МОДЕЛЬ ПОТТСА НА РЕШЕТКЕ БЕТЕ С НЕМАГНИТНЫМ РАЗБАВЛЕНИЕМ

К.ф.-м.н., С.В. Сёмкин, ВГУЭС, г. Владивосток,
Д.ф.-м.н., В.П. Смагин, ВГУЭС, г. Владивосток

В настоящей работе мы рассмотрим модель Поттса с немагнитным разбавлением (по узлам) и с произвольным числом состояний на решетке Бете во внешнем поле. Для того чтобы учесть влияние немагнитного разбавления, мы используем метод псевдохаотически распределенных примесей, изложенный в работе [4]. Суть метода заключается в использовании условия равенства нулю корреляции в расположении примесей для соседних узлов решетки в задаче с подвижными немагнитными примесями.

Сформулируем модель следующим образом. Рассмотрим решетку Бете с координационным числом q. Каждому узлу решетки поставим в соответствие величину σ_i которая может принимать s различных значений $1,2,\ldots s$ когда в узле находится магнитный атом. Два соседних магнитных атома взаимодействуют с энергией $-J_p\delta(\sigma_i,\sigma_j)$ где $\delta(\sigma_i,\sigma_j)=\begin{cases}1,\sigma_i=\sigma_j\\0,\sigma_i\neq\sigma_j\end{cases}$

Допустим, что в некоторых узлах решетки могут быть немагнитные атомы («примеси»). Пусть b доля магнитных атомов и, соответственно, $1-b$ – доля примесей в решетке. Пусть переменные σ_i принимают значения 0 когда в узле находится немагнитная примесь. Допустим, что силы взаимодействия действуют только между соседними атомами и есть внешнее поле H, которое действует на состояние 1. Тогда вклад в энергию системы от двух соседних узлов можно представить в следующем виде

$$E_{ij}=-H(\delta(\sigma_i,1)+\delta(\sigma_j,1))-J_p\delta(\sigma_i,\sigma_j)-(U_{11}-J_p)\delta(0,\sigma_j)\delta(\sigma_i,0)-\text{¿}$$
$$-U_{12}\{\delta(\sigma_i,0)(1-\delta(0,\sigma_j))+\delta(0,\sigma_j)(1-\delta(\sigma_i,0))\}-U_{22}(1-\delta(0,\sigma_j))(1-\delta(\sigma_i,0))$$

Здесь U_{11} - энергия взаимодействия двух соседних атомов примеси, U_{12} - энергия взаимодействия атома примеси и магнитного атома и U_{22} - энергия взаимодействия двух магнитных атомов.

Большая статистическая сумма системы имеет следующий вид:

$$Z=\sum\exp\left\{K\sum_{(i,j)}\varphi(\sigma_i,\sigma_j)+h\sum_i\delta(\sigma_i,1)+x\sum_i\delta(\sigma_i,0)\right\} \qquad (1)$$

где $K=\frac{J_p}{kT}$, $h=\frac{H}{kT}$, $x=\frac{\mu}{kT}$ (μ - химический потенциал),

$$\varphi(\sigma_i,\sigma_j)=\delta(\sigma_i,\sigma_j)+(\gamma-1)\delta(0,\sigma_j)\delta(\sigma_i,0) \quad ,$$
$$\gamma=\frac{U}{J_p} \quad , \quad U=U_{11}-2U_{12}+U_{22} \quad .$$

Используя (1), можно, для псевдохаотически распределенных примесей, вычислить вероятность p_1 того, что в узле решетки находится магнитный атом в состоянии 1 [4]:

$$p_1=b^2\frac{e^{K+2h}+te^h+(n-1)e^h y^{q-1}}{e^{K+2h}+(n-1)y^{q-1}(2e^h+y^{q-1}(e^K+n-2))} \tag{2}$$

где

$$t=\frac{1-b}{b}\frac{e^{K+2h}+(n-1)y^{q-1}(2e^h+y^{q-1}(e^K+n-2))}{e^h+(n-1)y^{q-1}} \tag{3}$$

