

О МЕТОДЕ
ФЛУКТУИРУЮЩИХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПОЛЕЙ
ДЛЯ СЛУЧАЙНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА
В ОКРЕСТНОСТИ МУЛЬТИКРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКИ

Г. Н. Караджян

Рассматривается случайная модель Изинга в приближении Бете—Пайерлса. В рамках метода флуктуирующих молекулярных полей получена система уравнений для связанных параметров порядка в окрестности мультикритической точки парамагнетик—ферромагнетик—спиновое стекло.

Эксперименты [1-9], проведенные на большом числе многокомпонентных магнитных веществ, показывают, что переход в состояние спинового стекла (СС) может происходить не только из парамагнитной (ПМ) фазы, но и из ферромагнитной (ФМ). Принято считать, что магнитные фазовые диаграммы некоторых из этих веществ [2, 3, 8] трехфазны; в мультикритической точке сходятся три фазы: ПМ, ФМ и СС. При этом, однако, различают два вида СС состояний: обычное СС состояние, получаемое в результате перехода ПМ—СС, и возвратное СС (re-entrant spin-glass state) как результат последовательности переходов ПМ—ФМ—СС. Природа возвратного СС состояния и причины разрушения дальнего ФМ порядка в результате этой последовательности переходов в настоящее время не установлены. Существует также точка зрения [9], согласно которой дальний ФМ порядок при такой последовательности переходов сохраняется.

Трехфазную фазовую диаграмму для нерегулярных магнитных систем предсказали Шеррингтон и Киркпатрик (ШК) [10]. Они изучали случайную модель Изинга с гауссовским распределением обменных энергий, центр и дисперсия которого зависят от числа спинов в решетке. Модель ШК фактически оперирует не с нормальным распределением обменных энергий, а с некоторым эффективным, имеющим только два отличных от нуля момента. Такие распределения не существуют в силу неограниченности их характеристических функций [11].

Альтернативным методом, свободным от многих недостатков метода реплик [10], является метод флуктуирующих молекулярных полей [12-16]. Преимущества этого метода были бы очевидны, если бы удалось показать его применимость в области неэргидичности СС и найти параметры порядка, описывающие древовидную структуру термодинамических СС состояний.

В работе [16] для случайной модели Изинга в приближении Бете—Пайерлса были предложены новые параметры порядка, пригодные для описания дендрограммы термодинамических состояний. Их существование автоматически следует из основных уравнений модели. Это так называемые параметры разветвления ξ_i ($i=1, 2, \dots$) — вспомогательные параметры, определяющие число и вид решений нелинейного интегрального уравнения для плотности распределения молекулярных полей. Параметры разветвления связываются некоторыми нелинейными алгебраическими уравнениями (уравнениями разветвления), которые по своему математическому смыслу адекватны уравнениям состояния физической системы.

В этом смысле можно считать, что в окрестности критической точки они соответствуют уравнениям состояния Гинзбурга—Ландау. Окрестность простых критических точек описывается одномерным уравнением разветвления, а окрестность вырожденных критических точек — многомерным. Параметры порядка ξ_i ($i=1, 2, \dots$) зависят лишь от экспериментально измеряемых термодинамических величин, равны нулю в парамагнитной фазе, начинают ветвиться в критической точке с критическими индексами теории среднего поля. Параметры разветвления с нечетными номерами обращаются в среднюю локальную намагниченность (с точностью до множителя), а с четными номерами — в параметр порядка Эдвардса—Андерсона, если применить указанный формализм к модели ШК.

Температурная зависимость параметров порядка при отсутствии внешнего магнитного поля имеет вид дерева с бесконечным числом точек ветвлений. Дендрограмма несколько иной топологии ([17], рис. 4) была предложена Пальмером для описания необратимых явлений в СС.

Описанный выше метод можно применить для вывода уравнений Гинзбурга—Ландау в окрестности мультикритической точки ПМ—ФМ—СС для континуальной модели Изинга в приближении Бете—Пайерлса. В рамках этого метода мультикритической точке ПМ—ФМ—СС соответствует дважды вырожденное собственное значение характерного линейного оператора задачи. Окрестность этой точки описывается поэтому двумя параметрами порядка ξ_1 и ξ_2 , которые связываются двумерным уравнением разветвления.

Основным уравнением в методе флуктуирующих молекулярных полей является нелинейное интегральное уравнение для логарифма $V^R(\rho)$ характеристической функции плотности распределения молекулярных полей $P_g^R(q)$ [16]

$$V^R(\rho) = \nu \int K^R(\rho, y; \theta) \exp[V^R(y)] dy. \quad (1)$$

Ядро этого уравнения зависит от пространственного распределения спинов и вида координатной зависимости обменной энергии $J(\mathbf{R}_{ij}) = J_0 I(\mathbf{R}_{ij})$ ($\mathbf{R}_{ij} = R_0 \mathbf{r}_{ij}$ — пространственный вектор, связывающий спины i и j)

$$K^R(\rho, y; \theta) = \frac{1}{2\pi} \int \left\langle \exp \left\{ i\rho \operatorname{Arth} \left[\operatorname{th}(x) \operatorname{th} \frac{I(\mathbf{R}_{ij})}{\theta} \right] \right\} - 1 \right\rangle_{\mathbf{R}_{ij}} \exp(-ixy) dx. \quad (2)$$

Угловые скобки означают усреднение по пространственному распределению спинов, $\theta = T/J_0$ — безразмерная температура, $\nu = 4\pi R_0^3 n/3$ — безразмерная концентрация спинов. Линии переходов ПМ—ФМ $\theta_c(\nu)$ и ПМ—СС $\theta_g(\nu)$ определяются первыми двумя собственными значениями линейного интегрального оператора $K^R(\theta)$ с ядром (2), а мультикритическая точка ПМ—ФМ—СС их точкой пересечения. В окрестности

$$\nu = \nu_{cg} + \Delta \cos \delta, \quad \theta = \theta_{cg} + \Delta \sin \delta, \quad \Delta \ll 1, \quad 0 \leq \delta \leq 2\pi$$

мультикритической точки (ν_{cg}, θ_{cg}) уравнение (1) записывается в виде

$$V^R - \nu_{cg} K^R(\theta_{cg}) V^R = \nu_{cg} \sum_{m+n \geq 2} \Delta^n \{ \Omega_{mn}(\theta_{cg}, \delta) K^R(\theta_{cg}) \} (V^R)^m,$$

$$\Omega_{mn}(\theta_{cg}, \delta) = \frac{\sin^n(\delta)}{m! n!} \left\{ \frac{d^n}{d\theta_{cg}^n} + \frac{n}{\nu_{cg}} \operatorname{ctg}(\delta) \frac{d^{n-1}}{d\theta_{cg}^{n-1}} \right\}. \quad (3)$$

Пространство нулей оператора $1 - \nu_{cg} K^R(\theta_{cg})$ имеет размерность 2. В (3) необходимо от ядра $K^R(\rho, y; \theta)$ перейти к ядру

$$N_{cg}^R(\rho, y; \theta) = \nu_{cg} K^R(\rho, y; \theta) - [M_1(\rho) L_1^*(y) + M_2(\rho) L_2^*(y)] \varphi(\rho) \varphi(y), \quad (4)$$

для которого мультикритическая точка не является собственной. В формуле (4) $L_{1,2}$ обозначают вырожденные собственные функции оператора $K^R(\theta)$ в мультикритической точке, $M_{1,2}$ — собственные функции «союзного» оператора, φ — весовая функция.

В результате обратного линейного преобразования уравнение (3) сводится к уравнению

$$V^R = \xi_1 (1 + R_{cg}) \varphi M_1 + \xi_2 (1 + R_{cg}) \varphi M_2 + \nu_{cg} \sum_{m+n \geq 2} \Delta^n (1 + R_{cg}) \times \\ \times \Omega_{mn}(\theta_{cg}, \delta) K^R(\theta_{cg}) (V^R)^m. \quad (5)$$

Здесь R_{cg} — резольвента оператора N_{cg}^R .

Параметры порядка

$$\xi_i = (L_i, V^R)_\varphi, \quad i = 1, 2; \quad V^R(\rho) = \ln \int P_q^R(q) \exp(i\rho q) dq$$

возникают в (5) естественным образом как скалярные произведения вырожденных собственных функций оператора $K^R(\theta)$ и логарифма характеристической функции плотности распределения молекулярных полей. Они являются однозначными функционалами от $P_q^R(q)$ и чувствительны к качественным изменениям распределения средних полей. Эти параметры порядка не содержат «лишней» для идентификации фаз переменной q и зависят лишь от термодинамических величин, доступных экспериментальному измерению.

При малых Δ уравнение (5) имеет единственное решение, которое представляется в виде сходящегося ряда

$$V^R(\rho) = \xi_1 L_1(\rho) + \xi_2 L_2(\rho) + \sum_{i+j+k \geq 2} V_{ijk}^R(\rho) \xi_1^i \xi_2^j \Delta^k. \quad (6)$$

Чтобы получить уравнения состояния, достаточно умножить (6) скалярно на $L_{1,2}$

$$\sum_{i+j+k \geq 2} \omega_{ijk}^{(\alpha)} \xi_1^i \xi_2^j \Delta^k = 0, \quad \alpha = 1, 2. \quad (7)$$

Коэффициенты $\omega_{ijk}^{(\alpha)} = (L_\alpha, V_{ijk}^R)_\varphi$, $\alpha = 1, 2$ двумерного уравнения разветвления (7) можно посчитать, предварительно вычислив функции $V_{ijk}^R(\rho)$ из (6) методом неопределенных коэффициентов. В силу свойств симметрии собственных функций L_i, M_i ($i=1, 2, \dots$) [16] некоторые из коэффициентов $\omega_{ijk}^{(\alpha)}$ обращаются в нуль. Это позволяет выделить характерные нелинейности в (7). Во втором порядке по (ξ_1, ξ_2, Δ) в двумерном уравнении разветвления присутствуют нелинейности следующего вида:

$$\omega_{110}^{(1)} \xi_1 \Delta + \omega_{110}^{(1)} \xi_1 \xi_2 + \omega_{300}^{(1)} \xi_1^3 + \omega_{111}^{(1)} \xi_1 \xi_2 \Delta + \omega_{120}^{(1)} \xi_1 \xi_2^2 + \omega_{102}^{(1)} \xi_1 \Delta^2 + o_3(\xi_1, \xi_2, \Delta) = 0, \\ \omega_{011}^{(2)} \xi_2 \Delta + \omega_{200}^{(2)} \xi_1^2 + \omega_{020}^{(2)} \xi_2^2 + \omega_{012}^{(2)} \xi_2 \Delta^2 + \omega_{002}^{(2)} \xi_2^2 \Delta + \omega_{201}^{(2)} \xi_1^2 \Delta + \\ + \omega_{210}^{(2)} \xi_1^2 \xi_2 + \omega_{030}^{(2)} \xi_2^3 + o_3(\xi_1, \xi_2, \Delta) = 0. \quad (8)$$

Система уравнений (8) для связанных параметров порядка ξ_1, ξ_2 является искомым уравнением состояния в окрестности мультикритической точки ПМ—ФМ—СС. Она дает информацию о возможных термодинамических фазах в окрестности мультикритической точки. ПМ состоянию соответствует решение $\xi_1 = \xi_2 = 0$, ФМ состоянию — решения вида $\xi_1 \neq 0, \xi_2 \neq 0$, СС состоянию — решения вида $\xi_1 = 0, \xi_2 \neq 0$.

Исходя из модели ШК в реплично-симметричном подходе, Сузуки ([18], формулы (3.2), (3.3)) построил феноменологические уравнения состояния для других величин: намагниченности и параметра порядка Эдвардса—Андерсона. Первые три члена в (8) по своей структуре совпадают с уравнениями состояния Сузуки. Однако уравнения (8) не являются феноменологическими. Они получены из микроскопического гамильтониана Изинга в приближении Бете—Пайерлса. Коэффициенты этого уравнения зависят от микроскопических характеристик системы. Кроме полярного угла δ на фазовой плоскости температура—концентрация спинов, они зависят от формы линий критических температур $\theta_c(\nu)$ и $\theta_g(\nu)$ в окрестности мультикритической точки. Последние в свою очередь несут информацию о координатной зависимости микроскопической обменной энергии $J(R_{ij})$ и пространственном распределении спинов.

Полученное выше двумерное уравнение разветвления (8) описывает локальную структуру дерева термодинамических состояний в окрестности

мультикритической точки ПМ—ФМ—СС и связывает поэтому два параметра разветвления из бесконечного множества ξ_i ($i=1, 2, \dots$). Между тем топология дерева термодинамических состояний сильно зависит от исследуемой области фазового пространства и для своего описания может потребовать более чем два параметра разветвления. Например, локальная структура дерева в окрестности точки $\nu=0, \theta=0$ в случае взаимодействия РККИ ([16], рис. 3) описывается бесконечным набором параметров разветвления ξ_i ($i=2, 4, 6, \dots$) и имеет довольно сложную структуру.

В связи с этим может возникнуть мысль о некоторой аналогии между множеством параметров разветвления ξ_i ($i=1, 2, \dots$) и параметром порядка Паризи $q(x)$ в ее дискретном представлении q_i ($i=0, 1, 2, \dots$). Параметры q_i ($i=0, 1, 2, \dots$) фиксируют точки ветвления (уровни иерархии) «ультраметрического» дерева Паризи и возникают в теории при параметризации матричного параметра порядка $Q_{\alpha\beta}$ (α, β — репличные индексы) в методе реплик нарушенной симметрии.

Следует, однако, заметить, что замечательное предположение (дерево) Паризи не является необходимым атрибутом теории среднего поля в методе реплик. Древоподобная схема параметризации Паризи вполне может быть заменена другой схемой, в том числе не имеющей вид дендрограммы.

Дерево же термодинамических состояний в методе флуктуирующих молекулярных полей возникает в теории отнюдь не аксиоматическим образом: оно содержится в основных уравнениях имеющей прозрачный физический смысл модели. Кроме того, дерево в методе флуктуирующих молекулярных полей определяется в пространстве экспериментально измеряемых физических величин, в то время как дерево Паризи строится на фиктивном пространстве реплик.

В способе появления дерева термодинамических состояний в теории СС заключено, по-видимому, главное преимущество метода флуктуирующих молекулярных полей по сравнению с методом реплик.

Список литературы

- [1] Coles B. R., Sarkissian B. V. B., Taylor R. H. // *Phil. Mag. B.* 1978. V. 37. N 4. P. 489—498.
- [2] Maletta H., Convert P. // *Phys. Rev. Lett.* 1979. V. 42. N 2. P. 108—111.
- [3] Salamon M. B., Rao K. V., Chen H. S. // *Phys. Rev. Lett.* 1980. V. 44. N 9. P. 596—599.
- [4] Nieuwenhuys G. J., Stocker H., Verbeek B. H., Mydosh J. A. // *Sol. St. Comm.* 1978. V. 27. N 3. P. 197—199.
- [5] Nieuwenhuys G. J., Verbeek B. H., Mydosh J. A. // *J. Appl. Phys.* 1979. V. 50. N 3. P. 1685—1690.
- [6] Shapiro S. M., Fincher C. R., Palumbo A. C., Parks R. D. // *Phys. Rev. B.* 1981. V. 24, N 11. P. 6661—6674.
- [7] Cowley R. A., Shirane G., Birgeneau R. J., Svensson E. C., Guggenheim H. J. // *Phys. Rev. B.* 1980. V. 22. N 9. P. 4412—4423.
- [8] Aeppli G., Shapiro S. M., Maletta H., Birgeneau R. J., Chen H. S. // *J. Appl. Phys.* 1984. V. 55. N 6. p. 1628—1633.
- [9] Murani A. P. // *Sol. St. Comm.* 1980. V. 34. N 8. P. 705—708.
- [10] Sherrington D., Kirkpatrick S. // *Phys. Rev. Lett.* 1975. V. 35. N 26. P. 1792—1795.
- [11] Оберхеттингер Ф. Преобразования Фурье распределений и их обращения. М.: Наука, 1979. 248 с.
- [12] Klein M. W., Brout R. // *Phys. Rev.* 1963. V. 132. N 6. P. 2412—2426.
- [13] Коренблит И. Я., Шендер Е. Ф. // *ЖЭТФ.* 1972. Т. 62. № 5. С. 1949—1962.
- [14] Гинзбург С. Л. // *ЖЭТФ.* 1976. Т. 74. № 1. С. 236—250.
- [15] Klein M. W., Schowalter L. J., Shukla P. // *Phys. Rev.* 1979. V. 19. N 3. P. 1492—1502.
- [16] Караджян Г. Н. // *ЖЭТФ.* 1980. Т. 78. № 2. С. 855—868.
- [17] Palmer R. G. // *Adv. Phys.* 1982. V. 31. N 6. P. 669—735.
- [18] Suzuki M. // *Progr. Theor. Phys.* 1977. V. 58. N 4. P. 1151—1165.

Поступило в Редакцию
2 января 1989 г.