ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 5, № 2 (2001) с. 157–161

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 5, No 2 (2001) p. 157–161

КАСКАДИ ФАЗОВИХ ПЕРЕХОДІВ ВХІД-ВИХІД У МОДЕЛІ БЛЮМА–ЕМЕРІ–ҐРІФІТСА НА ПРОСТІЙ КУБІЧНІЙ ҐРАТЦІ. НАБЛИЖЕННЯ ДВОЧАСТИНКОВОГО КЛАСТЕРА

О. Р. Баран, Р. Р. Левицький
Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України
вул. 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–Ґріфітса на простій кубічній ґратці. Побудовано фазові діяграми та отримано температурні залежності дипольного і квадрупольного моментів при різних наборах параметрів моделі (при таких, де достатньо розглядати однопідґраткову задачу).

Ключові слова: модель Блюма–Емері–Ґріфітса, фазові переходи, кластерне наближення.

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

I. ВСТУП

Модель Блюма–Емері–Ґріфітса (БЕҐ), що відповідає ізинґівській 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 нею 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 гамільтоніяні моделі тензорних членів обмінної (біквадратна взаємодія) та необмінної (однойонна анізотропія) природи, а також багата фазова діяграма зумовлюють і суто теоретичний інтерес до цієї моделі.

Модель БЕҐ досліджували різноманітними методами: в наближенні молекулярного поля (НМП) [1–4,7], у різних варіянтах теорії ефективних полів [8–11], у наближенні двочастинкового кластера (НДК) [12–14], на ґратці 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 зауважити, що при нульовій однойонній анізотропії НДК (результати якого узгоджуються з результатами для ґратки Бете та наближення константи зв'язку), на відміну від НМП, коректно реаґує на конкуренцію феромагнетної білінійної взаємодії з антиферомагнетною біквадратною взаємодією: отримані в НДК фазові діяграми для різних типів ґраток [12,15] якісно узгоджуються з результатами моделювання МК [19,20]. Стосовно праць [12,20] треба, однак, ще зауважити, що наведені в них фазові діяграми на площині температура — біквадратна взаємодія при нульовій однойонній анізотропії неповні: відсутня лінія, яка розділяє квадрупольну та нестійку квадрупольну фази, оскільки в цих працях розглянуто лише однопідґраткову задачу.

Гамільтоніян моделі БЕҐ має вигляд:

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

де $S_i = 0, \pm 1$; D_i — однойонна анізотропія; K та K' — білінійна та біквадратна короткосяжні взаємодії; i пробігає вузли ґратки, δ пробігає найближчі сусіди до вузла i. У моделі БЕҐ на тривимірних ґратках 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 БЕҐ на простій кубічній ґратці в НДК при таких значеннях антиферомагнетних біквадратної взаємодії та однойонної 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 підґратку. Таку задачу аналізували для моделі на ґратці 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 діяграми та деякі висновки неправильні.

II. НАБЛИЖЕННЯ ДВОЧАСТИНКОВОГО КЛАСТЕРА

Вільна енерґія моделі БЕҐ в НДК має вигляд [12–14]:

$$F = -k_{\rm B}TN[(1-z)\ln Z_1 + \frac{z}{2}\ln Z_{12}]; \quad (2.1)$$

$$Z_1 = 2e^{\beta\tilde{æ}'}\cdot\cosh(\beta\tilde{æ}) + 1; \qquad (2.2)$$
$$Z_{12} = 2e^{\beta(2\tilde{\tilde{æ}}'+K')}[e^{\beta K}\cdot\cosh(2\beta\tilde{\tilde{æ}}) + e^{-\beta K}] + 4e^{\beta\tilde{\tilde{æ}}'}\cdot\cosh(\beta\tilde{\tilde{æ}}) + 1.$$

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

$$\tilde{æ} = z\varphi, \qquad \tilde{æ}' = D + z\varphi', \qquad (2.3)$$
$$\tilde{\tilde{æ}} = (z-1)\varphi, \qquad \tilde{\tilde{æ}}' = D + (z-1)\varphi'.$$

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

$$\frac{e^{\beta\tilde{æ}'}\cdot\sinh(\beta\tilde{æ})}{Z_1} = \frac{e^{\beta(2\tilde{\tilde{æ}}'+K'+K)}\cdot\sinh(2\beta\tilde{\tilde{æ}}) + e^{\beta\tilde{\tilde{æ}}'}\cdot\sinh(\beta\tilde{\tilde{æ}})}{Z_{12}}; \qquad (2.4)$$
$$\frac{e^{\beta\tilde{æ}'}\cdot\cosh(\beta\tilde{æ})}{Z_1} = \frac{e^{\beta(2\tilde{\tilde{æ}}'+K')}[e^{\beta K}\cdot\cosh(2\beta\tilde{\tilde{æ}}) + e^{-\beta K}] + e^{\beta\tilde{\tilde{æ}}'}\cdot\cosh(\beta\tilde{\tilde{æ}})}{Z_{12}},$$

а для намагнечености $m = \langle S\rangle$ та квадрупольного моменту $q = \langle S^2\rangle$ — вирази:

$$m = \frac{2e^{\beta\tilde{æ}'}\cdot\sinh(\beta\tilde{æ})}{Z_1}; \quad q = \frac{2e^{\beta\tilde{æ}'}\cdot\cosh(\beta\tilde{æ})}{Z_1}. \qquad (2.5)$$

Слід нагадати [7,15,17,18,20], що наведені вище вирази можуть бути використані не в усьому просторі мікропараметрів моделі $k' \in]-\infty, +\infty[$, $d \in]-\infty, +\infty[$ ($k' = K'/K$, $d = D/K$). Так, для простої кубічної ґратки при наборах параметрів з реґіону $k' < -1$ та $d_1 < d < -6k' - 6$ (значення d_1 залежить від k': $d_1 = 0, -0.6, -1.2$ для $k' = -1, -2.25, -3.85$ відповідно) існують двопідґраткові фази.

Зупинімося тепер на результатах числового дослідження. Використаймо термінологію праці [15]: (F) — феромагнетна фаза ($m \neq 0$, $q \neq \frac{2}{3}$); (Q) — квадрупольна фаза ($m = 0$, $q \neq \frac{2}{3}$).

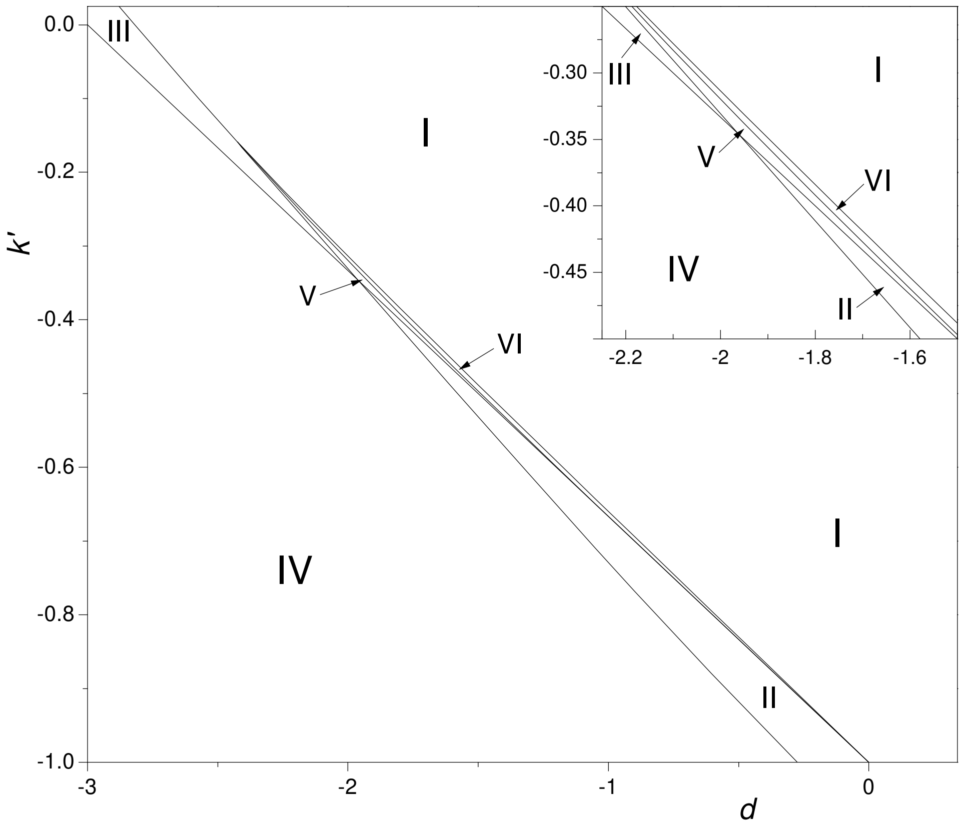

Рис. 1. Проекція фазової діяграми на (d, k') площину.

Проекція отриманої в НДК фазової діяграми моделі БЕҐ на простій кубічній ґратці на (d, k') площині при $-1 < k' \leq 0$ складається із шести реґіонів (див. рис. 1): I — $(Q) \to (F)$ фазовий перехід другого роду (який відбувається зі зменшенням температури); II — каскад фазових переходів вхід-вихід $(Q)\to(F)\to(Q)$, обидва ФП другого роду; III — $(Q) \to (F)$ ФП першого роду; IV — ФП відсутній; V — каскад ФП подвійний вхід-вихід $(Q)\to(F)\to(Q)\to(F)$ і тільки нижній перехід є першого роду; VI — каскад ФП подвійний вхід-вихід $(Q)\to(F)\to(Q)\to(F)$ і тільки верхній перехід є другого роду. Зауважимо, що реґіон III та реґіон IV, а також реґіон V та регіон II розділені лінією $k' = -1 - d/3$ (тою самою, яка в основному стані розділяє реґіони чистого 0 впорядкування та феромагнетного впорядкування [15]).

На рис. 2 зображено фазові діяграми на площині (k', t) при різних значеннях d (використовуємо приведену температуру $t = k_{\mathrm{B}}T/(zK)$). З цього рисунка можна бачити основний аспект температурних фазових переходів, які передбачає НДК в досліджуваній моделі при $-1 < k' \leq 0$. Розгляньмо для прикладу випадок $d = -1.8$ (див. також рис. 3). При $k' > -0.384$ в системі зі зменшенням температури є тільки один фазовий перехід $(Q)\to(F)$ другого роду. При $k' \in [-0.4, -0.384]$ відбувається каскад фазових переходів подвійний вхід-вихід $(Q)\to(F)\to(Q)\to(F)$, 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-вихід $(Q)\to(F)\to(Q)$, причому обидва переходи другого роду.

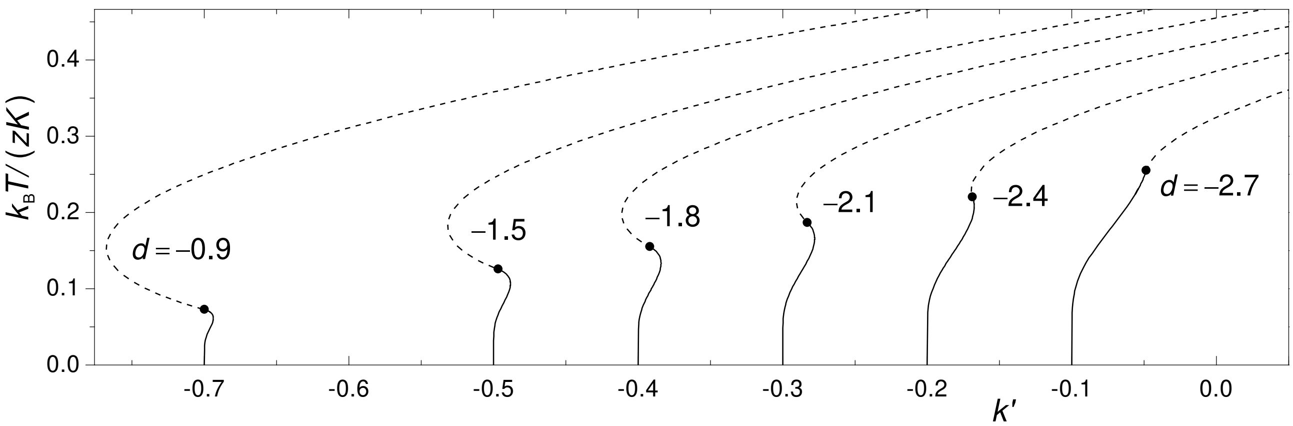

Рис. 2. Фазові діяграми на (k', t) площині при різних значеннях d. Штрих та суцільна лінія відповідають фазовим переходам другого та першого роду відповідно. Кружечки відповідають трикритичним точкам.

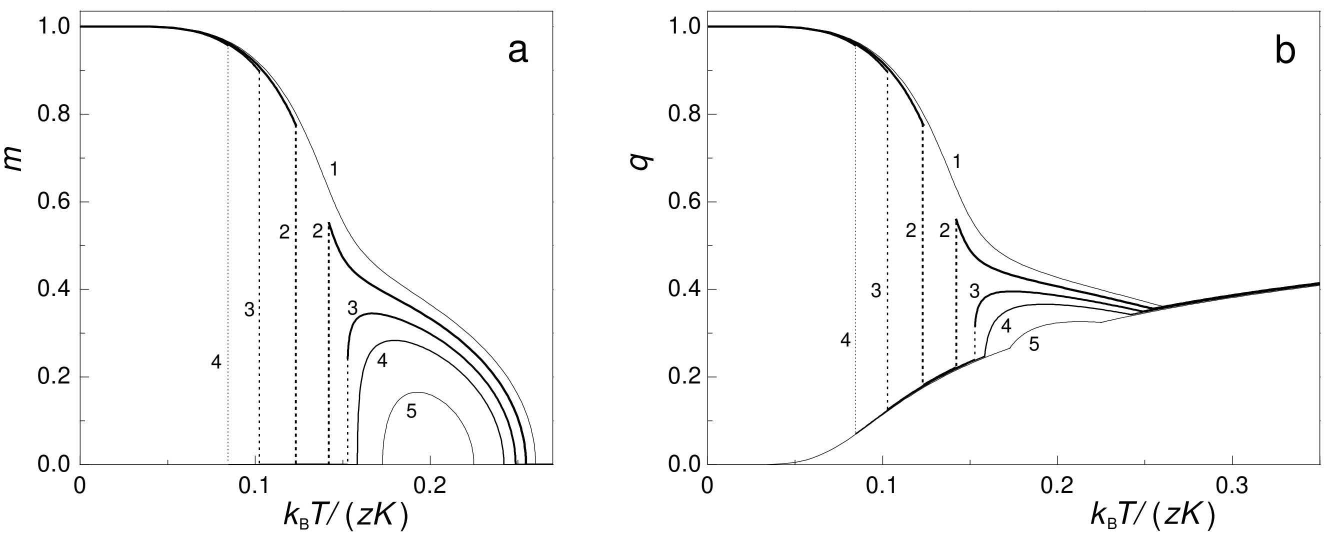

Рис. 3. Температурні залежності m (a) і q (b) при $d = -1.8$ та різних значеннях параметра k': 1 — $k' = -0.38$; 2 — $k' = -0.385$; 3 — $k' = -0.39$; 4 — $k' = -0.395$; 5 — $k' = -0.405$.

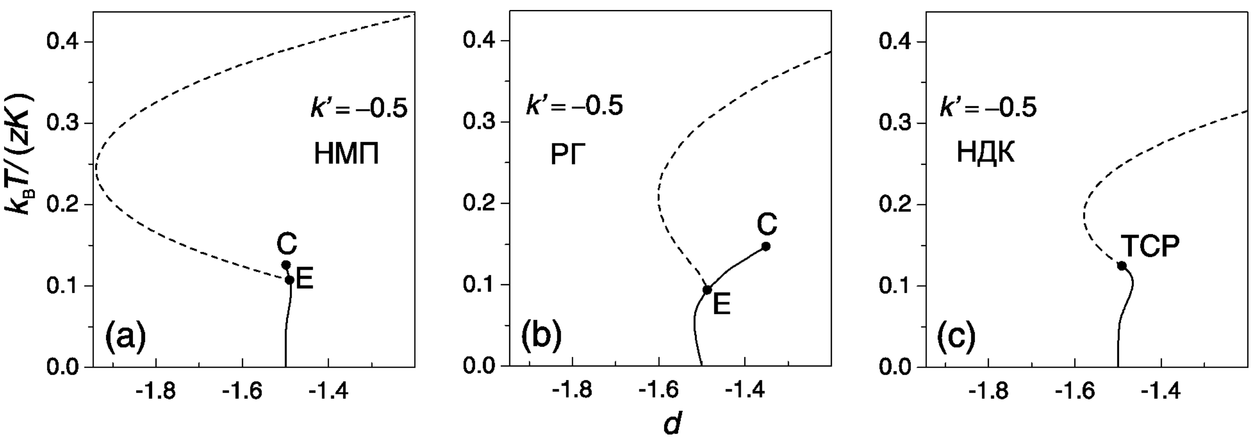

Рис. 4. Фазові діяграми на (d, t) площині при $k' = -0.5$. Результати НМП (a) [7], теорії РГ (b) [18] і НДК (c). Штрих та суцільна лінія відповідають фазовим переходам другого та першого роду відповідно. Кружечки відповідають критичній кінцевій точці E, критичній точці C (всередині феромагнітної фази)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

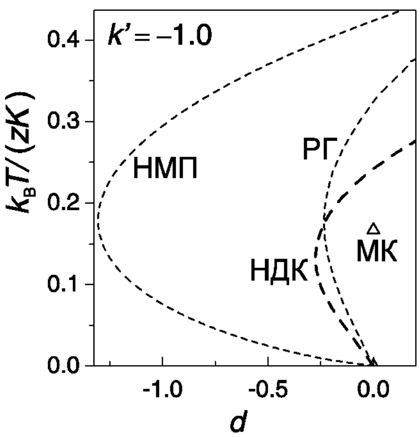

Рис. 5. Фазові діяграми на (d, t) площині при $k' = -1.0$. Результати НМП [7], теорії РГ [18] і НДК. Штрих відповідає фазовим переходам другого роду. Трикутники відповідають температурам фазових переходів при $k' = -1.0$, $d = 0$, отриманих моделюванням Монте–Карло [19].

Наведені в праці [15] аналогічні фазові діяграми, 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 $k' = k'_{\text{TCP}} + 0$ у системі є тільки один фазовий перехід $(Q) \to (F)$ другого роду). Автори праці [15] роблять висновок, що при наборах параметрів, коли в системі зі зменшенням температури відбувається каскад фазових переходів подвійний вхід-вихід $(Q) \to (F) \to (Q) \to (F)$, тільки нижній перехід 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 діяграм на (d, t) площині зі зміною k' подібна (що легко бачити з рис. 1) до зміни топології фазових діяграм на (k', t) площині зі зміною d (рис. 2). В НДК при $-1 < k' < k'_{R,\text{НДК}}$ ($k'_{R,\text{НДК}} \approx -0.16$) фазові діяграми на (d, t) площині мають топологію подвійний вхід-вихід із трикритичною точкою (рис. 4.c). В НМП [7] фазові діяграми на (d, t) площині мають топологію подвійний вхід-вихід з трикритичною точкою тільки при $-0.18 < k' < k'_{R,\text{НМП}}$ ($k'_{R,\text{НМП}} < 0$, його значення в праці [7] не подано), причому, як і в НДК, середній фазовий перехід може бути і першого, і другого роду. При $-1 < k' < -0.18$ фазові діяграми 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 знаходиться всередині феромагнетної фази [7]. Такий результат НМП дещо нагадує результат теорії ренормалізаційних груп [18]. На отриманій у [18] фазовій діяграмі 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 $(F) \to (Q)$ (зі зменшенням температури), лежить вище від частини, що відповідає переходам $(Q) \to (F)$. А в методі РГ [18] — навпаки: частина лінії фазового переходу першого роду, яка відповідає переходам $(F) \to (Q)$, лежить нижче від частини, що відповідає переходам $(Q) \to (F)$. В НМП критична точка C лежить лівіше від критичної кінцевої точки E, а на фазовій діяграмі, 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 $(Q) \to (F)$ другого роду, одержана в НДК, значно ближча до відповідної температури, отриманої методом Монте-Карло [19], аніж пораховані методом РГ [18] та в НМП [7].

III. ВИСНОВКИ

Для моделі Блюма–Емері–Ґріфітса на простій кубічній ґратці в НДК побудовані фазові діяграми при таких наборах параметрів моделі, коли в системі зі зміною температури відбувається каскад фазових переходів подвійний вхід-вихід $(Q) \to (F) \to (Q) \to (F)$. 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 ґратки Бете) допущена неточність і, як результат, робиться висновок, що при наборах параметрів моделі, за яких у системі відбувається каскад фазових переходів подвійний вхід-вихід $(Q) \to (F) \to (Q) \to (F)$, 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] С. І. 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).