Физика низких температур, 1995, т. 21, № 8, с. 874–877 УДК 539.2

Модифицированная модель Изинга во внешнем поле

В. Л. Коварский, А. В. Христов

Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины, Украина, 340114, г. Донецк, ул. Р. Люксембург, 72

Статья поступила в редакцию 26 января 1995 г., после переработки 27 марта 1995 г.

Работа посвящена модифицированной модели Изинга (ММИ), учитывающей конечную величину энергетического барьера между состояниями. Изучено поведение ММИ в статическом внешнем поле. Получены температурные зависимости восприимчивости при различных значениях параметров модели. Рассмотрено метастабильное состояние, моделирующее стекло. Показана возможность наличия двух максимумов на зависимости $\chi(T)$. Все расчеты сделаны в приближении молекулярного поля.

Роботу присвячено модифікованій моделі Ізінга (ММІ), яка ураховує скінченну величину енергетичного бар'єра між станами. Вивчено поведінку ММІ в статичному зовнішньому полі. Одержано температурні залежності сприйнятливості при різних значеннях параметрів моделі. Розглянуто метастабільний стан, що моделює скло. Показано можливість існування двох максимумів на залежності $\chi(T)$. Усі розрахунки виконано у наближенні молекулярного поля.

Применение модели Изинга к описанию структурно разупорядоченных систем (кристаллов с водородными связями, ян-теллеровских кристаллов, сплавов внедрения и замещения и т.п.) основано на приближении бесконечного барьера между состояниями и соответственно бесконечных времен наблюдения. Роль барьера, однако, существенна в некоторых кинетических, равновесных и метастабильных свойствах структурно разупорядоченных систем (см. [1,2] и ссылки в них).

В работах [1,2] была предложена модифицированная модель Изинга (ММИ), дающая простой приближенный метод учета конечной высоты энергетического барьера между состояниями. Для одноузельного двухъямного потенциала

$$u(\xi) = \left(|\xi| - 1\right)^2 \tag{1}$$

свободная энергия в приведенных единицах определяется выражением [2]

$$f = -2j\eta^2 + \tau\left[\varphi\left(\eta + \frac{1-\theta}{3}\right) + \varphi\left(-\eta + \frac{1-\theta}{3}\right) + \varphi\left(\frac{1+2\theta}{3}\right) + \frac{2}{3}\theta \ln\frac{z_1}{z_0} - \frac{1}{3}\ln\left(z_1^2 z_0\right)\right], \tag{2}$$

$$\varphi(x) \equiv x \ln x, \tag{3}$$

где ξ — обобщенная координата; τ — абсолютная температура; j — константа парного взаимодействия; η и θ — структурный и динамический параметры порядка; z_1 и z_0 — парциальные статистические суммы.

Внешнее поле h деформирует потенциал:

$$u(\xi) = \left(|\xi| - 1\right)^2 - h\xi, \tag{4}$$

в результате чего смещаются координаты минимумов

$$\xi_{\pm} = \pm 1 - h/2 \tag{5}$$

и значения энергий в минимумах

$$\delta\varepsilon_{\pm} = \pm h - h^2/4. \tag{6}$$

Частичная статистическая сумма z_1 расщепляется на две:

$$z_{\pm} = \int_{\delta\varepsilon_{\pm}}^{1} e^{-\varepsilon/\tau} 2\pi d\varepsilon = 2\pi\tau\left(e^{-\delta\varepsilon_{\pm}/\tau} - e^{-1/\tau}\right), \tag{7}$$

$$\left.\begin{aligned} z_0 &= \int_1^{\infty} e^{-\varepsilon/\tau} g_0(\varepsilon) d\varepsilon, \\ g_0(\varepsilon) &= 2\pi + 2\left(\arcsin\frac{1-h/2}{(\varepsilon - \delta\varepsilon_+)^{1/2}} + \arcsin\frac{1+h/2}{(\varepsilon - \delta\varepsilon_-)^{1/2}}\right). \end{aligned}\right\} \tag{8}$$

© В. Л. Коварский, А. В. Христов, 1995

В результате свободная энергия

$$f = -2j\eta^2 + \tau\left[\varphi\left(\eta + \frac{1-\theta}{3}\right) + \varphi\left(-\eta + \frac{1-\theta}{3}\right) + \right.$$

$$\left. + \varphi\left(\frac{1+2\theta}{3}\right) + \frac{\theta}{3}\ln\frac{z_+z_-}{z_0^2} - \frac{1}{3}\ln\left(z_+z_-z_0\right)\right] - \tau\eta\ln\frac{z_-}{z_+}. \tag{9}$$

В слабых полях $h \ll 1$ два первых слагаемых сводятся к (2), а последнее превращается в линейную добавку

$$\delta f = -\frac{2\eta h}{1 - e^{-1/\tau}}, \tag{10}$$

которая при низких температурах $\tau \ll 1$ переходит в классическое выражение

$$\delta f = -2\eta h. \tag{11}$$

Это последнее можно назвать приближением «статистического» поля, поскольку в нем учитывается только изменение вероятностей заселения состояний, а не деформация потенциала (4).

В приближении (11) условия термодинамического равновесия $\partial f/\partial\eta = \partial f/\partial\theta = 0$ сводятся к системе [2]

$$\left.\begin{aligned} -4j\eta + \tau\ln\frac{1-\theta+3\eta}{1-\theta-3\eta} - 2h = 0 \\ 9\eta^2 - \left(1-\theta\right)^2 + \left(1+2\theta\right)^2\left(z_1/z_0\right)^2 = 0 \end{aligned}\right\}, \tag{12}$$

где $z_1 = z_\pm$ и z_0 берутся при $h = 0$. Восприимчивость

$$\chi = 2\frac{\partial\eta}{\partial h} = \left[-j + \frac{3}{2}\tau\frac{1-\theta}{(1+2\theta)^2(z_1/z_0)^2}\right]^{-1} \tag{13}$$

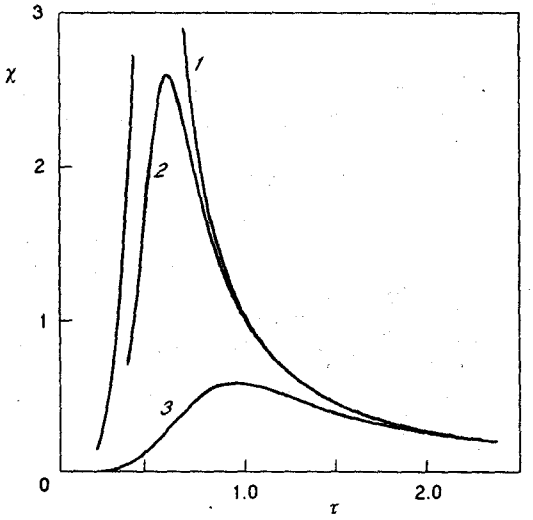

Рис. 1. Зависимость $\chi(\tau)$ в стабильном состоянии при $j = 0{,}5$ и различных h: 0 (*1*); 0,1 (*2*); 0,5 (*3*).

На рис. 1 приведены температурные зависимости восприимчивости для разных значений h. Очевидно, с ростом h достоверность результата падает. Расходимость $\chi(\tau)$ при $h = 0$, отвечающая фазовому переходу, в конечных полях превращается в плавный максимум. С ростом h положение максимума смещается вправо.

Для описания метастабильного стеклообразного состояния воспользуемся феноменологической моделью [1], согласно которой кристаллическая решетка представляет собой однородную смесь равнораспределенных узлов двух типов. В случае узлов типа 1 наложен запрет на заселение левой потенциальной ямы, а при типе 2 — правой. Это приводит к линейной зависимости параметров порядка

$$\frac{1-\theta_\pm}{3} \mp \eta_\pm = 0, \tag{14}$$

где верхние знаки берутся для типа 1, а нижние — для типа 2. В представлении новых параметров

$$\left.\begin{aligned} x = \eta_+ - \eta_- \\ y = \eta_+ + \eta_- \end{aligned}\right\}, \tag{15}$$

$$\left.\begin{aligned} 0 < x + y < 1 \\ 0 < x - y < 1 \end{aligned}\right\} \tag{16}$$

свободная энергия

$$f = -\frac{1}{2}jy^2 + \frac{1}{2}\tau\left[\varphi(x+y) + \varphi(x-y) + \varphi(1-x+y) + \right.$$

$$\left. + \varphi(1-x-y)\right] + \frac{1}{3}\tau(2-3x)\ln\left(z_1/z_0\right) - hy. \tag{17}$$

Условия устойчивости $f'_x = f'_y = 0$ удовлетворяются решениями двух типов

$$\left.\begin{aligned} y = 0 \\ \frac{x}{1-x} = \frac{z_1}{z_0} \end{aligned}\right\} \text{ — фаза 1,} \tag{18}$$

$$\left.\begin{aligned} -jy + \frac{1}{2}\tau\ln\left(\frac{x+y}{x-y}\,\frac{1-x+y}{1-x-y}\right) = 0 \\ \frac{x^2-y^2}{(1-x)^2-y^2} = \left(\frac{z_1}{z_0}\right)^2 \end{aligned}\right\} \text{ — фаза 2.} \tag{19}$$

В нулевом поле решение (18) соответствует стеклообразному метастабильному состоянию. Решение (19) следует исключить из рассмотрения как нефизическое. Дело в том, что модель (17) «придумана» для того, чтобы феноменологически заблокировать образование упорядоченной фазы (см. условие (14)). Поэтому мы полагаем, что частичное упорядочение в этой модели (фаза 2) представляет собой побочный эффект. Исключение фазы 2 логически непротиворечиво, поскольку фаза 1 ус-

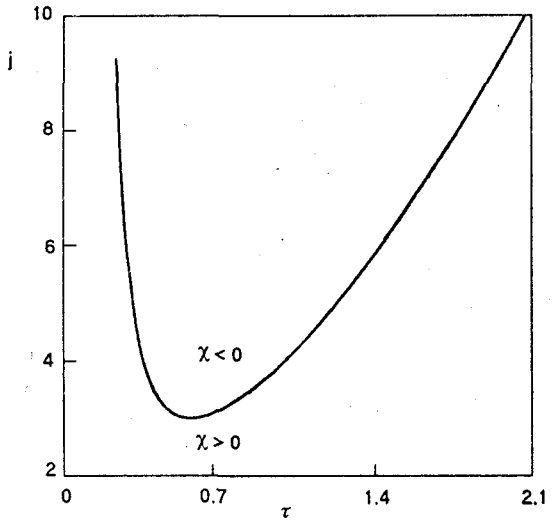

Рис. 2. Область устойчивости стеклообразной фазы (18).

тойчива при любых температурах, если j достаточно мало (рис. 2). Восприимчивость фазы в нулевом поле

$$\chi = \frac{\partial y}{\partial h} = \left\{-j + \tau\left[\frac{x}{x^2 - y^2} + \frac{1-x}{(1-x)^2 - y^2}\right]\right\}^{-1}. \quad (20)$$

Поведение $\chi(\tau)$ при разных значениях параметров показано на рис. 3.

Обратим внимание на сопоставление кривых $\chi(\tau)$ для стабильного и метастабильного состояний (рис. 4). Переход из метастабильного в стабильное состояние при любой температуре может привести к характерному «двугорбому» виду температурно-

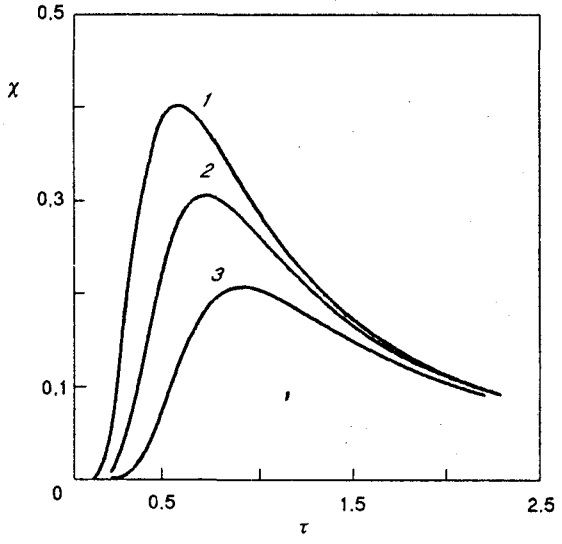

Рис. 3. Зависимость $\chi(\tau)$ в метастабильном стеклообразном состоянии при $j = 0{,}5$ и различных h: 0 (*1*); 0,5 (*2*); 1,0 (*3*).

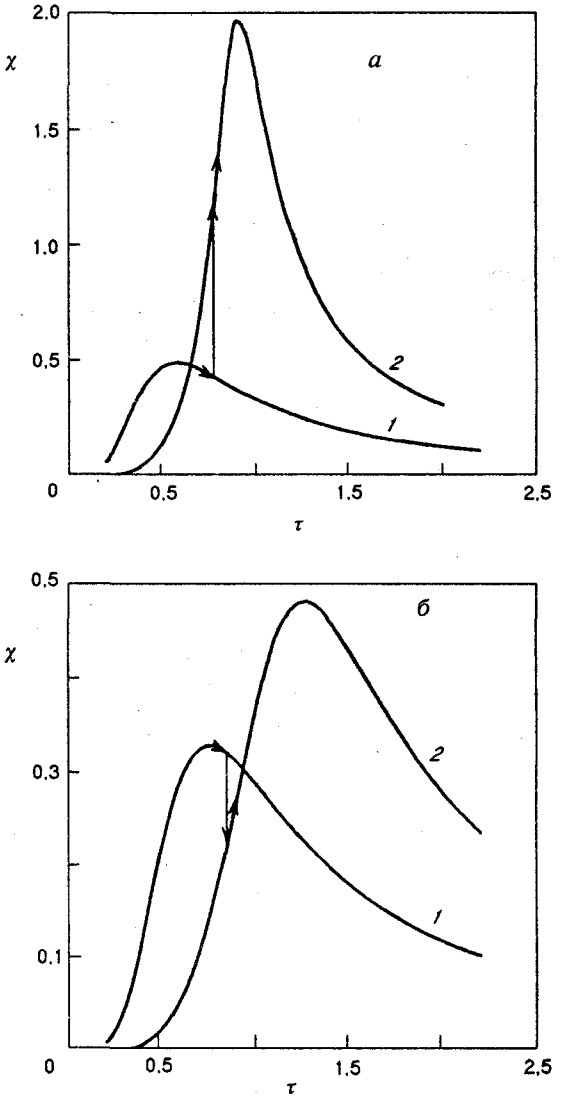

Рис. 4. Сопоставление зависимостей $\chi(\tau)$ в стабильном (*2*) и метастабильном (*1*) состояниях при $j = 0{,}1$; $h = 0{,}1$ (*а*) и $j = 1$; $h = 0{,}5$ (*б*). Стрелками показан возможный наблюдаемый ход $\chi(\tau)$.

го хода восприимчивости. Подобные явления наблюдались в различных кристаллах с водородными связями [3–5].

Авторы благодарны Б. Я. Сухаревскому за плодотворное обсуждение и полезные советы.

1. В. В. Еременко, В. Л. Коварский, И. В. Рубан, Б. Я. Сухаревский, *ФНТ* **15**, 444 (1989).
2. В. Л. Коварский, Б. Я. Сухаревский, *ФНТ* **18**, 1274 (1992).
3. Н. Д. Гаврилова, С. В. Павлов, *Изв. АН СССР, Неорганические материалы* **27**, 566 (1991).
4. Н. Д. Гаврилова, Н. П. Зайцева, Г. Л. Слабкая, Л. В. Соболева, С. В. Богатырева, *Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон.* **33**, 96 (1992).
5. A. I. Baranov, L. A. Shuvalov, and V. H. Schmidt, *Ferroelectrics* **127**, 245 (1992).

Modified Ising model in external field

V. L. Kovarsky and A. V. Khristov

The paper deals with a modified Ising model (MIM) involving a finite value of the energy barrier between the states. The MIM behaviour in external static field is considered. The temperature dependences of susceptibility are calculated for various model parameters. A glass simulating metastable state is examined. It is shown that there may be two maxima in the dependence $\chi(T)$. The calculation are made in the molecular field approximation.