

МОДЕЛЬ ПОТТСА НА РЕШЕТКЕ БЕТЕ С НЕМАГНИТНЫМИ ПРИМЕСЯМИ

С. В. Сёмкин[*]*, В. П. Смагин*

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса (ВГУЭС)
690600, Владивосток, Россия

Поступила в редакцию 17 апреля 2015 г.

Получено решение для модели Поттса на решетке Бете с подвижными немагнитными примесями. Предложен метод построения «псевдохаотического» распределения примесей с помощью обращения в нуль корреляции в расположении атомов примеси для ближайших узлов. Для псевдохаотического распределения примесей найдена температура фазового перехода, намагниченность и величина скачка спонтанной намагниченности при температуре фазового перехода.

DOI: 10.7868/S0044451015090000

1. ВВЕДЕНИЕ

Модель Поттса [1] формулируется следующим образом. Рассмотрим некоторую регулярную решетку. Каждому узлу поставим в соответствие величину σ_i («спин»), которая может принимать n различных значений, скажем $1, 2, \ldots, n$. Два соседних спина σ_i и σ_j взаимодействуют с энергией $-J_p\delta(\sigma_i, \sigma_j)$, где

$$\delta(\sigma_i, \sigma_j) = \begin{cases} 1, & \sigma_i = \sigma_j, \\ 0, & \sigma_i \neq \sigma_j. \end{cases}$$

Пусть есть внешнее поле H, которое действует на состояние 1. Тогда полная энергия равна

$$E = -J_p\Sigma_{(i,j)}\delta(\sigma_i, \sigma_j) - H\Sigma_i\delta(\sigma_i, 1).$$

Допустим, что в некоторых узлах решетки вместо спинов могут быть немагнитные атомы («примеси»). Пусть b — доля спинов и, соответственно, $1 - b$ — доля примесей в решетке.

Можно рассматривать два типа примесей — «вмороженные» неподвижные примеси случайно и без корреляции разбросанные по узлам решетки и «подвижные» примеси — способные перемещаться по узлам и находящиеся в термодинамическом равновесии с матрицей. Наибольший интерес представляет модель с вмороженными примесями, поскольку подавляющее большинство магнетиков с примесями относится именно к этому типу. Однако точное решение задачи с вмороженными примесями оказывается невозможным даже для простых решеток. Но оказывается, как будет показано ниже, можно получить точное решение задачи с подвижными примесями на решетке Бете. Это решение, интересное, возможно, и само по себе, позволяет подойти и к анализу поведения системы с вмороженными примесями. Для подвижных примесей можно рассчитать корреляцию (ковариацию) в расположении примесей для соседних узлов решетки. Накладывая условие равенства нулю этой корреляции получим распределение примесей, которое мы назвали «псевдохаотическим». И хотя такое распределение примесей по узлам решетки не является совершенно случайным, перколяционный порог, например, при псевдохаотическом распределении на решетке Бете совпадает с порогом для вмороженных примесей. Мы полагаем, что поведение системы с псевдохаотическими подвижными примесями является хорошим приближением для магнетика с вмороженными примесями.

Итак, рассмотрим модель Поттса с подвижными примесями. Пусть переменные σ_i могут, кроме значений $1, 2, \ldots, n$, принимать значения нуль, когда в узле находится немагнитная примесь. Допустим, что силы взаимодействия действуют только между соседними атомами. Тогда вклад в энергию системы от двух соседних узлов можно представить в следующем виде:

[*] E-mail: Li15@rambler.ru

$$E_{ij} = -J_p\delta(\sigma_i,\sigma_j) - (U_{11}-J_p)\delta(0,\sigma_j)\delta(\sigma_i,0) - \\ -U_{12}\left\{\delta(\sigma_i,0)\left(1-\delta(0,\sigma_j)\right)+\delta(0,\sigma_j)\left(1-\delta(\sigma_i,0)\right)\right\} - \\ - U_{22}\left(1-\delta(0,\sigma_j)\right)\left(1-\delta(\sigma_i,0)\right).$$

