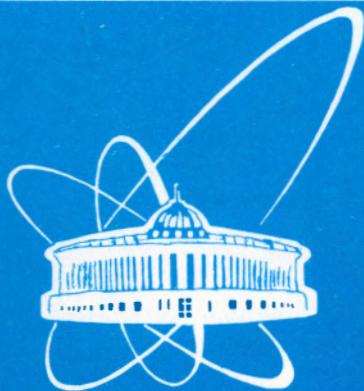


99-184



СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

99-184

P17-99-184

В.Д.Караиванов*

ДВУХКОМПОНЕНТНЫЙ РЕШЕТОЧНЫЙ ГАЗ

*Софийский университет, физический факультет, 1164 София,
Болгария
E-mail: vdkaraiv@phys.uni-sofia.bg

1999

1. Гамильтониан

Будем рассматривать изотропную и однородную решетку. В каждом узле или находится частица типа 1, или находится частица типа 2, или узел пустой. Эта система называется двухкомпонентный решеточный газ. В приближении ближайших соседей взаимодействие частиц описывается тремя константами:

ε_{11} - энергия взаимодействия пары 1,1;

ε_{22} - энергия взаимодействия пары 2,2;

$\varepsilon_{12} = \varepsilon_{21}$ - энергия взаимодействия пары 1,2 \equiv 2,1.

Кроме этих энергетических величин, для двухкомпонентного решеточного газа имеются еще две энергетические константы:

Δ_1 - энергия частицы типа 1 в термостате, т.е. химический потенциал частиц типа 1. Предполагается, что частица типа 1 в решетке имеет нулевую энергию.

Δ_2 - энергия частицы типа 2 в термостате, определенная подобным образом.

Вводим спиновые переменные S_i , i - номер узла, $i = 1, 2, \dots, N$:

$S_i = +1$, если в узле i находится частица типа 1;

$S_i = -1$, если в узле i находится частица типа 2;

$S_i = 0$, если в узел i - пустой.

Тогда гамильтониан двухкомпонентного газа при использовании большого статистического ансамбля имеет вид

$$H = -K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 - D \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^2 S_j + S_i S_j^2) - J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \\ (1) \quad - \mu \sum_i S_i^2 - h \sum_i S_i,$$

где

$$K = -\frac{1}{4} (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + 2\varepsilon_{12}),$$

$$D = -\frac{1}{4} (\varepsilon_{11} - \varepsilon_{22}),$$

$$J = -\frac{1}{4} (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} - 2\varepsilon_{12}),$$

$$\mu = \frac{1}{2} (\Delta_1 + \Delta_2), \quad h = \frac{1}{2} (\Delta_1 - \Delta_2).$$

Суммирование по i, j включает все пары ближайших соседей, а по i - все узлы решетки.

Гамильтониан H описывает модель, которую будем называть Б(инарную)-модель. Б-модель, кроме описанной реализации, имеет еще две. Первая из них - система магнитных моментов. Тогда μ есть химический потенциал частиц с

магнитными моментами $\pm I$, а h описывает внешнее магнитное поле. Вторая реализация - трехкомпонентный сплав. Гамильтониан (1) впервые представлен в работе [1], где методом функций Грина вычисляются корреляционные функции величин S_i и приведены выражения, связывающие энергетические константы трехкомпонентного сплава с коэффициентами K, D, J, μ, h . В связи с теорией сплавов, обобщение гамильтониана (1), включающее более высокие степени S_i , дано в [2]. В [3] к выражению (1) добавлен член, который дает возможность исследовать сложные системы типа ампифилина, льда и т.д. Когда $D = 0$, Б-модель совпадает с т.наз. БЭГ(Blume-Emery-Griffits)-модель [4]. С этой работы начинается интенсивное рассмотрение системы типа спин -1. Когда $K = 0$, БЭГ-модель сводится к БК(Blume-Capel)-модель [5, 6]. Для БЭГ-модели взаимодействие пары 1,1 равно взаимодействию пары 2,2; $\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22}$.

