

УДК 531.19

С.В. СЁМКИН, В.П. СМАГИН

КЛАСТЕРНЫЙ СПОСОБ ПОСТРОЕНИЯ ПРИБЛИЖЕНИЯ БЕТЕ ДЛЯ МОДЕЛИ ИЗИНГА РАЗБАВЛЕННОГО МАГНЕТИКА

Предложена интерпретация приближения Бете, основанная на сопоставлении спиновых кластеров различного размера на дереве Кейли. На основе этой интерпретации предложен метод построения приближения Бете для разбавленного по узлам или связям изинговского магнетика. Метод дает точное значение перколяционного порога для решетки Бете. Для различных вариантов метода построена спонтанная намагниченность как при нулевой, так и при конечной температуре как функция концентрации магнитных атомов, а также найдено аналитическое выражение для критического показателя корреляционной длины.

Ключевые слова: фазовые переходы, приближение Бете, модель Изинга, разбавленный магнетик.

Введение

Критические явления в моделях Изинга и Гейзенберга для разбавленного магнетика, а также в моделях ферромагнетиков со случайными связями исследуются на протяжении нескольких последних десятилетий [1–6]. Внимание исследователей было в основном сосредоточено на проблеме универсальности и вообще на поведении разбавленных магнетиков вблизи критической точки [3, 5, 6]. В качестве типичного реального примера разбавленного магнетика, поведение которого может быть описано моделью Изинга с разбавлением по узлам, можно привести сплав $\text{Fe}_b\text{Zn}_{1-b}\text{F}_1$, исследованный в [7]. В настоящей работе мы предлагаем простой метод расчета намагниченности и температуры Кюри разбавленного магнетика, применимый в широком диапазоне концентраций немагнитных примесей. Этот метод является обобщением известного метода Бете [8] на разбавленные магнетики, находящиеся в состоянии термодинамического равновесия. Вначале мы построим «кластерную» интерпретацию метода Бете для чистого (не разбавленного) изинговского магнетика. Эта интерпретация основана на сопоставлении кластеров различного размера на решетке Бете, что можно трактовать как ренормгрупповое преобразование конечного масштаба, аналогично [9, 10]. Затем будет показано, что это представление приближения Бете можно распространить на случай разбавленного по узлам или связям изинговского магнетика, причем возможны различные варианты такого распространения. В рассматриваемом приближении найден перколяционный порог (совпадающий с точным значением порога протекания для решетки Бете) и построена зависимость температуры Кюри от концентрации магнитных атомов. Для оценки точности нашего приближения мы сравниваем среднюю намагниченность при нулевой температуре как функцию концентрации с вероятностью того, что данный магнитный атом принадлежит бесконечному кластеру магнитных атомов на решетке Бете.

1. «Кластерный» способ построения приближения Бете

Построим решетку Бете следующим способом, который можно рассматривать как обобщение способа, описанного в [8]. Рассмотрим граф из n узлов, соединенных цепочкой. Крайние узлы этой цепочки соединим еще с $q-1$ новыми узлами (своими для каждого из крайних узлов), а каждый внутренний узел – с $q-2$ другими новыми узлами (опять-таки своими для каждого из внутренних узлов). Назовем всю совокупность этих добавленных $nq-2(n-1)$ узлов «первой оболочкой». Последующие оболочки определим рекуррентной процедурой: оболочка $r+1$ строится присоединением $q-1$ новых узлов к каждому из узлов оболочки r . Проведя эту процедуру N раз, получим так называемое дерево Кейли, внутренняя часть которого при $N \rightarrow \infty$ и является решеткой Бете. Рассмотрим теперь модель Изинга на решетке Бете. Пусть σ_i , $i=1, \dots, n$, – спины, расположенные в узлах первоначальной цепочки. Статистическая сумма системы $Z_N = \sum P(\sigma)$, где суммирование проводится по всем возможным конфигурациям σ и $P(\sigma) = \exp(K \sum \sigma_i \sigma_j)$. (Суммирование в последнем выражении проводится по всем связям решетки, $K = J/kT$, где J – обменный интеграл, T – абсолютная температура, k – постоянная Больцмана.) Запишем $P(\sigma)$ в виде

$$P(\sigma) = \exp\left(K \sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i \sigma_{i+1}\right) \prod_{j=1}^{q-1} Q_N(\sigma_1, s_{1,j}) \prod_{j=1}^{q-2} Q_N(\sigma_2, s_{2,j}) \dots \prod_{j=1}^{q-1} Q_N(\sigma_n, s_{n,j}),$$

где $s_{i,j}$ – совокупность спинов j -й ветки, отходящей от i -го узла цепочки, а

$$Q_N(\sigma_i, s_{i,j}) = \exp(K \sum s_i s_j + K s_i \sigma_i).$$

Суммируя это выражение по всем $s_{i,j}$ и введя обозначение $g_N(\sigma_i) = \sum_{\{s_{i,j}\}} Q_N(\sigma_i, s_{i,j})$ (все суммы

одинаковы для всех ветвей), получим $Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$, где

$$p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n) = \exp\left(K \sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i \sigma_{i+1}\right) g_N^{q-1}(\sigma_1) g_N^{q-2}(\sigma_2) \dots g_N^{q-1}(\sigma_n).$$

Если $f(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$ – некоторая функция спинов цепочки, то ее среднее значение, равное

$$\langle f(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n) \rangle = \frac{\sum_{\{\sigma_i\}} f(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n) p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)}{\sum_{\{\sigma_i\}} p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)},$$

можно представить в следующем виде. Обозначим $x_N = g_N(-1)/g_N(+1)$ и запишем

$g_N(\sigma_i)/g_N(+1)$ как $g_N(\sigma_i)/g_N(+1) = \exp\left(\frac{1-\sigma_i}{2} \ln x_N\right)$. Тогда

$$\langle f(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n) \rangle = \frac{\sum_{\{\sigma_i\}} f(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n) \tilde{p}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)}{\sum_{\{\sigma_i\}} \tilde{p}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)}, \quad (1)$$

где

$$\tilde{p}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n) = \exp\left(K \sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i \sigma_{i+1} + K \sum_{i=1}^n h_{N,i} \sigma_i\right),$$

$$h_{N,1} = h_{N,2} = (q-1)\mu_N, \quad h_{N,i} = (q-2)\mu_N, \quad (i=2, \dots, n-1), \quad \mu_N = \frac{1}{2K} \ln \frac{1}{x_N}.$$

Таким образом, среднее значение $\langle f(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n) \rangle$ можно интерпретировать как среднее по кластеру из n спинов σ_i , связанных обменным взаимодействием и находящихся в постоянных полях $h_{N,i}$. Для величин x_N (или μ_N) можно построить рекуррентное соотношение [7]

$$x_N = \frac{e^{-K} + e^K x_{N-1}^{q-1}}{e^K + e^{-K} x_{N-1}^{q-1}}, \quad x_0 = 1. \quad (2)$$

Переходя к термодинамическому пределу $N \rightarrow \infty$, получим из рекуррентного соотношения (2) самосогласованное уравнение для $x = \lim_{N \rightarrow \infty} x_N$. Решив это уравнение, можно вычислить среднее значение любой функции $f(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$. Однако можно предложить другой способ определения величины $\mu = \lim_{N \rightarrow \infty} \mu_N$, основанный на представлении среднего $\langle f(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n) \rangle$ как среднего по кластеру (1). Вычислим по формуле (1) среднюю намагниченность $M(n, \mu) = \left\langle \sum_{i=1}^n \sigma_i / n \right\rangle$. Рассмотрим теперь два кластера с различным количеством спинов n и n' .

Очевидно, что в термодинамическом пределе

$$M(n, \mu) = M(n', \mu). \quad (3)$$

Последнее равенство можно рассматривать как уравнение относительно μ . (Кроме того, уравнение для μ можно получить, приравнявая средние значения намагниченности различных частей одного и того же кластера, но следует учесть, что при этом может получиться тождественное равенство.)

Для магнетика без примесей предложенная интерпретация метода Бете приводит, разумеется, к тем же результатам, что и традиционная [11]. Но, как будет показано ниже, эта интерпретация

позволяет построить различные приближенные методы анализа магнитных свойств разбавленного магнетика на решетке Бете.

