

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

УДК: 530.145

PACS: 05.50.+q; 05.70.Fh; 64.60.-i

ІЗИНГІВСЬКІ ЧИТАННЯ–99 (Львів, 20 травня 1999 р.)

за редакцією Юрія Головача

Анотація. Збірник містить тексти лекцій про критичні явища, прочитаних під час "Ізингівських читань" – семінару, присвяченого 99-річчю з дня народження Ернста Ізинга.

ISING LECTURES–99 (Lviv, May 20, 1999)

edited by Yuri Holovatch

Abstract. Texts of lectures on critical phenomena given in the frames of the "Ising lectures" (a workshop in commemoration of the 99th anniversary of Ernest Ising).

ICMP–99–16

ІЗИНГІВСЬКІ ЧИТАННЯ–99
(Львів, 20 травня 1999 р.)
ISING LECTURES–99
(Lviv, May, 20 1999)



Ernest Ising (10.05.1900 – 11.05.1998).

ВСТУП

На протязі трьох останніх років Інститут фізики конденсованих систем НАН України спільно з кафедрою теоретичної фізики Львівського державного університету ім. Івана Франка проводять Ізингівські читання – семінар, причвячений фізиці критичних явищ. Цьогорічні Ізингівські читання відрізнялися від попередніх: виступали лише молоді науковці, які тільки починають дослідження у фізиці критичних явищ і фазових переходів. Очікувалося, що доповідачі обговорять формулювання задач, які вони розв'язують, покажуть місце цих задач у статистичній фізиці і фізиці конденсованих систем. Не секрет, що добре сформульована задача є запорукою успіху подальшого дослідження, тому завжди корисно обговорити ще раз цей важливий фрагмент кожного наукового проекту. У цілому доповідачі продемонстрували досить широке розуміння проблем, доступно пояснюючи і свої результати, і результати інших дослідників. На семінарі були присутні не лише співробітники Інституту фізики конденсованих систем НАН України та кафедри теоретичної фізики Львівського державного університету імені Івана Франка, але й студенти, які також починають свої наукові студії. Думається, що семінар був корисний, а різні деталі виголошених доповідей ще не раз будуть предметом неформальних обговорень. Назвемо доповідачів та теми їхніх виступів: Остап Баран “Ізингівські моделі зі спіном 1”; Тарас Яворський “Показник поправки до скейлінгу в розведених системах”; Роман Мельник “Критична поведінка бінарної симетричної суміші”; Святослав Кондрат “Деякі питання статистичної теорії самоасоційованих систем”; Андрій Ровенчак “Потенціал взаємодії між атомами гелію”; Кирило Табунщик “Термодинаміка псевдоспін-електронної моделі”.

Олег Держко

Зміст

ФАЗОВА ПОВЕДІНКА БІНАРНОЇ СИМЕТРИЧНОЇ СУМІШІ (Р.С.Мельник, О.В.Пацаган)	4
1. Вступ	4
2. Модель бінарної симетричної суміші	5
3. Аналіз і зауваження	8
ПОТЕНЦІАЛ ВЗАЄМОДІЇ МІЖ АТОМАМИ ГЕЛІЮ (А. Ровенчак)	12
THE CORRECTION-TO-SCALING EXPONENT IN DILUTE SYSTEMS (R. Folk, Yu. Holovatch, T. Yavors'kii)	19
ПРОБЛЕМИ СТАТИСТИЧНОЇ ТЕОРІЇ САМОАСОЦІЙОВАНИХ СИСТЕМ (С.В. Кондрат, М.Ф. Головка)	26
1. Вступ	26
2. Мікроскопічні моделі	28
3. Метод функціоналу густини Гінзбурга-Ландау	31
4. Мембранні теорії	34
5. Висновки	39
THERMODYNAMICS OF A PSEUDOSPIN-ELECTRON MODEL (Tabunshchyk K.V.)	41
1. Direct interaction between pseudospins.	42
1.1. Ferroelectric type interaction.	42
1.1.1. $\mu = const$ regime.	43
1.1.2. $n = const$ regime.	44
1.2. Antiferroelectric type interaction.	46
1.2.1. $\mu = const$ regime.	46
1.2.2. $n = const$ regime.	47
2. Interaction between pseudospins via conducting electron.	48

ФАЗОВА ПОВЕДІНКА БІНАРНОЇ СИМЕТРИЧНОЇ СУМІШІ

Р.С.Мельник, О.В.Пацаган

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
290011 м. Львів, вул. Свенціцького, 1*

1. Вступ

Критичні явища в рідких сумішах своєю різноманітністю вражають увагу будь-якого дослідника, якому доводиться з ними зустрічатись. Насправді, в той час, як однокомпонентні флюїди демонструють лише криву фазової рівноваги рідина-пара (РП), яка закінчується в критичній точці РП, то вже в двокомпонентних (бінарних) сумішах існують цілі лінії критичних точок РП, рідина-рідина (РР) і газ-газ (ГГ). Крім того, в бінарних флюїдних сумішах можуть існувати: кінцева критична точка (ККТ) (точка перетину кривої фазової рівноваги РП і лінії критичних точок РР або ГГ), азеотропна критична точка (точка, в якій закінчується крива точок рівних концентрацій), а також лінії потрійних точок, на яких співіснують три фази і лінії трикритичних точок (ТКТ), на яких три фази стають ідентичними [1].

На Рис.1, для прикладу, схематично представлений один з типів фазових діаграм бінарних флюїдних сумішей. На ньому зображена більшість з перерахованих вище критичних точок.

Основними факторами, що призводять до такої різноманітності критичної поведінки в рідких сумішах є відносна інтенсивність взаємодії між компонентами суміші і співвідношення між розмірами частинок.

Майже два десятиліття тому Ван Коніненберг і Скотт [2] на основі узагальненого на випадок бінарних сумішей рівняння стану Ван дер Ваальса прокласифікували всю можливу фазову топологію бінарних флюїдів. Однак, на сьогодні залишається незрозумілим (навіть на рівні середньопольових підходів), яка з мікроскопічних характеристик є визначальною для кожного типу діаграм. Також не відомо, якою мірою врахування критичних флуктуацій параметра порядку вплине на структуру діаграм. В зв'язку з цим актуальним є завдання побудови теорії фазової поведінки з перших принципів, яка б враховувала флуктуації і яка б дозволила отримувати повні фазові діаграми.

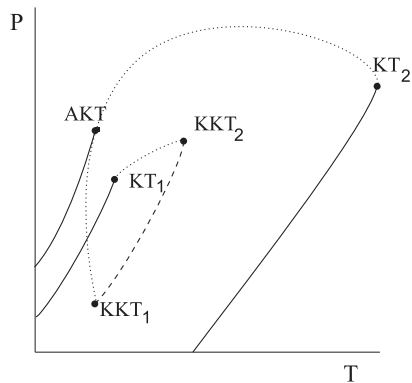


Рис. 1. Схематична фазова діаграма бінарної суміші, що демонструє V тип фазової поведінки. Суцільною лінією позначені криві співіснування чистих компонентів і крива азеотропної суміші, штриховою - крива співіснування трьох фаз, пунктирною - ліній критичних точок. 1, 2 - критичні точки чистих компонентів, АКТ - азеотропна критична точка, 1, 2 - кінцеві критичні точки.

Першим кроком в здійсненні такого завдання є побудова теорії для простих модельних систем. В даній лекції ми пропонуємо розглянути модель бінарної симетричної суміші (БСС).

2. Модель бінарної симетричної суміші

Розглядається двокомпонентна система твердих сфер однакового розміру σ , що взаємодіють між собою через потенціал прямокутної ями. Потенціал взаємодії між частинками представляється у вигляді суми двох доданків:

$$U_{\gamma\delta}(r) = U(r) + \Phi_{\gamma\delta}(r), \quad (\gamma, \delta = a, b)$$

де

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & r < \sigma \\ 0, & r \geq \sigma \end{cases}$$

- доданок, що описує взаємну непроникність твердих сфер,

$$\Phi_{\gamma\delta}(r) = \begin{cases} -\epsilon_{\gamma\delta}, & 0 < r \leq \lambda\sigma \\ 0, & r > \lambda\sigma \end{cases}$$

- доданок, що описує притягання між твердими сферами.

Додатково вважається, що $\epsilon_{aa} = \epsilon_{bb} = \epsilon \neq \epsilon_{ab}$. Модельний параметр $r = \frac{\Phi_{ab}(\mathbf{k})}{\Phi(\mathbf{k})} = \frac{\epsilon_{ab}}{\epsilon}$ характеризує силу відносної взаємодії між частинками і визначає фазову топологію такої модельної системи.

При $r > 1$ на фазовій діаграмі, так само як і на діаграмах однокомпонентних флюїдів, існуватиме лише крива співіснування РП, яка закінчується критичною точкою РП. У випадку $r < 1$ існує додаткова тенденція до розшарування і, крім фазового переходу РП, в системі відбувається фазовий перехід змішування-незмішування [3].

Фазова діаграма бінарної симетричної суміші визначається трьома термодинамічними полями (T, μ, h) , де T - температура, μ - загальний хімічний потенціал, пов'язаний із загальною густиною, h - впорядковуюче поле, пов'язане з відносною концентрацією компонент суміші. Свою увагу ми зосередимо на симетричному випадку $r < 1$ і $h = 0$, тобто вважатимем, що взаємодія між частинками одного сорту є енергетично вигіднішою, ніж взаємодія між частинками різних сортів, і середні кількості частинок сорту "а" і сорту "b" однакові. За таких умов поведінка БСС в околі критичної точки змішування - незмішування буде аналогічною до поведінки простої спин-1/2 моделі Ізінга в околі критичної точки. Різниця полягає лише в тому, що у флюїдній моделі критична температура залежить від густини, і тому на фазових діаграмах існуватиме ціла лінія критичних точок $T_c(\rho)$ (або $T_c(\mu)$) - так звана λ -лінія.

Наявність флуктуацій концентрації в таких системах, як буде показано нижче, суттєво впливає на характер кривої співіснування РП. Слід зауважити, що присутність такого впливу є характерною рисою фазової поведінки різних моделей, які, на перший погляд, не мають нічого спільного з моделлю бінарної симетричної суміші. Зокрема, класична спінова модель Гайзенберга [4,5], дипольна модель флюїду [6,7], модель флюїду Ван дер Ваальса-Поттса [8] та деякі ґраткові моделі флюїдів [9,10].

На Рис.2а-2г зображені фазові діаграми БСС при $\lambda = 1.5$ [11], які демонструють три можливі топологічні типи даної моделі. Топологія діаграм змінюється в залежності від мікроскопічного параметра r .

На Рис.2а модельний параметр підібраний таким чином ($r = 0.7$), що λ -лінія підходить до кривої РП значно нижче від критичної точки РП, перетин відбувається в ККТ, де співіснує критична рідина з некритичною парою. Нижче від температури ККТ співіснують некритична пара і незмішана рідина (густини обидвох фаз, завдяки симетричності моделі, однакові).

Суттєво іншою є ситуація, зображена на Рис.2г. Модельний па-

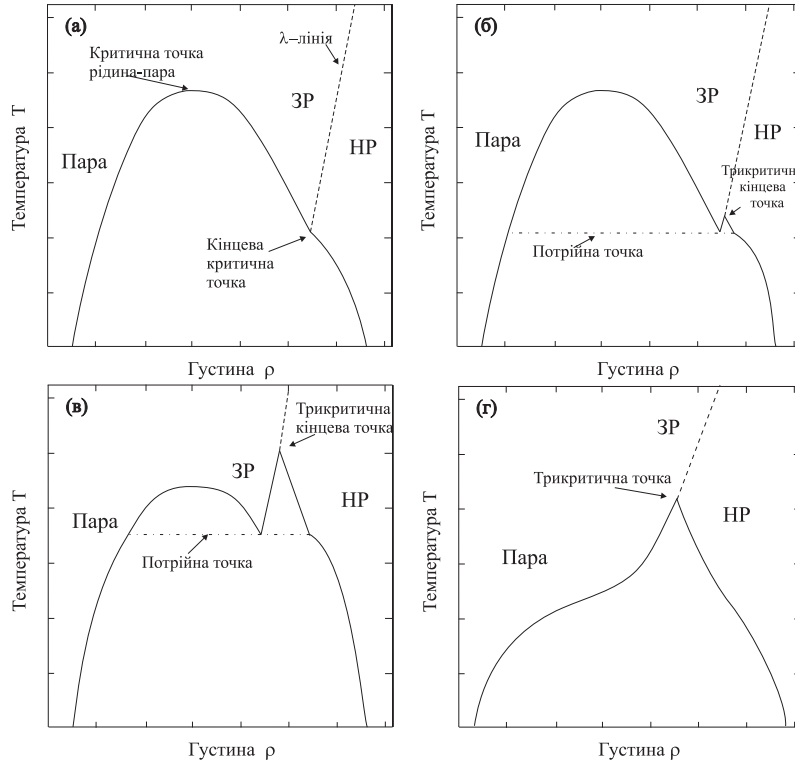


Рис. 2. Схематичне представлення фазових діаграм бінарної симетричної суміші при різних значеннях мікроскопічного параметра r [11]: (а) $r = 0.72$, (б) $r = 0.68$, (в) $r = 0.65$, (г) $r = 0.57$. Суцільною лінією позначена крива співіснування рідина-пара, штриховою лінією позначена лінія критичних точок змішування-незмішування. ЗР - змішана рідина, НР - незмішана рідина.

раметр підбраний так ($r = 0.57$), що λ -лінія перетинає криву співіснування РП в критичній точці РП, утворюючи ТКТ. В цій точці стають критичними три фази: пара, рідина сорту "а" і рідина сорту "б".

Проміжна ситуація зображена на Рис.2б і 2в. На цих рисунках λ -лінія перетинає криву співіснування РП при температурах, не набагато нижчих від критичної температури РП. В цьому випадку фазова діаграма є комбінацією попередніх двох випадків. При $r = 0.68$ аномалія ККТ переходить у малий пік і виникає потрійна точка, в якій співіснують три некритичні фази. При температурах, вищих за температуру потрійної точки і низьких густинах співіснують змішана рідина і пара. При вищих густинах співіснують змішана і незмішана рідини.

Подальше зменшення r не призводить до якісно нових топологічних змін.

3. Аналіз і зауваження

Цікаво є зрозуміти, яка причина такої різноманітності фазової поведінки у відносно простій моделі БСС. Спробуємо це з'ясувати, аналізуючи модель на основі розкладу Ландау для великого термодинамічного потенціалу. Такі розклади в різних контекстах детально аналізувались Роуксом і співавторами [12].