Точное решение для БЭГ-модели в отсутствие внешнего поля получено для цепочки [7]. Также при $h = 0$ известны точные решения для шестиугольной [8] и квадратной [9] решетки, когда выполняется т.наз. условие Хоригучи

$$\frac{K}{\theta} = -\ln \cosh \frac{J}{\theta},$$

где θ - температура в энергетических единицах, $\theta = k_B T$, k_B - константа Больцмана, T - температура в кельвинах.

Для решетки Бете при условии Хоригучи получены параметрические уравнения для определения критических величин [10], [11], а в [12] это условие снято. Согласно известной гипотезе точные решения для решетки Бете являются и приближенными решениями Бете-Пайерлса для произвольной решетки соответствующей размерности.

Приближение среднего поля для БЭГ-модели развито в [4], а обзор результатов представлен в [14]. В [15] показано, что это приближение подтверждает идею о БЭГ-модели как разбавленной модели Изинга [7]. Для более общей Б-модели параметры фазовых переходов, критические точки и т.д. исследовались только в приближении среднего поля, и для разных реализаций были найдены разнообразные фазовые диаграммы. Подробное изложение содержится в работах [16 -20], но в более поздних работах отсутствует сравнение с результатами более ранних работ. Кроме этого, как следует из дальнейшего изложения, приближение среднего поля существенно видоизменяет картину состояний системы.

Дальше вместо индекса 1 для частиц будем писать индекс плюс "+", а вместо индекса 2 - минус "-".

При $h = 0$ член с множителем D снимает вырождение относительно трансформации $S_i \rightarrow -S_i$, $i = 1, 2, \dots, N$. На "магнитном языке" этот член описывает возможную разницу в расположении магнитных моментов в направлении вверх (+) и направлении вниз (-).

2. Основное состояние

Механическое состояние системы вполне определяется N -мерной переменной

$$S = (S_1, S_2, \dots, S_N),$$

где N - полное число узлов в решетке. В дальнейшем предполагается, что

$$N \gg 1,$$

а также наличие циклических граничных условий.

Для описания энергии системы удобно ввести числа

$$N_+, N_-, N_0$$

и числа

$$N_{++}, N_{--}, N_{00}, N_{+-}, N_{+0}, N_{-0}.$$

Система обозначений ясна. N_+ есть число узлов, в которых $S_i = +I$, N_- - число узлов, где $S_i = -I$, N_0 - число пустых узлов, т.е. узлов, где $S_i = 0$. N_{++} есть число пар ближайших соседей, где $S_i = S_j = +I$, N_{+-} есть число пар ближайших соседей, где $S_i = +I, S_j = -I$, или $S_i = -I, S_j = +I$. При этом $N_{+-} = N_{-+}$. Подобным образом определяются числа $N_{--}, N_{00}, N_{+0}, N_{-0}$.

Девять чисел N_+, \dots, N_0 - не независимые. Они связаны соотношениями:

$$\begin{aligned} N_+ + N_- + N_0 &= N, \\ zN_+ &= 2N_{++} + N_{+-} + N_{+0}, \\ zN_- &= 2N_{--} + N_{+-} + N_{-0}, \\ zN_0 &= 2N_{00} + N_{+0} + N_{-0}. \end{aligned}$$

где z - число ближайших соседей каждого узла.

Сумма последних трех равенств дает

$$N_{++} + N_{--} + N_{00} + N_{+-} + N_{+0} + N_{-0} = \frac{zN}{2}.$$

Отметим, что $zN/2$ - число пар ближайших соседей в решетке.

Из девяти чисел N_+, \dots, N_0 независимыми являются только пять.

Числа N_+, \dots, N_0 удовлетворяют неравенствам:

$$0 \leq N_+, N_-, N_0 \leq N,$$

$$0 \leq N_{++}, N_{--}, N_{00}, N_{+-}, N_{+0}, N_{-0} \leq \frac{zN}{2}.$$

При нахождении выражения для энергии учитывается, что

$$\begin{aligned} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 &= N_{++} + N_{--} + N_{+-}, \\ \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^2 S_j + S_i S_j^2) &= 2(N_{++} - N_{--}), \\ \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j &= N_{++} + N_{--} - N_{+-}, \end{aligned}$$

$$\sum_i S_i^2 = N_+ + N_-, \quad \sum_i S_i = N_+ - N_-.$$

Для определения возможных основных состояний гамильтониан системы представим в следующем виде, который легко получается из верхних равенств и соотношений между числами N_+, \dots, N_{-0} :

$$(2) \quad H = -\left(K + 2D + J + 2\frac{\mu + h}{z}\right)N_{++} - \left(K - 2D + J + 2\frac{\mu - h}{z}\right)N_{--} - \left(K - J + 2\frac{\mu}{z}\right)N_{+-} - \frac{\mu + h}{z}N_{+0} - \frac{\mu - h}{z}N_{-0}.$$

Состояние системы, когда все узлы - пустые, т.е.

$$S_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N,$$

$$N_0 = N, \quad N_+ = N_- = 0,$$

$$N_{00} = \frac{zN}{2}, \quad N_{++} = N_{--} = N_{+-} = N_{+0} = N_{-0} = 0,$$

не будем рассматривать, как основное состояние. В этом состоянии энергия системы равна нулю. Поэтому все основные состояния будут с отрицательными энергиями.

В 6-мерном пространстве переменных

$$H, \quad N_{++}, \quad N_{--}, \quad N_{+-}, \quad N_{+0}, \quad N_{-0}$$

выражение для гамильтониана описывает равнину. Эта равнина пересекается равнинами

$$N_{++} = 0, \quad N_{++} = \frac{zN}{2}.$$

$$N_{--} = 0, \quad N_{--} = \frac{zN}{2}.$$

$$N_{+-} = 0, \quad N_{+-} = \frac{zN}{2}.$$

$$N_{+0} = 0, \quad N_{+0} = \frac{zN}{2},$$

$$N_{-0} = 0, \quad N_{-0} = \frac{zN}{2},$$

возникающими из ограничений для указанных переменных. Соответственно минимум энергии, который определяет основное состояние, находится в вершинах пересечения равнин для H с описанными 10 равнинами. При этом надо учитывать и ограничение на сумму переменных N_{++}, N_- и т.д.. Это ограничение сводит все возможные точки, где нужно искать минимумы энергии, как точки, для которых одно из чисел

$$N_{++}, \quad N_{--}, \quad N_{+-}, \quad N_{+0}, \quad N_{-0}$$

равно $zN/2$, а все другие равны нулю. Так получаем следующие основные состояния.

1. Состояние (++). На "магнитном языке" это состояние - ферромагнитное состояние, где во всех узлах $S_i = +1$, соответственно

$$N_+ = N, \quad N_{++} = \frac{zN}{2}.$$

а все другие числа равны нулю. В реализации двухкомпонентного газа это означает, что все узлы заняты частицами типа 1. Чтобы состояние (++) было основным, нужно выполнить следующую систему неравенств:

$$\begin{aligned} & -\left(K + 2D + J + 2\frac{\mu + h}{z}\right) < 0, \\ & -\left(K + 2D + J + 2\frac{\mu + h}{z}\right) < -\left(K - 2D + J + 2\frac{\mu - h}{z}\right), \\ & -\left(K + 2D + J + 2\frac{\mu + h}{z}\right) < -\left(K - J + \frac{2\mu}{z}\right), \\ & -\left(K + 2D + J + \frac{\mu + h}{z}\right) < -\frac{\mu + h}{z}, \\ & -\left(K + 2D + J + \frac{\mu + h}{z}\right) < -\frac{\mu - h}{z}. \end{aligned}$$

Первое из этих неравенств учитывает то, что энергия основного состояния должна быть отрицательной, а следующие четыре - то, что энергия была минимальной.

После элементарных преобразований верхняя система неравенств сводится к следующей:

$$(3) \quad \begin{aligned} & z(K + 2D + J) + 2(\mu + h) > 0, \\ & zD + h > 0, \\ & z(D + J) + h > 0, \\ & z(K + 2D + J) + \mu + h > 0, \\ & z(K + 2D + J) + \mu + 3h > 0. \end{aligned}$$

2. Состояние (--). Это состояние - тоже ферромагнитное, где во всех узлах $S_i = -1$, а для двухкомпонентного газа - состояние, в котором все узлы заняты частицами типа 2. Оно осуществляется как основное, когда выполняется следующая система неравенств:

$$(4) \quad \begin{aligned} & z(K - 2D + J) + 2(\mu - h) > 0, \\ & zD + h < 0, \\ & z(J - D) - h > 0, \\ & z(K - 2D + J) + \mu - 3h > 0, \\ & z(K - 2D + J) + \mu - h > 0. \end{aligned}$$

3. Состояние (+-). Это состояние - антиферромагнитное, а для двухкомпонентного газа - состояние, в котором узлы поочередно заняты частицами типа 1 и типа 2, т.е.

$$N_+ = N_- = \frac{N}{2}, \quad N_{+-} = \frac{zN}{2}.$$

Все другие числа равны нулю. Состояние (+-) осуществляется как основное, когда выполняется следующая система неравенств:

$$\begin{aligned} z(K - J) + 2\mu &> 0, \\ (*) \quad z(D + J) + h &< 0, \\ (*) \quad z(J - D) - h &< 0, \\ z(K - J) + \mu - h &> 0, \\ z(K - J) + \mu + h &> 0. \end{aligned}$$

Суммируя неравенства, обозначенные (*), получаем

$$J < 0.$$

Отметим, что это неравенство - необходимое, но недостаточное условие для осуществления антиферромагнитного состояния. В нем содержится меньше информации, чем в неравенствах (*).

В модели Изинга верхнее неравенство для J тоже является необходимым условием для существования антиферромагнитного состояния. Связь Б-модели с моделью Изинга проявляется и дальше.

4. Состояние (0+). Это состояние можно назвать полупустой решеткой типа (+). Для магнитной системы - это ферромагнитное состояние, в котором чередуются пустые узлы и узлы с $S_i = +1$, а для двухкомпонентного газа - пустые узлы и узлы, занятые частицами типа 1. Состояние (0+) осуществляется как основное, когда выполняется следующая система неравенств:

$$\begin{aligned} \mu + h &> 0, \\ z(K + 2D + J) + \mu + h &< 0, \\ z(K - 2D + J) + \mu - 3h &< 0, \\ z(K - J) + \mu - h &< 0, \\ h &> 0. \end{aligned}$$

5. Состояние (0-). Это состояние можно назвать полупустой решеткой типа (-). Для магнитной системы - это ферромагнитное состояние, в котором чередуются пустые узлы и узлы с $S_i = -1$, а для двухкомпонентного газа - пустые узлы и узлы, занятые частицами типа 2. Состояние (0-) осуществляется как основное, когда выполняется следующая система неравенств:

$$\begin{aligned} \mu - h &> 0, \\ z(K + 2D + J) + \mu + 3h &< 0, \\ z(K - 2D + J) + \mu - h &< 0, \\ z(K - J) + \mu + h &< 0, \\ h &< 0. \end{aligned}$$

При определенном z в пятимерном пространстве параметров K, D, J, μ, h приведенные системы неравенств определяют области существования каждого из описанных состояний, как основных. Для исследования этих областей первое и самое простое действие - найти их пересечение с осями K, D, J, μ, h . Рассмотрим случай

$$K \neq 0, \quad D = J = \mu = h = 0.$$

Тогда в системе неравенств для состояния (++) не выполняются второе и третье. С другой стороны, в этом случае гамильтониан системы имеет вид

$$H = -K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2$$

и очевидно при $K > 0$ энергия имеет минимум. Возникший парадокс разъясняется просто. При $K > 0$ то же значение энергии получается и для состояний (-) и (+), а строгие неравенства в системе исключают возможность такого вырождения. Все другие состояния тоже невозможны как основные.

Результаты в других случаях следующие:

$$D \neq 0, \quad K = J = \mu = h = 0.$$

Состояние (++) возможно как основное, когда $D > 0$, состояние (-) возможно как основное, когда $D < 0$, все остальные состояния не осуществляются как основные.

$$J \neq 0, \quad K = D = \mu = h = 0.$$

Состояние (+-) возможно как основное, когда $J > 0$, все остальные состояния не осуществляются как основные.

$$\mu \neq 0, \quad K = D = J = h = 0.$$

Все описанные состояния не осуществляются как основные.

$$h \neq 0, \quad K = D = J = \mu = 0.$$

Состояние (++) возможно как основное, когда $h > 0$, состояние (-) возможно как основное, когда $h < 0$, все остальные состояния не осуществляются как основные.

Следующий шаг в исследовании области существования основных состояний - нахождение их пересечения с 10 двумерными равнинами

$$(K,D), \quad (K,J), \quad (K,\mu), \quad (K,h), \quad (D,J), \quad (D,\mu), \quad (D,h),$$

$$(J,\mu), \quad (J,h), \quad (\mu,h).$$

Полное описание не будем представлять, так как все результаты легко получаются. Рассмотрим как примеры только два случая. Для равнины (K,D) состояние (++) возможно как основное состояние в области

$$D > 0, \quad K > -2D.$$

Состояние (--) возможно как основное состояние в области

$$D < 0, \quad K > 2D.$$

Очевидно, эти области не имеют общих точек. Все другие состояния не осуществляются как основные состояния.

Для БК-модели, когда внешнее поле h равно нулю, получаем, что состояние (+-) является основным состоянием в области

$$J < 0, \quad \mu > \frac{z}{2} D,$$

а все другие состояния в равнине (J, μ) не существуют как основные.

При определенных соотношениях между значениями параметров K, D, J, μ, h множество основных состояний изменяется. Первый вариант - аннулирование одного или нескольких коэффициентов в гамильтониане (2), а второй - равенство коэффициентов. Число возможных случаев - довольно обременительно, но так как все рассматриваются однотипно, отметим только некоторые примеры.

Когда один из коэффициентов в гамильтониане (2) равен нулю, состояние, определяемое исчезнувшей переменной, выпадает из множества основных состояний. Допустим, что

$$K + 2D + J + 2 \frac{\mu + h}{z} = 0.$$

Тогда гамильтониан (2) принимает вид

$$H = 4\left(D + \frac{h}{z}\right)N_{--} + 2\left(D + J + \frac{h}{z}\right)N_{+-} - \frac{\mu + h}{z}N_{+0} - \frac{\mu - h}{z}N_{-0}$$

и возможные основные состояния суть $(-)$, $(+)$, $(+0)$, (-0) . Для каждого из них возникает соответствующая система неравенств. Например, для состояния $(-)$ имеем:

$$\begin{aligned} D + \frac{h}{z} &< 0, \quad 2\left(D + \frac{h}{z}\right) < D + J + \frac{h}{z}, \\ 4\left(D + \frac{h}{z}\right) &< -\frac{\mu + h}{z}, \quad 4\left(D + \frac{h}{z}\right) < -\frac{\mu - h}{z}. \end{aligned}$$

Уже отмечалось, что если в системы неравенств для основных состояний включить и равенства, то появляется вырождение. Допустим, что в гамильтониане (2) коэффициенты перед N_{++} и N_{--} равны. Тогда

$$zD + h = 0,$$

и соответственно

$$\begin{aligned} H = -\left(K + J + 2 \frac{\mu}{z}\right)(N_{++} + N_{--}) - \left(K - J + 2 \frac{\mu}{h}\right)N_{+-} \\ - \frac{\mu + h}{z}N_{+0} - \frac{\mu - h}{z}N_{-0}. \end{aligned}$$

При этом гамильтониан, как возможные основные состояния, появляются уже известные состояния $(+)$, $(+0)$, (-0) и состояние, для которого

$$N_{++} + N_{--} = \frac{zN}{2}.$$

Это состояние - многократно вырожденное. Частные случаи его реализации - состояния $(++)$ и $(-)$.

Отметим, что в представленном механическом подходе не существует зависимости между химическим потенциалом и числом занятых узлов. Статистическое исследование, основанное на взаимодействии между системой и термостатом, устанавливает такую связь, и следовательно, в принципе статистическое основное состояние, которое определяется предельными переходами $T \rightarrow 0$, $N \rightarrow 0$, является одним из возможных механических состояний.

3. Приближение среднего поля

Статистическая сумма для равновесного статистического ансамбля с данным гамильтонианом имеет вид

$$Z_N = \sum_S \exp\left[-\frac{1}{\theta}H(S)\right].$$

Вычисление этой суммы дает точное решение задачи о равновесных термодинамических свойствах системы, которая находится в термостате с температурой θ и при химическом потенциале μ для магнитной системы соответственно Δ_+ и Δ_- для двухкомпонентного решеточного газа. Если статистическая сумма Z_N при заданном числе ближайших соседей z известна как функция величин θ , K , D , J , μ , h , в шестимерном пространстве этих величин можно определить области существования разных фаз, а границы этих областей определяют вид и параметры фазовых переходов. При $\theta = 0$ это шестимерное пространство переходит в уже знакомое пространство параметров K , D , J , μ , h , где возникает очертание областей основных состояний. Приближенное нахождение статистической суммы изменяет эту картину, при этом не всегда ясным образом, однако в ряде случаев это единственная возможность нахождения определенной информации.

Для нахождения статистической суммы воспользуемся приближением среднего поля, суть которого сводится к тому, что ближний порядок, т.е. конструкция пар ближайших соседей определяется дальним порядком. В конкретном случае редакция Брэгга-Вильямса для приближения среднего поля означает принятие следующих соотношений:

$$\frac{N_{++}}{zN/2} \approx \left(\frac{N_+}{N}\right)^2, \quad \frac{N_{--}}{zN/2} \approx \left(\frac{N_-}{N}\right)^2, \quad \frac{N_{00}}{zN/2} \approx \left(\frac{N_0}{N}\right)^2 = \left(\frac{N - N_+ - N_-}{N}\right).$$

Соответственно, из выражения (2) получаем гамильтониан в приближении среднего поля

$$\begin{aligned} H(N_+, N_-) = \frac{z}{2}K(N_+ + N_-)^2 - zD(N_+ + N_-)(N_+ - N_-) - \frac{z}{2}J(N_+ - N_-)^2 \\ - \mu(N_+ + N_-) - h(N_+ - N_-). \end{aligned}$$

Для основного состояния $(++)$ $N_+ = N$, $N_- = 0$ из этого выражения и (2) находим, что значение энергии совпадает. Тот же результат получается и для состояния $(-)$. Однако для состояний $(+)$, $(+0)$ и (-0) точное значение энергии не совпадает с полученным из $H(N_+, N_-)$. Это означает, что приближение среднего поля в этом варианте дает достоверные результаты, только когда система выходит из основных состояний $(++)$ и $(-)$. В дальнейшем этот вывод находит и другое подтверждение.

В приближении среднего поля статистическая сумма представляется в виде

$$Z_N = \sum_{N_+, N_-} P_N(N_+, N_-) \exp\left[-\frac{H(N_+, N_-)}{\theta}\right],$$

где множитель $P_N(N_+, N_-)$ учитывает вырождение состояния с энергией $H(N_+, N_-)$,

$$P_N = \frac{N!}{N_+! N_-! (N - N_+ - N_-)!}.$$

Так как $N \gg 1$, статистическая сумма определяется наибольшим членом суммы. Для вычислений удобно ввести следующим образом параметры L и M :

$$\frac{N_+}{N} = \frac{1}{2}(L+1), \quad \frac{N_-}{N} = \frac{1}{2}(M+1), \quad -1 \leq L, M \leq 1.$$

Тогда уравнения

$$\frac{\partial Z_N}{\partial L} = 0, \quad \frac{\partial Z_N}{\partial M} = 0$$

определяют те значения параметров, которые, поставленными в выражение для Z_N , дают искомый результат.

Результаты вычислений удобно записать используя следующие величины:

$$c_+ = \frac{N_+}{N}, \quad c_- = \frac{N_-}{N}, \quad c = \frac{N_+ + N_-}{N} = c_+ + c_-, \quad 0 \leq c, c_+, c_- \leq 1,$$

$$y = \frac{1}{N} \left(\sum_i S_i \right) = \frac{N_+ - N_-}{N} = c_+ - c_-, \quad -1 \leq y \leq 1.$$

Очевидно, c является безразмерной концентрацией занятых узлов, а y определяет среднюю безразмерную намагниченность для одного узла.

Система уравнений для y и c имеет вид

$$y = c \tanh(zD'c + zJ'y + h'),$$

$$y^2 = c^2 - 4(1 - c^2) \exp(2zK'c + zD'y + 2\mu'),$$

где

$$K' = \frac{K}{\theta}, \quad D' = \frac{D}{\theta}, \quad J' = \frac{J}{\theta}, \quad \mu' = \frac{\mu}{\theta}, \quad h' = \frac{h}{\theta}.$$

Первое уравнение показывает, что рассматриваемая магнитная система в отношении критической температуры эквивалентна модели Изинга в приближении среднего поля. Вводим новую переменную

$$u = zD'c + zJ'y + h'$$

и получаем уравнение для критической температуры θ_k в виде

$$\frac{1}{zcJ}(\theta u - zDc - h) = \tanh u.$$

Графическое представление этого уравнения ясно. Прямая, с левой стороны, пересекает кривую, описанную в правой части. Когда при изменении температуры точки, соответствующие локальному минимуму и локальному максимуму, сливаются, прямая становится касательной, и в этом положении температура равна температуре фазового перехода θ_k .

При $c = 1$ и $D = 0$ верхнее уравнение переходит в уравнение, определяющее критическую температуру для модели Изинга при наличии внешнего поля h .

Используя систему для y и c , рассмотрим предельный переход $\theta \rightarrow 0$. Соответственно получаем:

$$1) \quad c \rightarrow 1, \quad y \rightarrow 1, \quad c = c_+ = 1.$$

Этот случай осуществляется при выполнении неравенства (3) и неравенства

$$2zK + zD + 2\mu < 0.$$

$$2) \quad c \rightarrow 1, \quad y \rightarrow -1, \quad c = c_- = 1.$$

Этот случай осуществляется при выполнении неравенства (4) и неравенства

$$2zK - zD + 2\mu < 0.$$

Очевидно, эти два случая означают наличие основного состояния (+) или основного состояния (-). Все другие возможные значения для y и c не согласуются с условием $\theta \rightarrow 0$. Следовательно, приближение среднего поля учитывает только эти основные состояния.

Для высоких температур, когда выполняются все следующие неравенства

$$\left| \frac{2zK}{\theta} \right| \ll 1, \quad \left| \frac{zD}{\theta} \right| \ll 1, \quad \left| \frac{zJ}{\theta} \right| \ll 1, \quad \left| \frac{2\mu}{\theta} \right| \ll 1, \quad \left| \frac{h}{\theta} \right| \ll 1,$$

первое приближение для магнитной системы имеет вид

$$y = \frac{c}{3}(zD + h),$$

$$c = \frac{2}{3} \left[1 + \frac{1}{3\theta} \left(\frac{2zK}{3} + \mu \right) \right].$$

а для двухкомпонентного газа:

$$c_+ = \frac{1}{3} \left[1 + \frac{2z}{3\theta} \left(\frac{K}{3} + D \right) + \frac{1}{3\theta} (2\Delta_+ - \Delta_-) \right],$$

$$c_- = \frac{1}{3} \left[1 + \frac{2z}{3\theta} \left(\frac{K}{3} - D \right) + \frac{1}{3\theta} (2\Delta_- - \Delta_+) \right]$$

В нулевом приближении, когда температура так высока, что подавляет все взаимодействия, для магнитной системы

$$y = 0, \quad c = \frac{2}{3},$$

а для двухкомпонентного газа

$$c_+ = c_- = c_0 = \frac{1}{3}.$$

Эти результаты описывают полный хаос. Следовательно, при высоких температурах приближение среднего поля дает правильные результаты, и этот вывод вполне соответствует физическому содержанию этого приближения.

Автор выражает благодарность директору ОИЯИ проф. В.Г.Кадышевскому, директору ЛТФ проф. А.Т.Филиппову, проф. Н.М.Плакиде, проф. В.Б.Приезжеву, проф. М.Д.Матееву за предоставленную возможность работать в ОИЯИ и благоприятные условия, а проф. В.Б.Приезжеву и за разнообразные стимулирующие обсуждения.

Литература

- [1] R. A. Tahir-Kheli, Phys. Rev. 169, 517 (1968).
- [2] G.B. Taggart, J. Phys. Chem. Solids 34, 1917 (1973).

- [3] G. Compper and M. Schick, Phys. Rev. B **41**, 9148 (1990).
- [4] M. Blume, V.J. Emery and R.B. Griffiths, Phys. Rev. A **4**, 1071 (1971).
- [5] M. Blume, Phys. Rev. **141**, 517 (1966).
- [6] H. W. Capel, Physica **32**, 966 (1966); **33**, 295 (1967); **37**, 423 (1967).
- [7] V. D. Karaivanov, Phys. Lett. A **173**, 13 (1993).
- [8] T. Horiguchi, Phys. Lett. A **113**, 425 (1986).
- [9] K.-F. Tang, Phys. Lett. A **133**, 183 (1988).
- [10] K. G. Chakraborty and J. W. Tucker, Phys. Lett. A **111**, 205 (1985);
Physica A **129**, 122 (1986).
- [12] Н. С. Ананикян, Н. Ш. Измаилян, Р. Р. Щербаков, Письма в ЖЭТФ **59**, 71 (1994).
- [13] A. Z. Akheyyan and N. S. Ananikian, J. Phys. A **29**, 721 (1996).
- [14] L. D. Lawrie and S. Sarbach, in: Phase transitions and critical phenomena, Vol. 9, eds. C. Domb and J. L. Lebowitz (Academic Press, New York, 1984).
- [15] V. D. Karaivanov, Bulg. J. Phys. **25**, No 5-6, 233 (1998).
- [16] D. Mukamel and M. Blume, Phys. Rev. A **10**, 610 (1974).
- [17] J. Laizerowich and J. Sivardiere, Phys. Rev. A **11**, 2079 (1975).
- [18] J. Sivardiere and J. Laizerowich, Phys. Rev. A **11**, 2090 (1975).
- [19] J. Sivardiere and J. Laizerowich, Phys. Rev. A **11**, 2101 (1975).
- [20] D. Furman, S. Dattagupta and R. B. Griffiths, Phys. Rev. B **15**, 441 (1977).

Рукопись поступила в издательский отдел
25 июня 1999 года

Редактор М.И.Зарубина. Макет Р.Д.Фоминой

Подписано в печать 06.07.99
Формат 60 × 90/16. Офсетная печать. Уч.-изд. листов 1,35
Тираж 310. Заказ 51471. Цена 1 р. 62 к.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
Дубна Московской области