УДК 537.226+537.311.33; 537+535

РЕЛАКСАЦІЙНА ДИНАМІКА КВАЗІОДНОВИМІРНОЇ МОДЕЛІ ІЗІНГА

І. Р. Зачек

Національний університет “Львівська політехніка”, кафедра фізики

© *Зачек І. Р., 2014*

Розглянута динамічна модель квазіодновимірних сегнетоелектриків типу порядок-безлад, що грунтується на стохастичній моделі Глаубера, на основі якої отриманий ланцюжок рівнянь для залежних від часу функцій розподілу досліджуваних сполук. Розраховані статичні і динамічні діелектричні характеристики квазіодновимірних сегнетоелектриків.

Ключові слова: модель Ізінга, сегнетоелектрики.

Вступ

Однією із найактуальніших проблем сучасної фізики конденсованого стану є побудова статистичної теорії систем, що описуються моделлю Ізінга. Ця модель виявляється доволі ефективною для формулювання і розв’язання задач в теорії електро- і магнітоупорядкованих систем.

Вивчати динамічні властивості сегнетоактивних сполук, що описуються моделлю Ізінга, розпочали в роботі [1], в якій розглянуто лише одновимірну модель. Пізніше в роботах [2–4] підхід Глаубера був поширений на дво- і тривимірні ізінговські гратки. При цьому в [2] задача розв’язувалась в наближенні молекулярного поля, а в [3, 4] підхід Глаубера був узагальнений на випадок кластерного наближення.

Дослідження квазіодновимірних сегнетоелектриків виявили в них цілу низку властивостей, які не зустрічались в інших сегнетоелектричних кристалах. Особливістю їхньої структури є наявність ланцюжків, які утворені упорядковуючими елементами структури (УЕС) і квазіодновимірний характер впорядкування УЕС в них із сильними внутріланцюжковими і слабкими міжланцюжковими кореляціями. Теорії квазіодновимірних сегнетоелектриків присвячені роботи [5–10]. У роботах [5, 6] на основі квазіодновимірної анізотропної моделі Ізінга були розглянуті статичні властивості, в [7, 8] – їхні динамічні діелектричні характиристики. При отриманні замкненого рівняння для унарної функції розподілу УЕС автори цих робіт використали просте розщеплення отриманого ланцюжка рівнянь, але проведений аналіз показує, що таке розчеплення не є коректним. У роботах [9, 10] була запропонована кластерна динамічна модель дейтерованих квазіодновимірних сегнетоелектриків CsH_2PO_4 і отримано добре узгодження теорії з експериментом.

Тому виникає задача пошуку коректного розчеплення ланцюжка рівнянь і розрахунку на основі отриманих результатів статичних і динамічних діелектричних проникностей квазіодновимірних сегнетоелектриків. У цій роботі статичні діелектричні характеристики розраховані в сегнето- і параелектричних фазах, а динамічні – в параелектричній фазі.

Ланцюжок рінянь для залежних від часу функцій розподілу системи

Розглянемо просту модель квазіодновимірного сегнетоелектрика типу порядок-безлад, гамільтоніан якого має вигляд [5–8]:

$$\hat{H} = -\sum_{ij} J\, S^z_{i+1,j} S^z_{ij} - \frac{1}{2}\sum_{ij}\sum_{mn} J_{mn} S^z_{i+m,j+n} S^z_{ij} - \sum_{ij} \mathrm{m} E_{ij} S^z_{ij}\,. \tag{1}$$

Тут перший доданок описує взаємодії між УЕС всередині ланцюжків, другий – ефективні далекосяжні взаємодії між ними, а останній доданок описує взаємодію УЕС із зовнішнім електричним полем; S^z_{ij} – оператор псевдоспіна, що відповідає УЕС ($S^z_{ij} = \pm\frac{1}{2}$).

Надалі далекосяжні взаємодії будемо враховувати в наближенні молекулярного поля. В цьому випадку (2) набуває вигляду:

$$\hat{H} = -\sum_{ij} J\, S^z_{i+1,j} S^z_{ij} - \sum_{ij}\sum_{mn} J_{mn} \langle S^z_{i+m,j+n}\rangle S^z_{ij} - \sum_{ij} m E_{ij} S^z_{ij}\,. \tag{2}$$

Динамічні властивості системи, що описуються гамільтоніаном (2), будемо вивчати на основі методу Глаубера [1]. У межах цього методу для залежних від часу функцій розподілу дейтронів можна отримати таку систему рівнянь:

$$a\frac{d}{dt}\langle s_{ij}\rangle = -\langle s_{ij}\rangle + \langle th\frac{b}{2}e_{ij}\rangle, \quad b = \frac{1}{k_B T}, \tag{3}$$

$$a\frac{d}{dt}\langle s_{ij} s_{kl}\rangle = -2\langle s_{ij} s_{kl}\rangle + \langle s_{ij} th\frac{b}{2}e_{kl}\rangle + \langle s_{kl} th\frac{b}{2}e_{ij}\rangle. \tag{4}$$

Тут a – залежна від температури константа, що має розмірність часу, e_{ij} – локальне поле, що діє на і-й УЕС в j-му ланцюжку

$$e_{ij} = \frac{1}{2}J(\,s_{i+1,j} + s_{i-1,j}) + \frac{1}{b}x_{ij}, \qquad s_{ij} = 2\,S^z_{ij}, \tag{5}$$

де

$$x_{ij} = \frac{b}{2}\sum_{mn} J_{mn}\langle s_{i+m,j+n}\rangle + b\, m E_{ij}.$$

Подамо $th\frac{b}{2}e_{ij}$ у вигляді

$$th\frac{b}{2}e_{ij} = P_{ij}(s_{i+1,j} + s_{i-1,j}) + M_{ij} s_{i+1,j} s_{i-1,j} + L_{ij}. \tag{6}$$

Тут використані такі позначення:

$$P_{ij} = \frac{1}{4}\left[th\frac{1}{2}(bJ + x_{ij}) - th\frac{1}{2}(-bJ + x_{ij})\right],$$

$$M_{ij} = \frac{1}{4}\left[th\frac{1}{2}(bJ + x_{ij}) + th\frac{1}{2}(-bJ + x_{ij})\right] - \frac{1}{2}th\frac{1}{2}x_{ij},$$

$$L_{ij} = \frac{1}{4}\left[th\frac{1}{2}(bJ + x_{ij}) + th\frac{1}{2}(-bJ + x_{ij})\right] + \frac{1}{2}th\frac{1}{2}x_{ij}.$$

Тепер на основі (3) і (4) з врахуванням (5), (6) можна отримати таку систему рівнянь:

$$\begin{gathered}
a\frac{d}{dt}\langle s_{ij}\rangle = -\langle s_{ij}\rangle + P_{ij}(\langle s_{i+1,j}\rangle + \langle s_{i-1,j}\rangle) + M_{ij}\langle s_{i+1,j} s_{i-1,j}\rangle + L_{ij},\\
a\frac{d}{dt}\langle s_{ij} s_{i+1,j}\rangle = M_{ij}\langle s_{i-1,j}\rangle + L_{ij}\langle s_{ij}\rangle + (M_{ij} + L_{ij})\langle s_{i+1,j}\rangle -\\
-2\langle s_{ij} s_{i+1,j}\rangle + P_{ij}(\langle s_{i-1,j} s_{i+1,j}\rangle + \langle s_{ij} s_{i+2,j}\rangle) + 2P_{ij},\\
a\frac{d}{dt}\langle s_{i-1,j} s_{i+1,j}\rangle = L_{ij}(\langle s_{i-1,j}\rangle + \langle s_{i+1,j}\rangle) -\\
-2\langle s_{i-1,j} s_{i+1,j}\rangle + P_{ij}(\langle s_{ij} s_{i+1,j}\rangle + \langle s_{i-1,j} s_{ij}\rangle + \langle s_{i-2,j} s_{i+1,j}\rangle + \langle s_{i-1,j} s_{i+2,j}\rangle) +\\
+ M_{ij}(\langle s_{i-2,j} s_{ij} s_{i+1,j}\rangle + \langle s_{i-1,j} s_{ij} s_{i+2,j}\rangle),
\end{gathered} \tag{7}$$

$$a\frac{d}{dt}\langle s_{i-2,j}s_{i+1,j}\rangle = L_{ij}(\langle s_{i-2,j}\rangle+\langle s_{i+1,j}\rangle)-$$
$$-2\langle s_{i-2,j}s_{i+1,j}\rangle+P_{ij}(\langle s_{i-1,j}s_{i+1,j}\rangle+\langle s_{i-2,j}s_{ij}\rangle+\langle s_{i-3,j}s_{i+1,j}\rangle+\langle s_{i-2,j}s_{i+2,j}\rangle)+$$
$$+M_{ij}(\langle s_{i-3,j}s_{i-1,j}s_{i+1,j}\rangle+\langle s_{i-2,j}s_{ij}s_{i+2,j}\rangle)\ \text{і т.д.}$$

Отже, ми отримали ланцюжок рівнянь для залежних від часу функцій розподілу системи, що описується гамільтоніаном (2). Ця система не замкнена і трансцендентна. Тому важливим є пошук можливих шляхів коректного розщеплення отриманого ланцюжка рівнянь з метою отримання надійних її розв'язків.

Статична діелектрична проникність квазіодновимірних сегнетоелектриків

Обмежимось випадком малих відхилень від стану рівноваги. У цьому випадку функції розподілу УЕС можна подати у вигляді суми двох складових – рівноважних функцій і їх відхилень від стану рівноваги:

$$\langle s_{ij}\rangle = h_0+\langle s_{ij}\rangle_t,\quad \langle s_{ij}s_{i+1,j}\rangle = h_{01}+\langle s_{ij}s_{i+1,j}\rangle_t, \tag{8}$$
$$\langle s_{i-1,j}s_{i+1,j}\rangle = h_{02}+\langle s_{i-1,j}s_{i+1,j}\rangle_t,\quad \langle s_{i-2,j}s_{ij}s_{i+1,j}\rangle = h_{023}+\langle s_{i-2,j}s_{ij}s_{i+1,j}\rangle_t\ \text{і т.д.}$$

Тоді і

$$x_{ij} = x + x_{ijt}, \tag{9}$$

де $x=\frac{b}{2}\sum_{mn}J_{mn}h_0,\qquad x_{ijt}=\frac{b}{2}\sum_{mn}J_{mn}\langle s_{i+m,j+n}\rangle_t+bmE_{ijt}$.

Розкладемо коефіцієнти P_{ij}, M_{ij} та L_{ij} в ряди відносно x_{ijt}:

$$P_{ij}=P_0+\frac{x_{ijt}}{2}P_1,\qquad M_{ij}=M_0+\frac{x_{ijt}}{2}M_1,\qquad L_{ij}=L_0+\frac{x_{ijt}}{2}L_1. \tag{10}$$

Тут використані такі позначення:

$$P_0=\frac{1}{2}\frac{1-a^4}{R},\quad M_0=-\frac{1}{2}\frac{(1-a^2)shx}{(1+chx)R},\quad L_0=\frac{1}{2}\frac{\left[4a^2chx+(1+a^2)^2\right]shx}{(1+chx)R},\quad a=e^{-\frac{bJ}{2}},$$
$$P_1=-\frac{2a^2(1-a^4)shx}{R^2},\quad M_1=\frac{2a^2\left[2a^2+(1+a^4)chx\right]}{R^2}-\frac{1}{1+chx},$$
$$L_1=\frac{2a^2\left[2a^2+(1+a^4)chx\right]}{R^2}+\frac{1}{1+chx},\qquad R=1+a^4+2a^2chx.$$

Підставляючи (8) і (10) в систему рівнянь (7), отримуємо дві системи рівнянь – для рівноважних функцій розподілу і їх флюктуаційних частин. Розглянемо спочатку систему рівнянь для рівноважних функцій розподілу:

$$\begin{gathered}(-1+2P_0)h_0+M_0h_{02}+L_0=0,\\ 2(M_0+L_0)h_0-2h_{01}+2P_0h_{02}+2P_0=0,\\ 2L_0h_0+2P_0h_{01}-2h_{02}+2P_0h_{03}+M_0h_{023}+M_0h_{013}=0,\\ 2L_0h_0+2P_0h_{02}-2h_{03}+2P_0h_{04}+M_0h_{024}+M_0h_{024}=0,\\ 2L_0h_0+2P_0h_{0N-1}-2h_{0N}+2P_0h_{0N+1}+M_0h_{02N+1}+M_0h_{0N-1N+1}=0.\end{gathered} \tag{11}$$

Розв'язком цієї є точні кореляційні функції, які отримані в роботі [11] для одновимірної моделі Ізінга у зовнішньому полі. Рівноважна унарна функція розподілу системи, що роглядається, має такий вигляд:

$$h_0=\frac{sh\frac{x}{2}}{r},\qquad r=\sqrt{sh^2\frac{x}{2}+a^2}. \tag{12}$$

Беручи до уваги (12), з перших двох рівнянь системи (11), отримуємо результати для h_{01} та h_{02}:

$$h_{01}=h_0^2+(1-h_0^2)\frac{ch\frac{x}{2}-r}{ch\frac{x}{2}+r},\quad h_{01}=h_0^2+(1-h_0^2)\left(\frac{ch\frac{x}{2}-r}{ch\frac{x}{2}+r}\right)^2.$$

Використовуючи вираз для h_0 за наявності зовнішнього електричного поля, розраховуємо вираз для статичної діелектричної сприйнятливості квазіодновимірних сегнетоелектриків типу порядок-безлад:

$$c(0,T)=\frac{m^2}{u}\frac{b}{2}\frac{1}{F-\frac{bn}{4}},\quad F=\frac{r^{\frac{3}{2}}}{a^2 ch\frac{bn}{4}h_0},\ (T<T_c),\quad \chi(0,T)=\frac{\mu^2}{\upsilon}\frac{\beta}{2}\frac{1}{a-\frac{\beta\nu}{4}},\ (T>T_c). \tag{13}$$

Ці вирази збігаються з результатом, отриманим у межах кластерного наближення [9,10].

Динамічна діелектрична проникність квазіодновимірних сегнетоелектриків

Тепер перейдемо до розгляду системи рівнянь для флюктуаційних частин функцій розподілу УЕС, яку зобразимо в такому вигляді:

$$\begin{aligned}
&a\frac{d}{dt}\langle s_{ij}\rangle_t=-\langle s_{ij}\rangle_t+P_0(\langle s_{i+1,j}\rangle_t+\langle s_{i-1,j}\rangle_t)+M_0\langle s_{i+1,j}s_{i-1,j}\rangle_t+\\
&\quad+S^{(1)}\frac{b}{4}\sum_{mn}J_{mn}\langle s_{i+m,j+n}\rangle_t+S^{(1)}\frac{bm}{2}E_{ijt},\\
&a\frac{d}{dt}\langle s_{ij}s_{i+1,j}\rangle_t=M_0\langle s_{i-1,j}\rangle_t+L_0\langle s_{ij}\rangle_t+(M_0+L_0)\langle s_{i+1,j}\rangle_t-2\langle s_{ij}s_{i+1,j}\rangle_t+\\
&\quad+P_0(\langle s_{i-1,j}s_{i+1,j}\rangle_t+\langle s_{ij}s_{i+2,j}\rangle_t)+S_{01}^{(2)}\frac{b}{4}\sum_{mn}J_{mn}\langle s_{i+m,j+n}\rangle_t+S_{01}^{(2)}\frac{bm}{2}E_{ijt},\qquad (14)\\
&a\frac{d}{dt}\langle s_{i-1,j}s_{i+1,j}\rangle_t=L_0(\langle s_{i-1,j}\rangle_t+\langle s_{i+1,j}\rangle_0)-M_0(\langle s_{i-2,j}s_{ij}s_{i+1,j}\rangle_t+\langle s_{i-1,j}s_{ij}s_{i+2,j}\rangle_t)-\\
&\quad-2\langle s_{i-1,j}s_{i+1,j}\rangle_t+P_0(\langle s_{ij}s_{i+1,j}\rangle_t+\langle s_{i-1,j}s_{ij}\rangle_t+\langle s_{i-2,j}s_{i+1,j}\rangle_t+\langle s_{i-1,j}s_{i+2,j}\rangle_t)+\\
&\quad+S_{02}^{(2)}\frac{b}{4}\sum_{mn}J_{mn}\langle s_{i+m,j+n}\rangle_t+S_{02}^{(2)}\frac{bm}{2}E_{ijt},\\
&a\frac{d}{dt}\langle s_{i-2,j}s_{i+1,j}\rangle_t=L_0(\langle s_{i-2,j}\rangle_t+\langle s_{i+1,j}\rangle_0)-M_0(\langle s_{i-3,j}s_{i-1j}s_{i+1,j}\rangle_t+\langle s_{i-2,j}s_{ij}s_{i+2,j}\rangle_t)-\\
&\quad-2\langle s_{i-2,j}s_{i+1,j}\rangle_t+P_0(\langle s_{i-1j}s_{i+1,j}\rangle_t+\langle s_{i-2,j}s_{ij}\rangle_t+\langle s_{i-3,j}s_{i+1,j}\rangle_t+\langle s_{i-2,j}s_{i+2,j}\rangle_t)+\\
&\quad+S_{03}^{(2)}\frac{b}{4}\sum_{mn}J_{mn}\langle s_{i+m,j+n}\rangle_t+S_{03}^{(2)}\frac{bm}{2}E_{ijt}\qquad \text{і т.д.}
\end{aligned}$$

Тут використані такі позначення:

$$S^{(1)}=2P_1h_0+M_1h_{02}+L_1,\quad S_{01}^{(2)}=2(M_1+L_1)h_0+2P_1h_{02}+2P_1,$$

$$S_{02}^{(2)}=2L_1h_0+2P_1(h_{01}+h_{03})+M_1(h_{013}+h_{023}),\quad S_{03}^{(2)}=2L_1h_0+2P_1(h_{02}+h_{04})+2M_1h_{024}.$$

У випадку парафази система (14) значно спрощується. Із (14) отримується замкнене рівняння для унарної функції розподілу $\langle s_{ij}\rangle_t$:

$$a\frac{d}{dt}\langle s_{ij}\rangle_t=-\langle s_{ij}\rangle_t+P_0(\langle s_{i+1,j}\rangle_t+\langle s_{i-1,j}\rangle_t)+S_p^{(1)}\left(\frac{b}{4}\sum_{mn}J_{mn}\langle s_{i+m,j+n}\rangle_t+\frac{bm}{2}E_{ijt}\right), \tag{15}$$

де

$$S_p^{(1)}=\frac{2a}{1+a^2}.$$

Здійснюючи в (15) фур’є-перетворення і розв’язуючи отримане рівняння, одержимо, що

$$\langle s_p(\vec{k})\rangle_t = C_p e^{-\frac{t}{t_p(\vec{k})}} + \frac{\frac{1}{2} b\, m S_p^{(1)} t_p(\vec{k})}{1 + iwt_p(\vec{k})} E(\vec{k}) e^{iwt}, \qquad (16)$$

де

$$t_p(\vec{k}) = \frac{a}{1 - 2P_0 \cos kd - \frac{bn(\vec{k})}{4} S_p^{(1)}} \qquad (17)$$

– час релаксації поляризації, d – відстань між сусідніми УЕС в ланцюжку, k – компонента хвильового вектора вздовж ланцюжка. Нехтуючи далекосяжними взаємодіями із (17), отримаємо результати роботи [2]. У випадку ж $\vec{k} = 0$ із (17) маємо результат:

$$t_p(0) = a \frac{1 + a^2}{2a(a - \frac{bn}{4})}, \qquad (18)$$

який збігається з отриманими в роботах [4, 8–10]. У разі нехтування далекосяжними взаємодіями із (18) маємо результат роботи [3]. Використовуючи (16), можемо розрахувати вираз для динамічної діелектричної проникності в парафазі:

$$c_p(\vec{k}, w) = \frac{c_p(\vec{k}, 0)}{1 + iwt_p(\vec{k})}, \qquad (19)$$

де

$$c_p(\vec{k}, 0) = \frac{m^2}{u} \frac{b}{2} \frac{S_p^{(1)}}{1 - 2P_0 \cos kd - \frac{bn(\vec{k})}{4} S_p^{(1)}} \qquad (20)$$

– залежна від квазіімпульсу ститична діелектрична сприйнятливість в парафазі. У разі нехтування далекодією із (20) отримується результат роботи [2]. У випадку $\vec{k} = 0$ із (20) слідують результати робіт [4, 6, 9, 10].

Використовуючи (20), запишемо і вираз для комплексної діелектричної проникності квазіодновимірних сегнетоелектриків в парафазі:

$$e_p^*(\vec{k}, w) = e^{(0)} + 4pc_p(\vec{k}, w).$$

Слід відзначити, що отримані в межах лінійного наближення результати у випадку парафази і при $\vec{k} = 0$ збігаються з результатами кластерної теорії.

Висновки

У межах стохастичної моделі Глаубера отриманий ланцюжок рівнянь для залежних від часу функцій розподілу квазіодновимірних сегнетоелектриків типу порядок-безлад, розраховані залежні від квазіімпульсів статична діелектриична сприйнятливість і час релаксації поляризації, а також у параелектричній фазі комплексна діелектрична проникність. Показано, що в парафазі у випадку малого відхилення від стану рівноваги отримується замкнене рівняння для унарної функції розподілу і система рівнянь для парних функцій.

[1] Glauber J. // J. Math. Phys., 4(2) (1963) 294-307.
[2] Susuki H., Kubo R. // J. Phys. Jpn., 24(1) (1968) 51-60.
[3] Власова А.А., Шнейдер В.Е. // ЖЭТФ, 73(10) (1977) 1493-1498.
[4] Левицкий Р.Р., Зачек И.Р. // УФЖ, 24(10) (1979) 1486-1493.
[5] Scalapino D.J., Ymry Y., Pincus P. // Phys. Rev.B., 11(5) (1975) 2042-2048.
[6] De Carvalho A.V., Salinas S. H. // J. Phys. Soc. Jpn., 44(1) (1978) 238-243.
[7] Zumer S. // Phys. Rev.B., 21(3) (1980) 1298-1303.
[8] Kanda E., Tamaki A., Fujimura T. // J. Phys. C: Solid State Phys., 15 (1982) 3401-3410.
[9] Grigas J., Levitski R.R., Mits Ye.V., Paprotny W., Zachek I.R. // Ferroelectrics, 64(1-3) (1985) 33-35.
[10] Grigas J., Levitski R.R., Zachek I.R., Sorokov S.I., // Ferroelectrics 108 (1990) 261-266.
[11] Желифонов М.П. // ТМФ, 8(3) (1971) 401-416.

RELAXATIONAL DYNAMICS OF QUASI – ONE – DIMENSIONAL ISING MODEL

I. R. Zachek
Lviv Polytechnic National University,
Department of Physics

© Zachek I. R., 2014

A dynamical model of quasi-one-dimensional order-disorder type ferroelectrics based on the stochastic Glauber model is considered. A chain time-dependent distribution functions were obtained. Static and dynamic dielectrics characteristics of quasi-one-dimensional ferroelectrics are calculated.

Key words: Ising model, ferroelectrics.