김일성종합대학학보 주체109(2020)년
물리학 제66권 제1호

BEG모형에서 나타나는 통계집단들의 비등가성과 부의 열용량

정금혁, 리철원, 박성철

경애하는 최고령도자 **김정은**동지께서는 다음과 같이 말씀하시였다.

《수학, 물리학, 화학, 생물학과 같은 기초과학부문에서 과학기술발전의 원리적, 방법론적기초를 다져나가면서 세계적인 연구성과들을 내놓아야 합니다.》

먼거리호상작용을 하는 계는 그것을 묘사하는 통계집단들의 비등가성과 부의 열용량, 부의 자화률과 같은 부의 특성량들이 나타나는것으로 하여 통계물리학분야에서 오래전부터 관심을 끌어오는 대상들중의 하나이다.[1－3] 특히 최근에 나노구조들에서 계의 선형크기가 계를 이루는 분자나 원자들의 호상작용령역과 비교되면서 근거리호상작용을 하는 계들에서도 우와 같은 특성들이 나타나는것으로 하여 그에 대한 관심이 매우 높아지고있다.

이로부터 우리는 먼거리호상작용을 하는 계들중의 하나인 BEG모형을 대상으로 하여 이러한 계에서 통계집단의 비등가성과 부의 열용량특성이 어떻게 나타나는가 하는데 대한 연구를 진행하였다.

1. 정준집단을 리용한 BEG모형의 풀이

BEG(Blume-Emery-Griffiths)모형은 평균마당근사로 취급할수 있는 무한한 크기를 가진 살창스핀모형으로서 그것의 상도표는 미시정준집단이나 정준집단을 리용하여 해석적으로 얻을수 있다. 이 모형의 하밀토니안은 다음과 같이 주어진다.

$$H = \Delta \sum_{i=1}^{N} S_i^2 - \frac{J}{2N}\left(\sum_{i=1}^{N} S_i\right)^2 \tag{1}$$

여기서 $J>0$ 은 강자성교환호상작용결합상수이며 $\Delta>0$ 은 강자성상 $S_i=\pm 1$ 과 상자성상 $S_i=0$ 사이의 에네르기차이를 조절하여주는 파라메터이다. 문제고찰을 편리하게 하기 위하여 자연단위계를 리용하며 모든 물리적량들은 J 를 단위로 하여 표시하자.

구체적인 론의에 들어가기에 앞서 이 모형에 대한 정성적인 고찰부터 하자. 만일 계가 상자성상에 놓여있다면 계의 전에네르기는 령이며 균일한 강자성상에 놓여있다면 $(\Delta-1/2)N$ 의 에네르기를 가진다. 절대령도에서 자유에네르기최소조건은 내부에네르기최소조건과 같으므로 $\Delta>1/2$ 인 경우에는 상자성상이 안정한 상으로 되며 $\Delta<1/2$ 인 경우에는 강자성상이 안정한 상으로 된다. 결국 $\Delta=1/2$ 인 점은 상변환점으로 된다. 이것은 제1종의 상변환에 해당된다. 왜냐하면 그 점에서 강자성상에서 상자성상으로의 자화의 비약이 일어나기때문이다.

만일 $\Delta=0$ 이라면 식 (1)의 하밀토니안은 보통의 큐리－와이스모형의 하밀토니안으로 넘어가게 되며 $T=2/3$ 일 때 제2종의 상변환을 일으키게 된다.

정준집단을 리용한 BEG모형에 대한 연구는 이미 오래전부터 진행되여왔다. BEG모형에 대한 통계합은 다음과 같이 주어진다.[4]

$$Z(\beta,\,N)=\sum_{\{S_1,\,\cdots,\,S_N\}}\exp\left(-\beta\Delta\sum_{i=1}^{N}S_i^2+\frac{\beta J}{2N}\left(\sum_{i=1}^{N}S_i\right)^2\right) \tag{2}$$

여기서 $\beta=1/T$ 이다. 가우스항등식

$$\exp(bm^2)=\sqrt{\frac{b}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp(-bx^2+2mbx)$$

를 리용하면(여기서 $m=\sum_i S_i/N$ 이고 $b=N\beta J/2$)

$$Z(\beta,\,N)=\sum_{\{S_1,\,\cdots,\,S_N\}}\exp\left(-\beta\Delta\sum_{i=1}^{N}S_i^2\right)\sqrt{\frac{N\beta}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp\left(-\frac{N\beta}{2}x^2+mN\beta x\right) \tag{3}$$

로 되며 쉽게

$$Z(\beta,\,N)=\sqrt{\frac{N\beta}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp(-N\beta\,\tilde{f}(\beta,\,x)) \tag{4}$$

로 된다는것을 알수 있다. 여기서

$$\tilde{f}(\beta,\,x)=\frac{1}{2}x^2=\frac{1}{\beta}\ln[1+e^{-\beta\Delta}(e^{\beta x}+e^{-\beta x})] \tag{5}$$

이다.

한편 란다우의 련속상변환리론으로부터 웃식의 $\tilde{f}(\beta,\,x)$ 는 상변환점가까이에서 x 에 관한 제곱합렬로 전개할수 있다.

$$\tilde{f}(\beta,\,x)\approx f_0+Ax^2+Bx^4+Cx^6+\cdots \tag{6}$$

식 (6)의 결수를 식 (5)로부터 구하면

$$A=\beta-\frac{1}{2}e^{\beta\Delta}-1=0 \tag{7}$$

이며

$$B=4-e^{\beta\Delta} \tag{8}$$

이다. 제2종의 상변환점은 $A=0,\,B>0$ 으로 되는 점이며 $\Delta=0$ 일 때 $T=2/3$ 이다. $\Delta\neq0$ 이면 제2종의 상변환점은 달라지게 되며 결국 $(\Delta,\,T)$ 평면에서 제2종의 상변환곡선을 그릴수 있다.(그림 1)

제1종의 상변환곡선과 제2종의 상변환곡선이 사귀는 3중림계점은 $A=B=0$ 일 때 얻어지게 된다. 이로부터 $\Delta=\frac{\ln 4}{3}\approx 0.462\,1$ 이고 $\beta=3$ 으로 주어진다. 이 3중림계점으로부터 림계곡선을 수값적인 방법으로 연장하면 제1종의 상변환곡선을 얻게 된다.

그림 2에 각이한 β 에 따르는 함수 $\tilde{f}(\beta,\,x)$ 의 특성을 보여주었다. 첫 부분은 제2종의 상변환($\Delta=0.1$)에 해당되는 부분으로서 2개의 극소점을 가지며 두번째 부분은 제1종의 상변환($\Delta=0.485$)에 해당되는 부분으로서 3개의 극소점을 가진다.

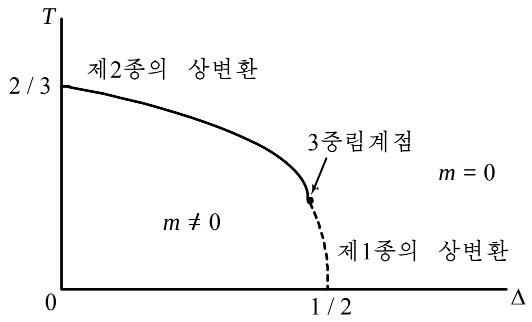

그림 1. 정준집단을 리용한 BEG모형의 상도표
실선－제2종의 상변환곡선,
점선－제1종의 상변환곡선

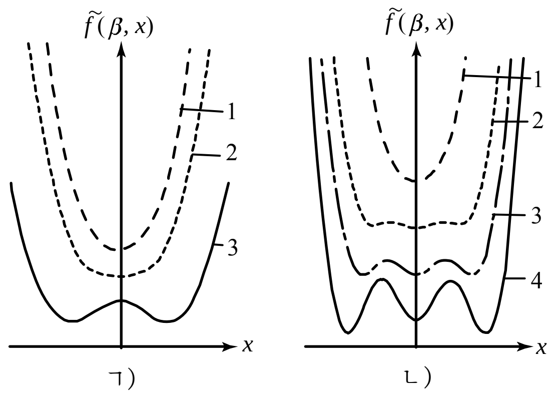

그림 2. 각이한 β 에 따르는 $\tilde{f}(\beta, x)$ 의 특성
ㄱ) 제2종의 상변환(1－3은 각각 $T = 0.80,\ 0.63,\ 0.40$ 인 경우), ㄴ) 제1종의 상변환(1－4는 각각 $T = 0.50,\ 0.24,\ 0.21,\ 0.18$ 인 경우)

2. 미시정준집단을 리용한 BEG모형의 풀이

이번에는 BEG모형을 미시정준집단을 리용하여 풀어보기로 하자. 그 과정을 통하여 먼거리호상작용을 하는 계에서 통계집단들의 비등가성을 론의한다.

어느 한 거시적상태가 N_+, N_-, N_0 개의 스핀에 의하여 결정된다고 하자. 여기서 N_+, N_-, N_0 은 각각 웃방향, 아래방향 및 령스핀이며 $N_+ + N_- + N_0 = N$ 이다. 계의 에네르기는

$$E = \Delta Q - \frac{1}{2N} M^2 \tag{9}$$

이며 여기서 2중극모멘트는 $Q = \sum_{i=1}^{N} S_i^2 = N_+ + N_-$ 이며 자화의 세기는 $M = \sum_{i=1}^{N} S_i = N_+ - N_-$ 이다.

한편 이러한 거시적상태를 실현할수 있는 가능한 미시적상태의 총수는

$$\Omega = \frac{N!}{N_+! N_-! N_0!} \tag{10}$$

으로 주어진다. 열력학적극한에서 스털링의 공식을 리용하면 계의 엔트로피로서

$$S = -N\left[(1-q)\ln(1-q) + \frac{1}{2}(q+m)\ln(q+m) + \frac{1}{2}(q-m)\ln(q-m) - q\ln 2\right] \tag{11}$$

를 얻는다. 여기서 $q = Q/N$ 과 $m = M/N$ 은 매 살창당 평균2중극모멘트와 자화이다. 한편 식 (9)는 다음과 같이 고쳐쓸수 있다.

$$q = 2K\varepsilon + Km^2 \tag{12}$$

여기서 $K = 1/(2\Delta)$ 이다. 이 관계식을 리용하면 매 살창당 엔트로피 $s = S/N$ 은 자화 m 과

에네르기 ε의 함수로서 다음과 같이 주어진다.

$$\begin{aligned}s(\varepsilon, m) = &-(1-2K\varepsilon-Km^2)\ln(1-2K\varepsilon-Km^2)-\\&-\frac{1}{2}(2K\varepsilon+Km^2+m)\ln(2K\varepsilon+Km^2+m)-\\&-\frac{1}{2}(2K\varepsilon+Km^2-m)\ln(2K\varepsilon+Km^2-m)+(2K\varepsilon+Km^2)\ln 2\end{aligned} \tag{13}$$

주어진 ε에 대하여 엔트로피를 최대로 만드는 m이 평형상태의 자화에 해당된다. 즉

$$s(\varepsilon) = \sup_m s(\varepsilon, m) \tag{14}$$

이 량이 미시정준집단에서 열력학적계의 모든 정보를 포함하고있는 량으로 되는것이다.

자유에네르기의 경우와 류사하게 엔트로피를 상변환점근방에서 자화에 관하여 합렬전개하면 다음과 같다.

$$s = s_0 + A_m m^2 + B_m m^4 + \mathrm{o}(m^6) \tag{15}$$

여기서

$$\left.\begin{aligned}s_0 &= -(1-2K\varepsilon)\ln(1-2K\varepsilon) - 2K\varepsilon\ln(K\varepsilon)\\A_m &= -K\ln\frac{K\varepsilon}{1-2K\varepsilon} - \frac{1}{4K\varepsilon}\\B_m &= -\frac{K}{4\varepsilon(1-2K\varepsilon)} + \frac{1}{8K\varepsilon^2} - \frac{1}{96K^3\varepsilon^3}\end{aligned}\right\} \tag{16}$$

이다. 열력학관계식 $\beta = \partial s/\partial\varepsilon$을 리용하여 $m=0$인 림계점에서의 온도를 계산하면

$$\frac{1}{T} = 2K\ln\frac{1-2K\varepsilon}{K\varepsilon} \tag{17}$$

을 얻는다. 이제 림계점에서 $A_m = 0$임을 고려하면

$$\beta = \frac{1}{2K\varepsilon} \tag{18}$$

을 얻는다. 3중림계점에서 $A_m = B_m = 0$임을 고려하면

$$\frac{K^2}{2\beta^2}\left[1+2\exp\left(-\frac{\beta}{2K}\right)\right] - \frac{K}{2\beta} + \frac{1}{12} = 0 \tag{19}$$

을 얻는다. 식 (18)과 (19)로부터 3중림계점값을 계산하면 $K \approx 1.081\ 3$, $\beta = 3.027\ 2$이다. 이것을 앞에서 구한 정준집단의 3중림계점값 $K = 1/(2\Delta) = 3/\ln 16 \approx 1.082\ 0$, $\beta = 3$과 비교해보면 매우 근사하다. 비록 이 값들이 매우 근사하기는 하지만 일치하지는 않으며 그 미세한 차이에 BEG모형에서의 통계집단들의 비등가성이 존재한다. 이제 그에 대하여 구체적으로 보기로 하자.

먼저 온도의 에네르기관련성 $T(\varepsilon)$을 따져보기로 하자. 이 곡선은 크게 두가지 부분으로 갈라볼수 있는데 식 (17)로부터 얻어지는 $m=0$인 고에네르기부분과 자발자화 $m(\varepsilon)$이 있을 때 $T = (\partial s/\partial\varepsilon)^{-1}$으로부터 얻어지는 저에네르기곡선으로 갈라볼수 있다. 그림 3에

미시정준집단에서 K값에 따르는 $T(\varepsilon)$곡선의 모양을 보여주었다. 수평으로 그은 점선부분은 정준집단에서의 상변환온도에 해당된다. 검은색부분은 미시정준집단에서 부의 열용량이 나타나는 부분을 의미한다.

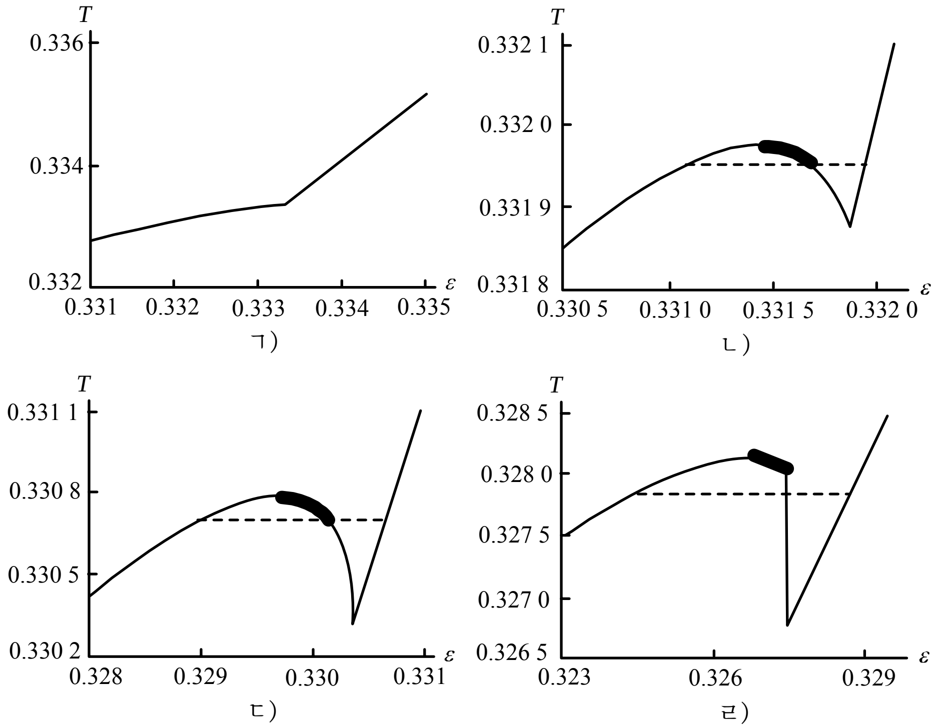

그림 3. 미시정준집단에서 K값에 따르는 $T(\varepsilon)$곡선의 모양

ㄱ)—ㄹ)는 각각 K=1.082 0, 1.081 7, 1.081 0, 1.080 5인 경우

그림 3의 ㄱ)에서 알수 있는바와 같이 $K=1.082$일 때 즉 3중림계점에 해당될 때 저에네르기가지는 3중림계점근방에서 경사도가 령으로 되게 되며 따라서 질서상에서 열용량은 발산하게 된다.

K의 값이 감소함에 따라 정준집단의 3중림계점과 미시정준집단의 3중림계점사이에는 부의 열용량부분이 나타나게 되며(그림 3의 ㄴ), ㄷ)) K값이 점점 더 작아지게 되면 상변환점에서의 온도비약까지 나타나게 된다.(그림 3의 ㄹ))

이러한 특성을 고려하여 정준집단을 리용한 경우와 미시정준집단을 리용한 경우의 림계곡선을 함께 그리면 그림 4와 같다. 그림에서 1은 두 통계집단이 일치하는 제2종의 상변환부분이며 2는 미시정준집단에서만 나타나는 제2종의 상변환부분, 3은 온도비약을 가지는 미시정준집단에서의 제1종의 상변환부분, 4는 정준집단에서의 제1종의 상변환부분이다.

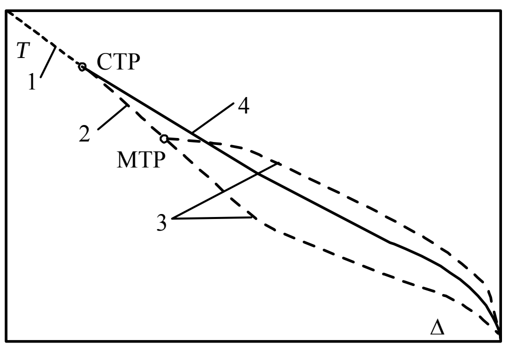

그림 4. 정준집단의 3중림계점과 미시정준집단의 3중림계점사이구역을 확대하여 그린 BEG모형의 상도표

맺 는 말

정준집단 및 미시정준집단을 리용하여 BEG모형을 고찰하였다. BEG모형에서 상변환점에 대하여 정준집단과 미시정준집단의 경우가 서로 차이났으며 미시정준집단의 경우에는 제1종의 상변환시에 온도비약과 부의 열용량특성이 나타났다. BEG모형에서 나타나는 이러한 모든 특성들은 먼거리호상작용을 하는 계들에서 나타나는 일반적인 특성과 일치한다.

참 고 문 헌

[1] G. N. B. Chendjou et al.; Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul., 60, 115, 2018.

[2] T. Tatekawa et al.; Phys. Rev., E 71, 056111, 2005.

[3] F. Bouchet et al.; Phys. Rev. Lett., 122, 074502, 2019.

[4] M. Blume et al.; Physical Review, A 4, 1071, 1971.

주체108(2019)년 9월 5일 원고접수

Inequivalence of Statistical Ensembles and Negative Heat Capacity in the BEG Model

Jong Kum Hyok, *Ri Chol Won* and *Pak Song Chol*

In this paper we studied the canonical and microcanonical description of BEG model. The phase transition point is different between the cases of canonical and microcanonical ensembles, especially in the case of microcanonical ensemble temperature jump and negative heat capacity are exhibited at the point of the first order phase transition. All these characteristics of BEG model are coincided with the general properties of long-range interaction systems.

Keywords: long-range interaction, negative susceptibility