

Спин-жидкостной подход в теории классической жидкости

А. В. Михеенков¹⁾, А. Ф., Барабанов, Л. А. Максимов*

Институт физики высоких давлений РАН, 142190 Троицк, Московская обл., Россия,

*Российский научный центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 14 сентября 2004 г.

После переработки 28 октября 2004 г.

Предложена простейшая модель двумерной жидкости, основанная на фрустрированной модели Гейзенберга, которая позволяет качественно описать поведение парной корреляционной функции в зависимости от вида двухступенчатого потенциала $U(r)$. Продемонстрирована тенденция к образованию квазисвязанного состояния при появлении локального минимума на отталкивательной части потенциала. Для случая двухступенчатого потенциала показана возможность фазового перехода в жидкости при изменении температуры.

PACS: 61.20.Gy, 75.10.Jm

Одним из важных вопросов в теории жидкости является отыскание парной корреляционной функции (ПКФ). Особый интерес представляет отыскание ПКФ, когда отталкивательная часть потенциала имеет немонотонный характер. Вычисление ПКФ в этом случае проводилось, например, методом молекулярной динамики в [1]. Считается, что подобные вычисления даже в 1D и 2D случаях вносят существенное понимание для теории фазовых переходов, например, в воде под давлением. На рис.1a,b приведен характерный вид потенциала в моделях жидкости, которые обсуждаются в литературе [1–3]. Оба потенциала относятся к классу core-softened потенциалов, и именно это позволяет рассматривать с их помощью фазовые переходы в жидкости.

В настоящей работе предлагается простейшая решеточная модель двумерной жидкости, основанная на антиферромагнитной 2D фрустрированной модели Гейзенберга, которая позволяет качественно описать поведение ПКФ в зависимости от вида двухступенчатого потенциала $U(r)$ (см. рис.1c,d). Рассматриваемая модель является развитием хорошо известной модели решеточного газа [4], эквивалентной модели Изинга и точно решаемой только для одноступенчатого потенциала. В отличие от модели Изинга, предлагаемый подход не является статическим и, кроме того, применим в случае сложных потенциалов.

Рис.1c соответствует отталкивательному потенциалу. Минимум потенциала рис.1d соответствует случаю, когда на близких расстояниях возможно слабое притяжение, отвечающее образованию ковалентных связей между частицами.

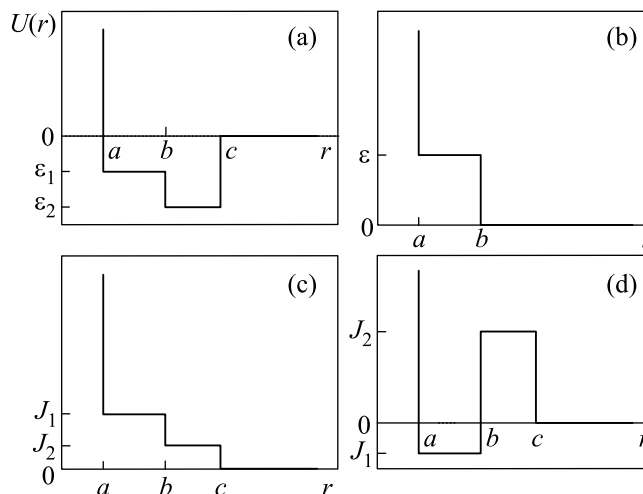


Рис.1. (a), (b) Типичный вид ступенчатого потенциала в работах по теории жидкости; (c) двухступенчатый потенциал во фрустрированной модели Гейзенберга при параметре фрустрации $p = 0.3$ ($J_1 = 0.7$, $J_2 = 0.3$ – константы спинового обмена для первых и вторых ближайших соседей); (d) двухступенчатый потенциал во фрустрированной модели Гейзенберга при параметре фрустрации $p = 1.5$ ($J_1 = -0.5$, $J_2 = 1.5$)

Рассмотрим двумерную жидкость со средним значением плотности ρ_0 . Представим в каждой точке i оператор плотности в виде $\hat{\rho} = \rho_0 + \Delta\hat{\rho}$; $\Delta\hat{\rho} = \gamma \hat{S}_i^z$, где оператор \hat{S}_i^z есть оператор проекции спина 1/2.

Таким образом, будем считать, что флуктуация плотности в точке i описывается спиновой волновой функцией, то есть при $\Psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ или $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ флуктуация плотности, соответственно, больше или меньше нуля. Нас будет интересовать корреляционная функция плотность–плотность $\langle \Delta\hat{\rho}_i \Delta\hat{\rho}_j \rangle$. Введенный выше коэффициент γ в рамках предлагаемого подхода

¹⁾e-mail: mikheenkova@gazeta.ru

вычислен быть не может, таким образом, коррелятор $\langle \Delta \hat{\rho}_i \Delta \hat{\rho}_j \rangle$ будет определяться с точностью до пропорциональности.

Решеточность модели состоит в том, что точки i мы рассматриваем на квадратной решетке. Узлы i этой квадратной решетки определяют “пробные” точки плоскости, и постоянная решетки l должна быть выбрана так, чтобы достаточно детально описывать существенную область изменения потенциала. Ниже используется минимально подробное описание потенциала, то есть $l > a$, $\sqrt{2}l > b$, $2l > c$ (см. рис.1).

Если теперь разрешить движение флуктуаций плотности по системе, то можно ввести гамильтониан

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2} J_1 \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{g}} \left\{ S_{\mathbf{i}}^z S_{\mathbf{i}+\mathbf{g}}^z + \frac{1}{2} (S_{\mathbf{i}}^+ S_{\mathbf{i}+\mathbf{g}}^- + S_{\mathbf{i}}^- S_{\mathbf{i}+\mathbf{g}}^+) \right\} + \\ &+ \frac{1}{2} J_2 \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{d}} \left\{ S_{\mathbf{i}}^z S_{\mathbf{i}+\mathbf{d}}^z + \frac{1}{2} (S_{\mathbf{i}}^+ S_{\mathbf{i}+\mathbf{d}}^- + S_{\mathbf{i}}^- S_{\mathbf{i}+\mathbf{d}}^+) \right\} = \\ &= \frac{1}{2} J_1 \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{g}} \mathbf{S}_{\mathbf{i}} \mathbf{S}_{\mathbf{i}+\mathbf{g}} + \frac{1}{2} J_2 \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{d}} \mathbf{S}_{\mathbf{i}} \mathbf{S}_{\mathbf{i}+\mathbf{d}}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь продольные члены отвечают взаимодействию флуктуаций: J_1 – на первых, J_2 – на вторых ближайших соседях пробной решетки (\mathbf{g}, \mathbf{d} – векторы первых и вторых соседей). В соответствии с видом потенциала на рис.1c,d, при указанном выше выборе l взаимодействие на всех более дальних соседях считается равным нулю.

Для характеристики относительной высоты ступеней потенциала J_1 и J_2 мы используем принятую в магнитных задачах переменную p (“параметр фрустрации”), $p = J_2/(J_1+J_2)$, $J_1 = (1-p)J$, $J_2 = pJ$, везде ниже $J = 1$.

Поперечные члены гамильтониана описывают движение флуктуаций. Ниже мы рассматриваем лишь частный случай, когда коэффициенты перед продольными и соответствующими поперечными членами одинаковы. Отметим, что внутриузельное отталкивание флуктуаций в рассматриваемой модели оказывается бесконечным благодаря констрейнту в пространстве спиновых волновых функций.

Таким образом, задача вычисления флуктуационной части ПКФ сводится к вычислению спиновых корреляционных функций $c_{i,j} = c_{i-j} = \langle S_i^z S_j^z \rangle$.

Существенно, что для описания жидкости спиновую задачу для 2D фрустрированного гейзенберговского антиферромагнетика следует рассматривать в подходе, когда на каждом узле средние значения и продольной, и поперечных компонент спина равны нулю, то есть в подходе спиновой жидкости.

Для более сложных, чем двухступенчатый, потенциалов требуется уменьшение “постоянной решетки” l и обобщение модели на случай взаимодействия с большим числом ближайших соседей (так, чтобы $J_1, J_2, J_3 \dots J_n$ достаточно подробно описывали область потенциала, отвечающую первым координационным сферам жидкости). Отметим, что узлы пробной решетки, вообще говоря, не имеют никакого отношения к наиболее вероятным положениям частиц исследуемой жидкости. Эти положения, в принципе, определяются после вычисления радиальной функции распределения и соответствуют ее максимумам.

Обратим внимание, что полученная информация о ПКФ, вообще говоря, достаточна для определения полной корреляционной функции $h(r)$ (последняя получается путем усреднения ПКФ по углам), а следовательно, для определения изотермической сжимаемости.

Опишем теперь кратко процедуру вычисления спиновых корреляционных функций c_{ij} в предложенной модели [5]. Уравнение движения для функции Грина $G_{\mathbf{nm}}^z = \langle S_{\mathbf{n}}^z | S_{\mathbf{m}}^z \rangle_{\omega}$ имеет вид

$$\omega \langle S_{\mathbf{n}}^z | S_{\mathbf{m}}^z \rangle_{\omega} = i \varepsilon_{z\beta\gamma} \sum_{\mathbf{f}=\mathbf{g},\mathbf{d}} J_{\mathbf{f}} \langle S_{\mathbf{n}+\mathbf{f}}^{\beta} S_{\mathbf{n}}^{\gamma} | S_{\mathbf{m}}^z \rangle_{\omega}, \quad (2)$$

где $J_{\mathbf{g}} = J_1, J_{\mathbf{d}} = J_2$. На втором шаге для функции Грина в правой части (2) получаем:

$$\begin{aligned} \omega i \varepsilon_{z\beta\gamma} \sum_{\mathbf{f}=\mathbf{g},\mathbf{d}} J_{\mathbf{f}} \langle S_{\mathbf{n}+\mathbf{f}}^{\beta} S_{\mathbf{n}}^{\gamma} | S_{\mathbf{m}}^z \rangle_{\omega} &= \\ &= -2J_1 c_{\mathbf{g}} \sum_{\mathbf{g}} (\delta_{\mathbf{nm}} - \delta_{\mathbf{n}+\mathbf{g},\mathbf{m}}) - \\ &- 2J_2 c_{\mathbf{d}} \sum_{\mathbf{d}} (\delta_{\mathbf{nm}} - \delta_{\mathbf{n}+\mathbf{d},\mathbf{m}}) + \\ &+ i \varepsilon_{z\beta\gamma} \sum_{\substack{\mathbf{f}_1=\mathbf{g}_1,\mathbf{d}_1 \\ \mathbf{f}_2=\mathbf{g}_2,\mathbf{d}_2}} J_{\mathbf{f}_1} J_{\mathbf{f}_2} \times \\ &\langle i \varepsilon_{\beta j l} S_{\mathbf{n}+\mathbf{f}_1+\mathbf{f}_2}^j S_{\mathbf{n}+\mathbf{f}_1}^l S_{\mathbf{n}}^{\gamma} + i \varepsilon_{\gamma j l} S_{\mathbf{n}+\mathbf{f}_1}^{\beta} S_{\mathbf{n}+\mathbf{f}_2}^j S_{\mathbf{n}}^l | S_{\mathbf{m}}^z \rangle_{\omega}. \end{aligned} \quad (3)$$

Для трехузельных членов в правой части 3 принимаем приближение следующего вида

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{n}+\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_2}^j S_{\mathbf{n}+\mathbf{g}_1}^l S_{\mathbf{n}}^{\gamma} &\approx \alpha_{\mathbf{g}} c_{\mathbf{g}} (\delta_{j l} S_{\mathbf{n}}^{\gamma} + \delta_{l \gamma} S_{\mathbf{n}+\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_2}^j) + \\ &+ \alpha_{\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_2} c_{\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_2} \delta_{j \gamma} S_{\mathbf{n}+\mathbf{g}_1}^l. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь $\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2 \neq 0$, тривиальный член с $\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2 = 0$ находится точно; α – вершинные поправки, их выбор подробно обсуждается в [5]. Такой подход приводит к отсутствию затухания функции Грина, то есть отвечает приближению среднего поля в модели

спиновой жидкости. Отметим, что выход за приближение среднего поля в этой задаче и учет затухания наталкиваются на существенные математические трудности [6] (так же как для случая традиционного двухподрешеточного состояния [7]).

В \mathbf{k} -пространстве функция Грина G^z принимает вид

$$G_{\mathbf{k},\omega}^z = \langle S_{\mathbf{k}}^z | S_{-\mathbf{k}}^z \rangle_{\omega} = \frac{F(\mathbf{k})}{\omega^2 - \omega^2(\mathbf{k})}, \quad (5)$$

где

$$F(\mathbf{k}) = -2 [J_1 c_g z_g (1 - \gamma_g(\mathbf{k})) + J_2 c_d z_d (1 - \gamma_d(\mathbf{k}))],$$

$$\omega^2(\mathbf{k}) = 2 [(\gamma_1 K_1 + \gamma_2 K_2) - (\gamma_3 K_3 + \gamma_4 K_4) - (\gamma_5 K_5 + \gamma_6 K_6)].$$

Входящие в выражение для спектра величины $K_1 \div K_6$ равны

$$K_1 = J_1 J_2 K_{gd} + J_1^2 \tilde{c}_g z_g (z_g - 1) + \frac{z_g}{4} + K_{gg},$$

$$K_2 = J_1 J_2 K_{gd} + J_2^2 \tilde{c}_d z_d (z_d - 1) + \frac{z_d}{4} + K_{dd},$$

$$K_3 = J_1^2 \tilde{c}_g z_g^2; \quad K_4 = J_2^2 \tilde{c}_d z_d^2,$$

$$K_5 = J_1 J_2 \tilde{c}_g z_g z_d,$$

$$K_6 = J_1 J_2 \tilde{c}_d z_g z_d,$$

$$K_{gg} = \sum_{\substack{\mathbf{r}=\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_2 \\ \mathbf{g}_1 \neq -\mathbf{g}_2}} \tilde{c}_r; \quad K_{dd} = \sum_{\substack{\mathbf{r}=\mathbf{d}_1+\mathbf{d}_2 \\ \mathbf{d}_1 \neq -\mathbf{d}_2}} \tilde{c}_r; \quad K_{gd} = \sum_{\mathbf{r}=\mathbf{g}+\mathbf{d}} \tilde{c}_r,$$

$\tilde{c}_r = \alpha_r c_r$ – корреляторы с учетом вершинных поправок α_r , z_g и z_d – число первых и вторых ближайших соседей в пробной решетке (в нашем случае $z_g = z_d = 4$);

$$\gamma_g(\mathbf{k}) = \frac{1}{z_g} \sum_{\mathbf{g}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{g}} = \frac{1}{2} (\cos(k_x) + \cos(k_y)),$$

$$\gamma_d(\mathbf{k}) = \frac{1}{z_d} \sum_{\mathbf{d}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{d}} = \cos(k_x) * \cos(k_y).$$

В $F(\mathbf{k})$ и $\omega^2(\mathbf{k})$ входят корреляторы $c_{\mathbf{r}}$ для первых пяти координационных сфер. Выражая их через функцию Грина $G_{\mathbf{q}}^z$:

$$c_{\mathbf{q}}^z = \langle S_{\mathbf{q}}^z S_{-\mathbf{q}}^z \rangle = -\frac{1}{\pi} \int d\omega m(\omega) \text{Im} G_{\mathbf{q}}^z = \frac{F(\mathbf{q})}{2\omega(\mathbf{q})} (2m(\omega_{\mathbf{q}}) + 1); \quad m(\omega) = (e^{\omega/T} - 1)^{-1},$$

получаем систему самосогласованных уравнений, которая решается численно:

$$c_{\mathbf{r}} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q} c_{\mathbf{q}}^z \gamma_{n,m}(\mathbf{q}); \quad \mathbf{r} = n\mathbf{g}_x + m\mathbf{g}_y,$$

$$\gamma_{n,m}(\mathbf{q}) = \frac{1}{z} \sum_{\mathbf{z}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} = \frac{1}{2} (\cos(nk_x) \cos(mk_y) + \cos(mk_x) \cos(nk_y)).$$

Определив отсюда $c_{\mathbf{q}}^z$, можно найти коррелятор $c_{\mathbf{r}}$ для любого \mathbf{r} .

Приведем результаты для c_{ij} для двух видов потенциала: первый – случай чистого отталкивания (рис.1с, $J_1 > J_2 > 0, p = 0.3$), второй – когда на близких расстояниях возникает локальный минимум (рис.1д, $J_1 < 0, J_2 > 0, p = 1.5$). Ниже, если не оговорено иное, все результаты представлены для температуры $T = 0.5J$. Физически второй случай соответствует ситуации, когда при уменьшении расстояния между частицами возникает тенденция к образованию ковалентных связей. Корреляторы $c(\mathbf{r})$ (\mathbf{r} принадлежит узлам пробной решетки) для первого слу-

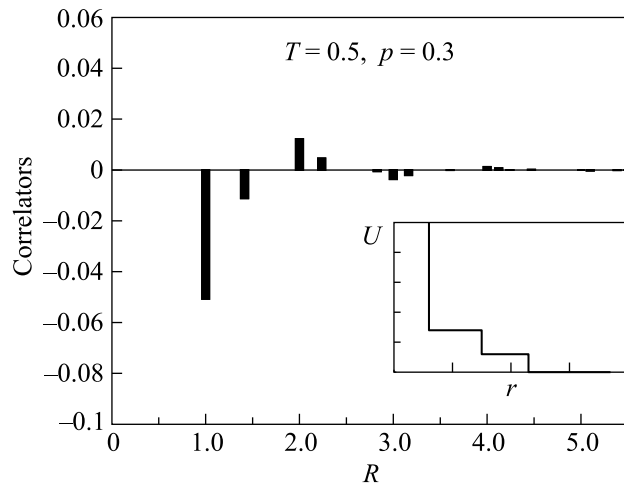


Рис.2. Спиновая корреляционная функция (пропорциональная парной корреляционной функции плотность – ПКФ) в зависимости от расстояния между узлами решетки R (R в единицах постоянной решетки l) для $T = 0.5J, p = 0.3$. На вставке приведен вид потенциала

чая приведены на рис.2. Их поведение соответствует стандартной зависимости $h(r)$: на близких расстоя-

ниях, в нашем случае на первых двух ближайших соседях пробной решетки $c_1 = c(\mathbf{g}) < 0$, $c_2 = c(\mathbf{d}) < 0$; положительные значения следующих корреляторов $c_3 = c(2\mathbf{g})$ и $c_4 = c(\mathbf{g} + \mathbf{d})$ описывают первый максимум функции $h(r)$. Во втором случае, рис.3, c_1 меняет знак и становится, хотя и малым, но поло-

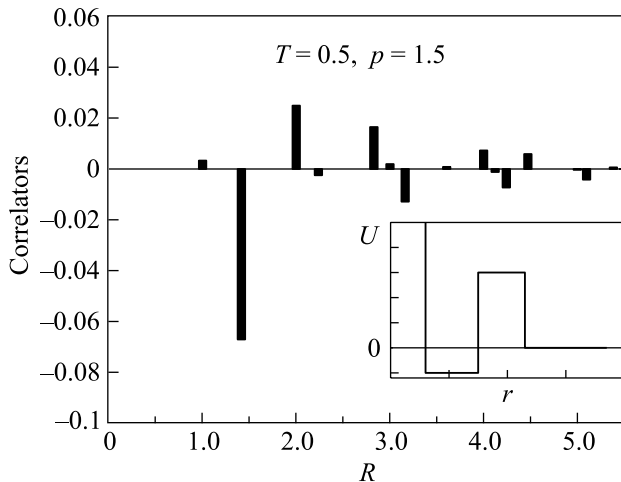


Рис.3. Спиновая корреляционная функция в зависимости от R для $T = 0.5J$, $p = 1.5$. На вставке приведен вид потенциала

жительным, c_3 остается положительным. Это можно трактовать как раздвоение первого максимума $h(r)$, что описывает тенденцию к образованию квазисвязанного состояния двух частиц при переходе от потенциала рис.1с к потенциалу рис.1d.

Отметим, что похожая ситуация обсуждалась в двумерном случае в [2, 1] для core-softened двухступенчатого потенциала вида рис.1а (обе ступени отрицательные) при фиксированном потенциале и переменной плотности. Задача решалась методами молекулярной динамики. При увеличении плотности наблюдался переход от “открытых” к “плотным” структурам, в которых частицы могут проникать в мягкую кору. В “плотной” структуре первый пик $h(r)$ расщеплен на два подпика, причем интенсивность ближнего подпика растет с ростом плотности. Возможность перехода в жидкости для core-softened (одноступенчатого) потенциала обсуждалась также в [3] с использованием термодинамической теории возмущений.

Покажем, к чему приводит относительное уменьшение высоты второй ступеньки J_2 двухступенчатого потенциала, то есть, например, переход от случая рис.1с ($p = 0.3$) к $p = 0.1$. Как видно из сравнения рис.2 и рис.4, основное изменение $h(r)$ сводится к существенному сдвигу первого максимума влево.

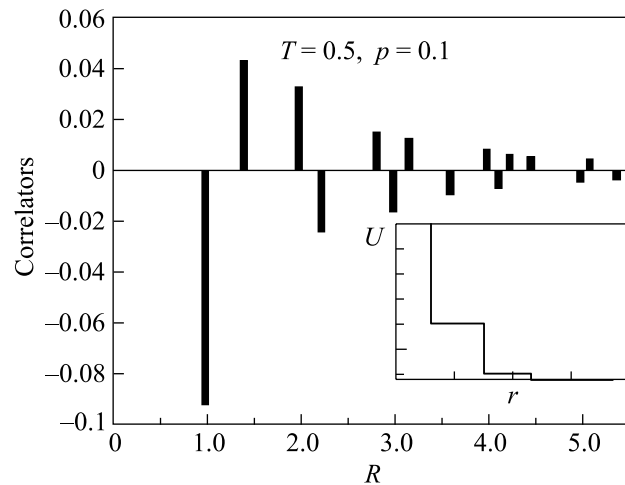


Рис.4. Спиновая корреляционная функция в зависимости от R для $T = 0.5J$, $p = 0.1$. На вставке приведен вид потенциала

Кроме того, осцилляции $c(r)$ принимают более выраженный характер.

Рассмотрим теперь влияние температуры на поведение $c(r)$ при фиксированном потенциале (то есть в нашем случае фрустрации). На рис.5 приведен вид корреляторов при нескольких температурах для случая $p = 0.6$ (соответствующий потенциал приведен на вставке). Как видно, с ростом температуры от $T = 0.25$ до $T = 0.75$ c_2 по модулю падает, а c_1 по модулю растет. Это отвечает увеличению заселенности второй ступеньки. При дальнейшем повышении температуры в интервале приблизительно $T \simeq 0.75 \div 1.0$ самосогласованного решения не существует. Однако при $T \gtrsim 1.0$ решение восстанавливается, но носит качественно отличный от предыдущего характер. А именно, резко меняются c_1 и c_2 , то есть происходит скачкообразное изменение относительных заселенностей первой и второй ступеней, указывающее на фазовый переход жидкость–жидкость. Вопрос о виде перехода – первый или второй род – в нашем приближении решен быть не может и требует выхода за рамки самосогласованного поля, сохраняющего $SU(2)$ -симметрию гамильтониана.

Отметим среди альтернативных методов исследования $2d$ квадратной фрустрированной модели Гейзенберга вычисление рядов теории возмущений для восприимчивости на конечных кластерах, квантовый метод Монте-Карло, методы точной диагонализации кластеров (подробнее см., например, обзор [8]). Однако во фрустрированном режиме ни один из этих методов не может осуществить достоверный выбор при конечных температурах между состояниями со спонтанным нарушением симметрии (box-фаза, columnar dimerized-фаза спиновой жидкости, плакетная фаза)

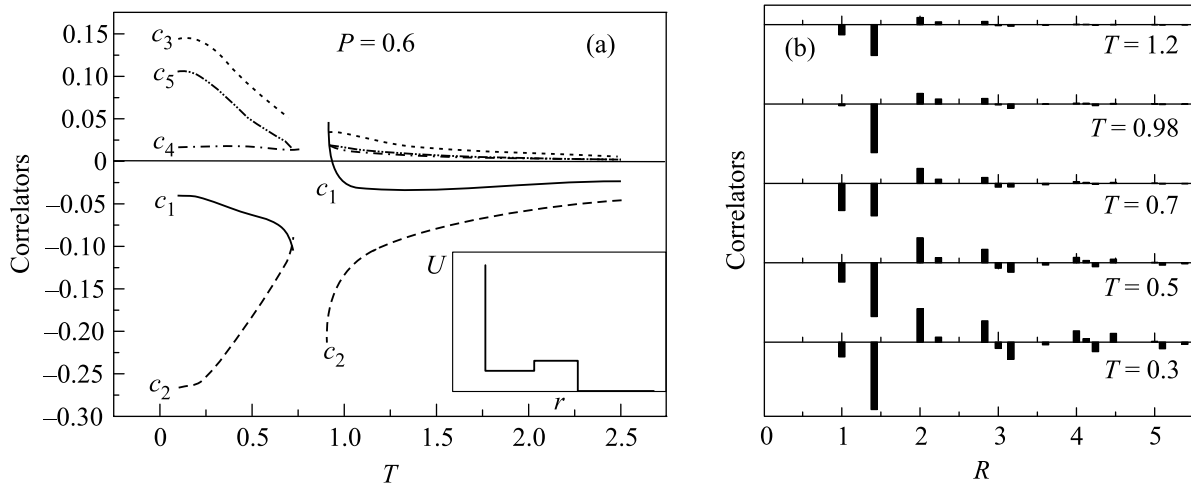


Рис. 5. (а) Зависимость от температуры первых пяти спиновых корреляторов для $p = 0.6$ ($J_1 = 0.4$, $J_2 = 0.6$). В области фазового перехода (при T , близких к 0.8 Дж) самосогласованное решение отсутствует. На вставке приведен вид потенциала. (б) Спиновая корреляционная функция зависимости от расстояния между узлами R при $p = 0.6$ для нескольких значений температуры

и спин-жидкостным состоянием, рассматриваемым в настоящей работе. В упомянутых альтернативных методах, кроме того, затруднительно нахождение в едином подходе спиновых корреляционных функций в широком интервале фрустраций и температур, а также исследование модели с учетом более дальних взаимодействий.

Развитие предложенного подхода представляется интересным в первую очередь в следующих направлениях. Так как он основан на изотропной модели Гейзенберга, кинетическая энергия флуктуаций плотности (поперечные члены) и потенциальная энергия (продольные члены) определяются одной и той же константой J . Более реалистичным было бы спин-жидкостное рассмотрение фрустрированной анизотропной модели Гейзенберга. В рамках теорий спиновой жидкости, насколько нам известно, такое рассмотрение пока отсутствует. Еще один путь развития – более аккуратное изучение влияния формы потенциала (добавление третьей ступени) на фазовый переход и на возможность образования квазимолекулярного состояния. Другой интересный открытый вопрос – изучение изменения симметрии ближнего порядка при переходе, то есть рассмотрение не только квадратной, но и других исходных решеток.

В предложенном подходе невозможно проанализировать влияние изменения давления и плотности на поведение $c(r)$. Отметим, однако, что результаты вычислений методами молекулярной динамики в двумерном случае [2] указывают на то, что увели-

чение температуры качественно эквивалентно росту давления.

Таким образом, в работе предложен основанный на модели Гейзенберга решеточный спин-жидкостный подход к рассмотрению классической жидкости, который позволяет описать поведение полной корреляционной функции при изменении температуры и вида потенциала. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований. Авторы благодарны В. Н. Рыжову и В. В. Бражкину за полезные обсуждения.

1. S. V. Buldyrev et al., in *New Kinds of Phase Transitions: Transformations in Disordered Substances*, Proc. of NATO Advanced Research Workshop, Volga River, Eds. V. V. Brazhkin, S. V. Buldyrev, V. N. Ryzhov, and H. E. Stanley, Kluwer, Dordrecht, 2002, p. 97.
2. M. R. Sadr-Lahijany, A. Scala, S. V. Buldyrev, and H. E. Stanley, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4895 (1998).
3. V. N. Ryzhov and S. M. Stishov, *Phys. Rev.* **E67**, 010201 (2003).
4. R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, 1982. Р. Бэксстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, М.: Мир, 1985.
5. A. F. Barabanov, L. A. Maksimov, and A. V. Mikheenkov, Ed. N. M. Plakida, Taylor&Francis, 2003, p. 1.
6. A. F. Barabanov and L. A. Maksimov, *Phys. Lett.* **A207**, 390 (1995).
7. S. Тyc and B. I. Halperin, *Phys. Rev.* **B42**, 2096 (1990).
8. G. Misguich and C. Lhuillier, *Cond-mat/0310405* (2003).