2. Разбавленный изинговский магнетик

Запишем уравнение (3) применительно к кластерам с $n = 1$ и $n' = 2$:

$$\text{th}(Kq\mu) = \frac{\text{sh}(2K(q-1)\mu)}{\text{ch}(2K(q-1)\mu) + e^{-2K}}.$$

Это уравнение имеет ненулевое решение при $K > K_c$, где $K_c = \frac{1}{2} \ln \frac{q}{q-2}$ – критическая точка для модели Изинга на решетке Бете [8]. Предположим теперь, что каждый узел решетки Бете заполнен изинговским спином с вероятностью b и немагнитным атомом с вероятностью $1-b$. Для этой модели можно построить обобщение уравнения (3) следующим образом. Кластер из одного узла может быть заполнен немагнитным атомом, среднее значение намагниченности такого кластера очевидно равно нулю. Если же кластер заполнен магнитным атомом, обозначим через M_l условное среднее значение его намагниченности, при условии, что у него есть l магнитных соседей. Тогда средняя намагниченность на узел решетки $M = b \langle M_l \rangle_{W_1(l)}$, где треугольные скобки означают усреднение по функции распределения $W_1(l)$ величины l . Сделаем теперь следующее приближение: будем считать $M_l = \text{th}(Kl\mu)$, то есть

$$M(1, \mu, b) = b \langle \text{th}(Kl\mu) \rangle_{W_1(l)}.$$

Рассуждая аналогично для кластера из двух узлов, получим

$$M(2, \mu, b) = \frac{1}{2} b(1-b) \langle \text{th}(Kl_1\mu) + \text{th}(Kl_2\mu) \rangle_{W_2(l_1, l_2)} + b^2 \left\langle \frac{\text{sh}(K(l_1 + l_2)\mu)}{\text{ch}(K(l_1 + l_2)\mu) + e^{-2K} \text{ch}(K(l_1 - l_2)\mu)} \right\rangle_{W_2(l_1, l_2)}.$$

Здесь l_1 и l_2 – количества магнитных соседей у первого и второго узлов кластера, а $W_2(l_1, l_2)$ – их функция распределения. Приравнявая теперь $M(1, \mu, b)$ и $M(2, \mu, b)$, получим уравнение относительно μ , которое можно рассматривать как обобщение уравнения (3) для разбавленного магнетика.

Найдем сначала критическую точку $K_c(b)$ разбавленного магнетика в рассматриваемом приближении. Приравнявая производные по μ от $M(1, \mu, b)$ и $M(2, \mu, b)$ при $\mu = 0$, получим

$$\langle l \rangle_{W_1(l)} = \frac{1}{2} (1-b) \langle l_1 + l_2 \rangle_{W_2(l_1, l_2)} + \frac{b}{1 + e^{-2K_c}} \langle l_1 + l_2 \rangle_{W_2(l_1, l_2)}.$$

Считая, что $\langle l \rangle_{W_1(l)} = qb$, а $\langle l_1 + l_2 \rangle_{W_2(l_1, l_2)} = 2(q-2)b$, получим выражение для $K_c(b)$:

$$K_c(b) = \frac{1}{2} \ln \frac{q - (q-1)(1-b)}{(q-1)(1+b) - q} = \frac{1}{2} \ln \frac{b + b_c}{b - b_c}. \quad (4)$$

При $b = 1$ получим известную [8] критическую точку модели Изинга на решетке Бете. Кроме того, видно, что $K_c(b) \rightarrow \infty$ (то есть температура Кюри $T_C(b) \rightarrow 0$) при $b \rightarrow b_c = \frac{1}{q-1}$, что является перколяционным порогом для решетки Бете [1].

Найдем теперь $M_0(b)$ – среднюю намагниченность магнитного атома при $K \rightarrow \infty$. Как известно [1], эта функция может быть интерпретирована как вероятность $P(b)$ того, что взятый наугад магнитный атом принадлежит бесконечному кластеру таких атомов. Для решетки Бете существует точное выражение для этой вероятности [1]:

$$P(b) = 1 - z^q, \quad (5)$$

где z – корень уравнения $\sum_{i=0}^{q-2} z^i = 1/b$. Будем использовать степень близости $M_0(b)$ к $P(b)$ в качестве критерия точности рассматриваемых приближений.

Уравнение для $M_0(b)$, полученное сопоставлением кластеров из одного и двух атомов, имеет, согласно сказанному выше, следующий вид:

$$M_0(b) = \langle \text{th}(yl) \rangle_{W_1(l)},$$

где $y = \lim_{K \rightarrow \infty} K\mu(K)$ и является решением уравнения

$$\langle \text{th}(yl) \rangle_{W_1(l)} = \frac{1}{2}(1-b) \langle \text{th}(yl_1) + \text{th}(yl_2) \rangle_{W_2(l_1, l_2)} + b \langle \text{th}(y(l_1 + l_2)) \rangle_{W_2(l_1, l_2)}.$$

Дальнейший расчет зависит от выбора функций распределения $W_1(l)$ и $W_2(l_1, l_2)$. Например, можно просто заменить усреднения по этим функциям подстановкой в соответствующие выражения средних значений $\langle l \rangle_{W_1(l)} = qb$ и $\langle l_1 \rangle_{W_2(l_1, l_2)} = \langle l_2 \rangle_{W_2(l_1, l_2)} = (q-1)b$. В этом случае приходим к выражениям

$$M_{0,a}(b) = \text{th}(yqb), \quad (6)$$

$$\text{th}(yqb) = (1-b) \text{th}(y(q-1)b) + b \text{th}(2y(q-1)b).$$

Если же в качестве функций распределения $W_1(l)$ и $W_2(l_1, l_2)$ выбрать биномиальные распределения, получим

$$M_{0,b}(b) = \sum_{l=0}^q C_q^l b^l (1-b)^{q-l} \text{th}(yl), \quad (7)$$

$$\sum_{l=0}^q C_q^l b^l (1-b)^{q-l} \text{th}(yl) = (1-b) \sum_{i=0}^{q-1} C_{q-1}^i b^i (1-b)^{q-1-i} \text{th}(yl) + b \sum_{i=0}^{2(q-1)} C_{2(q-1)}^i b^i (1-b)^{2(q-1)-i} \text{th}(yl).$$

На рис. 1 приведены графики спонтанной намагниченности при нулевой температуре, вычисленные в приближениях (6) и (7) (кривые 1 и 2), пунктирная линия – вероятность (5). Видно, что все три кривые достаточно близки.

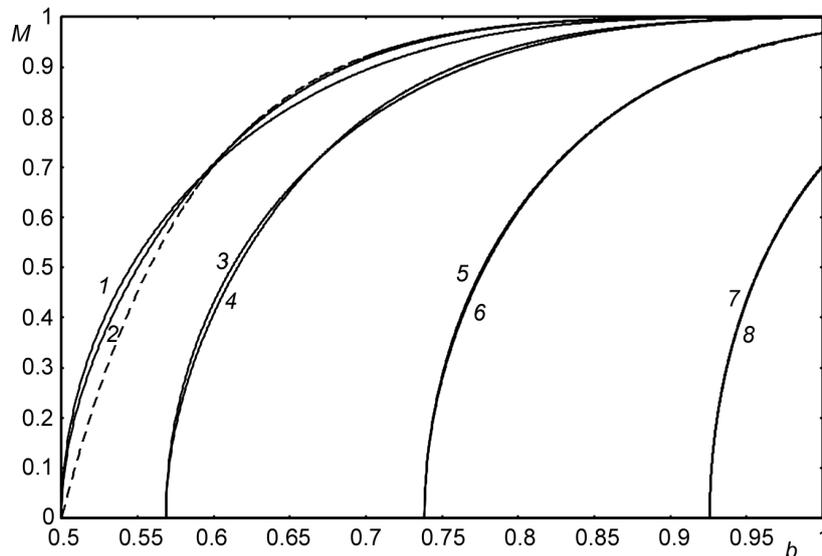


Рис. 1. Зависимость спонтанной намагниченности от концентрации магнитных атомов b при различных температурах для $q = 3$: кр. 1 и 2 – спонтанная намагниченность при нулевой температуре в приближениях (6) и (7) соответственно; пунктирная кривая – вероятность того, что магнитный атом принадлежит бесконечному кластеру (5); кр. 3, 5 и 7 – спонтанная намагниченность в приближении (6) при $K = 2.5K_c(1)$, $1.5K_c(1)$, $1.1K_c(1)$ соответственно; кр. 4, 6, 8 – спонтанная намагниченность в приближении (7) при тех же значениях K

На рис. 2 показаны разности $\Delta = M_0(b) - P(b)$ для методов (6) и (7). Видно, что отличие спонтанной намагниченности от вероятности принадлежать бесконечному кластеру меньше для приближения (7), то есть в случае, когда в качестве функций распределения $W_1(l)$ и $W_2(l_1, l_2)$ выбирается биномиальное распределение. Кроме того, из рис. 2 видно, что разница Δ максимальна при концентрациях, несколько больших, чем порог протекания, и практически исчезает при больших концентрациях магнитных атомов. На рис. 1 показана также спонтанная намагниченность как функция концентрации при конечных температурах (кривые 3–8). Видно, что различие между приближениями (6) и (7) становится меньше при увеличении температуры.

При использовании кластера из трех атомов получается, как показывает расчет, совпадающее с (4) выражение для $K_c(b)$ (и, в частности, такое же значение перколяционного порога $b_c = \frac{1}{q-1}$). Однако намагниченность $M(K, b)$ и, в частности, $M_0(b)$ несколько отличается от результатов, полученных при сопоставлении кластеров из одного и двух атомов.

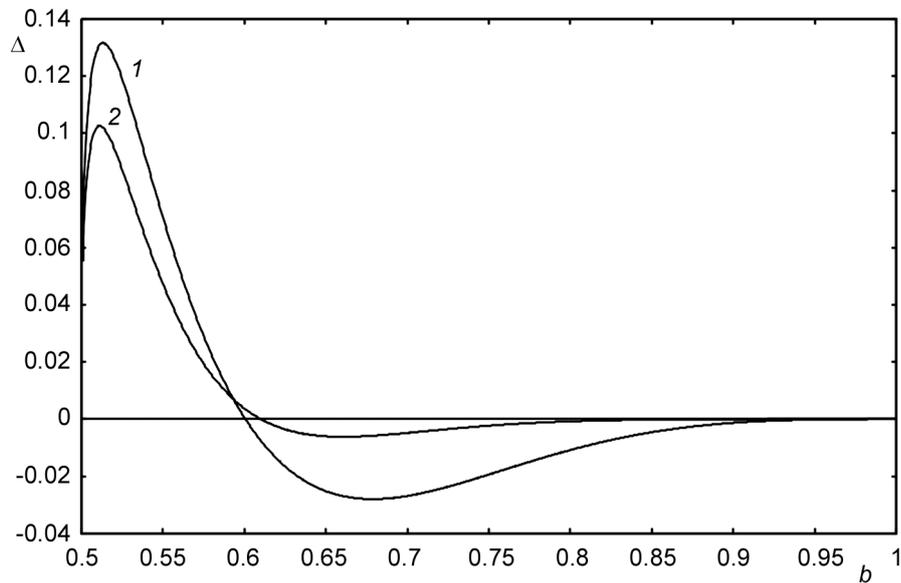


Рис. 2. Разница $\Delta = M_0(b) - P(b)$ спонтанной намагниченности при нулевой температуре и вероятности для магнитного атома принадлежать бесконечному кластеру в зависимости от концентрации b : кр. 1 и 2 – приближения (6) и (7) соответственно

Рассмотрение кластеров различного размера может быть использовано и для построения ре-нормгруппового преобразования фиксированного масштаба, аналогично [9, 10]. С помощью этого преобразования можно найти критический показатель корреляционной длины ν следующим образом. Средние значения спинов $M(n, \mu, b)$ (параметры порядка) являются функциями μ , которое можно интерпретировать как среднюю намагниченность атомов, окружающих кластер. Рассматривая два кластера, содержащих n и n' атомов, и предполагая скейлинговые свойства параметров M и μ одинаковыми, получим, что в критической точке при отсутствии внешнего поля при $\mu = 0$ должно выполняться равенство

$$\frac{\partial M(n, \mu, b)}{\partial \mu} = \frac{\partial M(n', \mu)}{\partial \mu} \quad (8)$$

Формально это уравнение совпадает с условием существования ненулевого решения в самосогласованной модели, получаемой приравнением $M(n, \mu, b)$ и $M(n', \mu, b)$. Однако с точки зрения ре-нормгруппового преобразования смысл (8) заключается в стационарности критической точки при

масштабных преобразованиях. Критический показатель корреляционной длины ν рассчитывается при линеаризации (8) вблизи критической точки и использования соотношения [8]

$$\left. \frac{\partial K'}{\partial K} \right|_{K=K_c} = \left(\frac{n}{n'} \right)^{\frac{1}{\nu D}},$$

где D – размерность пространства. Из (8) получим

$$\left. \frac{\partial K'}{\partial K} \right|_{K=K_c} = \frac{\partial f_n / \partial K}{\partial f_{n'} / \partial K} \Big|_{K=K_c}, \quad f_n = \left. \frac{\partial M(n, \mu, b)}{\partial \mu} \right|_{\mu=0}.$$

Применяя описанную процедуру к кластерам из одного и двух атомов, получим

$$\frac{1}{\nu} = \frac{D}{\ln 2} \ln \left[\frac{1}{1+b_c} (1-b+(b+b_c)) \left(1 + \frac{b-b_c}{2b} \ln \frac{b+b_c}{b-b_c} \right) \right]. \quad (9)$$

Величина $1/\nu$, вычисленная по формуле (9), при всех q является монотонно возрастающей функцией b , которая равна нулю при $b=b_c$ и достигает максимального значения при $b=1$, то есть для чистого магнетика. Это максимальное значение само по себе является монотонно убывающей функцией q .

Выводы

Таким образом, даже в простейшем варианте кластерного способа построения самосогласованных уравнений для модели Изинга разбавленного магнетика на решетке Бете, а именно при использовании кластеров из одного и двух атомов, получаем хорошее согласование как с известными точными теоретическими результатами, относящимися к этой модели, так и с экспериментальными данными (например, [7]). Можно надеяться, что использование кластеров большего размера, по описанной выше методике, приведет к еще более точным результатам. Расчеты, проведенные с кластером из трех атомов, позволяют высказать следующую гипотезу: выражение (4) для $K_c(b)$ является точным выражением для критической температуры в модели Изинга разбавленного магнетика на решетке Бете.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Займан Дж. Модели беспорядка. Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем. – М.: Мир, 1982. – 591 с.
2. Изюмов Ю.А., Медведев М.В. Теория магнитоупорядоченных кристаллов с примесями. – М.: Наука, 1970. – 271 с.
3. Фольк Р., Головач Ю., Яворский Т. // УФН. – 2003. – Т. 173. – С. 175–192.
4. Доценко В.С. // УФН. – 1995. – Т. 165. – С. 481–496.
5. Шалаев Б.Н. // ФТТ. – 2010. – Т. 52. – Вып. 6. – С. 83–86.
6. Шалаев Б.Н. // ЖЭТФ. – 1977. – Т. 73. – С. 2301–2309.
7. Virgineau R.J. et al. // Phys. Rev. B. – 1983. – V. 27. – P. 6747.
8. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике. – М.: Мир, 1985. – 486 с.
9. Серков Л.А. // ТМФ. – 1992. – Т. 92(1). – С. 92–99.
10. Incekeu J.O., Maritan A., and Stella A.L. // J. Phys. A. – 1982. – V. 15. – P. 291.
11. Сёмкин С.В., Смагин В.П. // ФТТ. – 2014. – Т. 56. – Вып. 6. – С. 1064–1068.

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса,
г. Владивосток, Россия

Поступила в редакцию 03.04.17,
после доработки – 15.08.17.