

05,01

Модель Изинга разбавленного ферромагнетика в приближении самосогласованного поля

© С.В. Сёмкин, В.П. Смагин

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса,
Владивосток, Россия

E-mail: li15@ Rambler.ru

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 14 ноября 2013 г.)

Рассмотрено применение метода усреднения по полям обменного взаимодействия к кластерам из одного и двух магнитных атомов в модели Изинга разбавленного ферромагнетика и построен вариант ренормгруппового преобразования фиксированного масштаба на основе этого метода. Показано, что полученное приближение позволяет различить модели с разбавлением по узлам и по связям.

1. Введение

Для исследования фазовых переходов в нерегулярных спиновых системах часто используется модель Изинга для разбавленного магнетика. Эта модель характеризуется гамильтонианом [1]

$$E(p) = -\sum_{\langle i,l \rangle} \xi_i \xi_l J \sigma_i \sigma_l - H \sum_i \xi_i \sigma_i. \quad (1)$$

Здесь σ_i — обычные изинговские переменные, определяющие ориентацию магнитного момента атома и принимающие значения $+1$ и -1 ; J — обменный интеграл, H пропорциональна внешнему магнитному полю. Случайная переменная ξ_i может быть равна 0 и 1, ее среднее значение $\langle \xi_i \rangle = p_s$ определяет вероятность заполнения l -го узла изинговским „спином“; суммирование в первой сумме проводится по всем упорядоченным парам соседних узлов, во второй сумме — по всем узлам решетки. Будем считать, что магнитные и немагнитные атомы размещены по узлам решетки случайно, без корреляции и не перемещаются под воздействием тепловых колебаний („вмороженные“ примеси). Кроме того, мы будем рассматривать модель замороженных связей. В ней считается, что определенная доля $1 - p_b$ всех обменных интегралов искусственно исключена.

Критические явления в моделях Изинга и Гейзенберга для разбавленного магнетика, а так же 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 настоящей работе мы предлагаем простой метод расчета намагниченности и температуры Кюри разбавленного магнетика, применимый в широком диапазоне концентраций немагнитных примесей. И хотя детали фазового перехода, такие как расчет критических показателей, корреляционной функции и т.д., остаются за рамками этой работы, все же предлагаемый метод можно в принципе использовать для вычисления критического показателя корреляционной длины путем

построения ренормгруппового преобразования фиксированного масштаба, аналогично [7].

Известно [8], что для чистого ($p_s = 1$) изинговского магнетика в нулевом внешнем поле справедливо следующее равенство:

$$\langle \sigma \rangle = \langle \text{th}(\beta J h_1) \rangle, \quad (2)$$

где $h_1 = \sum_j \sigma_j$ (суммирование производится по соседним к данному узлу спинам) — „обменное“ поле, $\beta = \frac{1}{kT}$, T — температура системы, k — постоянная Больцмана. Усреднение в правой части этого равенства является, в сущности, усреднением по функции распределения $W_1(h_1)$ величины обменного поля h_1 .

Соотношение (2) можно обобщить следующим образом. Рассмотрим кластер, состоящий из n атомов. Гамильтониан этого кластера выглядит так

$$E_n = -J \sum_i \sigma_i \sigma_j - J \sum_{in} h_{in}^i \sigma_i. \quad (3)$$

Суммирование в первом слагаемом этого выражения производится по парам входящих в кластер атомов, являющихся ближайшими соседями. Второе слагаемое в (3) описывает взаимодействие атомов кластера с их ближайшими соседями, не входящими в кластер. Поля обменного взаимодействия h_{in}^i вычисляются для каждого атома кластера суммированием изинговских переменных, соответствующих внешним атомам, соседним к данному.

Усредним величину $\frac{\sum \sigma_i}{n}$ по ансамблю с гамильтонианом (3), рассматривая h_{in}^i как постоянные, а затем усредним полученное выражение по совместной функции распределения полей обменного взаимодействия $W_n(h_1, \dots, h_n)$. Приравнявая результат этого усреднения к $\langle \sigma \rangle$, получим

$$\langle \sigma \rangle = \left\langle \frac{\sum \left(\frac{\sum \sigma_i}{n} \right) \exp(-\beta E_n)}{\sum \exp(-\beta E_n)} \right\rangle; \quad (4)$$

формулу (2) можно рассматривать как частный случай (4), когда кластер состоит из одного атома.

Формулы (4) можно использовать как основу приближенных методов нахождения спонтанной намагниченности и точки фазового перехода модели Изинга, заменяя неизвестную функцию распределения $W_n(h_1, \dots, h_n)$ тем или иным приближенным выражением, в которое средняя намагниченность $m = \langle \sigma \rangle$ входит как неизвестный параметр. Например, взяв в (2) $W_1(h_1) = \delta(h_1 - qm)$, где q — координационное число решетки, получим известное приближение среднего поля [7]. Если же использовать для $W_1(h_1)$ биномиальное распределение, получим приближение, описанное в [9]. Эту же методику можно использовать и для исследования разбавленного магнетика. В работе [9] рассмотрен разбавленный изинговский магнетик, в приближении, основанном на (2). В настоящей работе мы исследуем разбавленный магнетик в приближении, основанном на (4), используя кластеры из одного и двух атомов. Использование кластеров разных размеров позволяет также построить ренормгрупповое преобразование фиксированного масштаба [7]. Эта возможность также исследуется в настоящей работе.

2. Разбавление по связям и узлам

Рассмотрим кластеры из одного и двух узлов в модели Изинга с разбавлением по связям. Результат усреднения в (4) по приближенным функциям распределения обменных полей будем обозначать $\langle \sigma_n \rangle$. Тогда

$$\langle \sigma_1 \rangle = \langle \text{th}(Kh) \rangle_{W_1^q(h)} \quad (5)$$

и

$$\langle \sigma_2 \rangle = p_b \left\langle \frac{\text{sh}[K(h_1 + h_2)]}{\text{ch}[K(h_1 + h_2)] + e^{-2K} \text{ch}[K(h_1 - h_2)]} \right\rangle_{W_2^q(h_1, h_2)} + (1 - p_b) \left\langle \frac{\text{sh}[K(h_1 + h_2)]}{\text{ch}[K(h_1 + h_2)] + \text{ch}[K(h_1 - h_2)]} \right\rangle_{W_2^q(h_1, h_2)}$$

или

$$\langle \sigma_2 \rangle = p_b \left\langle \frac{\text{sh}[K(h_1 + h_2)]}{\text{ch}[K(h_1 + h_2)] + e^{-2K} \text{ch}[K(h_1 - h_2)]} \right\rangle_{W_2^q(h_1, h_2)} + (1 - p_b) \frac{1}{2} \langle \text{th}(Kh_1) + \text{th}(Kh_2) \rangle_{W_2^q(h_1, h_2)}, \quad (6)$$

где $K = J\beta$. Наличие двух слагаемых в правой части (6) обусловлено тем, что среди множества кластеров из двух соседних атомов на решетке доля кластеров с разорванной обменной связью составляет $1 - p_b$.

В модели с разбавлением по узлам для кластера из одного атома получим

$$p_s \langle \sigma_1 \rangle = p_s \langle \text{th}(Kh) \rangle_{W_1^q(h)}, \quad (7)$$

а для кластера из двух узлов —

$$p_s \langle \sigma_2 \rangle = p_s^2 \times \left\langle \frac{\text{sh}[K(h_1 + h_2)]}{\text{ch}[K(h_1 + h_2)] + e^{-2K} \text{ch}[K(h_1 - h_2)]} \right\rangle_{W_2^q(h_1, h_2)} + p_s(1 - p_s) \frac{1}{2} \langle \text{th}(Kh_1) + \text{th}(Kh_2) \rangle_{W_2^q(h_1, h_2)}. \quad (8)$$

В этих выражениях $\langle \sigma_1 \rangle$ и $\langle \sigma_2 \rangle$ — средняя намагниченность магнитного атома; намагниченность на узел получается умножением на p_s .

3. Метод среднего поля

В приближении среднего поля обменные поля h_1 и h_2 в выражениях (5)–(8) заменяются их средними значениями, что соответствует использованию в этих выражениях δ -функций в качестве функций распределения обменных полей

$$W_1^q(h) = \delta(h - mqp) \quad (9)$$

$$W_2^q(h_1, h_2) = W_1^{q-1}(h_1)W_1^{q-1}(h_2) = \delta(h_1 - m(q-1)p)\delta(h_2 - m(q-1)p). \quad (10)$$

Задачи разбавления по узлам и связям приводят в этом приближении к одинаковым выражениям, поэтому здесь p_b и p_s обозначены просто p . При использовании выражений (5) (или (7)) получим обобщение приближения среднего поля на случай разбавленного магнетика

$$m = \text{th}(Kqpm). \quad (11)$$

Это уравнение имеет ненулевое решение при $K > K_c = 1/qp$, что, как известно [1], не соответствует истинному поведению спонтанной намагниченности разбавленного магнетика, которая должна обращаться в ноль при концентрации, меньшей порога протекания p_c .

Использование кластера из двух атомов (соотношения (6) или (8)) не приводит к существенно иным результатам. Уравнение для намагниченности в этом случае

$$m = (1 - p) \text{th}[K(q-1)pm] + p \frac{\text{sh}[2k(q-1)pm]}{\text{ch}[2K(q-1)pm] + e^{-2K}} \quad (12)$$

имеет ненулевое решение при любых значениях p .

Заменяя в правых частях (11) и (12) намагниченность m параметром μ и приравнявая эти части, получим уравнение относительно μ :

$$\text{th}[Kq\mu] = (1 - p) \text{th}[K(q-1)\mu] + p \frac{\text{sh} 2K(q-1)\mu}{\text{ch}[2K(q-1)\mu] + e^{-2K}}. \quad (13)$$

Среднюю намагниченность m одного магнитного атома можно приравнять μ — решению (13). Или считать

Точные значения порогов протекания по узлам (верхнее значение) и связям (нижнее значение) [1] — первый столбец, перколяционный порог в приближении Бете — второй столбец (столбцы „1“, „2“ и „1–2“ — пояснения в тексте).

Тип решетки (координационное число)	Точное значение	Приближение Бете	1	2	1–2
Шестиугольная (3)	0.700 0.653	0.500	0.557	0.571	0.629
Квадратная (4)	0.590 0.500	0.333	0.428	0.429	0.434
Тетраэдр. (4)	0.430 0.390	0.333	0.428	0.429	0.434
Кубическая (6)	0.310 0.250	0.200	0.293	0.290	0.272
Треугольная (6)	0.500 0.347	0.200	0.293	0.310 0.295	0.556 0.315

$m = \text{th}(Kqp\mu)$ — в этом случае для чистого магнетика ($p = 1$) приходим к известному приближению Бете [10]. Для разбавленного магнетика ненулевое решение (13) существует при условии $K > K_c$, где

$$K_c(p) = \frac{1}{2} \ln \frac{p + p_c}{p - p_c},$$

$p_c = 1/(q - 1)$ — перколяционный порог в приближении среднего поля. График функции $T_c(p) = K_c^{-1}(p)$ при $q = 6$ приведен на рис. 1 (кривая 1). Зависимость намагниченности при нулевой температуре ($K \rightarrow \infty$) от концентрации $m(p)$ является, как известно [1], вероятностью того, что некоторый магнитный атом принадлежит бесконечному кластеру $P(p)$. Согласно (13) эта функция

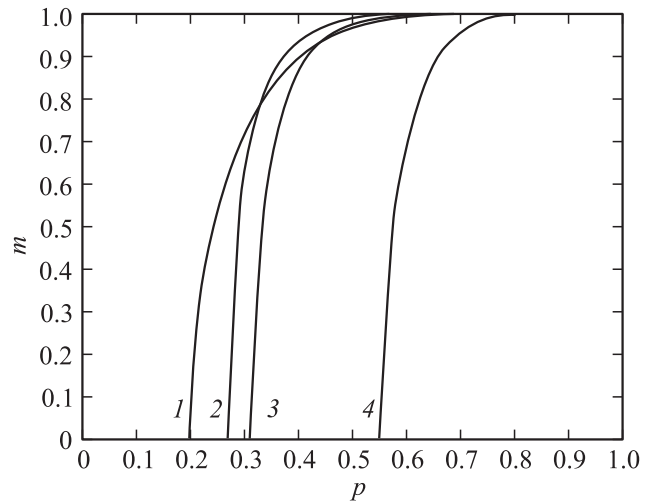


Рис. 2. Спонтанная намагниченность при нулевой температуре как функция концентрации для $q = 6$. 1 — приближение Бете, 2 — усреднение по полям, кубическая решетка, 3 — треугольная решетка, разбавление по узлам, 4 — треугольная решетка, разбавление по связям.

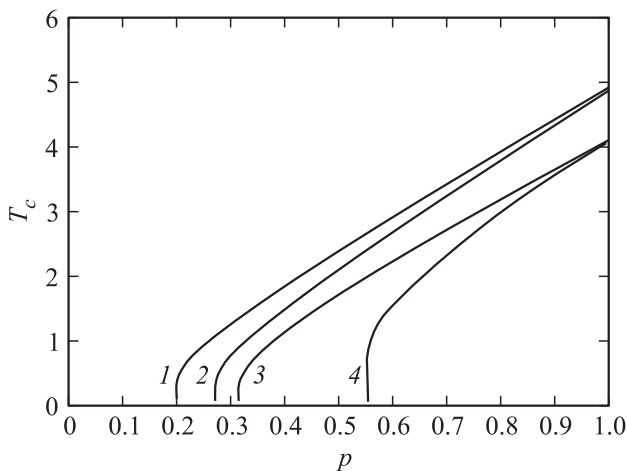


Рис. 1. Температура Кюри как функция концентрации при $q = 6$. 1 — приближение Бете, 2 — усреднение по полям, кубическая решетка, 3 — треугольная решетка, разбавление по узлам, 4 — треугольная решетка, разбавление по связям.

находится из решения уравнения

$$\begin{cases} \text{th}(qpx) = (1 - p)\text{th}[(q - 1)px] + p \text{th}[2(q - 1)px], \\ P(p) = \text{th}(qpx). \end{cases} \tag{14}$$

График этой при $q = 6$ функции показан на рис. 2 (кривая 1).

4. Усреднение по полям обменного взаимодействия

В работе [9] предложен другой приближенный метод нахождения функций распределения и основанная на

нем методика нахождения спонтанной намагниченности. Величины σ_j , входящие в выражение для $h_1 = \Sigma \sigma_j$, рассматриваются как независимые случайные переменные, принимающие значения $+1$ и -1 с вероятностями $(1+m)/2$ и $(1-m)/2$ соответственно. Количество слагаемых в сумме для h_1 является случайной величиной, распределенной по биномиальному закону от 0 до q с параметром p . Функция распределения $W_1^q(h)$ выглядит в этом случае следующим образом:

$$W_1^q(h) = \sum_{i=0}^q C_q^i p^i (1-p)^{q-i} \times \sum_{j=0}^i C_i^j \left(\frac{1+m}{2}\right)^j \left(\frac{1-m}{2}\right)^{i-j} \delta(h - (2j - i)). \quad (15)$$

Подставляя это выражение в (5), получим уравнение для спонтанной намагниченности как функции концентрации и температуры. Такой метод получения уравнений для спонтанной намагниченности мы будем в дальнейшем называть методом усреднения по обменным полям.

Как показано в [9], полученное из (5) с помощью (15) уравнение, в отличие от (11) и (12), имеет ненулевое решение только при $p > p_c$. Причем, приближенные значения p_c , полученные из этого уравнения, в большинстве случаев оказываются точнее, чем найденные из (14) (таблица, столбец „1“).

Поскольку приближение Бете (13) является более точным, чем приближение среднего поля для кластеров из одного (11) и двух (12) атомов, а метод усреднения по обменным полям дает более точные результаты даже для одноатомного кластера, можно надеяться, что комбинация этих методов окажется достаточно хорошим приближением.

Построим функцию распределения $W_2^q(h_1, h_2)$ для кластера из двух соседних атомов. Здесь возможны два случая. В одном случае может оказаться, что среди внешних атомов, соседних к первому атому кластера, нет ближайших соседей его второго атома. Так будет для шестиугольной решетки ($q = 3$), для квадратной или тетраэдрической ($q = 4$) и для кубической ($q = 6$). В дальнейшем мы будем называть эту ситуацию „отсутствием перекрытия координационных сфер“. В другом случае может оказаться, что атомы, соседние к одному узлу кластера, одновременно являются соседними и к его второму узлу — так, например, будет для плоской треугольной решетки ($q = 6$). В первом случае поля h_1 и h_2 являются (в рамках метода усреднения по обменным полям) статистически независимыми: $W_2^q(h_1, h_2) = W_1^{q-1}(h_1)W_1^{q-1}(h_2)$. Во втором случае $h_{1,2} = h'_{1,2} + h^{com}_{1,2}$, где $h^{com}_{1,2}$ — обменные поля, создаваемые атомами, соседними одновременно к обоим атомам кластера. Поля h'_1, h'_2 и $h^{com}_{1,2}$ считаются в рамках метода усреднения статистически независимыми и имеющими биномиальные распределения, аналогичные (15).

Для разбавленных магнетиков в первом из указанных случаев совместная функция распределения полей строится по (15) и в этом приближении модель разбавленного по узлам магнетика не отличается от модели разбавленных связей. Во втором случае функции распределения полей при разбавлении по узлам и по связям различаются.

Рассмотрим приближение, получаемое из (6) и (8) подстановкой в эти выражения функции распределения $W_2^q(h_1, h_2) = W_1^{q-1}(h_1)W_1^{q-1}(h_2)$, то есть при отсутствии перекрытия координационных сфер. Из получаемого при этом выражения можно вычислить спонтанную намагниченность как функцию концентрации и температуры. Оказывается, что спонтанная намагниченность не равна нулю только при $p > p_c$. Значения p_c , найденные этим способом, указаны в таблице (столбец „2“).

Для треугольной решетки функция распределения полей для разбавленного по узлам магнетика вычисляется следующим образом:

$$W_2^6(h_1, h_2) = W_1^3(h'_1)W_1^3(h'_2)W_1^2(h^{com})\delta \times (h_1 - (h'_1 + h^{com}))\delta(h_2 - (h'_2 + h^{com})). \quad (16)$$

В этом случае $h^{com}_1 = h^{com}_2 = h^{com}$. Для магнетика с треугольной решеткой, разбавленного по связям, ситуация несколько сложнее — h^{com}_1 может быть не равно h^{com}_2 . Совместную функцию распределения полей h^{com}_1 и h^{com}_2 зададим непосредственным расчетом вероятностей $W(h^{com}_1, h^{com}_2)$

$$W(-2, 0) = 2(1-p)^2 p^2 \left(\frac{1-m}{2}\right)^2,$$

$$W(-1, -1) = (1-p)^2 p^2 ((1-m)^2 + (1-m^2)/2)$$

$$W(-1, 0) = (1-p)^3 p(1-m) + (1-p)p^3(1-m^2/2),$$

$$W(-1, 1) = (1-p)^2 p^2(1-m^2)/2,$$

$$W(-2, -1) = 2(1-p)p^3 \left(\frac{1-m}{2}\right)^2$$

$$W(0, 0) = (1-p)^2 p^2(1-m^2) + p^4(1-m^2)/2 + (1-p)^4,$$

$$W(-2, -2) = p^4 \left(\frac{1-m}{2}\right)^2.$$

Остальные вероятности либо равны нулю, либо находятся из условия симметрии $W(h^{com}_1, h^{com}_2) = W(h^{com}_2, h^{com}_1)$ и того обстоятельства, что при замене m на $-m$ вероятность $W(h^{com}_1, h^{com}_2)$ переходит в $W(-h^{com}_1, -h^{com}_2)$. В столбце „2“ таблицы для треугольной решетки приведены два значения критической концентрации: верхнее — при разбавлении по узлам, нижнее — по связям.

Построим теперь комбинацию приближения Бете и метода усреднения по обменным полям. Для этого приравняем правые части (7) и (8), усреднение в которых производится по функциям распределения обменных полей, заданным выше. В столбце „1-2“ таблицы

приведены перколяционные пороги различных решеток, вычисленные этим способом. Для треугольной решетки приведено два значения: верхнее — при разбавлении по узлам, нижнее — по связям.

В этом же приближении мы вычислили концентрационные зависимости температуры Кюри (рис. 1). На этом рисунке кривая 2 соответствует $q = 6$ и отсутствию перекрытия координационных сфер. Кривая 3 вычислена для треугольной решетки при разбавлении по узлам, а кривая 4 — по связям. Кроме того, мы рассчитали намагниченность при нулевой температуре, т.е. долю атомов, принадлежащих бесконечному кластеру, как функцию от концентрации p (рис. 2). Номера кривых на этом рисунке соответствуют тем же случаям, что и номера на рис. 1.

5. Выводы

Таким образом, на основании полученных результатов можно сделать следующие выводы:

1. Все приближения, основанные на усреднении по полям взаимодействия, дают более точные результаты для концентрационной зависимости температуры Кюри и намагниченности, чем метод среднего поля, в том числе и в форме приближения Бете.

2. Использование кластера из двух атомов в методе усреднения по обменным полям хотя и не приводит к существенному улучшению точности приближения (см. таблицу) по сравнению с одноатомным кластером, позволяет все же в некоторых случаях различать задачи протекания по узлам и по связям.

3. Метод, основанный на сопоставлении кластеров из одного и двух узлов (что, в сущности, является ренормгрупповым преобразованием фиксированного масштаба), позволяет получить более точные результаты и при использовании приближения среднего поля (метод Бете), и при использовании усреднения по обменным полям. В этом последнем случае мы получаем для треугольной решетки наиболее близкие к точным значения перколяционных порогов и по узлам, и по связям.

Список литературы

- [1] Дж. Займан, Модели беспорядка. Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем. Мир, М. (1982). 592 с.
- [2] Ю.А. Изюмов, М.В. Медведев. Теория магнитоупорядоченных кристаллов с примесями. Наука, М. (1970), 271 с.
- [3] Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский. УФН **173**, 175 (2003).
- [4] Вик.С. Доценко. УФН **165**, 481 (1995).
- [5] Б.Н. Шалаев. ФГТ **52**, 83 (2010).
- [6] Б.Н. Шалаев. ЖЭТФ **73**, 2301 (1977).
- [7] Л.А. Серков. ТМФ **92** I, 92 (1992).
- [8] Н.В. Callen, Phys. Lett. **4**, 161 (1963).
- [9] В.И. Белоконь, С.В. Семкин. ЖЭТФ **102**, 1254 (1992).
- [10] Р. Бэкстер. Точно решаемые модели в статистической механике. Мир, М. (1985). 486 с.