УДК 531.19

Сёмкин Сергей Викторович, Смагин Виктор Павлович

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса
Владивосток, Россия

Метод среднего поля и метод усреднения по обменным полям для кластеров магнитных атомов

Рассмотрено применение методов среднего поля и усреднения по обменным полям к кластерам из одного и нескольких атомов в модели Изинга на простой решетке и предложен вариант метода ренормгруппы с использованием преобразований фиксированного масштаба.

Ключевые слова и словосочетания: *фазовые переходы, ренормгрупповой метод, модель Изинга.*

Для теоретического исследования магнитных фазовых переходов часто применяют модель Изинга [1], которую можно использовать также для исследования как решеточных, так и аморфных [2] магнетиков. Гамильтониан обобщенной модели Изинга имеет вид:

$$E = -\sum J_{ij}\sigma_i\,\sigma_j - H_{ex}\sum \sigma_i, \tag{1}$$

где σ_i – изинговские переменные, принимающие значения +1 и -1. (В моделях магнетиков эти переменные связаны с проекцией магнитного момента на выделенную ось.)

J_{ij} – константы, определяющие величину обменного взаимодействия,

H_{ex} – пропорциональна внешнему магнитному полю.

В решеточных моделях J_{ij} обычно принимается равной J для ближайших соседей и равной 0 для всех остальных пар атомов.

В работе [3] получено выражение:

$$\langle\sigma_i\rangle = \langle \mathrm{th}\beta H_i\rangle, \tag{2}$$

где

$$H_i = \sum J_{ij}\,\sigma_j + H_{ex}, \tag{3}$$

$\langle\ldots\rangle$ – 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 $\text{th}\beta\langle H_i\rangle = \text{th}\beta(\sum J_{ij}\langle\sigma_j\rangle + H_{ex})$ и считать $\langle\sigma_i\rangle = \langle\sigma_j\rangle = m$, получим так называемое приближение среднего поля:

$$m = \text{th}\beta(m\sum J_{ij} + H_{ex}).$$

Для решеточных моделей эту формулу можно записать так:

$$m = \text{th}(zKm + \beta H_{ex}) \tag{4}$$

где $K = \beta J$, а z – число ближайших соседей каждого узла (координационное число).

Усреднение в правой части (2) является, в сущности, усреднением по функции распределения полей (3), состоящих из поля обменного взаимодействия $H_{in} = \sum J_{ij}\sigma_j$ и внешнего поля H_{ex}. В работе [4] 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 z, получим при отсутствии внешнего поля следующее уравнение для намагниченности m

$$\sum_{i=0}^{\left[\frac{z-1}{2}\right]} C_z^i(1-m^2)^i\left(\sum_{j=0}^{N-i} m^{2j}C_{z-2i}^{2j+1}\right) thK(z-2i) = 2^{z-1}. \tag{5}$$

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

$$E_n = -J\sum\sigma_i\sigma_j - \sum H_{in}^i\sigma_i - H_{ex}\sum\sigma_i. \tag{6}$$

Суммирование в первом слагаемом этого выражения производится по парам входящих в кластер атомов, являющихся ближайшими соседями. Второе слагаемое в (6) 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 $\frac{\sum\sigma_i}{n}$ по ансамблю с гамильтонианом (6), рассматривая H_{in}^i как постоянные:

$$s_n = \frac{\sum\left(\frac{\sum\sigma_i}{n}\right)\exp(-\beta E_n)}{\sum\exp(-\beta E_n)}. \tag{7}$$

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

$$m = \left\langle\frac{\sum\left(\frac{\sum\sigma_i}{n}\right)\exp(-\beta E_n)}{\sum\exp(-\beta E_n)}\right\rangle. \tag{8}$$

Усреднение в правой части (8) проводится по совместной функции распределения полей обменного взаимодействия H_{in}^{i}; формулу (6) можно рассматривать как частный случай (8), когда кластер состоит из одного атома.

Аналогично формуле (6) соотношение (8) можно использовать как основу для приближенных методов вычисления намагниченности m, заменяя поля H_{in}^{i} их средними значениями, как в методе среднего поля или производя усреднение в (8) по приближенной функции распределения полей обменного взаимодействия.

Модель Изинга является одним из теоретических инструментов для исследования систем с коллективным взаимодействием. В некоторых случаях [1] эта модель допускает получение точных результатов. Но эти случаи немногочисленны и не охватывают важных для физики конденсированных сред систем, таких, как разбавленные или аморфные магнетики, спиновые стекла и т.д. Кроме того, и сама модель Изинга представляется не вполне адекватной для описания многих реальных систем с коллективным взаимодействием. Однако с помощью приближенных методов, основанных на использовании среднего поля или на усреднении по полям обменного взаимодействия, можно получить определенные результаты и в тех случаях, когда модель Изинга не допускает точного решения, или в тех, когда вместо гамильтониана (1) используется другой, более сложный гамильтониан с парным взаимодействием.

В связи с этим представляется разумным сравнить результаты, получаемые приближенными методами, с точными в тех случаях, когда последние существуют. В таблице 1 (первый столбец) приведены точные значения $K_c = J/kT_c$ (T_c – температура Кюри) для модели Изинга на плоских и объемных решетках с координационным числом z ($z = 3$ – шестиугольная, $z = 4$ – квадратная и тетраэдрическая, $z = 6$ – треугольная и простая кубическая). Модель Изинга также может быть точно решена для решетки Бете – графа без замкнутых путей с координационным числом z [1]. Соответствующие этому решению значения K_c приведены во втором столбце табл. 1.

В данной работе мы вычисляем K_c для простых решеток с координационными числами 3, 4 и 6 как с помощью метода среднего поля, так и с помощью усреднения по полям взаимодействия для кластеров различной величины. Рассмотрение кластеров различного размера может быть использовано для построения ренормгруппового преобразования (аналогично [5]), но эта задача выходит за рамки данной работы.

Для кластера, состоящего из одного атома в решетке с координационным числом z, значение K_c в приближении среднего поля находится из (4) и равно $1/z$. При использовании метода усреднения по обменным полям уравнение для критического значения K_c получается из (5) и имеет вид:

$$\sum_{i=0}^{\left[\frac{z-1}{2}\right]} C_z^i (z-2i)\, thK_c(z-2i) = 2^z. \tag{9}$$

Решения этого уравнения для координационных чисел 3, 4 и 6 приведены в пятом столбце табл. 1.

Рассмотрим кластер, состоящий из двух соседних атомов на решетке с координационным числом z. В отсутствии внешнего поля гамильтониан (6) для этого кластера имеет вид:

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

Вычисляя средний спин по кластеру согласно (7), получим:

$$s_2 = \frac{\mathrm{sh}K(h_1+h_2)}{\mathrm{ch}K(h_1+h_2)+\mathrm{e}^{-2K}\mathrm{ch}K(h_1-h_2)}. \tag{10}$$

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

$$m = \frac{\mathrm{sh}2(\mathrm{z}-1)Km}{\mathrm{ch}2(\mathrm{z}-1)Km+\mathrm{e}^{-2K}}\,. \tag{11}$$

Отсюда получаем уравнение для критической точки:

$$2(\mathrm{z}-1)K_c = 1 + \mathrm{e}^{-2K_c}. \tag{12}$$

Решения (12) при $z = 3, 4$ и 6 указаны в таблице 1 (четвертый столбец).

Для вычисления m и K_c методом усреднения по обменным полям левую часть (10) нужно приравнять m, а правую усреднить по функции распределения полей обменного взаимодействия $W_2(h_1, h_2)$, вычисленной 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 ($z = 3$), для квадратной или тетраэдрической ($z = 4$) и для кубической ($z = 6$). В другом случае может оказаться, что атомы, соседние к одному узлу кластера, одновременно являются соседними и к его второму узлу. Например, так будет для плоской треугольной решетки ($z = 6$). В первом случае поля h_1 и h_2 являются (в рамках метода усреднения по обменным полям) статистически независимыми

$$W_2(h_1, h_2) = W_1(h_1)W_1(h_2) \text{ и}$$

$$W_1(h) = \sum_{i=0}^{z-1} C_{z-1}^i \left(\frac{1+m}{2}\right)^i \left(\frac{1-m}{2}\right)^{z-1-i} \delta(h + z - 2i - 1). \tag{13}$$

Во втором случае $h_{1,2} = h'_{1,2} + h_{12}$, где h_{12} – обменное поле, созданное атомами, соседними одновременно к обоим атомам кластера. Поля

h_1', h_2' и h_{12} статистически независимые и имеют биноминальные распределения, аналогичные (13).

Проделав описанную выше процедуру для решеток с координационными числами 3, 4 и 6, получим критические точки, приведенные в табл. 1 (шестой столбец). Для $z = 6$ 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 (плоская треугольная решетка).

Таблица 1

z	Точные значения K_c для модели Изинга	K_c для решетки Бете	Метод среднего поля		Метод усреднения по обменным полям	
			$n = 1$	$n = 2$	$n = 1$	$n = 2$
3	0,658 (шестиугольная)	0,549	0,333	0,369	0,475	0,503
4	0,441 (квадратная) 0,370 (тетраэдрич.)	0,347	0,250	0,263	0,324	0,331
6	0,275 (треугольная) 0,222 (кубическая)	0,203	0,167	0,171	0,197	0,198 0,201

1. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике / Р. Бэкстер. – М.: Мир, 1985. – 486 с.

2. Белоконь В.И. Функция распределения случайных полей взаимодействия в неупорядоченных магнетиках. Спиновое и макроспиновое стекло / В.И. Белоконь, К.В. Нефедев // ЖЭТФ. – 2001. Т. 120, Вып 1(7). – С. 156 – 163.

3. Callen H.B. Phys. Lett. – 1963. – V. 4. – P. 161 – 175.

4. Белоконь В.И. Метод случайного поля в модели Изинга разбавленного ферромагнетика / В.И. Белоконь, С.В. Семкин // ЖЭТФ. – 1992. – Т. 102. – Вып 4(10). – С. 1254 – 1258.

5. Серков Л.А. Преобразование фиксированного масштаба с близкодействующими спиновыми корреляциями / Л.А. Серков // ТМФ. – 1992. – Т. 92. – № 1. – С. 92 – 97.