

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-99-21U

О.Я.Фаренюк*, А.М.Швайка

ОДНОМІРНА ПСЕВДОСПІН-ЕЛЕКТРОННА МОДЕЛЬ
З ПРЯМОЮ ВЗАЄМОДІЄЮ

*Львівський національний університет ім. І.Франка,
79005 Львів, вул. Драгоманова 50.

УДК: 538.945

PACS: 64.60.C, 71.10.Fd, 71.45.Gm

Одномірна псевдоспін-електронна модель з прямою взаємодією

О.Я.Фаренюк, А.М.Швайка

Анотація. Приведені точні розв'язки для одномірної псевдоспін-електронної моделі з прямою взаємодією між псевдоспинами. Побудовані фазові діаграми для нульової температури. Розраховано кореляційні функції та досліджено їх поведінку при наближенні до $T = 0$. Обчислено критичні індекси.

One dimensional pseudospin-electron model with direct interaction

O.Ya.Farenjuk, A.M.Shvaika

Abstract. An exact solutions for the one dimensional pseudospin-electron model with the direct interaction between pseudospins are given. Phase diagrams at zero temperature are built. Correlation functions are calculated and their behaviour is analyzed at $T = 0$. Critical indexes are obtained.

Псевдоспін-електронна модель враховує взаємодію сильнокорельованих електронів провідності з локальними збудженнями ґратки, які описуються псевдоспіновими змінними. В роботах [1–3], при нехтуванні прямою взаємодією між псевдоспінами, в результаті узагальненого наближення хаотичних фаз було отримано можливість виникнення нестійкості сегнетоелектричного типу, зарядового впорядкування і фазового впорядкування, зумовлених ефективними взаємодіями між псевдоспінами через електрони провідності.

Але повного опису термодинаміки можливих фазових переходів в цих роботах так і не було дано. Тому в роботі [4], див. також [5], для дослідження термодинамічних фазових переходів і побудови фазових діаграм було розглянено спрощену псевдоспін-електронну модель в якій відсутній перенос електронів (безмежно вузька зона), а ефективну взаємодію між псевдоспінами замінено ефективною ізінгівського типу. В цих роботах в наближенні середнього поля, яке є точним для безмежної розмірності простору $d = \infty$, було проведено дослідження фазових переходів сегнето- і антисегнетоелектричного типу (режим $\mu = \text{const}$) і фазового розшарування (режим $n = \text{const}$), а також побудовано відповідні фазові діаграми.

В даній роботі ця псевдоспін-електронна модель досліджується у протилежному одномірному випадку коли фазові переходи можливі тільки при $T = 0$.

Гамільтоніан системи брався у вигляді:

$$H = -h \sum_{i=1}^N S_i^z - J \sum_{i=1}^N S_i^z S_{i+1}^z + g \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} S_i^z - \mu \sum_{i=1}^N n_i + U \sum_{i=1}^N n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

де $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$; N – кількість вузлів.

Вибираємо циклічні крайові умови.¹ Статистичну суму $Z = \text{Sp } \hat{\rho}$, де $\hat{\rho} = e^{-\frac{H}{kT}}$ – матриця густини, можна записати в розгорнутому вигляді як:

$$Z_N = \sum_{|q_1\rangle=|1\rangle}^{|\bar{4}\rangle} \sum_{|q_2\rangle=|1\rangle}^{|\bar{4}\rangle} \dots \sum_{|q_N\rangle=|1\rangle}^{|\bar{4}\rangle} \exp\left(-\frac{H(q_1, q_2, \dots, q_N)}{kT}\right). \quad (2)$$

Під $|q_i\rangle$ розуміємо стан i -того вузла $|q_i\rangle = |n_{i\uparrow}, n_{i\downarrow}, S_i^z\rangle$, з чого видно що існує 8 можливих комбінацій:

$$|1\rangle = \left|0, 0, \frac{1}{2}\right\rangle \quad |\bar{1}\rangle = \left|0, 0, -\frac{1}{2}\right\rangle$$

¹Тобто вважаємо що вузол $N + 1$ співпадає з вузлом 1.

$$\begin{aligned} |2\rangle &= \left|1, 1, \frac{1}{2}\right\rangle & |\bar{2}\rangle &= \left|1, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle \\ |3\rangle &= \left|0, 1, \frac{1}{2}\right\rangle & |\bar{3}\rangle &= \left|0, 1, -\frac{1}{2}\right\rangle \\ |4\rangle &= \left|1, 0, \frac{1}{2}\right\rangle & |\bar{4}\rangle &= \left|1, 0, -\frac{1}{2}\right\rangle. \end{aligned}$$

Для обчислення статистичної суми праву частину (2) стандартним чином (див. напр. [6]) представимо як добуток множників, кожен з котрих залежить лише від стану однієї пари вузлів:

$$Z_N = \sum_{\{|q_i\rangle\}} A(q_1, q_2) \cdot A(q_2, q_3) \cdot \dots \cdot A(q_{N-1}, q_N) \cdot A(q_N, q_1), \quad (3)$$