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:

$$Z = \Sigma \exp\left\{K\Sigma_{(i,j)}\varphi(\sigma_i,\sigma_j) + \right. \\ \left. + h\Sigma_i\delta(\sigma_i,1) + x\Sigma_i\delta(\sigma_i,0)\right\}, \quad (1)$$

где $K = J_p/kT$, $h = H/kT$, $x = \mu/kT$ (μ — химический потенциал),

$$\varphi(\sigma_i,\sigma_j) = \delta(\sigma_i,\sigma_j) + (\gamma-1)\delta(0,\sigma_j)\delta(\sigma_i,0),$$

$$\gamma = \frac{U}{J_p}, \quad U = U_{11} - 2U_{12} + U_{22}.$$

2. РЕШЕНИЕ ДЛЯ РЕШЕТКИ БЕТЕ

Решетку Бете построим следующим образом. Рассмотрим два соседних узла со значениями спиновых переменных σ_1 и σ_2. Присоединим к каждому узлу $q-1$ внешних соседей (узлы первой оболочки). К каждому узлу первой оболочки снова присоединим $q-1$ узлов второй оболочки и продолжим этот процесс N раз. В результате получим так называемое дерево Кейли; решетка Бете — это внутренняя (далекая от граничных узлов) часть дерева Кейли при $N \to \infty$. Для вычисления статистической суммы (1) на решетке Бете воспользуемся приемом, аналогичным использованному в [1] для модели Изинга. Большая статистическая сумма (1) является суммой по всем возможным спиновым конфигурациям $\{\sigma\}$:

$$Z = \Sigma_{\{\sigma\}}P(\sigma);$$

$$P(\sigma) = \Sigma \exp\left\{K\Sigma_{(i,j)}\varphi(\sigma_i,\sigma_j) + \right. \\ \left. + h\Sigma_i\delta(\sigma_i,1) + x\Sigma_i\delta(\sigma_i,0)\right\}.$$

Выделяя в этом выражении, члены содержащие σ_1 и σ_2, запишем его в следующем виде:

$$P(\sigma) = e^{\psi(\sigma_1,\sigma_2)}\Pi_{j=1}^{q-1}Q_N\left(\sigma_1|s_1^{(j)}\right)\Pi_{l=1}^{q-1}Q_N\left(\sigma_2|s_2^{(l)}\right),$$

где

$$\psi(\sigma_1,\sigma_2) = K\varphi(\sigma_1,\sigma_2) + \\ + h\left(\delta(\sigma_1,1)+\delta(\sigma_2,1)\right) + x\left(\delta(\sigma_1,0)+\delta(\sigma_2,0)\right),$$

$s_1^{(j)}$ и $s_2^{(l)}$ обозначают совокупности спинов на j-й и l-й ветвях соответственно узлов 1 и 2.

Обозначив $G_N(\sigma) = \Sigma_{\{s\}}Q_N(\sigma|s)$ запишем статистическую сумму в следующем виде:

$$Z_N = \Sigma_{\sigma_1,\sigma_2}e^{\psi(\sigma_1,\sigma_2)}G_N^{q-1}(\sigma_1)G_N^{q-1}(\sigma_2). \quad (2)$$

С помощью (2) можно теперь найти вероятность p_i того, что спин σ_1 примет значение i (вероятности соответствующих значений переменной σ_2 будут, в силу симметрии, точно такими же):

$$p_i = \frac{1}{Z_N}\Sigma_{\sigma_1,\sigma_2}\frac{1}{2}\left(\delta(\sigma_1,i)+\delta(\sigma_2,i)\right) \times \\ \times e^{\psi(\sigma_1,\sigma_2)}G_N^{q-1}(\sigma_1)G_N^{q-1}(\sigma_2). \quad (3)$$

В соответствии со сказанным выше, концентрация магнитных атомов в решетке $b = 1-p_0$. Ковариацию расположения примесей в узлах 1 и 2 вычислим так:

$$g_{12} = \frac{1}{Z}\Sigma_{\sigma_1,\sigma_2}\delta(\sigma_1,0)\delta(\sigma_2,0)e^{\psi(\sigma_1,\sigma_2)} \times \\ \times G_N^{q-1}(\sigma_1)G_N^{q-1}(\sigma_2) - p_0^2. \quad (4)$$

