

КАСКАДИ ФАЗОВИХ ПЕРЕХОДІВ ВХІД-ВИХІД У МОДЕЛІ БЛЮМА-ЕМЕРІ-ГРІФІТСА НА ПРОСТИЙ КУБІЧНІЙ ГРАТЦІ. НАБЛИЖЕННЯ ДВОЧАСТИНКОВОГО КЛАСТЕРА

О. Р. Баран, Р. Р. Левицький

Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України
бул. Свєнціцького, 1, Львів, 79011, Україна
(Отримано 25 травня 2001 р.)

У наближенні двочастинкового кластера досліджено каскади фазових переходів вхід-вихід та подвійний вхід-вихід у системі, яка описується моделлю Блюма-Емері-Гріфітса на простій кубічній гратці. Побудовано фазові діаграми та отримано температурні залежності дипольного і квадрупольного моментів при різних наборах параметрів моделі (при таких, де достатньо розглядати однопідграткову задачу).

Ключові слова: модель Блюма-Емері-Гріфітса, фазові переходи, кластерне наближення.

PACS number: 75.10.Hk, 05.70.Fh, 64.60.-i, 64.60.Cn

I. ВСТУП

Модель Блюма-Емері-Гріфітса (БЕГ'), що відповідає ізинг'ївській моделі зі спіном 1, — одна з найінтенсивніше досліджуваних моделей у теорії конденсованих систем. Це пов'язано як з відносною простотою проведення на її основі наближених розрахунків та тестування різних наближених методів, так і з можливістю моделювання нео широкого класу реальних об'єктів. Вона ефективна при дослідженні простих та багатокомпонентних рідин [1–3], дипольних та квадрупольних упорядкувань у магнетиках [3–5], кристалів з феромагнетними домішками [3], впорядкування в надпровідних сплавах [6]. Крім того, наявність у гамільтонії моделі тензорних членів обмінної (біквадратна взаємодія) та необмінної (одноіонна анізотропія) природи, а також багата фазова діаграма зумовлюють і суттєвий інтерес до цієї моделі.

Модель БЕГ' досліджували різноманітними методами: в наближенні молекулярного поля (НМП) [1–4,7], у різних варіантах теорії ефективних полів [8–11], у наближенні двочастинкового кластера (НДК) [12–14], на гратці Бете [15], у високотемпературному розвиненні [16], на основі теорії ренормалізаційної групи (РГ) [17,18] та за допомогою моделювання Монте-Карло (МК) [15,19–21]. Слід зазуважити, що при нульовій одноіонній анізотропії НДК (результати якого узгоджуються з результатами для гратки Бете та наближення константи зв'язку), на відміну від НМП, коректно реагує на конкуренцію феромагнетною білінійною взаємодією з антиферомагнетною біквадратною взаємодією: отримані в НДК фазові діаграми для різних типів граток [12,15] якісно узгоджуються з результатами моделювання МК [19,20]. Стосовно праць [12,20] треба, однак, ще зазуважити, що наведені в них фазові діаграми на площині температура — біквадратна взаємодія при нульовій одноіонній анізотропії неповні: відсутня лінія, яка розділяє квадрупольну та нестійку квадрупольну фази, оскільки в цих працях розглянуто лише

однопідграткову задачу.

Гамільтонія моделі БЕГ' має вигляд:

$$H = - \sum_{i=1}^N D_i S_i^2 - \frac{1}{2} \sum_{i,\delta} [K S_i S_{i+\delta} + K' S_i^2 S_{i+\delta}^2], \quad (1.1)$$

де $S_i = 0, \pm 1$; D_i — одноіонна анізотропія; K та K' — білінійна та біквадратна короткосіжні взаємодії; i пробігає вузли гратки, δ пробігає найближчі сусіди до вузла i . У моделі БЕГ' на тривимірних гратках при певних наборах мікропараметрів зі зміною температури відбуваються різні каскади фазових переходів вхід-вихід та подвійний вхід-вихід (див. праці [15,19]).

У цій роботі ми досліджуємо модель БЕГ' на простій кубічній гратці в НДК при таких значеннях антиферомагнетних біквадратної взаємодії та одноіонної анізотропії (білінійна взаємодія є феромагнетною: $K > 0$), за яких відбуваються каскади фазових переходів вхід-вихід та подвійний вхід-вихід між квадрупольною та феромагнетною фазами. У своєму дослідженні ми обмежимося тими значеннями мікропараметрів моделі ($K'/K > -1$), при яких достатньо розглядати одну підгратку. Таку задачу аналізували для моделі на гратці Бете [15], в НМП [7] та на основі теорії РГ [18]. Однак у праці [15] були допущені неточності в числових розрахунках, унаслідок чого отримані в ній фазові діаграми та деякі висновки невправильні.

II. НАБЛИЖЕННЯ ДВОЧАСТИНКОВОГО КЛАСТЕРА

Вільна енергія моделі БЕГ' в НДК має вигляд [12–14]:

$$F = -k_B T N [(1-z) \ln Z_1 + \frac{z}{2} \ln Z_{12}]; \quad (2.1)$$

$$Z_1 = 2e^{\beta\tilde{x}'} \cdot \cosh(\beta\tilde{x}) + 1; \quad (2.2)$$

$$Z_{12} = 2e^{\beta(2\tilde{x}' + K')} [e^{\beta K} \cdot \cosh(2\beta\tilde{x}) + e^{-\beta K}] + 4e^{\beta\tilde{x}'} \cdot \cosh(\beta\tilde{x}) + 1.$$

Тут z — кількість найближчих сусідів, $\beta = (k_B T)^{-1}$,

$$\begin{aligned} \tilde{x} &= z\varphi, & \tilde{x}' &= D + z\varphi', \\ \tilde{\tilde{x}} &= (z-1)\varphi, & \tilde{\tilde{x}}' &= D + (z-1)\varphi'. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Для кластерних полів φ та φ' маємо систему рівнянь [12–14]:

$$\begin{aligned} \frac{e^{\beta\tilde{x}'} \cdot \sinh(\beta\tilde{x})}{Z_1} \\ = \frac{e^{\beta(2\tilde{x}' + K' + K)} \cdot \sinh(2\beta\tilde{x}) + e^{\beta\tilde{x}'} \cdot \sinh(\beta\tilde{x})}{Z_{12}}, \\ \frac{e^{\beta\tilde{x}'} \cdot \cosh(\beta\tilde{x})}{Z_1} \end{aligned} \quad (2.4)$$

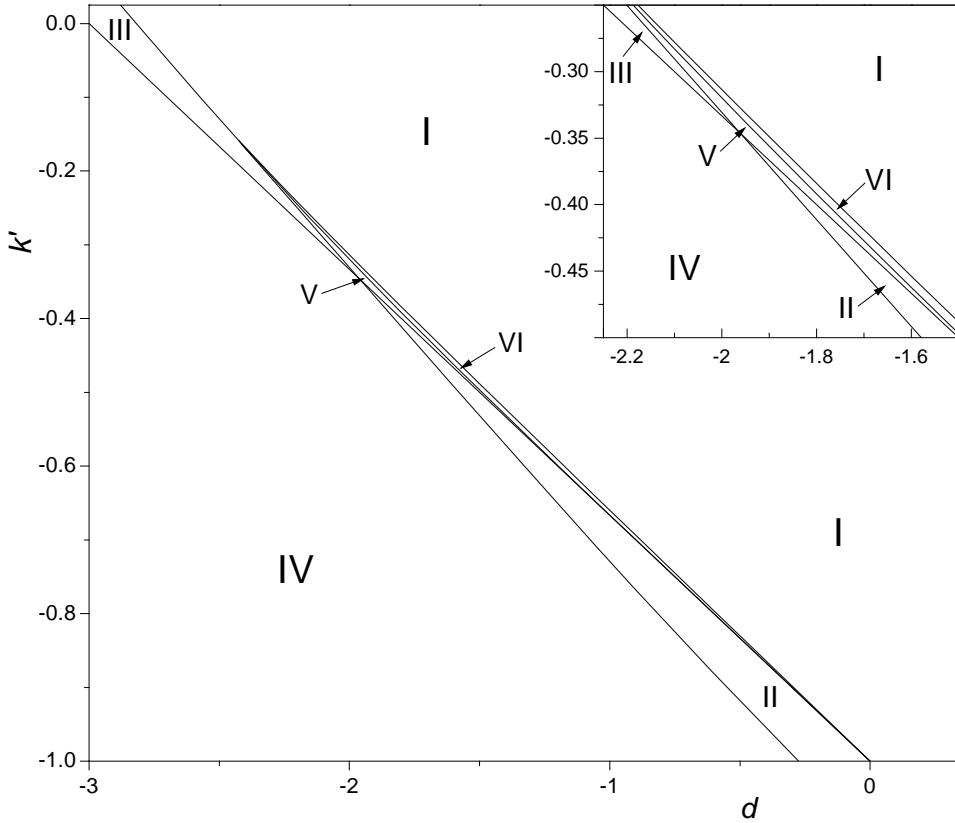


Рис. 1. Проекція фазової діяграми на (d, k') площину.

Проекція отриманої в НДК фазової діяграми моделі БЕГ' на простій кубічній ґратці на (d, k') площині при $-1 < k' \leq 0$ складається із шести регіонів (див. рис. 1): I — $(Q) \rightarrow (F)$ фазовий переход

другого роду (який відбувається зі зменшенням температури); II — каскад фазових переходів вхід-виход $(Q) \rightarrow (F) \rightarrow (Q)$, обидва ФП другого роду; III — $(Q) \rightarrow (F)$ ФП першого роду; IV — ФП відсутній; V — кас-

кад ФП подвійний вхід-виход $(Q) \rightarrow (F) \rightarrow (Q) \rightarrow (F)$ і тільки нижній перехід є першого роду; VI — каскад ФП подвійний вхід-виход $(Q) \rightarrow (F) \rightarrow (Q) \rightarrow (F)$ і тільки верхній перехід є другого роду. Зауважимо, що регіон III та регіон IV, а також регіон V та регіон II розділені лінією $k' = -1 - d/3$ (тою самою, яка в основному стані розділяє регіони чистого 0 впорядкування та феромагнетного впорядкування [15]).

На рис. 2 зображені фазові діаграми на площині (k', t) при різних значеннях d (використовуємо приведену температуру $t = k_B T / (zK)$). З цього рисунка можна бачити основний аспект температурних фазових переходів, які передбачає НДК в досліджуваній моделі при $-1 < k' \leq 0$. Розгляньмо для при-

кладу випадок $d = -1.8$ (див. також рис. 3). При $k' > -0.384$ в системі зі зменшенням температури є тільки один фазовий перехід $(Q) \rightarrow (F)$ другого роду. При $k' \in [-0.4, -0.384]$ відбувається каскад фазових переходів подвійний вхід-виход $(Q) \rightarrow (F) \rightarrow (Q) \rightarrow (F)$, причому при $k' \in [-0.392, -0.384]$ тільки верхній перехід є другого роду, а при $k' \in [-0.4, -0.392]$ тільки нижній перехід є першого роду. $k' = -0.392$, $t = 0.155$ — координати трикритичної точки (k'_{TCP}, t_{TCP}) , у якій лінія фазового переходу другого роду переходить у лінію фазового переходу першого роду. При $k' \in [-0.411, -0.4]$ відбувається каскад фазових переходів вхід-виход $(Q) \rightarrow (F) \rightarrow (Q)$, причому обидва перехіди другого роду.

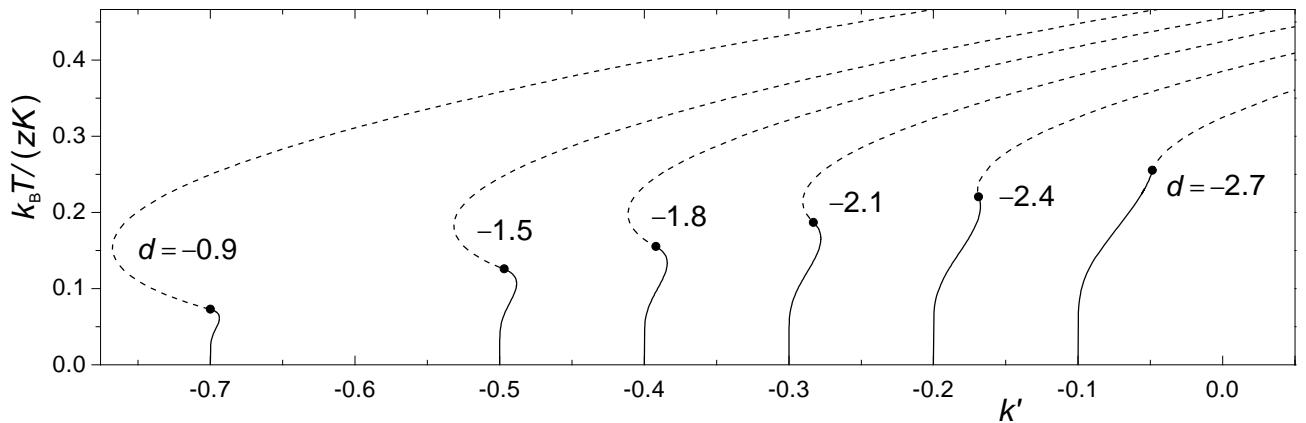


Рис. 2. Фазові діаграми на (k', t) площині при різних значеннях d . Штрихи та сухільна лінія відповідають фазовим переходам другого та першого роду відповідно. Кружечки відповідають трикритичним точкам.

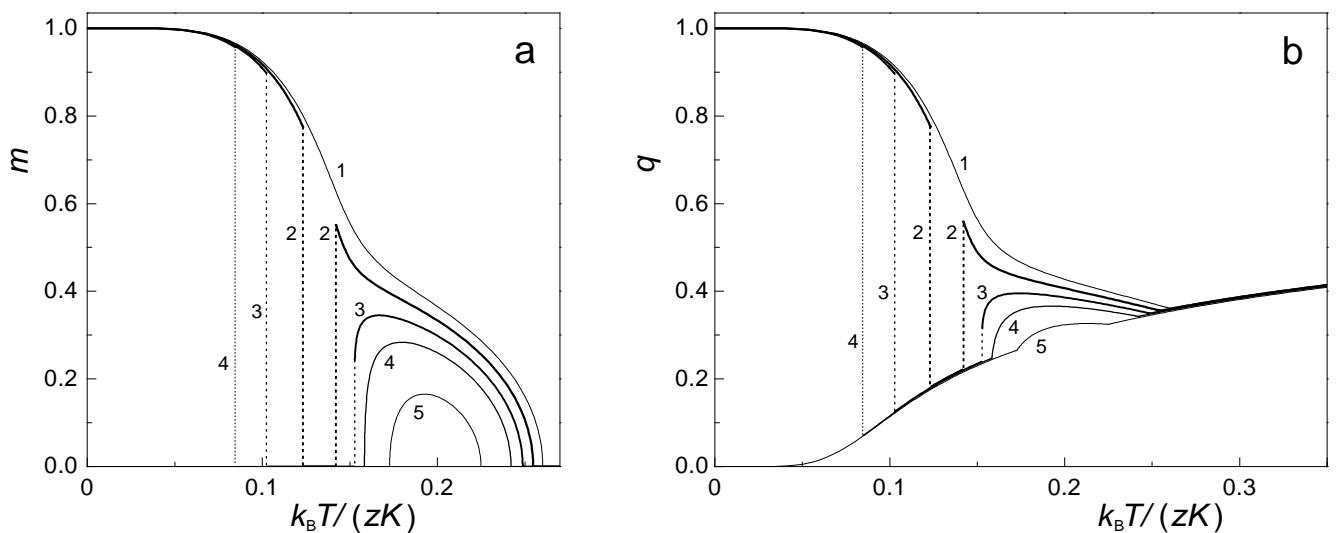


Рис. 3. Температурні залежності m (a) і q (b) при $d = -1.8$ та різних значеннях параметра k' : 1 — $k' = -0.38$; 2 — $k' = -0.385$; 3 — $k' = -0.39$; 4 — $k' = -0.395$; 5 — $k' = -0.405$.

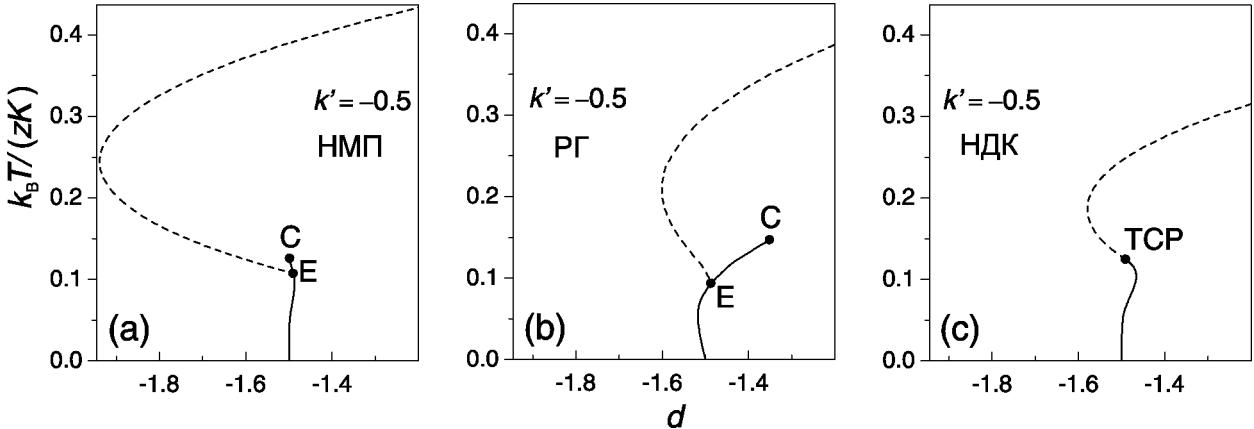


Рис. 4. Фазові діяграми на (d, t) площині при $k' = -0.5$. Результати НМП (а) [7], теорії РГ (б) [18] і НДК (с). Штрих та суцільна лінія відповідають фазовим переходам другого та першого роду відповідно. Кружечки відповідають критичній кінцевій точці E , критичній точці C (всередині феромагнітної фази) та трикритичній точці TCP.

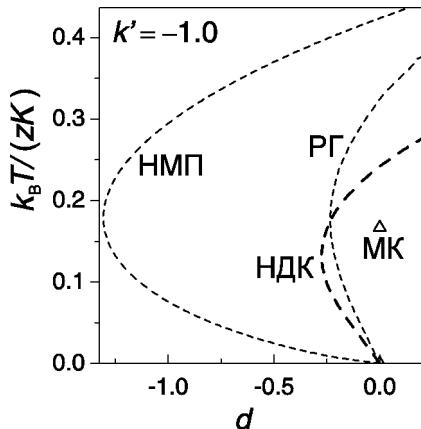


Рис. 5. Фазові діяграми на (d, t) площині при $k' = -1.0$. Результати НМП [7], теорії РГ [18] і НДК. Штрих відповідає фазовим переходам другого роду. Трикутники відповідають температурам фазових переходів при $k' = -1.0$, $d = 0$, отриманих моделюванням Монте–Карло [19].

Наведені в праці [15] аналогічні фазові діяgramи, отримані на ґратці Бете (результати на якій, як уже згадувалось вище, еквівалентні до НДК), якісно відрізняються від тих, що отримали ми. У трикритичній точці лінія фазового переходу має злам [15], причому обидві її частини (які відповідають фазовим переходам першого та другого родів) сходяться в трикритичну точку зліва (при $k' = k'_{TCP} + 0$ у системі є тільки один фазовий переход $(Q) \rightarrow (F)$ другого роду). Автори праці [15] роблять висновок, що при наборах параметрів, коли в системі зі зменшенням температури відбувається каскад фазових переходів подвійний вхід–вихід $(Q) \rightarrow (F) \rightarrow (Q) \rightarrow (F)$, тільки нижній переход може бути першого роду.

Зупинімося також коротко на порівнянні наших результатів із результатами інших методів. Передусім слід зауважити, що в НДК при $-1 < k' < 0$ зміна топології фазових діяgram на (d, t) площині зі зміною

k' подібна (що легко бачити з рис. 1) до зміни топології фазових діяgram на (k', t) площині зі зміною d (рис. 2). В НДК при $-1 < k' < k'_{R,NDK}$ ($k'_{R,NDK} \approx -0.16$) фазові діяграми на (d, t) площині мають топологію подвійний вхід–вихід із трикритичною точкою (рис. 4.c). В НМП [7] фазові діяgrams на (d, t) площині мають топологію подвійний вхід–вихід з трикритичною точкою тільки при $-0.18 < k' < k'_{R,NMP}$ ($k'_{R,NMP} < 0$, його значення в праці [7] не подано), причому, як і в НДК, середній фазовий переход може бути і першого, і другого роду. При $-1 < k' < -0.18$ фазові діяgrams в НМП мають топологію (рис. 4.a), яка в НДК не передбачається. Лінія фазового переходу другого роду закінчується в критичній кінцевій точці E на лінії фазового переходу першого роду, а лінія фазового переходу першого роду закінчується в критичній точці C , яка знаходитьться всередині феромагнетної фази [7]. Такий результат НМП дещо нагадує результат теорії ренормалізаційних груп [18]. На отриманій у [18] фазовій діяgramі на (d, t) площині при $k' = -0.5$ (див. рис. 4.b) лінія фазового переходу другого роду також закінчується в критичній кінцевій точці E на лінії фазового переходу першого роду, яка, своєю чергою, закінчується в критичній точці C всередині феромагнетної фази. Проте топології ліній фазового переходу першого роду в НМП [7] і в методі РГ [18] якісно відрізняються (див. рис. 4.a,b). Так, в НМП частина лінії фазового переходу першого роду, яка відповідає переходам $(F) \rightarrow (Q)$ (зі зменшенням температури), лежить вище від частини, що відповідає переходам $(Q) \rightarrow (F)$. А в методі РГ [18] — навпаки: частина лінії фазового переходу першого роду, яка відповідає переходам $(F) \rightarrow (Q)$, лежить нижче від частини, що відповідає переходам $(Q) \rightarrow (F)$. В НМП критична точка C лежить лівіше від критичної кінцевої точки E , а на фазовій діяgramі, отриманій методом РГ [18], — правіше. Тобто при $k' = -0.5$ та фіксованих d , при яких у системі відбуватимуться фазові переходи першого роду, НМП та метод РГ [18] передбачають якісно різні каскади фазових переходів

зі зміною температури.

При $k' = -1$ фазові діяграми, отримані методом РГ [18], в НМП [7] та в НДК, мають топологію вхід-вихід (див. рис. 5), причому при $d = 0$ температура фазового переходу $(Q) \rightarrow (F)$ другого роду, одержана в НДК, значно близчча до відповідної температури, отриманої методом Монте-Карло [19], аніж пораховані методом РГ [18] та в НМП [7].

III. ВИСНОВКИ

Для моделі Блюма-Емері-Гріфітса на простій кубічній гратці в НДК побудовані фазові діяgramи при таких наборах параметрів моделі, коли в системі зі

зміною температури відбувається каскад фазових переходів подвійний вхід-вихід $(Q) \rightarrow (F) \rightarrow (Q) \rightarrow (F)$. Показано, що в НДК середній фазовий перехід може бути і першого, і другого роду (подібно, як і в НМП [7] при таких наборах параметрів моделі, за яких відбуваються аналогічні фазові переходи). Нагадаємо, що в числових розрахунках праці [15] (для гратки Бете) допущена неточність і, як результат, робиться висновок, що при наборах параметрів моделі, за яких у системі відбувається каскад фазових переходів подвійний вхід-вихід $(Q) \rightarrow (F) \rightarrow (Q) \rightarrow (F)$, тільки нижній перехід може бути першого роду. Також показано, що при $0 > k' > -1$ фазові діяграми в просторі (t, d, k') , одержані в НДК, НМП [7] та методом РГ [18], якісно відрізняються.

- [1] D. Mukamel, M. Blume, Phys. Rev. A **10**, 610 (1974).
- [2] D. Furman, S. Dattagupta, R. B. Griffiths, Phys. Rev. B **15**, 441 (1977).
- [3] J. Sivardiere, in: Proc. Internat. Conf. Static critical phenomena in inhomogeneous systems, Karpacz 1984, Lecture notes in physics, **206**, Springer-Verlag, Berlin 1984.
- [4] H. H. Chen, P. M. Levy, Phys. Rev. B **7**, 4267 (1973).
- [5] Э. Л. Нагаев, *Магнетики со сложными обменными взаимодействиями* (Наука, Москва, 1988).
- [6] K. E. Newman, J. D. Dow, Phys. Rev. B **27**, 7495 (1983).
- [7] W. Hoston, A. N. Berker, Phys. Rev. Lett. **67**, 1027 (1991).
- [8] T. Kaneyoshi, E. F. Sarmento, Physica. A **152**, 343 (1988).
- [9] J. W. Tucker, J. Magn. Magn. Mat. **87**, 16 (1990).
- [10] K. G. Chakraborty, Phys. Rev. B **29**, 1454 (1984).
- [11] A. F. Siqueira, I. P. Fittipaldi, Phys. Stat. Sol. (b) **119**, K31 (1983).
- [12] C. I. Сороков, Р. Р. Левицький, О. Р. Баран, Укр. Фіз. Журн. **41**, 490 (1996).
- [13] S. I. Sorokov, R. R. Levitskii, O. R. Baran, Cond. Matt. Phys. No 9, 57 (1997).
- [14] O. R. Baran, R. R. Levitskii, Phys. Stat. Sol. (b) **219**, 357 (2000).
- [15] K. Kasono, I. Ono, Z. Phys. B: Condensed Matter, **88**, 205 (1992).
- [16] D. Saul, M. Wortis, D. Stauffer, Phys. Rev. B **9**, 4964 (1974).
- [17] A. Bakchick, A. Benyoussef, M. Touzani, Physica A **186**, 524 (1992).
- [18] R. R. Netz, A. N. Berker, Phys. Rev. B **47**, 15019 (1993).
- [19] O. F. De Alcantara Bonfim, C. H. Obcemea, Z. Phys. B: Condensed Matter **64**, 469 (1986).
- [20] R. J. C. Booth, Lu Hua, J. W. Tucker, C. M. Care, I. Halliday, J. Magn. Magn. Mat. **128**, 117 (1993).
- [21] D. Peña Lara, J. A. Plascak, Int. J. Mod. Phys. B **12**, 2045 (1998).

RE-ENTRANT PHASE TRANSITIONS IN THE BLUME-EMERY-GRIFFITHS MODEL ON A SIMPLE CUBIC LATTICE. THE TWO-PARTICLE CLUSTER APPROXIMATION

O. R. Baran, R. R. Levitskii

*Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., Lviv, UA-79011, Ukraine
phone: +380 (322) 70-74-39, E-mail: ostb@icmp.lviv.ua*

The two-particle cluster approximation is applied to study the re-entrant and double re-entrant behaviors of spin-1 Ising model with nearest-neighbour bilinear and biquadratic exchange interactions and single-ion anisotropy on a simple cubic lattice. The phase diagrams are constructed and the temperature dependences of dipolar and quadrupolar moments are calculated at various values of model parameters (at those when it suffices to consider a one-sublattice problem).