

05,11

Использование метода усреднения по полям взаимодействия для построения ренормгруппового преобразования фиксированного масштаба

© С.В. Сёмкин, В.П. Смагин

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса,
Владивосток, Россия

E-mail: Li15@rambler.ru

(Поступила в Редакцию 17 октября 2012 г.)

Рассмотрено применение метода усреднения по полям обменного взаимодействия к кластерам из двух магнитных атомов в модели Изинга на простых решетках и построен вариант ренормгруппового преобразования фиксированного масштаба. Рассмотрено применение этих методов к изинговскому магнетизму на квадратной решетке с анизотропным взаимодействием.

1. Введение

В работах [1,2] предложен метод усреднения по полям взаимодействия, с помощью которого можно находить критические точки и макроскопические параметры в различных системах взаимодействующих частиц. В [1,2] исследовано критическое поведение разбавленных магнетиков как с замороженными немагнитными примесями, так и с примесями, находящимися в термодинамическом равновесии с матрицей. В работе [3] методом усреднения по полям взаимодействия исследованы аморфные магнетики и спиновые стекла. Целью настоящей работы является дальнейшее развитие метода усреднения по обменным полям путем применения его к кластерам магнитных атомов и построения ренормгруппового преобразования на этой основе. Возможность такого развития метода мы покажем на примере изинговского магнетика с изотропным и анизотропным взаимодействием.

2. Метод усреднения по обменным полям

Гамильтониан обобщенной модели Изинга имеет вид [4]

$$E = - \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - H_{ex} \sum_i \sigma_i. \quad (1)$$

Здесь σ_i — изинговские переменные, принимающие значения $+1$ и -1 , J_{ij} — константы, определяющие величину обменного взаимодействия, H_{ex} пропорциональна внешнему магнитному полю.

В работе [5] получено выражение

$$\langle \sigma_i \rangle = \langle \text{th} \beta H_i \rangle, \quad (2)$$

где

$$H_i = \sum_j J_{ij} \sigma_j + H_{ex} \quad (3)$$

сумма обменного и внешнего полей, а $\langle \dots \rangle$ — усреднение по ансамблю —

$$\langle A \rangle = \frac{\sum A \exp(-\beta E)}{\sum \exp(-\beta E)}$$

$\beta = 1/kT$, k — постоянная Больцмана.

Формулу (2) можно рассматривать как основу для приближенных способов нахождения $\langle \sigma_i \rangle$ для системы с гамильтонианом (1). Например, если правую часть (2) заменить на

$$\text{th} \beta \langle H_i \rangle = \text{th} \beta \left(\sum_j J_{ij} \langle \sigma_j \rangle + H_{ex} \right)$$

и считать $\langle \sigma_i \rangle = \langle \sigma_j \rangle = m$, получим известное приближение среднего поля. Если $J_{ij} = J$ для ближайших соседей и нулю для всех остальных пар атомов,

$$m = \text{th}(qKm + \beta H_{ex}), \quad (4)$$

где $K = \beta J$, а q — число ближайших соседей каждого узла (координационное число). Как известно, ненулевое решение (4) при $H_{ex} = 0$ существует, если $K > K_c = 1/q$.

Усреднение в правой части (2) является, в сущности, усреднением по функции распределения полей (3), состоящих из поля обменного взаимодействия $H_{in} = \sum_j J_{ij} \sigma_j$ и внешнего поля H_{ex} . В работе [1] предложен метод нахождения m , основанный на приближенном вычислении функции распределения полей обменного взаимодействия H_{in} . Величины σ_j , входящие в выражение для H_{in} , рассматриваются как независимые случайные переменные, принимающие значения $+1$ и -1 с вероятностями $(1+m)/2$ и $(1-m)/2$ соответственно. Применив эту процедуру для решеточной модели с координационным числом q , и $J_{ij} = J$ для ближайших соседей и нулю для всех остальных пар атомов, получим при отсутствии внешнего поля следующее уравнение для намагниченности m :

$$\sum_{i=0}^N C_q^i (1-m^2)^i \left(\sum_{j=0}^{N-i} m^{2j} C_{q-2i}^{2j+1} \right) \text{th} K(q-2i) = 2^{q-1}, \quad (5)$$

Точные и приближенные значения критических точек изинговских магнетиков

q	Точные значения K_c для плоских решеток	K_c для решетки Бете	Метод среднего поля		Метод усреднения по обменным полям		Ренормгрупповое преобразование
			$n = 1$	$n = 2$	$n = 1$	$n = 2$	
3	0.658	0.549	0.333	0.369	0.475	0.503	0.630
4	0.370 (тет.) 0.441 (кв.)	0.347	0.250	0.263	0.324	0.331	0.358
6	0.214 (куб.) 0.275 (тр.)	0.203	0.167	0.171	0.197	0.198 0.201	0.206 0.243

где $N = \left[\frac{q-1}{2} \right]$. Уравнение для критического значения K_c получается из (5) и имеет вид

$$\sum_{i=0}^N C_q^i (q-2i) \operatorname{th} K_c (q-2i) = 2^{q-1}. \quad (6)$$

Решения этого уравнения для координационных чисел 3, 4 и 6 приведены в таблице.

Рассмотрим квадратную решетку ($q = 4$). У такой решетки есть два различных направления: „горизонтальное“ и „вертикальное“. Будем считать, что константа обменного взаимодействия для двух соседних горизонтальных атомов равна $J_1 = (1 + \varepsilon)J$, для двух соседних вертикальных $J_2 = (1 - \varepsilon)J$ и $J_{ij} = 0$ для всех остальных пар атомов. Параметр ε определяет степень анизотропии — при $\varepsilon = 0$ анизотропия отсутствует, а при $\varepsilon = \pm 1$ квадратная решетка распадается на не связанные между собой горизонтальные или вертикальные линейные цепочки атомов. Точное значение критической точки как

функции для этой модели находится из уравнения [4]

$$\operatorname{sh}(2(1 + \varepsilon)K_c) \operatorname{sh}(2(1 - \varepsilon)K_c) = 1. \quad (7)$$

Среднее значение обменного поля $\langle H_i \rangle = 2(1 + \varepsilon)Jm + 2(1 - \varepsilon)Km = 4Jm$ не зависит от параметра анизотропии ε , а значит в приближении среднего поля $K_c(\varepsilon) = 1/4$. Если же использовать процедуру усреднения по обменным полям, то для $K_c(\varepsilon)$ получим следующее уравнение:

$$\operatorname{th} 4K_c + \operatorname{th} 2(1 + \varepsilon)K_c + \operatorname{th} 2(1 - \varepsilon)K_c = 2. \quad (8)$$

Функция $\Theta_c(\varepsilon) = 1/K_c(\varepsilon)$, определяемая из (8), приведена на рисунке (кривая 5). Кривая 1 на этом рисунке соответствует точному решению (7).

3. Кластер из двух атомов

Соотношение (2) можно обобщить следующим образом. Рассмотрим кластер, состоящий из n атомов. Гамильтониан системы атомов, входящих в кластер, получается из (1) и выглядит так:

$$E_n = - \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum H_{in}^i \sigma_i - H_{ex} \sum \sigma_i. \quad (9)$$

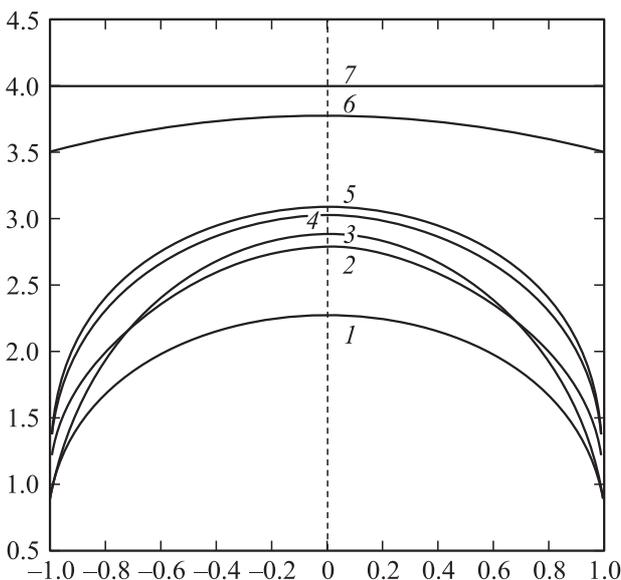
Суммирование в первом слагаемом этого выражения производится по парам входящих в кластер атомов, являющихся ближайшими соседями. Второе слагаемое в (9) описывает взаимодействие атомов кластера с их ближайшими соседями, не входящими в кластер, а третье — с внешним полем. Поля обменного взаимодействия H_{in}^i вычисляются для каждого атома кластера суммированием изинговских переменных, соответствующих внешним атомам, соседним к данному.

Усредним величину $\sum_n \sigma_i$ по ансамблю с гамильтонианом (9), рассматривая H_{in}^i как постоянные:

$$s_n = \frac{\sum \left(\sum_n \sigma_i \right) \exp(-\beta E_n)}{\sum \exp(-\beta E_n)}. \quad (10)$$

Усредняя теперь это выражение по всей решетке и предполагая, что $\langle \sigma_i \rangle = \langle s_n \rangle = m$, получим

$$m = \left\langle \frac{\sum \left(\sum_n \sigma_i \right) \exp(-\beta E_n)}{\sum \exp(-\beta E_n)} \right\rangle. \quad (11)$$



Температура Кюри как функция параметра анизотропии. 1 — точное решение, 2 — ренормгруппа усреднения по полям взаимодействия, 3 — ренормгруппа среднего поля, 4 — кластер из двух пар атомов (усреднение по полям), 5 — единичный атом, усреднение по полям, 6 — среднее поле, кластер из двух пар атомов, 7 — среднее поле, единичный атом

Усреднение в правой части (11) проводится по совместной функции распределения полей обменного взаимодействия H_{in}^i ; формулу (2) можно рассматривать как частный случай (11), когда кластер состоит из одного атома.

Аналогично формуле (2), соотношение (11) можно использовать для построения приближенных методов вычисления намагниченности m — заменяя поля H_{in}^i их средними значениями, как в методе среднего поля, или производя усреднение в (11) по приближенной функции распределения полей обменного взаимодействия.

Рассмотрим кластер, состоящий из двух соседних атомов на решетке с координационным числом q . В отсутствие внешнего поля и в случае, когда рассматривается изотропная модель с взаимодействием только между ближайшими соседями, гамильтониан (9) для этого кластера имеет вид

$$E_2 = -J(\sigma_1\sigma_2 + h_1\sigma_1 + h_2\sigma_2). \quad (12)$$

Вычисляя средний спин по кластеру (10), получим

$$s_2 = \frac{\text{sh}K(h_1 + h_2)}{\text{ch}K(h_1 + h_2) + e^{-2K}\text{ch}K(h_1 - h_2)}. \quad (13)$$

По методу среднего поля h_1 и h_2 в этом выражении нужно заменить их средними значениями, равными $(q-1)m$, и приравнять s_2 намагниченности m

$$m = \frac{\text{sh}2(z-1)Km}{\text{ch}2(q-1)Km + \exp(-2K)}. \quad (14)$$

Отсюда получаем уравнение для критической точки

$$2(q-1)K_c = 1 + e^{-2K_c}. \quad (15)$$

Решения (15) при $q = 3, 4$ и 6 указаны в таблице.

Для вычисления m и K_c методом усреднения по обменным полям левую часть (13) нужно приравнять m , а правую усреднить по функции распределения полей обменного взаимодействия $W_2(h_1, h_2)$, вычисленную в предположении, что спины всех соседних к кластеру атомов статистически независимы. 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 другом случае может оказаться, что некоторые 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,

$$W_2(h_1, h_2) = W_1(h_1)W_1(h_2)$$

и

$$W_1(h) = \sum_{i=0}^{q-1} C_{q-1}^i \left(\frac{1+m}{2}\right)^i \left(\frac{1-m}{2}\right)^{q-1-i} \times \delta(h+q-2i-1). \quad (16)$$

Во втором случае $h_{1,2} = h'_{1,2} + h_{com}$, где h_{com} — обменное поле, созданное атомами, соседними одновременно к обоим атомам кластера. Поля h'_1, h'_2 и h_{com} статистически независимы и имеют биномиальные распределения, аналогичные (16).

Продлав описанную выше процедуру для решеток с координационными числами 3, 4 и 6, получим критические точки, приведенные в таблице. Для $q = 6$ в таблице указано два значения — первое для независимых полей h_1 и h_2 (кубическая решетка или решетка Бете), второе для случая, когда у атомов кластера есть два общих соседа (треугольная решетка).

Как и в предыдущем пункте, рассмотрим плоскую квадратную решетку с анизотропным обменным взаимодействием. Возьмем два кластера, состоящие из двух соседних атомов каждый. Атомы первого кластера расположены горизонтально, а второго — вертикально. Предполагая, что кластеры находятся достаточно далеко друг от друга, так что можно считать обменные поля, действующие на атомы одного кластера, независимыми от полей, действующих на атомы другого, и используя метод среднего поля, получим выражение для $K_c(\varepsilon)$

$$\frac{(3-\varepsilon)K_c}{1 + \exp(-2(1+\varepsilon)K_c)} + \frac{(3+\varepsilon)K_c}{1 + \exp(-2(1-\varepsilon)K_c)} = 1. \quad (17)$$

Вычисление температуры Кюри $\Theta_c(\varepsilon) = 1/K_c(\varepsilon)$ по этой формуле дает кривую 6 на рисунке. Применение к такому парному кластеру процедуры усреднения по полям обменного взаимодействия дает кривую 4.

4. Ренормгрупповое преобразование фиксированного масштаба

Рассмотрение кластеров различного размера также может быть использовано для построения ренормгруппового преобразования, аналогично [6,7]. Средние значения спинов $\langle s_n \rangle$ (10) (параметры порядка) являются функциями $\langle \sigma_i \rangle = m$ — средней намагниченности атомов, окружающих кластер. Рассматривая два кластера, содержащих n и \tilde{n} атомов, и предполагая скейлинговые свойства параметров $\langle s_n \rangle$ и m одинаковыми, получим, что в критической точке при отсутствии внешнего поля должно выполняться равенство

$$\left. \frac{\partial \langle s_n \rangle}{\partial m} \right|_{m=0} = \left. \frac{\partial \langle s_{\tilde{n}} \rangle}{\partial \tilde{m}} \right|_{\tilde{m}=0}. \quad (18)$$

Рассмотрим кластеры из одного и двух атомов на решетке с координационным числом q . Вычисляя $\langle s_1 \rangle$ и $\langle s_2 \rangle$ по методу среднего поля и подставляя в (18), получим

$$qK_c = \frac{2(q-1)K_c}{1 + \exp(-2K_c)},$$

откуда

$$K_c = \frac{1}{2} \ln \frac{q}{q-2}, \quad (19)$$

что совпадает с критической точкой для решетки Бете [4].

Если $\langle s_1 \rangle$ и $\langle s_2 \rangle$ вычислить методом усреднения по обменным полям, из (18) получим

$$f_1(K_c) = f_2(K_c),$$

где $f_1(K_c) = \frac{1}{2^q} \sum_{i=0}^q C_q^i (q-2i) \text{th} K_c (q-2i)$ и

$$f_2(K_c) = \frac{1}{2^{2q-3}} \sum_{i=0}^{q-1} \sum_{j=0}^{q-1} C_{q-1}^i C_{q-1}^j ((q-1) - (i+j)) \times \frac{\text{sh}(2K_c((q-1) - (i+j)))}{\text{ch}(2K_c((q-1) - (i+j))) + e^{-2K_c} \text{ch}(2K_c(i-j))}$$

в случае, когда первые координационные сферы атомов кластера не перекрываются (за исключением, разумеется, самих атомов кластера). Если же есть t таких атомов, которые являются соседями к обоим атомам кластера, то

$$f_2(K_c) = \frac{1}{2^{2q-3}} \sum_{i=0}^z \sum_{j=0}^z \sum_{r=0}^t C_z^i C_z^j C_t^r (h_1 + h_2 + h_{12}) \times \frac{\text{sh}(K_c(h_1 + h_2 + 2h_{12}))}{\text{ch}(K_c(h_1 + h_2 + 2h_{12})) + e^{-2K_c} \text{ch}(K_c(h_{h_1-h_2}))},$$

где $z = q-1-t$, $h_1 = 2i-z$, $h_2 = 2j-z$, $h_{12} = 2r-t$. Решения (20) приведены в таблице.

Рассматривая квадратную решетку с анизотропным обменным взаимодействием, можно вычислить $\Theta_c(\varepsilon) = 1/K_c(\varepsilon)$, с помощью (18). Используя в (18) метод среднего поля, получим следующее выражение, неявно определяющее $K_c(\varepsilon)$:

$$\frac{(3-\varepsilon)}{1 + \exp(-2(1+\varepsilon)K_c)} + \frac{(3+\varepsilon)}{1 + \exp(-2(1-\varepsilon)K_c)} = 4.$$

График соответствующей этому случаю $\Theta_c(\varepsilon)$ приведен на рисунке (кривая 3). Если же использовать в (18) метод усреднения по обменным полям, получим функцию $\Theta_c(\varepsilon)$, график которой — кривая 2.

5. Выводы

1. Применение метода усреднения по обменным полям к кластеру из двух магнитных атомов приводит к более точным значениям критической температуры, чем использование этого метода для одного атома (таблица и рисунок — кривые 4 и 5).

2. Метод усреднения по обменным полям дает более точные значения критической температуры, чем метод среднего поля, примененный к кластерам с тем же числом атомов (таблица и рисунок — кривые 7 и 5 и кривые 6 и 4).

3. Использование метода усреднения по обменным полям для кластера из двух атомов позволяет точнее учесть геометрию решетки — для решеток с одинаковым координационным числом (треугольной и кубической) получаются разные результаты (таблица).

4. Ренормгрупповое преобразование фиксированного масштаба, построенное с помощью метода усреднения по обменным полям, дает для критической точки наиболее точные значения по сравнению с остальными рассмотренными методами (таблица, кривая 2 на рисунке).

5. Для квадратной решетки с сильно анизотропным обменным взаимодействием из всех рассмотренных нами методов наиболее близкие к точным результаты дает ренормгрупповое преобразование, построенное с помощью метода среднего поля (кривая 3 на рисунке).

Список литературы

- [1] В.И. Белоконов, С.В. Семкин. ЖЭТФ **102**, 1254 (1992).
- [2] В.И. Белоконов, С.В. Семкин. ЖЭТФ **104**, 3784 (1993).
- [3] В.И. Белоконов, К.В. Нефедев. ЖЭТФ **120**, 156 (2001).
- [4] Р. Бэкстер. Точно решаемые модели в статистической механике, Мир, М. (1985), 486 с.
- [5] H.V. Callen. Phys. Lett. **4**, 161 (1963).
- [6] Л.А. Серков. ТМФ **92** 1, 92 (1992).
- [7] J.O. Indekeu, A. Maritan, A.L. Stella. J. Phys. A **15**, 291 (1982).