УДК 531.19

С.В. СЁМКИН, В.П. СМАГИН

ПРИБЛИЖЕНИЕ БЕТЕ ДЛЯ ЧИСТОГО И РАЗБАВЛЕННОГО МАГНЕТИКА КАК УСРЕДНЕНИЕ ПО ЛОКАЛЬНЫМ ОБМЕННЫМ ПОЛЯМ

Предложена интерпретация приближения Бете, основанная на методе усреднения по локальным обменным полям с учетом корреляции соседних спинов. На основе этой интерпретации построен приближенный метод анализа изинговских магнетиков с немагнитным разбавлением. В рассмотренном приближении вычислены перколяционные пороги и зависимости температуры Кюри от концентрации магнитных атомов для решеток с различными координационными числами.

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

1. Введение

В работе [1] нами рассмотрено возможное обобщение метода Бете на случай разбавленного изинговского магнетика. В настоящей работе, являющейся продолжением [1], мы рассматриваем другой вариант этого обобщения. Классическая интерпретация приближения Бете заключается в точном учете обменного взаимодействия некоторого атома решетки с его ближайшими соседями. Взаимодействие с остальными атомами решетки учитывается посредством введения эффективного поля, величина которого определяется из условия равенства средней намагниченности центрального атома и его соседа [2]. Кроме того, приближение Бете для модели Изинга можно интерпретировать как точное решение задачи на решетке Бете [3]. И, как показано в нашей предыдущей работе [1], приближение Бете может быть интерпретировано как ренормгрупповое преобразование фиксированного масштаба, примененное к определенным образом построенным кластерам [1]. Различные интерпретации метода Бете, эквивалентные для чистого (без немагнитных примесей) магнетика, при обобщении их на случай разбавленного магнетика, приводят к различным способам расчета намагниченности и критической температуры как функций концентрации магнитных атомов.

Поэтому в настоящей работе мы предлагаем еще одну возможную интерпретацию метода Бете, построенную с помощью усреднения по функциям распределения обменных полей. Вначале мы построим её для чистого изинговского магнетика, а затем обобщим на магнетик с немагнитными примесями. С помощью этого приближения мы вычислим концентрационные зависимости намагниченности, температуры Кюри и найдем приближенные значения порогов протекания для решеток с различными координационными числами.

2. Приближение Бете как усреднение по локальным обменным полям

В работе [4] предложен метод усреднения по полям взаимодействия, с помощью которого можно находить критические точки и макроскопические параметры в различных системах взаимодействующих частиц. Этот метод в применении к модели Изинга основывается на использовании полученной в [5] формулы

$$\langle \sigma_i \rangle = \langle \mathrm{th} \beta H_i \rangle \tag{1}$$

где $\beta = 1/kT$, k - постоянная Больцмана, T температура

$$H_i = \sum_j J_{ij}\sigma_j + H_{ex},$$

сумма обменного $H_{in} = \sum_j J_{ij}\sigma_j$ и внешнего H_{ex} полей, а $\langle ... \rangle$ - усреднение по ансамблю, которое, в сущности, является усреднением по функции распределения полей H_i.

Обменные интегралы J_{ij} будем считать равными J для ближайших соседей и нулю для остальных пар атомов.

Рассмотрим функцию распределения $W(h)$ для поля обменного взаимодействия $h = H_{in} / J$, действующего на некоторый спин σ_0. Эту функцию всегда можно представить в виде

$$W(h) = \frac{1+m}{2} W_1(h) + \frac{1-m}{2} W_2(h) \tag{2}$$

где $m = \langle \sigma_i \rangle$ - средняя намагниченность, а $W_1(h)$ и $W_2(h)$ условные функции распределения для значений σ_0 равных +1 и -1 соответственно. Среднее значение $\langle h \rangle$, равное qm, с помощью (2), можно представить в виде

$$qm = \frac{1+m}{2} \langle h \rangle_1 + \frac{1-m}{2} \langle h \rangle_2$$

$\langle h \rangle_{1,2}$ - средние значения, вычисленные по функциям $W_{1,2}(h)$. Вводя величины $\mu_{1,2} = \langle h \rangle_{1,2} / q$, запишем предыдущее равенство в виде

$$2m = (1+m)\mu_1 + (1-m)\mu_2 . \tag{3}$$

Величины $(1 \pm \mu_{1,2})/2$ есть вероятности того, что спин, являющийся соседом положительно (отрицательно) ориентированного спина, сам направлен положительно (отрицательно). Вычислим среднее значение V произведения двух соседних спинов σ и σ':

$$V = \langle \sigma\sigma' \rangle = \frac{1+m}{2}\left(\frac{1+\mu_1}{2} - \frac{1-\mu_1}{2} \right) + \frac{1-m}{2}\left(\frac{1-\mu_2}{2} - \frac{1+\mu_2}{2} \right),$$

что можно переписать в виде

$$2V = (1+m)\mu_1 - (1-m)\mu_2 . \tag{4}$$

Из (3) и (4) легко выразить μ_1 и μ_2 через m и V:

$$\mu_1 = \frac{m+V}{1+m}, \qquad \mu_2 = \frac{m-V}{1-m} . \tag{5}$$

Выражение (1), полученное в работе [5], является частным случаем формулы (полученной в той же работе):

$$\langle f\sigma_0 \rangle = \langle f \operatorname{th}(Kh + h_{ex}) \rangle$$

где f - произвольная функция любых спинов, кроме σ_0. Взяв $f = h$, получим

$$\langle h\sigma_0 \rangle = qV = \langle h \operatorname{th}(Kh + h_{ex}) \rangle . \tag{6}$$

Используя функцию распределения (2), из (1) и (6) получим:

$$m = \frac{1+m}{2} \langle \operatorname{th}(Kh + h_{ex}) \rangle_1 + \frac{1-m}{2} \langle \operatorname{th}(Kh + h_{ex}) \rangle_2 , \tag{7}$$

$$qV = \frac{1+m}{2} \langle h \operatorname{th}(Kh + h_{ex}) \rangle_1 + \frac{1-m}{2} \langle h \operatorname{th}(Kh + h_{ex}) \rangle_2 \tag{8}$$

Уравнения (5), (7) и (8) могут использоваться для построения приближенных методов определения величин m и V, если задать тот или иной приближенный вид функций распределения $W_1(h)$ и $W_2(h)$. Оказывается, некоторые известные приближенные методы могут быть получены из системы (7-8) при соответствующем выборе функций $W_1(h)$ и $W_2(h)$. Например, если положить $W_{1,2}(h) = \delta(h - q\mu_{1,2})$, где δ - дельта-функция, получим известный метод среднего поля, т.е. $m = \operatorname{th}(qKm + h_{ex})$, $V = m^2$. Если же в (6) принять $V = m^2$ (то есть, пренебречь корреляцией между спином и его ближайшими соседями), то получим $\mu_1 = \mu_2 = m$. Если, кроме того, положить $W_1(h) = W_2(h) = W(h)$ и в качестве $W(h)$ взять биноминальное распределение с параметром $(1+m)/2$, получим уравнение для определения намагниченности m по методу усреднения по обменным полям [4].

Когда в качестве $W_1(h)$ и $W_2(h)$ берутся биноминальные распределения с параметрами $(1+\mu_1)/2$ и $(1+\mu_2)/2$ соответственно:

$$W_{1,2}(h) = \sum_{i=0}^{q} C_q^i \left(\frac{1+\mu_{1,2}}{2}\right)^i \left(\frac{1-\mu_{1,2}}{2}\right)^{q-i} \delta(h-(2i-q)), \qquad (9)$$

где C_q^i - биноминальные коэффициенты, получается известное приближение Бете. Используя (9) для вычисления средних в (7) и (8) и выразив $\mu_{1,2}$ через m и V с помощью (5), получим систему двух уравнений для определения двух неизвестных величин m и V:

$$m = \sum_{n=0}^{q} F_{q,n}(m,V)\,\mathrm{th}((2n-q)K + h_{ex}) \qquad (10)$$

$$qV = \sum_{n=0}^{q} (2n-q) F_{q,n}(m,V)\,\mathrm{th}((2n-q)K + h_{ex}) \qquad (11)$$

где

$$F_{q,n}(m,V) = C_q^n \left(\frac{1+m}{2}\left(\frac{1+\mu_1}{2}\right)^n \left(\frac{1-\mu_1}{2}\right)^{q-n} + \frac{1-m}{2}\left(\frac{1+\mu_2}{2}\right)^n \left(\frac{1-\mu_2}{2}\right)^{q-n} \right).$$

Если $h_{ex} = 0$, то

$$m = \sum_{n=0}^{\left[\frac{q-1}{2}\right]} (F_{q,q-n}(m,V) - F_{q,n}(m,V))\,\mathrm{th}((q-2n)K) \qquad (12)$$

$$qV = \sum_{n=0}^{\left[\frac{q-1}{2}\right]} (q-2n)(F_{q,q-n}(m,V) - F_{q,n}(m,V))\,\mathrm{th}((q-2n)K) \qquad (13)$$

Легко убедиться аналитически, что намагниченность $m(K,h_{ex})$, получаемая из системы уравнений (10-11) для $q=2$ совпадает с известным решением для одномерной цепочки спинов [3], которая есть частный случай решетки Бете. К сожалению нам не удалось получить аналитическое доказательство равенства решения системы (10)-(11) и намагниченности, рассчитанной в приближении Бете для произвольного q. Однако, численный расчет, проведенный для $q=3$ и $q=4$ показал совпадение решения (10)-(11) с приближением Бете, поэтому, мы предполагаем, что это решение и есть приближение Бете для произвольного q.

Уравнение для температуры Кюри $T_c = 1/K_c$ получим из (12)-(13) следующим образом. Уравнение (12) дифференцируем по m и полагаем $m=0$ в этой производной и в уравнении (13). Можно убедиться, что полученные уравнения совпадают при $V = 1/(q-1)$ и приводят к следующему условию

$$\sum_{n=0}^{\left[\frac{q-1}{2}\right]} A_q^n\,\mathrm{th}((q-2n)K_c) = 1, \qquad (14)$$

где

$$A_q^n = \frac{C_q^n (q-2n)(q^n (q-2)^{q-n} + q^{q-n}(q-2)^n)}{2^q q (q-1)^{q-1}} \qquad (15)$$

В приближении Бете $K_c = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{q}{q-2}\right)$ [2]. Можно показать, что подстановка этого значения K_c в уравнение (14) приводит к тождественному равенству.

3. Разбавленный магнетик

Возможны различные варианты обобщения рассматриваемого приближения на разбавленный магнетик. Ниже мы исследуем один из таких вариантов. Рассмотрим магнетик с разбавлением по связям. Пусть $h=\sum\sigma_i$ сумма по соседям, связанным с σ_0 неразорванными связями, а $h'=\sum\sigma_i$ сумма по всем q соседям σ_0, в том числе и по тем, связи с которыми разорваны. Очевидно, что для чистого, не разбавленного магнетика $h=h'$ для любого атома. Пусть $W_1(h)$ функция распределения по полям h, а $W_2(h,h')$ совместная функция распределения полей h и h'. ($W_1(h)=\int W_2(h,h')dh'$)Тогда

$$m=\left\langle \operatorname{th}(Kh)\right\rangle_{W_1(h)}$$

и

$$qV=\left\langle h'\operatorname{th}(Kh)\right\rangle_{W_2(h,h')}$$

где $V=\left\langle\sigma\sigma_0\right\rangle$ по всем парам соседних спинов. Функции $W_1(h)$ и $W_2(h,h')$ построим следующим образом. Пусть среди q соседей спина σ_0 n направлено в положительную сторону и, соответственно, $q-n$ в отрицательную. Будем полагать, что вероятность этого, как и для чистого магнетика, определяется выражением

$$F_{q,n}(m,V)=C_q^n\left(\frac{1+m}{2}\left(\frac{1+\mu_1}{2}\right)^n\left(\frac{1-\mu_1}{2}\right)^{q-n}+\frac{1-m}{2}\left(\frac{1+\mu_2}{2}\right)^n\left(\frac{1-\mu_2}{2}\right)^{q-n}\right)$$

где μ_1 и μ_2 выражаются через m и V также, как и для чистого магнетика (формула (5)). Влияние разбавления учтем так: будем считать, что среди n «положительных» соседей только i связано с центральным спином σ_0, а среди $q-n$ «отрицательных» j связано с центральным. Полагая, что каждая связь присутствует с вероятностью b и разорвана с вероятностью $1-b$, найдем условную функцию распределения $G_{q,n}(b,h)$ по полям h, при условии, что есть n положительных и $q-n$ отрицательных соседей

$$G_{q,n}(b,h)=\sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{q-n}C_n^iC_{q-n}^jb^{i+j}(1-b)^{q-(i+j)}\delta(h-(i-j)).$$

Таким образом,

$$W_1(h)=\sum_{n=0}^{q}F_{q,n}(m,V)G_{q,n}(b,h),$$

$$W_2(h,h')=\sum_{n=0}^{q}F_{q,n}(m,V)\delta(h'-(2n-q))G_{q,n}(b,h).$$

Окончательно получаем (для магнетика в нулевом внешнем поле):

$$m=\sum_{n=0}^{\left[\frac{q-1}{2}\right]}(F_{q,q-n}(m,V)-F_{q,n}(m,V))\Phi_{q,n}(b,K) \tag{16}$$

$$qV=\sum_{n=0}^{\left[\frac{q-1}{2}\right]}(q-2n)(F_{q,q-n}(m,V)-F_{q,n}(m,V))\Phi_{q,n}(b,K) \tag{17}$$

где

$$\Phi_{q,n}(b,h)=\sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{q-n}C_n^iC_{q-n}^jb^{i+j}(1-b)^{q-(i+j)}\operatorname{th}(K(j-i))$$

Уравнение для температуры Кюри, как функции концентрации b получается из уравнений (16)-(17) тем же способом, как соответствующее уравнение (14) для чистого магнетика получается из (12)-(13):

$$\sum_{n=0}^{\left[\frac{q-1}{2}\right]} A_q^n \Phi_{q,n}(b, K_c) = 1; \qquad (18)$$

и оно переходит в уравнение (14) при $b=1$. Температура Кюри, получаемая из (18), обращается в ноль при некотором $b=b_c$, значение которого зависит от q. Это значение b_c следует интерпретировать как приближенное значение порога протекания для решетки с соответствующим координационным числом, вычисленного в рассматриваемом приближении. В таблице 1 приведены значения b_c, полученные из (18) (столбец 3). В этой же таблице приведены значения b_c вычисленные методом усреднения по обменным полям [4] (столбец 2) и точные значения порогов протекания по узлам и связям для простых решеток (столбец 1). В методе усреднения по обменным полям [4] нет различия между разбавлением по узлам и связям. В отличие от этого метода, в настоящей работе мы рассматриваем магнетик, разбавленный именно по связям. Видно, что значения b_c, найденные предлагаемым в настоящей работе методом, для плоских решеток оказываются ближе к истинным значениям порогов протекания, чем полученные методом усреднения по обменным полям.

Тип решетки (координационное число)	1		2	3
	По узлам	По связям		
Шестиугольная (3)	0,700	0,653	0,557	0,614
Квадратная (4)	0,590	0,500	0,428	0,452
Тетраэдрическая (4)	0,430	0,390	0,428	0,452
Кубическая (6)	0,310	0,250	0,293	0,300
Треугольная (6)	0,500	0,347	0,293	0,300

Таблица 1. Критические значения концентрации, при которых исчезает спонтанная намагниченность (перколяционные пороги) для различных решеток. Столбец 1 – точные значения по узлам и связям [2], столбец 2 – вычисленные в приближении усреднения по обменным полям [4], столбец 3 – вычисленные в приближении, предложенном в настоящей работе.

Зависимости температуры Кюри от концентрации магнитных атомов, вычисленные из (19) для q=3,4 и 6 приведены на рис.1 (кривые 1, 3, 5 соответственно). На этом же рисунке приведены концентрационные зависимости температуры Кюри для тех же координационных чисел, вычисленные методом усреднения по обменным полям [4] (кривые 2, 4, 6). Видно, что все кривые качественно похожи: имеют бесконечную производную при $b=b_c$ и линейно зависят от b при b близких к 1. Из рис. 1 также видно, что значения температур Кюри при $b=1$ (т.е. для чистых магнетиков), найденные из (18), ближе к значениям для простых решеток с соответствующими координационными числами [3], чем те, что получены методом усреднения по обменным полям.

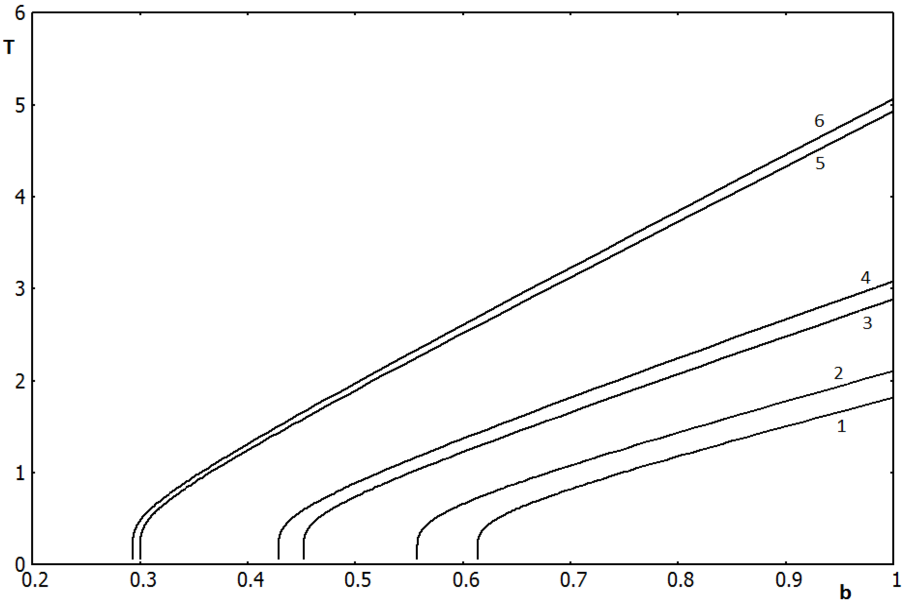

Рис.1 Температуры Кюри в зависимости от концентрации магнитных атомов для решеток с различными координационными числами q, вычисленные методом усреднения по обменным полям (кривые 2, 4, 6 для q=3,4 и 6 соответственно) и методом, рассмотренным в настоящей работе (кривые 1, 3, 5 для q=3,4 и 6 соответственно).

4. Выводы

Таким образом, в результате нашего анализа мы приходим к следующим выводам.

1. Рассмотренное в настоящей работе приближение, примененное к чистому магнетику, включает в себя известные приближения, такие как метод среднего поля, метод усреднения по обменным полям [4] и метод Бете. Кроме того, на его основе можно построить и другие приближения, путем выбора функций распределения обменных полей, отличных от биноминальных.

2. Будучи примененным к разбавленным магнетикам, наше приближение дает новый и более точный результат для перколяционных порогов и концентрационных зависимостей температуры Кюри и спонтанной намагниченности чем метод усреднения по обменным полям и известные обобщения метода Бете на разбавленный магнетик.

3. Структура предлагаемого приближения позволяет строить различные варианты его обобщения на случай разбавленного магнетика. Например, можно учесть различие корреляции спинов связанных и не связанных атомов, что, как мы полагаем, приведет к более точным результатам для модели разбавленного магнетика.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сёмкин С.В., Смагин В.П., Известия вузов.Физика, 2017, т. 60, вып. 10, с. 140 – 145.
2. Займан Дж., Модели беспорядка: Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем, М. Мир 1982, 591 с.
3. Бэкстер Р., Точно решаемые модели в статистической механике, М. Мир 1985, 486 с
4. Белоконь В.И., Семкин С.В., ЖЭТФ, 1992, т. 102, вып 4(10), с 1254 – 1258
5. Callen H. B., Phys. Lett., 1963, 4, pp. 161–175.

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса,
г. Владивосток, Россия
E-mail: Li15@rambler.ru

Поступила в редакцию

Сёмкин Сергей Викторович, к.ф.-м.н., доцент каф. электроники;
Смагин Виктор Павлович, д.ф.-м.н., доцент, профессор каф. электроники.