При аналітичних розрахунках в даній моделі існує проблема двох параметрів порядку: густини $\rho = N/V$ і різниці концентрацій $m = \frac{N_a - N_b}{N}$. Гамільтоніан такої системи повинен бути симетричним відносно зміни знаку m . Розклад Ландау для великого термодинамічного потенціалу БСС має вигляд [11]:

$$F = a \frac{(\rho - \rho_0)^2}{2} + \frac{(\rho - \rho_0)^4}{4} + \mu(\rho - \rho_0) + A \frac{m^2}{2} + \frac{m^4}{4} - \frac{B}{2} m^2 (\rho - \rho_0), \quad (1)$$

де μ - хімічний потенціал, ρ_0 - деяке значення густини, вибране так, що доданок $\sim (\rho - \rho_0)^3$ зникає.

Умовою існування критичної точки РП є $a = 0$. Якщо систему зафіксувати при густині $\rho = \rho_0$, то при $A = 0$ розклад (1) описує критичну точку змішування - незмішування.

Для прикладу розглянемо детальніше перехід від топології з ККТ (Рис.2а) до топології з потрійною точкою (Рис.2б, 2в). Вважатимем, що температура ККТ є значно нижчою від температури

критичної точки РП, тобто $a < 0$. Перепишемо розклад (1) в формі:

$$F = \theta \frac{\hat{m}^2}{2} + \frac{\hat{m}^4}{4} - \frac{\hat{\rho}^2}{2} + \frac{\hat{\rho}^4}{4} - \hat{\mu}\hat{\rho} + k(1 - \hat{\rho})\hat{m}^2, \quad (2)$$

де $\hat{\mu} = \mu/(\sqrt{-a})^3$, $\hat{\rho} = (\rho - \rho_0)/\sqrt{-a}$, $\hat{m} = m/\sqrt{-a}$, термодинамічний потенціал F записаний в одиницях a^2 . Параметр $k = B/2\sqrt{-a}$ описує ефективний зв'язок між параметром порядку \hat{m} і густиною ρ . Параметр $\theta = (A/(-a) - 2k)$ має розмірність температури, $\theta \sim (T - T_c)$, де T_c - температура критичної точки незмішування при $\hat{\rho} = 1$. Фазову поведінку системи отримуємо, мінімізуючи F за змінними $\hat{\rho}$ і \hat{m} .

При такому описі системи параметр k відіграє визначальну роль. Справді, при $k = 0$ фазові переходи рідина-пара і змішування-незмішування відбуваються, не впливаючи один на одного. Рідина при $\hat{\rho} = 1$ і пара при $\hat{\rho} = -1$ співіснують при $\hat{\mu} = 0$, λ -лінія перетинає криву співіснування в точці $\theta = 0$. При включенні малого k температура ККТ зростає з густиною:

$$\theta_c(\rho) = 2k(\rho - 1) \quad (3)$$

і λ -лінія зміщується відносно кривої співіснування РП.

З умови стійкості рідкої фази і умови для параметру порядку $\hat{m}^2 = \theta_c(\rho) - \theta$ знаходимо, що визначник матриці стійкості має вигляд:

$$C = 4m^2((3\rho^2 - 1)/2 - k^2).$$

Система стає нестійкою при $\rho < \rho_c$, де $\rho_c = \sqrt{(2k^2 + 1)/3}$ визначене з рівняння $C = 0$.

В трикритичній точці лінія спінодалі і критична лінія (3) перетинаються. Це відбувається при $\rho_c > 1$ або $k > k_0$ ($k_0 = 1$). Трикритична точка на фазовій діаграмі матиме координати:

$$\theta_t = \theta_c(\rho); \quad \rho_t = \rho_c; \quad \mu_t = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2k^2 + 1}{3}} (k^2 - 1). \quad (4)$$

Всі величини в (5) виражені через k . Отже, параметр, що описує кореляції між параметром порядку \hat{m} і густиною ρ є визначальним в фазовій топології системи. Нехтування такими кореляціями може призвести до якісно невірних діаграм.

На жаль, щодо кількісних оцінок поведінки системи середньопольові підходи і теорія Ландау є менш успішними. Підтвердженням цьому можуть бути проведені нами розрахунки параметрів критичної точки РП для моделі БСС як функцій мікроскопічного параметра r , а також аналогічні результати, отримані методом Монте-Карло

(МК) [11,13]. Наші розрахунки проводились з допомогою методу колективних змінних (КЗ) з виділеною системою відліку [14]. Метод дозволяє вивчати критичну поведінку системи з перших принципів, враховуючи флуктуації параметра порядку (в даному випадку флуктуації враховані в наближенні моделі ρ^4) [15]. На Рис.3 зображена поведінка критичної температури РП як функція мікроскопічного параметра r , а в Табл.1 подані для порівняння числові значення для \tilde{T}_c і η_c , розраховані методом МК і методом КЗ.

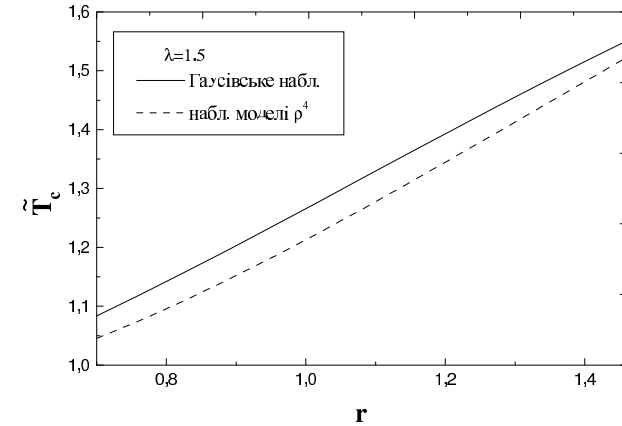


Рис. 3. Критична температура рідина-пара \tilde{T}_c бінарної симетричної суміші як функція мікроскопічного параметра r при $\lambda = 1.5$.

Табл. 1. Критичні температури \tilde{T}_c і критичні густини η_c , отримані методом МК і методом КЗ.

λ	r	\tilde{T}_c	\tilde{T}_c	η_c	η_c
1.5	0.72	1.06 [11]	1.055	-	-
2.0	1.0	2.684 [13]	2.753	0.123 [2]	0.129

Тут введені наступні позначення: $\tilde{T}_c = \frac{kT_c}{\epsilon}$, $\eta_c = \frac{\pi\rho\sigma^3}{6}$.

Слід зауважити добру узгодженість наших результатів з результатами методу МК. Розраховані в наближенні моделі ρ^4 температури є на $\approx 10 - 15\%$ нижчі від кількісних оцінок середньопольових підходів.

Література

1. G.M. Shneider Advan.Chem.Phys. **17**, 1 (1970).
2. P.H. Van Konynenburg, R.L. Scott, Phyl. Trans. Ray. Soc. **298A**, 1442 (1980).
3. I. R. Yukhnovskii, O. V. Patsahan, Journal of Stat. Phys. **81**, 647 (1995).
4. A. Oukouiss, M. Baus, Phys. Rev. **E55**, 7272 (1997);
5. J.-J.Weis, M.J.P. Nijmeijer, J.M. Tavares, M.M. Telo da Gama, Phys. Rev. **E55**, 436 (1997);
6. H. Zhang, M. Widom, Phys. Rev. bf **E49**, R3591 (1994);
7. B. Groh, S. Dietrich, Phys. Rev. bf **E50**, 3814 (1994);
8. M.A. Zaluska-Kotur, L.A. Turski, Phys. Rev. **A41**, 3066 (1990);
9. C.K. Hall, G. Stell, Phys.Rev. **B11**, 224 (1975);
10. P.C. Hemmer, G. Stell, Phys.Rev.Lett. **B11**, 1284 (1970);
11. N.B. Wilding, Phys.Rev. **E58**, 2 (1998);
12. D. Roux, C. Coulon, M.E. Cates J.Phys.Chem. **96**, 4174 (1992).
13. E. de Miguel, Phys.Rev. **E55**, 2 (1997).
14. O.V. Patsahan, I.R. Yukhnovskii, Theor.Math.Phys. **83**, 1 (1990).
15. I.R. Yukhnovskii, Phase transitions of the second order: Collective variables method.- Singapore: World Sci. Publ. Co. Ltd., 1987.

ПОТЕНЦІАЛ ВЗАЄМОДІЇ
МІЖ АТОМАМИ ГЕЛІЮ

А. Ровенчак

*Кафедра теоретичної фізики
Львівський державний університет
імені Івана Франка
вул. Драгоманова, 12, 290005 Львів*

Задача опису фазового переходу в ${}^4\text{He}$ має вже понад шістьдесят років, відколи В. Г. Кеєзом відкрив його у 1932 р. До цього часу не вдалося створити теорію, яка би давала добрий опис цього явища не лише якісно, але й кількісно.

Відомо, що λ -перехід виявляється зокрема як значне зростання теплоємності c_V системи. Суттєва проблема полягає в тому, що експериментальні дані з приводу цього є дуже неоднозначними, дотепер невідомо, наприклад, чи в точці переходу T_λ теплоємність має скінчене значення [1]. Різні підходи до теоретичного опису дають відповідно різні результати.

Поведінку теплоємності в околі T_λ подають переважно у вигляді $c_V \sim |1 - T/T_\lambda|^\alpha$. Один з методів опису λ -переходу, який ґрунтується на співвідношеннях для багаточастинкових функцій розподілу, був запропонований І. О. Вакарчуком [2]. Попередні оцінки результатів його застосування вказують на те, що функція теплоємності має розбіжність, принаймні при наближенні до T_λ справа. При цьому показник α є малим від'ємним числом. Для встановлення його значення потрібно деталізувати розрахунки, зокрема отримати точніші вирази для фур'є-зображення потенціалу міжатомної взаємодії в ${}^4\text{He}$, яке фігурує в багатьох рівняннях теорії.

Видається привабливим такий опис системи, який побудований з перших принципів, тобто для нього використані тільки певні загальні рівняння, як наприклад рівняння Шредінгера, і при цьому кількість даних, взятих з експерименту, повинна бути якнайменшою.

У даній роботі фур'є-зображення $\nu(\mathbf{q})$ потенціалу $\Phi(\mathbf{r})$ отримується з використанням певних квантово-механічних співвідношень на підставі структурного фактора S_q , виміряного в експериментах з розсіяння теплових нейтронів у надплинному ${}^4\text{He}$ [3].

Відповідні вирази в наближенні двох сум за хвильовим вектором можна отримати на підставі результатів робіт [4,5], у яких розглядалася багатобозонна неідеальна система при $T = 0$ К (тобто в основ-

ному стані). В [4] було отримано ланцюг рівнянь для коефіцієнтних функцій a_2, a_3, a_4, \dots у розкладі логарифму хвильової функції основного стану багатобозонної системи за “степенями” колективних змінних:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = C \exp \left\{ \sum_{n \geq 2} \frac{N^{1-n/2}}{n!} \sum_{\mathbf{k}_1 \neq 0} \dots \right. \\ \left. \dots \sum_{\mathbf{k}_n \neq 0} \delta(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n) a_n(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n) \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_n} \right\}, \\ \rho_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}.$$

У наближенні “двох сум за хвильовим вектором” з рівняння Шредингера з гамільтоніаном

$$H = \sum_{j=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}_j^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{j_1 \neq j_2} \Phi(|\mathbf{r}_{j_1} - \mathbf{r}_{j_2}|)$$

отримаємо таку систему рівнянь (1–3):

$$\frac{N m \nu(\mathbf{k})}{V \hbar^2} + \mathbf{k}^2 a_2(\mathbf{k}) - \mathbf{k}^2 a_2^2(\mathbf{k}) - \\ - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \mathbf{q}^2 a_4(\mathbf{q}, -\mathbf{q}, \mathbf{k}, -\mathbf{k}) + \\ + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \mathbf{q}(-\mathbf{k} - \mathbf{q}) a_3(\mathbf{k}, \mathbf{q}, -\mathbf{k} - \mathbf{q}) = 0, \quad (1)$$

$$a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = \left\{ \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 a_2(\mathbf{k}_1) a_2(\mathbf{k}_2) + \right. \\ \left. + \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_3 a_2(\mathbf{k}_1) a_2(\mathbf{k}_3) + \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 a_2(\mathbf{k}_2) a_2(\mathbf{k}_3) \right\} \times \\ \times \frac{-2}{\mathbf{k}_1^2 [1 - 2a_2(\mathbf{k}_1)] + \mathbf{k}_2^2 [1 - 2a_2(\mathbf{k}_2)] + \mathbf{k}_3^2 [1 - 2a_2(\mathbf{k}_3)]}, \quad (2)$$

$$a_4(\mathbf{k}, -\mathbf{k}, \mathbf{q}, -\mathbf{q}) = \frac{1}{\mathbf{k}^2 [1 - 2a_2(\mathbf{k})] + \mathbf{q}^2 [1 - 2a_2(\mathbf{q})]} \times \\ \times \left\{ (\mathbf{k} + \mathbf{q})^2 a_3^2(\mathbf{k} + \mathbf{q}, -\mathbf{k}, -\mathbf{q}) + (\mathbf{k} - \mathbf{q})^2 a_3^2(\mathbf{k} - \mathbf{q}, -\mathbf{k}, \mathbf{q}) + \right. \\ \left. + 2 [\mathbf{k}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) a_2(\mathbf{k}) + \mathbf{q}(\mathbf{q} + \mathbf{k}) a_2(\mathbf{q})] a_3(\mathbf{k} + \mathbf{q}, -\mathbf{k}, -\mathbf{q}) + \right. \\ \left. + 2 [\mathbf{k}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) a_2(\mathbf{k}) + \mathbf{q}(\mathbf{q} - \mathbf{k}) a_2(\mathbf{q})] a_3(\mathbf{k} - \mathbf{q}, -\mathbf{k}, \mathbf{q}) \right\}. \quad (3)$$

В роботах [5] були отримані вирази для s -частинкових матриць густини $F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s)$ через функції a_2, a_3, a_4 . Таким чином, враховуючи простий зв'язок парної функції розподілу з парним структурним фактором системи, фактично маємо співвідношення між a_2, a_3, a_4 і S_q при абсолютному нулі температури:

$$\frac{1}{1 - 2a_2(\mathbf{q})} = \frac{1}{2\Sigma(\mathbf{q})} \left[\sqrt{1 + 4S_q \Sigma(\mathbf{q})} - 1 \right], \quad (4)$$

де $\Sigma(\mathbf{q})$ є складним функціоналом a_2 :

$$\Sigma(\mathbf{q}) = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}_1 \neq 0} \sum_{\substack{\mathbf{k}_2 \neq 0 \\ \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{q} = 0}} \frac{1}{[1 - 2a_2(\mathbf{k}_1)] [1 - 2a_2(\mathbf{k}_2)]} \times \\ \times \left\{ a_2(\mathbf{k}_1) a_2(\mathbf{k}_2) + a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}) [1 + a_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q})] \right\} + \\ + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{a_4(\mathbf{k}, -\mathbf{k}, \mathbf{q}, -\mathbf{q})}{[1 - 2a_2(\mathbf{k})]} \quad (5)$$

