05,11

Исследование модели Поттса разбавленного магнетика методом усреднения по локальным полям

© С.В. Сёмкин, В.П. Смагин

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса,
Владивосток, Россия

E-mail: Li15@rambler.ru

(Поступила в Редакцию 2 февраля 2016 г.)

Метод усреднения по локальным полям межатомного взаимодействия применен к модели Поттса разбавленного магнетика. Получено самосогласованное уравнение для определения намагниченности и уравнение для расчета температуры фазового перехода. Для решеток с координационными числами 3 и 4 найдена спонтанная намагниченность как функция температуры и концентрации магнитных атомов для различных значений числа состояний спина.

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.

1. Введение

Рассмотрим модель Поттса с немагнитными примесями на некоторой регулярной решетке с координационным числом q. Пусть каждый узел решетки занят магнитным атомом с вероятностью b или атомом немагнитной примеси с вероятностью $1-b$ независимо от заполнения других узлов; иными словами, будем рассматривать магнетик с вмороженными примесями. Каждому узлу, содержащему магнитный атом, поставим в соответствие величину σ_i („спин") которая может принимать s различных значений, скажем $1, 2, \dots, s$ [1]. 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 также есть внешнее поле H, которое действует на состояние 1. Тогда полная энергия системы равна

$$E = -J_p \sum_{(i,j)} \xi_i \xi_j \delta(\sigma_i, \sigma_j) - H \sum_i \xi_i \delta(\sigma_i, 1),$$

где ξ_i равны 1 для узлов, занятых магнитными атомами и равны нулю для узлов, занятых атомами примеси.

В работах [2,3] было установлено, что критическое поведение этой модели может зависеть от концентрации примесей, вплоть до того, что характер фазового перехода может измениться при определенной концентрации примесей. В работе [4] мы рассмотрели поведение модели Поттса разбавленного магнетика на решетке Бете в случае, когда немагнитные примеси распределены псевдохаотически. В настоящей работе мы предлагаем другой подход к исследованию критического поведения в модели Поттса разбавленного магнетика.

Рассмотрим некоторый узел решетки занятый магнитным атомом. Пусть $n_1, n_2, \dots, n_s$ количества атомов первой координационной сферы этого узла, находящихся в состоянии $1, 2, \dots, s$ соответственно. Все числа n_i являются случайными величинами, меняющимися от узла к узлу с совместной функцией распределения $W(n_1, n_2, \dots, n_s)$.

Будем исходить из соотношения

$$\left\langle \frac{e^{Kn_j + h\delta(j,1)}}{\sum\limits_i e^{Kn_i + h\delta(i,1)}} \right\rangle W = p_j, \qquad (1)$$

которое является обобщением формулы, приведенной в работе [5]. Здесь p_j — вероятность обнаружить магнитный атом в состоянии j, $K = J_p/kT$, $h = H/kT$ (k — постоянная Больцмана). Определим намагниченность для модели Поттса следующим образом [2]:

$$M = \frac{sp_1 - 1}{s - 1}.$$

Из этого определения и из условия нормировки $p_1 + \sum\limits_{i=2}^{s} p_i = 1$ получим

$$M = p_1 - \frac{1}{s-1} \sum_{i=2}^{s} p_i,$$

что, согласно (1), приводит к выражению

$$M = \left\langle \frac{e^{Kn_1 + h} - \frac{1}{s-1} \sum\limits_{i=2}^{s} e^{Kn_i}}{e^{Kn_1 + h} + \sum\limits_{i=2}^{s} e^{Kn_i}} \right\rangle_W. \qquad (2)$$

Для дальнейшего анализа необходимо построить функцию $W(n_1, n_2, \dots, n_s)$ по которой производится усреднение в правой части (2). Здесь возможны различные приближения. Например, можно заменить n_j их средними значениями, что приводит к приближению среднего поля, рассмотренному в [6]. В настоящей работе мы рассмотрим другое приближение, аналогичное использованному в [7,8] применительно к модели Изинга для разбавленного магнетика. А именно, будем строить функцию распределения $W(n_1, n_2, \dots, n_s)$, считая, что каждый магнитный атом первой координационной сферы может находиться в состоянии j с вероятностью p_j независимо от других атомов. Это приводит к функции распределения следующего вида:

$$W(n_1, n_2 \dots n_s) = \sum_{z=0}^{q} C_q^z b^z (1-b)^{q-z} \times \sum_{\{n_i\}} C_z^{n_1, n_2, \dots n_s} p_1^{n_1} p_2^{n_2} \dots p_s^{n_s}.$$

Здесь $C_q^z = \frac{q!}{z!(q-z)!}$ — биномиальные коэффициенты, а $C_z^{n_1,n_2,\dots n_s} = \frac{Z!}{n_1! n_2! \dots n_s!}$ — мультиномиальные коэффициенты.

Будем искать решение, в котором все p_i для $i > 1$ одинаковы и равны p. Тогда выражая p и p_1 через намагниченность M, получим из (2) самосогласованное уравнение для определения M

$$M = \sum_{z=0}^{q} C_q^z b^z (1-b)^{q-z} \times \sum_{n_1=0}^{z} C_z^{n_1} \left(M + \frac{1-M}{s}\right)^{n_1} \left(\frac{1-M}{s}\right)^{z-n_1} \Lambda_{z,s}^{n_1}(K, h), \tag{3}$$

$$\Lambda_{z,s}^{n_1}(K, h) = \sum_{\{n_i\}} C_{z-n_1}^{n_2,\dots n_s} \frac{e^{Kn_1+h} - \frac{1}{s-1}\sum_{i=2}^{s} e^{Kn_i}}{e^{Kn_1+h} + \sum_{i=2}^{s} e^{Kn_i}}.$$

При $h = 0$ уравнение (3) всегда имеет решение $M = 0$, которое является устойчивым при $K < K_c(b)$, что означает отсутствие спонтанной намагниченности при высоких температурах. Уравнение для $K_c(b)$ можно получить, приравнивая к 1 производную по M правой части (3) при $M = 0$

$$1 = \sum_{z=0}^{q} C_q^z b^z (1-b)^{q-z} \sum_{n_1=0}^{z} C_z^{n_1} \frac{n_1 s - z}{s^z} \Lambda_{z,s}^{n_1}\big(K_c(b), 0\big). \tag{4}$$

При $K = K_c(b)$ происходит (при $s > 2$) скачкообразное увеличение спонтанной намагниченности M (фазовый переход 1-го рода). При $s = 2$, что соответствует модели Изинга, фазовый переход является переходом 2-го рода.

2. Решетки с координационными числами 3 и 4

При $q = 3$ из основного уравнения (3) получим уравнение для намагниченности для шестиугольной решетки.

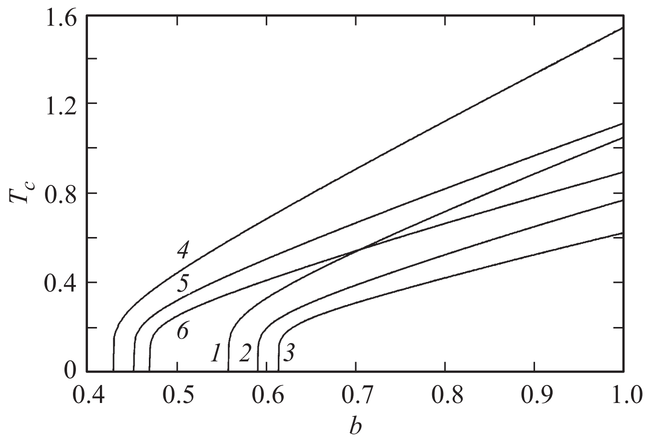

Рис. 1. Зависимость критической температуры от концентрации магнитных атомов. Кривые *1, 2* и *3* построены для координационного числа $q = 3$; кривые *4, 5, 6* — для $q = 4$. Количество состояний спина $s = 2$ для кривых *1* и *4*, $s = 3$ для кривых *2* и *5* и $s = 4$ для кривых *3* и *6*.

Это уравнение имеет достаточно громоздкий вид, но существенно упрощается в пределе $K \to \infty$ (то есть, при нулевой температуре). Полагая внешнее поле равным нулю, получим

$$M_0 = M_0 \left(-\frac{s-1}{s} M_0^2 + \frac{s-2}{s} M_0 + \frac{1}{s}\right) \left(\frac{b}{1-b}\right)^3. \tag{5}$$

Решение $M_0 = 0$ является устойчивым решением этого уравнения только при $b < b_c$, где b_c определяется из условия $s = \left(\frac{b_c}{1-b_c}\right)^3$, то есть

$$b_c = \frac{\sqrt[3]{s}}{1 + \sqrt[3]{s}}. \tag{6}$$

Величина b_c по смыслу является порогом протекания для решетки с координационным числом 3. Конечно, порог протекания по своему определению не может зависеть от числа состояний спина s, однако, в рамках рассматриваемого метода мы получаем именно такой результат. На рис. 1 приведены температуры фазового перехода $T_c(b) = 1/K_c(b)$, найденные из (4), в зависимости от концентрации магнитных атомов b (кривые *1, 2* и *3* построены для $q = 3$ для числа состояний спина 2, 3 и 4 соответственно). Видно, что функция $T_c(b)$ имеет бесконечную производную при $b = b_c$ и является практически линейной при b, близких к 1.

При $b > b_c$ спонтанная намагниченность, согласно (5), определяется выражением

$$M_0 = \frac{s - 2 + \sqrt{s^2 - 4(s-1)s\left(\frac{1-b}{b}\right)^3}}{2(s-1)}. \tag{7}$$

При $b = b_c$ величина M_0 скачком возрастает от нуля до значения $\Delta M_0 = \frac{s-2}{s-1}$. На рис. 2 показаны графики функций $M_0(b)$ для значений s, равных 2, 3 и 4 (кривые *1, 2*

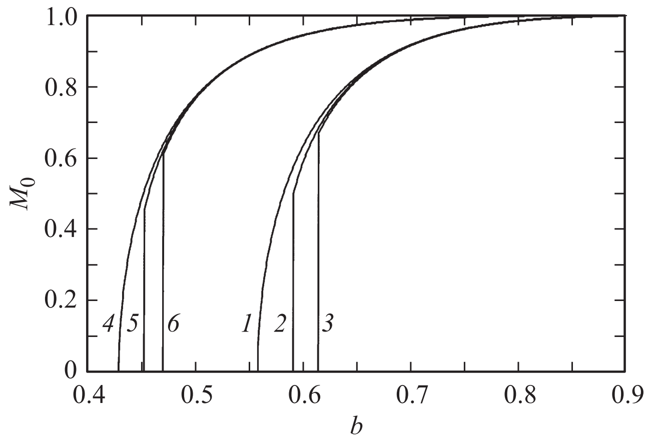

Рис. 2. Зависимость спонтанной намагниченности от концентрации магнитных атомов при нулевой температуре. Кривые *1, 2* и *3* построены для координационного числа $q = 3$; кривые *4, 5, 6* — для $q = 4$. Количество состояний спина $s = 2$ для кривых *1* и *4*, $s = 3$ для кривых *2* и *5* и $s = 4$ для кривых *3* и *6*.

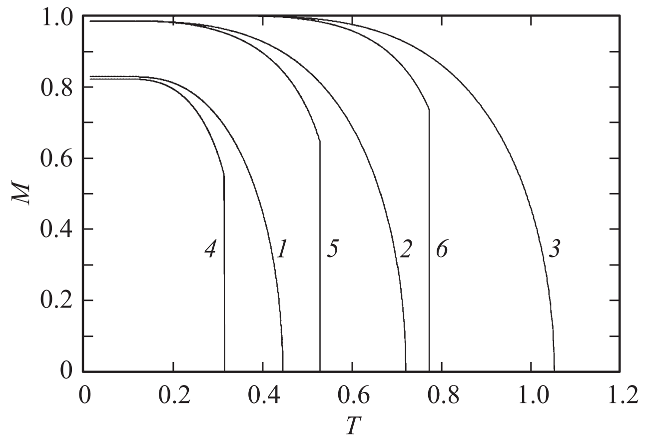

Рис. 3. Зависимость спонтанной намагниченности от температуры для разбавленного магнетика с координационным числом решетки $q = 3$. Кривые *1, 2* и *3* построены для $s = 2$ (модель Изинга) при концентрациях магнитных атомов 0.65, 0.8 и 1.0 соответственно. Кривые *4, 5* и *6* — для $s = 3$ при тех же значениях концентрации.

и *3* соответственно). Видно, что кривые фактически совпадают при больших значениях концентрации b, но заметно различаются вблизи перколяционных порогов.

На рис. 3 показана температурная зависимость спонтанной намагниченности при различных концентрациях b и числах состояний спина s. Из рисунка видно, что при $s = 2$ (модель Изинга) фазовый переход является переходом второго рода, а при $s = 3$ — первого рода. Хотя мы не получили изменение характера фазового перехода при уменьшении концентрации магнитных атомов, как это было обнаружено в [2] и [3], но все же, величина скачка намагниченности в критической точке уменьшается с уменьшением b.

Для $q = 4$ из (3) получим при $K \to \infty$ уравнение для спонтанной намагниченности при нулевой температуре

$$(1-b)^4 = 4b^3(1-b)\left(-\frac{s-1}{s}M_0^2 + \frac{s-2}{s}M_0 + \frac{1}{s}\right) + b^4\left(\frac{2(s-2)(s-1)}{s^2}M_0^3 - \frac{5s^2-15s+12}{s^2}M_0^2 + \frac{3(s-2)^2}{s^2}M_0 + \frac{3s-4}{s^2}\right). \tag{8}$$

Это уравнение имеет решение для $b > b_c$, которое, в свою очередь, определяется из уравнения

$$(1-b_c)^4 = 4b_c^3(1-b_c)\,\frac{1}{s} + \frac{3s-4}{s^2}\,b_c^4. \tag{9}$$

Как и в случае $q = 3$, перколяционный порог b_c оказывается зависящим от s. Для $s = 2$ уравнение (8) сводится к явной зависимости

$$M_0(b) = \sqrt{1 - \frac{2(1-b)^4}{4b^3(1-b) + b^4}}. \tag{10}$$

График этой функции, а так же решение (8) при $s = 3$ и 4 показаны на рис. 2 (кривые *4, 5* и *6* соответственно); видно, что величина скачка при $b = b_c$ растет с ростом s. Зависимости температуры фазового перехода от концентрации и спонтанной намагниченности от температуры и концентрации при $q = 4$ аналогичны соответствующим зависимостям для $q = 3$ (рис. 1 и 3).

Список литературы

[1] Р. Бэкстер. Точно решаемые модели в статистической механике. Мир, М. (1985). 486 с.
[2] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Азнаурова. ФТТ **50**, *4*, 703 (2008).
[3] C. Chatelain, B. Berche, W. Janke, P.-E. Berche. Nucl. Phys. B **719/3**, 275 (2005).
[4] С.В. Сёмкин, В.П. Смагин. ЖЭТФ **148**, *9*, 729, (2015).
[5] H.B. Callen. Phys. Lett. **4**, 161 (1963).
[6] С.В. Сёмкин, В.П. Смагин. ФТТ **56**, *12*, 2341 (2014).
[7] В.И. Белоконь, С.В. Семкин. ЖЭТФ **102**, 1254 (1992).
[8] T. Kaneyoshi. Physica A **218**, *1–2*, **46** (1995).