- \oplus \mathcal{H}_0$. Наличие двух пространств \mathcal{H}_{\pm} и \mathcal{H}_0 , каждое из которых соответствует упорядоченному состоянию и упорядоченной термодинамической фазе, свидетельствует о возможности макроскопического вырождения в системе. Для снятия вырождения выбирается одно из этих пространств, например, \mathcal{H}_{\pm} . Неупорядоченной фазе отвечает пространство \mathcal{H}_0 . Квазиравновесная гетерофазная система характеризуется пространством

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_1 \otimes \mathcal{F}_2, \quad \mathcal{F}_1 \equiv \mathcal{H}_{\pm}, \quad \mathcal{F}_2 \equiv \mathcal{H}_0. \quad (20)$$

Здесь приведена общая схема явного построения пространства гетерофазных состояний \mathcal{F} для широкого класса решеточных систем. В следующем пункте иллюстрируется применение этой схемы к конкретной модели изинговского типа.

4. Модифицированная модель Изинга

Рассмотрим двумерную модель Изинга с числом узлов, равным среднему числу частиц, $L = N$. Гетерофазное обобщение этой модели, согласно параграфу 2, приводит к перенормированному гамильтониану

$$\tilde{H} = \tilde{H}_1 \oplus \tilde{H}_2, \quad (21)$$

$$\tilde{H}_2 = N \left(\frac{U}{2} w_x^2 - \mu w_x \right) \hat{1}_x - \frac{1}{2} w_x^2 \hat{1}_x \sum_{\langle ij \rangle} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z,$$

в котором суммирование ведется по ближайшим соседям, а единичный оператор $\hat{1}_z$ напоминает, что оператор \tilde{H}_z задан на пространстве \mathcal{F}_z . Полный гамильтониан (21) определен на пространстве (20). Применяя к данной задаче метод трансформатрицы, можно убедиться, что максимальное собственное значение последней соответствует упорядоченной фазе, тогда как минимальное собственное значение - разупорядоченной фазе^{14/}. Таким образом, для термодинамического потенциала (4) имеем

$$y = \mathcal{F}_1 + \mathcal{F}_2,$$

$$\mathcal{F}_z = \beta \left(\frac{U}{2} w_z^2 - \mu w_z \right) - \frac{1}{2} \ln(2 \sinh \beta z) - \Lambda_z, \quad (22)$$

$$\beta z \equiv \beta I w_z^2, \quad \Lambda_z = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \gamma_z(\nu) d\nu,$$

причем функции $\gamma_z(\nu)$ определяются уравнением

$$\cosh \gamma_z(\nu) = \cosh \beta z \cdot \cosh \beta z - \cos \nu,$$

в котором положительные решения обозначены через $\gamma_1(\nu)$, а отрицательные - через $\gamma_2(\nu)$. Последнее уравнение можно преобразовать к виду

$$\gamma_z(\nu) = (-1)^{\alpha+1} \left\{ \ln 2 - \ln(\sinh \beta z) + \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \ln \left[\cosh^2 \beta z - (\cos \nu + \cos \nu') \sinh \beta z \right] d\nu' \right\}.$$

Поэтому для термопотенциала (22) получаем

$$y = \beta \frac{U}{2} (2w^2 + 1 - 2w) - Q_1 + Q_2 - \ln(2 \sinh \beta z) - \beta \mu,$$

где $w \equiv w_1$ и

$$Q_z = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi \ln \left[\cosh^2 \beta z - (\cos \nu + \cos \nu') \sinh \beta z \right] d\nu d\nu'.$$

В соответствии с выражением (10), для вероятности упорядоченной фазы имеем

$$W = \frac{2\kappa - B_z}{4\kappa - B_1 - B_2}, \quad \kappa \equiv \frac{U}{z_0 I}, \quad (23)$$

где z_0 - число ближайших соседей,

$$B_z = \frac{z}{z_0 N} \sum_{\langle ij \rangle} \langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle =$$

$$= \left[\frac{1}{2} + (-1)^{\alpha+1} K(z_z) \frac{\sinh \beta z - 1}{\sinh \beta z + 1} \right] \coth \beta z,$$

$$K(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{d\nu}{(1 - z \sin^2 \nu)^{1/2}}, \quad z_z \equiv \frac{\beta \sinh \beta z \cdot \cosh^2 \beta z}{(1 + \sinh \beta z)^4}.$$

Для спонтанной намагниченности находим

$$M = \frac{w}{N} \sum_i \langle \sigma_i^z \rangle, \equiv w \sigma, \quad \sigma = (1 - 1/\sinh^4 \beta z)^{1/8}. \quad (24)$$

При дальнейшем исследовании нам пригодятся также выражения для удельной энтропии

$$s = Q_1 - Q_2 + \ln(2 \sinh \beta z) - \beta I [w B_1 - 2u(1-w)(2w-1)] \quad (25)$$

и удельной теплоемкости

$$C_v = -2\beta^2 I^2 \frac{2u(X_2 - X_1) + X_1 Y_2 - X_2 Y_1}{4u - Y_1 - Y_2},$$

$$X_z = w_z^3 \left\{ (-1)^\alpha \frac{B_z}{\sinh 2\beta z} + \frac{\cosh^2 \beta z}{\sinh \beta z} \left[(-1)^{\alpha+1} \frac{B_z \tanh \beta z - 1/2}{\sinh^2 \beta z - 1} - \right. \right.$$

$$\left. \left. - 4 \frac{(\sinh \beta z - 1)^4}{(\sinh \beta z + 1)^6} \cdot \frac{dK(z_z)}{dz_z} \right] \right\},$$

$$Y_z = B_z + (-1)^{\alpha+1} \beta X_z / w_z.$$

Гетерофазная система абсолютно устойчива, если положительна вторая производная

$$\frac{\partial^2 y}{\partial w^2} = 2\beta I (4u - Y_1 - Y_2)$$

и отрицательна разность Δy ,

$$\Delta y \equiv y - y(1), \quad y(1) \equiv -\frac{1}{N} \ln \frac{1}{z_0} \left[\exp(-\beta \tilde{H}_1) \right]_{w=1},$$

$$\Delta y = \beta U w(w-1) - Q_1 + Q_2 + Q - \ln(2 \sinh \beta z),$$

$$Q \equiv \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi \ln \left[\cosh^2(\beta I) - (\cos \nu + \cos \nu') \sinh(\beta I) \right] d\nu d\nu'.$$

В низкотемпературной области вероятность упорядоченной фазы ведет себя по-разному, в зависимости от величины константы кристаллического поля μ , так, при $\mu < 1/2$

$$w \approx 1 - \frac{T}{2(1-2\mu)}, \quad T \equiv \frac{1}{2_0 I \beta} \quad (\mu < \frac{1}{2}),$$

и при $\mu > 1/2$

$$w \approx w_0 \left\{ 1 - \frac{2w_0}{\mu} \exp\left(-\frac{w_0^2}{T}\right) - \frac{1-w_0}{\mu} \exp\left[-\frac{(1-w_0)^2}{2T}\right] \right\},$$

$$w_0 \equiv \frac{2\mu}{4\mu-1} \quad (\mu > \frac{1}{2}).$$

Однако в области низких температур при $\mu < \frac{1}{2}$ становится расходящейся энтропия $S \rightarrow -\infty$, а при $\mu > \frac{1}{2}$ отрицательна теплоемкость. Случай бесконечной энтропии надо отбросить как нефизичный. Когда $C_v < 0$, это свидетельствует о неустойчивости системы. Температура потери устойчивости T_d для соответствующих значений параметра μ определяется как температура, при которой $C_v = 0$. При температуре T_d гетерофазная система должна распасться. Численный анализ величин $\partial^2 y / \partial w^2$ и Δy показывает, что термопотенциал гетерофазной системы всегда выше, чем термопотенциал чистой модели Изинга с $w \equiv 1$. Следовательно, в точке T_d гетерофазная система распадается, переходя в чистую упорядоченную фазу.

Для того, чтобы проверить, имеется ли температурная область между температурой распада T_d и критической температурой T_c , такая, что в этой области гетерофазная система может существовать как метастабильная, надо исследовать критическое поведение модели. Критическая температура, определяемая условием $\sigma = 0$, равна

$$T_c = 1/16 \operatorname{arctanh} 1 = 1/16 \ln(1+\sqrt{2}) = 0.071. \quad (27)$$

Это в четыре раза меньше, чем критическая температура в соответствующей чистой модели. Разложение по степеням $\tau \equiv (T-T_c)/T_c \rightarrow -0$ дает асимптотические выражения для вероятности упорядоченной фазы

$$w \approx \frac{1}{2} + \frac{\operatorname{arctanh} 1}{4\pi(\mu+0.087)} (-\tau) \ln(-\tau), \quad (28)$$

параметра порядка

$$\sigma \approx A_\sigma (-\tau)^{1/8} \ln^{1/8}(-\tau), \quad A_\sigma \equiv \left[\frac{4\sqrt{2} \operatorname{arctanh}^2 1}{\pi(\mu+0.087)} \right]^{1/8} \quad (29)$$

и теплоемкости

$$C_v \approx \frac{8 \operatorname{arctanh}^3 1}{\pi^2(\mu+0.087)} \ln^2(-\tau). \quad (30)$$

Асимптотики (29) и (30) отличаются от соответствующих выражений для чистой модели Изинга, для которой $\sigma \sim (-\tau)^{1/8}$, $C_v \sim \ln(-\tau)$. Формула (30) убеждает, что теплоемкость в критической области может быть положительной. Значит, может существовать интервал температур $T_d < T < T_c$, внутри которого гетерофазная система метастабильна.

Для большей убедительности высказанных утверждений система уравнений (23)-(26) была решена численно. Для температуры распада получены следующие значения: $T_d = 0,278 T_c$ при $\mu = 0,5$; $T_d = 0,472 T_c$ при $\mu = 1,5$; $T_d = 0,556 T_c$ при $\mu = 3$. К сожалению, энтропия (25) при этом оказалась отрицательной. Последнее означает, что на модель наложены какие-то излишне жесткие ограничения - вспомним аналогичную ситуацию, когда энтропия также отрицательна, имеющую место для сферической модели и реплика-симметричной модели спинового стекла^{/15/}.

5. Метод упорядочивающих источников

Пространства состояний, явно построенные в параграфе 3, годятся для модели Изинга произвольной размерности. Однако рассчитать что-либо для трехмерной модели Изинга, как известно, не просто. Сведения о структуре пространств состояний не дают эффективного вычислительного рецепта. К счастью, детальное знание этой структуры отнюдь не обязательно. Разделение термодинамических фаз удобнее осуществлять не по микроскопическим, а по макроскопическим характеристикам. По-видимому, проще всего это делать по величине параметра порядка. В некоторых приближениях параметр порядка появляется непосредственно при вычислениях. Если же этого не происходит, то можно с самого начала добавить к гамильтониану инфинитезимальные слагаемые, явно содержащие параметры порядка со свойствами исследуемых фаз. Такую процедуру можно назвать методом упорядочивающих источников^{/15/}. В данном параграфе этот метод конкретизируется для гетерофазного обобщения модели Гейзенберга с произвольным спином.

Пусть снова число узлов решетки совпадает с числом частиц, $N=L$. В каждом узле определен оператор \vec{S}_i ($i=1,2,\dots,N$) спина S . Для удобства в дальнейшем будут использоваться обозначения: $\langle \vec{S}_i \rangle_\alpha \equiv \langle \vec{S}_{i\alpha} \rangle$, $\vec{S}_{i\alpha} \equiv \vec{S}_i \cdot \hat{1}_\alpha$. Гамильтониан модели имеет вид

$$\tilde{H} = \tilde{H}_1 \oplus \tilde{H}_2, \quad \tilde{H}_\alpha = N \frac{U}{2} w_\alpha^2 \hat{1}_\alpha - w_\alpha^2 \sum_{ij} \mathcal{F}_{ij} \vec{S}_{i\alpha} \vec{S}_{j\alpha}. \quad (31)$$

Оператор \tilde{H} задан на пространстве $\mathcal{F} = \mathcal{F}_1 \otimes \mathcal{F}_2$, в котором \mathcal{F}_1 - пространство состояний с нарушенной $SU(3)$ -симметрией, а \mathcal{F}_2 - это $SU(3)$ -симметричное пространство^{/13/}. Параметром порядка служит величина

$$\vec{\sigma}_\alpha = \frac{1}{S} \langle \vec{S}_\alpha \rangle, \quad \vec{S}_\alpha = \frac{1}{N} \sum_i \vec{S}_{i\alpha}. \quad (32)$$

В упорядоченной, ферромагнитной фазе $\vec{\sigma}_i$ отлично от нуля, а в разупорядоченной, парамагнитной, параметр порядка равен нулю:

$$\vec{\sigma}_i \neq 0, \quad \vec{\sigma}_a = 0. \quad (33)$$

Условие (33) и является критерием, позволяющим отличить фазы друг от друга. При наличии трансляционной симметрии по решетке (33) можно переписать: $\langle \vec{S}_{i1} \rangle \neq 0$, $\langle \vec{S}_{i2} \rangle = 0$. Для вероятности ферромагнитной фазы, согласно (10), имеем

$$w_1 = \frac{U - 2\bar{J}_2}{2(U - \bar{J}_1 - \bar{J}_2)}, \quad \bar{J}_\alpha \equiv \frac{1}{N} \sum_{ij} \bar{J}_{ij} \langle \vec{S}_{i\alpha} \vec{S}_{j\alpha} \rangle. \quad (34)$$

Из положительности и ограниченности вероятности ($0 < w_\alpha < 1$) следует, что должно быть либо $U < \inf\{2\bar{J}_1, 2\bar{J}_2\}$, либо $U > \sup\{2\bar{J}_1, 2\bar{J}_2\}$. Условие гетерофазной устойчивости, то есть неравенство $\partial^2 y / \partial w_\alpha^2 > 0$ при $w_1 + w_2 = 1$ дает

$$\frac{1}{2\beta} (U - \bar{J}_1 - \bar{J}_2) > w_1^2 (D_1 - \bar{J}_1^2) - w_2^2 (D_2 - \bar{J}_2^2), \quad (35)$$

$$D_\alpha \equiv \frac{1}{N^2} \sum_{ijkl} \bar{J}_{ij} \bar{J}_{kl} \langle (\vec{S}_{i\alpha} \vec{S}_{j\alpha}) (\vec{S}_{k\alpha} \vec{S}_{l\alpha}) \rangle.$$

Составим гамильтониан

$$\tilde{H}(\nu) = \tilde{H}_1(\nu) \oplus \tilde{H}_2(\nu), \quad \tilde{H}_\alpha(\nu) = \tilde{H}_\alpha + \nu N_\alpha [\vec{\sigma}_\alpha(\nu)] \quad (36)$$

с источником

$$H_\alpha[\vec{\sigma}_\alpha(\nu)] = -N\bar{J}S w_\alpha^2 [2\vec{\sigma}_\alpha(\nu) \vec{S}_\alpha - \vec{\sigma}_\alpha^2(\nu)],$$

соответствующим теории среднего поля и содержащим параметр порядка

$$\vec{\sigma}_\alpha(\nu) = \frac{1}{S} \bar{J}_\alpha \rho_\alpha[\tilde{H}_\alpha(\nu)] \vec{S}_\alpha; \quad \rho_\alpha[\tilde{H}_\alpha(\nu)] = \frac{\exp[-\beta \tilde{H}_\alpha(\nu)]}{\bar{J}_\alpha \exp[-\beta \tilde{H}_\alpha(\nu)]}. \quad (37)$$

Ферромагнитная и парамагнитная фазы различаются по критерию, эквивалентному (33),

$$\vec{\sigma}_i(\nu) \neq 0, \quad \vec{\sigma}_a(\nu) = 0. \quad (38)$$

Теперь, независимо от используемого приближения, задача с гамильтонианом (36) всегда явно содержит параметр порядка (37), позволяющий различать фазы посредством критерия (38). В конце вычислений упорядочивающий источник убирается. Другими словами, математические ожидания операторов \tilde{A} определяются как своеобразные квазисредние /5/

$$\langle \tilde{A} \rangle = \lim_{\nu \rightarrow 0} \frac{\bar{J}_\alpha}{\bar{J}} \rho(\nu) \tilde{A}, \quad \rho(\nu) = \frac{\exp[-\beta \tilde{H}(\nu)]}{\bar{J}_\alpha \exp[-\beta \tilde{H}(\nu)]}. \quad (39)$$

В частности, для параметра порядка (32)

$$\vec{\sigma}_\alpha = \lim_{\nu \rightarrow 0} \vec{\sigma}_\alpha(\nu). \quad (40)$$

6. Модифицированная модель Гейзенберга

Сформулированная в предыдущем пункте методика наиболее наглядно иллюстрируется на точно решаемой модели с дальнедействием. Рассмотрим систему с гамильтонианом (31), в котором \bar{J}_{ij} - дальнедействующий потенциал, удовлетворяющий условиям $\bar{J}_{ij} \rightarrow 0$, $\frac{1}{N} \sum_{ij} \bar{J}_{ij} \rightarrow \text{const}$ при $N \rightarrow \infty$. Асимптотически точное решение такой задачи эквивалентно теории среднего поля, поэтому параметр порядка появляется в асимптотическом гамильтониане естественным образом.

Выражение (32) для параметров порядка дает /16/ с учетом (33) и (38)

$$|\vec{\sigma}_i| \equiv \sigma = B_S(2w^2\sigma S^2/T), \quad \vec{\sigma}_a \equiv 0, \quad (41)$$

где $B_S(\cdot)$ - функция Бриллюэна, вероятность ферромагнитной фазы находится из (34),

$$w_1 \equiv w = u/2(u - \sigma^2 S^2), \quad w_2 \equiv 1 - w, \quad (42)$$

а также введено обозначение

$$u \equiv \frac{U}{\bar{J}}, \quad T \equiv \frac{1}{\beta \bar{J}}, \quad \bar{J} \equiv \frac{1}{N} \sum_{ij} \bar{J}_{ij}.$$

Необходимое условие гетерофазности системы, $0 < w < 1$ требует, чтобы выполнялось одно из неравенств: или $u < 0$, или $u > 2\sigma^2 S^2$. Условие гетерофазной устойчивости (35) показывает, что при $u < 0$ гетерофазная система метастабильна, а при $u > \sigma^2 S^2$ стабильна. Критическая температура T_c в четыре раза меньше, чем обычная критическая температура T_0 в чистой системе

$$T_c = S(S+1)/6 = T_0/4, \quad T_0 = 2S(S+1)/3. \quad (43)$$

Метастабильная гетерофазная система может иметь ряд термодинамических особенностей, например, максимум намагниченности $M = w \sigma S$, равный

$$M_m = \sqrt{-u} / 4 \quad (u < 0) \quad (44)$$

и расположенный в точке T_m , определяемой уравнением

$$\sqrt{-u} = S' B_S (S' \sqrt{-u} / 8 T_m) \quad (45)$$

причем $T_m < T_c$. Теплоемкость C_H тоже может иметь максимум ниже точки Кюри.

Интересна следующая ситуация. При температурах от 0 до T_n абсолютно устойчива чистая ферромагнитная фаза. Выше T_n системе выгоднее находиться в гетерофазном состоянии. Точка нуклеации T_n , в которой появляются зародыши конкурирующей фазы, задается уравнением

$$\sqrt{u/2} = S' B_S (\sqrt{2u} S' / T_n) \quad (0 < u < 2 S'^2) \quad (46)$$

Процесс нуклеации является своеобразным фазовым переходом из чистого в гетерофазное состояние. Соответствующим ему параметром порядка служит вероятность w . В данном случае - это переход непрерывного типа, так как при температуре нуклеации $w(T_n) = 1$. Для спина 1/2 уравнение (46) дает

$$T_n = \sqrt{2u} / 2 \operatorname{arctanh} \sqrt{2u} \quad (S' = \frac{1}{2}) \quad (47)$$

Температура нуклеации может принимать значения от $T_n = 0$ при $u = 2 S'^2$ до $T_n = T_0$ при $u = 0$. Вследствие того, что фазовая вероятность w имеет излом при $T = T_n$, теплоемкость C_H в точке нуклеации имеет скачок. В реальных веществах, как свидетельствуют эксперименты, точка нуклеации тоже может сильно варьировать в зависимости от вида вещества; T_n может быть расположена как вблизи температуры перехода, так и достаточно далеко от него. Например, в шпинели $M_{0.45} Z_{0.55} Fe_2 O_4$ с помощью эффекта Мёссбауэра было выявлено сосуществование ферромагнитной и парамагнитной фаз, начиная с $T_n = 375$ К, тогда как $T_c = 516$ К, то есть $T_n = 0,727 T_c$.

В гетерофазной системе происходит переход первого рода, если

$$0 < u < u_t, \quad u_t \equiv \left(\frac{20}{3}\right) \frac{S'^2 (S'+1)^2}{S'^2 + (S'+1)^2} \quad (48)$$

Температура перехода первого рода T_1 лежит в интервале (T_c, T_0) . Правее T_1 существует метастабильное состояние перегретого ферромагнетика вплоть до температуры спиноподобного распада T_3 , определяемой условием $\partial w / \partial T \rightarrow \infty$ ($T \rightarrow T_3$). В случае половинного спина

$$T_3 = \frac{w_0^3}{4u} (4u + 3\sigma_0^2) (1 - \sigma_0^2) \quad (S' = \frac{1}{2}), \quad (49)$$

где σ_0 - решение уравнения (41) при $T = T_3$. При $u > u_t$ фазовый переход становится переходом второго рода. Точка смены рода перехода - это, трикритическая точка, она задается равенствами $T_t = T_c$, $u = u_t$. Если $u = u_t$ рассматривать как функцию от величины спина S' , то $u_t = u_t(S')$ определяет трикритическую линию. При больших S' - это парабола $u_t \approx 10 S'^2 / 3$ ($S' \gg 1$).

В трикритической точке скачком изменяются критические индексы. Так, теплоемкость $C_H \sim \begin{cases} (-T)^0, u \neq u_t, \\ (-T)^{-1/2}, u = u_t, \end{cases}$ намагниченность $M \sim \begin{cases} (-T)^{1/2}, u \neq u_t, \\ (-T)^{1/4}, u = u_t. \end{cases}$

Можно ввести новый критический индекс, характеризующий критическое поведение фазовой вероятности $w \approx \frac{1}{2} + A_w (-T)^E$. Этот индекс

$$E = \lim_{T \rightarrow -0} \ln w / \ln (-T) \quad \text{в трикритической точке тоже меняется скачком}$$

$$E = \begin{cases} 1, u \neq u_t, \\ 1/2, u = u_t. \end{cases} \quad \text{Существование трикритической точки обяза-}$$

но наличию в гамильтониане (31) слагаемых разного знака, положительному кристаллическому полю (первое слагаемое) и отрицательному обменному взаимодействию (второе слагаемое). Можно привести ряд других примеров, когда наличие в гамильтониане разных по знаку слагаемых также приводит к появлению трикритической точки. Такая ситуация имеет место в модели Блюма - Капеля [18-20], где наряду с отрицательным обменным взаимодействием содержится положительное слагаемое, соответствующее одноосной анизотропии.

В заключение найдем среднюю поверхностную энергию. Подставляя в формулу (7) выражения

$$E = N \int \left[u (w^2 - w + \frac{1}{2}) - w^2 S'^2 \sigma^2 \right],$$

$$E_1(T) = N \int \left(\frac{u}{2} - \sigma_0^2 S'^2 \right), \quad E_2(T) = N \int \frac{u}{2},$$

где $\sigma_0 = B_S (2 S'^2 \sigma_0 / T)$ - параметр порядка чистой ферромагнитной фазы, получаем

$$E_{\text{surf}} = - N \int \frac{u (u - 2 \sigma_0^2 S'^2)}{4 (u - \sigma_0^2 S'^2)} \quad (50)$$

Как видно, существование поверхностной энергии тоже связано с отли-
чием от нуля константы кристаллического поля u .

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

Д2-82-568	Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
Д9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
Д3,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.
Д11-83-511	Труды совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1982.	2 р. 50 к.
Д7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р. 55 к.
Д2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р. 00 к.
Д13-84-63	Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983.	4 р. 50 к.
Д2-84-366	Труды 7 Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1984.	4 р. 30 к.
Д1,2-84-599	Труды VII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1984.	5 р. 50 к.
Д17-84-850	Труды III Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1984. /2 тома/	7 р. 75 к.
Д10,11-84-818	Труды V Международного совещания по проблемам математического моделирования, программированию и математическим методам решения физических задач. Дубна, 1983.	3 р. 50 к.
	Труды IX Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1984 /2 тома/	13 р. 50 к.
Д4-85-851	Труды Международной школы по структуре ядра, Алушта, 1985.	3 р. 75 к.
Д11-85-791	Труды Международного совещания по аналитическим вычислениям на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1985.	4 р.
Д13-85-793	Труды XП Международного симпозиума по ядерной электронике. Дубна 1985.	4 р. 80 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

Автор признателен за обсуждение отдельных аспектов этой работы А.М.Ахметели, В.Б.Кислинскому, В.К.Митрюшкину, С.А.Пикину, Н.М.Плакиде, Д.Тер Хаару и А.С.Шумовскому.

Литература

1. В.И.Юкалов, ТМФ, 26 (1976) 403.
2. V.I.Yukalov, Physica, 108 A (1981) 402.
3. V.I.Yukalov, Physica 110A (1982) 247.
4. V.I.Yukalov, Phys.Rev. B32 (1985) 436.
5. В.И.Юкалов, ОИЯИ, П17-86-262, Дубна, 1986.
6. J.W.Gibbs, Collected Works, v.1 (Longmans, New York, 1928).
7. В.И.Юкалов, ОИЯИ, П17-85-370, Дубна, 1985.
8. H.Kawamura, Prog.Theor.Phys. 68 (1982) 764
9. D. Ter Haar and H.Wergeland, Elements of Thermodynamics (Addison - Wesley, Reading, 1967).
10. А.Ф.Барабанов, К.А.Кикоин, Л.А.Максимов, ТМФ, 20 (1974) 364.
11. С.М.Varma, Rev.Mod.Phys. 48 (1976) 219.
12. А.М.Атоян, А.Ф.Барабанов, Л.А.Максимов, ЖЭТФ, 74 (1978) 2220.
13. J.H.Jefferson and K.W.Stevens, J.Phys. C11 (1978) 3919.
14. V.B.Kislinsky and V.I.Yukalov, JINR E17-85-237, Dubna, 1985.
15. D.Chowdhury and A.Mookerjee, Phys.Rep. 114 (1984) 1.
16. А.М.Ахметели, А.С.Шумовский и В.И.Юкалов, Comm.Oxford Univ. DTP 45-81, Oxford, 1981.
17. J.Srivastava, K.Muraleedharan and R.Vijayaraghavan, Phys.Lett. 104A (1984) 482.
18. M.Blume, Phys.Rev. 141 (1966) 517.
19. H.W.Capel, Physica, 32 (1966) 966.
20. S.L.Lock and B.S.Lee, Phys.Stat.Sol. B124 (1984) 593.

Рукопись поступила в издательский отдел
4 ноября 1986 года.

Юкалов В.И.

P17-86-722

Решеточные смеси флуктуирующих фаз

Формулируется метод построения ренормированного гамильтониана для гетерофазной смеси, заданной на решетке. Обсуждаются два способа выделения термодинамических фаз: с помощью прямого построения пространств состояний, обладающих нужными свойствами, и посредством введения в гамильтониан слагаемых, явно содержащих параметры порядка, которые характеризуют нужные фазы. Методы иллюстрируются на гетерофазных моделях типа моделей Изинга и Гейзенберга.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Перевод Т.Ю.Думбрайс

Yukalov V.I.

P17-86-722

Lattice Mixtures of Fluctuating Phases

A method of constructing a renormalized Hamiltonian for a heterophase mixture on a lattice is formulated. Two ways of separating thermodynamic phases are discussed: a direct construction of spaces of states having desirable properties, and by introducing into the Hamiltonian the terms explicitly containing order parameters characterizing the needful phases. The methods are illustrated by heterophase models of the Ising and Heisenberg types.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1986