и

$$y=\frac{t+e^h+(e^K+(n-2))y^{q-1}}{t+e^{K+h}+(n-1)y^{q-1}} \quad . \tag{4}$$

В частном случае $h=0$ (при отсутствии внешнего поля) система (2-4) была проанализирована в работе [4]. В этой работе было в частности показано, что уравнения (2-4) описывают фазовый переход (первого рода если $s>2$ и второго рода при $s=2$) при условии, что $b>1/(q-1)$, то есть при концентрации магнитных атомов, превышающей порог протекания решетки Бете [5]. Температура $T_0(b)$, при которой происходит этот фазовый переход, определяется формулой [4]

$$T_0(b)=\left(\ln\frac{s-1+(q-1)b}{(q-1)b-1}\right)^{-1} \tag{5}$$

Другой частный случай получим взяв $b=1$ (модель Поттса без разбавления). Система (2-4) сводится в этом случае к:

$$p_1=\frac{e^h}{e^h+(s-1)y^q} \quad , \qquad y=\frac{e^h+(e^K+s-2)y^{q-1}}{e^{K+h}+(s-1)y^{q-1}} \quad . \tag{6}$$

Этот результат совпадает с результатом, полученным в работе [2].

Перейдем теперь к рассмотрению влияния немагнитного разбавления на фазовые переходы в модели Поттса в присутствии внешнего поля. Линия фазовых переходов первого рода будет теперь зависеть от концентрации магнитных атомов $h = h_c(K, b)$. Для нахождения этой зависимости запишем уравнение (4) (используя (3)) в виде:

$$(a_2 e^{2h} + a_1 e^h + a_0) e^K = b_2 e^{2h} + b_1 e^h + b_0 \quad , \qquad (7)$$

где

$$a_2 = -(1+\beta) y + \beta \quad , \quad a_1 = -(s-1) y^q + y^{q-1}$$
$$a_0 = -\beta (s-1) y^{2q-1} + (1+\beta)(s-1) y^{2q-2} \quad ,$$
$$b_2 = -1 \quad , \quad b_1 = -(2\beta(s-1) + 2s - 3) y^{q-1} + (1+2\beta)(s-1) y^q \quad ,$$
$$b_0 = -(1+\beta)(s-1)(s-2) y^{2q-2} + ((s-1)^2 + \beta(s-1)(s-2)) y^{2q-1} \quad ,$$
$$\beta = (1-b)/b \quad .$$

Поскольку уравнение (4) является рекуррентным уравнением [4], его корень должен быть устойчивым в смысле рекуррентной процедуры [1], что приводит к условию $F'(y) \le 1$, где $F(y)$ - правая часть уравнения (4). Следовательно, для нахождения линии фазовых переходов $h = h_c(K, b)$ нужно решить систему из уравнения (7) и условия равенства производных по y от правой и левой частей (7). Для нахождения конечной точки этой линии, к предыдущей системе нужно добавить третье уравнение – равенство вторых производных по y от правой и левой частей (7).

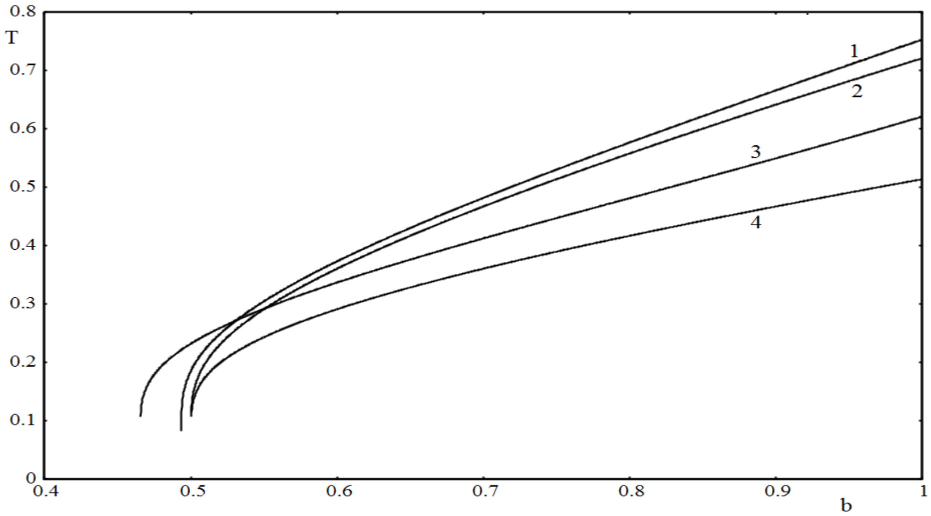

Рис. 1 Зависимость температуры начальной $T_0(b)$ (кривые 2 и 4) и конечной $T_e(b)$ (кривые 1 и 3) точек линии фазовых переходов от концентрации магнитных атомов при $q=3$. По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов b , по вертикальной – температура. Кривые 1 и 2 построены для $s=3$, кривые 3 и 4 – для $s=6$.

На рис. 1 приведены концентрационные зависимости температуры начальной точки линии фазовых переходов $T_0(b)$, вычисленные по формуле (5), и конечной ее точки $T_e(b) = 1/K_e(b)$. Кривые построены для $q=3$ и значений s равных 3 и 6. Функции $T_0(b)$ (кривые 2 и 4 на рис.1) начинаются, как это и следует из формулы (5), при значении b, равном $1/(q-1)$, что соответствует перколяционному порогу решетки Бете [5] и монотонно растут с ростом b до значения, соответствующего неразбавленному магнетику Поттса [2]. Однако, расчет $T_e(b)$ (кривые 1 и 3 на рис. 1) показывает, что эти функции начинаются при некоторых (зависящих от s) значениях b, меньших, чем $1/(q-1)$. Например, при $q=3$ и $s=3$ кривая $T_e(b)$ начинается от точки $b\approx 0{,}4934$ при пороге протекания $b_c=0{,}5$ (рис.1). Мы полагаем, что такое поведение $T_e(b)$ связано со свойствами псевдохаотического распределения немагнитных примесей. Условие псевдохаотического распределения (равенство нулю корреляции в расположении примесей для соседних узлов решетки) оставляет атомам примеси возможность перемещаться по узлам решетки. В следствие этого, магнитные атомы могут образовать перколяционный кластер даже при концентрациях, меньших порога протекания.

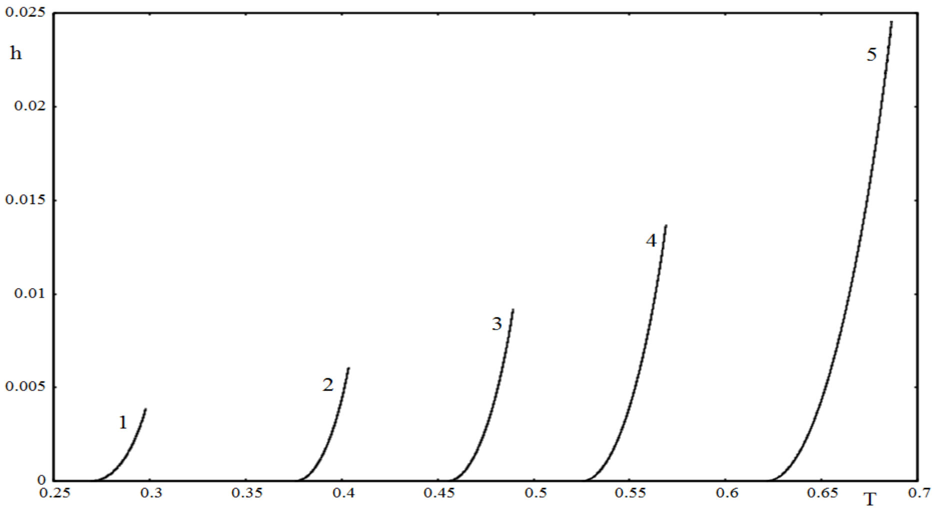

Рис. 2 Линии фазовых переходов для $q=3$ и $s=4$ при различных концентрациях магнитных атомов. По горизонтальной оси – температура T, по вертикальной – h. Кривые 1 – 5 соответствуют значениям концентрации магнитных атомов 0,55, 0,65, 0,75, 0,85 и 1.

Рассмотрим теперь влияние немагнитного разбавления на всю линию фазовых переходов в модели Поттса на решетке Бете. Анализируя (7) и условие равенства производных по y от обеих частей этого уравнения, можно показать, что зависимость $h=h_c(T,b)$ обладает следующими свойствами. Производная $\partial h_c/\partial T$ равна нулю при $T=T_0$ для всех $b>1/(q-1)$ и больше нуля при $T_0<T\leq T_e$. Эти особенности зависимости $h=h_c(T,b)$ проиллюстрированы на рис. 3.

Литература

1. Р. Бэкстер, Точно решаемые модели в статистической механике, Мир, Москва (1985), 486 с..
2. F.Y. Wu, Rev. Mod. Phys., T.54(1), 235 (1982)
7. С.В. Сёмкин, В.П. Смагин, ФТТ, 57(5), 926 (2015)
8. С.В. Сёмкин, В.П. Смагин, ЖЭТФ, 148, 4(10), 729(2015)
9. Дж. Займан, Модели беспорядка. Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем, Мир, Москва (1982), 592 с.