Для функций $G_N(\sigma)$ можно построить рекуррентные соотношения, представив $Q_N(\sigma|s)$ в виде

$$Q_N(\sigma|s) = \exp\left\{K\varphi(\sigma,s_1)+h\delta(s_1,1)+x\delta(s_1,0)\right\} \times \\ \times \Pi_{j=1}^{q-1}Q_{N-1}(s_1|t^{(j)}),$$

где s_1 — один из спинов первой оболочки, а $t^{(j)}$ — совокупность спинов одной из отходящих от него ветвей. Суммируя это выражение по совокупности спинов s, получим

$$G_N(\sigma) = \Sigma_{s_1}\exp\left\{K\varphi(\sigma,s_1) + \right. \\ \left. + h\delta(s_1,1) + x\delta(s_1,0)\right\}G_{N-1}^{q-1}(s_1). \quad (5)$$

Поскольку в дальнейшем мы собираемся перейти к термодинамическому пределу ($N \to \infty$), вместо функций $G_N(\sigma)$ введем отношения $y_{i,N} = G_N(i)/G_N(1)$. Из формулы (5) можно получить рекуррентные соотношения, выражающие $y_{i,k}$ через $y_{i,k-1}$ (очевидно, что $y_{i,0} = 1$), а из (3) и (4) получим выражения для p_i и g_{12} через $y_{i,N}$.

Будем искать решение, в котором все p_i для $i > 1$ равны между собой; $y_{i,k}$ при $i > 1$ обозначим просто y_k и, кроме того, введем обозначение $t_k = e^x y_{0,k}^{q-1}$. Тогда из (3) и (4) получим

$$p_1 = \frac{1}{\tilde{Z}_N}\left(e^{K+2h} + t_N e^h + (n-1)e^h y_N^{q-1}\right), \quad (6)$$

$$1-b = \frac{1}{\tilde{Z}_N}\left(t_N^2 e^{K\gamma} + t_N e^h + (n-1)t_N y_N^{q-1}\right), \quad (7)$$

$$g_{12} = \frac{t_N^2 e^{K\gamma}}{\tilde{Z}_N} - (1-b)^2, \qquad (8)$$

где $\tilde{Z}_N = Z_N / G_N^{2(q-1)}(1)$,

$$\tilde{Z}_N = t_N^2 e^{K\gamma} + e^{K+2h} + 2t_N e^h + \\ +(n-1)y_N^{q-1}\left(2t_N + 2e^h + e^K y_N^{q-1} + (n-2)y_N^{q-1}\right). \qquad (9)$$

Из (5) получим рекуррентные соотношения

$$y_{0,N} = \frac{e^{\gamma K} t_{N-1} + e^h + (n-1)y_{N-1}^{q-1}}{t_{N-1} + e^{K+h} + (n-1)y_{N-1}^{q-1}}, \qquad (10)$$

$$y_N = \frac{t_{N-1} + e^h + (e^K + (n-2))y_{N-1}^{q-1}}{t_{N-1} + e^{K+h} + (n-1)y_{N-1}^{q-1}}. \qquad (11)$$

Рассмотрим выражения (6)–(11) в термодинамическом пределе ($N \to \infty$). В этом пределе $y_{0,N} \to y_0$, $y_N \to y$, $t_N \to t$ и $Z_N \to Z$. Теперь, в соответствии со сказанным выше, возьмем такую величину γ, чтобы g_{12} обратилось бы в нуль. Соответствующую величину γ будем обозначать γ_0. Тогда из (7) и (8) получим

$$1 - b = \frac{te^{K\gamma_0}}{te^{K\gamma_0} + e^h + (n-1)y^{q-1}}.$$

Отсюда

$$e^{K\gamma_0} = \frac{1-b}{bt}\left(e^h + (n-1)y^{q-1}\right). \qquad (12)$$

Подставив это выражение в (8), получим

$$t = \frac{1-b}{b} \times \\ \times \frac{e^{K+2h} + (n-1)y^{q-1}\left(2e^h + y^{q-1}(e^K + n - 2)\right)}{e^h + (n-1)y^{q-1}}, \qquad (13)$$

из (6)

$$p_1 = \frac{1}{\tilde{Z}_0}\left(e^{K+2h} + te^h + (n-1)e^h y^{q-1}\right); \qquad (14)$$

$$\tilde{Z}_0 = t\frac{1+b}{b}\left(e^h + (n-1)y^{q-1}\right) + \\ + \left[e^{K+2h} + (n-1)y^{q-1}\left(2e^h + y^{q-1}(e^K + n - 2)\right)\right]$$

или

$$p_1 = b^2 \times \\ \times \frac{e^{K+2h} + te^h + (n-1)e^h y^{q-1}}{e^{K+2h} + (n-1)y^{q-1}\left(2e^h + y^{q-1}(e^K + n - 2)\right)}. \qquad (15)$$

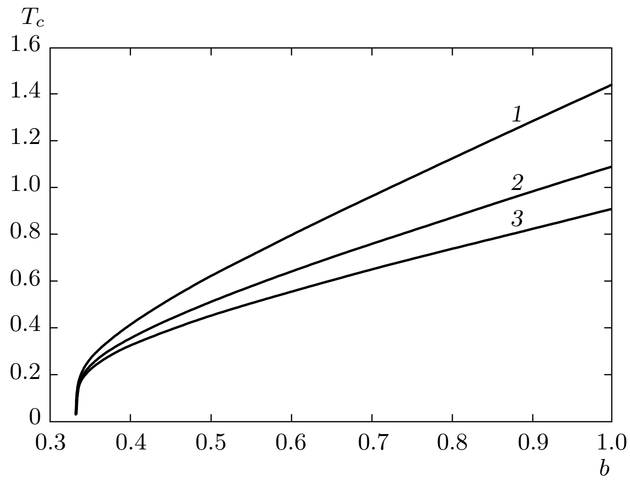

Рис. 1. Зависимость температуры Кюри от концентрации магнитных атомов при $q = 4$. Кривая *1* — $n = 2$ (модель Изинга), кривая *2* — $n = 3$ и кривая *3* — $n = 4$

Кроме того, из рекуррентного соотношения (11) получим при $N \to \infty$

$$y = \frac{t + e^h + \left(e^K + (n-2)\right)y^{q-1}}{t + e^{K+h} + (n-1)y^{q-1}}. \qquad (16)$$

Формулы (13)–(16) представляют собой решение задачи о нахождении величин, характеризующих состояние поттсовского магнетика в зависимости от температуры, внешнего поля и концентрации атомов примеси в случае псевдохаотического распределения последних. Кроме того, эти формулы позволяют найти температуру фазового перехода $K_c(b) = J_p/kT_c(b)$ в зависимости от концентрации магнитных атомов.

Анализ выражений (13)–(16) показывает, что при $K < K_c(b)$ и $h = 0$ единственным устойчивым решением (16) является $y = 1$ и $p_1 = b/n$ (из (15)). При $K = K_c(b)$ происходит (при $n > 2$) скачкообразное увеличение вероятности p_1 (фазовый переход первого рода). Найдем из выражений (13) и (16) температуру фазового перехода. При $K = K_c$ производная по y правой части (16) должна быть равна единице при $y = 1$ (если эта производная больше единицы, решение $y = 1$ становится неустойчивым). Взяв производную (16) (используя (13) для определения $t(y)$), получим

$$K_c(b) = \ln\frac{n - 1 + (q-1)b}{(q-1)b - 1}. \qquad (17)$$

При $b = 1$, т.е. для модели Поттса без примесей, (17) совпадает с критической температурой модели Поттса на решетке Бете, приведенной в работе [2]. При $n = 2$ (в этом случае модель Поттса эквивалентна модели Изинга) из (17) получается тот же результат, который приведен в работе [3]. На рис. 1 приведены графики критической температуры $T_c(b) = 1/K_c(b)$ для $q = 4$ и $n = 2, 3, 4$ (соответственно кривые *1*, *2* и *3*). Видно, что $T_c(b)$ имеют бесконечную производную при $b = b_c$ и практически линейно зависят от b вблизи $b = 1$, что соответствует известным свойствам зависимости критической температуры от концентрации магнитных атомов [4]. Кроме того, из (17) видно, что при произвольном n критическая температура обращается в нуль при концентрации, совпадающей с порогом протекания решетки Бете ($b_c = 1/(q-1)$), в этом смысле псевдохаотическое распределение примесей ведет себя как истинно хаотическое [5, 6]. Различие между этими распределениями можно проиллюстрировать, вычислив вероятность того, что взятый наугад магнитный атом принадлежит бесконечному кластеру магнитных атомов. Если определить намагниченность для модели Поттса с n состояниями аналогично [7]

$$M = \frac{np_1 - b}{b(n-1)},$$

то нетрудно показать, что вероятность для магнитного атома принадлежать бесконечному кластеру и есть намагниченность M при $T = 0$ и $h = 0$. Переходя в (13), (15) и (16) к пределу $K \to \infty$, получим

$$M_0(y) = \frac{1}{b(y)(n-1)} \times$$
$$\times \left(\left(\frac{1-b(y)}{1+(n-1)y^{q-1}} + \frac{b(y)}{1+(n-1)y^{2(q-1)}} \right) n - b(y) \right),$$
$$b(y) = \left(1 + \frac{1+(n-1)y^{q-1}}{1+(n-1)y^{2(q-1)}} \Sigma_{i=1}^{q-2} y^i \right)^{-1},$$
$$0 < y < 1.$$

Эти выражения определяют в параметрическом виде зависимость $M_0(b)$. На рис. 2 приведены графики $M_0(b)$ для $n = 2$ (кривая *2*) и $n = 4$ (кривая *3*). На этом же рисунке приведена функция $P(b)$ (кривая *1*), определяющая вероятность для магнитного атома принадлежать бесконечному кластеру при хаотическом распределении атомов примеси по узлам решетки Бете. (Эта вероятность находится по формулам [4] $P(b) = 1 - s^q$, $\Sigma_{i=0}^{q-2} s^i = 1/b$.) Видно, что хотя функции $M_0(b)$ и $P(b)$ достаточно близки, при любом n эти функции обращаются в нуль при одном и том же значении $b_c = 1/(q-1)$, что соответствует перколяционному порогу для решетки Бете, между ними есть, все же, некоторое различие.

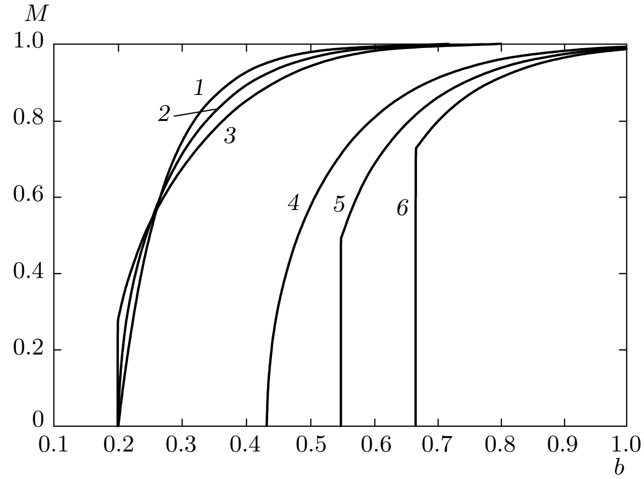

Рис. 2. Концентрационная зависимость спонтанной намагниченности. По горизонтальной оси — концентрация магнитных атомов b, по вертикальной — намагниченность. Кривая *1* — вероятность для магнитного атома принадлежать бесконечному кластеру в решетке Бете со случайным разбавлением, кривые *2* и *3* — намагниченность при нулевой температуре в модели Поттса с псевдохаотическим распределением соответственно при $n = 2$ и $n = 3$. Кривые *4*, *5* и *6* — намагниченность при $K = 1$ соответственно для $n = 2$, $n = 3$ и $n = 4$

На рис. 2 показана также и намагниченность при конечной температуре ($K = 1$) как функция концентрации магнитных атомов для $n = 2$ (кривая *4*), $n = 3$ (кривая *5*) и $n = 4$ (кривая *6*). Видно, что при $n = 2$ (модель Изинга) фазовый переход является переходом второго рода, а при $n > 2$ — первого рода. Как следует из формулы (17), значение концентрации $b_0(K)$, при котором возникает спонтанная намагниченность при конечном K, определяется выражением

$$b_0(K) = b_c \frac{1+(n-1)e^{-K}}{1-e^{-K}}. \tag{18}$$

Видно, что $b_0(K)$ растет с ростом n и при любом n больше b_c. При $K \to \infty$, $b_0(K) \to b_c$ для любого $n > 1$.

На рис. 3 показана зависимость величины скачка намагниченности M при фазовом переходе в зависимости от концентрации магнитных атомов для различных координационных чисел решетки q и числа спиновых состояний n. Следует отметить, что температура фазового перехода (17) сама по себе зависит от концентрации магнитных атомов b, поэтому для каждой кривой на рис. 3 ее различные точки соответствуют разным

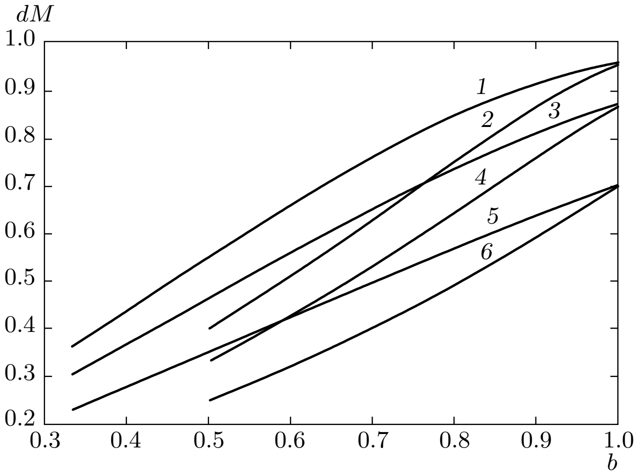

Рис. 3. Зависимость от концентрации скачка намагниченности при фазовом переходе в модели Поттса с псевдохаотическими примесями. По горизонтальной оси — концентрация магнитных атомов b, по вертикальной — величина скачка намагниченности dM. Кривые *1*, *3* и *5* построены для координационного числа $q = 4$, а кривые *2*, *4* и *6* — для $q = 3$. Число состояний $n = 6$ для кривых *1* и *2*, $n = 4$ для кривых *3* и *4* и $n = 3$ для кривых *5* и *6*

температурам. Видно, что величина скачка для всех значений параметров монотонно убывает с уменьшением концентрации b до некоторого ненулевого значения при $b = b_c$. При фиксированном b величина скачка растет с ростом n при постоянном q и с ростом q при постоянном n. Зависимость величины скачка от координационного числа решетки q (при одинаковом n) слабо выражена для чистого магнетика ($b = 1$), но становится более заметной при $b < 1$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ по заданию № 2014/292 на выполнение государственных работ в сфере научной деятельности в рамках базовой части государственного задания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва (1985).

2. F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).

3. С. В. Сёмкин, В. П. Смагин, ФТТ **56**, 1064 (2014).

4. T. Kaneyoshi, Physica A **218**, 46 (1995).

5. Дж. Займан, *Модели беспорядка. Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем*, Мир, Москва (1982).

6. С. В. Сёмкин, В. П. Смагин, Изв. ВУЗов, сер. физ. **57**, 54 (2014).

7. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Азнаурова, ФТТ **50**, 703 (2008).