Розв'язуючи (4) у прийнятому наближенні (дві суми за хвильовим вектором), отримаємо

$$a_2(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{S_q} \right) - \frac{1}{2} \Sigma^{(0)}(\mathbf{q}), \quad (6)$$

індекс (0) означає, що функціонал $\Sigma(\mathbf{q})$ розрахований на функціях

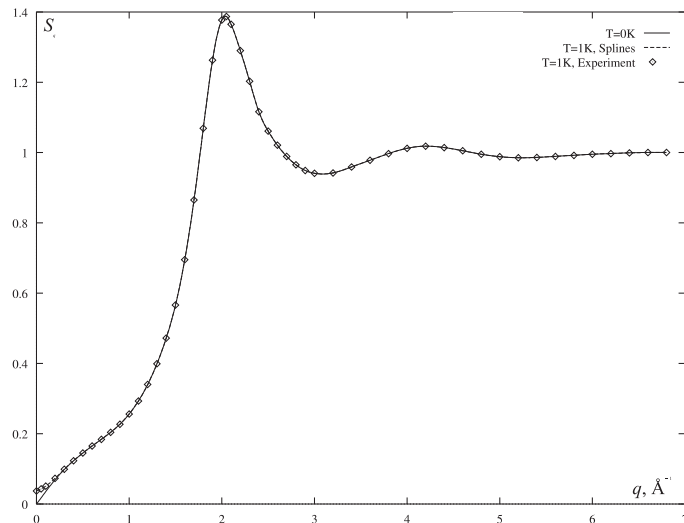
$$a_2(\mathbf{q}) = a_2^{(0)}(\mathbf{q}); \\ a_2^{(0)}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{S_q} \right)$$

— розв'язки (1–4) у наближенні хаотичних фаз. Таким чином, можна отримати фур'є-зображення потенціалу $\nu(\mathbf{q})$, а також перейти до $\Phi(\mathbf{r})$:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \nu(\mathbf{q}). \quad (7)$$

Для обчислень ми використовували експериментальні значення структурного фактора наддлинного ${}^4\text{He}$ із роботи [3], які відповідають густині $\rho = 0.02185 \text{ \AA}^{-3}$ і температурі $T = 1 \text{ K}$. Оскільки у вихідні вирази входить S_q при $T = 0 \text{ K}$, ми “продовжили” ці значення в $T = 0 \text{ K}$ на підставі співвідношення [6] (див. Рис. 1)

$$S_q(\beta) = \frac{S_q(\infty)}{\text{th} \frac{\beta}{2} E_q}, \quad E_q = \frac{\hbar^2 q^2}{2m S_q(\infty)}.$$

Рис. 1. Структурний фактор ${}^4\text{He}$

Результати розрахунків наведені на Рис. 2–3 і в табл. 1. Порівняння здійснюється з модельним потенціалом Азіза [7].

Наближення хаотичних фаз відповідає тому, що в (1) потрібно відкинути всі доданки, що містять суми за хвильовим вектором і покласти $a_2(\mathbf{q}) = a_2^{(0)}(\mathbf{q})$, тобто

$$\nu(\mathbf{q}) = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \frac{1}{2\rho} \left(\frac{1}{S_q^2} - 1 \right). \quad (8)$$

Як видно з Рис. 2–3, наближення двох сум за хвильовим вектором суттєво покращує результати порівняно з наближенням хаотичних фаз, тобто вплив три- і чотиричастинкових кореляцій є значним.

Отриманий нами потенціал дещо відрізняється від наведеного в [7]. Але повного збігу не слід було очікувати, оскільки наведені результати відповідають парній взаємодії між атомами ${}^4\text{He}$, яка фігурує у вихідних рівняннях теорії [4] і є, фактично, ефективною, а модельні потенціали розраховують на підставі узгодження різноманітних експериментальних даних, вважаючи міжатомні взаємодії парними. Щодо такої системи як рідкий ${}^4\text{He}$ при низьких температурах, то для неї, мабуть, є суттєвими три- і чотиричастинкові взаємодії, дослідження яких становить значну складність.

Табл. 1. Порівняння результатів обчислень

	$r_{\min}, \text{Å}$	$\Phi(r_{\min}), \text{K}$	$\Phi(0), \text{K}$
0-ве наближення	3.31	-17.08	$\simeq 242$
1-ше наближення	3.34	-10.58	$\simeq 230$
Модельний потенціал Азіза [7]	2.99	-11.04	$\simeq 2 \cdot 10^6$

Причиною осциляцій нашого потенціалу на великих відстанях є квантовий розгляд проблеми, відомо, що така поведінка спостерігається в рідких металах.

Щодо осциляцій на малих відстанях, то пояснити їх поки що не вдається, можливо, вони будуть згладжені після застосування наступних наближень.

Дещо інший підхід до розв'язку рівняння для $\Sigma(\mathbf{q})$ полягає у лінеаризації за допомогою методу Ньютона, тобто можна записати

$$\Sigma(\mathbf{q}) = \Sigma^{(0)}(\mathbf{q}) + \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\delta \Sigma^{(0)}(\mathbf{k}')}{\delta X(\mathbf{k}')} \Big|_{X(\mathbf{k}')=S_{k'}} (X(\mathbf{k}') - S_{k'}) + \dots,$$

$$X(\mathbf{k}') = \frac{1}{1 - 2a_2(\mathbf{k}')}.$$

Однак, враховуючи складність функціоналу $\Sigma(\mathbf{q})$, провести точні чисельні розрахунки для варіаційної похідної буде досить складно.

Отримані в цій роботі результати, які відповідають наближенню “двох сум за хвильовим вектором”, можуть бути використані для розрахунку термодинамічних функцій гелію і для подальшої побудови теорії з перших принципів.

Автор висловлює подяку своєму науковому керівникові, професору І. О. Вакарчуку, а також аспіранту кафедри теоретичної фізики В. В. Бабіну, спільно з яким були виконані розрахунки до цієї роботи.

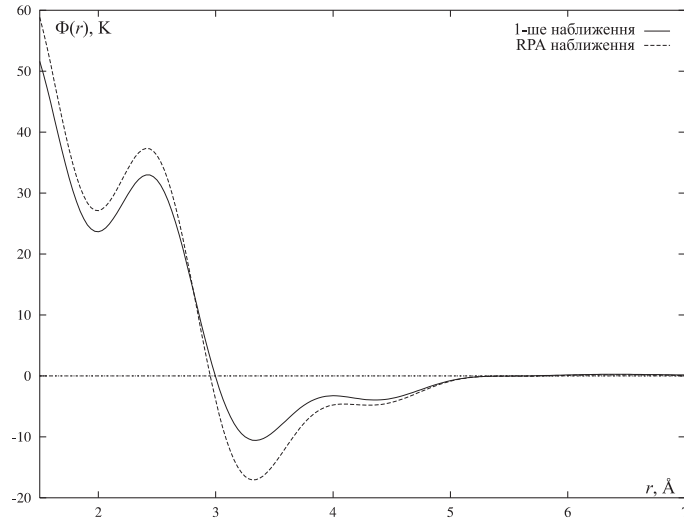


Рис. 2. Потенціал взаємодії між атомами He, різні наближення

Література

1. Lipa J. A., Swanson D. R., Nissen J. A. Phys. Rev. Lett., **76**, No. 8, 944–947 (1996)
2. Вакарчук І. О. Журн. фіз. досл., **1**, №. 2, 156–168 (1997)
3. Svensson E. C., Sears V. F., Woods A. D. B., Martel P. Phys. Rev. B, **21**, 8, (1980)
4. И. А. Вакарчук, И. Р. Юхновский. ТМФ, Том **40**, №. 1, 100–111 (1979); И. А. Вакарчук, И. Р. Юхновский. ТМФ, Том **42**, №. 1, 112–123 (1980)
5. И. А. Вакарчук. ТМФ, Том **80**, №. 3, 439–451 (1989); И. А. Вакарчук. ТМФ, Том **82**, №. 3, 438–449 (1990)
6. Боголюбов Н. Н., Зубарев Д. Н. ЖЭТФ, **28**, вып. 2, 129–139 (1955)
7. A. R. Janzen and R. A. Aziz J. Chem. Phys. **107**, 914 (1997)
8. R. A. Aziz, V. P. S. Nain, J. S. Carley, W. L. Taylor, and G. T. McConville J. Chem. Phys. **70**, 4430 (1979)

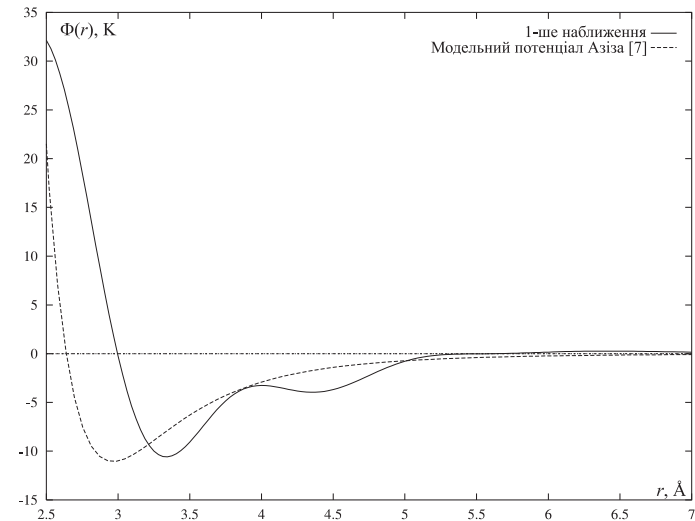


Рис. 3. Потенціал взаємодії між атомами He, порівняння з модельним потенціалом Азіза

THE CORRECTION-TO-SCALING EXPONENT IN DILUTE SYSTEMS¹

R. Folk¹, Yu. Holovatch^{2,3}, T. Yavors'kii³

¹*Institute for Theoretical Physics, University of Linz, A-4040 Linz, Austria*

²*Institute for Condensed Matter Physics, Ukrainian Academy of Sciences, UA-290011 Lviv, Ukraine*

³*Ivan Franko State University of Lviv, UA-290005 Lviv, Ukraine*

From renormalization group (RG) theory one knows that in the asymptotic region the values of the critical exponents are universal and scaling laws between them hold. There the couplings of the model Hamiltonian describing the critical system have reached their fixed point values. In the nonasymptotic region deviations from the fixed point values are present. They die out according to a universal power law governed by the correction-to-scaling exponent ω . E.g. for the zero field susceptibility the approach from above to the critical temperature T_c is characterized by the so-called Wegner expansion [1]

$$\chi \simeq \Gamma_0 \tau^{-\gamma} (1 + \Gamma_1 \tau^{\omega\nu} + \Gamma_2 \tau^{2\omega\nu} + \dots), \quad (1)$$

where $\tau = (T - T_c)/T_c$ and the Γ_i are the non-universal amplitudes. γ and ν are the asymptotic values of the susceptibility and correlation length critical exponents. The smaller the exponent ω , the larger is the region where corrections to the asymptotic power laws have to be taken into account. Being even further away from the fixed point it is necessary to consider the complete non linear crossover functions. This exponent has been calculated with high accuracy for the $O(n)$ symmetric model (in particular for the $3d$ -Ising model, see Table 1), but is much less known for the corresponding diluted model. As a result of a $3d$ -calculation of the field theoretic functions within the minimal subtraction scheme [2] and a thorough analysis of different methods for calculating critical exponents [3], we are able to present accurate values of the correction-to-scaling exponent for weakly diluted quenched $3d$ -Ising model.

The implication of quenched dilution on the critical behavior is a long-standing problem attracting theoretical, experimental and numerical efforts. In the $3d$ -Ising model quenched disorder changes the asymptotic critical exponents compared to the pure ones [4,5]. In principle this

¹R. Folk, Yu. Holovatch, T. Yavors'kii, Pis'ma v ZhETF, **69**, 698 (1999); [JETP Lett. **69**, 747 (1999)].

statement should hold for arbitrary weak dilution. But in order to observe this change one should approach the critical point close enough. The width of this region turns out to be dilution dependent.

In particular Monte Carlo (MC) calculations of the critical exponents in the dilute $3d$ -Ising model are more difficult to perform than for the pure model since they need much larger sizes of lattices [6]. Even then the exponents were found to be non-universal and varying continuously with dilution, i.e. they were effective ones [7]. It became clear that a correction-to-scaling analysis is unavoidable and indeed universal exponents were found [8]. Without it one still obtains concentration dependent effective exponents [9].

The value of the correction-to-scaling exponent ω found in MC calculations from an analysis invoking the first correction term in (1) turned out to be [8]

$$\omega = 0.37 \pm 0.06. \quad (2)$$

Thus it is almost half as large as its corresponding value in the pure model (see Table 1) and this smallness of ω in the dilute case explains its importance for an analysis of the asymptotic critical behavior. It is therefore highly desirable to have an independent quantitative theoretical prediction for the value of the correction-to-scaling exponent in the dilute system.

In theoretical calculations the value of ω found by scaling field RG [10] is $\omega = 0.42$. So far field theoretical RG studies mainly concentrated on the asymptotic values of the leading exponents. Correction-to-scaling exponents have been calculated within massive RG in two loop approximation in Ref. [11] ($\omega = 0.450$) and within the minimal subtraction scheme in three loop approximation in Ref. [12] ($\omega = 0.366$). Here, we improve this value in the massive RG scheme up to four loop order with the result

$$\omega = 0.372 \quad (3)$$

in excellent agreement with (2). In the minimal subtraction scheme we obtain $\omega = 0.390$ remaining within the bandwidth of MC accuracy.

The critical behavior of the quenched weakly dilute Ising model in the Euclidian space of $d = 4 - \varepsilon$ dimensions is governed by a Hamiltonian with two couplings [13]:

$$\mathcal{H}(\phi) = \int d^d R \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n [|\nabla \phi_\alpha|^2 + m_0^2 \phi_\alpha^2] - \frac{v_0}{4!} \left(\sum_{\alpha=1}^n \phi_\alpha^2 \right)^2 + \frac{u_0}{4!} \sum_{\alpha=1}^n \phi_\alpha^4 \right\}, \quad (4)$$

in replica limit $n \rightarrow 0$. Here ϕ_α are the components of order parameter; $u_0 > 0, v_0 > 0$ are bare couplings; m_0 is bare mass.

We describe the long-distance properties of the model (4) in the vicinity of the phase transition point using a field-theoretical RG approach. The results presented in this paper are obtained on the basis of two different RG schemes: the normalization conditions of massive renormalized theory at fixed [14] $d = 3$ and the minimal subtraction scheme [15]. The last approach allows both fixed $d = 3$ calculations [16] as well as an ε -expansion.

