ВІСНИК ЛЬВІВ. УН-ТУ VISNYK LVIV UNIV.
Серія фізична. 2007. Вип.40. С.57-63 Ser.Physic. 2007. N40. P.57-63

УДК 536.7:541.11
PACS number(s): 64.60.Fr.

ТЕРМОДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МОДЕЛЕЙ БЕКСТЕРА Й ЕШКІНА–ТЕЛЛЕРА В КРИТИЧНІЙ ОБЛАСТІ

О. Галдіна

Дніпропетровський національний університет
вул. Наукова, 13, 49050 Дніпропетровськ, Україна
e-mail: galdina@ff.dsu.dp.ua

На підставі термодинамічного методу дослідження критичного стану розглянуто критичні властивості двовимірних точно розв'язуваних моделей Бекстера і Ешкіна–Теллера. Ці моделі описують поведінку феромагнетиків та сегнетоелектриків. Проаналізовано асимптотичну поведінку комплексу термодинамічних характеристик стійкості в околі критичної точки. Визначено типи критичної поведінки моделей за термодинамічною класифікацією. З'ясовано причини порушення гіпотези універсальності в цих моделях.

Ключові слова: коефіцієнти стійкості, критичний нахил лінії фазової рівноваги, гіпотеза універсальності.

Головним завданням теорії критичних явищ є обчислення статистичної суми системи і знаходження всіх термодинамічних величин в околі критичної точки. У цьому сенсі проблема критичного стану є типовою задачею фізики багатьох сил і має ті ж самі труднощі – необхідність врахування величезної кількості внутрішніх ступенів вільності. Поки що це завдання не може бути вирішене для реальної системи через неможливість врахування взаємодії у повному обсязі, а тим більше флуктуацій. Один з методів подолання цієї проблеми пов'язаний зі знаходженням статистичної суми, точне обчислення якої можливе лише для двовимірних модельних систем. Тому в сучасних теоріях критичних явищ велику увагу приділяють різноманітним моделям.

Неабиякий інтерес становлять точно розв'язувані двовимірні моделі [1]. Ці моделі не мають реальних (двовимірних) аналогів, що унеможливлює безпосереднє порівняння їх з експериментом, але вони ілюструють певні термодинамічні властивості конкретних фізичних систем і, отже, дають нам якісні уявлення про перебіг критичних явищ у реальних системах. Крім того, за допомогою модельного підходу отримуємо чимало важливої інформації, яку неможливо здобути експериментальним шляхом.

У цій статті досліджено критичні властивості восьмивершинної моделі Бекстера і моделі Ешкіна–Теллера [1]. Ці моделі мають велике значення для теорії критичного стану, тому що вони розглядають порушення гіпотези універсальності: критичні їх показники залежать від параметрів взаємодії. Вони мають точний розв'язок за відсутності зовнішнього поля і дають змогу проводити дослідження термодинамічним методом.

Термодинамічний метод дослідження критичного стану однокомпонентних систем, введений у [2, 3], ґрунтується на конструктивному визначенні критичного стану за допомогою систем лінійних та нелінійних однорідних рівнянь і дослідженні умов стійкості критичного стану.

Основними величинами, що характеризують термодинамічну систему з погляду її стійкості, є адіабатичні величини (АВ), що розглядаються у разі сталих термодинамічних координат, $\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_x, \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_S, \left(\frac{\partial X}{\partial x}\right)_S$, та ізодинамічні величини (ІВ), що розглядаються у разі сталих термодинамічних сил, $\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_X, \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_X$, $\left(\frac{\partial X}{\partial x}\right)_T$. Величини $\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_x$ і $\left(\frac{\partial X}{\partial x}\right)_S$ називають адіабатичними коефіцієнтами стійкості (АКС), а $\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_X$ і $\left(\frac{\partial X}{\partial x}\right)_T$ – ізодинамічними коефіцієнтами стійкості (ІКС). Як узагальнену термодинамічну координату можна розглядати об'єм V, намагніченість M, електричну поляризацію $\mathcal{P}$. Відповідними термодинамічними силами X будуть тиск P, напруженості магнітного H і електричного E полів.

Конструктивне визначення критичного стану за [2, 3] має вигляд:

$$\begin{cases} dT = \left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_x dS + \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_S dx = 0 \\ dX = \left(\frac{\partial X}{\partial S}\right)_x dS + \left(\frac{\partial X}{\partial x}\right)_S dx = 0 \end{cases}, \left(\frac{dX}{dT}\right)_C = -\frac{dS}{dx} = K_c, \tag{1}$$

де K_c – нахил лінії фазової рівноваги в критичній точці.

Визначення (1) описує критичний стан за АВ; розв'язком системи лінійних однорідних рівнянь є критичний нахил K_c, який можна виразити через АКС :

$$-\frac{dS}{dx} = K_c = \left[sign\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_S\right]\left(\left(\frac{\partial X}{\partial x}\right)_S\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_x^{-1}\right)^{1/2} = \left(\frac{\partial X}{\partial T}\right)_x. \tag{2}$$

Це визначення при сумісному розгляді з умовами стійкості [2, 3] зумовлює наявність чотирьох альтернативних типів критичної поведінки термодинамічних систем:

1. $\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_x \neq 0, \left(\frac{\partial X}{\partial x}\right)_S \neq 0 \;\Rightarrow\; \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_S \neq 0, K_c \neq \{0, \infty\}$;
2. $\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_x \neq 0, \left(\frac{\partial X}{\partial x}\right)_S = 0 \;\Rightarrow\; \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_S = 0, K_c = 0$;
3. $\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_x = 0, \left(\frac{\partial X}{\partial x}\right)_S \neq 0 \;\Rightarrow\; \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_S = 0, K_c = \infty$;
4. $\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_x = 0, \left(\frac{\partial X}{\partial x}\right)_S = 0 \;\Rightarrow\; \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_S = 0, K_c = ?$.

Тип поведінки визначають станом одного АКС і критичним нахилом K_c. Для кожного типу встановлено поводження всього комплексу характеристик стійкості – АВ та ІВ.

Найбільший інтерес становить четвертий тип критичної поведінки, в якому обидва АКС наближаються до нуля, внаслідок чого нахил K_c не визначається з системи (1). Він може реалізуватися за допомогою кількох способів [2, 3]. Зокрема, можливе існування стійких критичних точок, в яких сходяться дві або навіть три лінії фазової рівноваги.

Розглянемо насамперед двовимірну восьмивершинну модель Бекстера [4–6]. Її було запропоновано як узагальнення моделей типу криги з вісьмома дозволеними конфігураціями вершин, вона описує поведінку сегнетоелектрика (антисегнетоелектрика). До шести вершин, що фігурують в моделі Ліба [1], було додано дві нові вершини, в яких всі стрілки входять у вузол або всі стрілки виходять з вузла. Тоді для локальної деформації стану ґратки необхідне лише скінчене значення енергії і слід очікувати, що сегнетоелектричний стан не буде повністю впорядкованим (на відміну від моделі Ліба). Восьмивершинну модель можна також розглядати як дві моделі Ізінга із взаємодією між найближчими сусідами (кожну з моделей розглядають на своїй підґратці), пов'язані між собою за допомогою взаємодії між чотирма спінами. У цьому випадку модель відповідає феромагнетикові.

Модель Бекстера має точний розв'язок за відсутності зовнішнього поля. Критичні показники цієї моделі становлять

$$\begin{aligned}
&\alpha = \alpha' = 2 - \frac{\pi}{\mu},\\
&\beta = \frac{\pi}{16\mu}, \quad \gamma = \frac{7\pi}{8\mu}, \quad \delta = 15, \qquad (3)\\
&\beta_e = \frac{\pi - \mu}{4\mu}, \quad \gamma_e = \frac{\pi + \mu}{2\mu}, \quad \delta_e = \frac{3\pi + \mu}{\pi - \mu}.
\end{aligned}$$

Тут індекс e означає електричні критичні показники; показники β, γ і δ – відносяться до феромагнетика, показник α однаковий і для феромагнетика, і для сегнетоелектрика; μ – це параметр взаємодії, область його значень – $(0, \pi)$. Отож, бачимо, що критичні показники залежать від параметра взаємодії, а це суперечить гіпотезі універсальності. Це виділяє модель Бекстера серед інших двовимірних моделей, що мають точний розв'язок. Зважаючи на це, варто очікувати, що залежно від параметра взаємодії змінюватимуться тип критичної поведінки за термодинамічною класифікацією і значення критичного нахилу. Простежимо це.

У випадку феромагнетика адіабатичні коефіцієнти стійкості матимуть такий асимптотичний вигляд: $\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_M \propto t^{2-\frac{\pi}{\mu}}$, $\left(\frac{\partial H}{\partial M}\right)_S \propto t^{\frac{7\pi}{8\mu}}$. Тут $t = \frac{T - T_c}{T_c}$. Зазначимо, що за відсутності зовнішнього поля поведінка ізодинамічних величин збігається з поведінкою адіабатичних величин. При значеннях $0 < \mu \le \frac{\pi}{2}$ показник α

набуває від'ємних значень, γ – додатних, тобто набуває значень $\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_M \neq 0$, $\left(\frac{\partial H}{\partial M}\right)_S = 0 \;\Rightarrow \left(\frac{\partial T}{\partial M}\right)_S = 0,\;\; K_c = 0$ і реалізується другий тип критичної поведінки. У разі $\frac{\pi}{2} < \mu < \frac{15\pi}{16}$ реалізується четвертий тип критичної поведінки, α збільшується ($0 < \alpha < \frac{14}{15}$), γ зменшується ($\frac{7}{4} > \gamma > \frac{14}{15}$), причому $\alpha < \gamma$. $\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_M = 0, \left(\frac{\partial H}{\partial M}\right)_S = 0 \;\Rightarrow\; \left(\frac{\partial T}{\partial M}\right)_S = 0$ – усі величини в цьому випадку прямують до нуля, але $\left(\frac{\partial H}{\partial M}\right)_S$ і $\left(\frac{\partial H}{\partial M}\right)_T$ – швидше від інших. Значення критичного нахилу $K_c = 0$. Випадок $\mu = \frac{15\pi}{16}$ теж відповідає четвертому типу критичної поведінки, але $\alpha = \gamma = \frac{14}{15}$, усі величини прямують до нуля за одним законом, критичний нахил $K_c \neq \{0, \infty\}$. При $\frac{15\pi}{16} < \mu < \pi$ також реалізується четвертий тип поведінки, $\frac{14}{15} < \alpha < 1$, $\frac{14}{15} > \gamma > \frac{7}{8}$, і $\alpha > \gamma$. Усі величини прямують до нуля, але $\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_M$ і $\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_H$ – швидше за інші. Значення критичного нахилу $K_c = \infty$.

Отож, за допомогою проведеного аналізу з'ясовано, що при $0 < \mu \leq \frac{\pi}{2}$ критична поведінка моделі Бекстера відповідає другому типу за термодинамічною класифікацією [2, 3] з $K_c = 0$, а при $\frac{\pi}{2} < \mu < \pi$ – четвертому типу, який залежно від значення μ (із зазначеного інтервалу реалізується трьома можливостями ($K_c = 0, K_c \neq \{0, \infty\}, K_c = \infty$).

У випадку сегнетоелектричної моделі Бекстера коефіцієнти стійкості матимуть такий асимптотичний вигляд: $\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_{\mathcal{P}} \propto t^{2-\frac{\pi}{\mu}}$, $\left(\frac{\partial E}{\partial \mathcal{P}}\right)_S \propto t^{\frac{\pi+\mu}{2\mu}}$. У разі $0 < \mu \leq \frac{\pi}{2}$, як і в попередньому випадку, α набуває від'ємних значень, а γ – додатні. Тому $\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_P \neq 0, \left(\frac{\partial E}{\partial \mathcal{P}}\right)_S = 0 \;\Rightarrow \left(\frac{\partial T}{\partial \mathcal{P}}\right)_S = 0,\;\; K_c = 0$ і реалізується другий тип критичної поведінки. У випадку $\frac{\pi}{2} < \mu < \pi$ показник α набуває додатних значень $0 < \alpha < 1$, але залишається меншим за γ, бо $\frac{3}{2} > \gamma > 1$ – реалізується четвертий тип критичної поведінки з $K_c = 0$.

Модель Ешкіна–Теллера є узагальненням двовимірної моделі Ізінга. Вона не має точного розв'язку, але може бути запропонована як вершинна модель з антипаралельним порядком, і її критична поведінка досліджена досить добре.

Модель Ешкіна–Теллера була запропонована [1, 7] як узагальнення моделі Ізінга на чотирикомпонентну систему. Кожний вузол ґратки в цій моделі зайнятий атомом одного з сортів: A, B, C або D. Кожному вузлу i у відповідають два спіни: s_i і σ_i. Критичні показники цієї моделі за відсутності зовнішнього поля мають вигляд:

$$\alpha = \frac{2-2y}{3-2y}, \quad \beta_m = \frac{2-y}{3-2y}, \quad \gamma_m = \frac{2y}{3-2y}, \quad \delta_m = \frac{2-y}{24-16y},$$
$$\beta_e = \frac{1}{12-8y}, \quad \gamma_e = \frac{7-4y}{6-4y}, \quad \delta_e = 15-8y. \tag{4}$$

Тут параметр $y = 2\mu/\pi$, де μ – це параметр взаємодії моделі Бекстера, але $0 < \mu \le \frac{2\pi}{3}$. Індекс m пов'язаний з уведенням поля $-H\Sigma\sigma_i$, а індекс e пов'язаний з полем $-E\Sigma\sigma_i s_j$.

Проаналізуємо поведінку АКС для цієї моделі. Для "магнітної" моделі Ешкіна–Теллера, коли $1 < y < 4/3$, що відповідає $\frac{\pi}{2} < \mu < \frac{2\pi}{3}$, критичний показник α набуває від'ємних значень, γ – додатних, тобто реалізується другий тип критичної поведінки з $K_c = 0$. При $0 \le y \le 1$ ($0 \le \mu \le \frac{\pi}{2}$) значення α стає додатним і $\alpha < \gamma$ – реалізується четвертий тип критичної поведінки з $K_c = 0$.

Для "електричної" моделі Ешкіна–Теллера при $1 \le y < 4/3$, що відповідає $\frac{\pi}{2} \le \mu < \frac{2\pi}{3}$, так само, як і в попередньому випадку, реалізується другий тип критичної поведінки. За умови, що $0 \le y < 1$ (тобто $0 \le \mu < \frac{\pi}{2}$) завжди $\gamma > \alpha$, що відповідає четвертому типу критичної поведінки за термодинамічною класифікацією з $K_c = 0$.

Цікаво зазначити, що аналіз експериментальних даних для сегнетоелектриків [8] і феромагнетиків виявив, що в реальних кристалах також реалізуються другий і четвертий типи критичної поведінки, а це добре узгоджується з отриманими теоретичними результатами.

Отже, було з'ясовано, що у восьмивершинній моделі Бекстера і Ешкіна–Теллера реалізуються другий і четвертий типи критичної поведінки за термодинамічною класифікацією. Причому в моделі Бекстера четвертий тип може бути реалізований трьома можливостями – із трьома різними значеннями критичного нахилу ($K_c = 0, K_c \neq \{0, \infty\}, K_c = \infty$). Типи поведінки розрізнять за рівнем розвитку флуктуацій в околі критичної точки: другий тип – характеризується помірними флуктуаціями енергії й значними флуктуаціями магнітної (або електричної) орієнтації, а в четвертому типі всі флуктуації є необмежено великі. Причина порушення гіпотези універсальності (яке полягає в залежності критичних показників від параметра взаємодії) в зазначених моделях криється в тому, що кожному значенню або неперервному діапазону значень параметра взаємодії відповідають різні типи критичної поведінки.

1. *Бэкстер Р.Д.* Точно решаемые модели в статистической механике. М.: Мир, 1985.
2. *Солдатова Е.Д.* Альтернативные типы критического поведения термодинамических систем // Український фізичний журнал. 1993. Т. 38. № 9. С.1434–1439.
3. *Soldatova E.D.* Variety of Critical State Nature Manifestation // Condensed Matter Physics. 1999. Vol. 2. N 4(20). P. 603–616.
4. *Baxter R.J.* Eight-Vertex Model in Lattice Statistics // Physical Review Letters. 1971. Vol. 26. N 14. P. 832–833.
5. *Baxter R.J.* Generalized Ferroelectric Model on a Square Lattice // Studies in Applied Mathematics. 1971. Vol. L. N 1. P. 51–69.
6. *Fan C., Wu F.Y.* General Lattice Model of Phase Transitions // Physical Review B. 1970. Vol. 2. N 3. P. 723–733.
7. *Ashkin J., Teller E.* Statistics of Two-Dimensional Lattices With Four Components // Physical Review. 1943. Vol. 64. N 5–6. P. 178–184.
8. *Солдатова Є.Д.*, *Галдіна О.М.* Дослідження термодинамічних властивостей сегнетоелектричної моделі Ліба в околі критичної точки // Український фізичний журнал. 2004. Т. 49. № 11. С. 1126–1130.

THERMODYNAMIC PROPERTIES OF BAXTER AND ASHKIN-TELLER MODELS IN THE CRITICAL REGION

A. Galdina

Dnipropetrovs'k national university, Physics Department
Naukovaa Str., 13, UA–49050 Dnipropetrovs'k, Ukraine
e-mail: galdina@ff.dsu.dp.ua

The critical properties of exactly solvable two-dimensional Baxter and Ashkin-Teller models have been examined on the basis of thermodynamic method of the critical state investigation. These models describe the behaviour of ferromagnets and ferroelectrics. The behaviour of the set of thermodynamic stability characteristics in the vicinity of the critical point has been analysed. The types of critical behaviour according to thermodynamic classification have been determined for these models. The reasons for violation of universality hypothesis in the models have been clarified.

Key words: stability coefficients, critical slope of the phase equilibrium curve, universality hypothesis.

Стаття надійшла до редколегії 14.10.2005
Прийнята до друку 26.02.2007