ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р17-87-342

В.И.Юкалов

ТРИКРИТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ В СИЛЬНОФЛУКТУИРУЮЩИХ СИСТЕМАХ

Направлено в Оргкомитет Всесоюзной
школы-совещания "Математические проблемы
статистической механики и квантовой
теории поля", Куйбышев, май 1987 г.

1987

Точка, лежащая на линии фазовых переходов и разделяющая переходы первого и второго рода, называется трикритической. Историю вопроса и детальное обсуждение существующих работ по теории трикритических точек можно найти в обзоре Лоури и Сарбача [I]. Имеется множество различных физических моделей с трикритическим поведением, которое резко отличается от обычного критического. В первую очередь это относится к скачкообразному изменению критических индексов. Например, удельная теплоёмкость C_v, параметр порядка σ и восприимчивость χ вблизи точки перехода T_c имеют следующий асимптотический вид:

$$C_v \sim |\tau|^{-\alpha}, \quad \sigma \sim |\tau|^{\beta}, \quad \chi \sim |\tau|^{\gamma}$$

в зависимости от приведенной температуры

$$\tau = (T - T_c)/T_c \to 0 .$$

Критические и трикритические индексы разумно сравнивать, используя одно и то же приближение. Так, в приближении среднего поля обычные критические индексы равны

$$\alpha = 0, \quad \beta = \frac{1}{2}, \quad \gamma = 1,$$

тогда как трикритические –

$$\alpha_t = \frac{1}{2}, \quad \beta_t = \frac{1}{4}, \quad \gamma_t = 1 .$$

В подавляющем большинстве случаев появление трикритических точек обязано наличию конкурирующих взаимодействий и сильных флуктуаций, срывающих переходы второго рода. Флуктуации могут быть как гомофазными, так и гетерофазными.

Одной из наиболее простых моделей, в которой имеется трикритическая точка, является модель Бейкера, подробно исследованная ранее (Кислинский и Юкалов [2]). В гамильтониан этой модели входят положительное дальнодействие и отрицательное короткодействие, которое обусловливает существование гомофазных флуктуаций.

Гетерофазные флуктуации, то есть флуктуирующие зародыши другой фазы, также могут вызвать срыв перехода второго рода на первый, следовательно, привести к появлению трикритической точки. В сложных системах возможно даже возникновение трикритических линий и трикритических поверхностей. Полезно напомнить, что гетерофазные флуктуации служат примером квазиравновесного беспорядка, а в среднем гетерофазные системы эргодичны. Это их принципиально отличает от систем с замороженным беспорядком [3-5], таких, как спиновые стекла, которые неэргодичны [6-8] и к тому же характеризуются бесконечным числом параметров порядка [9,I0].

Для учёта гетерофазных флуктуаций была развита статистическая теория (Юкалов [II-I4]), применимая к любым конкретным физическим системам. Так, оказалось, что присутствие гетерофазных флуктуаций существенно меняет свойства ферромагнетика, в частности, приводит к изменению рода перехода со второго на первый (Юкалов [I5], Шумовский и Юкалов [I6]). При этом, естественно, появляется трикритическая точка со всеми характерными для неё особенностями. Гетерофазные флуктуации в сегнетоэлектриках могут провоцировать трикритическое поведение, возникающее на трикритической линии (Башкиров и Юкалов [I7]). В случае гетерофазных антиферромагнетиков [I8] уже возможно появление трикритических поверхностей и гиперповерхностей.

Основные особенности систем с гетерофазными флуктуациями, приводящими к трикритическим явлениям, иллюстрируются ниже на примере гетерофазной модификации одномерной модели Бейкера [I9]. Эта модель по своей операторной структуре совпадает с моделью Изинга, но кроме стандартного близкодействия содержит ещё и дальнодействие. Одномерность модели позволяет решить её точно, а наличие дальнодействия обеспечивает существование фазового перехода ферромагнетик – парамагнетик. Таким образом, рассматриваемая модель отличается от обычной модели Изинга двумя принципиальными особенностями:

I) присутствием двух видов взаимодействия, ферромагнитного дальнодействия и близкодействия, знак которого может меняться;

2) учетом гетерофазных состояний, включающих как абсолютно устойчивые, так и метастабильные состояния. Эти особенности приводят к весьма нетривиальной термодинамике модели.

Пусть на цепочке, узлы которой нумеруются индексом i = I,2, ... N, заданы переменные $s_i = \pm I$, взаимодействие между которыми

$$J_{ij} = \nu J_s \delta_{i+1,j} + (1-\nu)\frac{J_\ell}{N} \qquad (\nu \le 1) \tag{I}$$

содержит наряду со взаимодействием ближайших соседей (первое слагаемое) ещё и дальнодействующую часть (второе слагаемое). Для учета гетерофазных состояний построим, следуя общей теории [I-4], гамильтониан

$$H(\nu) = H_1(\nu) \oplus H_2(\nu) , \tag{2}$$

в котором

$$H_\alpha(\nu) = w_\alpha^2 \left(\frac{N}{2} U - \frac{1}{4} \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j \right) , \tag{3}$$

причем α = I соответствует ферромагнитной, а α = 2 парамагнитной фазам, то есть наложены дополнительные условия усреднения

$$< s_i >_{H_1(\nu)} \equiv \sigma \neq 0 , \quad < s_i >_{H_2(\nu)} \equiv 0 , \tag{4}$$

а фазовые вероятности w_α определяются соотношениями

$$\frac{\partial f}{\partial w_\alpha} = 0 , \quad \frac{\partial^2 f}{\partial w_\alpha^2} > 0 , \quad w_1 + w_2 = 1 ,$$

$$f = - \lim_{N \to \infty} \frac{\Theta}{N} \ln \operatorname{tr} \exp \left[- H(\nu) / \Theta \right] . \tag{5}$$

Константа U в выражении (3) играет роль константы кристаллического поля. При изменении ν от 0 до I происходит кроссовер от **дальнодействия** к **близкодействию**.

При вычислении удельной свободной энергии f для близкодействующей части гамильтониана можно использовать метод **трансфер-матрицы**, а дальнодействующая часть, как известно[20], асимптотически точно соответствует теории среднего поля. В результате имеем

$$f = (w^2 - w + \tfrac{1}{2}) U - w^2 \Theta (K - L \sigma^2) -$$

$$- \Theta \ln \left[\cosh \varphi + 2 \cosh \varphi_2 + (\sinh^2 \varphi + e^{-4\varphi_1})^{1/2} \right] , \tag{6}$$

где

$$w \equiv w_1 , \quad K \equiv \frac{J_s \nu}{4 \Theta} , \quad L \equiv \frac{J_\ell (1-\nu)}{4 \Theta} ,$$

$$\varphi \equiv 2 \sigma w^2 L , \quad \varphi_1 \equiv w^2 K , \quad \varphi_2 \equiv (1-w)^2 K .$$

Вводя также обозначения

$$u \equiv \frac{U}{J_\ell} , \quad g \equiv \frac{J_s}{J_\ell} , \quad T \equiv \frac{\Theta}{J_\ell} ,$$

для вероятности ферромагнитной фазы из первого уравнения (5) находим

$$\frac{4 g w \nu e^{-4\varphi_1}}{(\sinh^2 \varphi + e^{-4\varphi_1})^{1/2} \cosh \varphi + \sinh^2 \varphi + e^{-4\varphi_1}} +$$

$$+ u (2w - 1) - 2 g w \nu - 2 w (1-\nu) \sigma^2 +$$

$$+ 2 g \nu (1-w) \tanh \varphi_2 = 0 . \tag{7}$$

Для параметра порядка из (4) получаем

$$\sigma = \frac{\sinh \varphi}{(\sinh^2 \varphi + e^{-4\varphi_1})^{1/2}} . \tag{8}$$

Гетерофазное состояние абсолютно устойчиво, если выполняются неравенства

$$0 < w < 1 , \quad \frac{\partial^2 f}{\partial w^2} > 0 , \quad \Delta f = f(1) - f(w) > 0 . \tag{9}$$

Если же последнее из этих неравенств несправедливо, то гетерофазное состояние метастабильно.

Исследуем устойчивость системы при T = 0. Тогда вероятность ферромагнитной фазы имеет вид

$$w_0 \equiv w(0) = \frac{2u - g|\nu|}{4u - 1 + \nu - g(\nu + |\nu|)} . \tag{I0}$$

Кроме того,

$$\frac{\partial^2 f}{\partial w^2} = 2 (4u - \nu g - 1 + \nu - |\nu| g) ,$$

$$\frac{4 \Delta f}{J_\ell} = \begin{cases} \dfrac{(2u - \nu g - 1 + \nu)^2 (4u + 2\nu g - 1 + \nu)}{(4u - 1 + \nu)^2} , & \nu < 0 , \\ \dfrac{(2u - \nu g - 1 + \nu)^2}{4u - 2\nu g - 1 + \nu} , & 0 \le \nu \le 1 . \end{cases}$$

Из неравенств (9) следует, что гетерофазное состояние абсолютно устойчиво, если или

$$u > \max\left\{ \frac{1}{4}(1-\nu-2\nu g),\ \frac{1}{2}(1-\nu+\nu g)\right\}, \quad \nu<0, \tag{11}$$

или

$$u > \frac{1}{2}(1-\nu+\nu g), \quad \nu>0. \tag{12}$$

Гетерофазное состояние метастабильно, если

$$\frac{1}{2}(1-\nu+\nu g) < u < \frac{1}{4}(1-\nu-2\nu g), \quad \nu<0 \tag{13}$$

или

$$u < \frac{1}{2}\nu g, \quad \nu>0. \tag{14}$$

В том случае, когда

$$\frac{1}{2}|\nu| g < u < \frac{1}{2}(1-\nu+\nu g), \tag{15}$$

при нулевой температуре система представляет собой чистый ферромагнетик, но начиная с конечной температуры T_n, называемой температурой нуклеации, становится выгодным гетерофазное состояние, являющееся смесью ферромагнитной и парамагнитной фаз.

Найдем низкотемпературные асимптотики для ферромагнитной вероятности

$$w \simeq w_0\left\{1 - \frac{4(1-\nu+\nu g)}{4u-\nu g-1+\nu-|\nu|g}\exp\left[-\frac{w_0^2}{T}(1-\nu+4\nu g)\right] + \right.$$

$$\left. + \frac{2|\nu|g(2u-\nu g-1+\nu)}{(2u-|\nu|g)(4u-\nu g-1+\nu-|\nu|g)}\exp\left[-\frac{(1-w_0)^2}{T}2|\nu|g\right]\right\},$$

параметра порядка

$$\sigma \simeq 1-2\exp\left[-\frac{w_0^2}{T}(1-\nu+4\nu g)\right],$$

энтропии

$$S \simeq \frac{w_0^2}{T}(1-\nu+\nu g)\exp\left[-\frac{w_0^2}{T}(1-\nu+4\nu g)\right] +$$

$$+ \frac{(1-w_0)^2}{2T}|\nu|g\exp\left[-\frac{(1-w_0)^2}{T}2|\nu|g\right]$$

и теплоёмкости

$$C_V \simeq \frac{w_0^4}{T^2}(1-\nu+\nu g)^2\exp\left[-\frac{w_0^2}{T}(1-\nu+4\nu g)\right] +$$

$$+ \frac{(1-w_0)^4}{4T^2}\nu^2 g^2\exp\left[-\frac{(1-w_0)^2}{T}2|\nu|g\right].$$

Положительность теплоёмкости указывает на устойчивость гетерофазного состояния относительно тепловых флуктуаций.

Проанализируем теперь критическое поведение модели. Для критической температуры из (8) получаем

$$T_c = \frac{1-\nu}{8}\exp\left(\frac{\nu g}{2T_c}\right). \tag{16}$$

Из вида (16) следует, что существует такое отрицательное значение кроссоверного параметра $\nu=\nu_1$,

$$\nu_1 = -\frac{1}{eg-1} \quad (eg>1), \tag{17}$$

что при $\nu<\nu_1$ ферромагнитное состояние невозможно ни при каких температурах. Наоборот, при $g \le e^{-1} = 0{,}3679$ положительное решение для T_c имеется при любых ν. Существование предельного значения (17) вполне объяснимо. Действительно, отрицательные величины ν отвечают антиферромагнитному характеру близкодействия. Наличие взаимодействия противоположного знака по сравнению с ферромагнитным дальнодействием служит разупорядочивающим фактором. Появление ферромагнитного порядка возможно, если только разупорядочивающее близкодействие не слишком велико.

Кроссоверное поведение T_c для различных g различно.

Интересно, что для $g>1$ этот кроссовер немонотонен: между значением $T_c = 0{,}5$, соответствующим теории среднего поля, и $T_c = 0$, соответствующим близкодействию, имеется максимум в точке

$$T_{max} = \frac{g}{8(1+\ln g)}, \quad \nu_{max} = \frac{\ln g}{1+\ln g}.$$

Разлагая термодинамические функции по степеням $\tau \equiv (T-T_c)/T_c$ слева от критической температуры, находим асимптотику ферромагнитной вероятности

$$w \simeq \frac{1}{2} + \begin{cases} A_w(-\tau), & u \neq u_t, \\ (-\tau)^{1/2}, & u = u_t, \end{cases}$$

где

$$A_w = \frac{2(1-\nu)(1+2K_c^2)}{(u-t)(1-4L_c^2/3)-4(1-\nu)(1+2K_c)^2},$$

$$u_t = t + \frac{4(1-\nu)(1+2K_c)^2}{1-4L_c^2/3}, \quad t = \frac{1+16K_cL_c-4L_c^2}{(1+4L_c)^2}.$$

Значение u_t определяет трикритическую точку. Для параметра порядка имеем асимптотику

$$\sigma \simeq \begin{cases} A_\sigma(-\tau)^{1/2}, & u \neq u_t, \\ (-\tau)^{1/4}, & u = u_t, \end{cases}$$

в которой критическая амплитуда A_σ задается выражением

$$A_\sigma^2 = \frac{2(u-t)(1+2K_c)}{(u-t)(1-4L_c^2/3)-4(1-\nu)(1+2K_c)^2}.$$

Величина A_σ^2 как функция кроссоверного параметра немонотонна. При изменении параметра ν немонотонно меняется также и скачок теплоёмкости

$$\Delta C_v \equiv \lim_{T\to T_c-0} C_v - \lim_{T\to T_c+0} C_v = A_\sigma(1+2K_c)L_c,$$

и сама теплоёмкость в критической точке справа.

$$C_v^c = \lim_{T\to T_c+0} C_v = \frac{16K_c^2L_c}{(1+L_c/2)^2}.$$

Антиферромагнитный характер близкодействия и наличие гетерофазных флуктуаций могут привести к срыву фазового перехода со второго рода на первый. Область фазового перехода первого рода задается неравенствами

$$t < u < t + \frac{4(1-\nu)(1+2K_c)^2}{1-4L_c^2/3}, \quad \nu > \nu_2, \tag{18}$$

либо

$$t < u < t - \frac{4(1-\nu)(1+2K_c)^2}{|1-4L_c^2/3|}, \quad \nu_1 < \nu < \nu_2, \tag{19}$$

где ν_2 определяется уравнением

$$(1-\nu_2)^2 = 12T_c^2. \tag{20}$$

Наиболее интересными свойствами рассмотренной модели, на наш взгляд, является существование немонотонной зависимости критической температуры и критических амплитуд от кроссоверного параметра ν, а также наличие фазовых переходов второго и первого рода, разделенных трикритической линией $u_t(\nu)$. Весьма нетривиальное поведение модели и широкий диапазон её свойств, которыми она может обладать в зависимости от соотношения между параметрами гамильтониана, по-видимому, делают возможным её использование при интерпретации экспериментальных данных для различных квазиодномерных магнетиков.

Литература

1. Lawrie I., Sarbach S.- Phase Trans. Crit. Phen., 1984, 9, p. 1.
2. Кислинский В.Б., Юкалов В.И. ОИЯИ Р17-86-532, Дубна, 1986.
3. Москаленко В.А., Владимир М.И., Скафару В.В.- ФНТ, 1983, 9, с. 1100.
4. Gulacsi Z., Crisan M., Gulacsi M., Anghel A.- J. Mag. Mag. Mat., 1983, 37, p. 58.
5. Young A.P. - Phys. Rev. Lett., 1983, 51, p. 1206.
6. Provost J., Vallee G. - Phys.Rev. Lett., 1983, 50, p. 598.
7. Sompolinsky H., Zippelius A.- Phys. Rev. Lett., 1983, 50, p. 1297.
8. Young A.P. - Phys. Rev. Lett., 1983, 50, p. 917.
9. Parisi G. - Phys. Rev. Lett., 1983, 50, p. 1946.
10. De Dominicis C., Kondor I. - Phys. Rev., 1983, B27, p. 606.
11. Юкалов В.И. - ТМФ, 1976, 26, с. 403.
12. Yukalov V.I. - Physica, 1981, 108A, p. 402.
13. Yukalov V.I. - Phys. Rev., 1985, B32, p. 436.
14. Yukalov V.I. - Physica, 1987, 141A, p. 352.
15. Yukalov V.I. - Phys. Lett., 1981, 85A, p. 68.
16. Shumovsky A.S., Yukalov V.I. - Physica, 1982, 110A, p. 518.
17. Башкиров Е.К., Юкалов В.И. - В кн.: Проблемы статистической механики, с. 76, ОИЯИ Д17-84-850, Дубна, 1984.
18. Бокий М.А., Кудрявцев И.К., Шумовский А.С., Юкалов В.И. - ОИЯИ Р17-87-149, Дубна, 1987.
19. Кислинский В.Б., Юкалов В.И. - ОИЯИ Е17-86-535, Дубна, 1986.
20. Pearce P.A., Thompson C.J. - Comm. Math. Phys., 1975, 41, p. 191.

Рукопись поступила в издательский отдел
14 мая 1987 года.

Юкалов В.И. Р17-87-342

Трикритические явления в сильнофлуктуирующих системах

Проанализировано появление трикритических точек, линий и поверхностей вследствие существования конкурирующих взаимодействий и сильных флуктуаций. Эти флуктуации могут быть как гомофазными, так и гетерофазными. Общие свойства подробно проиллюстрированы на гетерофазном обобщении модели Бейкера. Показано, что кроссовер между критической и трикритической областями может быть немонотонным.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод Т.Ю.Думбрайс

Yukalov V.I. P17-87-342

Tricritical Phenomena in Strongly Fluctuating Systems

The appearance of tricritical points, lines and surfaces because of the existence of competing interactions and strong fluctuations is analysed. These fluctuations can be homogeneous as well as heterogeneous. General properties are illustrated in detail by a heterophase generalization of the Baker model. It is shown that the crossover between critical and tricritical regions can be nonmonotonic.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987