In the RG method the change of the couplings u and v under renormalization is described by two β -functions

$$\beta_u(u, v) = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial \mu} \right)_0, \quad \beta_v(u, v) = \mu \left(\frac{\partial v}{\partial \mu} \right)_0, \quad (5)$$

where μ corresponds to the mass in the massive field theory approach and to the scale parameter in the minimal subtraction scheme. The subscript in (5) indicates that the derivatives are taken at constant unrenormalized parameters. The β -functions differ for different RG schemes and in consequence the fixed point coordinates u^*, v^* , defined by the simultaneous zeros of both β -functions, are scheme dependent. The asymptotic critical exponents as well as the correction-to-scaling exponent do not depend on the RG scheme and take universal values.

The correction-to-scaling exponent ω is defined by the smallest eigenvalue of the matrix of derivatives of the β -functions

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \beta_u}{\partial u} & \frac{\partial \beta_u}{\partial v} \\ \frac{\partial \beta_v}{\partial u} & \frac{\partial \beta_v}{\partial v} \end{pmatrix} \quad (6)$$

Method	dilute	pure
scaling field	0.42[10]	0.87[10]
ε expansion	see text	0.814 ± 0.018 [26]
massive RG, $d = 3$	0.372	0.799 ± 0.011 [26]
min. sub. RG, $d = 3$	0.390	0.791
MC	0.37 ± 0.06 [8]	0.8 ± 0.1 [16]; $0.8 - 0.85$ [31]; 0.87 ± 0.09 [32]

Table 1. Values of correction-to-scaling exponent ω as obtained from different methods in dilute and pure $3d$ -Ising models. For the accuracy of our values see text and Fig. 1.

taken at the stable fixed point. For the stable fixed point both eigenvalues of this matrix have a positive real part.

Our results for the correction-to-scaling exponent are based on the known high order expansions for the functions β_u and β_v . In the massive scheme they are known in four loop approximation [17]. In the minimal subtraction scheme one can obtain these functions in five loop approximation in the replica limit from those of a cubic model [2]. In the limiting case of the pure model only the coupling u is present. The corresponding β -function results from putting $v = 0$ in $\beta_u(u, v)$ and the correction-to-scaling exponent is simply the derivative $\partial \beta_u(u, 0)/\partial u$ taken at the stable fixed point u^* . Note that for the pure model the β -functions in the massive scheme are known in six loop approximation [18] and the five loop results for the RG functions in the minimal subtraction scheme [19] agree with those recovered from Ref. [2].

It is known that the series obtained in the perturbational RG approach are at best asymptotic (for the dilute model see however Ref. [20]). An appropriate resummation procedure has to be applied to the β functions in order to obtain reliable information. The choice of the resummation procedure depends on the information about the high order behavior of the expansion series. This information is not available for the case of the β -functions (5). In this situation we have used in our analysis several resummation procedures. In particular we tried Padé-Borel resummation [18] for resolvent series [21] as well as Chisholm-Borel resummation technique [11,22]. Simple Padé-tables were analyzed as well. Then, special attention was payed to the choice of the fit parameter (entering Borel-Leroy transform). We observed the standard 'benchmarks', namely fastest convergence of the perturbation theory results, reproducibility of the best accuracy known for exponent values of the pure model. Moreover different forms of the approximants were tried and analyzed on the base of a model function [3].

The steps which we follow in the calculation of the correction-to-scaling exponent ω are the following: First the β -functions (5) are resummed and the system of equations for the fixed points, $\beta_u(u^*, v^*) = 0$, $\beta_v(u^*, v^*) = 0$, is solved. Then the matrix of derivatives (6) is calculated for the resummed β -functions. The stability of the fixed points is checked. The fixed point with both $u^* \neq 0$ and $v^* \neq 0$ is the stable one at $d = 3$ and the smallest eigenvalue gives the desired correction-to-scaling exponent. Note that the eigenvalues might be complex, in this case both have the same positive real part defining ω .

In Fig. 1 we present our results for the exponent ω obtained in successive orders of perturbation theory in number of loops. To perform the

resummation the Borel transforms of the truncated l th order perturbation theory expansion for the β -functions were presented in the form of $[(l-1)/1]$ rational approximants of two variables [22]. This form of rational approximants appeared to give the most reliable results. The four loop results for the exponent ω obtained in both RG schemes are given in the second column of Tab. 1. The behavior of ω in successive numbers of loops shown in Fig. 1. The uncertainty in ω may be estimated by taking the difference between the four loop and the three loop result. It gives in all cases the typical accuracy of lower then 10%. Although both RG schemes lead to comparable values for ω , the convergence of the values in the massive scheme is much faster. Note that the result for ω combined with the corresponding four loop results for the asymptotic critical exponents [17,24] confirms the conjectured inequality, $-\nu\omega < \alpha < 0$, for the random models critical exponents involving the specific heat exponent α [23].

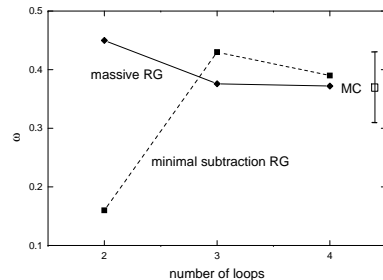


Figure 1. Correction-to-scaling exponent ω of the dilute 3d Ising model in increasing number of loops. Open square with error bar shows the region of accuracy of the MC data [8]; full squares: our values in the minimal subtraction RG scheme; full diamonds: our values in the massive RG scheme.

As it was noted above five loop results for the minimal subtraction scheme are available [2]. In particular applying the resummation scheme [25] to the pure Ising model case, $v = 0$, we get the following values for ω in increasing number of loops starting from two loop: $\omega = 0.566; 0.852; 0.756; 0.791$. This leads to an improvement in accuracy of the previously calculated $d = 3$ five loop value [16] (see the third column of Tab. 1).

The degeneracy of the dilute Ising model β -functions on the one loop level leads to the $\sqrt{\varepsilon}$ -expansion [13,27]. For the critical exponents this

expansion is known up to $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ [28]. Starting from the five loop results of Ref. [2] in the replica limit we get the following expansions [29] for the eigenvalues ω_1 and ω_2 of the stability matrix (5) in the fixed point $u^* \neq 0, v^* \neq 0$:

$$\begin{aligned}\omega_1 &= 2\varepsilon + 3.704011194\varepsilon^{3/2} + 11.30873837\varepsilon^2, \\ \omega_2 &= 0.6729265850\varepsilon^{1/2} - 1.925509085\varepsilon \\ &\quad - 0.5725251806\varepsilon^{3/2} - 13.93125952\varepsilon^2.\end{aligned}\quad (7)$$

From naively adding the successive perturbational contributions one observes that already in three loop approximation ($\sim \varepsilon$) ω_2 becomes negative and therefore **no stable fixed point** exists in strict $\sqrt{\varepsilon}$ -expansion. Even the resummation procedures we applied above, do not change this picture [24]. This can be considered as indirect evidence that the $\sqrt{\varepsilon}$ -expansion is not Borel summable, as may be expected from Ref. [20]. A physical reason might be the existence of the Griffith singularities caused by the zeros of the partition function of the pure system [30]. The fixed d approach, both within the massive [14] and minimal subtraction [15,16] schemes, seems to be the only reliable way to study critical behaviour of the model by means of RG technique.

We acknowledge valuable correspondance with Alan J. McKane and Victor Martín-Mayor.

References

1. F. J. Wegner, Phys. Rev. B **5**, 4529 (1972)
2. H. Kleinert and V. Schulte-Frohlinde, Phys. Lett. B **342**, 284 (1995)
3. Details will be published elsewhere
4. A. B. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974)
5. J. T. Chayes, L. Chayes, D. S. Fisher *et al.*, Phys. Rev. Lett. **57**, 2999 (1986)
6. D. P. Landau, Phys. Rev. B **22**, 2450 (1980); J. Marro, A. Labarta, and J. Tejada, Phys. Rev. B **34**, 347 (1986)
7. J.-S. Wang and D. Chowdhury, J. Phys. France **50**, 2905 (1989); J.-S. Wang, M. Wöhlert, H. Mühlenbein *et al.*, Physica A **166**, 173 (1990); H.-O. Heuer, Europhys. Lett. **12**, 551 (1990); H.-O. Heuer, Phys. Rev. B **42**, 6476 (1990); H.-O. Heuer, J. Phys. A **26**, L333 (1993)
8. H. G. Ballesteros, L. A. Fernández, V. Martín-Mayor *et al.*, Phys. Rev. B **58**, 2740, (1998)
9. S. Wiseman and E. Domany, Phys. Rev. Lett. **81**, 22 (1998); Phys. Rev. E **58**, 2938 (1998)

10. K. E. Newman and E. K. Riedel, Phys. Rev. B **25**, 264 (1982)
11. J. Jug, Phys. Rev. B **27**, 609 (1983)
12. H. K. Janssen, K. Oerding, and E. Sengespeick, J. Phys. A **28**, 6073 (1995)
13. G. Grinstein and A. Luther, Phys. Rev. B **13**, 1329 (1976); T. C. Lubensky, Phys. Rev. B **11** 3573 (1975)
14. G. Parisi in: *Proceedings of the Cargrèse Summer School 1973* (unpublished); J. Stat. Phys., **23**, 49 (1980)
15. G. t'Hooft and M Veltman, Nucl. Phys. B **44**, 189 (1972)
16. R. Schloms and V. Dohm, Europhys. Lett. **3**, 413 (1987); Nucl. Phys. B **328**, 639 (1989)
17. I. O. Mayer, A. I. Sokolov, and B. N. Shalaev, Ferroelectrics **95**, 93 (1989); I. O. Mayer, J. Phys. A **22** 2815 (1989)
18. G. B. Baker, B. G. Nickel, and D. I. Meiron, Phys. Rev. B **17**, 1365 (1978)
19. H. Kleinert, J. Neu, V. Schulte-Frohlinde *et al.*, Phys. Lett. B **272**, 39 (1991); Phys. Lett. B **319**, 545(E) (1993)
20. A. J. Bray, T. McCarthy, M. A. Moore *et al.*, Phys. Rev. B **36**, 2212 (1987); A. J. McKane, Phys. Rev. B **49**, 12003 (1994)
21. P. J. S. Watson, J. Phys. A **7**, L167 (1974)
22. J. S. R. Chisholm, Math. Comp. **27**, 841 (1973)
23. A. Aharony, A. B. Harris, and S. Wiseman, Phys. Rev. Lett. **81**, 252 (1998)
24. R. Folk, Yu. Holovatch, and T. Yavors'kii, J. Phys. Stud. (Ukraine) **2**, 213 (1998) and unpublished
25. In this case the Padé-Borel resummation based on $[(l-1)/1]$ Padé approximant for the Borel transform is recovered.
26. R. Guida and J. Zinn-Justin, J. Phys. A **31**, 8103 (1998)
27. D. E. Khmel'nitskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **68**, 1960 (1975) [Sov. Phys. JETP **41**, 981 (1975)]
28. B. N. Shalaev, S. A. Antonenko, and A. I. Sokolov, Phys. Lett. A **230**, 105 (1997)
29. Up to $\mathcal{O}(\varepsilon)$ we recover the result of C. Jayaprakash and H. J. Katz, Phys. Rev. B **16**, 3987 (1977), the $\sqrt{\varepsilon}$ term is twice larger as in B. N. Shalaev, Zh. Eksp. Teor. Fiz., **73**, 2301 (1977) [Sov. Phys. JETP **46** 1204 (1977)]
30. R. B. Griffith, Phys. Rev. Lett. **23**, 17 (1969)
31. C. F. Baillie, R. Gupta, K. A. Hawick *et al.*, Phys. Rev. B **45**, 10438 (1992)
32. H. G. Ballesteros, L. A. Fernández, V. Martín-Mayor, *et al.*, J. Phys. A **32**, 1 (1999)

ПРОБЛЕМИ СТАТИСТИЧНОЇ ТЕОРІЇ САМОАСОЦІЙОВАНИХ СИСТЕМ

С.В. Кондрат, М.Ф. Головко

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
290011 м. Львів, вул. Свенціцького, 1*

1. Вступ

Як добре відомо, суміш води та нафтоподібних частинок розшарується на дві фази - фазу нафти та води. Однак такий розчин може розмішуватися, якщо до суміші додати поверхнево-активні частинки, які ще називають амфіфільними (від грецького любити обох), чи інакше сурфактантами. У таких трисортних системах виникає різноманіття фаз, розглядом яких та оглядом можливих підходів до їх опису і присвячена дана робота. Результати даного огляду в значній мірі базуватимуться на монографії Гомлера і Шіка [1].

Перш за все звернемо увагу на структуру амфіфільних частинок. Такі частинки мають полярну головку (що добре взаємодіє із водою) та неполярний хвіст, добре взаємодіючий із нафтою. Прикладом такої частинки може бути молекула, що описується хемічною формулою $CH_3(CH_2)_{i-1}(OCH_2CH_2)_jOH$, або скорочено C_iE_j . Коротко розглянемо фазову поведінку системи таких молекул. При деякій температурі та невеликій кількості амфіфільних частинок маємо дві розділені фази, із сурфактантом, що знаходиться, скажімо, переважно у воді. При збільшенні температури до деякої критичної T_L (яку ще називають температурою Крафта) з'являється третя фаза (збагачена водою), яка фізично розташована між водою та нафтою, від чого інша назва - середня фаза. При подальшому рості температури амфіфільні частинки стають все більш розчинні у нафті та менш - у воді і при деякій температурі вирівнюються концентрації води та нафти у середній фазі. Знову збільшуючи температуру середня фаза стає все більш і більш насичена нафтою, аж поки при деякій температурі T_n (температура помутніння), стає ідентичною до фази нафти і система знову стає двофазною. Це схематично зображено на рис. 1. При достатньо великій концентрації сурфактанту спостерігається тенденція до створення агрегатів різних форм та розмірів, що знаходяться у воді чи нафті (в залежності від їх концентрації). Найпростішим прикладом таких агрегатів можуть бути міцели, що плавають у воді (у випадку великих концентрацій води)

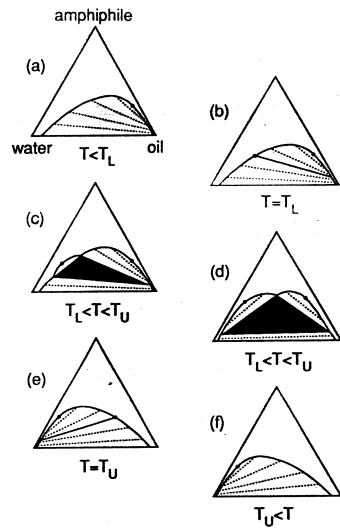


Figure 1. Схематична послідовність фазових діаграм, кожна при постійній температурі, для тринарної суміші води, нафти та сурфактанту [1].

чи обернені міцели (у випадку великих концентрацій нафти).

При дуже великих концентраціях сурфактанту утворюється так звана ліотропна фаза (у якій відбувається певне впорядкування агрегатних структур). Прикладами такої фази можуть бути кубічна чи гексагональна фази. Завдяки багатству та різноманіттю фазової поведінки опис таких систем є доволі складним. Існує декілька підходів щодо їх опису. Першоосною їх є конкретизація масштабів довжин чи інших фізичних характеристик: (i) Розгляд системи на масштабах порядку розмірів взаємодіючих молекул, мабуть, потребує введення гамільтонової функції системи. Однією із можливих реалізацій такого підходу є побудова граткової моделі тринарної суміші; (ii) Збільшуючи масштаб довжин (наприклад шляхом усереднення (інтеграції) мікроскопових величин по невеликій області) прийдемо до теорій опису системи в термінах параметра порядку. Побудова функціоналу вільної енергії як функції параметра порядку і є суттю методу функціоналу Гінзбурга-Ландау. В принципі вільну енергію Гінзбурга-Ландау можемо одержати із мікроскопових тео-

рій, однак частіше вона конструюється із симетричних міркувань; (iii) При додаванні у двокомпонентну суміш (нафти та води) амфифільних частинок вони розташовуватимуться у міжфазній області, і при достатньо високих концентраціях утворюють шар, чи подвійний шар у випадку бінарних домішок), який можемо трактувати як гнучку мембрану. Дослідження властивостей систем як мембран розвивається у рамках так званих мембранних теорій.

Коротко зупинимось на цих трьох підходах.

2. Мікроскопічні моделі

Розглянемо просту систему звичайної тринарної суміші, що у гратковій моделі описується гамільтоновою функцією [2,3]:

$$H_0 = - \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\langle ij \rangle} E^{\alpha\beta} P_i^\alpha P_j^\beta - \sum_{\alpha} \sum_i \mu^\alpha P_i^\alpha; \quad (1)$$

де α, β нумерує сорти (a,b,c), i, j - вузли гратки; $P_i^\alpha = 1$, якщо по i -тому вузлі знаходиться частинка сорту α та нуль у протилежному випадку; $E^{\alpha\beta}$ - енергія, μ^α - хемічний потенціал. Умовою

$$\sum_{\alpha} P_i^\alpha = 1, \forall i \quad (2)$$

забезпечується наявність частинок у всіх вузлах.

Здійснивши перетворення виду

$$\begin{aligned} P_i^a &= \frac{(1 + S_i)S_i}{2} \\ P_i^b &= -\frac{(1 + S_i)S_i}{2} \\ P_i^c &= -(1 - S_i^2) \end{aligned} \quad (3)$$

прийдемо до добре відомої моделі Blume-Emery-Griffiths (BEG) [4]:

$$H_{BEG} = - \sum_{\langle ij \rangle} \{ JS_i S_j + K S_i^2 S_j^2 + C(S_i^2 S_j + S_i S_j^2) \} - \sum_i (HS_i - \Delta S_i^2) \quad (4)$$

де

$$J = \frac{1}{4}(E^{aa} + E^{bb} - 2E^{ab})$$

$$\begin{aligned}
C &= \frac{1}{4}(E^{aa} - E^{bb}) - \frac{1}{2}(E^{ac} - E^{bc}) \\
K &= \frac{1}{2}(E^{aa} + E^{bb}) + E^{cc} - (E^{ac} + E^{bc}) - \frac{1}{4}(E^{aa} + E^{bb}) + \\
&\quad \frac{1}{2}E^{ab} = E^{cc} - (E^{ac} + E^{bc} - \frac{1}{2}E^{ab}) - \frac{1}{2}(E^{aa} + E^{bb}); \\
2H &= \mu^a - \mu^b - 2d(E^{ac} - E^{bc}) \\
2\Delta &= 2\mu^c - \mu^a - \mu^b + 2d(E^{ac} + E^{bc} - 2E^{cc}), \quad (5)
\end{aligned}$$

$S_i = (0, 1, -1)$, і d - вимірність гіперкубічної ґратки. Це є одна із найпростіших моделей самоасоційованих систем і, зрозуміло, не враховує багатьох властивостей, притаманних таким системам. Однак навіть така проста модель дає непогані (принаймі, якісно) результати і широко вивчалася у багатьох роботах, зокрема у наближенні середнього поля [5]. Можливим вдосконаленням моделі є врахування здатності амфифільних частинок до створення поверхні між нафтою та водою [6]:

$$H = H_0 - L \sum_{\langle ijk \rangle} (P_i^a P_j^c P_k^a + P_i^b P_j^c P_k^b - P_i^a P_j^c P_k^b - P_i^b P_j^c P_k^a), \quad (6)$$

де підсумовування здійснюється за трьома найближчими "сусідами" та $L < 0$. Такий доданок зменшує енергію конфігурації, в якій сурфактант знаходиться між нафтою та водою і збільшує у випадку знаходження сурфактанта між водою чи нафтою. Тоді гамільтоніан з врахуванням нового доданку набуде вигляду

$$H = H_0 - L \sum_{ijk} S_i (i - S_j^2) S_k. \quad (7)$$

Неважко бачити, що цей доданок сприяє утворенню ламілярної фази із конфігураціями типу нафта-сурфактант-вода-нафта-сурфактант.. Фазова поведінка такої моделі, досліджена в наближенні середнього поля у роботі [7], тут представлена у вигляді фазових діаграм у змінних L і Δ (хемічний потенціал сурфактанту) (рис. 2) та L і $\langle P^c \rangle$ (концентрації сурфактанту) (рис. 3) для системи із однаковою концентрацією нафти та води. Бачимо, що ламілярна фаза з'являється тільки при високих амфифільності (достатньо великих значеннях $|L|$) та концентраціях сурфактанту. При малих $|L|$ перехід від фази співіснування фаз води та нафти до неупорядкованої фази є переходом першого порядку. Дослідження структури неупорядкованої фази можемо здійснити шляхом обчислення струк-

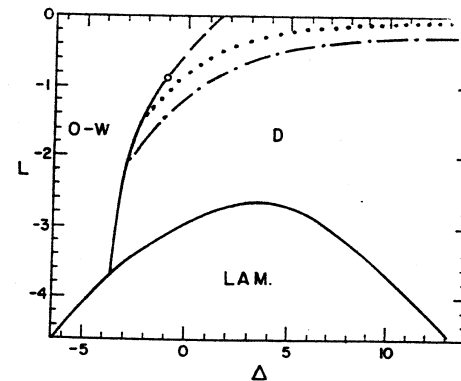


Figure 2. Фазова діаграма трикомпонентної моделі при рівних концентраціях води та нафти, постійній температурі ($T/J=4.2$) та $K/J = 0.5$. Діаграма намальована у змінних L (амфифільність) та хемічного потенціалу сурфактанту (Δ у одиницях J) [7].

турного фактору чи кореляційної функції. Асимптотична форма кореляційної функції має вигляд:

$$\langle (P_0^a - P_0^b)(P_r^a - P_r^b) \rangle x e^{-\frac{r}{\xi}} \cos(qr + \phi) \quad (8)$$

де ϕ - зсув фаз. Величина ξ дає типові розміри областей кореляції, тоді як q^{-1} показує розміри помітних змін в структурі речовини.

Лінію, в якій q перетворюється в нуль, називають лінією неупорядкованості (disordered line) - на рис. 2 позначено (...). Бачимо, що у великій області фазової діаграми (справа від лінії неупорядкованості) $q \neq 0$. Для великих значень $|L|$ та $\langle P^c \rangle$ маємо добре впорядковану ламілярну фазу, (рис. 3), однак при малих $|L|$ (чи $\langle P^c \rangle$) $q \neq 0$ для неупорядкованої фази, тобто ця фаза є неупорядкована, але не безструктурна. Таку фазу, мабуть, можемо ідентифікувати як фазу мікроемulsійну.

Мабуть одна із найкращих моделей була запропонована у роботі [8]. Ідея полягає у врахуванні асиметрії взаємодії амфифільної частинки із водою та нафтою. Гамільтонова функція є наступною:

$$\begin{aligned}
H &= H_0 + H_{amp} \\
H_{amp} &= - \sum_{\langle ij \rangle} \{ P_i^a P_j^c (L_a \delta(r_{ji}, \tau_j) + L_c \delta(r_{ij}, \tau_i)) +
\end{aligned}$$

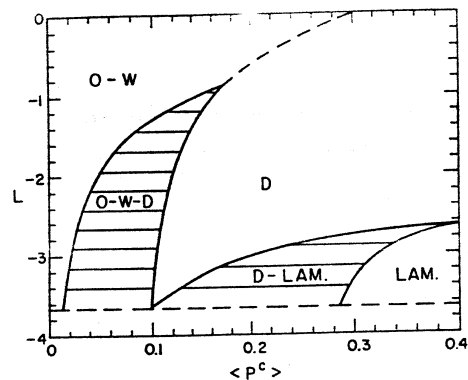


Figure 3. Фазова діаграма для тих же даних, що і на рис. 2, однак у змінних амфіфільності та концентрації сурфактанту $\langle P^c \rangle$ [7].

$$+ L_a \delta(r_{ij}, \tau_j) \delta(r_{ij}, \tau_i) - E^{ac} + \dots \} \quad (9)$$

Тут r_{ij} - одиничний вектор в напрямі $i \rightarrow j$, τ_i - орієнтація частинки, $\delta(a, b)$ - дельта-символ Кронекера; коефіцієнти L_a , L_b - показники сили взаємодії між різними орієнтаціями молекул. Результати даної моделі дуже добре співпадають із експериментальними даними. На рис. 4 представлено переріз призми Гібса при співвідношенні концентрації води до концентрації нафти як 1:1, отримане із моделі Motesena, а на рис. 5 результати експериментальних даних [9] при тих же співвідношеннях; бачимо, що модель Motesena добре описує систему із слабо амфіфільністю із сурфактантом типу C_4E_1 .

3. Метод функціоналу густини Гінзбурга-Ландау

Стандартно функціонал Гінзбурга-Ландау має вигляд

$$F[\phi(r)] = \int d\vec{r} \{ g_0 (\nabla \phi)^2 + f(\phi) - \mu \phi \}, \quad (10)$$

де $f(\phi)$ - густина вільної енергії систем, $\phi(r)$ - параметр порядку (у нас це, наприклад, може бути різниця густин нафти та води), μ - різниця хемічного потенціалу нафти та води. Поблизу критичної точки густину вільної енергії апроксимують першими кількома доданками

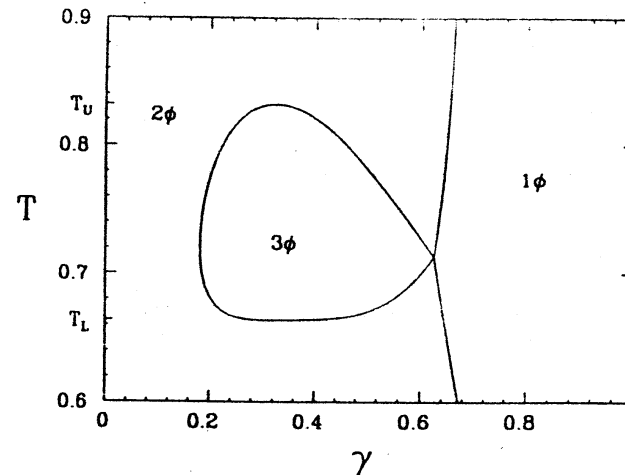


Figure 4. Вертикальний переріз призми Гібса при рівних концентраціях води та нафти [8].

розкладу за степенями ϕ

$$f(\phi) = a_2 \phi^2 + a_3 \phi^3 + a_4 \phi^4. \quad (11)$$

Стабільність однорідної фази потребує $a_4 > 0$. Зауважимо, що для симетричної системи необхідно, щоб $a_3 = 0$. Тоді для $a_2 < 0$ матимемо співіснування фаз нафти та води, при $\mu = 0$. Тоді як для $a_2 > 0$ - єдину неупорядковану фазу.

Функціонал густини у формі (10) передбачає змочування границі розділу фаза нафти та води третьою фазою [10], що однак суперечить експериментальним даним. Непридатність (10) до опису областей трифазного співіснування слідує із простого аналізу (10). Рівняння руху класичної частинки, побудовані на основі (10) є ньютонівськими із потенціалом $-f(\phi) + \mu \phi$. Трифазне співіснування передбачає наявність трьох мінімумів $f(\phi)$ однакової глибини. Оскільки $\mu = 0$, то класична частинка повинна перейти із стану $z \rightarrow -\infty$ до $z \rightarrow +\infty$ (де z у класичній аналогії час), що неможливо за скінченний проміжок часу, оскільки маємо три "горби" однакової висоти. Вихід полягає у врахуванні флюктуацій вищого порядку. У 1990 році Гомпфер і Шік та [11] запропонували наступний, узагальнений

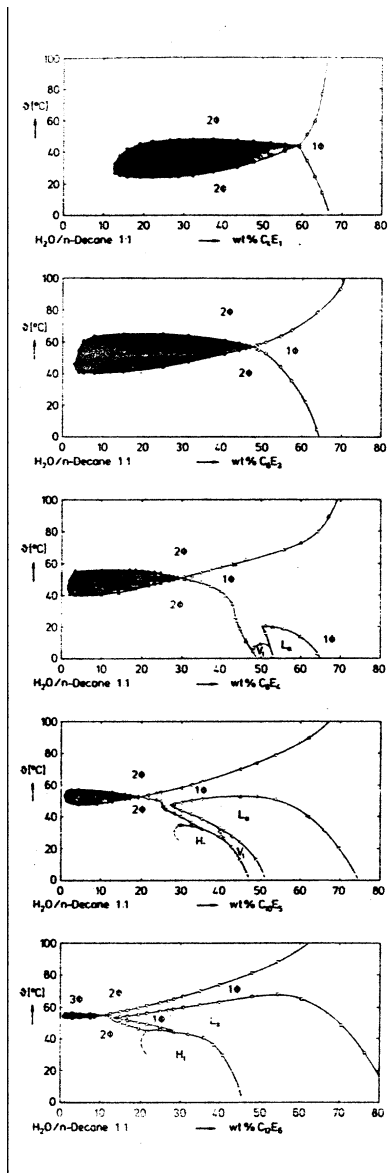


Figure 5. Вертикальний переріз призми Гібса при рівних концентраціях води та нафти для системи вода, декан та $C_{12}E_6$ ля різної амфифільності сурфактанту [9].

вигляд функціоналу густини:

$$F[\phi] = \int d^3r \{ C[\Delta^2 \phi(r)]^2 + g(\phi)[\Delta \phi(r)]^2 + f(\phi) - \mu \phi \}. \quad (12)$$

Покладаючи $g(\phi) = g_0$, $f(\phi) = a_2 \phi^2$ отримаємо функціонал, запропонований Тебнером і Стреєм [12].

Кореляційна функція параметр порядку - параметр порядку (для $g_0^2 < g_{+0}^2 \equiv 4ca_2$) обчислення у рамках моделі [12] має вигляд

$$G(r) = \frac{\lambda}{2\pi r} e^{-\frac{r}{\xi}} \sin \frac{1\pi r}{\lambda}, \quad (13)$$

де

$$\begin{aligned} \xi &= \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{a_r}{c} \right)^{\frac{1}{2}} + \frac{1}{4} \frac{g_0}{c} \right\}^{-\frac{1}{2}} \\ \lambda &= 2\pi \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{a_2}{c} \right)^{\frac{1}{2}} - \frac{1}{4} \frac{g_0}{c} \right\}^{-\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (14)$$

аналогічний до (8). Якщо g_0 більше за g_{+0} , кореляційна функція спадає монотонно. Лінія $g_0 = g_{+0}$ називається лінією неупорядкованості (disordered line), тобто це лінія появи певних структурних властивостей у системі. Починаючи з точки $g_0 = 0$ (яку називають лінією Ліфшица), пік структурного фактора зсувається вправо від $k = 0$, що означає переважаючу осциляційну поведінку кореляційної функції.

Гомпфер і Краус [13] запропонували такий вибір $f(\phi)$ та $g(\phi)$ для виразу (8) (для $\mu = 0$ та $c = 1$):

$$\begin{aligned} f(\phi) &= (\phi^2 - 1)^2 (\phi^2 + f_0) \\ g(\phi) &= g(\phi) + g_2 \phi^2, \end{aligned} \quad (15)$$

де

$$g_2 = 4\sqrt{1 + f_0} - g(0) + 0.01. \quad (16)$$

$f(\phi)$ має три мінімуми в точках $\phi_{1,2,3} = 0, \pm 1$. Перехід до області трифазного співіснування відбувається при $f_0 = 0$ ($f(\phi_{1,2,3}) = 0$). Фазова діаграма у наближенні середнього поля та результати Монте-Карло представлені на рис. 6.

4. Мембранні теорії

У системах типу нафта-сурфактант-вода завжди виникають границі розділу областей існування води та нафтоподібних частинок.

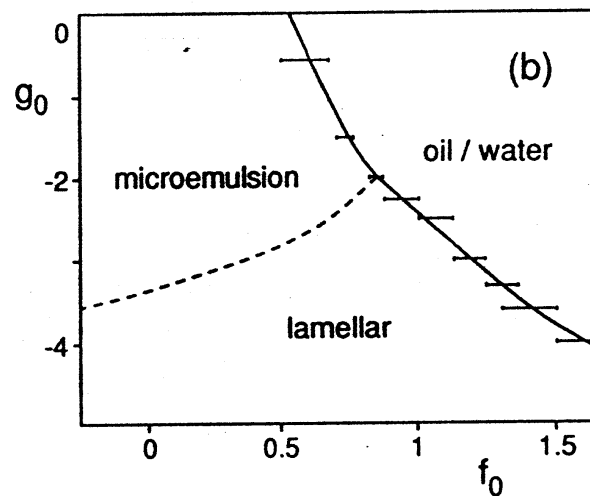
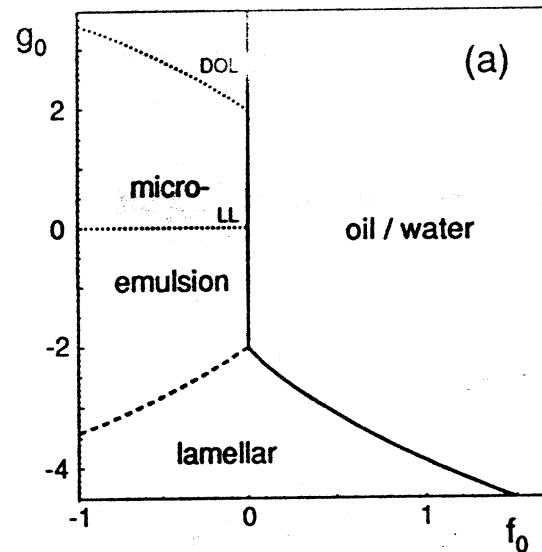


Figure 6. (a) Фазова діаграма отримана у підході Ландау-Гінзбурга у наближенні середнього поля; (b) Результат методу Монте-Карло [11].

При достатньо низьких концентраціях це просто границя розділу фази, збагаченої водою, та фази, збагаченої нафтою. При зростанні концентрації сурфактанту частинки сурфактанту розташовуватимуться у міжфазній області, зменшуючи поверхневий натяг завдяки властивості амфіфільності. Зменшення поверхневого натягу продовжуватиметься до тих пір, доки із зростанням числа молекул сурфактанту зменшуватиметься площа, що припадає на одну частинку. Далі може статися, що формування комплексів амфіфільних частинок (міцел, тощо) у об'ємній фазі стане більш енергетично вигідним (власне вільно-енергетично), ніж збільшення числа частинок у міжфазній області. Таку точку можемо ідентифікувати, як СМС (критичну точку міцелотворення). Поверхневий натяг, однак, все одно буде зменшуватися (не так швидко, як раніше), і до тих пір, доки не почне утворюватися або середня фаза, скажімо, у вигляді мікроемульсій, чи ламілярної фази, і система перейде до області трифазного співіснування.

Спробуємо сконструювати вираз для вільної енергії двовимірної флюїдної поверхні (надалі мембрани), що існує у тривимірному просторі. Мембрану будемо описувати за допомогою тривимірного вектора $X(\nu_1, \nu_2)$, де ν_1, ν_2 – внутрішні координати мембрани. При відсутності будь-яких внутрішніх ступенів вільності вільна енергія такої флюїдної мембрани повинна бути інваріантна відносно трансляцій та поворотів, а також репараметризаційно інваріантна (внаслідок плинності мембрани ніяка система координат не є виділеною). Сконструюємо вільну енергію мембрани, як розвинення по похідних векторного поля $X(\nu); \nu = (\nu_1, \nu_2)$, обмежившись другим порядком. Інваріантами (відносно вищезгаданих перетворень) будуть величини $1, n\Delta X, (\Delta X)^2$ та R , де n – одиничний вектор, нормальний до поверхні, R – скалярна кривизна (єдина незалежна компонента тензора кривизни), $\Delta = D_i D^i$, де D_i – інваріантна похідна

$$D_i V^k = \partial_i V^k + \Gamma_{ik}^j V^k, \quad (17)$$

V_k – k -та компонента довільного векторного поля, Γ_{ik}^j – символи Крістоффеля; мається на увазі підсумовування за однаковими індексами.

Тоді вираз для вільної енергії мембрани матиме вигляд [14–17]

$$H = \int d^2\nu \sqrt{g} \left\{ \sigma + \frac{\lambda_s}{2} n\Delta X + \frac{k}{2} (\Delta X)^2 + \frac{\bar{k}}{2} R \right\} \quad (18)$$

де $g = \det(g(\nu_1, \nu_2))$, $g(\nu_1, \nu_2)$ – метричний тензор. Ввівши величини

$$K = \det(D_i D_j X)$$

$$H = \frac{1}{2} Sp(D_i D_j X) \quad (19)$$

вираз для вільної енергії мембрани можна записати як

$$H = \int d^2\nu \sqrt{g} \{ \sigma + \lambda_s H + 2kH^2 + \bar{k}K \} \quad (20)$$

Для спрощення розглянемо майже плоску мембрану. Нехай плоска мембрана паралельна до площини (x_1, x_2) , тобто

$$X(x_1, x_2) = (x_1, x_2, f(x_1, x_2)) \quad (21)$$

Тоді у наближенні першого неznикаючого доданку у розкладі по похідних f вираз для вільної енергії набуде вигляду

$$H = \frac{k}{2} \int d^2x (\nabla^2 f)^2 \quad (22)$$

у припущенні $\sigma = 0$. Для такого H можемо обчислити флюктуації відхилення нормалі від x_3 [18]

$$\langle \theta^2 \rangle = \frac{T}{K} \ln \left(\frac{L}{a} \right), \quad (23)$$

де a - величина порядку розмірів молекул та L - лінійне розширення мембрани (linear extension). Бачимо, що для розмірів мембрани порядку

$$L_0 = a \exp \left\{ \frac{\pi^2 n}{T} \right\} \quad (24)$$

наближення плоских мембран не годиться. З іншого боку, обчисливши кореляційну функцію типу нормаль-нормаль

$$\langle \bar{n}(0) \bar{n}(\nu) \rangle \sim \exp \left\{ \frac{|\nu|}{\xi_p} \right\}, \quad (25)$$

$$\xi_p = a \exp \left(\frac{4\pi k}{3T} \right)$$

бачимо, що для відстаней менших ξ_p нормалі у різних точках мембрани добре скорельовані, тоді як для відстаней більших ξ_p нормалі є суттєво нескорельовані. Це означає, що довільна достатньо велика мембрана буде "скручуватися". Не зупиняючись на вирішенні цієї проблеми, зауважимо, що існують два підходи до її вирішення: (i) врахування вищих порядків у розкладах по похідних $f(x_1, x_2)$; (ii)

перенормування коефіцієнту k (rigidity - так званої зв'язності). Зауважимо, що вільну енергію гнучкої мембрани можемо одержати із теорії Гінзбурга-Ландау. Справді, функціонал Гінзбурга-Ландау для сферичних чи циліндричних міцел радіусу R можна записати у вигляді [19,20]

$$\frac{F}{A} = R^{\frac{1}{d}} \int dr r^d \left\{ c \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} \phi_R(r) + \frac{d}{r} \frac{\partial}{\partial r} \phi_R(r) \right)^2 + g(\phi_R) \left(\frac{\partial \phi_R(r)}{\partial r} \right)^2 + f(\phi_R) \right\}, \quad (26)$$

де $d = 1(2)$ для циліндричних (сферичних) міцел, а ϕ_R - профіль, що мінімізує F . Тоді для великих R можемо записати

$$\phi_R(r) = \bar{\phi}(r - R) + \frac{\phi_1(r - R)}{R} + \dots \quad (27)$$

де $\bar{\phi}(r - R)$ - планарний профіль ($R \rightarrow \infty$).

Тоді, враховуючи тільки перший доданок у розкладі (P) та ввівши позначення

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} dz P_s(z),$$

$$\lambda_s = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} dz z P_s(z),$$

$$k = \int_{-\infty}^{+\infty} dz 2c[\bar{\phi}']^2,$$

$$\bar{k} = \int_{-\infty}^{+\infty} dz (z^2 P_s(z) - 4c[\bar{\phi}']^2),$$

$$P_s(z) = 2g(\bar{\phi})(\bar{\phi}')^2 + 4c[\bar{\phi}']^2 \quad (28)$$

для вільної енергії кривої поверхні одержимо

$$H = \int dS \{ \sigma + \lambda_s H + 2kH^2 + \bar{k}K \}, \quad (29)$$

$H = \frac{C_1 + C_2}{2}$, $k = C_1 C_2$, і C_1, C_2 - власні значення тензора кривизни. Графік залежності вільної енергії на одиницю площі від радіуса міцели представлений на рис.7.

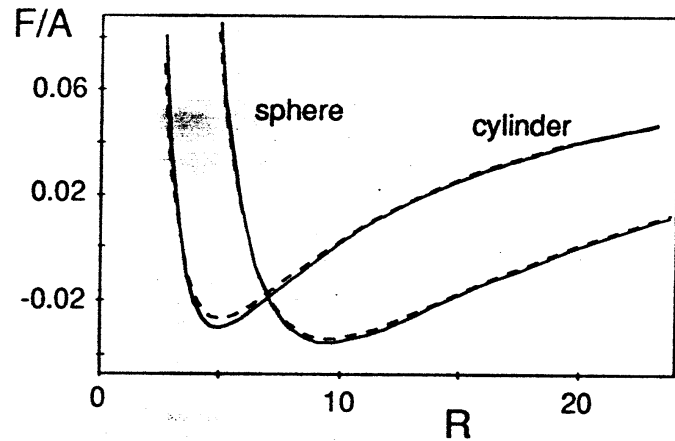


Figure 7. Вільна енергія сферичних та циліндричних міцел як функція радіуса R [20].

5. Висновки

Ми зупинились на трьох взаємодоповнюючих підходах в теорії самоасоційованих систем. Кожен з них має свої переваги і недоліки.

1). Мікроскопічні підходи в основному використовуються для опису фазових діаграм і найчастіше апробуються на гратчастих моделях, хоча останнім часом робляться спроби опису і неперервних моделей [21]. Нові можливості мікроскопічних підходів виникають з розвитком методів комп'ютерного моделювання.

2) Підхід Гінзбурга-Ландау значно спрощує систему, описуючи її в термінах кількох параметрів порядку і коефіцієнтів, що можуть бути взяті безпосередньо з експерименту.

3) Мембранні підходи описують системи, в яких амфіфільні молекули є настільки нерозчинними, що вони можуть трактуватись як мембрани. Індивідуальність амфіфільних молекул при цьому відображається через еластичні модулі мембран, що значно спрощує опис змін обумовлений їх формою та конфігурацією. Оскільки при цьому масштаби довжин не є мікроскопічними, виникає можливість опису ефектів далекосяжних кореляцій.

Література

1. G. Gompper, M. Schick. Self-Assembling Amphiphilic Systems. in Phase Transitions and Critical Phenomena edited by C.Domb and J. Lebowitz, 1994.
2. J.Sivardiere and J.Lazierowicz, Phys.Rev. A 11, 2090, 1975.
3. D.Furman, S.Dattagupta and R.B.Griffiths, Phys.Rev. B. 15, 441, 1977.
4. M.Blume, V. Emery and R.B. Griffiths, Phys.Rev. A 4. 1071, 1971.
5. D.Mukamel, M.Blume, Phys.Rev. A 10, 610, 1974.
6. M.Schick and W-H. Shih, Phys.Rev. Lett. 59, 1205, 1987.
7. J.Lerczak, M.Schick, G.Gompper, Phys.Rev. A 46, 985, 1992.
8. M.W.Matsen and M.Schick, Macromolecules, 1993.
9. M.Kahlweit, M.Strey, P.Firman, J.Phys.Chem. 90, 671, 1986.
10. J.S. Rowlinson and B.Widom, Molecular Theory of Capillarity (Clarendon Press, Oxford), 1982.
11. G.Gompper and M.Schick, Phys.Rev A 42, 2137, 1990.
12. M. Teubner, R. Strey. J. Chem. Phys. 87, 3195, 1987.
13. G.Gompper and M.Kraus, Phys.Rev. E., 1993.
14. P.B.Canham, J.Theor.Biol. 26, 61, 1970.
15. W.Helfrich, Z.Naturforsch, 28c, 693, 1973.
16. A.M.Polyakov, Nucl.Phys. B268, 406, 1986.
17. E.Evans, Biophys. J. 14,923, 1974.
18. P.G. de Gennes and C.Taupin, J.Phys.Chem. 86, 2294, 1982.
19. K.Kawasaki, T.Kawakatsu, Physica A 167, 549, 1990
20. G.Gompper and S.Zschocke, Europhys.Lett. 16, 731, 1991
21. C. Guerra, A.M. Somoza, M.M. Telo da Gama. J. Chem. Phys., 109, 1152, 1998.

THERMODYNAMICS OF A PSEUDOSPIN-ELECTRON MODEL

Tabunshchuk K.V.

*Institute for Condensed Matter Physics Nat. Acad. Sci. Ukr.
1 Svientsitskii Str., UA-79011 Lviv, Ukraine*

Introduction

Pseudospin-electron (PE) model is one of theoretical models which considers the interaction of electrons with local lattice vibrations where an anharmonic variables are represented by pseudospins. The theoretical investigation of the PE model is an enduring subject of interest at the quantum statistics department.

The model is used to describe the strongly correlated electrons of CuO₂ sheets coupled with the vibrational states of apex oxygen ions O_{IV} (which move in the double-well potential) in YBaCuO type high-T_c superconductors (HTSC) [1]. Recently a similar model has been applied for investigation of the proton-electron interaction in molecular and crystalline systems with hydrogen bonds [2].

The model Hamiltonian is the following:

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

$$H_i = U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{\sigma} n_{i\sigma} + g \sum_{\sigma} n_{i\sigma} S_i^z - h S_i^z,$$

where the strong single-site electron correlation U , interaction with the anharmonic mode (g -term), and the energy of the anharmonic potential asymmetry (h -term) are included in the single-site part. Hamiltonian (1) also contains terms, which describe electron transfer t_{ij} and direct interaction between pseudospins J_{ij} . The energy of the electron states at the lattice site is accounted from the level of chemical potential μ .

In the case of strong coupling ($g \gg t$) and correlation ($U \gg t$) the perturbation theory can not be applied. It is reasonable to include these one in zero order Hamiltonian (single-site Hamiltonian H_i). Its eigenfunctions are build of the vectors $|n_{i\uparrow}, n_{i\downarrow}, S_i^z\rangle$, which form the full unit cell state basis [3]:

$$|1\rangle = |0, 0, \frac{1}{2}\rangle, \quad |2\rangle = |1, 1, \frac{1}{2}\rangle, \quad |3\rangle = |0, 1, \frac{1}{2}\rangle, \quad |4\rangle = |1, 0, \frac{1}{2}\rangle, \quad (2)$$

$$|\tilde{1}\rangle = |0, 0, -\frac{1}{2}\rangle, \quad |\tilde{2}\rangle = |1, 1, -\frac{1}{2}\rangle, \quad |\tilde{3}\rangle = |0, 1, -\frac{1}{2}\rangle, \quad |\tilde{4}\rangle = |1, 0, -\frac{1}{2}\rangle.$$

In the early works the main attention at the investigation of this model has been paid to the examination of electron states, effective electron-electron interaction, to the elucidation of additional possibilities of occurrence of superconducting pair correlations. On the basis of PE model a possible connection between the superconductivity and lattice instability of the ferroelectric type in HTSC has been discussed [4,5]. A series of works has been carried out in which the pseudospin $\langle S^z S^z \rangle$, mixed $\langle S^z n \rangle$ and charge $\langle nn \rangle$ correlation functions were calculated. It has been shown with the use of the generalized random phase approximation (GRPA) in the limit $U \rightarrow \infty$ [3,6], that there exists a possibility of divergences of these functions at some values of temperature. This effect was interpreted as a manifestation of dielectric instability or ferroelectric type anomaly. The tendency to the spatially modulated charge and pseudospin ordering at the certain model parameter values was found out. The analysis of ferroelectric type instabilities in the two-sublattice model of high temperature superconducting systems has been made [7]. The influence of oxygen nonstoichiometry on localization of apex oxygen in YBa₂Cu₃O_{7-x} type crystals is studied in the work [8].

The purpose of this article (lecture) is to present the thermodynamics of the PE model in the case of the different type interactions between pseudospins. First, we provide an overview of the results of works which deal with the theoretical investigation of the PE model with the inclusion of the *direct pseudospin-pseudospin interaction* (but without the electron transfer ($t_{ij} = 0$)). Second, we present the results of the investigation of the model in the case of the absence of the direct pseudospin-pseudospin interaction and Hubbard correlation ($J_{ij} = 0, U = 0$), when *interaction between pseudospins via conducting electron is done*.

1. Direct interaction between pseudospins.

1.1. Ferroelectric type interaction.

The work [9] is devoted to the study of the PE model in the case of zero electron transfer ($t_{ij} = 0$). The direct interaction between pseudospins is taken into account. It is supposed to be a long-ranged that allows one to use the mean field approximation (MFA). In this approximation, the model Hamiltonian has the following form:

$$H = \sum_i \tilde{H}_i + \frac{N}{2} J \eta^2, \quad \tilde{H}_i = -\mu \sum_{\sigma} n_{i\sigma} + U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + g \sum_{\sigma} n_{i\sigma} S_i^z - (h + J\eta) S_i^z.$$

The interaction ($J_{ij} \sim J/N$) is taken as the ferroelectric type one;

the order parameter $\eta = \langle S_i^z \rangle$ does not depend on the unit cell index.

Grand canonical potential and partition function of the model, calculated per one lattice site are equal to

$$\frac{\Omega}{N} = -T \ln Z_i + \frac{1}{2} J \eta^2, \quad (3)$$

$$Z_i = 2 \left[\cosh \beta h_n + e^{-\beta(U-2\mu)} \cosh \beta(h_n - g) + 2e^{\beta\mu} \cosh \beta \left(h_n - \frac{g}{2} \right) \right],$$

where $h_n = h/2 + J\eta/2$.

Then, all thermodynamic properties can be derived from the presented formulae (3).

The average number of electrons is determined as follows [9]:

$$-\frac{1}{N} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, h, \mu} = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i n_i \right\rangle \equiv \langle n \rangle. \quad (4)$$

The equation for the order parameter is obtained from the thermodynamical relation [9]:

$$\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \eta} \right)_{T, h, \mu} = 0. \quad (5)$$

For the investigation of equilibrium conditions one should separate two regimes: $\mu = \text{const}$ and $n = \text{const}$. We would like to note that hereafter we shall demonstrate the results of numerical investigation which show the main features of the considered model.

1.1.1. $\mu = \text{const}$ regime.

The $\mu = \text{const}$ regime corresponds to the case when, for example, charge redistribution between the conducting sheets CuO_2 and other structural elements is allowed. For this regime the equilibrium is defined by the minimum of the grand canonical potential that form an equation for pseudospin mean value (5) and expression for $\langle n \rangle$ (4).

At some regions of h values the field dependencies $\eta(h)$ possesses S -like behaviour Fig. 1 (the first order phase transition with the jump of order parameter and electron concentration take place at the change of field h). The phase transition point is presented by a crossing point on the dependence $\Omega(h)$.

The phase diagram $T_c - h$ is shown in Fig. 2. One can see that with respect to Ising model the phase coexistence curve is shifted in field and distorted from the vertical line and hence the possibility of the first order phase transition with the temperature change exists in PE model.

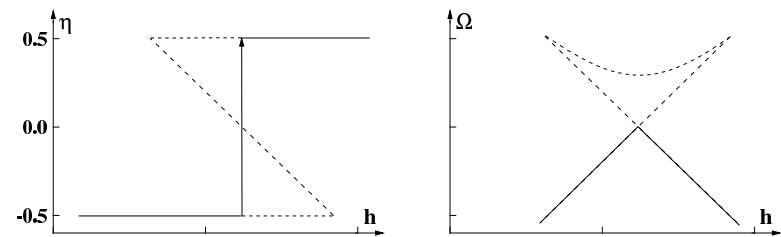


Figure 1. Field dependencies of the order parameter and grand canonical potential ($T = 0$).

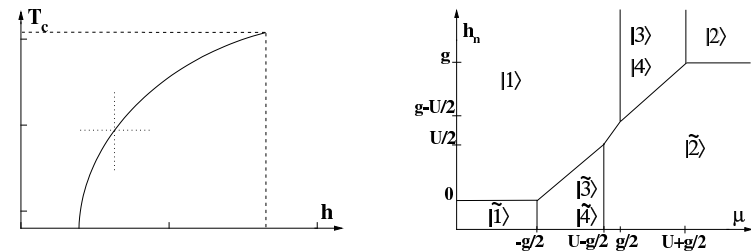


Figure 2. $T_c - h$ and $\mu - h$ phase diagrams.

The phase diagram $\mu - h$ (Fig. 2) indicate stability regions for states with $\eta = \pm 1/2$ ($U < g$ and $T = 0$). The form of diagram depends on the relation between U and g parameter values [9]. Transitions between regions $|r\rangle \leftrightarrow |p\rangle$, $|\tilde{r}\rangle \leftrightarrow |\tilde{p}\rangle$ lead to the change of the average number of electrons only. At transitions $|r\rangle \leftrightarrow |\tilde{r}\rangle$ the flipping of pseudospin takes place, and at $|r\rangle \leftrightarrow |\tilde{p}\rangle$ ($r \neq p$) both processes occur.

Hence, the possibility of the first order phase transition with the change of field h and/or chemical potential μ takes place and is shown by thick line on phase diagram in Fig. 2.

1.1.2. $n = \text{const}$ regime.

In the regime of the fixed electron concentration value the equilibrium is determined by the minimum of free energy $F = \Omega + \mu N$ and form a set of equations (4), (5) for the chemical potential and order parameter.

Typical example of the $\eta(h)$ dependence is shown in Fig. 3 which corresponds to the $\langle n \rangle$ value in the interval $0 \leq n \leq 1$.

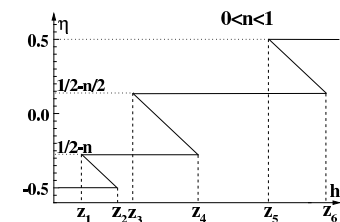


Figure 3. Field dependence of the order parameter ($T = 0$).

Phases $\eta = -\frac{1}{2}$ (phase 1), $\eta = \frac{1}{2} - n$ (phase 2), $\eta = \frac{1}{2} - \frac{n}{2}$ (phase 3), $\eta = \frac{1}{2}$ (phase 4) exist between phase transition points (which is determined according to the Maxwell rule from the range of S -like behaviour (between the spinodal points Z_i)) and outside of them. At the change of the model parameter values the regions, where metastable phases exist, can overlap, some phase transitions disappear (some intermediate phases can not be realized). In case $1 \leq n \leq 2$ the dependence $\eta(h)$ is generally similar. The phase 3 and phase 2' at $\eta = \frac{3}{2} - n$, which now appears instead of phase 2, may play the role of the intermediate phases.

On the phase diagram $n - h$ Fig. 4 the thick solid line indicates the phase coexistence curve and hence the possibility of the first order phase transition with the change of the longitudinal field h and/or electron concentration $\langle n \rangle$ takes place.

More detail analyse of a free energy behaviour shows that the above presented (in this paragraph) results are not realized. The investigation of the equilibrium conditions shows that the first order phase transition transforms into the phase separation. One can see regions where state with homogenous distribution of particles is unstable ($d\mu/dn \leq 0$), and the phase separation into the regions with different concentrations exists (Fig. 5). The phase diagram $n - h$ (Fig. 5) illustrates the separation phases.

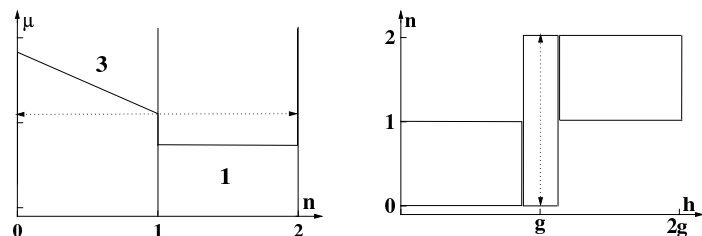


Figure 5. Dependence of the chemical potential μ on the electron concentration and $n - h$ phase separation diagram ($T = 0$).

The phase 3 splits into phase 4 (with concentration $n = 0$, order parameter $\eta = \frac{1}{2}$) and phase 1 ($n = 2$, $\eta = -\frac{1}{2}$) with weight coefficients $1 - n$ and n respectively (thin dotted lines in Fig. 4 and Fig. 5).

Therefore, more convenient and thermodynamically stable is the phase separated state, which is the mixture of states with different electron concentrations and different values of order parameters.

1.2. Antiferroelectric type interaction.

In the case of antiferroelectric type interaction it is convenient to introduce two kinds of sites (A-sites, B-sites). These corresponds to the doubling of the lattice period [10].

Within the framework of the MFA we shall write:

$$S_A^z S_B^z = -\eta_A \eta_B + \eta_A S_B^z + \eta_B S_A^z, \quad (6)$$

where $\eta_A = \langle S_A^z \rangle$, $\eta_B = \langle S_B^z \rangle$.

Then, we obtain the following expression for the model Hamiltonian:

$$\begin{aligned} H &= \sum_i \tilde{H}_{iA} + \sum_j \tilde{H}_{jB} + N \left\{ \frac{J_1}{2} \eta_A \eta_B + \frac{J_2}{4} (\eta_A^2 + \eta_B^2) \right\}, \\ \tilde{H}_{iA} &= -\mu(n_{iA\downarrow} + n_{iA\uparrow}) + U n_{iA\downarrow} n_{iA\uparrow} + g(n_{iA\downarrow} + n_{iA\uparrow}) S_{iA}^z - \\ &\quad -(h + J_1 \eta_B + J_2 \eta_A) S_{iA}^z, \\ \tilde{H}_{jB} &= \tilde{H}_{jA}|_{A \leftrightarrow B}. \end{aligned} \quad (7)$$

The Hilbert space forms as a direct product of the eigenfunctions (2) for \tilde{H}_A and \tilde{H}_B operators (7) $\{|n_{iA\uparrow} N_{iA\downarrow}, S_{iA}^z\rangle\} \oplus \{|n_{iB\uparrow} N_{iB\downarrow}, S_{iB}^z\rangle\}$. The analytical consideration in this case in general is very similar to the previous (ferromagnetic interaction) one, but formulae are more complicated (see in details [10]).

Grand canonical potential can be written in the form:

$$\begin{aligned} \Omega &= J_1 \eta_A \eta_B + \frac{J_2}{2} (\eta_A^2 + \eta_B^2) + T \ln \left\{ \left(\eta_A^2 - \frac{1}{2} \right) \left(\eta_B^2 - \frac{1}{2} \right) \right\} \\ &\quad - T \ln \left(1 + e^{-\beta(-2\mu+U+g)} + 2e^{-\beta(-\mu+\frac{g}{2})} \right) \\ &\quad - T \ln \left(1 + e^{-\beta(-2\mu+U-g)} + 2e^{-\beta(-\mu-\frac{g}{2})} \right). \end{aligned} \quad (8)$$

1.2.1. $\mu = \text{const}$ regime.

The set of equations for η_A , η_B is defined by the minimum of the grand canonical potential (8). The expression for the electron mean values is determined from the thermodynamical relation (4).

The form of the grand canonical potential field dependence $\Omega(h)$ (and therefore the type and number of phase transitions) depends on the relation between parameters J_1 and J_2 values (Fig. 6). There are no any specific behaviour when J_1 and J_2 are placed in the regions 5 and 6. The case when J_1

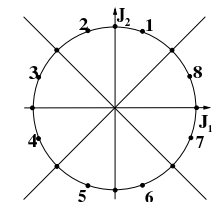


Figure 6. $J_1 - J_2$ area.

and J_2 are placed in the domains 1, 7, 8 is similar to ferroelectric type interaction.

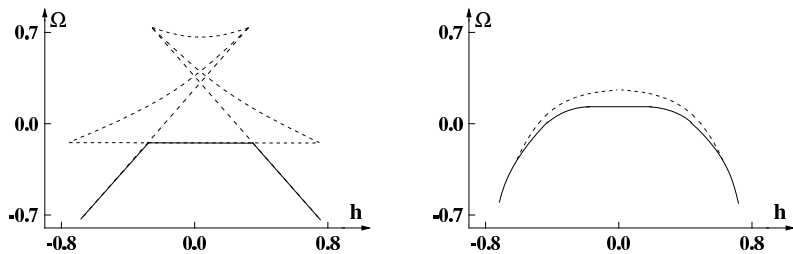


Figure 7. Field dependencies of grand canonical potential within the 2 and 4 regions respectively ($T = 0$).

The location of J_1 and J_2 parameters within the area 4 leads to the possibility of the two sequential second order phase transitions: from the ferroelectric phase (FP) with the one pseudospin mean value to the antiferroelectric phase (AP) and then to the FP with the another order parameter value (Fig. 7).

The case when J_1 and J_2 belong to the region 2, 3 is shown in Fig. 7 and the corresponding phase diagram μ - h in Fig. 8.

One can see that two first order phase transitions with the change of the field h and/or chemical potential μ take place. With respect to ferroelectric type interaction between pseudospins (Fig. 2) the phase coexistence curve is split and one obtains the range (the range width is equal J_1) where the AP exists (Fig. 8). With the temperature increase the first order phase transitions transform into the second order phase transitions. Hence the possibility of the first order phase transition from FP into AP and then the second order phase transition from AP into FP exist with the temperature increase for the narrow range of h values.

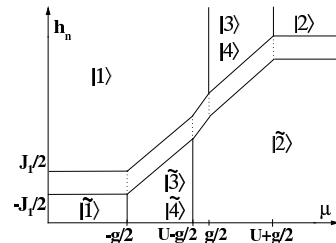


Figure 8. μ - h phase diagram ($T = 0$).

1.2.2. $n = \text{const}$ regime.

As it was mentioned above, in the case of the fixed value of the electron concentration (regime $n = \text{const}$) the first order phase transition transform into the phase separation.

In Fig. 9 one present the phase diagram n - h when J_1, J_2 are placed in the region 2. Within the area surrounded by the lines the phase separation into the regions with different concentrations and phases FP (solid lines) and AP (dotted lines) takes place. Outside of these boundaries (which surround the phase separated states) the state with the space homogeneity of electron concentration (FP) is stable. Between the boundaries one have the AP.

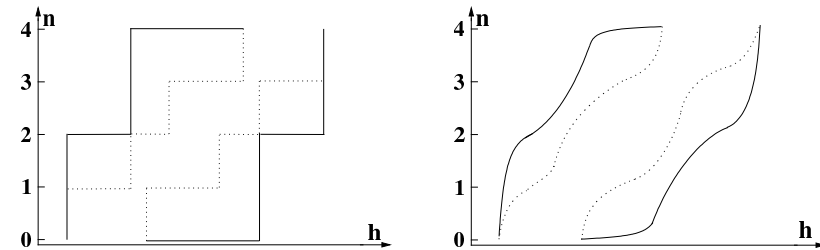


Figure 9. n - h phase diagram ($T = 0$ and $T \neq 0$).

We would like to remind that in the $\mu = \text{const}$ regime with the temperature increase the first order phase transitions transform into the second order ($J_1, J_2 \in \text{domain } 2,3$). On the other hand, in the $n = \text{const}$ regime this correspond to the narrowing of the range of the phase separated states and transform into the second order phase transition curves. Then the phase transition curves approach one to another and, finally, disappear at the certain value of temperature.

The location of J_1, J_2 within the area 4 leads to the possibility of the two second order phase transitions with the change of the field (similar to the $\mu = \text{const}$ regime).

2. Interaction between pseudospins via conducting electron.

In the $U = 0$ and $J_{ij} = 0$ limit operator (1) can be transformed to the Hamiltonian of the electron subsystem of binary alloy in the case of equilibrium disorder. Model (1) is close to the Falicov-Kimball (FK) model but differ in thermodynamic equilibrium conditions, i.e. in a way how self-consistency is achieved ($\langle S^z \rangle = \text{const}$ for the FK model and $h = \text{const}$ for the PE one).

In the present part of work we propose (for the case of the $U = 0$ and $J_{ij} = 0$ limit) the self-consistent scheme for calculation of mean values of pseudospin and particle number operators, grand canonical potential as

well as correlation functions. The approach is based on the GRPA with the inclusion of the mean field corrections. The possibilities of the phase separation and chess-board phase appearance are investigated [11].

The calculation is performed in the strong coupling case ($g \gg t$) using of single-site states as the basic one. The formalism of electron creation (annihilation) operators $a_{i\sigma} = b_{i\sigma} P_i^+$, $\tilde{a}_{i\sigma} = b_{i\sigma} P_i^-$ ($P_i^\pm = \frac{1}{2} \pm S_i^z$) acting at a site with the certain pseudospin orientation is introduced. Expansion of the calculated quantities in terms of electron transfer leads to the infinite series of terms containing the averages of the T -products of the $a_{i\sigma}$, $\tilde{a}_{i\sigma}$ operators. The evaluation of such averages is made using the corresponding Wick's theorem. The averages of the products of the projection operators P_i^\pm are expanded in semi-invariants [11].

Nonperturbated electron Green function is equal to

$$g(\omega_n) = \langle g_i(\omega_n) \rangle; \quad g_i(\omega_n) = \frac{P_i^+}{i\omega_n - \varepsilon} + \frac{P_i^-}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon}}, \quad (9)$$

where $\varepsilon = -\mu + g/2$, $\tilde{\varepsilon} = -\mu - g/2$ are single-site energies. Single-electron Green function (calculated in Hubbard-I type approximation) is $\Rightarrow = G_{\mathbf{k}}(\omega_n) = (g^{-1}(\omega_n) - t_{\mathbf{k}})^{-1}$ and its poles determine the electron spectrum

$$\varepsilon_{I,II}(t_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{2}(2E_0 + t_{\mathbf{k}}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{g^2 + 4t_{\mathbf{k}}\langle S^z \rangle g + t_{\mathbf{k}}^2}. \quad (10)$$

In the adopted approximation the diagrammatic series for the pseudospin mean value can be presented in the form

$$\langle S^z \rangle = \bullet = \circ - \text{loop} + \frac{1}{2!} \text{loop}^2 - \dots \quad (11)$$

Here we use the following diagrammatic notations: $\circ - S^z$, $\text{---}\triangleleft\text{---} - g_i(\omega_n)$, wavy line is the Fourier transform of hopping $t_{\mathbf{k}}$. Semi-invariants are represented by ovals and contain the δ -symbols on site indexes. In the spirit of the traditional mean field approach [11] the renormalization of the basic semi-invariant by the insertion of independent loop fragments is taken into account in (11).

The analytical expression for the loop is the following:

$$\begin{aligned} \text{loop} &= \frac{2}{N} \sum_{n,\mathbf{k}} t_{\mathbf{k}}^2 \frac{(P_i^+(i\omega_n - \varepsilon)^{-1} + P_i^-(i\omega_n - \tilde{\varepsilon})^{-1})}{g^{-1}(\omega_n) - t_{\mathbf{k}}} \\ &= \beta(\alpha_1 P_i^+ + \alpha_2 P_i^-). \end{aligned} \quad (12)$$

It should be noted that within the self-consistent scheme of the GRPA, the chain fragments form the single-electron Green function in the Hubbard-I approximation and in the sequences of loop diagrams in the expressions for grand canonical potential Ω and pair correlation functions ($\langle S_i^z S_j^z \rangle$, $\langle S_i^z n_j \rangle$, $\langle n_i n_j \rangle$) the connections between any two loops by more than one semi-invariant are omitted. This procedure includes the renormalization of the higher order semi-invariants, which is similar to the one given by expression (11).

From (11) and (12) follows the equation for pseudospin mean value

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} \tanh \left\{ \frac{\beta}{2} (h + \alpha_2 \langle S^z \rangle) - \alpha_1 \langle S^z \rangle + \ln \frac{1 + e^{-\beta\varepsilon}}{1 + e^{-\beta\tilde{\varepsilon}}} \right\}. \quad (13)$$

The grand canonical potential in the considered approximation has the form:

$$\begin{aligned} \Delta\Omega = \Omega - \Omega \Big|_{t=0} &= -\frac{2}{N\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln \frac{(\cosh \frac{\beta}{2} \varepsilon_I(t_{\mathbf{k}})) (\cosh \frac{\beta}{2} \varepsilon_{II}(t_{\mathbf{k}}))}{(\cosh \frac{\beta}{2} \varepsilon) (\cosh \frac{\beta}{2} \tilde{\varepsilon})} + \langle S^z \rangle (\alpha_2 - \alpha_1) \\ &- \frac{1}{\beta} \ln \cosh \left\{ \frac{\beta}{2} (h + \alpha_2 - \alpha_1) + \ln \frac{1 + e^{-\beta\varepsilon}}{1 + e^{-\beta\tilde{\varepsilon}}} \right\} + \frac{1}{\beta} \ln \cosh \left\{ \frac{\beta}{2} h + \ln \frac{1 + e^{-\beta\varepsilon}}{1 + e^{-\beta\tilde{\varepsilon}}} \right\} \end{aligned}$$

The solution of equation (13) and calculation of potential Ω were performed numerically.

In the $\mu = \text{const}$ regime (in the uniform case) there exists a possibility of the first order phase transition with the jump of the pseudospin mean value and reconstruction of the electron spectrum [11].

In the $n = \text{const}$ regime one can see (Fig. 10) that the regions with $d\mu/dn \leq 0$, where states with a homogeneous distribution of particles are unstable, exist. This corresponds to the phase separation into the states with different electron concentrations and pseudospin mean values. In the phase separated region the free energy as a function of n deflects up (Fig. 10) and concentrations of the separated phases are determined by the tangent line touch points (these points are also the points of binodal lines which are determined according to the Maxwell rule from the function $\mu(n)$).

The analysis of the $\langle S^z S^z \rangle_{\mathbf{q}}$ correlator temperature behaviour shows that the high temperature phase become unstable with respect to fluctuations with $\mathbf{q} \neq 0$ for certain values of model parameters. The maximal temperature of instability is achieved for $\mathbf{q} = 0$ or $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ (in the case of square lattice with nearest-neighbor hopping) and indicates the possibility of phase transition into a modulated (chess-board) phase.

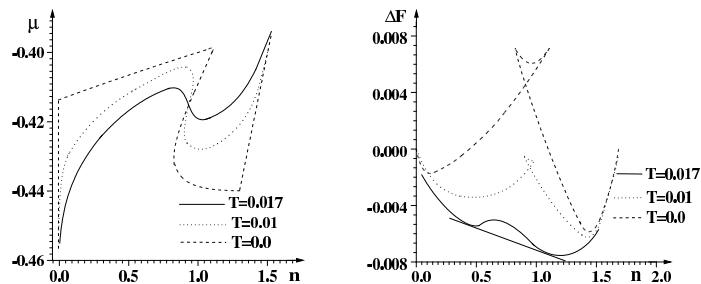


Figure 10. Dependence of the chemical potential μ on the electron concentration n and deviation of the free energy from linear dependence $\Delta F = F(n) - [\frac{n}{2}F(2) + (1 - \frac{n}{2})F(0)]$ for different T values.

The analytical consideration of the chess-board phase within the framework of the presented above approximation can be performed in a similar way.

From the comparison of the grand canonical potential Ω values for uniform and chess-board phases, the (μ, h) phase diagram is obtained (Fig. 11). One can see that chess-board phase exists as an intermediate one between the uniform phases with the different $\langle S^z \rangle$ and n values. The transition between different uniform phases (bistability) is of the first order (Fig. 11, dashed line), while the transition between the uniform and modulated ones is of the first (dotted line) or second (solid line) order.

Appearance of various phases in the considered model remind the situation known for the FK model with a rich phase diagram [12]. However, contrary to this model, an existence of uniform phases is possible in our case. This results from the another regime of thermodynamic averaging (fixation of h field which is analogous to the chemical potential in the FK model).

References

1. Müller K.A., *Z. Phys. B*, vol. 80, 193 (1990).
2. Matsushita E., *Phys.Rev. B*, vol. 51, No 24, 17332 (1995).

3. Stasyuk I.V., Shvaika A.M., *Acta Physica Polonica A*, vol. 85, No 2, 363 (1994).
4. Hirsch J.E., Tang S., *Phys.Rev. B*, vol. 40, No 4, 2179 (1989).
5. Frick M., von der Linden W., Morgenstern I., Raedt H., *Z. Phys. B*, vol. 81, 327 (1990).
6. Stasyuk I.V., Shvaika A.M., Danyliv O.D. *Molecular Physics Reports*, vol. 9, 61 (1995).
7. Danyliv O.D., Stasyuk I.V., *Condensed Matter Physics*, vol. 7, 163, (1996).
8. Stasyuk I.V., Velychko O.V., *Ukr.Phys.Journal*, vol. 44, No 6, 772 (1999).
9. Stasyuk I.V., Havrylyuk Yu., *Preprint of the Institute for Condensed Matter Physics*, ICMP-98-18E, Lviv 1998, p. 20.
10. Stasyuk I.V., Dublenych Yu.I., *Preprint of the Institute for Condensed Matter Physics*, ICMP-99-07U, Lviv 1999, p. 26 .
11. Stasyuk I.V., Shvaika A.M., Tabunshchik K.V., *Condensed Matter Physics*, vol. 2, No 1(17), 109 (1999).
12. Freericks J.K., *Phys. Rev. B*, vol. 47, 9263 (1993).

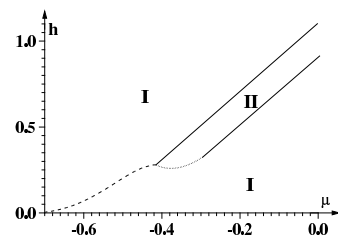


Figure 11. μ - h phase diagram. I – uniform phase, II – chess-board phase.

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/>)

ІЗИНГІВСЬКІ ЧИТАННЯ-99 (ЛЬВІВ, 20 ТРАВНЯ 1999)

Роботу отримано 30 вересня 1999 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром ІФКС НАН України

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені