

УДК 531.19

С.В. Сёмкин¹

В.П. Смагин²

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса
Владивосток. Россия

Модель Гейзенберга с тремя состояниями на решетке Бете

Модели Изинга, Поттса, Гейзенберга и другие решеточные модели применяются для теоретического описания многих объектов и явлений в физике конденсированных сред и ядерной физике. Как правило, в теоретических исследованиях критического поведения магнетиков используется модель Изинга – модель с максимально простым гамильтонианом. Это объясняется гипотезой универсальности, согласно которой такое критическое поведение определяется только симметрией гамильтониана системы и не зависит от его деталей. Другими словами, одно и то же критическое поведение (например, критические показатели) характерно не для каждого конкретного гамильтониана, а относится к целому классу гамильтонианов с одинаковой симметрией. Однако гипотеза универсальности сама по себе не содержит способов определения того, к какому классу универсальности принадлежит каждый конкретный гамильтониан. Поэтому не лишено смысла и рассмотрение более сложных решеточных моделей, таких, как модель Гейзенберга. В статье рассмотрена модель Гейзенберга с тремя состояниями на решетке Бете. Задача заключается в нахождении равновесных вероятностей этих состояний при заданной температуре и внешнем поле. Эта задача может быть решена точно с помощью составления системы рекуррентных уравнений. Однако наша главная цель заключалась даже не в решении самой задачи для модели Гейзенберга. В отношении модели Изинга известно, что ее решение на решетке Бете может быть интерпретировано как ренормгрупповое преобразование фиксированного масштаба в постоянном эффективном поле. В настоящей статье мы исследовали возможность аналогичной интерпретации для модели Гейзенберга. Оказалось, что она невозможна для исходной модели Гейзенберга, но возможна для модели с более общим видом гамильтониана.

Ключевые слова и словосочетания: фазовые переходы, модель Гейзенберга, решетка Бете.

¹ Сёмкин Сергей Викторович – канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры информационных технологий и систем, e-mail: Li15@rambler.ru

² Смагин Виктор Павлович – д-р физ.-мат. наук, зав. лабораторией фундаментальной и прикладной физики, e-mail: Li15@rambler.ru

S.V. Semkin

V.P. Smagin

Vladivostok State University of Economics and Service
Vladivostok, Russia

Three-state Heisenberg model on the Bethe lattice

The Ising, Potts, Heisenberg, and other lattice models are used for the theoretical description of many objects and phenomena in condensed matter physics and nuclear physics. As a rule, in theoretical studies of the critical behavior of magnetic materials, the Ising model is used — a model with the simplest Hamiltonian. This is explained by the universality hypothesis, according to which this critical behavior is determined only by the symmetry of the Hamiltonian of the system and does not depend on its details. That is, the same critical behavior (for example, critical exponents) is not characteristic of each specific Hamiltonian, but refers to a whole class of Hamiltonians with the same symmetry. However, the universality hypothesis does not in itself contain any means of determining to which universality class each particular Hamiltonian belongs. Therefore, consideration of more complex lattice models, such as the Heisenberg model, is not without meaning.

In this paper, we considered the Heisenberg model with three states on the Bethe lattice. The task is to find the equilibrium probabilities of these states at a given temperature and external field. This problem can be solved exactly by creating a system of recurrent equations, which is done in this paper. However, our main goal was not even to solve the problem itself for the Heisenberg model. Regarding the Ising model, it is known that its solution on the Bethe lattice can be interpreted as a fixed-scale renormalization group transformation in a constant effective field. In this paper, we investigated the possibility of a similar interpretation for the Heisenberg model. It turned out that it is impossible for the original Heisenberg model, but it turns out to be possible for a model with a more general form of the Hamiltonian.

Keywords: phase transitions, Heisenberg model, Bethe lattice.

В работе [1] показано, что известное приближение Бете для модели Изинга может быть получено с помощью сопоставления кластеров различного размера, находящихся в одном и том же эффективном поле. Для чистого магнетика приближение Бете можно получить как решение задачи Изинга на решетке (дерево) Бете [2] или как соотношение, связывающее намагниченность центрального атома и атома первой координационной сферы [3]. Однако на приближение Бете можно смотреть и как на один из самосогласованных методов, общая схема построения которых представлена в работах [4–6]. Эти методы основаны на усреднении по локальным обменным полям. Методика усреднения по локальным полям применяется и для анализа поведения сплава двух типов магнитных атомов [7], и для анализа систем, в которых обменный интеграл является непрерывной функцией расстояния между атомами [8; 9]. В работе [10] один из вариантов этой методики уже применялся для анализа равновесных состояний сплава магнитных и немагнитных атомов в отсутствии внешнего магнитного поля. Такой способ получения приближения Бете можно назвать «ренормгрупповым» в том смысле, что вблизи критической точки переход от кластера с одним узлом к кластеру с двумя узлами можно рассматривать как ренормгрупповое преобразование фиксированного масштаба [11]. В настоящей работе мы покажем, что такой

способ возможен и для более сложной модели магнетика, а именно: модели Гейзенберга с тремя состояниями.

Сформулируем эту модель следующим образом. Пусть в каждом узле некоторой регулярной решетки с координационным числом q находятся «спины» σ_i (i – номер узла), каждый из которых может принимать 3 различных значения $-1, 0, +1$. Гамильтониан модели Гейзенберга можно представить в следующем виде:

$$H(\{\sigma\}) = - \sum_{(i,j)} J \sigma_i \sigma_j - \sum_i H_e \sigma_i, \quad (1)$$

где J – константа обменного взаимодействия,

H_e – внешнее поле.

Первая сумма в выражении (1) – это сумма по всем парам соседних узлов, вторая – по всем узлам. Будем полагать, что все узлы решетки эквивалентны в термодинамическом пределе. Для нахождения равновесных средних величин в системе с гамильтонианом (1) необходимо вычислить статистическую сумму:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp \left(K \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j + \sum_i h \sigma_i \right), \quad (2)$$

$$K = \frac{J}{kT}, \quad h = \frac{H_e}{kT}$$

Эта задача имеет точное решение для так называемой решетки Бете. Решетка Бете строится следующим образом [2]. Центральный узел (узел 0 на рис. 1) соединяется с q другими узлами, каждый из которых, в свою очередь, с $q - 1$ новыми. Прделав эту процедуру N раз, получим так называемое дерево Кэйли. Решеткой Бете называется внутренняя (далекая от граничных точек) часть этого графа при $N \rightarrow \infty$. Рассмотрим вычисление статистической суммы (2) на решетке Бете методом, описанным в [2]:

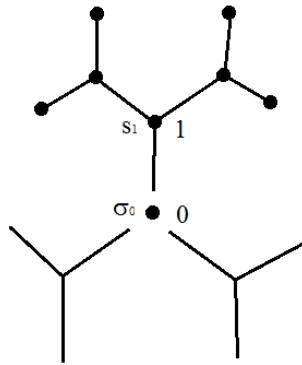


Рис. 1. Узлы и связи в решетке Бете при $q = 3$

Статистическую сумму (2) представим в виде $Z = \sum V(\sigma)$,

где

$$V(\sigma) = \exp \left(K \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j + \sum_i h \sigma_i \right)$$

Вероятность P_i того, что центральный спин σ_0 принимает значение $m_i = -1, 0, +1$:

$$P_i = \frac{\sum \sigma(\sigma_0, m_i) V(\sigma)}{Z}$$

Преобразуем $V(\sigma)$ с учетом того, что точка 0 (рис. 1) является корневой точкой q независимых подграфов:

$$V(\sigma) = \exp(h\sigma_0) \prod_{j=1}^q Q_N(\sigma_0 | s^{(j)})$$

где $s^{(j)}$ – все спины на j -м подграфе, кроме σ_0 , а

$$Q_N(\sigma_0 | s) = \exp(K \sum_{(i,j)} s_i s_j + K s_1 \sigma_0 + \sum_i h s_i)$$

Пусть $g_N(\sigma_0) = \sum_s Q_N(\sigma_0 | s)$, тогда $Z = \sum_{\sigma_0} \exp(h\sigma_0) [g_N(\sigma_0)]^q$

и

$$P_i = \frac{1}{Z} \sum [\delta(\sigma_0, m_i) \exp(h\sigma_0) [g_N(\sigma_0)]^q]$$

Обозначим $x_N = \frac{g_N(-1)}{g_N(+1)}$, $y_N = \frac{g_N(0)}{g_N(+1)}$, тогда

$$P_{+1} = \frac{e^h}{e^h + x_N^q e^{-h} + y_N^q}, \quad P_0 = \frac{y_N^q}{e^h + x_N^q e^{-h} + y_N^q} \quad \text{и} \quad P_{-1} = \frac{x_N^q e^{-h}}{e^h + x_N^q e^{-h} + y_N^q}, \quad (3)$$

то есть

$$\langle \sigma_0 \rangle = \frac{e^h - x_N^q e^{-h}}{e^h + x_N^q e^{-h} + y_N^q} \quad \langle \sigma_0^2 \rangle = \frac{e^h + x_N^q e^{-h}}{e^h + x_N^q e^{-h} + y_N^q}$$

Для величин x_N и y_N можно составить рекуррентные соотношения, основываясь на следующих соображениях [2]. Если разрезать верхний подграф на рис. 1 в точке 1, примыкающей к точке 0, то он распадется на «ствол» $(0,1)$ и $q-1$ идентичных ветвей, каждая из которых является подграфом, аналогичным исходному, но содержащим $N-1$ оболочек. Поэтому

$$Q_N(\sigma_0 | s) = \exp(K s_1 \sigma_0 + h s_1) \prod_{j=1}^{q-1} Q_{N-1}(s_1 | t^{(j)})$$

где $t^{(j)}$ – все спины (кроме s_1) на j -й ветви подграфа. Следовательно,

$$g_N(\sigma_0) = \sum_{s_1} \exp(K s_1 \sigma_0 + h s_1) [g_{N-1}(s_1)]^{q-1}$$

Отсюда получим рекуррентные соотношения для x_N и y_N :

$$x_N = \frac{y_{N-1}^{q-1} + e^{-K+h} + x_{N-1}^{q-1} e^{K-h}}{y_{N-1}^{q-1} + e^{K+h} + x_{N-1}^{q-1} e^{-K-h}}, \quad y_N = \frac{y_{N-1}^{q-1} + e^h + x_{N-1}^{q-1} e^{-h}}{y_{N-1}^{q-1} + e^{K+h} + x_{N-1}^{q-1} e^{-K-h}} \quad (4)$$

Используя рекуррентные уравнения (4) (с начальным условием $x_0 = y_0 = 1$) и соотношения (3), можно вычислить вероятности P_i для корне-

вой точки дерева Кейли с N оболочками. Решение для решетки Бете получим, переходя к пределу $N \rightarrow \infty$. Для нахождения этого предела в рекуррентных соотношениях (4) положим, что $x_N = x_{N-1} = x$, $y_N = y_{N-1} = y$, и будем рассматривать полученные равенства как уравнения относительно x и y . Подставив решения этих уравнений в (3), найдем вероятности P_i для решетки Бете.

При $h = 0$ и $N \rightarrow \infty$ рекуррентные уравнения (4) переходят в

$$x = \frac{y^{q-1} + e^{-K} + x^{q-1}e^K}{y^{q-1} + e^K + x^{q-1}e^{-K}}, \quad y = \frac{y^{q-1} + 1 + x^{q-1}}{y^{q-1} + e^K + x^{q-1}e^{-K}}. \quad (5)$$

Средние по ансамблю значения вероятностей состояния спина находятся из (3) при подстановке в них решений (5):

$$P_{+1} = \frac{e^h}{e^h + x^q e^{-h} + y^q}, \quad P_0 = \frac{y^q}{e^h + x^q e^{-h} + y^q} \quad \text{и} \quad P_{-1} = \frac{x^q e^{-h}}{e^h + x^q e^{-h} + y^q}. \quad (6)$$

При любом значении K у системы (5) есть корень $x = 1$ (y находится из второго уравнения (5) при $x = 1$). Это решение соответствует отсутствию в системе спонтанной намагниченности, и оно теряет устойчивость в точке фазового перехода $K = K_c$, т.е. производная по x от правой части первого уравнения (5) должна быть равна 1 при $x = 1$ и $K = K_c$. Это условие приводит к

$$\frac{y^{q-1} + 2}{y^{q-1} + 2\text{ch}K_c} = y.$$

Исключая из этих уравнений y , получим уравнение для определения K_c :

$$(q-1)\text{sh}K_c - \text{ch}K_c = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\text{th}(K_c/2)}{q-1} \right)^{q-1}.$$

Обозначив $z = \text{th}(K_c/2)$, получим:

$$2(q-1)z - (1+z^2) = \frac{1}{2} (1-z^2) \left(1 - \frac{z}{q-1} \right)^{q-1}. \quad (7)$$

Рассмотрим модель с гамильтонианом несколько более общего вида, чем (1):

$$H(\{\sigma\}) = - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_i \sigma_j - \sum_{\langle i,j \rangle} J_1 \sigma_i^2 \sigma_j^2 - \sum_i H_s \sigma_i. \quad (8)$$

Возьмем теперь один из узлов решетки, содержащий спин σ_0 . Спины, со-

держатся в соседних узлах, будем обозначать σ_j . Пусть $H_1 = K \sum \sigma_j + h$ и

$$\varphi_1 = \sum \sigma_j^2.$$

Найдем условные средние $\overline{\sigma_0}$ и $\overline{\sigma_0^2}$ при фиксированных H_1 и φ_1 :

$$\overline{\sigma_0} = \frac{\text{sh}H_1}{\text{ch}H_1 + \frac{x_1}{2}}, \quad \overline{\sigma_0^2} = \frac{\text{ch}H_1}{\text{ch}H_1 + \frac{x_1}{2}}, \quad (9)$$

где $x_1 = e^{-K_1\varphi_1}$, $K_1 = \frac{J_1}{kT}$. H_1 и $\varphi_1(x_1)$, входящие к уравнению (9), будем рассматривать как неизвестные параметры, определяющие взаимодействие спина σ_0 с остальными атомами решетки. Если $K_1 \rightarrow 0$, то модель с гамильтонианом (8) переходит в модель Гейзенберга с тремя состояниями.

Рассмотрим на решетке кластер из двух соседних узлов, содержащих спины σ_1 и σ_2 . Будем считать, что энергия $E(\sigma_1, \sigma_2)$ взаимодействия этих спинов друг с другом и с атомами, не входящими в кластер, определяется выражением:

$$-\frac{E(\sigma_1, \sigma_2)}{kT} = K\sigma_1\sigma_2 + K_1\sigma_1^2\sigma_2^2 + H_2(\sigma_1 + \sigma_2) + K_1\varphi_2(\sigma_1^2 + \sigma_2^2),$$

где H_2 и φ_2 – параметры, описывающие взаимодействие атомов кластера с внешним окружением. Тогда средние значения $\frac{1}{2(\sigma_1 + \sigma_2)}$ и $\frac{1}{2(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)}$ находятся из формул ($x_2 = e^{-K_1\varphi_2}$):

$$\frac{1}{2(\sigma_1 + \sigma_2)} = \frac{e^{K+K_1}\text{sh}2H_2 + x_2\text{sh}H_2}{e^{K+K_1}\text{ch}2H_2 + e^{-K+K_1} + 2x_2\text{ch}H_2 + \frac{x_2^2}{2}}, \quad (10)$$

$$\frac{1}{2(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)} = \frac{e^{K+K_1}\text{ch}2H_2 + e^{-K+K_1} + x_2\text{ch}H_2}{e^{K+K_1}\text{ch}2H_2 + e^{-K+K_1} + 2x_2\text{ch}H_2 + \frac{x_2^2}{2}}.$$

Приравняем теперь правые части (9) и (10) и будем полагать, что x_1 и x_2 в этих выражениях просто некоторые неизвестные параметры, которые не обязательно должны выражаться как функции окружающих кластеры спинов, так что при $K_1 \rightarrow 0$, x_1 и x_2 остаются неопределенными. Аналогично допустим, что $H_1 = Kh_1 + h$ и $H_2 = Kh_2 + h$, где h_1 и h_2 – неизвестные параметры. Таким образом, мы получим два уравнения относительно четырех неизвестных: x_1 , x_2 , h_1 и h_2 . Если на эти неизвестные наложить еще два дополнительных независимых условия, то полученную систему можно будет решить. Подставив это решение в правые части (9) или (10), можно рассматривать полученные выражения как приближенные значения средних по ансамблю $\langle \sigma \rangle$ и $\langle \sigma^2 \rangle$. Например, предположив, что h_1 и h_2 (а также φ_1 и φ_2) пропорциональны количеству внешних атомов, соседних к атому кластера, получим:

$$\frac{h_1}{h_2} = \frac{\ln x_1}{\ln x_2} = \frac{q}{q-1}. \quad (11)$$

Можно показать, что при таком выборе дополнительных условий и при $K_1 \rightarrow 0$ описанная процедура приводит к решению для модели Гейзенберга на решетке Бете (5), (6). При отсутствии внешнего поля ($h = 0$) и в пределе $K_1 \rightarrow 0$ получим:

$$\text{th}Kh_1 = \frac{e^K\text{sh}2Kh_2 + x_2\text{sh}Kh_2}{e^K\text{ch}2Kh_2 + e^{-K} + x_2\text{ch}Kh_2}, \quad (12)$$

$$\frac{\text{ch}K h_1}{\text{ch}K h_1 + \frac{x_1}{2}} = \frac{e^K \text{ch}2K h_2 + e^{-K} + x_2 \text{ch}K h_2}{e^K \text{ch}2K h_2 + e^{-K} + 2x_2 \text{ch}K h_2 + \frac{x_2^2}{2}}.$$

Уравнение для критического значения K_c , при котором возникает спонтанная намагниченность, получается приравниванием производных по h_2 от первого уравнения (11) при $h_1 = h_2 = 0$. Учитывая (11), получим:

$$\frac{q}{q-1} = \frac{2e^{K_c} + x_2}{e^{K_c} + e^{-K_c} + x_2}, \quad \frac{1}{1+x_1/2} = \frac{e^{K_c} + e^{-K_c} + x_2}{e^{K_c} + e^{-K_c} + 2x_2 + x_2^2/2}, \quad x_1 = x_2^{q/(q-1)},$$

Обозначив $z = \text{th}(K_c/2)$, получим после несложных преобразований:

$$\frac{4qz - 2(1+z)^2}{1-z^2} = \left(1 + \frac{z}{q-1}\right)^{q-1},$$

что совпадает с уравнением (7) для критической точки модели Гейзенберга с тремя состояниями на решетке Бете.

Таким образом, непосредственное построение ренормгруппового преобразования с гамильтонианом (1) не приводит к точному решению на решетке Бете, так как это означало бы наложение дополнительного условия $x_1 = x_2 = 1$ в равенствах (9) – (12). Однако замена гамильтониана модели Гейзенберга (1) гамильтонианом более общего вида (8) позволяет, построив для (8) ренормгрупповое преобразование, получить решение для модели Гейзенберга на решетке Бете путем возвращения к частному случаю (1) в полученных уравнениях.

1. Сёмкин С.В., Смагин В.П. Приближение Бете в модели Изинга с подвижными примесями // Физика твердого тела. 2015. Т. 57, №5. С. 926–931.
2. Бэкстер С.Р. Точно решаемые модели в статистической механике. М.: Мир, 1985. 486 с.
3. Квасников И.А. Термодинамика и статистическая физика. Т. 2: Теория равновесных систем // Едиториал УРСС. М., 2002. 432 с.
4. Сёмкин С.В., Смагин В.П. Использование метода усреднения по полям взаимодействия для построения ренормгруппового преобразования фиксированного масштаба // Физика твердого тела. 2013. Т. 55, №5. С. 892–895
5. Сёмкин С.В., Смагин В.П. Модель Изинга разбавленного ферромагнетика в приближении самосогласованного поля // Физика твердого тела. 2014. Т. 56. №6. С. 1064–1068.
6. Сёмкин С.В., Смагин В.П. Методы получения самосогласованных уравнений для изинговского магнетика // Изв. вузов. Физика. 2013. Т. 56, № 2 С. 9–14.
7. Мейлихов Е.З., Фарзетдинова Р.М. Теория эффективного поля для разупорядоченных магнитных сплавов // Физика твердого тела. 2014. Т. 56, №4. С. 679–686.
8. Мейлихов Е.З., Фарзетдинова Р.М. Обобщенная теория среднего поля для решеточных магнитных систем и ферромагнетизм полупроводников с магнитными примесями // Физика твердого тела. 2005. Т. 47, №6. С. 1085–1091.
9. Белоконов В.И., Нефедев К.В. Функция распределения случайных полей взаимодействия в неупорядоченных магнетиках. Спиновое и макроспиновое стекло // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2001. Т. 120, №1. С. 156–163.
10. Белоконов В.И., Семкин С.В. Метод случайного поля в модели Изинга разбавленного ферромагнетика // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1992. Т. 102, №4. С. 1254.

11. Серков Л.А. Название Преобразование фиксированного масштаба с близкодействующими спиновыми корреляциями // Теоретическая и математическая физика. 1992. Т. 92, №1. С. 759–762.

Транслитерация

1. Syomkin S.V., Smagin V.P. Priblizhenie Bete v modeli Izinga s podvizhnymi primesyami // Fizika tverdogo tela. 2015. Т. 57, №5. P. 926–931.
2. Behkster C.R. Tochno reshaemye modeli v statisticheskoy mekhanike. M.: Mir, 1985. 486 p.
3. Kvasnikov I.A. Termodinamika i statisticheskaya fizika. Т. 2: Teoriya ravnovesnyh sistem // Editorial URSS. M., 2002. 432 p.
4. Syomkin S.V., Smagin V.P. Ispol'zovanie metoda usredneniya po polyam vzaimodejstviya dlya postroeniya renormgruppovogo preobrazovaniya fiksirovannogo masshtaba // Fizika tverdogo tela. 2013. Т. 55, №5. P. 892–895
5. Syomkin S.V., Smagin V.P. Model' Izinga razbavlenno ferromagnetika v priblizhenii samosoglasovannogo polya // Fizika tverdogo tela. 2014. Т. 56. № 6. P. 1064–1068.
6. Syomkin S.V., Smagin V.P. Metody polucheniya samosoglasovannyh uravnenij dlya izingovskogo magnetika // Izv. vuzov. Fizika. 2013. Т. 56, № 2. P. 9–14.
7. Mejlihov E.Z., Farzetdinova R.M. Teoriya ehffektivnogo polya dlya razuporyadochennyh magnitnyh splavov // Fizika tverdogo tela. 2014. Т. 56, №4. P. 679–686.
8. Mejlihov E.Z., Farzetdinova R.M. Obobshchennaya teoriya srednego polya dlya reshetochnyh magnitnyh sistem i ferromagnetizm poluprovodnikov s magnitnymi primesyami // Fizika tverdogo tela. 2005. Т. 47, №6. P. 1085–1091.
9. Belokon' V.I., Nefedev K.V. Funkciya raspredeleniya sluchajnyh polej vzaimodejstviya v neuporyadochennyh magnetikah. Spinovoe i makrospinovoe steklo // ZHurnal ehksperimental'noj i teoreticheskoy fiziki. 2001. Т. 120, № 1. P. 156–163.
10. Belokon' V.I., Semkin S.V. Metod sluchajnogo polya v modeli Izinga razbavlenno ferromagnetika // ZHurnal ehksperimental'noj i teoreticheskoy fiziki. 1992. Т. 102, № 4. P. 1254.
11. Serkov L.A. Nazvanie Preobrazovanie fiksirovannogo masshtaba s blizkodejstvuyushchimi spinovymi korrelyაციями // Teoreticheskaya i matematicheskaya fizika. 1992. Т. 92, №1. P. 759–762.

© С.В. Сёмкин, 2019

© В.П. Смагин, 2019

Для цитирования: Сёмкин С.В., Смагин В.П. Модель Гейзенберга с тремя состояниями на решетке Бете // Территория новых возможностей. Вестник Владивостокского государственного университета экономики и сервиса. 2019. Т. 11, № 1. С. 74–81.

For citation: Semkin S.V., Smagin V.P. Three-state Heisenberg model on the Bethe lattice, *The Territory of New Opportunities. The Herald of Vladivostok State University of Economics and Service*, 2019, Vol. 11, №1, pp. 74–81.

DOI [dx.doi.org/10.24866/VVSU/2073-3984/2019-1/074-081](https://doi.org/10.24866/VVSU/2073-3984/2019-1/074-081)

Дата поступления: 12.03.2019.