де трансфер-матриця взята у вигляді:

$$\begin{aligned} A(q_i, q_j) &= \exp\left\{\frac{\tilde{h}}{2} (S_i^z + S_j^z) + \tilde{J} S_i^z S_j^z \right. \\ &\quad \left. - \frac{\tilde{g}}{2} \left(S_i^z \cdot \sum_{\sigma} n_{i\sigma} + S_j^z \cdot \sum_{\sigma} n_{j\sigma} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\mu}{2} \left(\sum_{\sigma} n_{i\sigma} + \sum_{\sigma} n_{j\sigma} \right) - \frac{\tilde{U}}{2} (n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}) \right\} \end{aligned} \quad (4)$$

(використано позначення $\tilde{h} = \frac{h}{kT}$, $\tilde{\mu} = \frac{\mu}{kT}$, $\tilde{J} = \frac{J}{kT}$, $\tilde{g} = \frac{g}{kT}$, $\tilde{U} = \frac{U}{kT}$). Очевидно що $A(q_i, q_j) = A(q_j, q_i)$.

Сумування по q_2, q_3, \dots, q_N можна розглядати як послідовне множення матриць, а по q_1 – як взяття сліду. Отже

$$Z_N = \text{Sp}(A^N). \quad (5)$$

Матриця A є ермітовою², а тому має 8 дійсних власних значень $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_8$ і ортонормовану систему власних векторів P_1, P_2, \dots, P_8

$$AP_i = \lambda_i P_i \quad i = 1 \dots 8.$$

Справедливим є вираз:

$$A = P \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_8 \end{pmatrix} P^{-1} \quad P = (P_1, \dots, P_8).$$

²Справді – її елементи дійсні, а сама вона симетрична.

Підставивши це в (5) маємо

$$Z_N = \text{Sp} \begin{pmatrix} \lambda_1^N & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_8^N \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^8 \lambda_i^N. \quad (6)$$

Нехай λ_1 – найбільше власне значення. Перепишемо Z_N у формі

$$Z_N = \lambda_1^N \left(1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N + \dots + \left(\frac{\lambda_8}{\lambda_1} \right)^N \right)$$

і в термодинамічній границі $N \rightarrow \infty$ отримаємо

$$Z_N = \lambda_1^N. \quad (7)$$

Перейдемо до обчислення власних значень. У явному вигляді матрицю A можна записати:

$$A = \begin{pmatrix} B_1 & B_3 \\ B_3^T & B_2 \end{pmatrix} \quad (8)$$

$$B_1 = \begin{pmatrix} e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4}} & e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4} + \frac{g}{2} + \mu - \frac{U}{2}} & e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4} + \frac{g}{4} + \frac{h}{2}} & e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4} + \frac{g}{4} + \frac{h}{2}} \\ e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4} + \frac{g}{2} + \mu - \frac{U}{2}} & e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4} + g + 2\mu - U} & e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4} + \frac{3}{4}g + \frac{3}{2}\mu - \frac{U}{2}} & e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4} + \frac{3}{4}g + \frac{3}{2}\mu - \frac{U}{2}} \\ e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4} + \frac{g}{4} + \frac{h}{2}} & e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4} + \frac{3}{4}g + \frac{3}{2}\mu - \frac{U}{2}} & e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4} + \frac{g}{2} + \mu} & e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4} + \frac{g}{2} + \mu} \\ e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4} + \frac{g}{4} + \frac{h}{2}} & e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4} + \frac{3}{4}g + \frac{3}{2}\mu - \frac{U}{2}} & e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4} + \frac{g}{2} + \mu} & e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4} + \frac{g}{2} + \mu} \end{pmatrix}$$

$$B_2 = \begin{pmatrix} e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4}} & e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4} - \frac{g}{2} + \mu - \frac{U}{2}} & e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4} - \frac{g}{4} + \frac{h}{2}} & e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4} - \frac{g}{4} + \frac{h}{2}} \\ e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4} - \frac{g}{2} + \mu - \frac{U}{2}} & e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4} - g + 2\mu - U} & e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4} - \frac{3}{4}g + \frac{3}{2}\mu - \frac{U}{2}} & e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4} - \frac{3}{4}g + \frac{3}{2}\mu - \frac{U}{2}} \\ e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4} - \frac{g}{4} + \frac{h}{2}} & e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4} - \frac{3}{4}g + \frac{3}{2}\mu - \frac{U}{2}} & e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4} - \frac{g}{2} + \mu} & e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4} - \frac{g}{2} + \mu} \\ e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4} - \frac{g}{4} + \frac{h}{2}} & e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4} - \frac{3}{4}g + \frac{3}{2}\mu - \frac{U}{2}} & e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4} - \frac{g}{2} + \mu} & e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4} - \frac{g}{2} + \mu} \end{pmatrix}$$

$$B_3 = \begin{pmatrix} e^{-\frac{J}{4}} & e^{-\frac{J}{4} - \frac{g}{2} + \mu - \frac{U}{2}} & e^{-\frac{J}{4} - \frac{g}{4} + \frac{h}{2}} & e^{-\frac{J}{4} - \frac{g}{4} + \frac{h}{2}} \\ e^{-\frac{J}{4} + \frac{g}{2} + \mu - \frac{U}{2}} & e^{-\frac{J}{4} + 2\mu - U} & e^{-\frac{J}{4} + \frac{g}{4} + \frac{3}{2}\mu - \frac{U}{2}} & e^{-\frac{J}{4} + \frac{g}{4} + \frac{3}{2}\mu - \frac{U}{2}} \\ e^{-\frac{J}{4} + \frac{g}{4} + \frac{h}{2}} & e^{-\frac{J}{4} - \frac{g}{4} + \frac{3}{2}\mu - \frac{U}{2}} & e^{-\frac{J}{4} + \mu} & e^{-\frac{J}{4} + \mu} \\ e^{-\frac{J}{4} + \frac{g}{4} + \frac{h}{2}} & e^{-\frac{J}{4} - \frac{g}{4} + \frac{3}{2}\mu - \frac{U}{2}} & e^{-\frac{J}{4} + \mu} & e^{-\frac{J}{4} + \mu} \end{pmatrix}.$$

Характеристичне рівняння $\det(A - \lambda I) = 0$ має вигляд:

$$\lambda^6 \left(\lambda^2 + \lambda \left(-2e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4} + \frac{g}{2} + \mu} - 2e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4} - \frac{g}{2} + \mu} - e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4} - g + 2\mu - U} \right. \right. \\ \left. \left. - e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4} + g + 2\mu - U} - e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4}} - e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4}} \right) \right)$$

$$+ 2e^{\frac{J}{4} + \frac{g}{2} + \mu} + 2e^{\frac{J}{2} - \frac{g}{2} + \mu} - e^{-\frac{J}{2}} - e^{-\frac{J}{2} + g + 2\mu - U} + 4e^{\frac{J}{2} + 2\mu} \\ + 2e^{\frac{J}{2} + \frac{g}{2} + 3\mu - U} + e^{\frac{J}{2}} + e^{\frac{J}{2} + 4\mu - 2U} + e^{\frac{J}{2} - g + 2\mu - U} - e^{-\frac{J}{2} - g + 2\mu - U} \\ - 2e^{-\frac{J}{2} - \frac{g}{2} + \mu} + e^{\frac{J}{2} + g + 2\mu - U} - 4e^{-\frac{J}{2} + 2\mu} + 2e^{\frac{J}{2} - \frac{g}{2} + 3\mu - U} \\ - e^{-\frac{J}{2} + 4\mu - 2U} - 2e^{-\frac{J}{2} + \frac{g}{2} + \mu} - 2e^{-\frac{J}{2} - \frac{g}{2} + 3\mu - U} - 2e^{-\frac{J}{2} + \frac{g}{2} + 3\mu - U} \Big) = 0$$

або у символічних позначеннях

$$\lambda^6 (\lambda^2 + b\lambda + c) = 0. \quad (9)$$

З нього зразу видно що найбільшим власним значенням буде

$$\lambda_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4c}}{2} \quad (10)$$

або у явному вигляді:

$$\lambda_1 = \frac{1}{2} e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4}} + \frac{1}{2} e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4}} + e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4} - \frac{g}{2} + \mu} + e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4} + \frac{g}{2} + \mu} \\ + \frac{1}{2} e^{\frac{h}{2} + \frac{J}{4} - g + 2\mu - U} + \frac{1}{2} e^{-\frac{h}{2} + \frac{J}{4} + g + 2\mu - U} \\ + \frac{1}{2} \left(-4e^{\frac{J}{2} + \frac{g}{2} + 3\mu - U} - 2e^{\frac{J}{2} + g + 2\mu - U} - 2e^{\frac{J}{2} - g + 2\mu - U} \right. \\ \left. - 4e^{\frac{J}{2} - \frac{g}{2} + 3\mu - U} + 4e^{-\frac{J}{2} - g + 2\mu - U} + 8e^{-\frac{J}{2} + \frac{g}{2} + 3\mu - U} + 4e^{-h + \frac{J}{2} + \frac{g}{2} + \mu} \right. \\ \left. + 4e^{h + \frac{J}{2} - \frac{3}{2}g + 3\mu - U} - 2e^{\frac{J}{2} + 4\mu - 2U} - 8e^{\frac{J}{2} + 2\mu} + 4e^{h + \frac{J}{2} - g + 2\mu} - 2e^{\frac{J}{2}} \right. \\ \left. + 8e^{-\frac{J}{2} - \frac{g}{2} + \mu} + 4e^{-h + \frac{J}{2} + \frac{3}{2}g + 3\mu - U} + 8e^{-\frac{J}{2} + \frac{g}{2} + \mu} + 2e^{h + \frac{J}{2} - g + 2\mu - U} \right. \\ \left. + 4e^{-\frac{J}{2}} + 4e^{-h + \frac{J}{2} + g + 2\mu} + 4e^{h + \frac{J}{2} - \frac{g}{2} + \mu} + e^{h + \frac{J}{2}} + e^{-h + \frac{J}{2}} \right. \\ \left. + 4e^{-\frac{J}{2} + g + 2\mu - U} - 4e^{\frac{J}{2} - \frac{g}{2} + \mu} + 2e^{-h + \frac{J}{2} + g + 2\mu - U} + 16e^{-\frac{J}{2} + 2\mu} \right. \\ \left. + e^{h + \frac{J}{2} - 2g + 4\mu - 2U} - 4e^{\frac{J}{2} + \frac{g}{2} + \mu} + e^{-h + \frac{J}{2} + 2g + 4\mu - 2U} \right. \\ \left. + 4e^{-\frac{J}{2} + 4\mu - 2U} + 8e^{-\frac{J}{2} - \frac{g}{2} + 3\mu - U} \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Розглянемо поведінку статистичної суми у границі $T \rightarrow 0$.³ При цьому, в кожній точці площини $h - \mu$ за винятком кількох прямих, $b \rightarrow \infty$, $c \rightarrow \infty$ як один з своїх доданків, показник степеня котрого найбільший у даній точці. Тобто у границі $T \rightarrow 0$ можна вважати

$$b = B \exp \left\{ \frac{B_0 + B_1 h + B_2 \mu}{kT} \right\}, \quad (11)$$

де B , B_0 , B_1 , B_2 – певні коефіцієнти.

³Доцільність цього впливає з того, що для одномірних моделей фазовий перехід можливий лише при $T=0$.

Якщо $J > 0$ то безпосередньо можна перекоонатися що всюди, крім певного набору точок в площині $\mu - h$ (див. нижче), маємо

$$\frac{c}{b^2} \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0.$$

Тому

$$\lambda_{\max} = \frac{-b + \sqrt{b^2 \left(1 - \frac{4c}{b^2}\right)}}{2} = -b \quad \text{оскільки } b < 0. \quad (12)$$

Статистична сума дорівнює:

$$\Omega_{T \rightarrow 0} = -kTN \ln(-B) - N(B_0 + B_1 h + B_2 \mu). \quad (13)$$

звідки відразу випливає:

$$\langle n \rangle = -\frac{1}{N} \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = B_2, \quad (14)$$

$$\langle S^z \rangle = -\frac{1}{N} \frac{\partial \Omega}{\partial h} = B_1. \quad (15)$$

Для випадку $J < 0$ розгляд аналогічний⁴.

На рис. 1 приведені фазові діаграми $h - \mu$, де лінії розділяють “фази” з різним значенням $\langle S^z \rangle$ і $\langle n \rangle$. Запишемо доданки у λ_1 , що домінують у кожній з областей:

$$\begin{aligned} (1): & \exp\left(\frac{h}{2} + \frac{J}{4}\right) & (2): & \exp\left(\frac{h}{2} + \frac{J}{4} - \frac{g}{2} + \mu\right) \\ (3): & \exp\left(\frac{h}{2} + \frac{J}{4} - g + 2\mu - U\right) & (4): & \exp\left(-\frac{h}{2} + \frac{J}{4}\right) \\ (5): & \exp\left(-\frac{h}{2} + \frac{J}{4} + \frac{g}{2} + \mu\right) & (6): & \exp\left(-\frac{h}{2} + \frac{J}{4} + g + 2\mu - U\right). \end{aligned}$$

На лінії фазового переходу відбувається зрівнювання швидкості прямування на безмежність при $T \rightarrow 0$ доданків що домінують над і

⁴Правомірність використання наведеної вище побудови для $J < 0$ впливає з того що:

а) для факторизації статистичної суми неявно використовувався той факт, що $\langle n_i \rangle = \langle n_j \rangle$, $\langle S_i^z \rangle = \langle S_j^z \rangle$ – середні значення параметрів для різних вузлів рівні.

б) це ж буде справедливо і для $J < 0$ якщо трансфер-матрицю записувати для пар вузлів. Введемо певне збурююче поле δh що діє на непарні вузли. З вигляду гамільтоніана видно що $T = A_1 \otimes A_2$, де A_1 і A_2 – трансфер-матриці записані для кожного вузла в парі. Тоді $Z_N = \text{Sp}(T)^{\frac{N}{2}} = \text{Sp}\left((A_1 \otimes A_2)^{\frac{N}{2}}\right)$. Використавши властивість $\text{Sp}\left((A_1 \otimes A_2)^{\frac{N}{2}}\right) = \text{Sp}\left((A_1)^{\frac{N}{2}}\right) \cdot \text{Sp}\left((A_2)^{\frac{N}{2}}\right)$ при $N \rightarrow \infty$

отримуємо: $Z_N = \lambda_{\max}^{\frac{N}{2}} = (\lambda_{1 \max} \cdot \lambda_{2 \max})^{\frac{N}{2}}$; і при $\delta h \rightarrow 0$ маємо $\lambda_{1 \max} \rightarrow \lambda_{2 \max}$ і $Z_N = \lambda_{1 \max}^N$, тобто вираз, тотожний використаному при побудові діаграм.

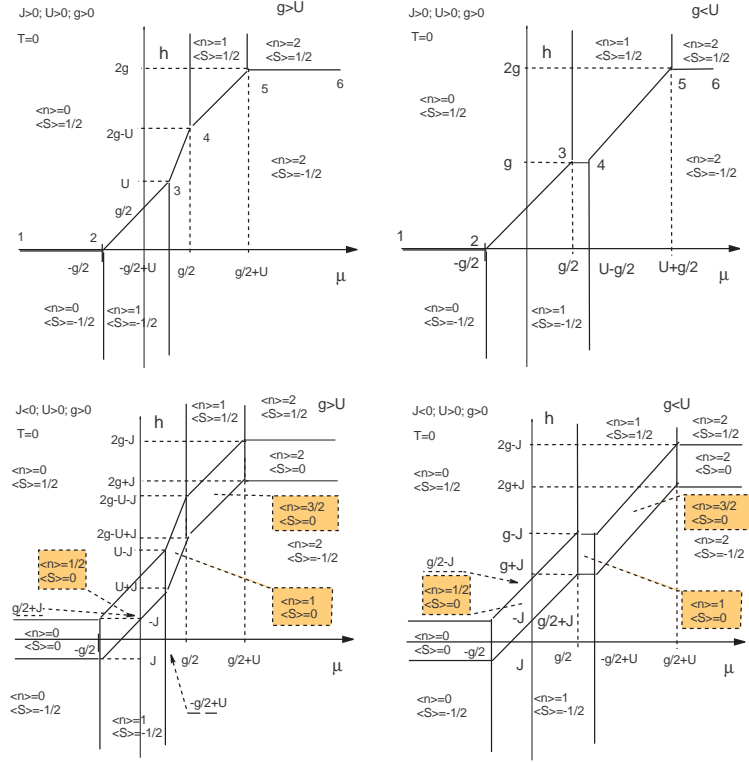


Рис. 1. Фазові діаграми $h - \mu$ для різних значень параметрів.

під нею. Крім цього з тою ж швидкістю зростає і величина $\sqrt{-c}$.⁵ Ця властивість використовується при розгляді поведінки кореляційних довжин.

При $J < 0$ відбувається розщеплення лінії 123456 на величину $2J$; при цьому в утвореній області домінують такі доданки:

$$\begin{aligned} (1-2): & \sqrt{\exp\left(\frac{J}{2}\right)} & (4-5): & \sqrt{\exp\left(\frac{J}{2} + \frac{g}{2} + 3\mu - U\right)} \\ (2-3): & \sqrt{\exp\left(\frac{J}{2} + \frac{g}{2} + \mu\right)} & (5-6): & \sqrt{\exp\left(\frac{J}{2} + 4\mu - 2U\right)} \end{aligned}$$

⁵ c завжди менше нуля при $T \rightarrow 0$. Справді, для довільного доданка зі знаком “+” існує доданок зі знаком “-”, показник експоненти котрого завжди більший від показника доданка зі знаком плюс.

(3-4): $\sqrt{\exp(\frac{J}{2} + g + 2\mu - U)}$ для $g > U$; $\sqrt{(\frac{J}{2} + 2\mu)}$ для $U > g$.

Видно, що діаграми для випадку $J > 0$ повністю співпадають з одержаними у роботі [4] в наближенні середнього поля.

На рис. 2 та 3 приведено залежності $\langle S^z \rangle$ та $\langle n \rangle$ від спряжених полів h та μ при різних різних значеннях температури та константи взаємодії J .

Аналітичні вирази для кореляційних функцій

$$g_{ij}^{(nm)} = \langle n_i n_j \rangle - \langle n_i \rangle \langle n_j \rangle \quad (16)$$

$$g_{ij}^{(nS)} = \langle n_i S_j^z \rangle - \langle n_i \rangle \langle S_j^z \rangle \quad (17)$$

$$g_{ij}^{(SS)} = \langle S_i^z S_j^z \rangle - \langle S_i^z \rangle \langle S_j^z \rangle \quad (18)$$

були отримані наступним чином.

В загальному випадку, середні від операторів можна записати:

$$\langle n_i \rangle = Z_N^{-1} \sum_{\{q_k\}} A(q_1, q_2) \dots A(q_{i-1}, q_i) n_i A(q_i, q_{i+1}) \dots A(q_N, q_1)$$

$$\langle n_i n_j \rangle = Z_N^{-1} \sum_{\{q_k\}} A(q_1, q_2) \dots A(q_{i-1}, q_i) n_i A(q_i, q_{i+1}) \dots A(q_{j-1}, q_j) n_j A(q_j, q_{j+1}) \dots A(q_N, q_1).$$

Запишемо ці вирази у матричній формі. Для цього використаємо матрицю $S^{(n)}$ що має вигляд $S_{ii}^{(n)} = S_i^{(n)} = (02110211)$; $S_{ij}^{(n)} = 0$ для $i \neq j$. Тоді відразу

$$\langle n_i n_j \rangle = Z_N^{-1} \text{Sp} \left(S^{(n)} A^{j-i} S^{(n)} A^{N+i-j} \right) \quad (19)$$

$$\langle n_i \rangle = Z_N^{-1} \text{Sp} \left(S^{(n)} A^N \right). \quad (20)$$

Вирази (19) і (20) не зміняться, якщо одночасно перетворити

$$P^{-1} A P = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_8 \end{pmatrix} \quad (21)$$

$$P^{-1} S^{(n)} P = S'^{(n)}.$$

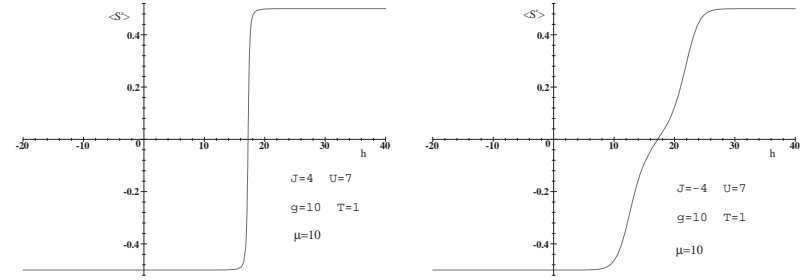


Рис. 2. Залежність $\langle S^z \rangle$ від h при різних значеннях константи взаємодії J .

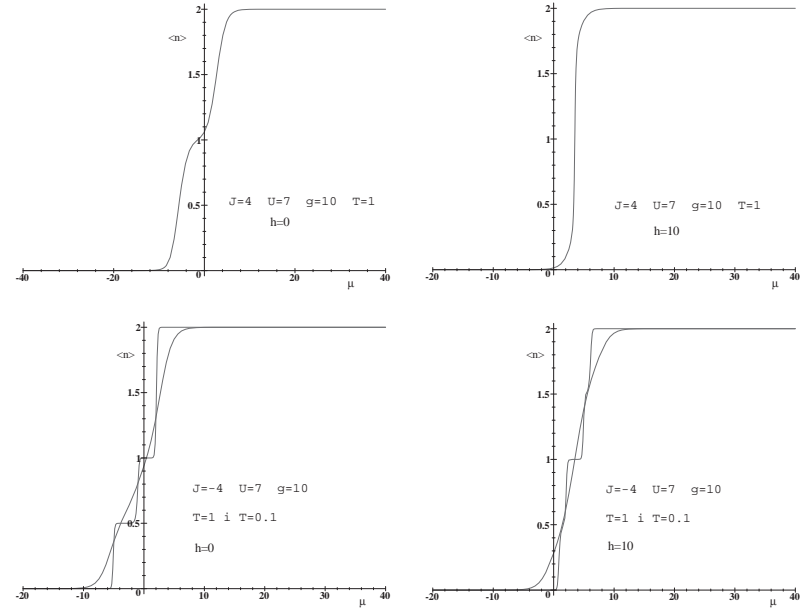


Рис. 3. Залежність $\langle n \rangle$ від μ при різних значеннях температури і константи взаємодії J .

Позначивши P_{ki} компоненти власного вектора P_i одержимо $S'_{ij}{}^{(n)} = \sum_{k=1}^8 P_{ki}P_{kj}S_k^{(n)}$. Врахувавши той факт, що $\lambda_3 = \dots = \lambda_8 = 0$ (очевидний з рівняння (5)), з (19), (20), (16), (3), направляючи N до безмежності при сталому значенні $j - i$ одержимо⁶:

$$\langle n_i n_j \rangle = \left(S'_{11}{}^{(n)} \right)^2 + \left(S'_{12}{}^{(n)} \right)^2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{j-i} \quad (22)$$

$$\langle n_i \rangle = S'_{11}{}^{(n)} \quad (23)$$

$$g_{ij}^{(nn)} = \left(S'_{12}{}^{(n)} \right) \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{j-i} \quad (24)$$

$$S'_{11}{}^{(n)} = \sum_k P_{k1}^2 S_k^{(n)} \quad S'_{12}{}^{(n)} = \sum_k P_{k1} P_{k2} S_k^{(n)}.$$

Вектори P_1 і P_2 є власні вектори, що відповідають власним значенням λ_1, λ_2 .

$$\begin{aligned} P_{1,2} [1] = & \left(e^{-\frac{h}{2}+g+2\mu-U} - e^{-\frac{h}{2}+J+g+2\mu-U} + \lambda e^{-h+\frac{3}{4}J+g+2\mu-U} \right. \\ & - e^{-\frac{h}{2}+J+4\mu-2U} + e^{-\frac{h}{2}+4\mu-2U} - 2e^{-\frac{h}{2}+J+\frac{g}{2}+3\mu-U} + 2e^{-\frac{h}{2}+\frac{g}{2}+3\mu-U} \\ & - 2e^{-\frac{h}{2}+J+\frac{g}{2}+U} + 2\lambda e^{-h+\frac{3}{4}J+\frac{g}{2}+\mu} + 2e^{-\frac{h}{2}+\frac{g}{2}+\mu} - 2e^{-\frac{h}{2}+J-\frac{g}{2}+3\mu-U} \\ & + 2e^{-\frac{h}{2}+3\mu-U} - 4e^{-\frac{h}{2}+J+2\mu} + 4e^{-\frac{h}{2}+2\mu} \\ & \left. + 2\lambda e^{-\frac{J}{4}-\frac{g}{2}+\mu} + \lambda e^{-\frac{J}{4}-g+2\mu-U} + \lambda e^{-\frac{J}{4}} \right) / \left((\lambda - e^{-\frac{h}{2}+\frac{J}{4}}) \lambda \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_{1,2} [2] = & \left(e^{-\frac{J}{4}+\frac{g}{2}+\mu-\frac{U}{2}} - e^{\frac{3}{4}J+\frac{g}{2}+\mu-\frac{U}{2}} + \lambda e^{-\frac{h}{2}+\frac{J}{2}+\frac{g}{2}+\mu-\frac{U}{2}} \right. \\ & - e^{-\frac{g}{2}+\frac{3}{4}J+3\mu-\frac{3}{2}U} + e^{-\frac{J}{4}-\frac{g}{2}+3\mu-\frac{3}{2}U} \\ & \left. - 2e^{\frac{3}{4}J+2\mu-\frac{U}{2}} + 2e^{-\frac{J}{4}+2\mu-\frac{U}{2}} \right) / \lambda \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_{1,2} [3] = & \left(e^{-\frac{J}{4}+\frac{g}{4}+\frac{\mu}{2}} - e^{\frac{3}{4}J+\frac{g}{4}+\frac{\mu}{2}} + \lambda e^{-\frac{h}{2}+\frac{J}{2}+\frac{g}{4}+\frac{\mu}{2}} - e^{\frac{3}{4}J-\frac{3}{4}g+\frac{5}{2}\mu-U} \right. \\ & \left. + e^{-\frac{J}{4}-\frac{g}{4}+\frac{5}{2}\mu-U} - 2e^{\frac{3}{4}J-\frac{g}{4}+\frac{3}{2}\mu} + 2e^{-\frac{J}{4}-\frac{g}{4}+\frac{3}{2}\mu} \right) / \lambda \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_{1,2} [4] = & \left(e^{-\frac{J}{4}+\frac{g}{4}+\frac{\mu}{2}} - e^{\frac{3}{4}J+\frac{g}{4}+\frac{\mu}{2}} + \lambda e^{-\frac{h}{2}+\frac{J}{2}+\frac{g}{4}+\frac{\mu}{2}} - e^{\frac{3}{4}J-\frac{3}{4}g+\frac{5}{2}\mu-U} \right. \\ & \left. + e^{-\frac{J}{4}-\frac{g}{4}+\frac{5}{2}\mu-U} - 2e^{\frac{3}{4}J-\frac{g}{4}+\frac{3}{2}\mu} + 2e^{-\frac{J}{4}-\frac{g}{4}+\frac{3}{2}\mu} \right) / \lambda \end{aligned}$$

⁶Для доведення використано те, що $P^{-1} = P^T$ (це видно з означення P у виразі (6)), а також як наслідок симетричності матриці $S'^{(n)}$.

$$P_{1,2} [5] = 1$$

$$P_{1,2} [6] = e^{-\frac{g}{2}+\mu-\frac{U}{2}}$$

$$P_{1,2} [7] = e^{-\frac{g}{4}+\frac{\mu}{2}}$$

$$P_{1,2} [8] = e^{-\frac{g}{4}+\frac{\mu}{2}}$$

Аналогічно, ввівши ще матрицю $S^{(S)}$ з компонентами

$$S_{ii}^{(S)} = S_i^{(S)} = \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right); \quad S_{ij}^{(S)} = 0: i \neq j$$

зразу запишемо:

$$\langle n_i S_j^z \rangle = \left(S'_{11}{}^{(n)} S'_{11}{}^{(S)} \right) + \left(S'_{12}{}^{(n)} S'_{12}{}^{(S)} \right) \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{j-i} \quad (25)$$

$$\langle S_i^z \rangle = S'_{11}{}^{(S)} \quad (26)$$

$$g_{ij}^{(nS)} = \left(S'_{12}{}^{(n)} S'_{12}{}^{(S)} \right) \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{j-i} \quad (27)$$

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle = \left(S'_{11}{}^{(S)} \right)^2 + \left(S'_{12}{}^{(S)} \right)^2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{j-i} \quad (28)$$

$$g_{ij}^{(SS)} = \left(S'_{12}{}^{(S)} \right)^2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{j-i}. \quad (29)$$

Виходячи з означення кореляційної довжини ξ :

$$g(x) \sim x^{-\tau} e^{-x/\xi},$$

де x – відстань між вузлами; τ – деяке число, отримаємо для неї в одиницях віддалей між вузлами

$$\xi = \left[\ln \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right) \right]^{-1}. \quad (30)$$

Це очевидно справедливо для всіх трьох кореляційних функцій (24), (27), (29).

Відомо, що на лінії фазового переходу $\xi \rightarrow \infty$, тобто на діаграмі $h - \mu$ ці лінії можна одержати з умови

$$\lim_{T \rightarrow 0^+} \frac{\lambda_2}{\lambda_1} = 1. \quad (31)$$

Так як λ_1 і λ_2 – корені квадратного рівняння, то ця умова тотожності умові $\lim_{T \rightarrow 0^+} (b^2 - 4c) = 0$, або, після нескладних перетворень

$\lim_{T \rightarrow 0^+} \frac{b^2}{4c} = 1$. Одержана таким чином лінія фазового переходу співпадає з лінією, одержаною іншим методом вище. У цьому можна переконатися, виходячи з даних, наведених у коментарях до діаграм.

Фур'є-образ кореляційних функцій дорівнює (тут $\alpha, \beta \in \{S^z, n\}$)⁷

$$G_k^{(\alpha\beta)} = \frac{1}{N} \sum_{j-i} g_{ij}^{(\alpha\beta)} e^{Ik(j-i)}, \quad k = 2\pi \frac{m}{N}; \quad -\frac{N}{2} < m \leq \frac{N}{2},$$

де $g_{ij}^{(\alpha\beta)} = S'_{12}(\alpha) S'_{12}(\beta) \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right)^{|j-i|} = \text{coef}(\alpha, \beta) \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right)^{|j-i|}$ (див. (24), (27), (29))

$$\begin{aligned} G_k^{(\alpha\beta)} &= \frac{\text{coef}(\alpha, \beta)}{N} \sum_{j-i} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{|j-i|} e^{Ik(j-i)} \\ &= \frac{\text{coef}(\alpha, \beta)}{N} \left(1 + \sum_{\substack{j-i < 0 \\ j-i < 0}} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} e^{-Ik}\right)^{i-j} + \sum_{\substack{j-i > 0 \\ j-i > 0}} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} e^{Ik}\right)^{j-i} \right) \\ &= \frac{\text{coef}(\alpha, \beta)}{N} \left(1 + \frac{\lambda_2 e^{Ik}}{\lambda_1} + \frac{\lambda_2 e^{-Ik}}{\lambda_1} \right) \end{aligned}$$

і нарешті:

$$G_k^{(\alpha\beta)} = \frac{\text{coef}(\alpha, \beta)}{N} \left(\frac{1 - \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^2}{1 - 2 \cos(k) \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right) + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^2} \right). \quad (32)$$

Знаменник у формулі (32) може дорівнювати нулю лише при $k = 0$ та π . Тоді одержимо такі умови розбіжності фур'є-образу корелятивної функції:

$$\frac{\lambda_2}{\lambda_1} = 1 \quad (33)$$

$$\frac{\lambda_2}{\lambda_1} = -1. \quad (34)$$

Перша з них очевидно відповідає умові фазового переходу при $T \rightarrow 0$ і $J > 0$, а друга - $J < 0$ (див. також формулу (31)).

⁷Тут і нижче I – комплексна одиниця

Ще однією важливою характеристикою моделі, що описує фазові переходи є її критичні індекси.

Для даної моделі безпосередньо обчислено критичні індекси для теплоємності α , кореляційних функцій η , кореляційної довжини ν , намагніченості β і δ ($M(h, T) = -\frac{1}{N} \frac{\partial \Omega}{\partial h}$) та магнітної сприйнятливості γ ($\chi = \frac{\partial M}{\partial h}$). При цьому, ввівши деяку приведену температуру

$$t = \frac{1}{b_i^2}, \quad (35)$$

де під b_i розуміється доданок з λ_1 , що домінує в області діаграми $h - \mu$ що розглядається, одержано

$$\begin{aligned} c &\sim t^{-\alpha} \\ g &\sim (i-j)^{-d+2-\eta} \\ \xi &\sim t^{-\nu} \\ M &\sim t^\beta \\ M &\sim h^{\frac{1}{\delta}} \\ \chi &\sim t^{-\gamma}, \end{aligned} \quad (36)$$

де $d = 1$ – розмірність системи, а $\alpha = 1$, $\eta = 1$, $\nu = 1$, $\beta = 0$, $\delta = \infty$, $\gamma = 1$. Ці значення повністю співпадають з відповідними, одержаними для звичайної моделі Ізінга.

Для них виконуються співвідношення, одержані з гіпотези скейлінга:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (37)$$

$$(2 - \eta)\nu = \gamma, \quad (38)$$

а також вираз отриманий з додатковим припущенням гіперскейлінга:

$$d\nu = 2 - \alpha \quad (39)$$

Вибір t по формулі (35) дещо довільний бо, взагалі кажучи, можна брати довільні цілі степені величини t , при цьому $2 - \alpha$, ν , β і γ будуть множитися на деяке одне і те ж число. Тому коефіцієнти α , β , γ визначені неоднозначно, але співвідношення (37), (38), (39) будуть завжди виконуватися.

Література

1. Stasyuk I.V., Shvaika A.M. A model with local anharmonicity in theory of HTSC systems: Correlation functions and “transverse”

- dielectric susceptibility // *Condensed Matter Physics*. – 1994. – **3**. – P. 134–175.
2. Stasyuk I.V., Shvaika A.M., Danyliv O.D. Dielectric instability and charge ordering in the local anharmonic model of high- T_c superconductors // *Molecular Physics Reports*. – 1995. – **9**. – P. 61–75.
 3. Stasyuk I.V., Shvaika A.M. Dielectric, charge and phase-separation instabilities in pseudospin–electron model of high- T_c superconductors // *Czechoslovak Journal of Physics*. – 1996. – **46**, Suppl. S2. – P. 961–962.
 4. Stasyuk I.V., Havrylyuk Yu. Phase transitions in pseudospin–electron model with direct interaction between pseudospins. – Lviv, 1998. – 20 P. (Preprint/Nat. Acad. Sci. Ukr., Inst. cond. matt. phys.: ICMP-98-18E).
 5. Стасюк І.В., Дубленич Ю.І. Фазові переходи та розділення фаз у псевдоспін–електронній моделі з прямою взаємодією антисегнетоелектричного типу. – Львів, 1999. – 26 с. (Препринт/НАН України, Ін-т фізики конденсованих систем: ICMP-99-07U).
 6. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике. – М.: Мир, 1985. – 488 с.

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/>)

Олег Ярославович Фаренюк
Андрій Михайлович Швайка

ОДНОМІРНА ПСЕВДОСПІН-ЕЛЕКТРОННА МОДЕЛЬ З ПРЯМОЮ
ВЗАЄМОДІЄЮ

Роботу отримано 18 жовтня 1999 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені