

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-01-01U

Ю.І.Дубленич

ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ ТА РОЗШАРУВАННЯ ФАЗ У
ПСЕВДСПІН-ЕЛЕКТРОННІЙ МОДЕЛІ З ПРЯМОЮ
ВЗАЄМОДІЄЮ ПСЕВДСПІНІВ БЕЗ ПОПЕРЕЧНОГО ПОЛЯ
ТА ПЕРЕНЕСЕННЯ ЕЛЕКТРОНІВ

УДК: 544.015.4

PACS: 74.65+n, 71.45.Gm

Фазові переходи та розшарування фаз у псевдоспін-електронній моделі з прямою взаємодією псевдоспінів без поперечного поля та перенесення електронів

Ю.І.Дубленич

Анотація. Показано, що статистичну суму псевдоспін-електронної моделі з прямою взаємодією псевдоспінів, однак без електронного перенесення та поперечного поля, можна виразити через статсуму моделі Ізінга із залежним від температури позовжнім полем. Доведено, що в режимі сталого хемічного потенціалу μ існують температурні фазові переходи першого роду зі стрибкоподібною зміною середнього значення псевдоспіна та середньої концентрації електронів n , а в режимі $n = const$ відбувається розшарування на фази з різними значеннями цих величин. Одержано точні вирази для кривої співіснування фаз ($\mu = const$) та кривих фазового розшарування ($n = const$).

Phase transitions and phase separation in a pseudospin-electron model with direct interaction between pseudospins without electron transfer and transverse field

Yu.I. Dublanych

Abstract. It is shown that the partition function for the pseudospin-electron model with direct interaction between pseudospins but without electron transfer and transverse field can be expressed in terms of the partition function for the Ising model in a temperature dependent external field. It is proved that in the regime of constant chemical potential μ , temperature first order phase transitions with jumps of mean values of pseudospins and average electron concentration n exist. In the $n = const$ regime, the separation into phases with different values of these magnitudes takes place. Exact expressions for the phase coexistence curve ($\mu = const$) and the phase separation curves ($n = const$) are obtained.

1. Вступ

Псевдоспін-електронну модель було запропоновано для опису фізичних процесів, у високотемпературних надпровідниках типу $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ [1,2]. Їх незвичайні властивості зумовлені, по-перше, сильною електронною кореляцією Габбардового типу в зонах провідності, основний внесок в які дають надпровідні площини $\text{Cu}_2\text{-O}_2$, а по-друге, сильно ангармонічними коливаннями так званих апексних йонів кисню O_4 [3]. Виявлено також помітну кореляцію між заповненістю електронних станів в йонах Cu_2 і відстанню $\text{O}_4\text{-Cu}_2$ [4]. Ці факти свідчать про сильну електронно-коливну взаємодію. І вже в перших публікаціях про можливі механізми високотемпературної надпровідності розглядали підсилення ефективного притягання між електронами внаслідок їх взаємодії з ангармонічними фононами [5–7].

Гамільтоніан псевдоспін-електронної моделі має вигляд:

$$H = H_0 + \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma},$$

$$H_0 = \sum_i H_i = \sum_i [U n_{i\downarrow} n_{i\uparrow} - \mu(n_{i\downarrow} + n_{i\uparrow}) + g(n_{i\downarrow} + n_{i\uparrow}) S_i^z - \quad (1)$$

$$-h S_i^z - \Omega S_i^x].$$

Псевдоспінова змінна $S_i^z = \pm 1/2$ описує два можливі положення йона O_4 в подвійній потенціальній ямі. В одновузловій частині гамільтоніану враховано Габбардове відштовхування електронів U , псевдоспін-електронну взаємодію g , асиметрію подвійної потенціальної ями (поздовжнє поле h) та енергію тунельного розщеплення (поперечне поле Ω). μ – хемічний потенціал, $a_{j\sigma}$ – оператор знищення електрона зі спіном σ (σ набуває двох значень: \downarrow і \uparrow), $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}$ – оператор числа електронів. Другий член в гамільтоніані H описує перескоки електронів з вузла на вузол.

Ми розглядатимемо термодинаміку псевдоспін-електронної моделі, в якій додатково враховано ще псевдоспін-псевдоспінову взаємодію, зате знехтувано перескоками електронів та поперечним полем. Таку модель досліджено в наближенні середнього поля в роботі [8]. Подібне дослідження для двопідґраткової моделі зроблено в [9]. А в роботі [10] в наближенні середнього поля та однопетлевого проаналізовано двопідґраткову модель з протилежними напрямками поля h на різних підґратках. В згаданих роботах показано, що систему доцільно розглядати у двох різних режимах:

а) режим $\mu = \text{const}$. У цьому випадку електронні стани, не враховані явно в моделі, відіграють роль термостата, що й забезпечує сталість хемічного потенціалу. Стан термодинамічної рівноваги визначається мінімумом великого термодинамічного потенціалу;

б) режим $n = \text{const}$. У цьому режимі хемічний потенціал є функцією n , температури та параметрів моделі, а умова термодинамічної рівноваги – мінімум вільної енергії.

В наближенні середнього поля показано, що в режимі $n = \text{const}$ за змінювання поля h або температури можливі фазові переходи першого роду зі стрибкоподібною зміною параметра порядку $\eta = \langle S_i^z \rangle$ та середньої концентрації електронів, а в режимі $n = \text{const}$ відбувається розшарування на фази з різними значеннями η та n .

В даній роботі ми доведемо, що статусу розглядуваної моделі можна виразити через статусу моделі Ізінга із залежним від температури поздовжнім полем. Це дає змогу одержати точні вирази для кривої співіснування фаз (режим $\mu = \text{const}$) та кривих фазового розшарування (режим $n = \text{const}$).

2. Гамільтоніан, статистична сума та середня концентрація електронів

Отже, система, яку розглядатимемо, складається з двох підсистем: псевдоспінової та електронної. Псевдоспінову систему описує гамільтоніан Ізінга із поздовжнім полем h . Взаємодія між електронами – одновузлове кулонове відштовхування U . Взаємодія між псевдоспіною та електронною підсистемами також одновузлова і характеризується константою g . Гамільтоніан такої системи має вигляд

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

де

$$H_i = U n_{i\downarrow} n_{i\uparrow} - \mu(n_{i\downarrow} + n_{i\uparrow}) + g(n_{i\downarrow} + n_{i\uparrow}) S_i^z - h S_i^z - \quad (3)$$

одновузловий гамільтоніан. Вектори $|n_{i\uparrow}, n_{i\downarrow}, S_i^z\rangle$ (i – номер вузла) утворюють повний базис, в якому гамільтоніан H діагональний:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |0, 0, 1/2\rangle, & |\tilde{1}\rangle &= |0, 0, -1/2\rangle, \\ |2\rangle &= |1, 1, 1/2\rangle, & |\tilde{2}\rangle &= |1, 1, -1/2\rangle, \\ |3\rangle &= |0, 1, 1/2\rangle, & |\tilde{3}\rangle &= |0, 1, -1/2\rangle, \\ |4\rangle &= |1, 0, 1/2\rangle, & |\tilde{4}\rangle &= |1, 0, -1/2\rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

Зафіксуємо напрям псевдоспіна S_i^z . Статсума для одновузлового гамільтоніяна H матиме вигляд:

$$Z_{i\uparrow} = \left(1 + e^{-\beta(-2\mu+U+g)} + 2e^{-\beta(-\mu+\frac{g}{2})}\right) e^{\beta\frac{h}{2}} \equiv p e^{\beta\frac{h}{2}}, \quad (5)$$

якщо псевдоспін скерований вгору ($S_i^z = 1/2$), та

$$Z_{i\downarrow} = \left(1 + e^{-\beta(-2\mu+U-g)} + 2e^{-\beta(-\mu-\frac{g}{2})}\right) e^{-\beta\frac{h}{2}} \equiv q e^{-\beta\frac{h}{2}}, \quad (6)$$

якщо псевдоспін скерований вниз ($S_i^z = -1/2$); тут $\beta = 1/\theta = 1/(k_B T)$ – обернена термодинамічна температура.

Статистична сума для системи з N еквівалентними вузлами

$$Z = \sum_{k=0}^N \binom{N}{k} e^{-\beta\left(-\frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z\right)} e^{-\beta\left(\frac{N}{2}-k\right)h} p^k q^{N-k}. \quad (7)$$

Позначка (k) означає, що сумування проводиться за всіма можливими конфігураціями з k псевдоспінами вгору. Після елементарних перетворень збудемо:

$$Z = \left\{ \sum_{k=0}^N \binom{N}{k} e^{\frac{\beta}{2}\sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z} e^{-\beta\left(\frac{N}{2}-k\right)\left(h-\frac{1}{\beta}\ln\phi\right)} \right\} (pq)^{\frac{N}{2}}, \quad (8)$$

де

$$\phi = \frac{q}{p} = \frac{1 + e^{-\beta(-2\mu+U-g)} + 2e^{-\beta(-\mu-\frac{g}{2})}}{1 + e^{-\beta(-2\mu+U+g)} + 2e^{-\beta(-\mu+\frac{g}{2})}}. \quad (9)$$

Вираз у фігурних дужках – це статистична сума для моделі Ізінга з полем $h - \frac{1}{\beta} \ln \phi$. Позначимо її $Z_I\left(h - \frac{1}{\beta} \ln \phi\right)$. Отже,

$$Z(h) = Z_I\left(h - \frac{1}{\beta} \ln \phi\right) (pq)^{\frac{N}{2}}. \quad (10)$$

Запишімо вираз для великого термодинамічного потенціалу на один вузол:

$$\omega = \frac{\Omega}{N} = -\frac{1}{\beta N} \ln \left\{ Z_I\left(h - \frac{1}{\beta} \ln \phi\right) \right\} - \frac{1}{2\beta} \ln(pq). \quad (11)$$

Параметер порядку $\eta = \langle S_i^z \rangle$ та середнє число електронів n на вузол – це похідні ω за h та μ , відповідно, взяті з протилежним знаком:

$$\eta = -\frac{\partial \omega}{\partial h}, \quad n = -\frac{\partial \omega}{\partial \mu}. \quad (12)$$

Зрозуміло, що

$$\eta_I\left(h - \frac{1}{\beta} \ln \phi\right) = \eta(h), \quad (13)$$

де $\eta_I(h)$ – параметер порядку для моделі Ізінга з полем h . За допомогою простих перетворень, врахувавши (13), дістанемо такий вираз для n :

$$n = 2 - \phi_- (1 - 2\eta(h)) - \phi_+ (1 + 2\eta(h)), \quad (14)$$

$$\phi_{\pm} = \frac{1 + e^{-\beta(-\mu \pm \frac{g}{2})}}{1 + e^{-\beta(-2\mu+U \pm g)} + 2e^{-\beta(-\mu \pm \frac{g}{2})}}. \quad (15)$$

Вирази (9), (13), (14) та (15) дають змогу проаналізувати проблему фазових переходів та розшарування фаз в розглядуваній моделі.

3. Фазові переходи в режимі $\mu = const$

Якщо температура менша від критичної, в моделі Ізінга існує фазовий перехід першого роду за нульового поля h . З формули (13) випливає, що в нашій моделі в режимі $\mu = const$ фазовий перехід першого роду зі стрибкоподібними змінами параметра порядку η та середньої концентрації електронів відбувається за поля

$$h = \frac{1}{\beta} \ln \frac{1 + e^{-\beta(-2\mu+U-g)} + 2e^{-\beta(-\mu-\frac{g}{2})}}{1 + e^{-\beta(-2\mu+U+g)} + 2e^{-\beta(-\mu+\frac{g}{2})}}, \quad (16)$$

а критична температура така ж, як і для моделі Ізінга. Цікаво, що наближення середнього поля дає такий самий вираз для h [8].

Щоб дослідити поведінку кривої співіснування фаз в координатах температура-поле $h = h(\theta)$, знайдемо границі $h(\theta)$, якщо $\theta \rightarrow 0$ і $\theta \rightarrow \infty$. Функція $h = h(\theta, \mu, U, g)$ інваріантна відносно одночасної заміни $h \leftrightarrow -h$, $g \leftrightarrow -g$, тому досить розглянути $g \geq 0$ (тоді й $h \geq 0$).

Оскільки $\lim_{\theta \rightarrow \infty} h(\theta) = g$, функція $h = h(\theta)$ має асимптоту $h = g$. У випадку $0 < U < g$

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} h(\theta) = \begin{cases} 0, & \mu \leq -\frac{g}{2} \\ \mu + \frac{g}{2}, & -\frac{g}{2} < \mu \leq -\frac{g}{2} + U \\ 2\mu - U + g, & -\frac{g}{2} + U < \mu \leq \frac{g}{2} \\ \mu - U + \frac{3g}{2}, & \frac{g}{2} < \mu \leq \frac{g}{2} + U \\ 2g, & \mu > \frac{g}{2} + U. \end{cases} \quad (17)$$

У випадку $0 < g < U$

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} h(\theta) = \begin{cases} 0, & \mu \leq -\frac{g}{2} \\ \mu + \frac{g}{2}, & -\frac{g}{2} < \mu \leq \frac{g}{2} \\ g, & \frac{g}{2} < \mu \leq -\frac{g}{2} + U \\ \mu - U + \frac{3g}{2}, & -\frac{g}{2} + U < \mu \leq \frac{g}{2} + U \\ 2g, & \mu > \frac{g}{2} + U. \end{cases} \quad (18)$$

Якщо $\mu = U/2$, крива $h(\theta)$ переходить у пряму $h = g$, а криві $h = h(\theta)$ для $\mu_1 = U/2 - \Delta\mu$ та $\mu_2 = U/2 + \Delta\mu$ взаємно симетричні відносно цієї ж прямої $h = g$, тому достатньо розглядати μ з проміжка $]-\infty, U/2]$.

Цікаво дослідити поведінку кривої співіснування фаз для нульових та нескінченних електронних кореляцій на вузлі ($U = 0$ та $U \rightarrow \infty$). Якщо $U = 0$, то

$$h = \frac{2}{\beta} \ln \frac{1 + e^{-\beta(-\mu - \frac{g}{2})}}{1 + e^{-\beta(-\mu + \frac{g}{2})}}. \quad (19)$$

Якщо $U \rightarrow \infty$, то

$$h = \frac{1}{\beta} \ln \frac{1 + 2e^{-\beta(-\mu - \frac{g}{2})}}{1 + 2e^{-\beta(-\mu + \frac{g}{2})}}. \quad (20)$$

В останньому випадку крива $h(\theta)$ має асимптоту $h = 2g/3$. Якщо $g > 0$, то h як функція U спадна і криві $h(\theta)$ для всеможливих $U > 0$ заповнюють область між кривими $h(\theta)$ для $U = \infty$ та $U = 0$.

На рис.1 зображено декілька кривих $h = h(\theta)$ для одних і тих самих значень параметрів μ та g і різних значень U . Вигляд цих кривих не залежить ні від вимірності простору ($d \geq 2$), ні від типу ґратки, ні від псевдоспін-псевдоспінової взаємодії. Від цього залежить тільки критична температура.

Розгляньмо двовимірну квадратну ґратку з різними константами взаємодії J, J' між псевдоспінами по вертикалі та по горизонталі. Критичну температуру для такої ґратки можна визначити з рівняння (див. напр. [11])

$$k \equiv \left(\operatorname{sh} \frac{2J}{\theta} \operatorname{sh} \frac{2J'}{\theta} \right)^{-1} = 1. \quad (21)$$

Важливо відзначити, що на відміну від моделі Ізінга, у псевдоспін-електронній моделі (2) існує температурний (тобто за змінювання температури) фазовий перехід першого роду за фіксованого поля h , якщо $\mu \neq U/2$. Тоді $\langle S_i^z \rangle$ стрибає з $-\eta_I(0)$ до $+\eta_I(0)$. Для квадратної анізотропної ґратки (див. [11])

$$\eta_I(0) = \frac{1}{2} (1 - k^2)^{\frac{1}{8}}. \quad (22)$$

За певних умов можливі навіть два або й три такі переходи (див. рис.1 для $U=6$).

4. Розшарування фаз в режимі $n = const$

Розгляньмо криву $n(h)$, що задається виразом (14), за фіксованого μ . Беремо до уваги тільки термодинамічно стійкі стани, тобто стани, які відповідають мінімуму великого термодинамічного потенціалу. Тоді крива $n(h)$ матиме розрив першого роду (стрибок) в точці h , що визначається формулою (16). Якщо змінювати μ від $-\infty$ до $+\infty$, то ця крива опише на площині (h, n) певну область, яка, зрозуміло, не охопить всієї смуги $0 \leq n \leq 2$. Залишиться область, яку описує відрізок, що відповідає стрибку n в точці розриву. Це і є область фазового розшарування в режимі $n = const$. Рівняння кривої, що її обмежує, очевидно, має вигляд:

$$\begin{cases} h = \frac{1}{\beta} \ln \phi \\ \left[\begin{array}{l} n^- = 2 - \phi_-(1 - 2\eta_I(0)) - \phi_+(1 + 2\eta_I(0)) \\ n^+ = 2 - \phi_-(1 + 2\eta_I(0)) - \phi_+(1 - 2\eta_I(0)). \end{array} \right. \end{cases} \quad (23)$$

Це – параметричне рівняння, де параметром виступає μ . Тут n^- та n^+ – електронні концентрації розшарованих фаз з $\eta = +\eta_I(0)$ та $\eta = -\eta_I(0)$, відповідно.

Графіки кривих розшарування для квадратної анізотропної ґратки приведено на рис.2. Вони центрально симетричні відносно точки $h = g, n = 1$. Точки $(0, 0)$ та $(2g, 2)$ відповідають $\mu = -\infty$ та $\mu = +\infty$. За критичної температури область розшарування сплющується в лінію.

Можна побудувати також криві фазового розшарування в площині (n, θ) за фіксованого h . Такі криві приведено на рис.3. Области розшарування обмежені кривими $n^-(\theta)$, $n^+(\theta)$ та віссю n .

5. Результати

Отже, ми показали, що статусу псевдоспін-електронної моделі можна виразити через статусу моделі Ізінга із залежним від температури позовжнім полем. З цього випливають такі основні висновки:

1) критична температура моделі така ж, як і відповідної моделі Ізінга;

2) в режимі $\mu = const$ за фіксованого поля h можуть існувати один, два, або й три температурні фазові переходи першого роду, коли середнє значення псевдоспіна змінює знак, а також стрибком змінюється середня концентрація електронів. Знайдено точне рівняння для кривої співіснування фаз, яке не залежить ні від розмірності простору ($d \geq 2$), ні від типу ґратки;

3) в режимі фіксованого числа електронів існує нестійкість щодо розшарування на фази з протилежними значеннями середнього псевдоспіна та різними електронними концентраціями. Для квадратної анізотропної ґратки побудовано точні криві фазового розшарування.

Виразити статусу псевдоспін-електронної моделі через статусу відповідної спінової моделі можливо й для двопідґраткових моделей, які розглядалися в [9] та [10]. Для них також справедлива формула (14), однак $h(\theta)$ треба замінити на $h(\theta) - h_0(\theta)$, де $h_0(\theta)$ – крива співіснування фаз, якщо $g=0$.

Література

1. Müller K.A. // Z. Phys. B., 1990, vol. 80, p. 193; Phase Transitions, 1998 (Special issue).
2. Hirsh J.E., Tang S. // Phys. Rev. B, 1989, vol. 40, p. 2179.
3. Müller V., Hucho C., Maurer D. // Ferroelectrics, 1992, vol. 130, p. 45-76.
4. Cava R.J., Hewat A.W. // Physica C, 1990, vol. 165, p. 419.
5. Kurtz S.K., Hardy J.R., Flocken J.W. // Ferroelectrics, 1988, vol. 87, p. 29.
6. Plakida N.M. // Physica Scripta, 1989, vol. T29, p. 77.
7. Bussman-Holder A., Simon A., Butner H. // Phys. Rev. B, 1989, vol. 39, p. 207.
8. Stasyuk I.V., Havrylyuk Yu. // Cond. Matt. Phys., 1999, vol. 2, p. 487.

9. Стасюк І.В., Дубленич Ю.І. Фазові переходи та розділення фаз у псевдоспін-електронній моделі з прямою взаємодією антисегнетоелектричного типу. // Препринт Інституту фізики конденсованих систем, Львів, 1999, ICMP-99-07U, 26 с.
10. Danyliv O.D. // Physica C, 1998, vol. 309, p. 303.
11. Baxter R.J. Exactly Solved Models in Statistical Mechanics // Academic Press, 1982.

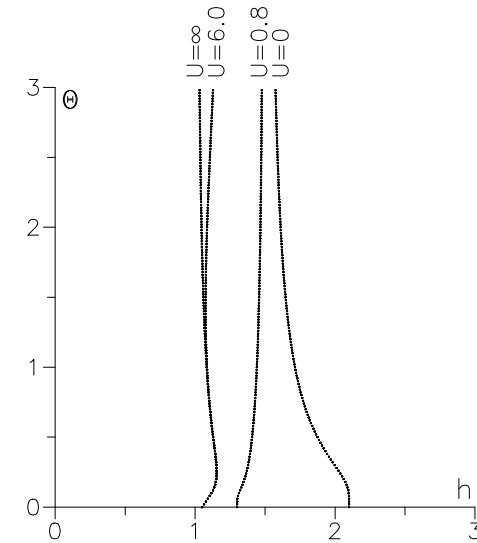


Рис. 1. Криві співіснування фаз у площині температура-поле (режим $\mu = const$) для різних значень U . $\mu=0.3$, $g=1.5$.

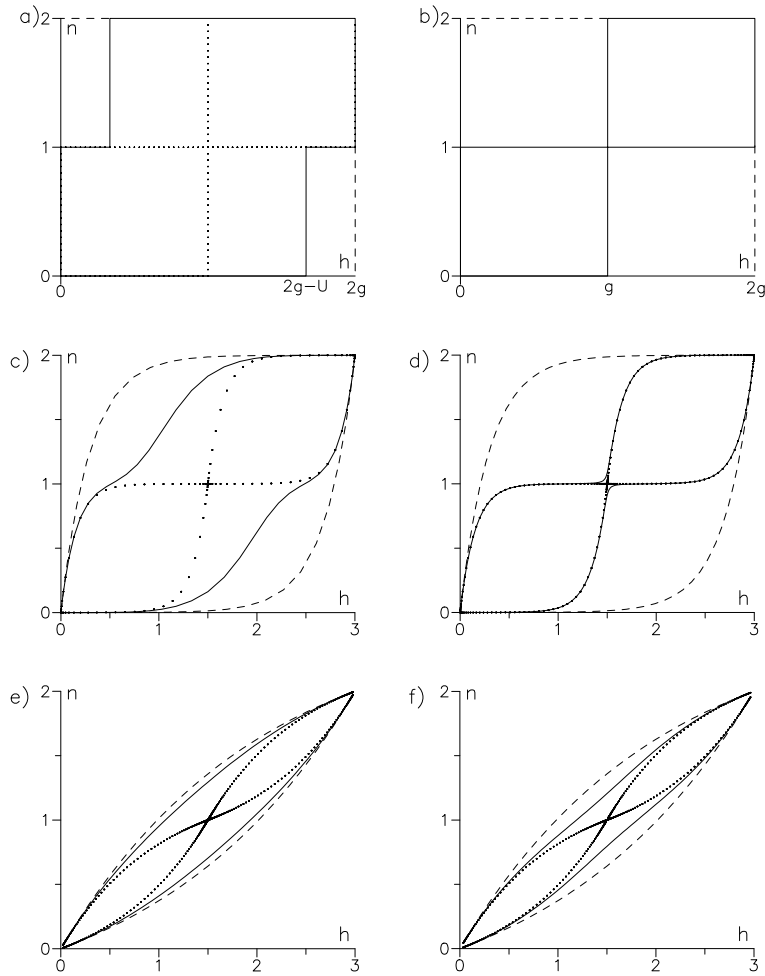


Рис. 2. Области розширення фаз у площині (h, n) . Пунктирними лініями зображено криві розширення для $U = \infty$, а штрихованими – для $U=0$. Суцільні лінії відповідають $0 < U < \infty$.

- a) $\theta=0$, $0 < U < g$; b) $\theta=0$, $0 < g < U$;
 c) $\theta=0.15$, $U=0.8$, $g=1.5$; d) $\theta=0.15$, $U=2.0$, $g=1.5$;
 e) $\theta=1.0$, $U=0.8$, $g=1.5$; f) $\theta=1.0$, $U=2.0$, $g=1.5$.

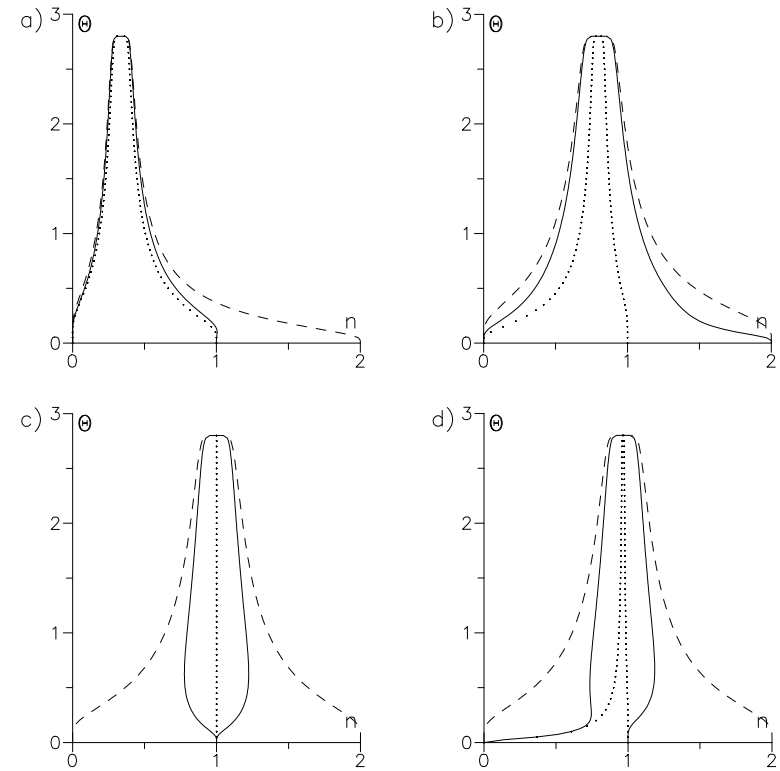


Рис. 3. Области розширення фаз у площині (n, θ) . Пунктирними лініями зображено криві розширення для $U = \infty$, а штрихованими – для $U=0$. Суцільні лінії відповідають $0 < U < \infty$. $J=1.0$, $J'=1.5$, $g=1.5$;

- a) $U=0.8$, $h=0.5$; b) $U=0.8$, $h=1.2$;
 c) $U=2.0$, $h=1.5$; d) $U=2.0$, $h=1.45$.

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

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

Ігор Васильович Стасюк
Юрій Ігорович Дубленич

ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ ТА РОЗШАРУВАННЯ ФАЗ У
ПСЕВДОСПІН-ЕЛЕКТРОННІЙ МОДЕЛІ З ПРЯМОЮ ВЗАЄМОДІЄЮ
ПСЕВДОСПІНІВ БЕЗ ПЕРЕНЕСЕННЯ ЕЛЕКТРОНІВ ТА ПОПЕРЕЧНОГО
ПОЛЯ

Роботу отримано 26 грудня 2000 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені