

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-99-07U

І.В. Стасюк, Ю.І.Дубленич

ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ ТА РОЗДІЛЕННЯ ФАЗ У
ПСЕВДОСПІН-ЕЛЕКТРОННІЙ МОДЕЛІ З ПРЯМОЮ
ВЗАЄМОДІЄЮ АНТИСЕГНЕТОЕЛЕКТРИЧНОГО ТИПУ

УДК: 538.945

PACS: 74.65+n,71.45.Gm

Фазові переходи та розділення фаз у псевдоспін-електронній моделі з прямою взаємодією антисеґнетоелектричного типу

І.В. Стасюк, Ю.І.Дубленич

Анотація. Досліджено рівноважні стани псевдоспін-електронної моделі з прямою взаємодією між псевдоспінами антисеґнетоелектричного типу. Проведено розрахунки псевдоспінових параметрів порядку, термодинамічного потенціалу та вільної енергії. Проаналізовано фазові переходи в системі в режимах постійних значень хемічного потенціалу (переходи зі стрибкоподібними змінами середніх значень псевдоспінів) та постійної середньої концентрації (розділення на фази з різними концентраціями та значеннями параметрів порядку).

Phase transitions and phase separation in a pseudospin-electron model with direct interaction of antiferroelectric type

I.V. Stasyuk, Yu.I. Dublanych

Abstract. Equilibrium states of a pseudospin-electron model with interaction of antiferroelectric type between pseudospins are studied. Calculations of the pseudospin order parameters, thermodynamic potential and free energy are performed. An analysis of phase transitions in the system is made in two different regimes: at constant values of chemical potential (transitions with jump-like changes of mean values of pseudospins) and at constant mean electron concentration (separation into phases with different concentrations and values of the order parameters).

1. Вступ

Для теоретичного опису ангармонічних коливань так званих апексних іонів кисню O_4 у високотемпературному надпровіднику $YBa_2Cu_3O_7$ було запропоновано псевдоспін-електронну модель, яку називають також моделлю Мюллера. В ній спочатку було враховано два види одноузлової взаємодії: електрон-електронну (Хаббардова кореляція) та псевдоспін-електронну. Крім того, було розглянуто можливість перенесення електронів, а також тунелювання частинок у подвійних потенціальних ямах. Асиметрію локального ангармонічного потенціалу враховували як поздовжнє поле, що діє на псевдоспіни.

На основі цієї моделі було розглянуто ефективні взаємодії, які приводять до локального притягання між електронами [1], розраховано парні кореляційні функції надпровідного типу [2] та діелектричну сприйнятливості [3]. Виявлено тенденцію до нестійкостей сегнетоелектричного типу, які пов'язано з впливом електронного перенесення на ефективну взаємодію між псевдоспінами. В роботах [4,5] модель узагальнено на двоїдгіратковий випадок, характерний для структур типу $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$. Поздовжнє поле, що діє на псевдоспіни, має при цьому протилежні знаки на різних підгіратках. За відсутності електронного перенесення це робить модель аналогічною до моделі Міцуї, відомої в теорії сегнетоелектриків. Фазові діаграми, побудовані для цього випадку, виявили існування, крім фази з впорядкуванням псевдоспінів сегнетоелектричного типу, неполярних фаз, де псевдоспіни, впорядковані в кожній з підгіраток, в сумі компенсуються [5].

Встановлено суттєві відмінності в поведінці псевдоспін-електронної моделі в режимах постійної електронної концентрації n та постійного хемічного потенціалу μ . Більш детально це питання вивчено в роботі [6], де в наближенні середнього поля проаналізовано термодинамічні властивості псевдоспін-електронної моделі з додатковим урахуванням прямої взаємодії між псевдоспінами сегнетоелектричного типу за відсутності електронного перенесення. Виявлено фазові переходи першого роду з стрибкоподібними змінами середнього значення псевдоспіна $\langle S_z \rangle$ та концентрації електронів n в режимі постійного значення хемічного потенціалу, а також фазового розшарування на стани з різними $\langle S_z \rangle$ і n в режимі заданої середньої електронної концентрації.

Мета даної роботи – узагальнити розгляд, проведений в [6], на випадок псевдоспінних взаємодій антисегнетоелектричного типу.

Модель, яка тут виникає, відповідає у певній мірі двоїдгіратковому опису кисневих підгіраток в $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, однак поле асиметрії залишається однаковим для всіх псевдоспінів. Буде побудовано рівняння для параметрів порядку, розраховано основні термодинамічні функції (термодинамічний потенціал Ω та вільну енергію F), досліджено рівноважні стани системи в режимах $\mu = const$ та $n = const$, побудовано фазові діаграми.

2. Термодинамічні функції в наближенні середнього поля

Розглянемо псевдоспін-електронну систему, яку описує гамільтоніан

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z + \sum_i H_i, \quad (1)$$

де однокомірковий гамільтоніан H_i має вигляд

$$H_i = U n_{i\downarrow} n_{i\uparrow} - \mu (n_{i\downarrow} + n_{i\uparrow}) + g (n_{i\downarrow} + n_{i\uparrow}) S_i^z - h S_i^z. \quad (2)$$

Тут J_{ij} описує пряму взаємодію між псевдоспінами S_i^z та S_j^z ,

μ – хемічний потенціал,

g – константа псевдоспін-електронної взаємодії,

U – Хаббардова кореляція,

h – поздовжнє зовнішнє поле або асиметрія локального ангармонічного потенціалу.

У випадку взаємодії J_{ij} антисегнетоелектричного типу доцільно розбити кристалічну ґратку на дві підгіратки A та B , що відповідає подвоєнню періоду вихідної структури. У цьому випадку гамільтоніан (1) можна переписати у вигляді

$$H = - \sum_i^A \sum_j^B J_{iAjB} S_{iA}^z S_{jB}^z - \frac{1}{2} \sum_i^A \sum_j^A J_{iAjA} S_{iA}^z S_{jA}^z - \frac{1}{2} \sum_i^B \sum_j^B J_{iBjB} S_{iB}^z S_{jB}^z + \sum_i^A H_{iA} + \sum_i^B H_{iB}. \quad (3)$$

Надалі розглядатимемо наближення середнього поля, тобто

$$S_{iA}^z S_{jB}^z \approx -\eta_A \eta_B + \eta_A S_{jB}^z + \eta_B S_{iA}^z \quad (4)$$

і т.п., де $\eta_A = \langle S_{iA}^z \rangle$, $\eta_B = \langle S_{jB}^z \rangle$.

У цьому наближенні гамільтоніян матиме вигляд

$$\begin{aligned}
H &= \sum_i^A \tilde{H}_{iA} + \sum_j^B \tilde{H}_{jB} + N \left\{ \frac{J_1}{2} \eta_A \eta_B + \frac{J_2}{4} (\eta_A^2 + \eta_B^2) \right\}; \\
\tilde{H}_{iA} &= -\mu(n_{iA\downarrow} + n_{iA\uparrow}) + U n_{iA\downarrow} n_{iA\uparrow} + g(n_{iA\downarrow} + n_{iA\uparrow}) S_{iA}^z - \\
&\quad - (h + J_1 \eta_B + J_2 \eta_A) S_{iA}^z, \\
\tilde{H}_{jB} &= -\mu(n_{jB\downarrow} + n_{jB\uparrow}) + U n_{jB\downarrow} n_{jB\uparrow} + g(n_{jB\downarrow} + n_{jB\uparrow}) S_{jB}^z - \\
&\quad - (h + J_1 \eta_A + J_2 \eta_B) S_{jB}^z,
\end{aligned} \tag{5}$$

$$\text{де } J_1 = \sum_i^A J_{iAjB} = \sum_j^B J_{iAjB},$$

$$J_2 = \sum_i^A J_{iAjA} = \sum_j^B J_{iBjB},$$

N – загальна кількість псевдоспінів.

Вектори $|n_{iA\uparrow}, n_{iA\downarrow}, S_{iA}^z\rangle$ та $|n_{jB\uparrow}, n_{jB\downarrow}, S_{jB}^z\rangle$ утворюють повні бази для гамільтоніанів \tilde{H}_{iA} та \tilde{H}_{jB} відповідно, а їх прямих добуток – повний базис для гамільтоніяна H , в якому цей гамільтоніян діагональний:

$$\begin{aligned}
|1\rangle_A &= |0, 0, \frac{1}{2}\rangle_A & |\tilde{1}\rangle_A &= |0, 0, -\frac{1}{2}\rangle_A \\
|2\rangle_A &= |1, 1, \frac{1}{2}\rangle_A & |\tilde{2}\rangle_A &= |1, 1, -\frac{1}{2}\rangle_A \\
|3\rangle_A &= |0, 1, \frac{1}{2}\rangle_A & |\tilde{3}\rangle_A &= |0, 1, -\frac{1}{2}\rangle_A \\
|4\rangle_A &= |1, 0, \frac{1}{2}\rangle_A & |\tilde{4}\rangle_A &= |1, 0, -\frac{1}{2}\rangle_A,
\end{aligned} \tag{6}$$

і аналогічно для підґратки В.

Відповідні власні значення:

$$\begin{aligned}
\lambda_1^A &= -\frac{1}{2}(h + J_1 \eta_B + J_2 \eta_A) & \lambda_{\tilde{1}}^A &= \frac{1}{2}(h + J_1 \eta_B + J_2 \eta_A) \\
\lambda_2^A &= -2\mu + U + g + \lambda_1^A & \lambda_{\tilde{2}}^A &= -2\mu + U - g + \lambda_1^A \\
\lambda_3^A &= -\mu + \frac{g}{2} + \lambda_1^A = \lambda_4^A & \lambda_{\tilde{3}}^A &= -\mu - \frac{g}{2} + \lambda_1^A = \lambda_{\tilde{4}}^A
\end{aligned} \tag{7}$$

$$\begin{aligned}
\lambda_1^B &= -\frac{1}{2}(h + J_1 \eta_A + J_2 \eta_B) & \lambda_{\tilde{1}}^B &= \frac{1}{2}(h + J_1 \eta_A + J_2 \eta_B) \\
\lambda_2^B &= -2\mu + U + g + \lambda_1^B & \lambda_{\tilde{2}}^B &= -2\mu + U - g + \lambda_1^B \\
\lambda_3^B &= -\mu + \frac{g}{2} + \lambda_1^B = \lambda_4^B & \lambda_{\tilde{3}}^B &= -\mu - \frac{g}{2} + \lambda_1^B = \lambda_{\tilde{4}}^B.
\end{aligned}$$

Статистична сума для однієї комірки

$$Z_i = \left(\sum_r e^{-\beta \lambda_r^A} \right) \left(\sum_r e^{-\beta \lambda_r^B} \right) e^{-\beta (J_1 \eta_A \eta_B + \frac{J_2}{2} (\eta_A^2 + \eta_B^2))}. \tag{8}$$

Загальна статистична сума

$$Z = Z_i^{N/2}. \tag{9}$$

Термодинамічний потенціал в розрахунку на одну комірку

$$\Omega = -\theta \ln Z_i. \tag{10}$$

Розгляньмо умови рівноваги в режимі $\mu = const$:

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \eta_A} \right)_{T, \mu, h} = 0, \\ \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \eta_B} \right)_{T, \mu, h} = 0. \end{cases} \tag{11}$$

З цих умов дістаємо рівняння для параметрів порядку η_A , η_B :

$$\begin{cases} \eta_A + \frac{1}{2} = \frac{1}{1 + \phi e^{-\beta(h + J_1 \eta_B + J_2 \eta_A)}}, \\ \eta_B + \frac{1}{2} = \frac{1}{1 + \phi e^{-\beta(h + J_1 \eta_A + J_2 \eta_B)}}, \end{cases} \tag{12}$$

де

$$\phi = \frac{1 + e^{-\beta(-2\mu + U - g)} + 2e^{-\beta(-\mu - \frac{g}{2})}}{1 + e^{-\beta(-2\mu + U + g)} + 2e^{-\beta(-\mu + \frac{g}{2})}}. \tag{13}$$

Використавши ці рівняння, зможемо записати термодинамічний потенціал у вигляді

$$\begin{aligned}
\Omega &= J_1 \eta_A \eta_B + \frac{J_2}{2} (\eta_A^2 + \eta_B^2) + \\
&+ \theta \ln \left\{ \left(\eta_A^2 - \frac{1}{2} \right) \left(\eta_B^2 - \frac{1}{2} \right) \right\} - \\
&- \theta \ln \left(1 + e^{-\beta(-2\mu + U + g)} + 2e^{-\beta(-\mu + \frac{g}{2})} \right) - \\
&- \theta \ln \left(1 + e^{-\beta(-2\mu + U - g)} + 2e^{-\beta(-\mu - \frac{g}{2})} \right).
\end{aligned} \tag{14}$$

Середнє число електронів на комірку знайдемо, продиференціювавши по μ вираз (10):

$$\begin{aligned}
n = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} &= 2 \left(\frac{e^{-\beta \lambda_2^A} + e^{-\beta \lambda_{\tilde{2}}^A} + e^{-\beta \lambda_3^A} + e^{-\beta \lambda_{\tilde{3}}^A}}{\sum_r e^{-\beta \lambda_r^A}} + \right. \\
&+ \left. \frac{e^{-\beta \lambda_2^B} + e^{-\beta \lambda_{\tilde{2}}^B} + e^{-\beta \lambda_3^B} + e^{-\beta \lambda_{\tilde{3}}^B}}{\sum_r e^{-\beta \lambda_r^B}} \right).
\end{aligned} \tag{15}$$

Підставивши значення λ_2^A, λ_r^B , після простих перетворень здобуємо:

$$4 - n = f(A, B) + f(B, A), \quad (16)$$

де

$$f(A, B) = \left(\frac{1 + e^{-\beta(-\mu - \frac{g}{2})}}{1 + e^{-\beta(-2\mu + U - g)} + 2e^{-\beta(-\mu - \frac{g}{2})}} e^{-\beta(h + J_1\eta_B + J_2\eta_A)} \phi + \frac{1 + e^{-\beta(-\mu + \frac{g}{2})}}{1 + e^{-\beta(-2\mu + U + g)} + 2e^{-\beta(-\mu + \frac{g}{2})}} \right) \frac{2}{1 + e^{-\beta(h + J_1\eta_B + J_2\eta_A)}}.$$

Використавши рівняння (12), остаточно дістанемо для n такий вираз:

$$n = 4 - 2\phi_-(1 - (\eta_A + \eta_B)) - 2\phi_+(1 + \eta_A + \eta_B), \quad (17)$$

де

$$\phi_- = \frac{1 + e^{-\beta(-\mu - \frac{g}{2})}}{1 + e^{-\beta(-2\mu + U - g)} + 2e^{-\beta(-\mu - \frac{g}{2})}}, \quad (17a)$$

$$\phi_+ = \frac{1 + e^{-\beta(-\mu + \frac{g}{2})}}{1 + e^{-\beta(-2\mu + U + g)} + 2e^{-\beta(-\mu + \frac{g}{2})}}. \quad (17b)$$

3. Граничний випадок нульової температури

В границі абсолютного нуля температури систему рівнянь (12) можна розв'язати аналітично. Розглянемо спочатку випадок $g = 0$, тобто псевдоспінову систему антисегнетоелектричного типу, яка не взаємодіє з електронами. Розв'язки системи (12) η_A, η_B як функції зовнішнього поля h та термодинамічний потенціал Ω наведено в таблиці 1. Перші три рядки таблиці відповідають розв'язкам $\eta_A = \eta_B$, які існують завжди, а решта рядків дають розв'язки, які існують тільки за умови $J_2 > J_1$. Вигляд функцій $\eta_A(h), \eta_B(h), \frac{\eta_A + \eta_B}{2}, \frac{\eta_A - \eta_B}{2}$ та $\Omega(h)$ визначають співвідношення між величинами $\pm \frac{J_1 - J_2}{2}, \pm \frac{J_1 + J_2}{2}$, тобто між параметрами J_1 і J_2 . Є вісім основних типів таких залежностей відповідно до розташування значень J_1 і J_2 в межах різних секторів на площині (J_1, J_2) , див. рис. 1. Графіки згаданих функцій за J_1 і J_2 , взятих в центрах дуг кола одиничного радіуса в межах секторів, наведено на рис. 2.

У випадку, коли константа взаємодії g відмінна від нуля, криві $\eta_{A,B}(h), \frac{\eta_A + \eta_B}{2}, \frac{\eta_A - \eta_B}{2}$ зміщуються вздовж осі абсцис вправо на

$\theta \ln \phi$, а крива $\Omega(h)$ – під кутом до осей на вектор

$$\begin{aligned} & \left(\theta \ln \phi; -\theta \ln \left(1 + e^{-\beta(-2\mu + U - g)} + 2e^{-\beta(-\mu - \frac{g}{2})} \right) - \right. \\ & \left. - \theta \ln \left(1 + e^{-\beta(-2\mu + U + g)} + 2e^{-\beta(-\mu + \frac{g}{2})} \right) - 4\theta \ln 2 \right). \quad (18) \end{aligned}$$

Знайдемо границю цього вектора, якщо $T \rightarrow 0$. Виходячи з того, що $U > 0$, отримуємо:

$$\begin{aligned} & \lim_{T \rightarrow 0} \left(\theta \ln \left(1 + e^{-\beta(-2\mu + U \mp g)} + 2e^{-\beta(-\mu \mp \frac{g}{2})} \right) \right) = \\ & = \begin{cases} 0, & \mu \leq \mp \frac{g}{2} \\ \mu \pm \frac{g}{2}, & \mp \frac{g}{2} < \mu < \mp \frac{g}{2} + U \\ 2\mu - U \pm g, & \mu \geq \mp \frac{g}{2} + U. \end{cases} \quad (19) \end{aligned}$$

Границю вектора (18), коли $T \rightarrow 0$, знайдемо спочатку у випадку $0 < U < g$. Тоді $-\frac{g}{2} < -\frac{g}{2} + U < \frac{g}{2} < \frac{g}{2} + U$ і для вектора зміщення маємо:

$$\begin{aligned} & (0, 0), & \mu \leq -\frac{g}{2} \\ & \left(\mu + \frac{g}{2}, \mu + \frac{g}{2} \right), & -\frac{g}{2} < \mu \leq -\frac{g}{2} + U \\ & (2\mu - U + g, 2\mu - U + g), & -\frac{g}{2} + U < \mu \leq \frac{g}{2} \\ & \left(\mu - U + \frac{3g}{2}, 3\mu - U + \frac{g}{2} \right), & \frac{g}{2} < \mu \leq \frac{g}{2} + U \\ & (2g, 4\mu - 2U), & \mu > \frac{g}{2} + U. \end{aligned} \quad (20)$$

Якщо ж $0 < g < U$, то $-\frac{g}{2} < \frac{g}{2} < -\frac{g}{2} + U < \frac{g}{2} + U$, і для вектора зміщення одержуємо:

$$\begin{aligned} & (0, 0), & \mu \leq -\frac{g}{2} \\ & \left(\mu + \frac{g}{2}, \mu + \frac{g}{2} \right), & -\frac{g}{2} < \mu \leq \frac{g}{2} \\ & (g, 2\mu), & \frac{g}{2} < \mu \leq -\frac{g}{2} + U \\ & \left(\mu - U + \frac{3g}{2}, 3\mu - U + \frac{g}{2} \right), & -\frac{g}{2} + U < \mu \leq \frac{g}{2} + U \\ & (2g, 4\mu - 2U), & \mu > \frac{g}{2} + U. \end{aligned} \quad (21)$$

Якщо $g < 0$, то в нерівностях для μ треба зробити заміну $-g \leftrightarrow g$.

4. Термодинамічні функції за відмінної від нуля температури

Розглянемо тепер відмінні від нуля температури. Тоді розв'язати систему рівнянь (12) можна в загальному випадку тільки чисельно. На рис. 3 наведено графіки функцій $\eta_{A,B}(h), \frac{\eta_A + \eta_B}{2}, \frac{\eta_A - \eta_B}{2}$; точку

(J_1, J_2) взято з області 2, в якій $-J_2 < J_1 < 0$. Потовщені лінії на графіках відповідають мінімальним значенням Ω (стабільні стани).

Якщо $\eta_A = \eta_B = \eta$, то розв'язки системи (12), яка тоді зводиться до одного рівняння, утворюють криву $h = -\theta \ln \frac{1-2\eta}{1+2\eta} - (J_1 + J_2)\eta + \theta \ln \phi$. За умови $\theta \leq \frac{J_1+J_2}{4}$ функція $h(\eta)$ має на проміжку $-\frac{1}{2} \leq \eta \leq \frac{1}{2}$ екстремуми в точках $\eta = \pm \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{\theta}{J_1+J_2}}$. Відрізок кривої $h(\eta)$ між цими екстремумами відповідає верхній частині "риб'ячого хвоста" на кривій $\Omega(h)$, який зникає, коли $\theta \geq \frac{J_1+J_2}{4}$.

Окрім розв'язків, для яких $\eta_A = \eta_B$, і які існують за будь-якої температури та довільних J_1 і J_2 , система (12) за певних умов має ще й інші розв'язки. Знайдемо ці умови.

Для цього запишемо систему (12) у змінних $x = \eta_A - \eta_B$, $y = \eta_A + \eta_B$:

$$\begin{cases} e^{-\beta(J_1-J_2)x} = \frac{(1+x)^2 - y^2}{(1-x)^2 - y^2}, \\ e^{\beta(J_1+J_2)y} = \phi^2 e^{-2\beta h} \frac{(1+y)^2 - x^2}{(1-y)^2 - x^2}. \end{cases} \quad (22)$$

Перше рівняння системи (22) завжди має розв'язки $(0, y)$, де y - довільне. Крім цього, може існувати ще й інша сім'я розв'язків:

$$\begin{aligned} y &= \pm \sqrt{\frac{(1+x)^2 - (1-x)^2 e^{-\beta(J_1-J_2)x}}{1 - e^{-\beta(J_1-J_2)x}}} = \\ &= \pm \sqrt{1 + x^2 + 2x \frac{1 + e^{-\beta(J_1-J_2)x}}{1 - e^{-\beta(J_1-J_2)x}}} = \pm \sqrt{f(x)}. \end{aligned} \quad (23)$$

Підкореневий вираз $f(x)$ має задовольняти нерівність $0 \leq f(x) \leq 1$, де $|x| \leq 1$.

Цю нерівність достатньо розглянути за $0 \leq x \leq 1$, бо $f(x)$ - парна функція. Якщо $J_1 > J_2$, то права частина нерівності не виконується ні за яких $0 \leq x \leq 1$. Якщо ж $J_1 < J_2$, то права частина виконується за будь-яких $0 \leq x \leq 1$, а ліва - коли $e^{-\frac{\beta(J_1-J_2)}{2}x} \geq \frac{1+x}{1-x}$, $0 \leq x \leq 1$.

Остання нерівність має ненульові розв'язки, якщо

$$\frac{d}{dx} \left(e^{-\frac{\beta(J_1-J_2)}{2}x} \right) \Big|_{x=0} \geq \frac{d}{dx} \left(\frac{1+x}{1-x} \right) \Big|_{x=0},$$

тобто $-\frac{\beta(J_1-J_2)}{2} \geq 2$, звідки $\theta \leq \frac{J_2-J_1}{4}$.

Оскільки вирази $\frac{(1+x)^2 - y^2}{(1-x)^2 - y^2}$ та $\frac{(1+y)^2 - x^2}{(1-y)^2 - x^2}$ завжди мають однакові знаки, то, якщо (x, y) є розв'язком першого рівняння системи (22), завжди знайдеться таке h , за якого (x, y) буде також розв'язком і

другого рівняння. Отже, ми довели, що за умови $\theta < \frac{J_2-J_1}{4}$, система (12) за певних h має як розв'язки типу $\eta_A = \eta_B$, так і розв'язки типу $\eta_A \neq \eta_B$.

Це можна показати й іншим - простішим - способом. Якщо система рівнянь (22) має розв'язки типу (23) ($x \neq 0$), то вони існують в як завгодно малому околі точки $x = 0$. Отже, умова існування таких розв'язків - це існування границі

$$\tilde{y} = \lim_{x \rightarrow 0} y = \pm \sqrt{1 + \frac{4\theta}{J_1 - J_2}}. \quad (24)$$

Підкореневий вираз має зміст, якщо

$$\theta \leq \frac{J_2 - J_1}{4}. \quad (25)$$

В точках $h = -\frac{J_1+J_2}{2}\tilde{y} + \theta \ln \frac{1+\tilde{y}}{1-\tilde{y}} + \theta \ln \phi$ та частина кривої $\Omega(h)$, для якої $\eta_A \neq \eta_B$, доторкається іншої частини, для якої $\eta_A = \eta_B$.

Графіки зміщення $\Delta h = \theta \ln \phi$ за різних температур як функції μ показано на рис. 4. Їх вигляд суттєво залежить від того, яка з величин g та U більша. У випадку $U > g > 0$ існує третє "плато", якого немає, якщо $0 < U < g$.

Відкладаючи по осі аплікату (перпендикулярній до рисунка) одну з величин $\eta_{A,B}$, $\frac{\eta_A + \eta_B}{2}$, $\frac{\eta_A - \eta_B}{2}$, Ω для фіксованого $\mu = 0$ та переміщуючи відповідний графік вздовж кривої $h = \theta \ln \phi$, одержимо складну поверхню. Перетнувши її площиною $h = h_0$, матимемо графік відповідної величини як функції μ за фіксованого $h = h_0$. Вигляд таких графіків (рис. 5) залежить від співвідношення між параметрами U , $\frac{g}{2}$, $\frac{J_1+J_2}{2}$, $\frac{J_1-J_2}{2}$ та від h_0 .

5. Фазові переходи за фіксованих μ і n та розшарування фаз

Тепер перейдемо до проблеми фазових переходів в розглядуваній моделі. Як видно з рис. 2, в областях 4, 5, 6 немає фазових переходів за нульової температури (точок самоперетину кривої $\Omega(h)$, які, до того ж, відповідають стабільним станам), в областях 7,8,1 існує єдиний фазовий перехід в точці $h = 0$ (цей випадок розглянуто в [6]), а в областях 2,3 ($J_1 < 0 < J_2$) маємо два фазові переходи в точках $h = \pm \frac{J_1}{2}$. Перехід в точці $h = \frac{J_1}{2}$ ($J_1 < 0$) - це перехід типу сегнетоелектрик-антисегнетоелектрик, а в точці $h = -\frac{J_1}{2}$ - навпаки.

Зі збільшенням температури ці точки зближуються, а за температури $\theta = \frac{J_2 - J_1}{4}$ зливаються. Фазову діаграму в координатах (h, θ) за нульового значення g зображено на рис. 6.

Якщо g відмінне від нуля, то крива $\theta(h) |_{g=0}$ зміщується вправо на $\lim_{\theta \rightarrow 0} (\theta \ln \phi)$ і деформується:

$$\theta(h) = \theta(h) |_{g=0} + \theta \ln \phi. \quad (26)$$

За своїм характером діаграми, зображені на рис. 6, близькі до отриманих в роботах [4,5]. Область, охоплена кривою рівноваги, відповідає антисегнетоелектричній фазі. Якщо $g \neq 0$, існують (як і у випадку, що розглядався в [4,5]) певні значення поля h , для яких у системі зі зміною температури відбуваються два послідовні фазові переходи. Антисегнетоелектрична фаза є тоді проміжною, за низьких та за високих температур система перебуває в сегнетоелектричному стані.

На рис. 7 зображено фазові діаграми в площині (μ, h) за нульової температури та вказано значення середнього числа n частинок на комірку. Якщо за фіксованого h перетинати лінію фазових переходів, змінюючи μ , то n змінюється стрибком.

Відкладаючи по осі ординат значення n по обидва боки ліній фазових переходів, а по осі абсцис h , одержимо дві замкнуті криві $n_p(h)$ симетричні одна одній відносно точки $(-\frac{J_1}{2} + g, 2)$ (рис. 8). З збільшенням температури ці криві стають гладкішими, обмежені ними фігури вужчають і зближуються, а за максимальної температури фазового переходу першого роду області, охоплені кривими, зникають (рис. 9). Можна записати параметричну формулу цих кривих, де параметром є хемічний потенціал:

$$\begin{cases} h = h_{+|g=0} + \theta \ln \phi, \\ \left[\begin{array}{l} n_p^- = 4 - 2\phi_-(1 - \eta_s^+) - 2\phi_+(1 + \eta_s^+), \\ n_p^+ = 4 - 2\phi_-(1 - \eta_s^-) - 2\phi_+(1 + \eta_s^-). \end{array} \right. \end{cases} \quad (27)$$

Тут $h_{+|g=0}$ - поле, за якого відбувається фазовий перехід, якщо $g = 0$. Тоді $\eta_s = \eta_A + \eta_B$ змінюється стрибкоподібно зі значення η_s^- до η_s^+ .

Кожній точці (h, n) з області, обмеженої такою кривою, відповідає розшарований стан системи - суміш двох фаз - сегнетоелектричної та антисегнетоелектричної - зі значеннями n рівними $n_p(h)$ з цієї кривої.

В цьому легко переконатися, побудувавши графік вільної енергії $F(n)$ (рис. 10) за фіксованого h . Відрізка дотичної до кривої $F(n)$

між точками $n_p^-(h)$, $n_p^+(h)$ відповідає суміш двох фаз - анти- та сегнетоелектричної з $n = n_p^-(h)$ та $n = n_p^+(h)$ відповідно.

6. Результати

Таким чином, в псевдоспін-електронній системі з прямою взаємодією псевдоспінів зі зміною зовнішнього поля h за деяких умов, яким мають задовольняти константи взаємодії J_1 , J_2 між псевдоспинами, до певного значення температури відбуваються два фазові переходи першого роду: перехід сегнетоелектрик - антисегнетоелектрик та навпаки.

Такі ж фазові переходи відбуваються і тоді, коли збільшувати температуру (режим $\mu = const$) за умови, що поле h належить певному інтервалу значень. Якщо ж h виходить за межі цього інтервалу, то відбувається один фазовий перехід антисегнетоелектрик - сегнетоелектрик, або переходів немає взагалі.

За фіксованого значення середнього числа електронів в широкому інтервалі значень поля h існує розшарування системи на дві фази - анти- та сегнетоелектричну - з різними значеннями середнього числа електронів на комірку.

Література

1. Hirsch J.E., Tang S. Effective interactions in an oxygen hole metal. // Phys. Rev. B, 1989, vol. 40, No 4, p. 2179-2186.
2. Frick M., von der Linden W., Morgenstern I., Raedt H. Local anharmonic vibrations, strong correlations and superconductivity. A quantum simulation study. // Z. Phys. B. Condensed Matter, 1990, vol. 81, No 2, p. 327-335.
3. Stasyuk I.V., Shvaika A.M. Electron spectrum and dielectric susceptibility of the Hubbard model with local lattice anharmonicity. // Acta Physica Polonica A, 1994, vol. 85, No 2, p. 363-366.
4. Stasyuk I.V., Shvaika A.M., Danyliv O.D. Dielectric instability and charge ordering in the local anharmonic model of high- T_c superconductors. // Molecular Physics Reports, 1995, vol. 9, p. 61-75.
5. Stasyuk I.V., Velychko O.V. Influence of oxygen nonstoichiometry on localization of apex oxygen in $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ type crystals. // Укр. фіз. журн., 1999, Т. 44, N 6, с. 772-781.
6. Stasyuk I.V., Havrylyuk Yu. Phase transitions in pseudospin-electron model with direct interaction between pseudospins. // Preprint ICMP-98-18E.

Табл. 1. Параметри порядку η_A , η_B та термодинамічний потенціал Ω за нульової температури у випадку $g = 0$.

	η_A	η_B	Ω
$h < \frac{J_1+J_2}{2}$	$-1/2$	$-1/2$	$h - \frac{J_1+J_2}{4}$
$h > -\frac{J_1+J_2}{2}$	$1/2$	$1/2$	$-h - \frac{J_1+J_2}{4}$
$-\frac{ J_1+J_2 }{2} \leq h \leq \frac{ J_1+J_2 }{2}$	$-\frac{h}{J_1+J_2}$	$-\frac{h}{J_1+J_2}$	$\frac{h^2}{J_1+J_2}$
$\frac{J_1-J_2}{2} < h < -\frac{J_1-J_2}{2}$, $J_2 > J_1$	$-1/2$	$1/2$	$\frac{J_1-J_2}{4}$
$\frac{J_1+J_2}{2} < h \leq \frac{J_1-J_2}{2}$, $J_2 < 0, J_2 > J_1$	$-\frac{1}{J_2} (h - \frac{J_1}{2})$	$-1/2$	$\frac{1}{2J_2} (h - \frac{J_1}{2})^2 +$ $+\frac{h}{2} - \frac{J_2}{8}$
$\frac{J_1-J_2}{2} \leq h < \frac{J_1+J_2}{2}$, $J_2 > 0, J_2 > J_1$	$-1/2$	$-\frac{1}{J_2} (h - \frac{J_1}{2})$	
$-\frac{J_1-J_2}{2} \leq h < -\frac{J_1+J_2}{2}$, $J_2 < 0, J_2 > J_1$	$-\frac{1}{J_2} (h + \frac{J_1}{2})$	$1/2$	$\frac{1}{2J_2} (h + \frac{J_1}{2})^2 -$ $-\frac{h}{2} - \frac{J_2}{8}$
$-\frac{J_1+J_2}{2} < h \leq -\frac{J_1-J_2}{2}$, $J_2 > 0, J_2 > J_1$	$1/2$	$-\frac{1}{J_2} (h + \frac{J_1}{2})$	

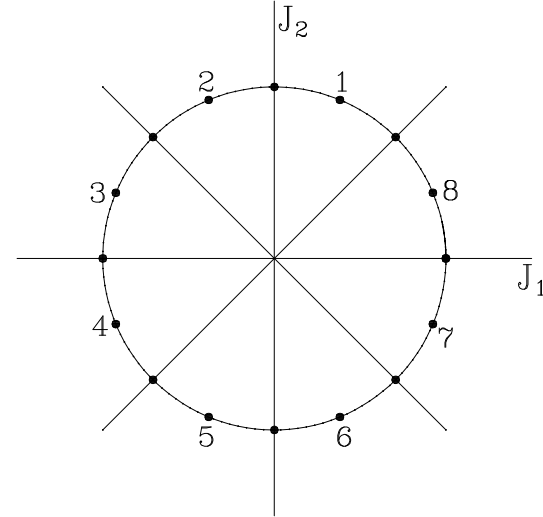
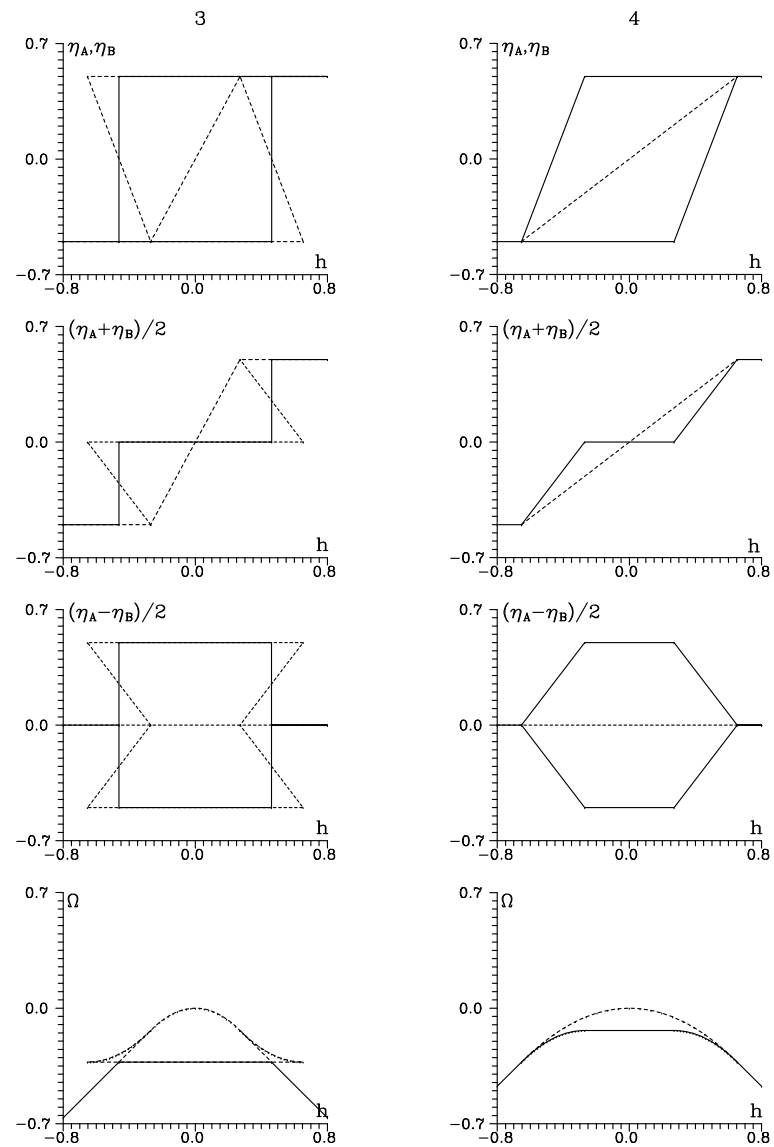
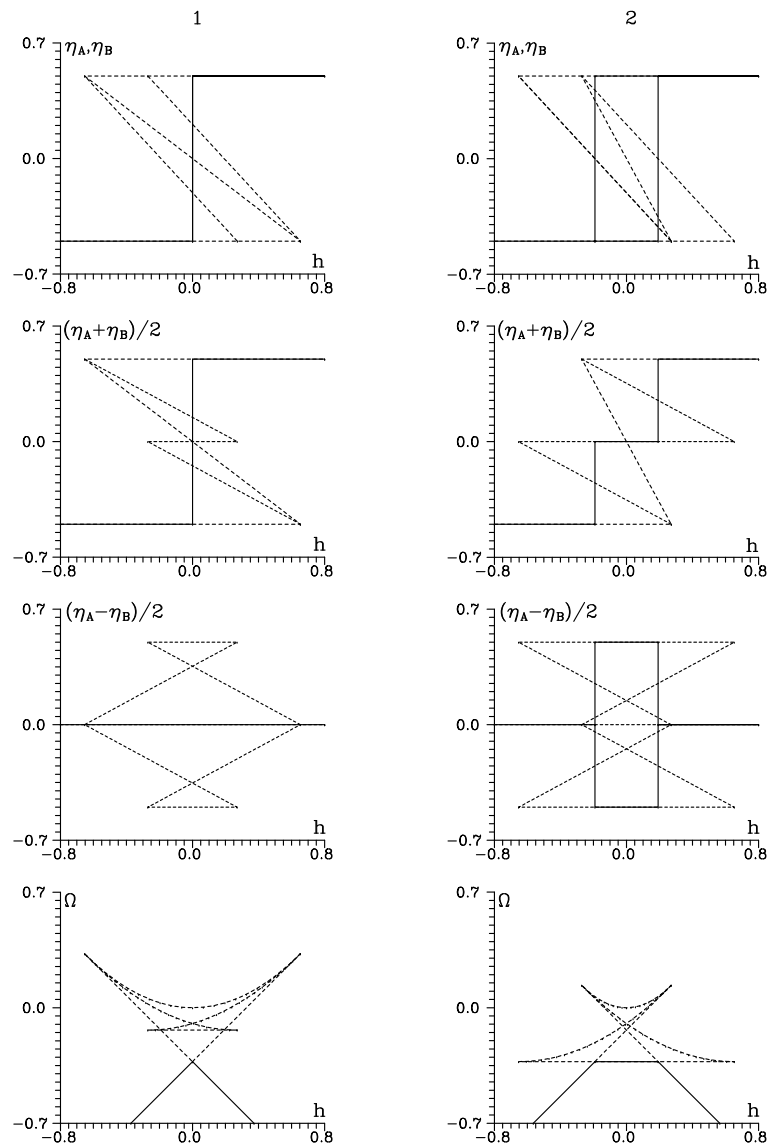


Рис. 1. Розбиття площини (J_1, J_2) на вісім областей, що відповідають різним співвідношенням між параметрами J_1 і J_2 :

- 1) $0 < J_1 < J_2$; 2) $-J_2 < J_1 < 0$; 3) $J_1 < -J_2 < 0$; 4) $J_1 < J_2 < 0$;
- 5) $J_2 < J_1 < 0$; 6) $0 < J_1 < -J_2$; 7) $0 < -J_2 < J_1$; 8) $0 < J_2 < J_1$.

Рис. 2. (С. 13–16). Параметри порядку η_A , η_B , їх півсума і піврізниця та термодинамічний потенціал Ω як функції зовнішнього поля h за нульових температури T та константи псевдоспін-електронної взаємодії g (тут і на наступних рисунках всі енергетичні величини подано у їх відношенні до $\sqrt{J_1^2 + J_2^2}$). Суцільними лініями зображено термодинамічно стійкі стани. Номери над рисунками відповідають точкам на площині (J_1, J_2) (рис. 1).



Продовження рисунка 2.

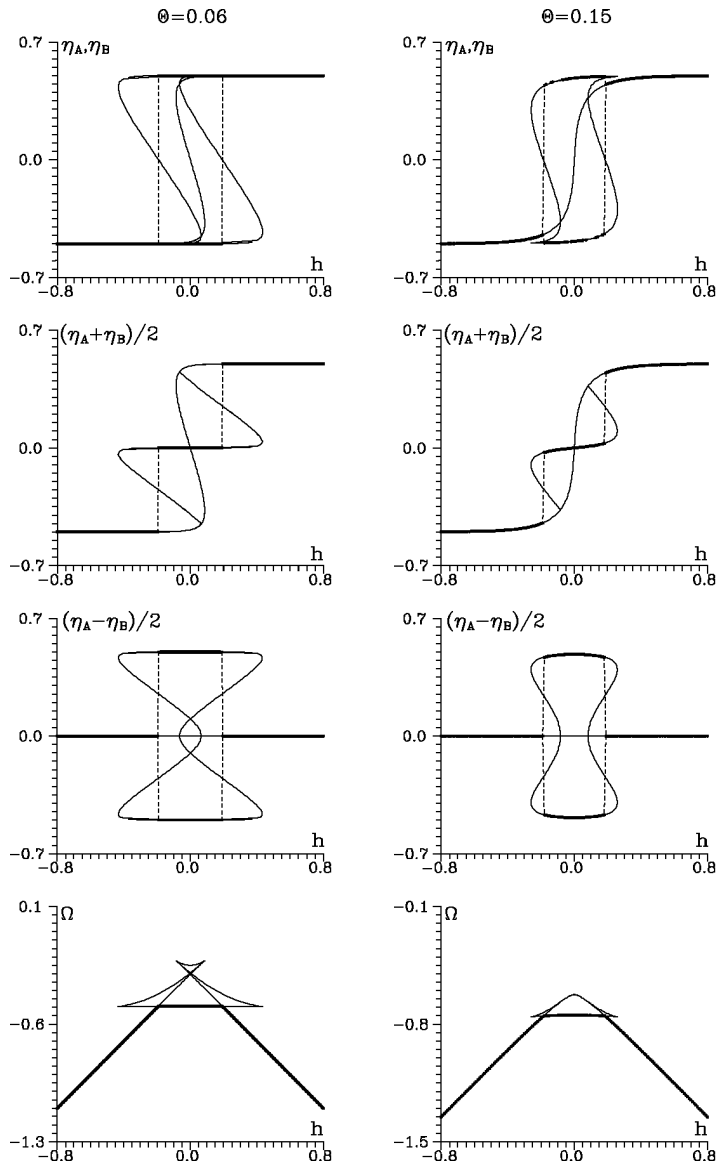
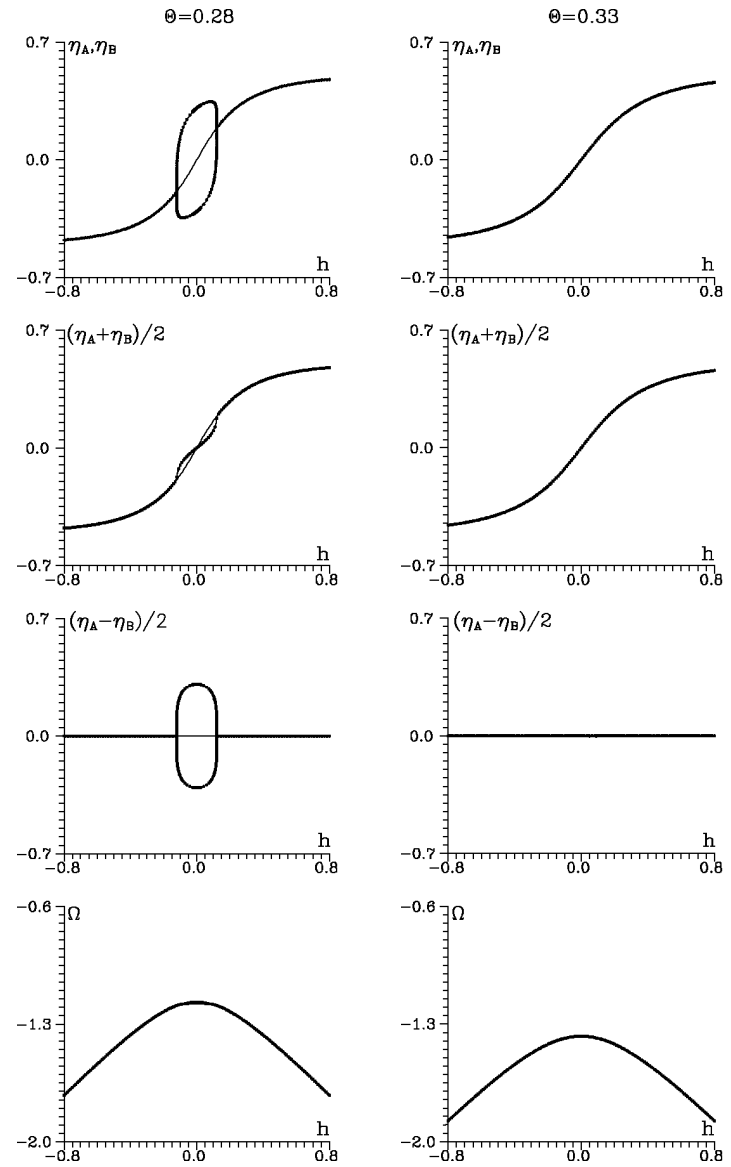


Рис. 3. Параметри порядку η_A , η_B , їх півсума і піврізниця та термодинамічний потенціал Ω як функції зовнішнього поля h за нульової константи псевдоспін-електронної взаємодії, обчислені в точці 2 (див. рис. 1) площини (J_1, J_2) за різних значень температури. Товщеними лініями зображено термодинамічно стійкі стани.



Продовження рисунка 3.

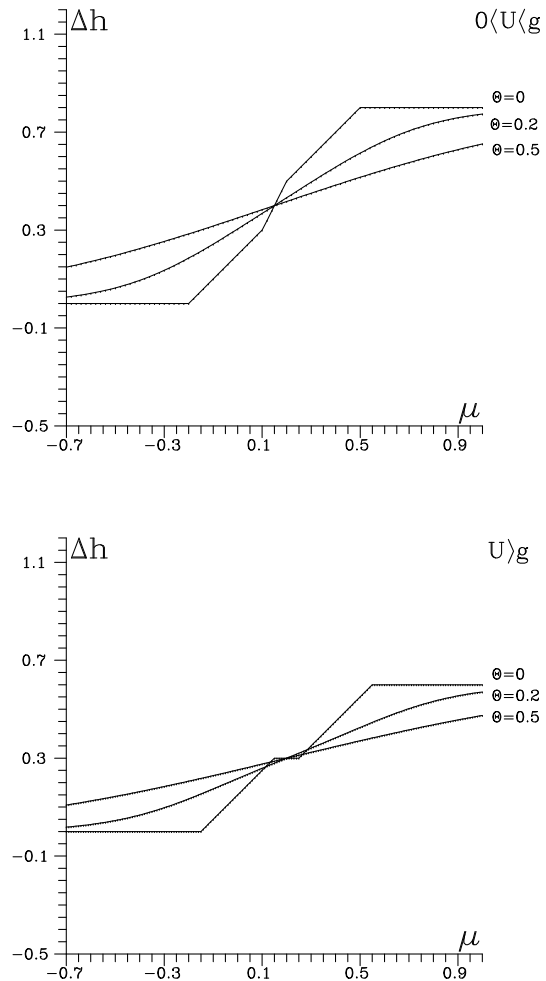


Рис. 4. Зміщення $\Delta h = \theta \ln \Phi$ як функція μ за різних значень температури θ .

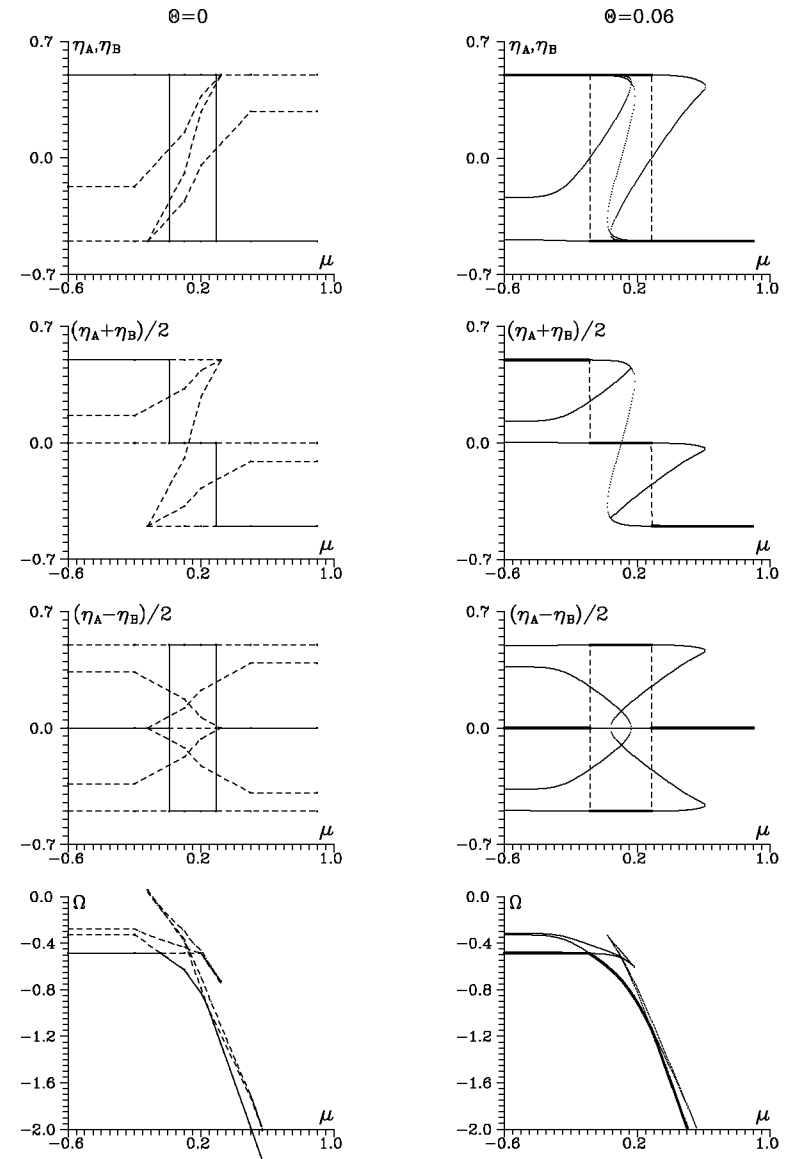


Рис. 5. Параметри порядку η_A , η_B , їх півсума і піврізниця та термодинамічний потенціал Ω як функції хемічного потенціалу μ за фіксованого $h = 0.35$, обчислені в точці 2 площини (J_1, J_2) . Суцільними лініями для $\theta = 0$ та потовщеними лініями для $\theta = 0.06$ зображено термодинамічно стійкі стани.

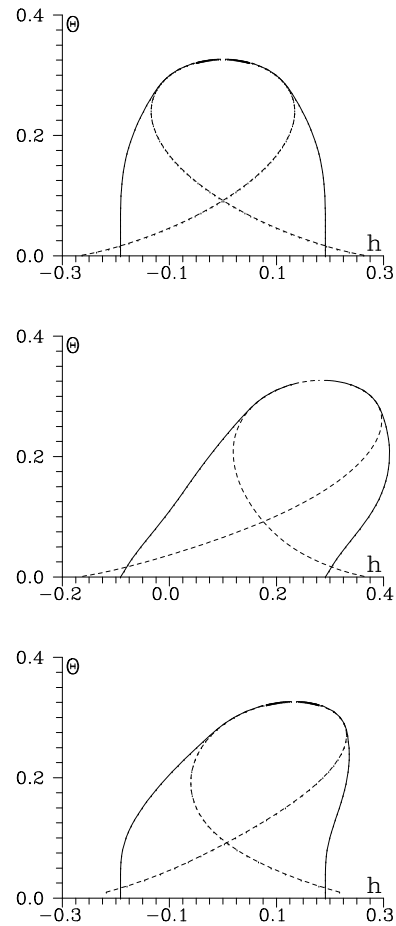


Рис. 6. Фазові діаграми в координатах (h, θ) за різних значень μ ($J_1 = -0.3827$, $J_2 = 0.9239$):

а) $g = 0$; б) $\mu = -0.1$, $U = 0.3$, $g = 0.4$; в) $\mu = -0.5$, $U = 0.3$, $g = 0.4$. Пунктирними лініями зображено спінодальні криві. Між точками їх дотику до кривої рівноваги фазовий перехід є переходом другого роду. Крива рівноваги фаз охоплює область, у якій стійкою є антисеїнетоелектрична фаза.

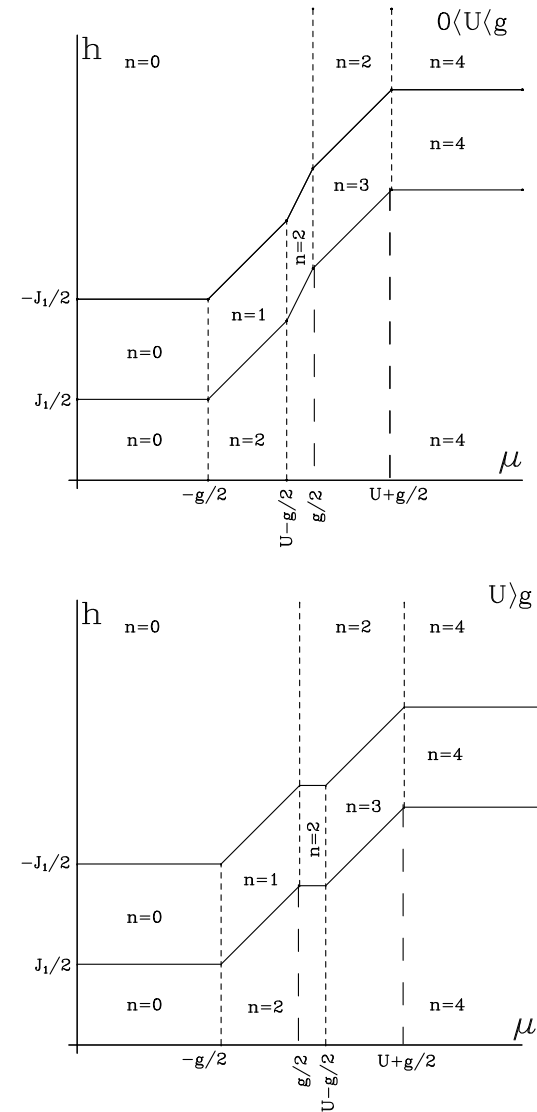


Рис. 7. Фазові діаграми в площині (μ, h) за нульової температури.

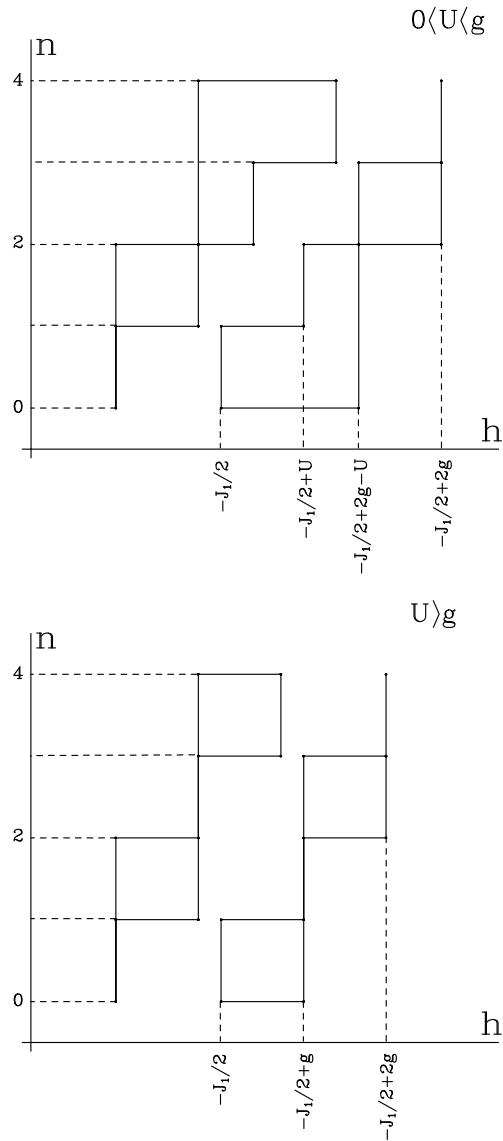


Рис. 8. Области фазового розширення (охоплені суцільними лініями) за нульової температури.

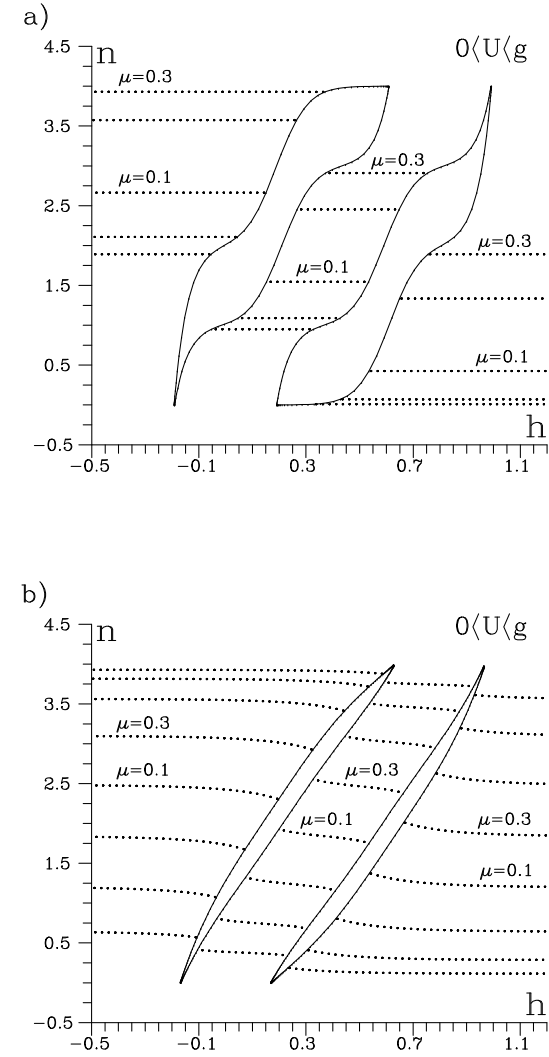
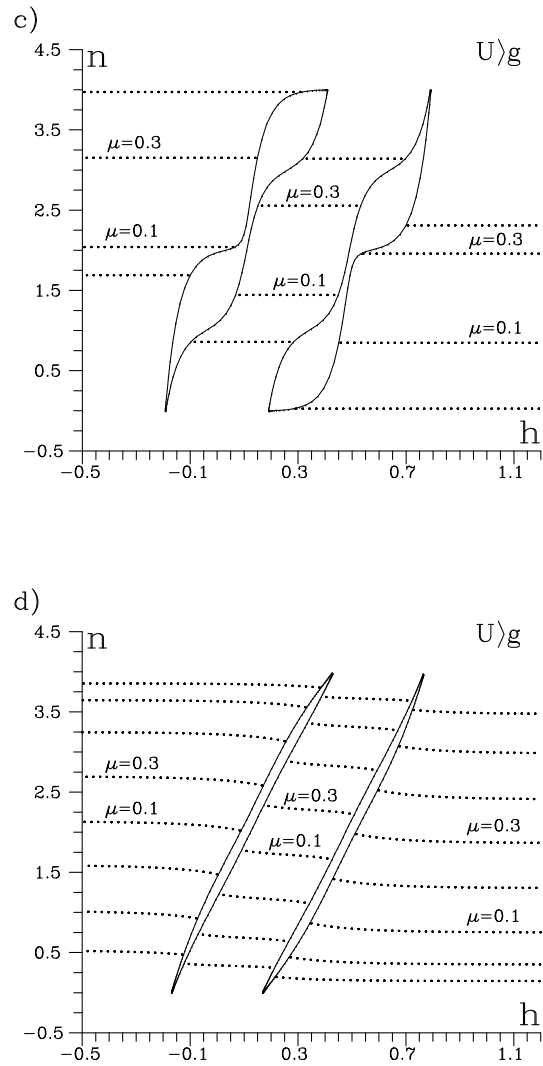
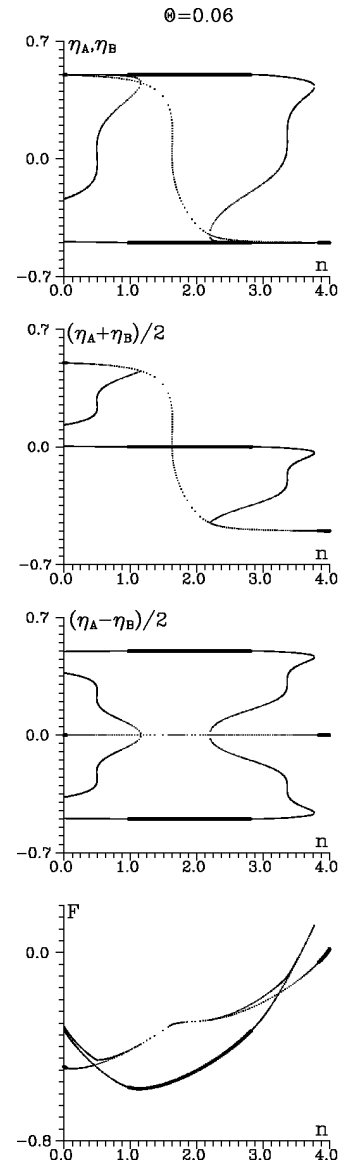


Рис. 9. Области фазового розширення за відмінної від нуля температури (суцільні лінії), а також графіки $n(h)$ для основного стану за різних значень хемічного потенціалу μ (пунктирні лінії) ($J_1 = -0.3827$, $J_2 = 0.9239$):

- a) $\theta = 0.05$; $U = 0.3$; $g = 0.4$; b) $\theta = 0.2$; $U = 0.3$; $g = 0.4$;
 c) $\theta = 0.05$; $U = 0.4$; $g = 0.3$; d) $\theta = 0.2$; $U = 0.4$; $g = 0.3$.



Продовження рисунка 9.

Рис. 10. Параметри порядку η_A , η_B , їх півсума і піврізниця та вільна енергія F як функції середнього числа частинок на комірку n за фіксованого $h = 0.35$ ($J_1 = -0.3827$, $J_2 = 0.9239$). Потовщеними лініями зображено термодинамічно стійкі стани.

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Ігор Васильович Стасюк
Юрій Ігорович Дубленич

ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ ТА РОЗДІЛЕННЯ ФАЗ У
ПСЕВДОСПІН-ЕЛЕКТРОННІЙ МОДЕЛІ З ПРЯМОЮ ВЗАЄМОДІЄЮ
АНТИСЕГНЕТОЕЛЕКТРИЧНОГО ТИПУ

Роботу отримано 8 червня 1999 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені