

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Владивостокский государственный университет экономики и сервиса»

На правах рукописи

**СЁМКИН Сергей Викторович**

**Методы усреднения по обменным полям в исследовании  
магнитных состояний чистых и разбавленных магнетиков**

Специальность 01.04.02. – Теоретическая физика

Диссертация  
на соискание учёной степени  
доктора физико-математических наук

Научный консультант:  
д.ф.-м.н., доцент  
Смагин Виктор Павлович

Владивосток – 2021

## Оглавление

Введение.....	4
Глава 1. Модели магнетиков и методы их анализа.....	8
1.1. Дискретная модель с парным взаимодействием на регулярной решетке.....	8
1.2. Решение для решетки Бете.....	13
1.3. Усреднение по полям взаимодействия.....	15
1.4. Кластеры взаимодействующих спинов.....	21
1.5. Усреднение по полям взаимодействия для разбавленных магнетиков.....	25
Глава 2. Одномерная цепочка изинговских спинов.....	30
2.1. Намагниченность и спиновые корреляции в цепочке изинговских спинов без немагнитного разбавления.....	31
2.2. Одномерная модель Изинга с подвижными примесями.....	37
2.3. Точное и приближенные решения для одномерной модели Изинга разбавленного магнетика.....	43
Глава 3. Модель Изинга чистого и разбавленного магнетика.....	49
3.1. Изинговский магнетик на квадратной решетке с анизотропным взаимодействием.....	50
3.2. Модель Изинга разбавленного ферромагнетика в приближении самосогласованного поля.....	60
3.3. Корреляционные функции чистого и разбавленного изинговского магнетика в приближении эффективного поля.....	69
3.4. Способ построения приближения Бете в модели Изинга разбавленного магнетика.....	75
Глава 4. Подвижные примеси и псевдохаотическое приближение.....	81
4.1. Применение метода среднего поля к модели Изинга с подвижными примесями и к модели Поттса с тремя состояниями.....	83
4.2. Модель Изинга с подвижными примесями на произвольной решетке Бете.....	90
4.3. Корреляционные функции и псевдохаотическое приближение.....	98

Глава 5. Модель Поттса чистого и разбавленного магнетика.....	106
5.1. Модель Поттса с тремя состояниями на решетке Бете.....	107
5.2. Приближенные методы исследования фазовых состояний в модели Поттса разбавленного магнетика.....	115
5.3. Модель Поттса с немагнитными примесями на решетке Бете в псевдохаотическом приближении.....	125
Глава 6. Циклические кластеры и рекурсивные решетки.....	138
6.1. Метод циклических кластеров в модели Изинга разбавленного магнетика.....	139
6.2. Модель Изинга с немагнитным разбавлением на рекурсивных решетках.....	146
6.3. Приближение Бете для чистого и разбавленного магнетиков как усреднение по локальным обменным полям.....	151
6.4. Модель Гейзенберга с тремя состояниями на решетке Бете.....	157
6.5. Самосогласованное приближение в модели Изинга чистого и разбавленного магнетика с использованием парной корреляции.....	161
Заключение.....	167
Основные публикации автора по теме диссертации.....	170
Список литературы.....	176

## Введение

Исследование поведения систем многих взаимодействующих частиц, таких, например, как магнетики является одной из центральных проблем физики твердого тела и статистической механики. Эта проблема стала особенно актуальной в последнее время в связи с открытием все большего числа новых магнитных систем, таких как спиновые стекла, спиновый лед или магнитные материалы с управляемыми свойствами. Весьма эффективным инструментом анализа таких систем являются решеточные модели, например, модель Изинга, модель Поттса или модель Гейзенберга. Эти и другие решеточные модели могут во многих случаях и сами по себе служить достаточно точным описанием реальных систем, а кроме того, принцип универсальности позволяет распространить результаты, полученные для простых решеточных моделей и на более сложные системы. Решеточные модели могут быть сформулированы не только для «чистых» магнетиков, с трансляционной симметрией гамильтониана, но и для систем с немагнитным или иным разбавлением или для магнетиков со случайными магнитными полями [8, 21]. Такие неупорядоченные и неоднородные магнитные системы являются в некотором смысле более интересным объектом исследования, чем «чистые» магнетики, поскольку неупорядоченные системы характеризуются большим числом магнитных состояний и более сложной реакцией на изменение внешних параметров [10, 21].

К сожалению, эффективность решеточных моделей для анализа магнетиков и других систем взаимодействующих частиц ограничена, как правило, невозможностью получить точное решение в подавляющем большинстве случаев. Известное решение Онсагера [6] для двумерной модели Изинга на квадратной решетке в отсутствие внешнего поля является одним из редких исключений из этого правила. В случае магнетиков с примесями или других неупорядоченных систем точных решений практически никогда не удается получить. Более того, в этом случае затруднительно указать даже общие свойства фазовых переходов и критических явлений.

В предлагаемой работе представлено несколько новых подходов к нахождению приближенных решений как для чистых, так и разбавленных решеточных моделей. Это, во-первых, дальнейшее развитие метода усреднения по локальным полям взаимодействия [1, 14] в различных направлениях. Во-вторых, использование кластеров различного размера и конфигурации как для усреднения по локальным полям, так и для построения ренормгруппового преобразования фиксированного масштаба. И в-третьих, метод псевдохаотического распределения примесей для анализа разбавленных магнетиков. Все эти методы как в общей постановке, так и применительно к конкретным задачам рассмотрены в настоящей работе.

**Цель диссертационной работы** - разработка эффективных методов учета влияния подвижных и замороженных примесей на макроскопические характеристики разбавленных магнетиков. Кроме того, целью работы является исследование с помощью этих методов магнитных фазовых переходов и магнитных состояний в моделях разбавленных магнетиков. Для достижения этой цели в работе были поставлены и решены следующие **задачи**.

1. Развитие метода усреднения по обменным полям путем применения его к кластерам магнитных атомов и построения ренормгруппового преобразования на этой основе. Применение этого метода к магнетикам Изинга, Поттса и Гейзенберга с изотропным и анизотропным взаимодействием.
2. Распространение метода усреднения по обменным полям в обобщенной, «кластерной» форме на разбавленные по узлам и связям решеточные магнетики. Применение метода к разбавленному по узлам или связям изинговскому решеточному магнетик, нахождение порогов протекания и концентрационной зависимости температуры Кюри.
3. Применение обобщенного метода усреднения по обменным полям к задаче о нахождении корреляционных функций чистого и разбавленного изинговского магнетика.
4. Применение метода усреднения по полям к анализу магнитных состояний магнетика с подвижными немагнитными примесями, находящимися в термодинамическом равновесии с магнитной подсистемой.
5. Формулировка условий, при которых подвижные немагнитные примеси распределены близко к хаотическому распределению замороженных примесей («псевдохаотическое» распределение).

**Научная новизна** работы состоит в следующем:

1. Впервые сформулирован и обоснован метод усреднения по локальным обменным полям (или в более общей форме – метод усреднения по конфигурациям соседних спинов). Предложено использование кластеров как для обобщения метода усреднения по локальным полям, так и для построения ренормгруппового преобразования фиксированного масштаба. Все эти методы обобщены на случай разбавленных магнетиков.
2. Впервые получено точное решение для одномерной модели Изинга с неподвижными, хаотично расположенными немагнитными примесями. Решена одномерная модель Изинга с подвижными немагнитными примесями. Для этой модели найдены корреляционные функции. Показано, что с помощью подбора параметров межатомного взаимодействия, систему с подвижными примесями, находящимися в термодинамическом равновесии, можно приблизить к системе с замороженными примесями (псевдохаотическое приближение).
3. Предложена интерпретация приближения Бете, основанная на сопоставлении спиновых кластеров различного размера на дереве Кейли. На основе этой интерпретации развит метод построения приближения Бете для разбавленного по узлам или связям изинговского магнетика.

4. Найдены корреляционные функции и решение задачи о разбавленном изинговском магнетике на решетке Бете в псевдохаотическом приближении.

5. Получено решение для модели Поттса на решетке Бете с немагнитными примесями в псевдохаотическом приближении. Найдена температура фазового перехода, намагниченность и величина скачка спонтанной намагниченности при температуре фазового перехода. Исследовано влияние немагнитного разбавления на всю линию фазовых переходов первого рода в модели Поттса на решетке Бете во внешнем поле.

6. Построен класс приближенных решений задачи Изинга с немагнитным разбавлением, являющийся обобщением приближения Бете. Показано, что некоторые из приближений этого класса можно интерпретировать как точные решения для модели Изинга на рекурсивных решетках.

**Теоретическая и практическая значимость работы.** Результаты, полученные в работе, имеют фундаментальную теоретическую значимость. Метод усреднения по локальным обменным полям, в том виде, в котором он развит в диссертационной работе, может быть использован для анализа поведения широкого класса систем многих частиц с конечным радиусом взаимодействия. Важное теоретическое значение имеет развитый в работе способ связи замороженного и расплавленного беспорядка в разбавленных магнетиках (псевдохаотическое распределение). Как показано в работе, эта связь может быть построена с помощью подбора параметров межатомного взаимодействия – своих при каждом значении температуры. Теоретическое значение имеет также и впервые полученное в работе точное решение для одномерной модели Изинга с замороженными примесями.

### **Основные научные положения и результаты, выносимые на защиту**

1. Теоретическое обоснование и обобщение метода усреднения по локальным полям взаимодействия. Доказательство того, что в системе взаимодействующих частиц любое термодинамическое среднее некоторой величины всегда может быть вычислено в два этапа. На первом этапе величина вычисляется по кластеру частиц, при фиксированном внешнем окружении. На втором – производится усреднение по конфигурациям этого окружения.

Построенная на основе такого представления термодинамических средних общая схема получения самосогласованных уравнений, включающая в себя как известные способы (метод среднего поля, приближение Бете, метод усреднения по обменным полям), так новые.

2. Точное решение для одномерной модели Изинга с неподвижными, хаотично расположенными немагнитными примесями. Найденные для этой модели зависимости намагниченности и парной корреляции от температуры, внешнего поля и концентрации примесей.

3. Точное решение модели Изинга с подвижными немагнитными примесями на решетке Бете. Зависимость критических концентраций примесей от параметров межатомного взаимодействия.

4. Метод псевдохаотического приближения. Предположение о полной некоррелированности псевдохаотического распределение в области нулевой намагниченности для любой решетки. Обоснование этого предположения расчетом корреляционных функций для модели Изинга с немагнитным разбавлением на решетке Бете. Полученное для этой модели выражение для магнитной восприимчивости.

5. Решение для модели Поттса на решетке Бете с немагнитными примесями в псевдохаотическом приближении. Полученные в этом приближении температура фазового перехода, намагниченность и величина скачка спонтанной намагниченности при температуре фазового перехода. Влияние немагнитного разбавления на всю линию фазовых переходов первого рода в модели Поттса на решетке Бете во внешнем поле.

6. Построенный класс приближенных решений задачи Изинга, являющийся обобщением приближения Бете. Доказательство того, что некоторые из приближений этого класса можно интерпретировать как точные решения для модели Изинга на рекурсивных решетках. Расширение этого класса на модель Изинга разбавленного по узлам и связям магнетика.

**Достоверность научных результатов** подтверждается независимыми численными расчетами; близостью результатов, полученных в различных приближениях, их сравнением с точными решениями; качественной сходимостью экспериментальных и теоретических данных; непротиворечивостью используемых моделей и основных положений статистической физики.

**Апробация работы.** Основные результаты работы были представлены на всероссийских научных конференциях: 56, 57, 58, 59, 60 и 62 Всероссийской научной конференции. Владивосток

**Публикации** По теме диссертации опубликовано 1 монографий, 23 статьи в ведущих российских и зарубежных журналах, входящих в БД Scopus, Web of Science и Перечень ВАК и 32 работы в сборниках трудов и тезисов научных конференций.

**Структура и объем диссертации** Диссертация состоит из введения, 6 глав и заключения, в которых приведены основные результаты и выводы, а также списка цитируемой литературы. Общий объем диссертации составляет 182 страницы и включает 43 рисунка, 9 таблиц и 94 библиографических ссылок.

## Глава 1. Модели магнетиков и методы их анализа

### 1.1. Дискретная модель с парным взаимодействием на регулярной решетке

Причиной фазовых переходов в магнетиках главным образом является, как известно [8, 18, 91], обменное взаимодействие между электронами незаполненных оболочек атомов магнетика. Это взаимодействие приводит к тому, что энергия соседних электронов минимальна тогда, когда их спины параллельны (ферромагнетизм) или антипараллельны (антиферромагнетизм) [91]. Конечно, кроме этого существует и диполь-дипольное взаимодействие, и множество различных сложных эффектов, связанных с кристаллической или молекулярной структурой веществ и приводящих к появлению анизотропии, различным видам магнитной упорядоченности и другим особенностям [91]. Магнитные свойства системы сильно зависят от ее размерности, от наличия в кристаллической структуре немагнитных примесей [18] или других факторов, нарушающих ее трансляционную симметрию. Задача теории магнитных состояний и магнитных фазовых переходов в веществе в самой общей постановке заключается в том, чтобы качественно или даже количественно объяснить особенности этих явлений на основе микроскопических моделей магнетика. И хотя многое в этом направлении уже сделано, задача эта еще далека от окончательного решения. В особенности это касается критического поведения неупорядоченных магнетиков, магнетиков с примесями или систем со случайными полями [19-21].

В статистической физике для теоретического описания фазовых переходов и критических явлений, как правило, используются модели, в которых геометрия решетки и параметры, характеризующие взаимодействие магнитных моментов считаются заданными [6,19]. Кроме того, часто взаимодействие частиц в этих моделях является парным, то есть гамильтониан взаимодействия частиц представляется в виде суммы слагаемых, каждое из которых связано только с одной парой частиц. И хотя существуют системы, для которых такое приближение явно не оправдано, во многих случаях модели с парным взаимодействием и с заданной геометрией расположения взаимодействующих атомов вполне способны отразить существенные свойства реальных магнетиков. В настоящей работе мы будем иметь дело в основном с моделями с парным взаимодействием, хотя большинство излагаемых здесь методов могут быть легко обобщены на модели с многочастичным взаимодействием.

К моделям с парным взаимодействием относится, например, квантовая модель Гейзенберга [91], гамильтониан которой (иногда называемый гамильтонианом Гейзенберга – Дирака – ван Флека) имеет вид

$$\mathcal{H} = -\sum_{(i,j)} J_{ij} \hat{S}_i \hat{S}_j - g\mu_B \mathbf{H}_e \sum_i \hat{S}_i \quad (1.1)$$



Здесь  $\hat{S}_i$  – оператор спина, локализованного в  $i$  – м узле некоторой регулярной решетки,  $\mathbf{H}_e$  – внешнее магнитное поле,  $g$  – фактор Ланде,  $\mu_B$  – магнетон Бора. Первая сумма в выражении (1.1) – это сумма по всем (упорядоченным) парам узлов, вторая – по всем узлам. Константы  $J_{ij}$  называются обменными интегралами, они, обычно, быстро убывают с расстоянием и часто принимаются отличными от нуля только для ближайших соседей. Использование такого квантовомеханического гамильтониана сильно осложняется тем, что спиновые переменные, относящиеся к разным атомам, нельзя считать независимыми. Поэтому гамильтониан (1.1) упрощают следующим образом. Операторы спина  $\hat{S}_i$  в (1.1) заменяют обычными классическими единичными векторами  $\vec{S}_i$ , а прямое произведение операторов в (1.1) скалярным произведением этих векторов ( $\vec{S}_i, \vec{S}_j$ ). В результате получим классическую модель Гейзенберга, использующуюся для описания изотропных магнетиков – гамильтониан этой модели имеет осевую симметрию, если внешнее поле не равно нулю, а в отсутствии внешнего поля не меняется при повороте всех спинов на один угол в любом направлении. Для учета кристаллической анизотропии, вместо скалярного произведения используется анизотропная комбинация компонент векторов  $\vec{S}_i$  и  $\vec{S}_j$ :  $\alpha S_i^x S_j^x + \beta S_i^y S_j^y + \gamma S_i^z S_j^z$ , что приводит к гамильтониану

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j)} J_{ij} (\alpha S_i^x S_j^x + \beta S_i^y S_j^y + \gamma S_i^z S_j^z) - g\mu_B (\vec{H}_e, \sum_i \vec{S}_i) \quad (1.2)$$

который называется XYZ моделью. При  $\gamma = 1$  и  $\alpha = \beta = 0$  получим модель магнетика с сильной осевой анизотропией, а при  $\alpha = \beta = 1$  и  $\gamma = 0$  – модель магнетика с сильной планарной анизотропией (XY – модель). Существуют ситуации (например, в многослойных системах), для более точного описания которых, в гамильтониан (1.2) следует добавить слагаемые, пропорциональные квадрату скалярного произведения ( $\vec{S}_i, \vec{S}_j$ ) (биквадратный обмен) или даже его более высоким степеням [21].

В классической модели Гейзенберга и в ее анизотропных и иных обобщениях, значения компонент векторов  $\vec{S}_i$ , входящие в (1.2) являются произвольными вещественными числами, ограниченными лишь условием  $|\vec{S}_i| = 1$ . Если отказаться от непрерывности этих компонент и допустить, что они могут принимать лишь дискретное множество значений (что имеет смысл как с принципиальной (универсальность), так и с технической (упрощение расчетов), точки зрения) получим множество дискретных моделей, полный обзор которых выходит за рамки настоящей работы. Эти модели можно тем или иным способом классифицировать, например, опираясь на группы симметрии гамильтониана – множества преобразований спиновых переменных, не меняющих значение энергии системы [18]. Однако нашей целью является разработка методов анализа, обладающих максимальной универсальностью в пределах класса дискретных моделей с парным взаимодействием. Поэтому все дискретные варианты модели (1.2) или ее

модификаций с более общим видом парного взаимодействия мы будем рассматривать как частные случаи дискретной модели с произвольным парным взаимодействием. Сформулируем эту модель следующим образом. Пусть в каждом узле некоторой регулярной решетки с координационным числом  $q$  находятся «спины»  $\sigma_i$  ( $i$  - номер узла), каждый из которых может принимать  $n$  различных дискретных значений  $m_1, m_2, \dots, m_p$ , скалярных или векторных. Гамильтониан модели с парным взаимодействием можно представить в таком виде

$$\mathcal{H}(\{\sigma\}) = -\sum_{(i,j)} \varphi(\sigma_i, \sigma_j) - \sum_i \psi(H_e, \sigma_i) \quad (1.3)$$

Здесь  $\varphi(\sigma_i, \sigma_j)$  – симметричная функция парного взаимодействия. Функция  $\psi(H_e, \sigma_i)$  описывает взаимодействие спина с внешним полем (или полями)  $H_e$ . Первая сумма в выражении (1.3) - это сумма по всем упорядоченным парам взаимодействующих спинов, вторая – по всем узлам. Гамильтониан (1.3) является функцией  $\{\sigma\}$  – множества всех возможных наборов значений спиновых переменных  $\sigma_i$ ; - это множество образует ансамбль состояний системы.

К дискретным моделям с парным взаимодействием относится, во-первых, известная модель Изинга [6]. Действительно, если  $p = 2$ ,  $m_1 = 1$ ,  $m_2 = -1$ ,  $\psi(H_e, \sigma_i) = H_e \sigma_i$  и  $\varphi(\sigma_i, \sigma_j) = J_{ij} \sigma_i \sigma_j$  из (1) получим гамильтониан модели Изинга [6]. Если же  $\varphi(\sigma_i, \sigma_j) = J_{ij} \delta(\sigma_i, \sigma_j)$ ,  $\psi(H_e, \sigma_i) = H_e \delta(\sigma_i, m_1)$  где  $\delta(\sigma_i, \sigma_j) = \begin{cases} 1, & \sigma_i = \sigma_j \\ 0, & \sigma_i \neq \sigma_j \end{cases}$ , из (1.3) получим гамильтониан модели Поттса с  $n$  состояниями [6]. Для изотропных моделей с взаимодействием только между ближайшими соседями  $J_{ij} = J$  для ближайших соседей и равно нулю во всех остальных случаях.

Согласно общим принципам статистической механики [24, 25] равновесное значение  $\langle A \rangle$  любой наблюдаемой величины  $A(\{\sigma\})$ , зависящей от состояния системы, может быть вычислено как среднее по ансамблю

$$\langle A \rangle = \sum_{\{\sigma\}} A(\{\sigma\}) P(\{\sigma\}),$$

где функция  $P(\{\sigma\})$  (вероятности различных состояний) равна

$$P(\{\sigma\}) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}(\{\sigma\})}{kT}\right)$$

Здесь  $Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}(\{\sigma\})}{kT}\right)$  – статистическая сумма,  $T$  – температура,  $k$  – постоянная Больцмана. Энтропия  $S$  и энергия  $E$  системы определяются выражениями

$$S = -k \sum_{\{\sigma\}} P(\{\sigma\}) \ln(P(\{\sigma\})), \quad E = \sum_{\{\sigma\}} P(\{\sigma\}) \mathcal{H}(\{\sigma\})$$

Отсюда, используя определение свободной энергии  $F = E - TS$ , получим  $F = -kT \ln Z$ . Иными словами, для нахождения равновесных средних величин в системе с гамильтонианом (1.3) необходимо вычислить статистическую сумму

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left(\frac{1}{kT} \sum_{(i,j)} \varphi(\sigma_i, \sigma_j) + \frac{1}{kT} \sum_i \psi(H_e, \sigma_i)\right) \quad (1.4)$$

Допустим теперь, что в некоторых узлах решетки вместо спинов могут быть немагнитные атомы («примеси»). Можно рассматривать два типа примесей – «вмороженные» неподвижные примеси случайно и без корреляции разбросанные по узлам решетки и «подвижные» примеси – способные перемещаться по узлам и находящиеся в термодинамическом равновесии с матрицей [8, 19-21]. Модель с вмороженными примесями можно сформулировать так [8]. Для каждого узла решетки с номером  $l$  введем случайную переменную  $\xi_l$ , которая может быть равна 0 и 1, а ее среднее значение  $\langle \xi_l \rangle = b_s$  определяет вероятность заполнения  $l$ -го узла. Гамильтониан (1.3) заменяется на

$$H_s(\{\sigma\}) = - \sum_{(i,j)} \xi_i \xi_j \varphi(\sigma_i, \sigma_j) - \sum_i \xi_i \psi(H_e, \sigma_i) \quad (1.5)$$

Такая модель называется моделью с разбавлением по узлам. Можно также сформулировать модель замороженных связей. В ней считается, что определенная доля  $1 - b_b$  всех парных взаимодействий искусственно исключена.

Рассмотрим теперь задачу с подвижными примесями. Предположим, что взаимодействие между атомами примеси и между примесью и магнитным атомом тоже является парным и будем учитывать это взаимодействие только для ближайших соседей. Обозначим через  $U_{11}$  энергию взаимодействия двух соседних атомов примеси,  $U_{12}$  - энергию взаимодействия атома примеси и магнитного атома и  $U_{22}$  - энергию взаимодействия двух магнитных атомов. Пусть переменные  $\sigma_i$  принимают значения  $m_1, m_2, \dots, m_p$ , если в узле находится магнитный атом и значение  $\varepsilon$  (не равное ни одному из  $m_k$ ), если в узле находится примесь. Определим  $\varphi(\varepsilon, \sigma_j) = U_{12}$  и  $\varphi(\varepsilon, \varepsilon) = U_{11}$ . Тогда большая статистическая сумма имеет вид

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp \left( \frac{1}{kT} \sum_{(i,j)} \tilde{\varphi}(\sigma_i, \sigma_j) + \frac{1}{kT} \sum_i \psi(H_e, \sigma_i) + r \sum_i \delta(\sigma_i, \varepsilon) \right), \quad (1.6)$$

где  $\tilde{\varphi}(\sigma_i, \sigma_j) = \varphi(\sigma_i, \sigma_j) + U_{22}(1 - \delta(\varepsilon, \sigma_j))(1 - \delta(\sigma_i, \varepsilon))$ ,  $r = \frac{\mu}{kT}$  ( $\mu$  - химический потенциал). Таким образом, модель с подвижными немагнитными примесями с  $n$  состояниями спина можно рассматривать просто как модель без примесей, но с парным взаимодействием с  $p + 1$  состояниями. Например, поскольку модель Поттса с двумя состояниями эквивалентна модели Изинга [6], модель Изинга с подвижными примесями эквивалентна модели Поттса с тремя состояниями.

Несколько сложнее обстоит дело с вмороженными примесями. Вычисление статистической суммы с гамильтонианом (1.5) должно, по идее, производиться при заданных значениях переменных  $\xi_l$ , поскольку в случае вмороженных примесей указание значений этих переменных должно рассматриваться как способ задать геометрию системы. Однако в таком случае статистическая сумма и средние значения наблюдаемых величин оказываются функциями макроскопически большого числа параметров  $\xi_l$ , что, конечно же, не имеет смысла. Для преодоления этой трудности используется идея самоусреднения [21], согласно которой в термодинамическом пределе систему с гамильтонианом (1.5) можно представить в виде совокупности слабо

взаимодействующих макроскопических подсистем, а свободную энергию всей системы, соответственно, как сумму свободных энергий этих подсистем. (Такое представление возможно потому, что функция парного взаимодействия  $\varphi(\sigma_i, \sigma_j)$ , как правило, быстро убывает с увеличением расстояния между спинами  $\sigma_i$  и  $\sigma_j$ .) Если теперь полагать, что в каждой из таких подсистем реализуется свой случайный набор значений «параметров заполнения»  $\xi_l$ , то по закону больших чисел свободную энергию системы можно представить как среднее значение по всем возможным конфигурациям  $\{\xi\}$ :

$$F = -kT \overline{\ln Z(\{\xi\})} = -kT \sum_{\{\xi\}} P(\{\xi\}) \ln Z(\{\xi\}), \quad (1.7)$$

где  $Z(\{\xi\})$  - статистическая сумма, вычисленная при заданном значении параметров  $\xi_l$ ,  $P(\{\xi\})$  - вероятность этого набора. Для вычисления среднего в (1.7) используется так называемый метод реплик [21], который удобно представить в следующей интерпретации [21], позволяющей в известном смысле убрать принципиальное различие между замороженными и подвижными примесями. Обозначим

$$F(\{\xi\}) = -kT \ln Z(\{\xi\}) \quad (1.8)$$

свободную энергию системы, вычисленную для заданного набора значений параметров  $\xi_l$ . Предположим теперь, что примеси могут все же перемещаться по узлам решетки, то есть значения параметров  $\xi_l$  могут изменяться. Если считать, что расположение примесей находится в полном термодинамическом равновесии со спиновыми переменными, то получим модель расплавленного беспорядка (1.6). Однако можно представить себе ситуацию, когда время установления равновесного состояния в расположении примесей значительно превышает время установления равновесия в системе спиновых переменных и система спинов не находится в тепловом равновесии с системой примесей. Иными словами, будем считать, что температура  $T'$  системы примесей не совпадает с температурой  $T$  спиновой системы. В этом случае свободную энергию (1.8) можно рассматривать в качестве гамильтониана системы примесей. (К которому, конечно же, следует добавить  $U(\{\xi\})$  - слагаемое, связанное с энергией взаимодействия магнитных атомов и атомов примеси, наподобие, как в модели (1.6)). Тогда полная статистическая сумма системы равна

$$Z = \sum_{\{\xi\}} P(\{\xi\}) \exp \left( -\frac{1}{kT'} (F(\{\xi\}) + U(\{\xi\})) \right)$$

или

$$Z = \sum_{\{\xi\}} P(\{\xi\}) \left( Z^T(\{\xi\}) \exp \left( -\frac{U(\{\xi\})}{k} \right) \right)^{1/T'}$$

а полная свободная энергия

$$F = -kT' \ln Z \quad (1.9)$$

При  $T' = T$  получим модель подвижных примесей, находящихся в термодинамическом равновесии с системой спинов (1.6). Модель с замороженными случайно распределенными примесями можно понимать как предел  $T' \rightarrow \infty$  при конечном значении  $T$ . Покажем это, воспользовавшись предельным соотношением, выполняющимся для любых положительных  $y_i$  и которое легко доказать по правилу Лопиталья:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\ln(\sum_i P_i y_i^x)}{x} = \sum_i P_i \ln y_i, \quad \text{где} \quad \sum_i P_i = 1$$

Используя это соотношение в (1.9), получим

$$\lim_{T' \rightarrow \infty} F = -kT \sum_{\{\xi\}} P(\{\xi\}) \ln Z(\{\xi\}) + \sum_{\{\xi\}} P(\{\xi\}) U(\{\xi\}),$$

что с точностью до аддитивной константы  $\sum_{\{\xi\}} P(\{\xi\}) U(\{\xi\})$ , имеющей смысл средней энергии конфигурации примесей, совпадает с (1.7).

## 1.2. Решение для решетки Бете

Вычисление статистической суммы (1.4) является крайне сложной задачей, допускающей точное решение только в сравнительно небольшом количестве частных случаев. Известно, например, точное решение для модели Изинга на квадратной решетке в отсутствии внешнего поля [6].

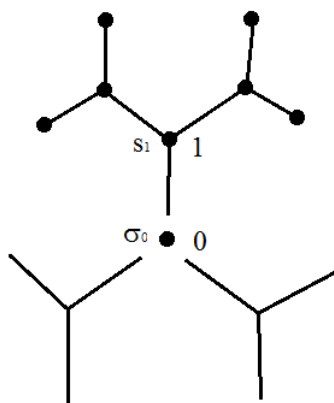


Рис.1.1. Узлы и связи в решетке Бете при  $q = 3$ .

Существуют, однако, модельные кристаллические решетки (являющиеся в известном смысле «паталогическими»), для которых сумма (1.4) или средние значения, найденные по этой статистической сумме, могут быть вычислены точно. Например, эта задача имеет точное решение для так называемой решетки Бете. Решетка Бете строится следующим образом [6]. Центральный узел (узел 0 на рис. 1) соединяется с  $q$  другими узлами, каждый из которых, в свою очередь, с  $q - 1$  новыми. Прделав эту процедуру  $N$  раз, получим так называемое дерево Кэй-

ли. Решеткой Бете называется внутренняя (далекая от граничных точек) часть этого графа при  $N \rightarrow \infty$ . Рассмотрим вычисление статистической суммы (1.4) на решетке Бете методом, описанным в [6]. Статистическую сумму (1.4) представим в виде  $Z = \sum V(\sigma)$ , где

$$V(\sigma) = \exp \left( K \sum_{(i,j)} \varphi(\sigma_i, \sigma_j) + \frac{1}{kT} \sum_i \psi(H_e, \sigma_i) \right)$$

Вероятность  $P_i$  того, что центральный спин  $\sigma_0$  принимает значение  $m_i$

$$P_i = \frac{\sum \delta(\sigma_0, m_i) V(\sigma)}{Z}.$$

Преобразуем  $V(\sigma)$  с учетом того, что точка 0 (рис. 1.1) является корневой точкой  $q$  независимых подграфов:

$$V(\sigma) = \exp \left( \frac{\psi(H_e, \sigma_0)}{kT} \right) \prod_{j=1}^q Q_N(\sigma_0 | s^{(j)})$$

$s^{(j)}$  обозначает все спины на  $j$ -ом подграфе, кроме  $\sigma_0$ , а

$$Q_N(\sigma_0 | s) = \exp \left( K \sum_{(i,j)} \varphi(s_i, s_j) + K\varphi(s_1, \sigma_0) + \frac{1}{kT} \sum_i \psi(H_e, s_i) \right)$$

Пусть  $g_N(\sigma_0) = \sum_s Q_N(\sigma_0 | s)$ . Тогда

$$Z = \sum_{\sigma_0} \exp \left( \frac{\psi(H_e, \sigma_0)}{kT} \right) [g_N(\sigma_0)]^q$$

и

$$P_i = \frac{1}{Z} \sum \delta(\sigma_0, m_i) \exp \left( \frac{\psi(H_e, \sigma_0)}{kT} \right) [g_N(\sigma_0)]^q$$

Обозначим  $x_{i,N} = \frac{g_N(m_i)}{g_N(m_n)}$ . Тогда

$$P_i = \frac{\exp \left( \frac{\psi(H_e, m_i)}{kT} \right) x_{i,N}^q}{\sum_j \exp \left( \frac{\psi(H_e, m_j)}{kT} \right) x_{j,N}^q} \quad \text{для } i = 1 \dots p-1$$

и

$$P_n = \frac{\exp \left( \frac{\psi(H_e, m_i)}{kT} \right)}{\sum_j \exp \left( \frac{\psi(H_e, m_j)}{kT} \right) x_{j,N}^q}. \tag{1.10}$$

Для величин  $x_{i,N}$  можно составить рекуррентные соотношения, основываясь на следующих соображениях [6]. Если разрезать верхний подграф на рис. 1.1 в точке 1, примыкающей к точке 0, то он распадется на «ствол»  $(0,1)$  и  $q-1$  идентичных ветвей, каждая из которых является подграфом, аналогичным исходному, но содержащим  $N-1$  оболочек. Поэтому

$$Q_N(\sigma_0 | s) = \exp \left( K\varphi(s_1, \sigma_0) + \frac{\psi(H_e, s_1)}{kT} \right) \prod_{j=1}^{q-1} Q_{N-1}(s_1 | t^{(j)}),$$

где  $t^{(j)}$  обозначает все спины (кроме  $s_1$ ) на  $j$ -ой ветви подграфа. Следовательно

$$g_N(\sigma_0) = \sum_{s_1} \exp \left( K\varphi(s_1, \sigma_0) + \frac{\psi(H_e, s_1)}{kT} \right) [g_{N-1}(s_1)]^{q-1}.$$

Отсюда получим рекуррентные соотношения для  $x_{i,N}$

$$x_{i,N} = \frac{\exp \left( K\varphi(m_n, m_i) + \frac{\psi(H_e, m_n)}{kT} \right) + \sum_{j=1}^{n-1} \exp \left( K\varphi(m_j, m_i) + \frac{\psi(H_e, m_j)}{kT} \right) x_{j,N-1}^{q-1}}{\exp \left( K\varphi(m_n, m_n) + \frac{\psi(H_e, m_n)}{kT} \right) + \sum_{j=1}^{n-1} \exp \left( K\varphi(m_j, m_n) + \frac{\psi(H_e, m_j)}{kT} \right) x_{j,N-1}^{q-1}} \quad (1.11)$$

Используя рекуррентные уравнения (1.11) (с начальным условием  $x_{i,0} = 1$ ) и соотношения (1.10) можно вычислить вероятности  $P_i$  для корневой точки дерева Кейли с  $N$  оболочками. Решение для решетки Бете получим переходя к пределу  $N \rightarrow \infty$ . Для нахождения этого предела в рекуррентных соотношениях (1.11) положим  $x_{i,N} = x_{i,N-1} = x_i$  и будем рассматривать полученные равенства как уравнения относительно  $x_i$ . Подставив решения этих уравнений в (1.10), найдем вероятности  $P_i$  для решетки Бете.

Это решение можно рассматривать как приближенное решение для произвольной решетки с координационным числом  $q$  – в этом и заключается приближение Бете. В дальнейшем будет показано, что приближение Бете допускает интерпретацию и в терминах усреднения по полям взаимодействия, и в терминах ренормгруппового преобразования конечного масштаба.

### 1.3. Усреднение по полям взаимодействия

К проблеме нахождения равновесных средних значений в системе с гамильтонианом (1.3) или в моделях с немагнитным разбавлением (1.5) и (1.6) можно подойти несколько с иной точки зрения, не предполагающей непосредственного вычисления статистической суммы. Этот подход, который в дальнейшем будет называться методом усреднения по полям взаимодействия, основан на использовании функции распределения по полям взаимодействия [1, 14].

Применение функции распределения по полям взаимодействия к изучению свойств системы многих взаимодействующих частиц началось с работы Чандрасекхара [92]. В этой работе рассматривалось движение системы галактик, связанных гравитационным взаимодействием. Позднее этот метод был использован для оценки влияния магнитоэстатического взаимодействия мелких ферромагнитных частиц, находящихся в немагнитной матрице [93]. Приведем теперь обоснование метода усреднения по полям взаимодействия применительно к вычислению термодинамических средних в системе взаимодействующих частиц. Будем считать, что частицы находятся в узлах периодической решетки; обобщение на случай разбавленных магнетиков или других систем без трансляционной симметрии обсудим ниже.

Итак, рассмотрим систему из  $N$  взаимодействующих частиц, каждая из которых характеризуется некоторым параметром  $\sigma$ , который в дальнейшем будем называть *спином*. Обозначим  $\Omega$  множество всех этих спинов, а гамильтониан системы  $\mathcal{H}(\Omega)$ . Конкретный вид гамильтониана

значения не имеет, но мы будем полагать, что для каждого спина  $\sigma_i$  в гамильтониане есть конечное число слагаемых, содержащих  $\sigma_i$ . Причем это число остается конечным и в термодинамическом пределе  $N \rightarrow \infty$ . Два спина  $\sigma_i$  и  $\sigma_j$  будем называть взаимодействующими, если в гамильтониане есть слагаемое не аддитивно зависящее от  $\sigma_i$  и  $\sigma_j$ .

Рассмотрим в системе группу, содержащую  $n$  спинов. Такую группу мы будем в дальнейшем называть *кластером*. Множество входящих в кластер спинов будем обозначать  $c$ . Обозначим  $r$  множество не входящих в кластер спинов, каждый из которых взаимодействует хотя бы с одним спином кластера и обозначим  $s$  множество всех остальных спинов. Очевидно,  $\Omega$  является объединением непересекающихся множеств  $c$ ,  $r$  и  $s$ .

Выделим теперь в гамильтониане слагаемые, связанные с взаимодействием спинов принадлежащих  $c$  и  $r$ :

$$\mathcal{H}(\Omega) = \mathcal{H}_c(c, r) + \mathcal{H}_s(r, s).$$

Гамильтониан  $\mathcal{H}_c(c, r)$  содержит только слагаемые, зависящие от спинов кластера  $c$  и слагаемые, описывающие взаимодействие спинов кластера со спинами из множества  $r$ . Гамильтониан  $\mathcal{H}_s(r, s)$  – содержит все остальные слагаемые, входящие в  $\mathcal{H}(\Omega)$ . Тогда статистическую сумму системы можно записать в виде

$$Z = \sum_r Z_c(r) Z_s(r), \quad (1.12)$$

где

$$Z_s(r) = \sum_s \exp\left(-\frac{1}{kT} \mathcal{H}_s(r, s)\right) \text{ и } Z_c(r) = \sum_c \exp\left(-\frac{1}{kT} \mathcal{H}_c(c, r)\right).$$

Каждое слагаемое в (1.12) имеет смысл (ненормированной) вероятности того, что система спинов  $r$  будет находиться в некотором состоянии. Нормированная вероятность

$$W(r) = Z_c(r)Z_s(r)/Z$$

есть функция распределения для наборов состояний спинов, взаимодействующих с кластером.

Пусть  $f(r)$  некоторая функция спинов, принадлежащих  $r$ , а  $g(c)$  некоторая функция кластерных спинов  $c$ . Тогда среднее по ансамблю значение произведения  $fg$  можно представить в виде

$$\langle fg \rangle = \frac{1}{Z} \sum_r f(r) \left( \sum_c g(c) \exp\left(-\frac{1}{kT} \mathcal{H}_c(c, r)\right) \right) Z_s(r).$$

Разделив и умножив каждое слагаемое в этой сумме на «кластерную» статсумму  $Z_c(r)$ , запишем полученное выражение в виде:

$$\langle fg \rangle = \sum_r f(r) \langle g \rangle_r W(r), \quad (1.13)$$

где

$$\langle g \rangle_r = \frac{1}{Z_c(r)} \sum_c g(c) \exp\left(-\frac{1}{kT} \mathcal{H}_c(c, r)\right). \quad (1.14)$$



Формулу (1.13) можно интерпретировать следующим образом. Выражение (1.14) можно понимать как «кластерное среднее» функции  $g(c)$ , вычисленное при условии, что конфигурация взаимодействующих с кластером спинов задана и неизменна. Выражение (1.13) в этом случае можно понимать как усреднение произведения  $f(r)\langle g \rangle_r$  по функции распределения  $W(r)$ . На использовании формул (1.13) – (1.14) и основан метод усреднения по полям взаимодействия.

Рассмотрим кластер из одного спина  $\sigma_0$  в системе с гамильтонианом (1.3). Тогда «кластерный» гамильтониан  $\mathcal{H}_1(\sigma_0, r) = -\sum_{\sigma \in r} \varphi(\sigma_0, \sigma) - \psi(H_e, \sigma_0)$ . Взяв  $g = \begin{cases} 1, \sigma_0 = m_i \\ 0, \sigma_0 \neq m_i \end{cases}$ , найдем по (1.14)  $p_i(r)$  - условную вероятность того, что спин  $\sigma_0$  имеет значение  $m_i$  при условии, что значения соседних спинов зафиксированы

$$p_i(r) = \frac{\exp(-\mathcal{H}_1(m_i, r)/kT)}{\sum_{k=1}^n \exp(-\mathcal{H}_1(m_k, r)/kT)},$$

а из (1.13) получим

$$\langle f \rangle_i P_i = \left\langle \frac{f(r) \exp(-\mathcal{H}_1(m_i, r)/kT)}{\sum_{k=1}^n \exp(-\mathcal{H}_1(m_k, r)/kT)} \right\rangle_{W(r)} \quad (1.15)$$

$\langle f \rangle_i$  - условное среднее значение функции  $f$ , при условии, что  $\sigma_0 = m_i$ .

При  $f(r) = 1$  найдем по этой формуле среднюю по ансамблю вероятность определенного значения спина  $\sigma_0$ :

$$P_i = \left\langle \frac{\exp(-\mathcal{H}_1(m_i, r)/kT)}{\sum_{k=1}^n \exp(-\mathcal{H}_1(m_k, r)/kT)} \right\rangle_{W(r)} \quad (1.16)$$

Учитывая, что каждый из спинов  $\sigma_j \in r$  может принимать только одно из  $n$  значений, при отсутствии анизотропии усреднение в (1.16) можно представить, как усреднение по «числам заполнения»  $N_i$  – количеству соседей, находящихся в состоянии  $m_i$ .

$$P_i = \left\langle \frac{\exp((\sum_{k=1}^n N_k \varphi(m_i, m_k) + \psi(H_e, m_i))/kT)}{\sum_{i=1}^n \exp((\sum_{k=1}^n N_k \varphi(m_i, m_k) + \psi(H_e, m_i))/kT)} \right\rangle_{W(N_1, \dots, N_n)} \quad (1.17)$$

Выражения (1.16) или (1.17) можно использовать для построения приближенных способов нахождения величин  $P_i$  путем того или иного выбора приближенного вида функции  $W$ . Если в (1.17) взять

$$W(N_1, \dots, N_n) = \prod_{j=1}^n \delta(N_j - qP_j),$$

то есть заменить числа  $N_j$  их средними значениями, пренебрегая дисперсией этих величин, получим приближение среднего поля

$$P_i = \frac{\exp((q \sum_{k=1}^n P_k \varphi(m_i, m_k) + \psi(H_e, m_i))/kT)}{\sum_{i=1}^n \exp((q \sum_{k=1}^n P_k \varphi(m_i, m_k) + \psi(H_e, m_i))/kT)} \quad (1.18)$$

Для модели Изинга или одноосной модели Гейзенберга  $\varphi(m_i, m_k) = J m_i m_k$ ,  $\psi(H_e, m_i) = H_e m_i$ . Поэтому

$$P_i = \frac{\exp(m_i(qKM+h))}{\sum_{i=1}^n \exp(m_i(qKM+h))}, \quad (1.19)$$

где  $M = \sum_{i=1}^p P_i m_i$  - средняя намагниченность,  $K = J/kT$ ,  $h = H_e/kT$ . Умножив каждое из равенств (1.19) на  $m_i$  и складывая, получим

$$M = \frac{\sum_{i=1}^p m_i \exp(m_i(qKM+h))}{\sum_{i=1}^p \exp(m_i(qKM+h))}.$$

Для модели Изинга  $p = 2$ ,  $m_1 = 1$ ,  $m_2 = -1$  и последнее выражение переходит в

$$M = \text{th}(qKM + h)$$

Для модели Поттса с  $n$  состояниями  $\varphi(m_i, m_k) = J\delta(m_i, m_k)$ ,  $\sum_{k=1}^n P_k \varphi(m_i, m_k) = P_i$ ,  $\psi(H_e, m_i) = H_e \delta(1, m_i)$ . Считая вероятности всех состояний кроме первого равными  $P_2$  из (1.19) получим

$$P_1 = \frac{\exp(qKP_1+h)}{\exp(qKP_1+h)+(n-1)\exp(qKP_2)}, \quad P_2 = \frac{\exp(qKP_2)}{\exp(qKP_1+h)+(n-1)\exp(qKP_2)}.$$

Другой способ выбора функции распределения в (1.16) или (1.17) приводит к методу среднего спина [1]. Этот способ заключается в следующем. Будем полагать, что каждый из соседних данному узлу спинов принимает значения  $m_i$  с вероятностями  $P_i$  независимо от других спинов. Иными словами, в этом приближении учитывается дисперсия величин  $N_i$ , но пренебрегается корреляцией между этими величинами, то есть, возьмем  $W$  в виде

$$W(N_1, \dots, N_p) = \sum_{L_1, L_2, \dots, L_n} C_{L_1, L_2, \dots, L_n}^q P_1^{L_1} P_2^{L_2} \dots P_n^{L_n} \prod_{i=1}^n \delta(N_i - L_i) \quad (1.20)$$

$$C_{L_1, L_2, \dots, L_n}^q = \frac{q!}{L_1! L_2! \dots L_n!}.$$

Приближение, в котором построена функция (1.20) будем называть «приближение среднего спина». Подставляя теперь такое полиномиальное распределение в (1.17), получим систему уравнений для определения величин  $P_i$ .

Во многих моделях может оказаться так, что «одночастичный» гамильтониан  $\mathcal{H}_1(\sigma_0, r)$ , входящий в (1.14), оказывается зависящим от одной или нескольких функций величин  $\sigma_j$ , например, от суммы этих величин или от суммы их квадратов. В модели Изинга или Гейзенберга на решетке с координационным числом  $q$

$$\mathcal{H}_1(\sigma_0, r) = -J\sigma_0 \sum_{j=1}^q \sigma_j - \sigma_0 H_e \quad (1.21)$$

в модели Поттса с тремя состояниями гамильтониан  $\mathcal{H}_1(\sigma_0, r)$  можно представить как функцию  $\sum_{j=1}^q \sigma_j$  и  $\sum_{j=1}^q \sigma_j^2$ . Такие функции можно назвать «полями взаимодействия», а усреднение в (1.15) становится, фактически, усреднением по функции распределения этих полей. Действительно, пусть, например, гамильтониан  $\mathcal{H}_1(\sigma_0, r)$  зависит только от  $h = \sum_{j=1}^q \sigma_j$ . Тогда (1.16) примет вид

$$P_i = \sum_{\{\sigma_j\}} p_i(h) W(r) = \sum_{h_{in}} p_i(h) \sum_{\{\sigma_j\}} \delta(h - \sum_{j=1}^q \sigma_j) W(r)$$

Функция

$$W(h) = \sum_{\{\sigma_j\}} \delta(h - \sum_{j=1}^{q'} \sigma_j) W(\{\sigma_j\})$$

и есть функция распределения по полям взаимодействия  $h$ .

Рассмотренное выше решение модели с парным взаимодействием на решетке Бете тоже можно трактовать как вариант усреднения по полям взаимодействия. Вначале опишем такую интерпретацию приближения Бете для изотропной модели Изинга на простой решетке с взаимодействием между ближайшими соседями, а затем обобщим на случай произвольной модели с гамильтонианом типа (1.3). В модели Изинга есть только два возможных значения каждого спина, вероятности которых могут быть выражены через среднюю намагниченность системы:  $P_{1,2} = (1 \pm M)/2$ . Одночастичный кластерный гамильтониан (1.21) зависит только от суммы спинов, соседних к  $\sigma_0$ , что позволяет перейти к усреднению по различным значениям этой суммы, то есть, к усреднению по полю взаимодействия  $h = \sum_{j=1}^q \sigma_j$ . Учитывая все это, из (1.13) и (1.14) при  $g = \sigma_0$  и  $f = 1$  получим

$$M = \langle \sigma_0 \rangle = \langle \text{th}(Kh + h_{ex}) \rangle_{W(h)} \quad (1.22)$$

а при  $f = h$

$$qV = \langle h\sigma_0 \rangle = \langle h \text{th}(Kh + h_{ex}) \rangle_{W(h)} \quad (1.23)$$

здесь  $V$  – среднее значение произведения «центрального» спина  $\sigma_0$  и любого из его соседей. Согласно приближению «среднего спина», функция распределения полей  $W(h)$  строится в предположении, что все спины, образующие поле  $h$ , независимы и принимают значения  $\pm 1$  с вероятностями  $P_{1,2} = (1 \pm M)/2$ , то есть величина  $h$  имеет биномиальное распределение  $h \sim \text{Bin}(q, P_1)$ . Подстановка этого распределения в (1.22) приводит к самосогласованному уравнению относительно  $M$ , а подстановка в (1.23) – к уравнению для определения  $V$ . Иными словами, в приближении среднего спина средняя намагниченность соседних атомов задается сразу, а намагниченность центрального спина «подстраивается под окружение», в соответствии с (1.22).

Рассмотрим теперь другой способ приближенного построения функции  $W(h)$ , логика которого в известном смысле противоположна логике построения приближения среднего спина. А именно, будем считать «заранее заданной» намагниченность центрального спина, а функцию распределения представим в виде

$$W(h) = P_1 W_1(h) + P_2 W_2(h) \quad (1.24)$$

где  $W_1(h)$  и  $W_2(h)$  условные функции распределения для значений  $\sigma_0$  равных  $+1$  и  $-1$  соответственно. Допустим теперь, что функции  $W_1(h)$  и  $W_2(h)$  можно аппроксимировать биномиальными распределениями с некоторыми неизвестными параметрами  $P_{11}$  и  $P_{21}$ , имеющими смысл условных вероятностей того, что спин, являющийся соседом положительно (отрицательно) ориентированного спина, сам направлен положительно (отрицательно). Эти неизвестные параметры определяются из условий согласования с заданной средней намагниченностью  $M$ . Среднее значение поля взаимодействия равно  $qM$ , поэтому  $M = P_1 P_{11} + P_2 P_{21}$ , а кроме того  $V = P_1 P_{11} - P_2 P_{21}$ . Используя эти условия, выразим функцию распределения через  $M$  и  $V$ , а сами эти параметры найдем из уравнений (1.22) и (1.23). Оказывается, что полученное таким путем значение  $M$  совпадает с полученным в приближении Бете, то есть приближение Бете – это усреднение по полям взаимодействия с приближенной функцией распределения (1.24).

В общем случае, когда каждый спин может принимать  $n$  различных значений, а одночастичный гамильтониан не обязательно является функцией одного «поля взаимодействия», приближение Бете в терминах усреднения по полям взаимодействия может быть выражено так. Функцию распределения значений соседних к центральному узлу спинов представим, используя «числа заполнения» в виде аналогичном (1.23)  $W(N_1, \dots, N_n) = \sum P_i W_i$ , где  $W_i$  полиномиальные распределения (1.19), в которых вместо  $P_j$  используются неизвестные величины  $P_{ij}$ , понимаемые как вероятности того, что ближайший сосед спина, находящегося в состоянии  $m_i$ , находится в состоянии  $m_j$ . Для величин  $P_{ij}$  можно записать  $p$  условий нормировки  $\sum_j P_{ij} = 1$ , кроме того, выполняются  $n$  условий  $\sum_j P_{ij} P_j = P_i$ , из которых только  $p - 1$  являются независимыми, поскольку сумма всех этих условий приводит к тождественному равенству. Таким образом,  $p^2 + p$  вероятностей  $P_{ij}$  и  $P_i$  должны удовлетворять  $2p$  независимым условиям. Остальные  $p^2 - p$  условий для этих величин можно составить с помощью (1.15). Если в (1.15) положить  $f = 1$  получим  $p - 1$  независимых уравнений. Еще  $p - 1$  уравнений получим из (1.15) полагая  $f = \sum \sigma_i$ , где  $\sigma_i$  - ближайшие соседи центрального спина  $\sigma_0$ . Левая часть равенства (1.15) примет при этом вид  $qP_i \sum P_{ij} m_j$ . Взяв теперь  $f = \sum \sigma_i^2$  получим в левой части (1.15)  $qP_i \sum P_{ij} m_j^2$ . Всего таким путем можно получить, согласно теореме Вандермонда [40], ровно  $p$  независимых групп по  $p - 1$  уравнений в каждой, что в совокупности с  $2p$  условиями нормировки дает  $p^2 + p$  уравнений для  $p^2 + p$  неизвестных. Решение этой системы и является решением для решетки Бете (1.10).

На первый взгляд может показаться, что приближение среднего спина (1.20) уступает в точности приближению Бете (1.24), поскольку в приближении среднего спина полностью отбрасывается корреляция между спинами, соседними с центральным, а в приближении Бете учи-

тывается, хотя и только «через центральный спин». И действительно, приближение Бете дает критические значения температурного параметра  $K$ , которые ближе к известным точным значениям, чем те, что получаются в приближении среднего спина [2]. Однако при переходе к разбавленным магнетикам или другим системам без трансляционной симметрии приближение среднего спина часто оказывается более гибким и универсальным методом, чем приближение Бете, что делает его удачным компромиссом между точностью приближения и математической простотой модели.

Таким образом, методика усреднения по полям взаимодействия или, в более широком смысле, по конфигурациям спинов, взаимодействующих с данным спином, позволяет в рамках единого подхода рассмотреть и сопоставить известные приближенные методы. Кроме того, на ее основе можно развить совокупность различных приближенных методов, применимых к исследованию как чистых, так и разбавленных магнетиков [1-4, 7, 26, 36-38]. Однако существует еще одно направление, в котором можно обобщить метод усреднения по обменным полям. Это обобщение заключается в замене одного спина  $\sigma_0$  системой связанных спинов (кластером). Такое обобщение открывает две возможности. С одной стороны, можно построить уравнения, наподобие (1.15) или (1.16) но не для одиночного спина, а для кластера спинов и развить на основе этих уравнений приближенные методы. С другой стороны, можно построить некий вариант ренормгруппового преобразования фиксированного масштаба [16], сопоставляя различные кластеры между собой.

#### 1.4. Кластеры взаимодействующих спинов

Рассмотрим на решетке кластер, состоящий из  $n$  спинов. Совокупность входящих в кластер спинов будем обозначать  $c$ . Как и в предыдущем разделе, обозначим  $r$  совокупность не входящих в кластер спинов, каждый из которых взаимодействует хотя бы с одним спином кластера и обозначим  $s$  множество всех остальных спинов решетки. В предыдущем разделе показано, что если  $f(r)$  некоторая функция спинов, принадлежащих  $r$ , а  $g(c)$  некоторая функция кластерных спинов  $c$ , то среднее по ансамблю значение произведения  $fg$  можно представить в виде (1.13), (1.14).

Рассмотрим теперь кластер из двух соседних спинов  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$ . Обозначим  $r^{(1)}$  спины, непосредственно взаимодействующие со спином  $\sigma_1$ , но не взаимодействующие со спином  $\sigma_2$ ; аналогично  $r^{(2)}$ , а множество спинов, взаимодействующих с обоими кластерными спинами обозначим  $r^{(12)}$ . Иными словами, если для некоторого спина  $\sigma$  в гамильтониане (1.3) есть слагаемое  $\varphi(\sigma_1, \sigma)$ , но не слагаемого  $\varphi(\sigma_2, \sigma)$ , то этот спин принадлежит множеству  $r^{(1)}$ , если нет первого слагаемого, но есть второе – множеству  $r^{(2)}$ , а если присутствуют оба этих слагаемых –

множеству  $r^{(12)}$ . Очевидно, множество  $r$  есть объединение непересекающихся множеств  $r^{(1)}$ ,  $r^{(2)}$  и  $r^{(12)}$ .

Полагая, что вероятности  $P_i$  того, что кластерный спин находится в состоянии  $m_i$ , одинаковы для обоих спинов кластера, из (1.22), (1.23) получим для гамильтониана (1.3)

$$P_i = \left\langle \frac{1}{2} \frac{\sum_j \exp(-\mathcal{H}_2(m_i, m_j)/kT) + \sum_j \exp(-\mathcal{H}_2(m_j, m_i)/kT)}{\sum_{(i,j)} \exp(-\mathcal{H}_2(m_i, m_j)/kT)} \right\rangle_{W_2}, \quad (1.25)$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_2(m_i, m_k) = & \varphi(m_i, m_k) + \psi(h, m_i) + \psi(h, m_k) + \\ & + \sum_j \varphi(m_i, \sigma_j^{(1)}) + \sum_j \varphi(m_k, \sigma_j^{(2)}) + \\ & + \sum_j (\varphi(m_i, \sigma_j^{(12)}) + \varphi(m_k, \sigma_j^{(12)})) \end{aligned}$$

где  $\sigma_j^{(1)}$ ,  $\sigma_j^{(2)}$  и  $\sigma_j^{(12)}$  спины, принадлежащие  $r^{(1)}$ ,  $r^{(2)}$  и  $r^{(12)}$  соответственно.

Функция  $W_2$  есть функция распределения для вероятностей различных конфигураций соседних спинов  $\sigma_j^{(1)}$ ,  $\sigma_j^{(2)}$  и  $\sigma_j^{(12)}$ . Для этой функции распределения можно принимать те же приближения, что и для кластера из одного спина и получать соответствующие приближенные методы расчета термодинамических средних. Оказывается [2], что полученные таким путем приближения, например, приближение среднего поля для кластера из двух атомов или приближение, основанное на использовании полиномиальной функции распределения, оказываются точнее, чем соответствующие приближения для кластера из одного спина.

Конечно, использование кластеров для построения приближенных способов нахождения термодинамических средних ограничено возрастающей сложностью «кластерного» гамильтониана  $\mathcal{H}_c(c, r)$  при увеличении числа кластерных спинов  $n$ . Однако даже при сравнительно небольшом числе  $n$  можно гораздо точнее учесть топологию решетки, чем при использовании «односпинового» кластера (1.15) и (1.16). Например, можно рассмотреть кластер в виде замкнутой цепочки спинов (циклический кластер) или кластер, образованный спинами, находящимися в вершинах многогранника (в вершинах куба, например на кубической решетке). Даже если ограничиться только кластером из двух спинов, можно при определенном приближении для функции  $W_2$  получить метод расчета, различающий решетки с одним и тем же координационным числом  $q$  - например, кубическую и плоскую треугольную [2]. Кроме того, использование кластеров позволяет вычислять спиновые корреляции между атомами кластера, что при определенных допущениях позволяет делать выводы о корреляционной функции и о поведении корреляционной длины в системе [9].

Использование кластеров различных размеров открывает еще одну дополнительную возможность для построения приближенных решений. Эта возможность заключается в следующем. Рассмотрим два кластера содержащие  $n$  и  $n'$  спинов. Предположим, что эти кластеры отличаются между собой либо количеством спинов, либо топологической структурой. Для каждого из этих кластеров можно с помощью (1.13) вычислить некоторую вероятность, относящуюся к одному или нескольким спинам. Например, вероятности  $P_i$  того, что кластерный спин находится в состоянии  $m_i$  или вероятности, относящиеся к паре соседних спинов. Приравнивая теперь соответствующие выражения для обоих кластеров между собой, получим выражение, на основе которого можно строить различные приближения.

Проиллюстрируем этот подход на примере модели Изинга с взаимодействием между ближайшими соседями. Взяв на решетке кластер из одного спина  $\sigma_0$ , из (1.16) получим

$$M = \langle \text{th}(Kh + h_e) \rangle_{W_1(h)}, \quad (1.26)$$

где  $M = (+1)P_1 + (-1)P_2$  – средняя намагниченность на спин, а усреднение производится по функции распределения «поля взаимодействия»  $h = \sum \sigma_j$  – сумме всех спинов, соседних к  $\sigma_0$ . Возьмем теперь кластер из двух соседних атомов. Множество  $s$  состоит теперь из двух спинов  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$ , а «кластерный гамильтониан»

$$\mathcal{H}_2(\sigma_1, \sigma_2) = -J\sigma_1\sigma_2 - (Jh_1 + H_e)\sigma_1 - (Jh_2 + H_e)\sigma_2,$$

где «поля взаимодействия»  $h_1$  и  $h_2$  являются суммами значений внешних спинов, взаимодействующих с кластерными спинами  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$  соответственно. Вычисляя для этого кластера намагниченность с помощью (1.25), получим

$$M = \left\langle \frac{\text{sh}(K(h_1+h_2)+2h_e)}{\text{ch}(K(h_1+h_2)+2h_e) + e^{-2K}\text{ch}K(h_1-h_2)} \right\rangle_{W_2(h_1, h_2)} \quad (1.27)$$

усреднение здесь проводится по совместной функции распределения полей взаимодействия  $W_2(h_1, h_2)$ .

Приравнивая теперь правые части (1.26) и (1.27), получим

$$\langle \text{th}(Kh + h_e) \rangle_{W_1(h)} = \left\langle \frac{\text{sh}(K(h_1+h_2)+2h_e)}{\text{ch}(K(h_1+h_2)+2h_e) + e^{-2K}\text{ch}K(h_1-h_2)} \right\rangle_{W_2(h_1, h_2)} \quad (1.28)$$

Согласно изложенному выше знание «истинных» функций распределения  $W_1(h)$  и  $W_2(h_1, h_2)$  эквивалентно точному решению задачи, для этих функций равенство (1.28) выполняется тождественно, а намагниченность  $M$  найдется из любого равенства (1.26) или (1.27). Допустим теперь, что берется некоторое приближение для функций распределения  $W_1(h)$  и  $W_2(h_1, h_2)$ , в котором обе эти функции выражены через один неизвестный параметр. Тогда подставляя эти приближенные выражения в (1.28) получим уравнение относительно этого параметра. Например, рассмотрим для функций  $W_1(h)$  и  $W_2(h_1, h_2)$  приближение «среднего поля»

$$W_1(h) = \delta(h - q\mu),$$

$$W_2(h_1, h_2) = \delta(h_1 - (q-1)\mu)\delta(h_2 - (q-1)\mu),$$

где  $\mu$  – некоторый неизвестный параметр, то есть, заменим поля  $h$ ,  $h_1$  и  $h_2$  их средними значениями, которые будем считать пропорциональными числу спинов, взаимодействующих с  $\sigma_0$ ,  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$  соответственно. Тогда из (1.28) получим

$$\text{th}(Kq\mu + h_e) = \frac{\text{sh}(2K(q-1)\mu + 2h_e)}{\text{ch}(2K(q-1)\mu + 2h_e) + e^{-2K}} \quad (1.29)$$

Решив теперь это уравнение относительно  $\mu$  и подставив это решение в левую (или правую) часть (1.29), получим намагниченность как функцию  $K$ ,  $h_e$  и координационного числа решетки  $q$ . Если же для функций распределения принять более детальное приближение, например, на основе полиномиального распределения (1.20) (приближение среднего спина), то получим приближение, в рамках которого можно точнее учитывать геометрию решетки, поскольку в этом случае функция  $W_2(h_1, h_2)$  будет зависеть уже не только от координационного числа, но и от наличия спинов, соседних к обоим спинам кластера [2].

Нетрудно показать (глава 3 и глава 4), что приближение (1.29) есть не что иное, как решение модели Изинга на решетке Бете. Оказывается, что и для модели более общего вида, чем модель Изинга, решение на решетке Бете может быть интерпретировано как решение, полученное сопоставлением кластеров из одного и двух спинов в «среднеполевом» приближении для функций распределения по полям взаимодействия. Допустим, что входящее в (1.15) выражение  $-\mathcal{H}_1(m_i, \{\sigma_j\})/kT$  может быть представлено в виде

$$-\frac{\mathcal{H}_1(m_i, \{\sigma_j\})}{kT} = \sum_{l=1}^{n-1} K_l m_i^l \sum_{j=1}^q \sigma_j^l + \sum_{l=1}^{n-1} h_l m_i^l \quad (1.30)$$

Обозначив  $\varphi_{1,l} = \sum_{j=1}^q \sigma_j^l$  из (1.15) получим

$$\overline{\sigma_0^s} = \frac{\sum_{i=1}^n m_i^s \exp(\sum_{l=1}^{n-1} (K_l \varphi_{1,l} + h_l) m_i^l)}{\sum_{i=1}^n \exp(\sum_{l=1}^{n-1} (K_l \varphi_{1,l} + h_l) m_i^l)}, \quad (1.31)$$

где  $\overline{\sigma_0^s}$  есть условное среднее значение  $\sigma_0^s$  при фиксированных  $\varphi_{1,l}$ . Согласно (1.15) усреднение этого выражения по функции распределения величин  $\varphi_{1,l}$  даст среднее значение  $\sigma_0^s$  по ансамблю.

Аналогичную процедуру можно построить и для кластера из двух атомов, используя выражение (1.25). Обозначив

$$\varphi_{21,l} = \sum_{j=1}^{q-1} \sigma_{1j}^l \quad \text{и} \quad \varphi_{22,l} = \sum_{j=1}^{q-1} \sigma_{2j}^l,$$

где  $\sigma_{1j}$  совокупность спинов, находящихся во внешних, не входящих в кластер, узлов, соседних к первому атому кластера,  $\sigma_{2j}$  аналогичная совокупность спинов для второго атома. Теперь, используя (1.25), можно найти условные средние  $\frac{1}{2}(\overline{\sigma_1^s} + \overline{\sigma_2^s})$  при фиксированных  $\varphi_{21,l}$  и  $\varphi_{22,l}$ .



Поступим теперь следующим образом. Вместо того, чтобы использовать те или иные выражения для величин  $\varphi_{1,l}$ ,  $\varphi_{21,l}$  и  $\varphi_{22,l}$ , выражающие их через средние по ансамблю, составим систему равенств

$$\overline{\sigma_0^S} = \frac{1}{2}(\overline{\sigma_1^S} + \overline{\sigma_2^S}) \quad (1.32)$$

Эти равенства будем рассматривать как систему из  $n - 1$  уравнений относительно  $3(n - 1)$  неизвестных  $\varphi_{1,l}$ ,  $\varphi_{21,l}$  и  $\varphi_{22,l}$ . Еще  $2(n - 1)$  условий для этих неизвестных можно в принципе ввести различными способами. Наиболее простой из этих способов заключается в следующем. Во-первых, будем считать, что для всех  $l$   $\varphi_{21,l} = \varphi_{22,l} = \varphi_{2,l}$ , что сократит число неизвестных до  $2(n - 1)$ . Кроме того, допустим, что для всех  $l$  выполняются соотношения  $\frac{\varphi_{1,l}}{\varphi_{2,l}} = \frac{q}{q-1}$ . Если все  $K_l$  в выражении (1.30) не равны нулю, то система (1.32) в совокупности с указанными выше дополнительными условиями позволяет вычислить все величины  $\varphi_{1,l}$ . Средними по ансамблю  $\langle \sigma_0^S \rangle$  будем теперь считать значения, вычисляемые по (1.31) при подстановке в это выражение полученных решений. Если же некоторые  $K_l$  в выражении (1.30) равны нулю, можно прибегнуть к следующему приему. Найдем  $\langle \sigma_0^S \rangle$  описанным выше способом, полагая, что все  $K_l$  не равны нулю, а затем перейдем в полученных выражениях к пределу  $K_l \rightarrow 0$  для тех  $l$ , для которых соответствующие  $K_l$  не входили в выражение (1.30). Полученное этим способом решение для  $\langle \sigma_0^S \rangle$  и есть точное решение для решетки Бете (1.10).

## 1.5. Усреднение по полям взаимодействия для разбавленных магнетиков

Главное отличие систем с замороженными примесями от чистых магнетиков заключается в нарушении трансляционной симметрии решетки – термодинамические средние, такие, например, как вероятности различных состояний  $P_i$  в общем случае не равны для различных спинов системы. Здесь, конечно, можно прибегнуть к усреднению по различным конфигурациям примесей, либо согласно идее самоусреднения [21] – по различным спином в одной и той же конфигурации. Однако эта процедура вовсе не является тривиальной. Дело в том, что критические явления и фазовые переходы возникают в системе при термодинамическом пределе, – когда количество связанных между собой спинов стремится к бесконечности. В системе без примесей все спины связаны между собой, но при добавлении немагнитных примесей в системе даже в термодинамическом пределе возникают области изолированных спинов – группы конечного числа спинов, связанных только друг с другом. Понятно, что с уменьшением концентрации магнитных атомов  $b$  таких групп становится все больше, а при значениях  $b$ , меньших некоторого предельного значения  $b_c$ , которое называется порогом протекания, вся система спинов распадается на не связанные конечные группы [8]. Если же  $b > b_c$ , некоторая доля спинов  $P(b)$

образует так называемый бесконечный кластер – количество входящих в него спинов бесконечно в термодинамическом пределе. Фазовые переходы и спонтанная намагниченность в системе образуется именно за счет спинов этого бесконечного кластера.

Учитывая, что и порог протекания  $b_c$  и функция  $P(b)$  определяются только геометрией самой решетки и не зависят ни от числа возможных состояний спина  $n$ , ни от конкретного вида гамильтониана взаимодействия (1.3), возникает мысль рассматривать «перколяционную часть» задачи как заданную. Иными словами, полагать, что  $b_c$  и  $P(b)$  являются такими же заранее определенными параметрами, как, например, координационное число решетки  $q$ . В качестве примера такого подхода можно рассмотреть такую модификацию метода среднего поля для магнетиков с замороженными примесями. Согласно приближению среднего поля для модели Изинга с взаимодействием только между ближайшими соседями средняя намагниченность спина при отсутствии внешнего поля определяется из самосогласованного уравнения  $M = \text{th}(Kh)$ , где  $h$  – среднее поле взаимодействия. Для чистого магнетика  $h = qM$ . Для магнетика с замороженными примесями  $h = \langle q_i \sigma_i \rangle$  – среднее по ансамблю значение произведения спина  $\sigma_i$  на число его ближайших соседей  $q_i$ , которое является случайной величиной, принимающей целочисленные значения от 0 до  $q$  и в среднем равной  $qb$ . В самом простом и грубом приближении, не учитывающем перколяционных свойств решетки, можно считать

$$h = \langle q_i \sigma_i \rangle \approx \langle q_i \rangle \langle \sigma_i \rangle = qbM$$

Если теперь приближенно учесть то обстоятельство, что в отсутствие внешнего поля ненулевой средней намагниченностью могут обладать только спины, входящие в бесконечный кластер, то среднее поле взаимодействия можно оценить так:  $h \approx qbP(b)M$ , то есть, оценивая среднее  $\langle q_i \sigma_i \rangle$ , мы учитываем только спины бесконечного кластера. Тогда уравнение для нахождения спонтанной намагниченности в приближении среднего поля

$$M = \text{th}(KqbP(b)M).$$

Это уравнение имеет ненулевое решение только при значениях  $K$  и  $b$ , удовлетворяющих условию

$$KqbP(b) > 1$$

Граница этой области определяет зависимость температуры Кюри от концентрации магнитных атомов

$$T_c(b) = bP(b)T_c(1) \quad (1.33)$$

где  $T_c(1) = qJ/k$  – температура Кюри чистого магнетика. Как показано в [8], равенство (1.33) действительно выполняется в хорошем приближении для модели Изинга с немагнитными примесями.

Описанный выше подход имеет, впрочем, некоторые недостатки. Во-первых, функция  $P(b)$ , как правило, не известна – ее нахождение является в общем случае отдельной сложной задачей. Во-вторых нет очевидных или универсальных способов использования заданной «перколяционной геометрии» для решения «магнитной» части задачи.

Можно, однако, использовать и другой подход к исследованию магнетиков с замороженными примесями. Этот подход заключается в следующем. Не используя никакой априорной информации о перколяционных свойствах решетки, найти решение (точное или приближенное) «магнитной» задачи с заданной концентрацией магнитных атомов. А уже на основе этого решения получить и описание перколяционных свойств [48]. Например, функцию  $P(b)$  можно найти как предельное значение намагниченности при  $T \rightarrow 0$  или из соотношения (1.33) по концентрационной зависимости температуры Кюри.

Обобщим метод усреднения по обменным полям на случай магнетика с замороженными примесями. Для модели с замороженным разбавлением по узлам (или связям), например с гамильтонианом (1.5), основное выражение метода усреднения по полям взаимодействия  $P_i = \sum_r p_i(r) W(r)$  все еще остается в силе. Но теперь вероятности  $P_i$  в общем случае различны для различных магнитных атомов. Согласно идее самоусреднения, для получения вероятностей  $\bar{P}_i$ , связанных с макроскопическими наблюдаемыми величинами, вероятности  $P_i$  нужно усреднить по всем магнитным атомам решетки. То есть

$$\bar{P}_i = \sum_r p_i(r) \bar{W}(r) , \quad (1.34)$$

где  $\bar{W}(r)$  – функция распределения, усредненная по всем узлам решетки, занятыми магнитными атомами. Область определения функции  $\bar{W}(r)$  состоит теперь не только из всех возможных конфигураций  $r$  содержащих ровно  $q$  спинов, но и из конфигураций, содержащих меньшее число спинов (от нуля, до  $q$ ), поскольку некоторые соседние к магнитному атому узлы могут быть заняты атомами примеси.

Теперь, на основе (1.34) можно строить приближенные методы нахождения  $\bar{P}_i$ , используя те или иные приближения для  $\bar{W}(r)$ . Однако, основная проблема с использованием этого выражения для построения приближенных методов решения заключается в упомянутой выше корреляции между значениями переменных  $\sigma_j \in r$  и числом магнитных соседей узла  $q_0$ . Оказывается впрочем, что даже пренебрегая этой корреляцией можно получить качественно верную зависимость спонтанной намагниченности и температуры Кюри от концентрации магнитных атомов. Рассмотрим, например, модель Изинга с замороженным беспорядком и взаимодействием только между ближайшими соседями. Тогда из (1.34) получим

$$M = \langle \text{th}(Kh + h_e) \rangle_{W(h)} \quad (1.35)$$

Функцию распределения по полям взаимодействия построим в биномиальном приближении следующим образом

$$W(h) = \sum_{n=0}^q C_q^n b^n (1-b)^{q-n} W_n(h), \quad (1.36)$$

где

$$W_n(h) = \sum_{k=0}^n C_n^k (P_1)^k (P_2)^{n-k} \delta(h - (2k - n)) \quad (1.37)$$

$P_1$  и  $P_2$  – усредненные по конфигурациям вероятности положительного и отрицательного значений изинговского спина. Если принять  $P_{1,2} = (1 \pm M)/2$ , то, подставляя (1.36), (1.37) в (1.35), получим уравнение, определяющее зависимость намагниченности  $M$  от температуры, внешнего поля и концентрации магнитных атомов  $b$ .

Рассмотрим теперь на решетке кластер, состоящий из  $n$  узлов. Как и в случае чистого магнетика, обозначим  $c$  совокупность входящих в кластер спинов. Но теперь нужно учесть возможность того, что некоторые узлы кластера могут быть заняты немагнитными примесями. Обозначим  $\{\xi_i\}_c$  совокупность «кластерных» переменных  $\xi_i$ , определяющих заполнение узлов кластера магнитными атомами или атомами примеси и усредним (1.25) по всем возможным вариантам распределения примесей в узлах решетки, не входящих в кластер. Получим

$$\bar{P}(c, \{\xi_i\}_c) = \sum_r p(c, \{\xi_i\}_c, r) \bar{W}(r) \quad (1.38)$$

По вероятностям  $\bar{P}(c, \{\xi_i\}_c)$  можно теперь вычислить, например, среднюю намагниченность атома кластера, среднюю спиновую корреляцию или другие, характеризующие кластер средние. Эти величины будут, конечно, зависеть от  $\{\xi_i\}_c$  и поэтому, для того, чтобы перейти к наблюдаемым величинам, их нужно еще усреднить и по  $\{\xi_i\}_c$ . Используя (1.38), можно приближенно вычислять соответствующие средние, построив функцию  $\bar{W}(r)$  в том или ином приближении. И, конечно же, как и в случае чистого магнетика, можно использовать «ренормгрупповой» подход – приравнивание средних, вычисленных по кластерам различного размера или конфигурации.

В настоящей работе предлагается еще один, несколько иной подход к анализу свойств разбавленных магнетиков (глава 4). Вместо того, чтобы с самого начала полагать, что примеси распределены в решетке случайно, рассмотрим магнетик, в котором магнитные атомы и атомы примеси могут перемещаться и находятся в термодинамическом равновесии. Энергия такой системы определяется не только ориентацией магнитных моментов, но и расположением атомов примеси по узлам решетки. Иными словами, гамильтониан той или иной модели магнетика с подвижными примесями будет состоять из слагаемых, связанных с обменным взаимодействием магнитных атомов и слагаемых, связанных с межатомным взаимодействием в кристаллической решетке, причем равновесное распределение атомов примеси зависит от параметров, характеризующих эти взаимодействия. Тогда для каждого значения температуры, внешнего маг-

нитного поля и концентрации (доли) магнитных атомов в системе можно подобрать значения параметров межатомного взаимодействия с таким расчетом, чтобы равновесное распределение атомов примеси было бы как можно ближе к случайному. Для такой модели можно определить несколько типов корреляционных функций, характеризующих взаимосвязь магнитных моментов и взаимосвязь расположения атомов примеси. В качестве условия близости распределения атомов примеси по узлам решетки к случайному можно использовать равенство нулю корреляции в расположении атомов примеси для двух ближайших узлов.

## Глава 2. Одномерная цепочка изинговских спинов

В данной главе работы будет рассмотрена одномерная цепочка изинговских спинов как чистая, так и с немагнитным разбавлением. Как известно [6], одномерная цепочка является в некотором смысле «патологическим» видом кристаллической решетки – в ней не может быть фазового перехода и спонтанной намагниченности при ненулевой температуре, а при немагнитном разбавлении бесконечный кластер магнитных атомов разрушается при любой ненулевой концентрации примесей. Иными словами, рассматривая одномерную цепочку с немагнитными примесями, мы всегда находимся в области концентраций ниже порога протекания и температур выше температуры Кюри. Однако такая область существует у модели Изинга на любой решетке; можно полагать, что концентрационная зависимость температуры Кюри  $T_c(b)$  стягивается в одномерном случае к единственной точке  $b = 1, T_c = 0$ . И, как показано в [6] для чистого магнетика, приближение к точке  $T = 0$  можно рассматривать как приближение к точке фазового перехода со стороны высоких температур. Естественно предположить, что для разбавленной одномерной цепочки приближение к точке  $b = 1, T = 0$  можно рассматривать как приближение к линии  $T_c(b)$  со стороны высоких температур и малых концентраций.

Несмотря на то, что одномерную цепочку можно рассматривать как частный случай решетки Бете с координационным числом  $q$  равным двум, есть причины, по которым ее имеет смысл рассмотреть отдельно. Главная причина заключается в том, что для одномерной цепочки существует способ получения точного решения с помощью трансфер-матрицы конечных размеров [6]. Этот метод позволяет помимо намагниченности найти корреляционную функцию на любом расстоянии, а значит, точно вычислить корреляционную длину. Следовательно, применяя к одномерной цепочке различные приближенные методы, которые можно применять и для  $q > 2$ , получим больше параметров, по которым можно сравнить точное и приближенные решения и точнее оценить степень эффективности каждого приближения. А кроме того, одномерные структуры с обменным взаимодействием могут быть реализованы экспериментально [89], а значит, их теоретическое рассмотрение имеет и самостоятельный практический интерес.

В разделе 2.2 рассмотрено применение методов среднего поля и усреднения по обменным полям к кластерам из одного и двух атомов в линейной цепочке изинговских спинов. Получены значения намагниченности и корреляционных функций в различных приближениях.

В разделе 2.3 решена одномерная модель Изинга с подвижными немагнитными примесями. Для этой модели найдены корреляционные функции. Показано, что с помощью подбора параметров межатомного взаимодействия, систему с подвижными примесями, находящимися в термодинамическом равновесии, можно приблизить к системе с замороженными примесями.

В разделе 2.4 рассмотрена одномерная модель Изинга с неподвижными случайно распределенными немагнитными примесями. Модель Изинга с немагнитным разбавлением применяется для теоретического описания многих объектов и явлений в физике конденсированных сред и ядерной физики. Влияние немагнитного разбавления на критическое поведение магнетиков, в том числе и тех, которые описываются моделью Изинга, представляет значительный научный интерес. Для модели Изинга с немагнитным разбавлением не удастся построить точное решение для какой-либо кристаллической решетки. Свойства этой модели исследуются либо численно, либо в том или ином приближении. В разделе 2.4 получено точное решение для одномерной модели Изинга с неподвижными, хаотично расположенными немагнитными примесями. Это точное решение основано на составлении рекуррентных уравнений, через решения которых выражаются намагниченность и корреляция соседних спинов. Показано, что в пределе, когда разбавленный магнетик переходит в чистый, полученное решение переходит в известное точное решение для одномерной модели Изинга.

Полученное точное решение сравнивается с несколькими приближенными решениями. Были рассмотрены следующие приближенные методы: метод среднего поля, метод усреднения по обменным полям как с учетом, так и без учета корреляций и псевдохаотическое приближение. Наиболее грубым, как и следовало ожидать, оказывается метод среднего поля. Решения, полученные по методу усреднения по обменным полям, особенно с учетом корреляции, гораздо лучше согласуются с точным решением. Но наиболее близким к точному решению оказывается решение, полученное в псевдохаотическом приближении. Причем это приближение превосходит остальные приближения по точности во всем диапазоне концентраций магнитных атомов.

## **2.1. Намагниченность и спиновые корреляции в цепочке изинговских спинов без немагнитного разбавления**

Существует класс приближенных методов нахождения намагниченности и температуры Кюри магнетиков - методов, основанных на использовании самосогласованных уравнений. К ним относятся известные методы среднего поля, приближение Бете, а так же метод усреднения по обменным полям, рассмотренный в работах [1-4]. Все самосогласованные методы можно классифицировать следующим образом. Выделяя в решетке кластер из  $n$  атомов и рассматривая эти атомы как находящиеся в полях  $h + h_i$ , где  $h_i$  - «обменные» поля, запишем равенство (являющееся обобщением равенства, полученного в [5]):

$$\langle \sigma \rangle = \langle f_n(K, h, h_1, \dots, h_n) \rangle. \quad (2.1)$$

Для  $n = 1$  и  $n = 2$  «кластерные» функции  $f_n$  имеют следующий вид:

$$f_1(K, h, h_1, \dots) = \text{th}(Kh_1 + h), \quad (2.2)$$

$$f_2(K, h, h_1, h_2) = \frac{\text{sh}(K(h_1+h_2)+2h)}{\text{ch}(K(h_1+h_2)+2h)+e^{-2K}\text{ch}K(h_1-h_2)}. \quad (2.3)$$

Усреднение в (2.1) проводится по функции распределения полей  $h_i$ , которую можно заменить тем или иным приближением. Суть самосогласованных приближений заключается в следующей процедуре. Приближенное выражение для функции распределения полей  $h_i$  строится с помощью параметра  $\mu$ , через который выражается и намагниченность  $m$ . Возможны два способа реализации этой процедуры – «однокластерный» и «ренормгрупповой» (глава 1). В однокластерном способе рассматривается один кластер из  $n$  атомов и используются равенства

$$m = \langle f_n(K, h, h_1, \dots, h_n) \rangle_{W(\mu)} \quad \text{и} \quad m = \mu$$

а в ренормгрупповом рассматриваются два кластера из  $n$  и  $n'$  атомов соответственно,  $m$  и  $\mu$  находятся из уравнений

$$m = \langle f_n(K, h, h_1, \dots, h_n) \rangle_{W(\mu)}$$

и

$$\langle f_n(K, h, h_1, \dots, h_n) \rangle_{W(\mu)} = \langle f_{n'}(K, h, h_1, \dots, h_{n'}) \rangle_{W'(\mu)}$$

Рассмотрим приближенную плотность вероятности

$$W_n^f(h_1, \dots, h_n, \mu) = \delta(h_1 - q_1\mu) \dots \delta(h_n - q_n\mu) \quad (2.4)$$

$q_i$  – число внешних соседей  $i$ -того узла кластера. Однокластерный способ получения самосогласованных уравнений с использованием этой функции приводит к известному методу среднего поля [6], ренормгрупповой (для кластеров с  $n = 1$  и  $n' = 2$ ) – к приближению Бете [6].

Построим приближенную плотность вероятности  $W_n^S(h_1, \dots, h_n, \mu)$  следующим образом. Будем считать спиновые переменные, соответствующие узлам, соседним к узлам кластера, независимыми случайными величинами, принимающими значения  $+1$  с вероятностью  $(1 + \mu)/2$  и значение  $-1$  с вероятностью  $(1 - \mu)/2$ . Тогда каждая из величин  $h_i$  будет иметь биномиальное распределение, а совместное распределение  $W_n^S(h_1, \dots, h_n, \mu)$  зависит от геометрии решетки [2, 3]. Однокластерный способ с использованием такой функции рассмотрен в [1], а ренормгрупповой – в [2, 3]. Описанные выше способы нахождения намагниченности могут быть обобщены на случай магнетиков, разбавленных немагнитными примесями [1]. Однако в упомянутых выше работах не рассматривались корреляционные функции, хотя из общих соображений можно предположить, что существует внутренняя связь между приближениями и корреляционными функциями. В данной работе мы рассмотрим корреляционные функции для максимально простой модели – одномерной цепочки изинговских спинов и проанализируем поведение этих функций в различных самосогласованных приближениях.

Одномерная модель Изинга определяется следующим образом [6]. Рассмотрим цепочку  $N$  узлов, пронумерованных индексом  $i$  ( $i = 1, \dots, N$ ). Пусть в каждом узле этой цепочки нахо-



дится изинговский «спин», принимающий значения 1 и -1. Положим, что взаимодействуют только спины, находящиеся в соседних узлах. Тогда энергия системы имеет вид:

$$E = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - H_{ex} \sum \sigma_i \quad (2.5)$$

Здесь  $J$  - константа обменного взаимодействия,  $H_{ex}$  пропорциональна внешнему магнитному полю. Кроме того, полагаем, что  $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ , то есть на цепочку наложено периодическое граничное условие. Используя формулу (2.1) получим выражение для статистической суммы:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}} \exp(K \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} + h \sum \sigma_i) \quad (2.6)$$

$K = J/kT$ ,  $h = H_{ex}/kT$ ,  $k$  - постоянная Больцмана,  $T$  - температура системы. Как известно [6], намагниченность  $M$  в одномерной модели Изинга (равная среднему значению спина) в термодинамическом пределе ( $N \rightarrow \infty$ ) равна:

$$M(K, h) = \frac{\text{sh}h}{\sqrt{\text{sh}^2 h + e^{-4K}}}. \quad (2.7)$$

Этот результат можно получить, представив статистическую сумму (6) в виде следа  $N$ -ой степени трансфер-матрицы и выразив сумму через собственные значения этой матрицы [6]. Кроме того можно найти аналитическое выражение для корреляционной функции  $i$ -го и  $j$ -го спинов:

$$g_{ij} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle = (1 - M^2) \left( \frac{\text{ch}h - \sqrt{\text{sh}^2 h + e^{-4K}}}{\text{ch}h + \sqrt{\text{sh}^2 h + e^{-4K}}} \right)^{|j-i|}. \quad (2.8)$$

Рассмотрим теперь некоторые самосогласованные приближения для одномерной модели Изинга. Рассматривая кластеры из одного и двух атомов и применяя однокластерный способ с использованием функции распределения (2.4) получим приближения среднего поля, которые в дальнейшем будем обозначать 1a (для кластера из одного атома) и 1b (для кластера из двух атомов). Уравнения для намагниченности  $m$  в этих приближениях таковы

$$m = \text{th}(2Km + h) \quad \text{и} \quad m = \frac{\text{sh}(2Km + 2h)}{\text{ch}(2Km + 2h) + e^{-2K}}. \quad (2.9)$$

Поведение намагниченности, получаемой из этих уравнений, сильно отличается от точного решения (2.7), в частности из (2.9) следует наличие ненулевой намагниченности при конечных температурах в отсутствие внешнего поля. И, как будет показано ниже, вычисление корреляционных функций в этих приближениях не приводит ни к каким разумным оценкам.

Применив ренормгрупповой способ к кластерам из одного и двух атомов и используя функцию распределения (2.4), получим:

$$m = \text{th}(2K\mu + h) = \frac{\text{sh}(2K\mu + 2h)}{\text{ch}(2K\mu + 2h) + e^{-2K}}. \quad (2.10)$$

Этот метод (который мы в дальнейшем будем обозначать 1c) приводит к точному решению (7), что не удивительно, поскольку одномерную цепочку Изинга можно рассматривать как частный случай решетки Бете. Убедиться в этом можно следующим образом. Обозначим  $x = \exp(2K\mu)$ . Тогда

$$\frac{x^2 e^h - e^{-h}}{x^2 e^h + e^{-h}} = \frac{x^2 e^{2h} - e^{-2h}}{x^2 e^{2h} + e^{-2h} + 2xe^{-2K}} \text{ или } x^2 e^{h-2K} - 2xshh - e^{-h-2K} = 0.$$

Отсюда

$$x = (shh + \sqrt{D})e^{2K-h}, \quad D = sh^2h + e^{-4K} \text{ и}$$

$$m = \frac{x^2 e^h - e^{-h}}{x^2 e^h + e^{-h}} = \frac{shh}{\sqrt{sh^2h + e^{-4K}}} = M(K, h).$$

Применение биномиального распределения  $W_1^S(h_1, \mu)$  и однокластерного способа для кластера из одного атома (метод 2a) приводит к уравнению:

$$A_1 m^2 + B_1 m + C_1 = 0 \quad (2.11)$$

где

$$A_1 = (\text{th}(2K + h) + \text{th}(-2K + h) - 2\text{th}h)/4,$$

$$B_1 = (\text{th}(2K + h) - \text{th}(-2K + h) - 2)/2,$$

$$C_1 = (\text{th}(2K + h) + \text{th}(-2K + h) + 2\text{th}h)/4.$$

для кластера из двух атомов (метод 2b) – к уравнению:

$$A_2 m^2 + B_2 m + C_2 = 0, \quad (2.12)$$

где

$$A_2 = \left( \frac{\text{sh}(2K+2h)}{\text{ch}(2K+2h)+e^{-2K}} + \frac{\text{sh}(-2K+2h)}{\text{ch}(-2K+2h)+e^{-2K}} - 2 \frac{\text{sh}(2h)}{\text{ch}(2h)+e^{-2K}} \right) / 4,$$

$$B_2 = \left( \frac{\text{sh}(2K+2h)}{\text{ch}(2K+2h)+e^{-2K}} - \frac{\text{sh}(-2K+2h)}{\text{ch}(-2K+2h)+e^{-2K}} - 2 \right) / 2,$$

$$C_2 = \left( \frac{\text{sh}(2K+2h)}{\text{ch}(2K+2h)+e^{-2K}} + \frac{\text{sh}(-2K+2h)}{\text{ch}(-2K+2h)+e^{-2K}} + 2 \frac{\text{sh}(2h)}{\text{ch}(2h)+e^{-2K}} \right) / 4,$$

а согласно ренормгрупповому способу с использованием биномиального распределения (метод 2c), намагниченность находится из уравнений:

$$m = A_1 \mu^2 + (B_1 + 1)\mu + C_1, \quad (2.13)$$

$$(A_1 - A_2)\mu^2 + (B_1 - B_2)\mu + (C_1 - C_2) = 0.$$

Корреляционные функции для всех приближений найдем следующим образом. Используя (2.7) и (2.8), можно построить функции распределения по обменным полям для кластеров из одного и двух атомов:

$$W_1(h_1) = P_{1,1}\delta(h_1 - 2) + 2P_{1,-1}\delta(h_1) + P_{-1,-1}\delta(h_1 + 2), \quad (2.14)$$

где

$$P_{1,1} = \frac{(1+M)^2}{4} + \frac{g_{13}}{4}, \quad P_{1,-1} = \frac{1-M^2}{4} - \frac{g_{13}}{4}, \quad P_{-1,-1} = \frac{(1-M)^2}{4} + \frac{g_{13}}{4}$$

$$W_2(h_1, h_2) = Q_{1,1}\delta(h_1 - 1)\delta(h_2 - 1) + Q_{1,-1}\delta(h_1 - 1)\delta(h_2 + 1) + Q_{-1,-1}\delta(h_1 + 1)\delta(h_2 - 1) + Q_{-1,-1}\delta(h_1 + 1)\delta(h_2 + 1) \quad (2.15)$$

Величины  $Q$  вычисляются так же, как и  $P$ , только вместо  $g_{13}$  нужно взять  $g_{14}$ . Непосредственной проверкой можно убедиться, что усреднение (2.2) и (2.3) по функциям распределения

$W_1(h_1)$  и  $W_2(h_1, h_2)$  равно точному значению намагниченности (2.3). Выражая из этих равенств  $g_{13}$  и  $g_{14}$ , получим:

$$g_{13} = -(A_1 M^2 + B_1 M + C_1)/A_1$$

(2.16)

и

$$g_{14} = -(A_2 M^2 + B_2 M + C_2)/A_2$$

Эти же выражения мы будем использовать для нахождения приближенных значений корреляционных функций, подставляя вместо  $M$  соответствующее приближенное значение намагниченности  $m$ . Несколько сложнее построить выражение для нахождения приближенных значений корреляции между соседними спинами  $g_{12}$ . Это выражение можно построить следующим образом. Рассмотрим кластер состоящий из двух соседних атомов и вычислим среднее значение произведения их спинов по ансамблю с гамильтонианом (2.5):

$$w_2(K, h, h_1, h_2) = \frac{\text{ch}(K(h_1+h_2)+2h) - e^{-2K} \text{ch}K(h_1-h_2)}{\text{ch}(K(h_1+h_2)+2h) + e^{-2K} \text{ch}K(h_1-h_2)}$$

Теперь можно найти корреляционную функцию  $g_{12}$  по формуле

$$g_{12} = \langle w_2(K, h, h_1, h_2) \rangle - M^2, \tag{2.17}$$

где усреднение в первом слагаемом правой части проводится по функции распределения (2.15). Непосредственной проверкой можно убедиться, что это выражение совпадает с (2.8). Это же выражение мы будем использовать для нахождения приближенного значения  $g_{12}$ , заменяя  $M$  на  $m$  и проводя усреднение по соответствующей приближенной функции распределения.

На рисунке 2.1 показаны зависимости намагниченности от параметра  $K$  при фиксированном значении  $h = 0,1$ . Кривые 1 и 2 построены по методам 1а и 1б соответственно, кривые 3 и 4 – по методам 2а и 2б.

Кривая 6 – точное решение, а кривая 5 – ренормгрупповой метод с усреднением по биномиальной функции распределения – 2с. На рисунке 2.2 приведены графики зависимостей от  $K$  при том же  $h$  значении корреляционной функции  $g_{12}$  вычисленной по (2.17) в различных приближениях. Кривые 1 и 2 – по методам 2а и 2б, кривая 3 – по методу 2с, а кривая 4 – точное решение 2.8.

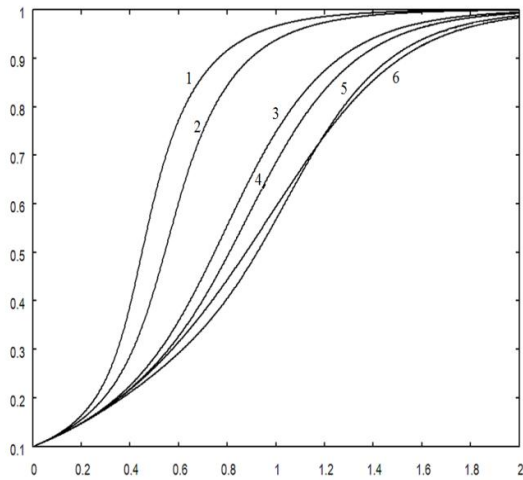


Рис. 2.1

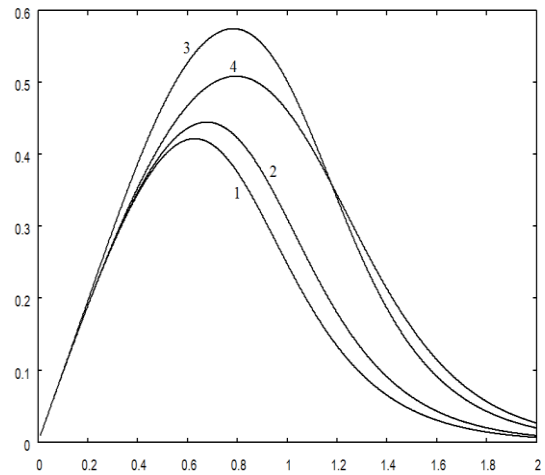


Рис.2.2

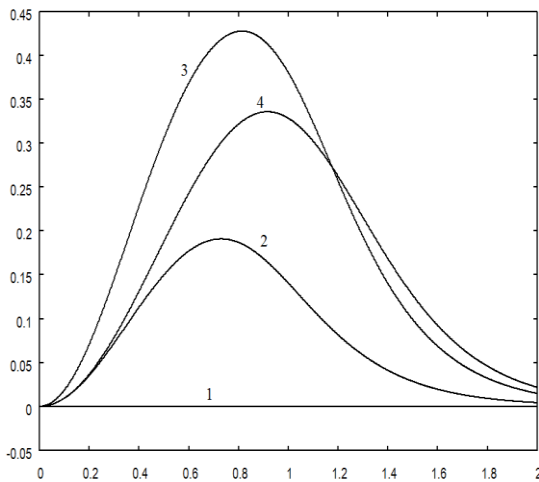


Рис. 2.3

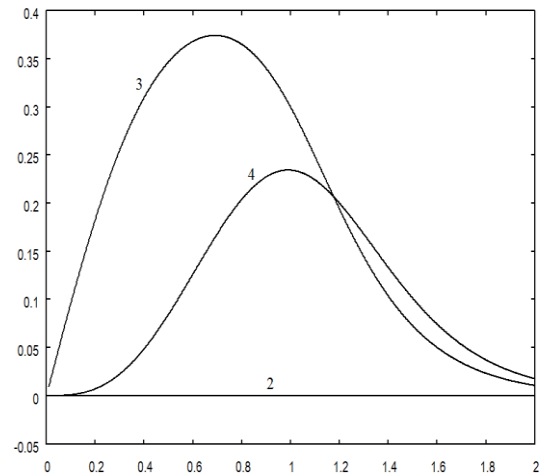


Рис.2.4

На рисунке 2.3 представлены корреляционные функции  $g_{13}$  найденные по методу 2b (кривая 2), 2c (кривая 3) и точное решение – кривая 4. Кривая 1 показывает корреляционную функцию  $g_{13}$ , вычисленную по методу 2a. Эта функция, как и следовало ожидать из характера этого приближения, тождественно равна нулю. Наконец, рис 2.4 иллюстрирует зависимости от  $K$  функций  $g_{14}$ , вычисленных по второй из формул (2.16). Кривая 3 на этом рисунке построена по методу 2c, нулевая зависимость 2 – по методу 2b, а кривая 4 – точное решение.

В целом, анализ поведения корреляционных функций, вычисленных в различных приближениях, позволяет сделать следующие выводы:

1. Метод среднего поля (понимаемый как усреднение выражений типа (2.2) или (2.3) по  $\delta$ -образному распределению (2.4)) не дает никаких разумных оценок для корреляционных функций спинов, находящихся друг от друга дальше, чем размер рассматриваемого кластера.

2. Однокластерные методы, основанный на усреднении по биномиальной функции распределения (2а и 2b), дают более точное значение намагниченности, чем методы среднего поля, основанные на кластерах тех же размеров (1а и 1b). Кроме того, эти методы позволяют получить разумную оценку для корреляционной функции спинов, находящихся на расстоянии, на единицу больше, чем размер кластера (кривая 1 на рис. 2.2 и кривая 2 на рис. 2.3).

3. Наиболее точное приближение, как для намагниченности, так и для соответствующих корреляционных функций, дает ренормгрупповой метод 2с. И хотя метод 1с является в данном случае (для линейной цепочки спинов) точным решением, проведенные нами исследования показывают, что метод 2с дает более точные результаты для решеток с более сложной геометрией.

## 2.2. Одномерная модель Изинга с подвижными примесями

Частным случаем решетки Бете [6, 7] является одномерная цепочка подвижных магнитных и немагнитных атомов, для которой можно построить точное решение с помощью трансфер-матрицы [6]. Это решение обладает тем преимуществом, что оно позволяет сравнительно легко рассчитать корреляционную функцию.

Запишем статистическую сумму одномерной цепочки, состоящей из  $N$  узлов, в следующем виде:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left\{\sum_{i=1}^N (K\sigma_i\sigma_{i+1} + L\sigma_i^2\sigma_{i+1}^2 + r\sigma_i^2 + h_e\sigma_i)\right\} \quad (2.18)$$

где  $r = \mu/kT$  и используется циклическое граничное условие  $\sigma_1 = \sigma_{N+1}$ . Вычислив тем или иным способом (2.18) можно найти химический потенциал и спонтанную намагниченность из следующих соотношений:

$$bM = \frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z_N}{\partial h_e} \quad \text{и} \quad b = \frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z_N}{\partial r}. \quad (2.19)$$

Для вычисления  $Z_N$  воспользуемся следующим способом [6]. Рассмотрим трансфер-матрицу  $V$

$$V = \begin{pmatrix} 1 & e^{(r+h_e)/2} & e^{(r-h_e)/2} \\ e^{(r+h_e)/2} & e^{K+L+r+h_e} & e^{-K+L+r} \\ e^{(r-h_e)/2} & e^{-K+L+r} & e^{K+L+r-h_e} \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

Если  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$  и  $\lambda_3$  - собственные числа матрицы (2.20), то статистическая сумма (1) равна  $Z_N = \lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N$ . Пусть  $\lambda_1$  есть максимальное из собственных чисел матрицы  $V$ . Тогда в термодинамическом пределе ( $N \rightarrow \infty$ ) формулы (2.19) перейдут в

$$bM = \frac{\partial \ln \lambda_1}{\partial h_e} \quad \text{и} \quad b = \frac{\partial \ln \lambda_1}{\partial r}. \quad (2.21)$$

Собственные числа (2.20) находятся из характеристического уравнения:

$$\lambda^3 + A\lambda^2 + B\lambda + C = 0, \quad (2.22)$$

где

$$A = -(1 + 2e^{(1+r)K+r} \text{ch}(h_e))$$

$$B = 2(e^{2(\gamma K+r)} \text{sh}(2K) + (e^{(1+\gamma)K} - 1)e^r \text{ch}(h_e))$$

$$C = -4e^{\gamma K+2r}(e^{\gamma K} \text{ch}(K) - 1)\text{sh}(K)$$

Дифференцируя (2.21) по  $r$  и по  $h_e$  и используя (2.22), можно записать выражения для нахождения  $M$  и  $r$  через  $\lambda_1$  и производные коэффициентов  $A$ ,  $B$  и  $C$ :

$$bM = -\frac{\lambda_1 \frac{\partial a}{\partial h_e} + \frac{\partial b}{\partial h_e}}{3\lambda_1^2 + 2a\lambda_1 + b}, \quad b = -\frac{\lambda_1^2 \frac{\partial a}{\partial r} + \lambda_1 \frac{\partial b}{\partial r} + \frac{\partial c}{\partial r}}{(3\lambda_1^2 + 2a\lambda_1 + b)\lambda_1} \quad (2.23)$$

Решая (2.22) численно или по формулам Кардано и находя  $\lambda_1$ , можно, используя (2.23), найти зависимость намагниченности  $M$  от  $b$  и  $h_e$ .

Определим для модели Изинга с подвижными примесями корреляционные функции. Ковариацию величин  $\sigma_i^2$  и  $\sigma_j^2$  (средние значения которых равны концентрации магнитных атомов  $b$ ), рассматриваемую как функция от расстояния между этими узлами, будем называть «позиционной» корреляционной функцией:

$$g_{ij}^p = \langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle - b^2.$$

Эта функция показывает коррелированность в расположении магнитных атомов (или атомов примеси); впрочем, даже если все  $g_{ij}^p$  равны нулю, это еще не означает, что примеси распределены в решетке полностью хаотично. Ковариацию самих величин  $\sigma_i$  и  $\sigma_j$

$$g_{ij}^{mp} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - b^2 M^2$$

будем называть «магнитно-позиционной» корреляционной функцией, поскольку она характеризует связь между расположением и магнитными моментами атомов одновременно. Для того чтобы описать корреляцию только между величинами магнитных моментов, определим «магнитную» корреляционную функцию:

$$g_{ij}^m = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle / \langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle - M^2 = (g_{ij}^{mp} + b^2 M^2) / (g_{ij}^p + b^2) - M^2.$$

Значения этой функции есть разницы условных средних от произведений  $\sigma_i \sigma_j$  и произведений условных средних  $\sigma_i$  и  $\sigma_j$  при условии, что обе эти величины не равны нулю.

Рассмотрим вычисление этих корреляционных функций для линейной цепочки. Для одномерной цепочки, состоящей из  $N$  узлов

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle = & \\ = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{\sigma\}} & V(\sigma_1, \sigma_2) \dots V(\sigma_{i-1}, \sigma_i) \sigma_i^2 V(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \dots \\ & \dots V(\sigma_{j-1}, \sigma_j) \sigma_j^2 V(\sigma_j, \sigma_{j+1}) \dots V(\sigma_N, \sigma_1), \end{aligned} \quad (2.24)$$

где

$$V(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \exp\{K\sigma_i \sigma_{i+1} + L\sigma_i^2 \sigma_{i+1}^2 + r(\sigma_i^2 + \sigma_{i+1}^2)/2 + h_e(\sigma_i + \sigma_{i+1})/2\}$$

элемент трансфер-матрицы.

Введем матрицу  $\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$  и запишем (2.24) в следующем виде:

$$\langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle = \frac{1}{Z_N} \text{Tr} \mathbf{V}^{i-1} \mathbf{S} \mathbf{V}^{j-i} \mathbf{V}^{N-j+1} \quad (2.25)$$

Для вычисления следа в (2.25) рассмотрим ортогональную матрицу  $\mathbf{P}$ , приводящую симметричную трансфер-матрицу  $\mathbf{V}$  к диагональному виду:

$$\mathbf{P}^{-1} \mathbf{V} \mathbf{P} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}.$$

Тогда (2.25) запишется в виде:

$$\langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle = \frac{1}{Z_N} \text{Tr} \begin{pmatrix} \lambda_1^{i-1} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^{i-1} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^{i-1} \end{pmatrix} \tilde{\mathbf{S}} \begin{pmatrix} \lambda_1^{j-i} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^{j-i} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^{j-i} \end{pmatrix} \tilde{\mathbf{S}} \begin{pmatrix} \lambda_1^{N-j+1} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^{N-j+1} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^{N-j+1} \end{pmatrix}$$

где  $\tilde{\mathbf{S}} = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{S} \mathbf{P}$ . Учитывая, что  $Z_N = \lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N$  и переходя к пределу  $N \rightarrow \infty$  получим

$$\langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle = \frac{1}{\lambda_1^{j-1}} \text{Tr} \begin{pmatrix} \lambda_1^{i-1} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^{i-1} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^{i-1} \end{pmatrix} \tilde{\mathbf{S}} \begin{pmatrix} \lambda_1^{j-i} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^{j-i} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^{j-i} \end{pmatrix} \tilde{\mathbf{S}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.26)$$

Выражая (2.26) через элементы матрицы  $\tilde{\mathbf{S}}$ , получим:

$$\langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle = \tilde{s}_{11}^2 + \tilde{s}_{12} \tilde{s}_{21} \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{j-i} + \tilde{s}_{13} \tilde{s}_{31} \left( \frac{\lambda_3}{\lambda_1} \right)^{j-i} \quad (2.27)$$

Вычисляя аналогичным образом  $\langle \sigma_i^2 \rangle$ , можно показать, что оно равно  $\tilde{s}_{11}$ . Поэтому позиционная корреляционная функция является суммой двух убывающих геометрических прогрессий:

$$g_{ij}^p = \langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle - b^2 = A_1 x_1^{j-i} + A_2 x_2^{j-i} \quad (2.28)$$

где  $A_1 = \tilde{s}_{12} \tilde{s}_{21}$ ,  $A_2 = \tilde{s}_{13} \tilde{s}_{31}$ ,  $x_1 = \lambda_2/\lambda_1$ ,  $x_2 = \lambda_3/\lambda_1$ . Для расчета магнитно-позиционной корреляционной функции нужно использовать вместо матрицы  $\mathbf{S}$  матрицу  $\mathbf{S}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$ , что

приводит для  $g_{ij}^{mp}$  к уравнению, аналогичному (2.28):

$$g_{ij}^{mp} = B_1 x_1^{j-i} + B_2 x_2^{j-i}. \quad (2.29)$$

Оказывается, что при  $h_e = 0$  (в этом случае намагниченность  $M$  так же обращается в ноль – в одномерной цепочке нет возникновения спонтанной намагниченности при ненулевой температуре) один из коэффициентов  $A_1$  или  $A_2$  в формуле (2.28) обращается в ноль (какой именно – зависит от нумерации корней  $\lambda_2$  и  $\lambda_3$  характеристического уравнения), то есть позиционная корреляционная функция в этом случае имеет вид убывающей геометрической прогрессии. Что касается магнитно-позиционной корреляционной функции (2.29) то она также ста-

новится при  $h_e = 0$  геометрической прогрессией, но если в (2.28) знаменатель прогрессии  $x_1$ , то в (12) -  $x_2$  и наоборот. Если же  $h_e \neq 0$ , то все четыре коэффициента  $A_1, A_2, B_1$  и  $B_2$  в выражениях (2.28) и (2.29) не равны нулю.

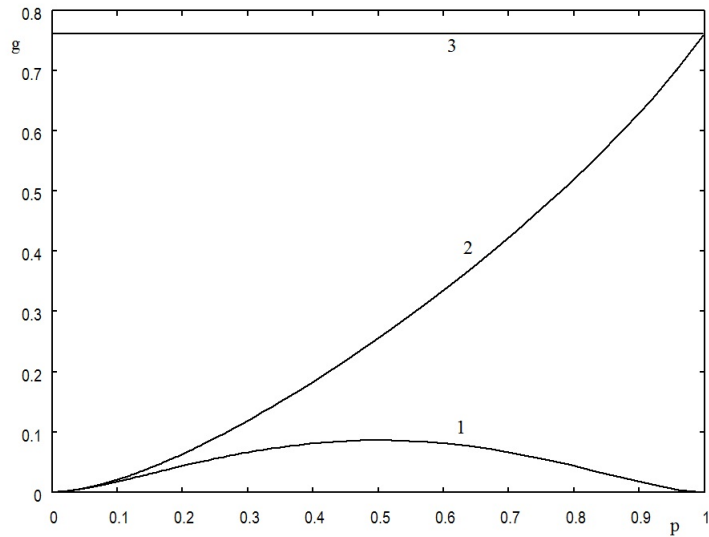


Рис. 2.5. Концентрационная зависимость корреляционных функций ближайших соседей в одномерной цепочке при  $K = 1, h_e = 0, \gamma = 1$ . По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов  $p$ , по вертикальной – значение корреляционной функции. Кривая 1 –  $g_{12}^p(b)$ , кривая 2 –  $g_{12}^{mp}(b)$ , кривая 3 –  $g_{12}^m(b)$ .

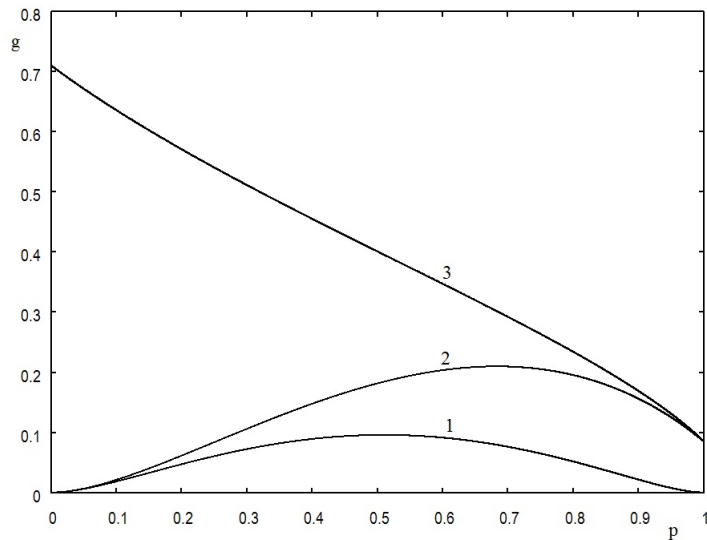


Рис. 2.6. Концентрационная зависимость корреляционных функций ближайших соседей в одномерной цепочке при  $K = 1, h_e = 0,3, \gamma = 1$ . По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов  $p$ , по вертикальной – значение корреляционной функции. Кривая 1 –  $g_{12}^p(b)$ , кривая 2 –  $g_{12}^{mp}(b)$ , кривая 3 –  $g_{12}^m(b)$ .

На рис. 2.5 и 2.6 показаны графики позиционной  $g_{12}^p$  (1), магнитно-позиционной  $g_{12}^{mp}$  (2) и магнитной  $g_{12}^m$  (3) корреляционных функций в зависимости от концентрации магнитных атомов  $p$ ; на рис. 2.5 – при  $h_e = 0$ , а на рис. 2.6 – при  $h_e = 0,3$ .



Позиционная корреляционная функция  $g_{ij}^p$  зависит, в частности, от значения величины  $U$  - эффективного потенциала кулоновского взаимодействия.

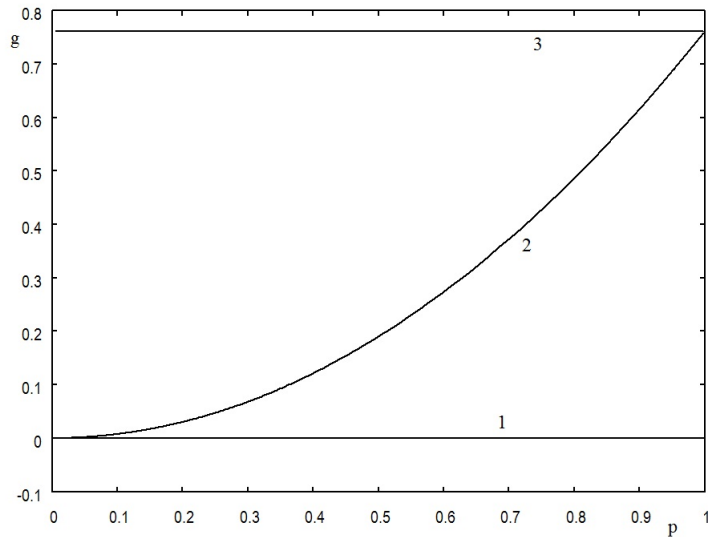


Рис. 2.7. Концентрационная зависимость корреляционных функций ближайших соседей в одномерной цепочке при  $K = 1$ ,  $h_e = 0$ ,  $\gamma = \gamma_0$ . По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов  $b$ , по вертикальной – значение корреляционной функции. Кривая 1 –  $g_{12}^p(b) = 0$ , кривая 2 –  $g_{12}^{mp}(b)$ , кривая 3 –  $g_{12}^m(b)$ .

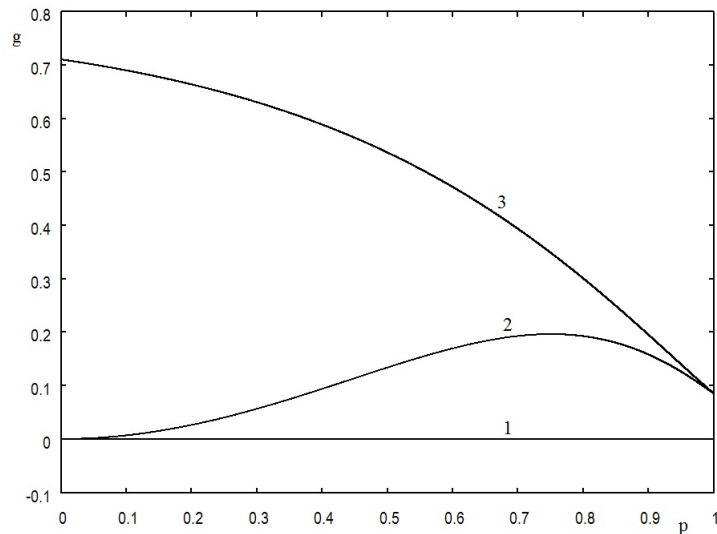


Рис. 2.8. Концентрационная зависимость корреляционных функций ближайших соседей в одномерной цепочке при  $K = 1$ ,  $h_e = 0,3$ ,  $\gamma = \gamma_0$ . По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов  $p$ , по вертикальной – значение корреляционной функции. Кривая 1 –  $g_{12}^p(b) = 0$ , кривая 2 –  $g_{12}^{mp}(b)$ , кривая 3 –  $g_{12}^m(b)$ .

Подберем теперь величину  $U$  с таким расчетом, чтобы при заданных значениях внешнего поля  $h_e$ , температурного параметра  $K$  и концентрации магнитных атомов  $p$  корреляционная функция  $g_{12}^p$  равнялась бы нулю. Согласно изложенному выше, при  $h_e = 0$  такой выбор  $U$  приводит к обращению в ноль всех значений позиционной корреляционной функции  $g_{ij}^p$ , то есть распреде-

ление примесей в этом случае является не коррелированным на любых расстояниях. Строго говоря, это не означает (хотя и не исключает этого), что распределение примесей полностью случайно, поскольку для полностью случайного распределения необходимо равенство нулю не только парных ковариаций, но и тройных, четверных и т.д. Однако равенство нулю парной корреляционной функции позволяет рассматривать распределение примесей как «приближенно случайное». Если же  $h_e \neq 0$ , то обращение в ноль только  $g_{12}^p$  уже не приводит к обращению в ноль всех значений  $g_{ij}^p$ , но все же можно считать, что расположение примесей более хаотично, чем при  $g_{12}^p \neq 0$ . В дальнейшем будем называть распределение примесей с  $g_{12}^p = 0$  «псевдохаотичным».

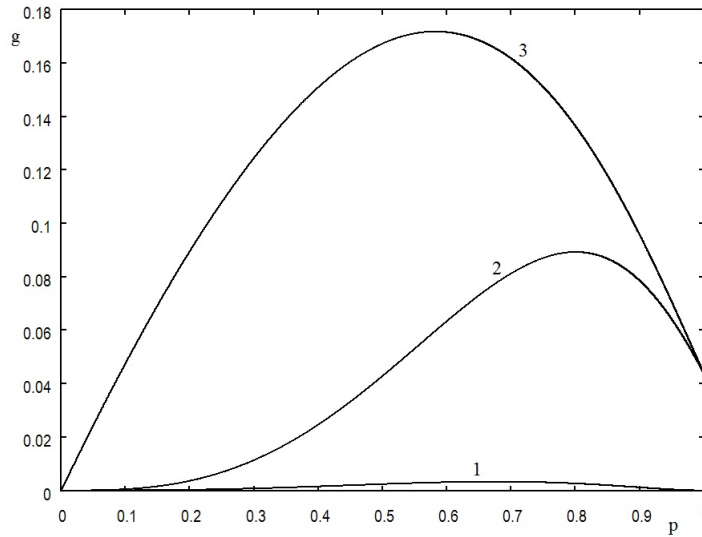


Рис. 2.9. Концентрационная зависимость корреляционных функций для соседей, следующих за ближайшими в одномерной цепочке при  $K = 1$ ,  $h_e = 0,3$ ,  $\gamma = \gamma_0$ . По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов  $p$ , по вертикальной – значение корреляционной функции. Кривая 1 –  $g_{13}^p(b)$ , кривая 2 –  $g_{13}^{mp}(b)$ , кривая 3 –  $g_{13}^m(b)$ .

На рисунках 2.7 и 2.8 показаны графики позиционной  $g_{12}^p$  (1), магнитно-позиционной  $g_{12}^{mp}$  (2) и магнитной  $g_{12}^m$  (3) корреляционных функций в зависимости от концентрации магнитных атомов  $p$ , причем для каждого значения  $p$  величина  $\gamma = U/J$  подбирается так, чтобы  $g_{12}^p = 0$ . На рис. 2.7  $h_e = 0$ , а на рис. 2.8  $h_e = 0,3$ . На рисунке 2.9 показаны графики функций  $g_{13}^p$ ,  $g_{13}^{mp}$  и  $g_{13}^m$  (кривые 1, 2 и 3 соответственно) при  $h_e = 0,3$  и для такого  $\gamma$ , при котором  $g_{12}^p = 0$ . Видно, что хотя  $g_{13}^p$  отлично от нуля, но ее величина значительно меньше других корреляционных функций.

### 2.3. Точное и приближенные решения для одномерной модели Изинга разбавленного магнетика

Известно [8], что критическое поведение разбавленных или аморфных магнетиков может сильно отличаться от критического поведения магнетиков, имеющих трансляционную симметрию решетки. Однако, даже для простых моделей магнетика с разбавлением, например, для модели Изинга с немагнитными примесями, не удастся построить точного решения для плоских или объемных решеток. В этом разделе мы рассмотрим полученное нами точное решение для одномерной модели Изинга с немагнитным разбавлением.

Рассмотрим одномерный изинговский магнетик (цепочку), в котором некоторые магнитные атомы заменены на неподвижные немагнитные примеси, так что вероятность обнаружить в любом узле цепочки магнитный атом равна  $b$ , а вероятность обнаружить там примесь  $1 - b$ . При таком разбавлении цепочка разбивается на отрезки магнитных атомов разной длины, разделенные немагнитными примесями. Среднее значение изинговского спина, в расчете на один магнитный атом (намагниченность) может быть вычислена так:

$$M = \sum_{n=1}^{\infty} m_n p_n,$$

где  $m_n$  - средняя намагниченность атома отрезка длиной  $n$ , а  $p_n$  - вероятность того, что произвольно взятый магнитный атом принадлежит такому отрезку. Очевидно, что  $p_n = nb^{n-1}(1 - b)2$ , а намагниченность  $m_n$  вычислим следующим образом. Пусть  $Z_n$  - статистическая сумма для отрезка из  $n$  изинговских спинов  $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n$

$$Z_n = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} \exp(K \sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i \sigma_{i+1} + h \sum_{i=1}^n \sigma_i) = F_n(+1) + F_n(-1),$$

где

$$F_n(\sigma_n) = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_{n-1}} \exp(K \sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i \sigma_{i+1} + h \sum_{i=1}^n \sigma_i).$$

Здесь  $K = J/kT$  ( $J$  - обменный интеграл,  $T$  - температура,  $k$  - постоянная Больцмана),  $h = H_{ex}/kT$  ( $H_{ex}$  - внешнее поле). Эти безразмерные параметры имеют простой смысл:  $K$  показывает отношение энергии обменного взаимодействия к тепловой энергии, а  $h$  - отношение энергии взаимодействия спина с внешним полем к тепловой.

Тогда

$$m_n = \frac{1}{n} \frac{\partial}{\partial h} \ln Z_n = \frac{1}{n} \frac{F_{n,h}(+1) + F_{n,h}(-1)}{F_n(+1) + F_n(-1)}.$$

Для величин  $F_n(\pm 1)$  и их производных по  $h$   $F_{n,h}(\pm 1)$  можно составить рекуррентные соотношения:

$$F_{n+1}(\sigma) = \sum_{\sigma'=\pm 1} F_n(\sigma') e^{K\sigma\sigma'+h\sigma} = F_n(+1)e^{K\sigma+h\sigma} + F_n(-1)e^{-K\sigma+h\sigma}$$

$$F_{n+1,h}(\sigma) = (F_{n,h}(+1) + \sigma F_n(+1))e^{K\sigma+h\sigma} + (F_{n,h}(-1) + \sigma F_n(-1))e^{-K\sigma+h\sigma}$$

$$F_1(+1) = F_{1,h}(+1) = e^h, F_1(-1) = e^{-h}, F_{1,h}(-1) = -e^{-h}$$

Вводя обозначения

$$x_n = F_n(-1)/F_n(+1), y_n = F_{n,h}(+1)/F_n(+1) \text{ и} \\ z_n = F_{n,h}(-1)/F_n(+1),$$

получим

$$m_n = \frac{1}{n} \frac{y_n + z_n}{1 + x_n}, \\ x_{n+1} = \frac{e^{-2K} + x_n}{1 + x_n e^{-2K}} e^{-2h}, y_{n+1} = \frac{y_n + z_n e^{-2K}}{1 + x_n e^{-2K}} + 1, \\ z_{n+1} = \frac{z_n + y_n e^{-2K}}{1 + x_n e^{-2K}} e^{-2h} - x_{n+1} \\ x_1 = e^{-2h}, y_1 = 1, z_1 = -e^{-2h}$$

Покажем, что при  $n \rightarrow \infty$  значение  $m_n$  стремится к известному значению [6]. При  $n \rightarrow \infty$  последовательность  $x_n$  имеет конечный предел  $X$ , определяемый из уравнения

$$X = \frac{e^{-2K} + X}{1 + X e^{-2K}} e^{-2h}, \\ e^{-2K} X^2 + (1 - e^{-2h})X - e^{-2K-2h} = 0,$$

корни которого

$$X_{1,2} = e^{K-h} (-e^K \operatorname{sh} h \pm R) \text{ где } R = \sqrt{e^{2K} \operatorname{sh}^2 h + e^{-2K}}.$$

Рекуррентные уравнения для  $y_{n+1}$  и  $z_{n+1}$  после подстановки вместо  $x_n$  и  $x_{n+1}$  предельного значения  $X_1$  можно записать в матричном виде

$$\begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}_{n+1} = \mathbf{A} \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}_n + \begin{pmatrix} 1 \\ -X_1 \end{pmatrix},$$

где

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \alpha & \alpha e^{-2K} \\ \alpha e^{-2K-2h} & \alpha e^{-2h} \end{pmatrix} \text{ где } \alpha = \frac{1}{1 + X_1 e^{-2K}}$$

Поэтому

$$\begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}_n = \mathbf{A}^{n-1} \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}_1 + \left( \sum_{i=0}^{n-2} \mathbf{A}^i \right) \begin{pmatrix} 1 \\ -X_1 \end{pmatrix}.$$

Собственные числа матрицы  $\mathbf{A}$  есть 1 и  $\lambda = \frac{1 + X_2 e^{-2K}}{1 + X_1 e^{-2K}}$

Пусть  $\mathbf{W}$  - матрица, приводящая  $\mathbf{A}$  к диагональному виду:

$$\mathbf{A} = \mathbf{W} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} \mathbf{W}^{-1},$$

тогда

$$\begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}_n = \mathbf{W} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \lambda^{n-1} \end{pmatrix} \mathbf{W}^{-1} \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}_1 + \mathbf{W} \begin{pmatrix} n-1 & 0 \\ 0 & \sum_{i=0}^{n-2} \lambda^i \end{pmatrix} \mathbf{W}^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ -X_1 \end{pmatrix}$$

Учитывая теперь, что  $|\lambda| < 1$ , получим в пределе  $n \rightarrow \infty$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}_n = \mathbf{W} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{W}^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ -X_1 \end{pmatrix},$$

значит,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{y_n + z_n}{n} = (w_{11} + w_{21})(w'_{11} - X_1 w'_{12})$$

А предельное значение намагниченности

$$M = \frac{(w_{11} + w_{21})(w'_{11} - X_1 w'_{12})}{1 + X_1},$$

где  $w_{ij}$  - элементы матрицы  $\mathbf{W}$ ,  $w'_{ij}$  - матрицы  $\mathbf{W}^{-1}$ . Вычислив эти элементы, получим

$$w_{11} = 1, \quad w_{21} = X_1, \quad w'_{11} = -\frac{X_2}{X_1 - X_2}, \quad w'_{12} = \frac{1}{X_1 - X_2},$$

то есть

$$M = -\frac{X_1 + X_2}{X_1 - X_2} = \frac{e^K \operatorname{sh} h}{\sqrt{e^{2K} \operatorname{sh}^2 h + e^{-2K}}}.$$

Это выражение совпадает с полученной в [6] намагниченностью бесконечной изинговской цепи.

Выражение для намагниченности  $M$  можно представить в виде степенного ряда по концентрации магнитных атомов  $b$ :

$$M = m_1 + 2(m_2 - m_1)b + \sum_{k=2}^{\infty} ((k+1)m_{k+1} - 2k m_k + (k-1)m_{k-1})b^k,$$

из которого можно найти производные  $\frac{\partial^k M}{\partial b^k}$  при  $b = 0$ . В частности

$$\left. \frac{\partial M}{\partial b} \right|_{b=0} = 2(m_2 - m_1) = 2 \left( \frac{\operatorname{sh}(2h)}{\operatorname{ch}(2h) + e^{-2K}} - \operatorname{th}(h) \right).$$

Аналогично вычисляется среднее значение произведения спинов соседних магнитных атомов.

$$S = \sum_{n=2}^{\infty} s_n \tilde{p}_n,$$

где  $s_n$  - среднее значение произведения спинов, принадлежащих отрезку длиной  $n$ , а  $\tilde{p}_n$  - вероятность того, что пара соседних магнитных атомов принадлежит такому отрезку.  $\tilde{p}_n = (n-1)b^{n-2}(1-b)^2$ , а  $s_n$  найдем так

$$s_n = \frac{1}{n-1} \frac{\partial}{\partial K} \ln Z_n = \frac{1}{n-1} \frac{F_{n,K(+1)} + F_{n,K(-1)}}{F_n(+1) + F_n(-1)}.$$

Вводя обозначения  $t_n = F_{n,h(+1)}/F_n(+1)$  и  $w_n = F_{n,h(-1)}/F_n(+1)$ , получим

$$s_n = \frac{1}{n-1} \frac{t_n + w_n}{1 + x_n}$$

$$t_{n+1} = \frac{t_n + w_n e^{-2K}}{1 + x_n e^{-2K}} + \frac{1 - x_n e^{-2K}}{1 + x_n e^{-2K}}, \quad w_{n+1} = \frac{w_n + t_n e^{-2K}}{1 + x_n e^{-2K}} e^{-2h} - \frac{e^{-2K} - x_n}{1 + x_n e^{-2K}} e^{-2h}$$

$$x_2 = \frac{\operatorname{ch}(-K+h)}{\operatorname{ch}(K+h)} e^{-2h}, \quad t_2 = \operatorname{th}(K+h), \quad w_2 = -\frac{\operatorname{sh}(-K+h)}{\operatorname{ch}(K+h)} e^{-2h}$$

Если  $h = 0$ , то все  $m_n = 0$ , а все  $s_n = \operatorname{th}K$ , поэтому  $M = 0$  и  $S = \operatorname{th}K$ .

Можно также представить  $S$  в виде ряда по степеням  $b$ :

$$S = s_2 + 2(s_3 - s_2)b + \sum_{k=2}^{\infty} ((k+1)s_{k+2} - 2ks_{k+1} + (k-1)s_k)b^k$$

Полученное точное решение можно использовать для оценки точности различных приближенных решений для модели Изинга разбавленного магнетика [1,9]. Построение большого числа приближенных методов можно описать в рамках следующего общего подхода. Рассмотрим изинговский магнетик с разбавлением по связям на решетке с координационным числом  $q$ . Пусть  $h_{in} = \sum \sigma_i$  сумма по соседям, связанным со спином  $\sigma_0$  неразорванными связями, а  $h'_{in} = \sum \sigma_i$  сумма по всем  $q$  соседям  $\sigma_0$ , в том числе и по тем, связи с которыми разорваны. Очевидно, что для чистого, не разбавленного магнетика  $h_{in} = h'_{in}$  для любого атома. Пусть  $W_1(h_{in})$  функция распределения по полям  $h_{in}$ , а  $W_2(h_{in}, h'_{in})$  совместная функция распределения полей  $h_{in}$  и  $h'_{in}$ . ( $W_1(h_{in}) = \int W_2(h_{in}, h'_{in}) dh'_{in}$ ) Тогда

$$m = \langle \text{th}(Kh_{in} + h) \rangle_{W_1(h_{in})} \quad (2.30)$$

и

$$qV = \langle h'_{in} \text{th}(Kh_{in} + h) \rangle_{W_2(h_{in}, h'_{in})}, \quad (2.31)$$

где  $m$  – средняя намагниченность,  $V = \langle \sigma \sigma_0 \rangle$  по всем парам соседних спинов,  $h = H_{ex}/kT$  ( $H_{ex}$  – внешнее поле,  $T$  – температура,  $k$  – постоянная Больцмана). Если теперь использовать ту или иную оценку для функций  $W_1(h_{in})$  и  $W_2(h_{in}, h'_{in})$ , можно построить различные приближенные методы для определения намагниченности в модели Изинга разбавленного магнетика. Например, полагая  $W_1(h_{in}) = \delta(h_{in} - qbm)$ ,  $W_2(h_{in}, h'_{in}) = W_1(h_{in})\delta(h'_{in} - qm)$ , где  $b$  – вероятность того, что связь между соседними узлами окажется не разорванной, получим из (1) и (2) метод среднего поля:  $m = \text{th}(Kqbm + h)$ . Более точное приближение получим используя для  $W_1(h_{in})$  биномиальное распределение:

$$W_1(h_{in}) = \sum_{n=0}^q C_q^n b^n (1-b)^{q-n} \sum_{i=0}^n C_n^i \left(\frac{1+m}{2}\right)^i \left(\frac{1-m}{2}\right)^{n-i} \delta(h_{in} - (2i - n)).$$

При использовании такого распределения, из (2.30) следует метод усреднения по локальным полям или метод среднего спина, рассмотренный в работе [1]. Если в методе среднего спина учесть корреляцию  $V$ , получим

$$W_1(h) = \sum_{n=0}^q F_{q,n}(m, V) G_{q,n}(b, h),$$

$$W_2(h, h') = \sum_{n=0}^q F_{q,n}(m, V) \delta(h' - (2n - q)) G_{q,n}(b, h),$$

где

$$G_{q,n}(b, h) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^{q-n} C_n^i C_{q-n}^j b^{i+j} (1-b)^{q-(i+j)} \delta(h - (i - j))$$

и

$$F_{q,n}(m, V) = C_q^n \left[ \frac{1+m}{2} \left( \frac{1+\mu_1}{2} \right)^n \left( \frac{1-\mu_1}{2} \right)^{q-n} + \frac{1-m}{2} \left( \frac{1+\mu_2}{2} \right)^n \left( \frac{1-\mu_2}{2} \right)^{q-n} \right]$$

$$\mu_1 = \frac{m+V}{1+m}, \quad \mu_2 = \frac{m-V}{1-m}$$

Уравнение для намагниченности по методу среднего спина получается из (2.30) если положить  $V = m^2$ ; уравнение (2.31) в этом случае нужно отбросить.

Другой подход к построению приближенных методов заключается в использовании модели Изинга не с замороженными, а с подвижными немагнитными примесями, находящимися в термодинамическом равновесии. В этом случае в гамильтониан войдет дополнительный параметр, связанный с энергией взаимодействия магнитных атомов и атомов примеси. Для подвижных примесей можно рассчитать корреляцию (ковариацию) в расположении примесей для соседних узлов решетки. Подбирая теперь параметр взаимодействия так, чтобы эта корреляция обращалась в ноль, получим распределение примесей, которое мы назвали «псевдохаотическим» [7, 9, 10]. Применительно к решетке Бете, этот метод приводит к следующему результату [9]:

$$M = \text{th} \frac{qx-h}{q-1},$$

где  $x$  - корень уравнения

$$\text{th} \frac{qx-h}{q-1} = (1-b)\text{th}(x) + b \frac{\text{sh}(2x)}{\text{ch}(2x)+e^{-2K}}.$$

На рисунке 2.10 показаны зависимости намагниченности в расчете на один магнитный атом как функция концентрации магнитных атомов  $b$  при значениях  $K = 0.5$  и  $h = 0.05$ . Кривые 1 и 2 – точное решение и решение, полученное в псевдохаотическом приближении. (Эти две кривые в точности не совпадают, но различие между ними не видно в масштабе рис. 2.10.) Кривая 3 – намагниченность, полученная методом «среднего спина» без учета корреляции, а кривая 4 – с учетом корреляции  $V$ . На рисунке 2.10 не приведена зависимость  $M(b)$  соответствующая приближению среднего поля, так как эта зависимость очень сильно отличается от точного решения (и других приближений) в области больших значений  $b$ . Однако, при малых  $b$  метод среднего поля дает, как ни странно, более близкое к точному значение  $M$ , чем варианты метода среднего спина. При  $b$  близких к нулю, все приближения совпадают с точным решением, что впрочем, и следовало ожидать, т. к. система в этом случае приближается к парамагнитной. При  $b = 1$ , т. е. при отсутствии немагнитного разбавления, метод среднего спина с учетом корреляции и псевдохаотическое приближение дают точное решение. (Такое совпадение будет иметь место не только для одномерной цепочки, но и для решетки Бете с произвольным координационным числом  $q$ .)

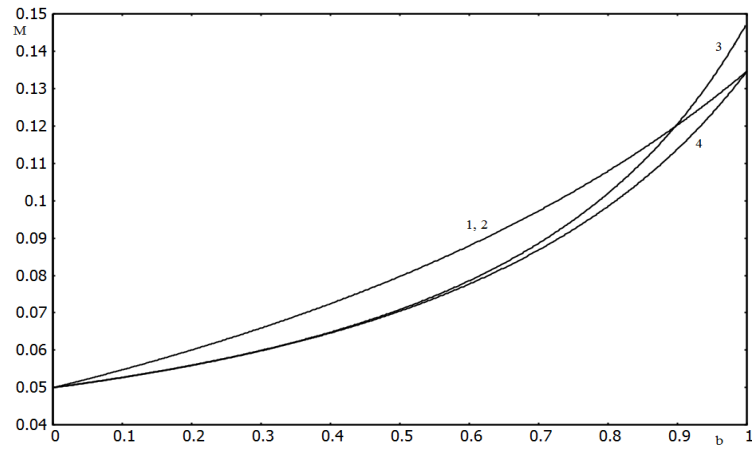


Рис. 2.10

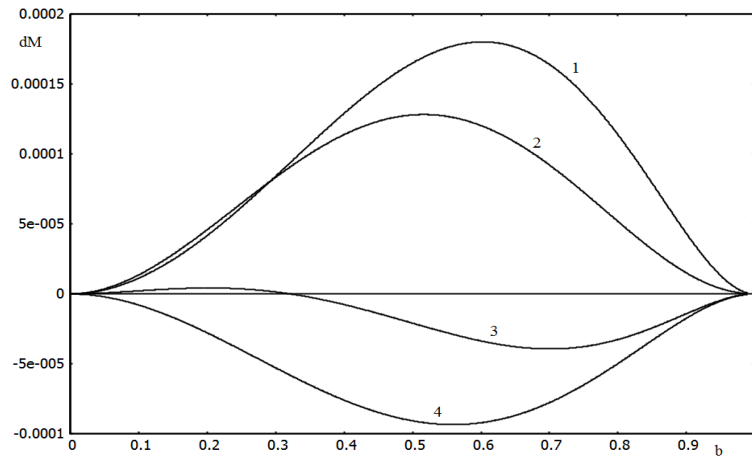


Рис. 2.11

Разница между псевдохаотическим приближением и точным решением показана на рис.2.11. На этом рисунке приведены графики разницы  $M_{nx}(b) - M(b)$  при  $K = 0.5$  и  $h = 0.3, 0.5, 0.7$  и  $1.0$  (кривые 1 – 4 соответственно). Расчет показывает, что эта разница не превосходит по абсолютной величине  $10^{-3} - 10^{-4}$ .



### Глава 3. Модель Изинга чистого и разбавленного магнетика

Модель Изинга чистого и разбавленного магнетика является одним из теоретических инструментов для исследования систем с коллективным взаимодействием как с трансляционной симметрией бесконечного кристалла, так и без нее. Но в этой модели не удастся получить практически никаких точных решений. Однако с помощью приближенных методов, основанных на использовании среднего поля или на усреднении по полям обменного взаимодействия, можно поручить некоторые результаты и для этой модели.

В параграфе 3.2 рассмотрено применение метода усреднения по полям обменного взаимодействия к кластерам из двух магнитных атомов в модели Изинга без немагнитных примесей на простых решетках и построен вариант ренормгруппового преобразования фиксированного масштаба. Рассмотрено применение этих методов к изинговскому магнетика на квадратной решетке с анизотропным взаимодействием.

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 [8, 18-23]. Внимание исследователей было в основном сосредоточено на проблеме универсальности и вообще на поведении разбавленных магнетиков вблизи критической точки [20, 22, 23]. В настоящей главе мы предлагаем простые методы расчета намагниченности и температуры Кюри разбавленного магнетика, применимые в широком диапазоне концентраций немагнитных примесей.

В параграфе 3.3 рассмотрено обобщение метода усреднения по обменным полям на случай двухатомных кластеров и применение этого метода к анализу модели Изинга разбавленного магнетика. Кроме того, в этом параграфе вычислены температуры Кюри и перколяционные пороги для простых решеток с координационными числами 3, 4 и 6 с помощью усреднения по полям взаимодействия для кластеров различной величины. Рассмотрение кластеров различного размера также используется для построения ренормгруппового преобразования и вычисления перколяционных порогов в этом случае. Построены концентрационные зависимости температуры Кюри и спонтанной намагниченности при нулевой температуре. Показано, что применение метода усреднения по обменным полям в его ренормгрупповой форме приводит к более точным результатам во всех рассмотренных случаях и позволяет различать разбавление по узлам и по связям.

В параграфе 3.4 рассмотрен метод эффективного поля, применимый как к чистым, так и к разбавленным магнетикам и представляющий собой вариант ренормгруппового преобразования фиксированного масштаба. Показано, что для чистых магнетиков метод эквивалентен из-

вестному приближению Бете. С помощью этого метода рассчитаны намагниченность и корреляционные функции как для чистых, так и для разбавленных по связям изинговских магнетиков.

В параграфе 3.5 предложена интерпретация приближения Бете, основанная на сопоставлении спиновых кластеров различного размера на дереве Кейли. На основе этой интерпретации развит метод построения приближения Бете для разбавленного по узлам или связям изинговского магнетика. Этот метод является обобщением известного метода Бете [6] на разбавленные магнетики. Метод дает точное значение перколяционного порога для решетки Бете. Для различных вариантов метода построена спонтанная намагниченность как при нулевой, так и при конечной температуре как функция концентрации магнитных атомов.

### 3.1. Изинговский магнетик на квадратной решетке с анизотропным взаимодействием

В работах [1, 14] предложен метод усреднения по полям взаимодействия, с помощью которого можно находить критические точки и макроскопические параметры в различных системах взаимодействующих частиц. В [1, 14] исследовано критическое поведение разбавленных магнетиков как с замороженными немагнитными примесями, так и с примесями, находящимися в термодинамическом равновесии с матрицей. В работе [15] методом усреднения по полям взаимодействия исследованы аморфные магнетики и спиновые стекла. Здесь будет рассмотрено 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 будет показана на примере изинговского магнетика с изотропным и анизотропным взаимодействием.

Для теоретического исследования магнитных фазовых переходов часто используется модель Изинга [6]. Эта модель может быть использована для исследования как решеточных, так и аморфных [8] магнетиков. Гамильтониан обобщенной модели Изинга имеет вид:

$$E = - \sum J_{ij} \sigma_i \sigma_j - H_{ex} \sum \sigma_i. \quad (3.1)$$

Здесь  $\sigma_i$  - 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.

Точное решение модели Изинга (вычисление статсуммы и нахождение явного выражения для параметра порядка  $\langle \sigma_i \rangle$  - средней намагниченности на один атом) возможно лишь в не-

которых частных случаях. Существует решение одномерной модели Изинга [6], а так же известное решение Онзагера для модели Изинга на квадратной решетке в отсутствии внешнего поля [6]. Полученное Онзагером выражение для средней намагниченности  $m = \langle \sigma_i \rangle$  имеет следующий вид [6]:

$$m = (1 - 1/\text{sh}^4(2K))^{1/8}, \quad (3.2)$$

где  $K = \beta J$ ,  $\beta = 1/kT$ ,  $k$  - постоянная Больцмана.

В работе [5] получено выражение:

$$\langle \sigma_i \rangle = \langle \text{th} \beta H_i \rangle, \quad (3.3)$$

где

$$H_i = \sum_j J_{ij} \sigma_j + H_{ex}, \quad (3.4)$$

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 (3.3) можно рассматривать как основу для приближенных способов нахождения  $\langle \sigma_i \rangle$  для системы с гамильтонианом (3.1). Например, если правую часть (3.3) 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,

$$m = \text{th}(qKm + \beta H_{ex}), \quad (3.5)$$

где  $K = \beta J$ , а  $q$  - число ближайших соседей каждого узла (координационное число). Как известно, ненулевое решение (3.5) при  $H_{ex} = 0$  существует если  $K > K_c = 1/q$ .

Усреднение в правой части (3.3) является, в сущности, усреднением по функции распределения полей (3.4) состоящих из поля обменного взаимодействия  $H_{in} = \sum J_{ij} \sigma_j$  и внешнего поля  $H_{ex}$ . В работе [1] предложен метод нахождения  $m$ , основанный на приближенном вычислении функции распределения полей обменного взаимодействия  $H_{in}$ . Величины  $\sigma_j$ , 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  $m$

$$\sum_{i=0}^N C_q^i (1 - m^2)^i \left( \sum_{j=0}^{N-i} m^{2j} C_{q-2i}^{2j+1} \right) \text{th} K(q - 2i) = 2^{q-1}, \quad (3.6)$$

где  $N = \left[ \frac{q-1}{2} \right]$ . Уравнение для критического значения  $K_c$  получается из (3.6) и имеет вид:

$$\sum_{i=0}^N C_q^i (q - 2i) \operatorname{th} K_c (q - 2i) = 2^{q-1} \quad (3.7)$$

Решения этого уравнения для координационных чисел 3, 4 и 6 приведены в таблице 3.1.

q	Точные значения $K_c$ для плоских решеток	$K_c$ для решетки Бете	Метод среднего поля		Метод усреднения по обменным полям		Ренорм-групповое 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

Таблица 3.1 Точные и приближенные значения критических точек изинговских магнетиков.

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  $J_1 = (1 + \varepsilon)J$ , а для двух соседних вертикальных  $J_2 = (1 - \varepsilon)J$  и  $J_{ij} = 0$  для всех остальных пар атомов. Параметр  $\varepsilon$  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  $\varepsilon$  для этой модели находится из уравнения [4]:

$$\operatorname{sh}(2(1 + \varepsilon)K_c) \operatorname{sh}(2(1 - \varepsilon)K_c) = 1. \quad (3.8)$$

Среднее значение обменного поля  $\langle H_i \rangle = 2(1 + \varepsilon)Jm + 2(1 - \varepsilon)Jm = 4Jm$  не зависит от параметра анизотропии  $\varepsilon$ , 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:

$$\operatorname{th} 4K_c + \operatorname{th} 2(1 + \varepsilon)K_c + \operatorname{th} 2(1 - \varepsilon)K_c = 2 \quad (3.9)$$

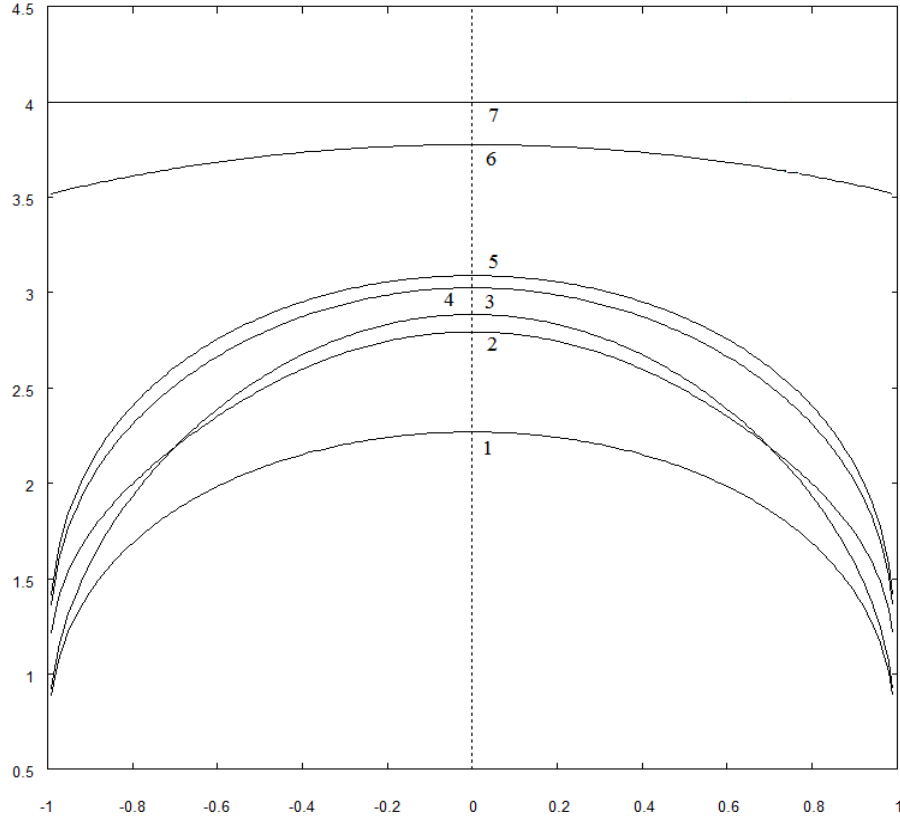


Рис. 3.1 Температура Кюри как функция параметра анизотропии. 1 – точное решение, 2 – ренормгруппа усреднения по полям взаимодействия, 3 – ренормгруппа среднего поля, 4 – кластер из двух пар атомов (усреднение по полям), 5 – единственный атом, усреднение по полям, 6 – среднее поле, кластер из двух пар атомов, 7 – среднее поле, единственный атом

Функция  $\Theta_c(\varepsilon) = 1/K_c(\varepsilon)$ , определяемая из (3.9), приведена на рис. 3.1 (кривая 5). Кривая 1 на этом рисунке соответствует точному решению (3.8).

Соотношение (3.3) можно обобщить следующим образом. Рассмотрим кластер, состоящий из  $n$  атомов. Гамильтониан системы атомов, входящих в кластер, получается из (3.1) и выглядит так:

$$E_n = -\sum_{(i,j)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum H_{in}^i \sigma_i - H_{ex} \sum \sigma_i. \quad (3.10)$$

Суммирование в первом слагаемом этого выражения производится по парам входящих в кластер атомов, являющихся ближайшими соседями. Второе слагаемое в (3.10) 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 (3.10), рассматривая  $H_{in}^i$  как постоянные:

$$S_n = \frac{\sum \left( \frac{\sum \sigma_i}{n} \right) \exp(-\beta E_n)}{\sum \exp(-\beta E_n)} \quad (3.11)$$

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

$$m = \left\langle \frac{\sum (\frac{\sum \sigma_i}{n}) \exp(-\beta E_n)}{\sum \exp(-\beta E_n)} \right\rangle. \quad (3.12)$$

Усреднение в правой части (3.12) проводится по совместной функции распределения полей обменного взаимодействия  $H_{in}^i$ ; формулу (3.3) можно рассматривать как частный случай (3.12) когда кластер состоит из одного атома.

Аналогично формуле (3.3), соотношение (3.12) 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 (3.12) по приближенной функции распределения полей обменного взаимодействия.

Рассмотрим кластер, состоящий из двух соседних атомов на решетке с координационным числом  $q$ . В отсутствии внешнего поля и в случае, когда рассматривается изотропная модель с взаимодействием только между ближайшими соседями, гамильтониан (3.10) для этого кластера имеет вид:

$$E_2 = -J(\sigma_1 \sigma_2 + h_1 \sigma_1 + h_2 \sigma_2). \quad (3.13)$$

Вычисляя средний спин по кластеру (3.11), получим:

$$s_2 = \frac{\text{sh}K(h_1+h_2)}{\text{ch}K(h_1+h_2)+e^{-2K}\text{ch}K(h_1-h_2)}. \quad (3.14)$$

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  $m$ :

$$m = \frac{\text{sh}2(z-1)Km}{\text{ch}2(q-1)Km+\exp(-2K)}. \quad (3.15)$$

Отсюда получаем уравнение для критической точки:

$$2(q-1)K_c = 1 + e^{-2K_c} \quad (3.16)$$

Решения (3.16) при  $q = 3, 4$  и  $6$  указаны в таблице 3.1.

Еще один вариант самосогласованного уравнения можно построить следующим образом. Приравняем между собой правые части (3.5) и (3.15):

$$\text{th}(qK\mu + \beta H_{ex}) = \frac{\text{sh}(2(q-1)K\mu + 2\beta H_{ex})}{\text{ch}(2(q-1)K\mu + 2\beta H_{ex}) + e^{-2K}} \quad (3.17)$$

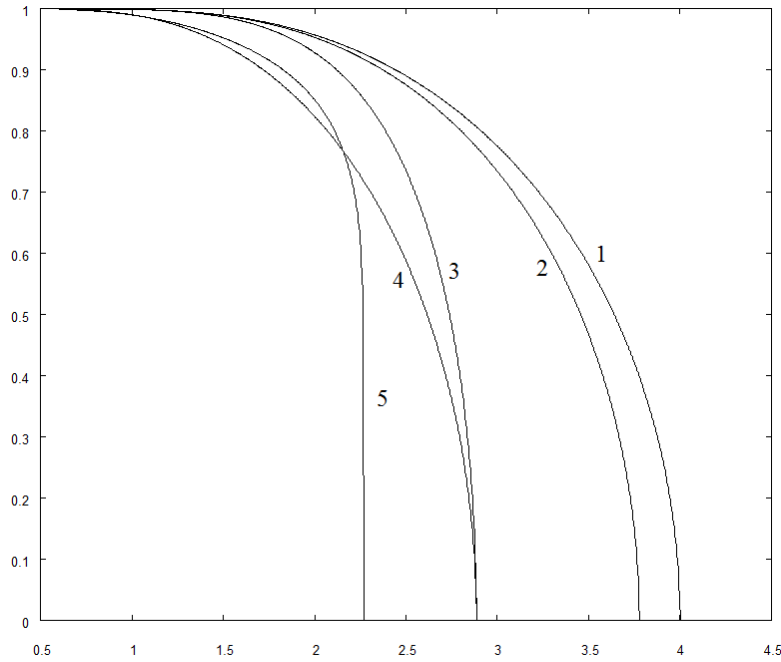


Рис. 3.2 Спонтанная намагниченность как функция температуры в различных приближениях

Уравнение (3.17) рассматривается как уравнение относительно параметра  $\mu$ . Ненулевое (при  $H_{ex} = 0$ ) решение этого уравнения относительно  $\mu$ , существует при  $K \geq K_c$ , где

$$K_c = \frac{1}{2} \ln \frac{q}{q-2}. \quad (3.18)$$

Среднюю намагниченность  $t$  одного атома можно приравнять  $\mu$  - решению (3.17). Или считать  $t = \text{th}(qK\mu + \beta H_{ex})$  - в этом случае приходим к известному приближению Бете [6]. Как известно [6], приближение среднего поля (3.5) и приближение Бете можно рассматривать как точные решения модели Изинга на специальном образом подобранных («бесконечномерных») решетках. На рис. 3.2 показаны графики  $t(K^{-1})$  при  $H_{ex} = 0$  для  $q = 4$  построенные по (3.5), (3.15), (3.17) (кривые 1 – 4 соответственно) в сравнении с точным решением (2) (кривая 5).

Для вычисления  $t$  и  $K_c$  методом усреднения по обменным полям, левую часть (3.14) нужно приравнять  $t$ , 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,

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

$$W_1(h) = \sum_{i=0}^{q-1} C_{q-1}^i \left(\frac{1+m}{2}\right)^i \left(\frac{1-m}{2}\right)^{q-1-i} \delta(h+q-2i-1). \quad (3.19)$$

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 (3.19).

Проделав описанную выше процедуру для решеток с координационными числами 3, 4 и 6, получим критические точки, приведенные в таблице 3.1. 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).

С помощью усреднения по обменным полям можно также построить самосогласованное уравнение аналогичное уравнению (3.17). Для этого правую часть (3.3), усредненную по соответствующей функции распределения, нужно приравнять правой части (3.14). (При этом, так же как и при применении метода среднего поля, есть две возможности – намагниченность можно считать равной либо решению полученного уравнения, либо значению правой части (3.3) в этом решении.) На рисунке 3.3 приведены графики  $m(K^{-1})$  при  $H_{ex} = 0$  для  $q = 4$  по методу усреднения по обменным полям в сравнении с точным решением (2) (кривая 5). Кривая 1 построена по уравнению (3.3) ( $m = \langle s_1 \rangle(m)$ ), кривая 2 – построена по уравнению, получаемому усреднением правой части (3.14) и приравниванием результата  $m$  ( $m = \langle s_2 \rangle(m)$ ). Кривые 3 и 4 построены по уравнению  $\langle s_1 \rangle(\mu) = \langle s_2 \rangle(\mu)$ , кривая 3 -  $m = \langle s_2 \rangle(\mu)$ , а кривая 4 -  $m = \mu$ .

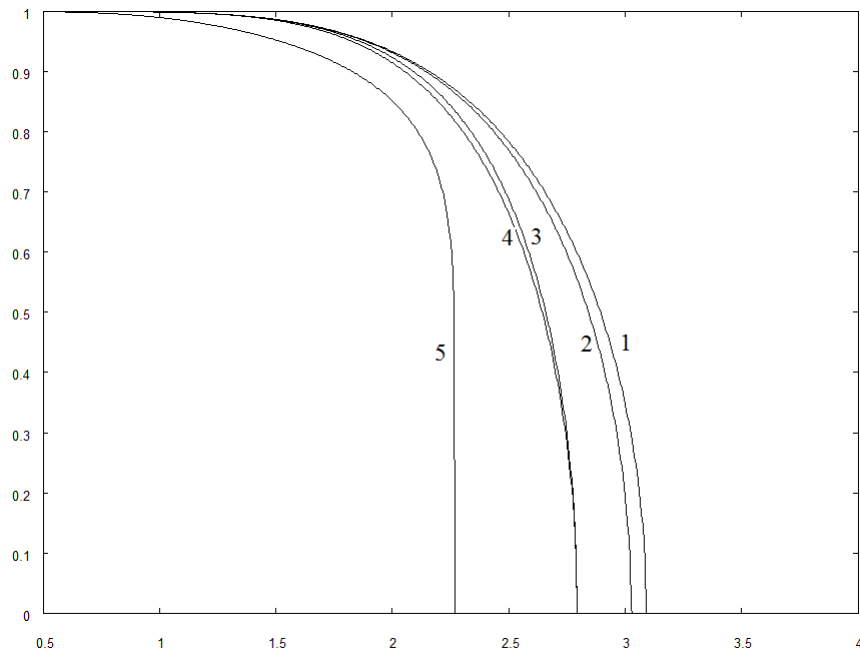


Рис.3.3



Снова рассмотрим плоскую квадратную решетку с анизотропным обменным взаимодействием. Возьмем два кластера, состоящих 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 не зависимыми от полей, действующих на атомы другого и используя метод среднего поля, получим выражение для  $K_c(\varepsilon)$ :

$$\frac{(3-\varepsilon)K_c}{1+\exp(-2(1+\varepsilon)K_c)} + \frac{(3+\varepsilon)K_c}{1+\exp(-2(1-\varepsilon)K_c)} = 1 \quad (3.20)$$

Вычисление температуры Кюри  $\Theta_c(\varepsilon) = 1/K_c(\varepsilon)$  по этой формуле дает кривую 6 на рис. 3.1. Применение к такому парному кластеру процедуры усреднения по полям обменного взаимодействия дает кривую 4 на рис. 3.1.

Рассмотрение кластеров различного размера также может быть использовано для построения ренормгруппового преобразования, аналогично [16, 17]. Средние значения спинов  $\langle s_n \rangle$  (3.11) (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

$$\left. \frac{\partial \langle s_n \rangle}{\partial m} \right|_{m=0} = \left. \frac{\partial \langle s_{\tilde{n}} \rangle}{\partial \tilde{m}} \right|_{\tilde{m}=0}. \quad (3.21)$$

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 (3.21), получим

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

откуда

$$K_c = \frac{1}{2} \ln \frac{q}{q-2} \quad (3.22)$$

Что совпадает с критической точкой для решетки Бете [6].

Если  $\langle s_1 \rangle$  и  $\langle s_2 \rangle$  вычислить методом усреднения по обменным полям, из (3.21) получим:

$$f_1(K_c) = f_2(K_c), \quad (3.23)$$

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

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

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

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

где  $z = q - 1 - t$ ,  $h_1 = 2i - z$ ,  $h_2 = 2j - z$ ,  $h_{12} = 2r - t$ . Решения (3.23) приведены в табл. 3.1.

Как известно [6], критические показатели модели среднего поля (так называемые «классические» критические показатели) весьма значительно отличаются как от критических показателей точного решения Онзагера (3.2), так и от экспериментально полученных значений [18]. Легко убедиться, что все рассмотренные выше самосогласованные модели так же приводят к классическим критическим показателям, не отличаясь в этом смысле от модели среднего поля. Однако рассмотрение кластеров различного размера может быть использовано и для построения ренормгруппового преобразования фиксированного масштаба, аналогично [16, 17]. С помощью этого преобразования можно найти критический показатель корреляционной длины  $\nu$  следующим образом.

Формально уравнение (3.21) совпадает с условием существования ненулевого решения в самосогласованной модели, получаемой приравниванием правых частей (3.12) для кластеров, содержащих  $n$  и  $\tilde{n}$  атомов. Однако, с точки зрения ренормгруппового преобразования, смысл (3.21) заключается в стационарности критической точки при масштабных преобразованиях. Критический показатель корреляционной длины  $\nu$  рассчитывается при линейризации (3.21) вблизи критической точки и использования соотношения [16]

$$\left. \frac{\partial \bar{K}}{\partial K} \right|_{K=K_c} = \left( \frac{n}{\tilde{n}} \right)^{\frac{1}{\nu D}}, \quad (3.24)$$

где  $D$  - размерность пространства. Из (3.21) получим

$$\left. \frac{\partial \bar{K}}{\partial K} \right|_{K=K_c} = \left. \frac{f'_n}{f'_{\tilde{n}}} \right|_{K=K_c}, \quad f_n(K) = \left. \frac{\partial \langle s_n \rangle}{\partial m} \right|_{m=0}. \quad (3.25)$$

Применяя описанную процедуру к кластерам из одного и двух атомов и вычисляя  $\langle s_n \rangle$  по методу среднего поля, получим

$$f'_1(K_c) = q, \quad f'_2(K_c) = q \left( 1 + \frac{q-2}{2(q-1)} \ln \frac{q}{q-2} \right)$$

$$\frac{1}{\nu} = D \frac{\ln \left( 1 + \frac{q-2}{2(q-1)} \ln \frac{q}{q-2} \right)}{\ln 2}. \quad (3.26)$$

При использовании метода усреднения по обменным полям для вычисления  $\langle s_n \rangle$ , получим следующий результат:

$$f_1(K) = \frac{1}{2^q} \sum_{i=0}^q C_q^i (q - 2i) \operatorname{th} K (q - 2i),$$

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

Критическая точка находится, согласно (3.21), из условия  $f_1(K_c) = f_2(K_c)$  и совпадает, разумеется, с приведенной в таблице 3.1. Критические показатели  $\nu$  приведены в таблице 3.2.

q	Точные значения $1/\nu$ для модели Изинга	Метод среднего поля		Метод усреднения по обмен- ным полям	
		$D = 2$	$D = 3$	$D = 2$	$D = 3$
3	-	0,700	-	1,361	-
4	1 (квадратная)	0,600	0,900	1,152	1,728
6	1,587 (кубическая)	0,437	0,651	0,375	1,209

Таблица 3.2

Таким образом, сопоставив самосогласованные уравнения, полученные с помощью приближения среднего поля и с помощью усреднения по обменным полям, мы приходим к следующим выводам.

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. (табл. 3.1 и рис.3.1 – кривые 4 и 5). Значения критической температуры, вычисленное по самосогласованным уравнениям, наиболее близко к точному значению при построении уравнения путем сопоставления кластеров различного размера: приближение Бете точнее приближений среднего поля и (3.15), аналогично – для метода усреднения по обменным полям.

2. Метод усреднения по обменным полям дает более точные значения критической температуры, чем метод среднего поля, примененный к кластерам с тем же числом атомов (табл. 3.1 и рис.3.1 – 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 (табл. 3.1).

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 (табл. 3.1, кривая 2 на рис. 3.1).

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 рис. 3.1).

### 3.2. Модель Изинга разбавленного ферромагнетика в приближении самосогласованного поля

Для исследования фазовых переходов в нерегулярных спиновых системах часто используется модель Изинга для разбавленного магнетика. Эта модель характеризуется гамильтонианом [8]

$$E(p) = -\sum_{(l,l')} \xi_l \xi_{l'} J \sigma_l \sigma_{l'} - H \sum_l \xi_l \sigma_l. \quad (3.27)$$

Здесь  $\sigma_l$  - обычные изинговские переменные, определяющие ориентацию магнитного момента атома и принимающие значения +1 и -1;  $J$  - обменный интеграл,  $H$  пропорциональна внешнему магнитному полю. Случайная переменная  $\xi_l$  может быть равна 0 и 1, ее среднее значение  $\langle \xi_l \rangle = b_s$  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, рассмотрим модель замороженных связей. В ней считается, что определенная доля  $1 - b_b$  всех обменных интегралов искусственно исключена.

Известно [5], что для чистого ( $p_s = 1$ ) изинговского магнетика в нулевом внешнем поле справедливо следующее равенство:

$$\langle \sigma \rangle = \langle \text{th} \beta J h_1 \rangle, \quad (3.28)$$

где  $h_1 = \sum_j \sigma_j$  (суммирование производится по соседним к данному узлу спином) – «обменное» поле,  $\beta = 1/kT$ ,  $T$  - 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 (3.28) можно обобщить следующим образом. Рассмотрим кластер, состоящий из  $n$  атомов. Гамильтониан этого кластера выглядит так:

$$E_n = -J \sum \sigma_i \sigma_j - J \sum h_{in}^i \sigma_i. \quad (3.29)$$

Суммирование в первом слагаемом этого выражения производится по парам входящих в кластер атомов, являющихся ближайшими соседями. Второе слагаемое в (3.29) описывает взаимодействие атомов кластера с их ближайшими соседями, не входящими в кластер. Поля обменно-

го 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 (3.29), 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:

$$\langle \sigma \rangle = \left\langle \frac{\sum (\frac{\sum \sigma_i}{n}) \exp(-\beta E_n)}{\sum \exp(-\beta E_n)} \right\rangle; \quad (3.30)$$

формулу (3.28) можно рассматривать как частный случай (3.30) когда кластер состоит из одного атома.

Формулы (3.30) 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 (3.28)  $W_1(h_1) = \delta(h_1 - qt)$ , где  $q$  - координационное число решетки, получим известное приближение среднего поля [6]. Если же использовать для  $W_1(h_1)$  биномиальное распределение, получим приближение, описанное в [1]. Эту же методику можно использовать и для исследования разбавленного магнетика. В работе [1] рассмотрен разбавленный изинговский магнетик, в приближении, основанном на (3.28). Здесь исследуется разбавленный магнетик в приближении, основанном на (3.30) используя кластеры из одного и двух атомов. Использование кластеров разных размеров позволяет так же построить ренормгрупповое преобразование фиксированного масштаба [16]. Эта возможность так же исследуется в этом разделе.

Рассмотрим кластеры из одного и двух узлов в модели Изинга с разбавлением по связям. Результат усреднения в (3.30) по приближенным функциям распределения обменных полей будем обозначать  $\langle \sigma_n \rangle$ . Тогда

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1 \rangle &= \langle \text{th}Kh \rangle_{W_1^q(h)} \text{ и} \\ \langle \sigma_2 \rangle &= b_b \left\langle \frac{\text{sh}K(h_1 + h_2)}{\text{ch}K(h_1 + h_2) + e^{-2K} \text{ch}K(h_1 - h_2)} \right\rangle_{W_2^q(h_1, h_2)} + \\ &+ (1 - b_b) \left\langle \frac{\text{sh}K(h_1 + h_2)}{\text{ch}K(h_1 + h_2) + \text{ch}K(h_1 - h_2)} \right\rangle_{W_2^q(h_1, h_2)} \end{aligned} \quad (3.31)$$

или

$$\langle \sigma_2 \rangle = b_b \left\langle \frac{\text{sh}K(h_1 + h_2)}{\text{ch}K(h_1 + h_2) + e^{-2K} \text{ch}K(h_1 - h_2)} \right\rangle_{W_2^q(h_1, h_2)} + (1 - b_b) \frac{1}{2} \langle \text{th}Kh_1 + \text{th}Kh_2 \rangle_{W_2^q(h_1, h_2)}, \quad (3.32)$$

где  $K = J\beta$ . Наличие двух слагаемых в правой части (3.32) обусловлено тем, что среди множества кластеров из двух соседних атомов на решетке, доля кластеров с разорванной обменной связью составляет  $1 - b_b$ .

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

$$b_s \langle \sigma_1 \rangle = b_s \langle \text{th}Kh \rangle_{W_1^q(h)}, \quad (3.33)$$

а для кластера из двух узлов –

$$b_s \langle \sigma_2 \rangle = b_s^2 \left\langle \frac{\text{sh}K(h_1+h_2)}{\text{ch}K(h_1+h_2)+e^{-2K}\text{ch}K(h_1-h_2)} \right\rangle_{W_2^q(h_1,h_2)} + b_s(1-b_s) \frac{1}{2} \langle \text{th}Kh_1 + \text{th}Kh_2 \rangle_{W_2^q(h_1,h_2)}. \quad (3.34)$$

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

В приближении среднего поля, обменные поля  $h_1$  и  $h_2$  в выражениях (3.31) – (3.34) заменяются их средними значениями, что соответствует использованию в этих выражениях - функций в качестве функций распределения обменных полей:

$$W_1^q(h) = \delta(h - mqb) \quad (3.35)$$

$$W_2^q(h_1, h_2) = W_1^{q-1}(h_1)W_1^{q-1}(h_2) = \delta(h_1 - m(q-1)b)\delta(h_2 - m(q-1)b). \quad (3.36)$$

Задачи разбавления по узлам и связям приводят в этом приближении к одинаковым выражениям, поэтому здесь  $b_b$  и  $b_s$  обозначены просто  $b$ . При использовании выражений (3.31) (или (3.33)) получим обобщение приближения среднего поля на случай разбавленного магнетика:

$$m = \text{th}Kqbm. \quad (3.37)$$

Это уравнение имеет ненулевое решение при  $K > K_c = 1/qb$ , что, как известно [8] не соответствует истинному поведению спонтанной намагниченности разбавленного магнетика, которая должна обращаться в ноль при концентрации, меньшей порога протекания  $b_c$ .

Использование кластера из двух атомов (соотношения (3.32) или (3.34)) не приводит к существенно иным результатам. Уравнение для намагниченности в этом случае

$$m = (1-b)\text{th}K(q-1)bm + b \frac{\text{sh}2K(q-1)bm}{\text{ch}2K(q-1)bm+e^{-2K}} \quad (3.38)$$

имеет ненулевое решение при любых значениях  $b$ .

Приравнявая правые части (3.37) и (3.38) получим уравнение:

$$\text{th}Kqbm = (1-b)\text{th}K(q-1)b\mu + b \frac{\text{sh}2K(q-1)b\mu}{\text{ch}2K(q-1)b\mu+e^{-2K}}. \quad (3.39)$$

Среднюю намагниченность  $m$  одного магнитного атома можно приравнять  $\mu$  - решению (13). Или считать  $m = \text{th}Kqbm$  - в этом случае для чистого магнетика ( $b = 1$ ) приходим к известному приближению Бете [6]. Для разбавленного магнетика ненулевое решение (3.39) существует при условии  $K > K_c$ , где

$$K_c(b) = \frac{1}{2} \ln \frac{b+b_c}{b-b_c},$$

$b_c = 1/(q - 1)$  - перколяционный порог решетки Бете.

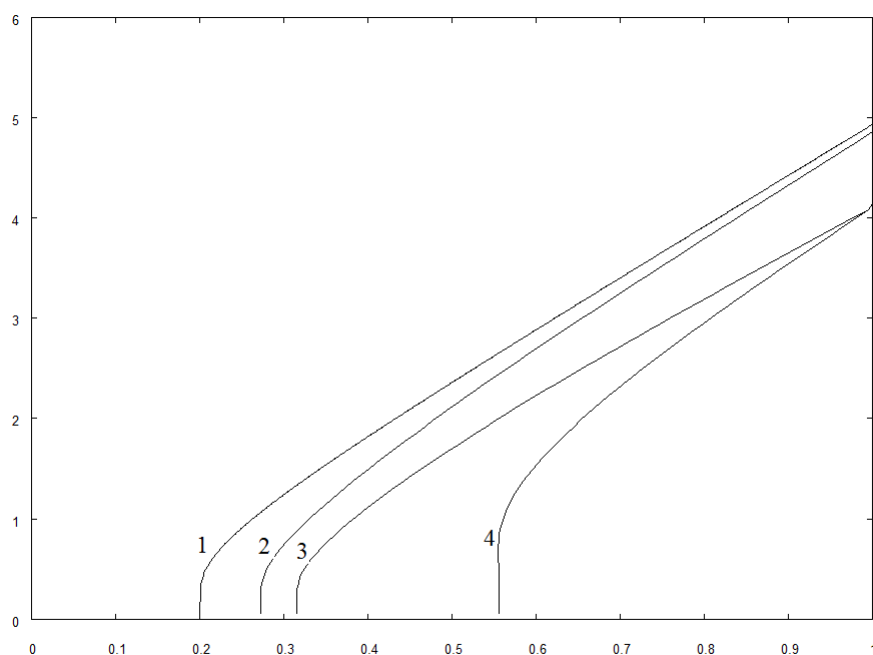


Рис. 3.4 Температура Кюри как функция концентрации при  $q = 6$ . 1 – приближение Бете, 2 – усреднение по полям, кубическая решетка, 3 – треугольная решетка, разбавление по узлам, 4 – треугольная решетка, разбавление по связям

График функции  $T_c(b) = K_c^{-1}(b)$  при  $q = 6$  приведен на рис.3.4 (кривая 1). Полученный результат можно рассматривать как приближенное решение для разбавленного магнетика на решетке с координационным числом  $q$ , как и само решение Бете может рассматриваться как приближенное решение для чистого магнетика на любой решетке с известным координационным числом. Зависимость намагниченности при нулевой температуре ( $K \rightarrow \infty$ ) от концентрации  $m(b)$  является, как известно [8], вероятностью того, что некоторый магнитный атом принадлежит бесконечному кластеру  $P(b)$ . Согласно (3.39) эта функция находится из решения уравнения

$$\begin{cases} \text{th}qbx = (1 - b)\text{th}(q - 1)bx + b\text{th}2(q - 1)bx \\ P(b) = \text{th}qbx \end{cases} \quad (3.40)$$

График этой при  $q = 6$  функции показан на рис. 3.5 (кривая 1).

Для решетки Бете перколяционная кривая  $P_0(b)$  может быть вычислена точно [8]. Для построения этой кривой можно использовать метод производящей функции, как в [8], но тот же результат может быть получен и из простых комбинаторных соображений.

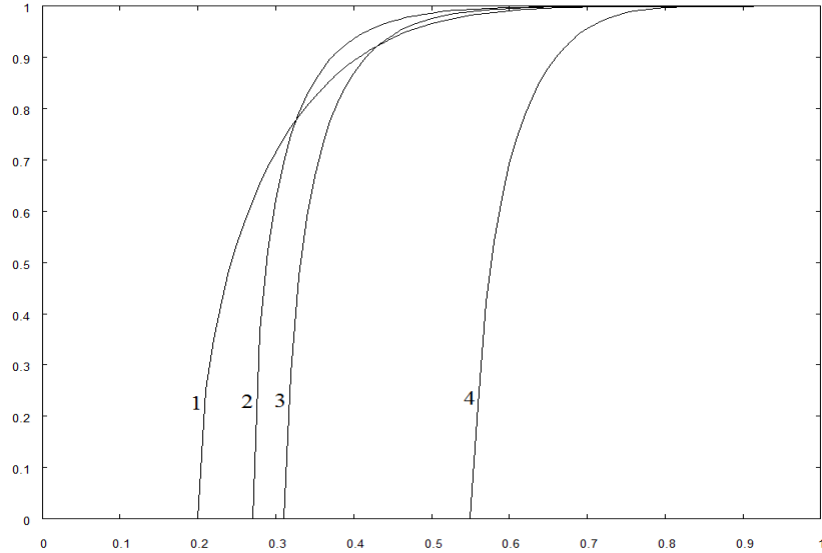


Рис.3.5 Спонтанная намагниченность при нулевой температуре как функция концентрации для  $q = 6$ . 1 – приближение Бете, 2 – усреднение по полям, кубическая решетка, 3 – треугольная решетка, разбавление по узлам, 4 – треугольная решетка, разбавление по связям

Обозначим  $V$  вероятность того, что выбранный случайно узел решетки Бете разбавленного магнетика не принадлежит бесконечному кластеру магнитных атомов. Очевидно, что  $V$  связано с  $P_0(b)$  простым соотношением:

$$1 - V = bP_0(b). \quad (3.41)$$

Введем вероятность  $Z$  того, что узел решетки, у которого по крайней мере один соседний узел заполнен магнитным атомом, не принадлежит бесконечному кластеру. Тогда

$$V = (1 - b) + bZ^q. \quad (3.42)$$

Первое слагаемое в этом выражении – вероятность того, что данный узел не занят магнитным атомом, а второе – вероятность того, что в узле находится магнитный атом, но все соседние узлы не принадлежат бесконечному кластеру. Рассматривая теперь один из узлов, соседних к данному, можно записать следующее соотношение для вероятности  $Z$ :

$$Z = (1 - b) + bZ^{q-1}. \quad (3.43)$$

Уравнение (3.43) имеет тривиальное решение  $Z = 1$ . Исключив этот корень, получим

$$\sum_{i=0}^{q-2} Z^i = 1/b. \quad (3.44)$$

Из уравнений (3.41) и (3.42) получим выражение  $P_0(b)$  через  $Z$ :

$$P_0(b) = 1 - Z^q. \quad (3.45)$$

Уравнения (3.43) - (3.45) и дают решение задачи о нахождении перколяционной кривой  $P_0(b)$  для решетки Бете. Графики функций  $P_0(b)$  для  $q = 3$  и  $q = 4$  приведены на рис.3.6 (кривые 2 и 4 соответственно). Функция  $P_0(b)$  обладает следующими свойствами. Она не равна нулю только в интервале  $b_c < b \leq 1$ , где  $b_c = 1/(q - 1)$  и монотонно возрастает до 1 с ростом  $b$ . При



$b = b_c$  функция  $P_0(b)$  имеет конечную производную, которую можно определить из (3.44) и (3.45). Дифференцируя эти уравнения по  $b$  и исключив производную от  $Z$ , получим (с учетом того, что при  $b = b_c$   $Z = 1$ )

$$P'_0(b_c) = \frac{2q(q-1)}{q-2}. \quad (3.46)$$

На рисунке 3.6 показаны также графики функции  $P(b)$  для  $q = 3$  (кривая 1) и для  $q = 4$  (кр. 3).

Вернемся теперь к функции  $P(b)$ , определяемой уравнениями (3.40). Как видно из рисунка 3.6, эта функция близка к  $P_0(b)$ ; с ростом  $q$  различие между ними уменьшается. Однако есть важное различие в поведении этих функций вблизи  $b_c$ . Покажем, что при  $b = b_c$ , производная функции  $P(b)$  (в отличие от производной  $P_0(b)$ ) бесконечна.

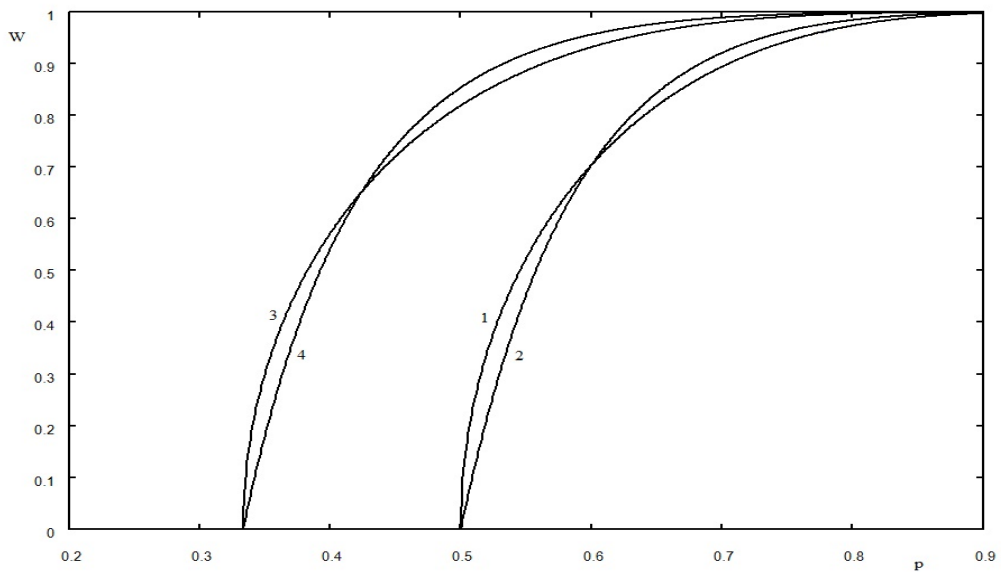


Рис.3.6

Обозначим в (3.40)  $y = qbx$  и разложим все гиперболические тангенсы в (3.40) до второго ненулевого члена вблизи  $y = 0$ . В результате получим, что вблизи  $b = b_c$

$$P(b) = A(q)(b - b_c)^{1/2}, \quad (3.47)$$

где  $A(q) = \sqrt{\frac{3(1+b_c)^2}{b_c(4-3b_c-b_c^2)}}$ . То есть,  $P'(b) = \frac{1}{2}A(q)(b - b_c)^{-1/2}$ .

В работе [1] предложен другой приближенный метод нахождения функций распределения и основанная на нем методика нахождения спонтанной намагниченности. Величины  $\sigma_j$ , входящие в выражение для  $h_1 = \sum \sigma_j$  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  $b$ . Функция распределения  $W_1^q(h)$  выглядит в этом случае следующим образом:

$$W_1^q(h) = \sum_{i=0}^q C_q^i b^i (1-b)^{q-i} \sum_{j=0}^i C_i^j \left(\frac{1+m}{2}\right)^j \left(\frac{1-m}{2}\right)^{i-j} \delta(h - (2j - i)). \quad (3.48)$$

Подставляя это выражение в (3.31) 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.

Тип решетки (координационное число)	точно	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
Тетраedr. (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

Таблица 3.3. Точные и приближенные значения перколяционных порогов простых решеток.

Предельным переходом  $K \rightarrow \infty$  можно найти перколяционную кривую в этом приближении  $P_{01}(b)$ . Например, для  $q = 3$  (шестиугольная решетка) получим:

$$P_{01}(b) = \sqrt{1 - 2 \left(\frac{1-b}{b}\right)^3} \quad (3.49)$$

Эта функция обращается в ноль при  $b \leq b_c$ , где  $b_c = \frac{\sqrt[3]{2}}{1+\sqrt[3]{2}} \approx 0,557$ .

Как показано в [1], полученное из (3.31) с помощью (3.48) уравнение, в отличие от (3.37) и (3.38), имеет ненулевое решение только при  $b > b_c$ . Причем, приближенные значения  $b_c$ , полученные из этого уравнения, в большинстве случаев оказываются точнее, чем найденные из (3.40) (таблица 3.3, столбец «1»).

Поскольку приближение Бете (3.39) является более точным, чем приближение среднего поля для кластеров из одного (3.37) и двух (3.38) 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, со-

седних 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  $h_{1,2} = h'_{1,2} + h_{1,2}^{com}$ , где  $h_{1,2}^{com}$  – обменные поля, создаваемые атомами, соседними одновременно к обоим атомам кластера. Поля  $h'_1, h'_2$  и  $h_{1,2}^{com}$  считаются в рамках метода усреднения статистически независимыми и имеющими биномиальные распределения, аналогичные (3.48).

Для разбавленных магнетиков в первом из указанных случаев совместная функция распределения полей строится по (3.48) 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 (3.32) и (3.34) 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  $b > b_c$ . Значения  $b_c$ , найденные этим способом указаны в таблице (колонка «2»).

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

$$W_2^6(h_1, h_2) = W_1^3(h'_1)W_1^3(h'_2)W_1^2(h^{com}) \delta(h_1 - (h'_1 + h^{com}))\delta(h_2 - (h'_2 + h^{com})). \quad (3.50)$$

В этом случае  $h_1^{com} = h_2^{com} = h^{com}$ . Для магнетика с треугольной решеткой, разбавленного по связям, ситуация несколько сложнее –  $h_1^{com}$  может быть не равно  $h_2^{com}$ . Совместную функцию распределения полей  $h_1^{com}$  и  $h_2^{com}$  зададим непосредственным расчетом вероятностей  $W(h_1^{com}, h_2^{com})$ :

$$\begin{aligned} W(-2,0) &= 2(1-b)^2 b^2 \left(\frac{1-m}{2}\right)^2, & W(-1,-1) &= (1-b)^2 b^2 ((1-m)^2 + (1-m^2)/2) \\ W(-1,0) &= (1-b)^3 b(1-m) + (1-b)b^3(1-m^2)/2, \\ W(-1,1) &= (1-b)^2 b^2(1-m^2)/2, & W(-2,-1) &= 2(1-b)b^3 \left(\frac{1-m}{2}\right)^2 \end{aligned}$$

$$W(0,0) = (1-b)^2 b^2 (1-m^2) + b^4 (1-m^2)/2 + (1-b)^4, \quad W(-2,-2) = b^4 \left(\frac{1-m}{2}\right)^2.$$

Остальные вероятности либо равны нулю, либо находятся из условия симметрии  $W(h_1^{com}, h_2^{com}) = W(h_2^{com}, h_1^{com})$  и того обстоятельства, что при замене  $m$  на  $-m$  вероятность  $W(h_1^{com}, h_2^{com})$  переходит в  $W(-h_1^{com}, -h_2^{com})$ . В столбце «2» таблицы 3.3 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 (3.33) и (3.34), усреднение в которых производится по функциям распределения обменных полей, заданным выше. В столбце «1-2» таблицы 3.3 приведены перколяционные пороги различных решеток, вычисленные этим способом. Для треугольной решетки приведено два значения: верхнее – при разбавлении по узлам, нижнее – по связям. Для шестиугольной решетки ( $q = 3$ ) такой «ренормгрупповой» вариант метода усреднения по обменным полям приводит к следующему выражению для перколяционной функции  $P_{12}(b)$ :

$$P_{12}(b) = \sqrt{1 - \frac{2(1-b)^3}{b^2(2b-1)}} \quad (3.51)$$

Эта функция обращается в ноль при  $b \leq b_c$ , где  $b_c \approx 0,629$  является корнем уравнения

$$4b^3 - 7b^2 + 6b - 2 = 0.$$

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. таблица) 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.

### 3.3. Корреляционные функции чистого и разбавленного изинговского магнетика в приближении эффективного поля

Исследование фазовых переходов в разбавленных и неупорядоченных магнетиках является предметом теоретических и экспериментальных исследований уже на протяжении многих лет [19, 20, 22]. В работах [2, 3] предложена классификация самосогласованных методов расчета намагниченности и критических точек чистых и разбавленных магнетиков. Но в этих работах не рассматривался вопрос о вычислении корреляционных функций и их поведения вблизи критической точки. Однако, как будет показано в данном параграфе, некоторые из описанных в [3, 3] методов могут быть использованы и для расчета спиновых корреляций.

Рассмотрим модель Изинга с разбавлением по связям. Гамильтониан этой модели имеет вид:

$$E = -\sum J_{ij}\sigma_i\sigma_j - H_{ex}\sum\sigma_i. \quad (3.52)$$

Здесь  $\sigma_i$  - изинговские переменные, принимающие значения +1 и -1.  $J_{ij}$  – константы, определяющие величину обменного взаимодействия,  $H_{ex}$  пропорциональна внешнему магнитному полю. Величины  $J_{ij}$  не равны нулю только для ближайших соседей в кристаллической решетке, а для этих соседей  $J_{ij}$  равно  $J$  с вероятностью  $b$  и нулю с вероятностью  $1 - b$ . Вероятность  $b$  является долей «магнитных» связей в решетке, при  $b = 1$  магнетик является чистым. Здесь рассматривается применение к этой модели некоторых из описанных в [3] самосогласованных методов и расчет с их помощью корреляционных функций как для чистого, так и для разбавленного магнетика.

Согласно [3], одним из способов приближенного решения задачи с гамильтонианом типа (3.52) является следующий. Рассмотрим кластер, состоящий из  $n$  атомов. Гамильтониан этого кластера выглядит так:

$$E_n = -\sum J_{ij}\sigma_i\sigma_j - J\sum h_{in}^i\sigma_i - H_{ex}\sum\sigma_i. \quad (3.53)$$

Суммирование в первом слагаемом этого выражения производится по парам входящих в кластер атомов, являющихся ближайшими соседями. Второе слагаемое в (3.53) описывает взаимодействие атомов кластера с их ближайшими соседями, не входящими в кластер, а третье слагаемое – 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 (3.53), рассматривая  $h_{in}^i$  как постоянные, а затем усредним полученное выражение по совместной функции распределения по-

лей обменного взаимодействия  $W_n(h_{in}^i)$ . Построив аналогичное выражение для другого кластера, содержащего  $n' \neq n$  атомов и приравнявая эти два выражения, получим уравнение:

$$\langle \sigma \rangle = \left\langle \frac{\sum (\frac{\sum \sigma_i}{n}) \exp(-\beta E_n)}{\sum \exp(-\beta E_n)} \right\rangle = \left\langle \frac{\sum (\frac{\sum \sigma_i}{n'}) \exp(-\beta E_n)}{\sum \exp(-\beta E_n)} \right\rangle. \quad (3.54)$$

Дальнейший расчет зависит от того, в каком приближении рассматривать функцию распределения полей обменного взаимодействия  $W_n(h_{in}^i)$ . Простейшее приближение получим, если принять все  $h_{in}^i$  постоянными величинами, равными  $q_i \mu$ , где  $q_i$  - число «внешних» соседей  $i$ -го атома,  $\mu$  - характеризующий намагниченность параметр, определяющийся из решения самосогласованного уравнения (3.54). Для чистого ( $b = 1$ ) магнетика, взяв  $n = 1$  и  $n' = 2$  в этом приближении получим:

$$M = \text{th}(qK\mu + h) = \frac{\text{sh}(2(q-1)K\mu + 2h)}{\text{ch}(2(q-1)K\mu + 2h) + e^{-2K}} \quad (3.55)$$

Здесь  $M = \langle \sigma \rangle$  - средняя намагниченность на узел,  $K = J/kT$  ( $k$  - постоянная Больцмана),  $h = H_{ex}/kT$ ,  $q$  - координационное число решетки. Нетрудно показать, что приближение (3.54) есть не что иное, как известное приближение Бете [6]. Действительно, обозначив  $x = \exp(-2K\mu)$ , перепишем (3.55) в виде:

$$M = \frac{e^h - e^{-h} x^q}{e^h + e^{-h} x^q} = \frac{e^{2h} x^{-(q-1)} - e^{-2h} x^{q-1}}{e^{2h} x^{-(q-1)} + e^{-2h} x^{q-1} + 2e^{-2K}}$$

или

$$M = \frac{e^h - e^{-h} x^q}{e^h + e^{-h} x^q}, \quad x = \frac{e^{-K+h} + e^{K-h} x^{q-1}}{e^{K+h} + e^{-K-h} x^{q-1}} \quad (3.56)$$

что совпадает с решением для модели Изинга на решетке Бете, приведенном в [6]. То есть, для вычисления намагниченности  $M$  приближение (3.55) можно рассматривать просто как вариант получения приближения Бете. Другими способами приближение Бете можно получить как решение задачи Изинга на решетке (дерево) Бете [6] или как соотношение, связывающее намагниченность центрального атома и атома первой координационной сферы [24]. Но способ (3.55) позволяет, как будет показано ниже, рассчитать не только намагниченность, но и корреляционные функции как для чистого, так и для разбавленного изинговского магнетика.

Корреляцию соседних спинов в приближении (3.55) можно найти следующим образом. Рассмотрим кластер, состоящий из двух атомов. Усредняя произведение спиновых переменных атомов кластера по ансамблю с гамильтонианом (3.53) и приравнявая  $h_{in}^1 = h_{in}^2 = (q-1)\mu$ , получим

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = \frac{\text{ch}(2(q-1)K\mu + 2h) - e^{-2K}}{\text{ch}(2(q-1)K\mu + 2h) + e^{-2K}} \quad (3.57)$$

Корреляция  $g_{12} = \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle - M^2$  вычисляется по (3.56), в котором параметр  $\mu$  является решением уравнения (3.54). Эту корреляцию можно также выразить через  $K$  и намагниченность  $M$ :

$$g_{12} = \text{th}K + \frac{1 - \sqrt{1 - (1 - \exp(-4K))M^2}}{\text{sh}2K} - M^2 \quad (3.58)$$

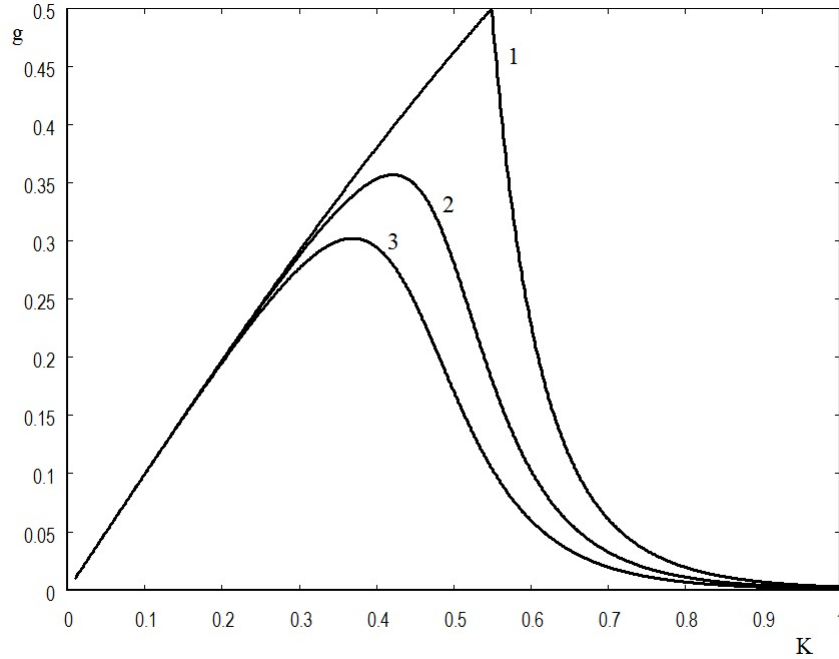


Рис. 3.7 Корреляция  $g_{12}$  как функция параметра  $K = J/kT$  при различных значениях внешнего поля. 1 -  $H_{ex} = 0$ , 2 -  $H_{ex} = 0,1$ , 3 -  $H_{ex} = 0,2$

Из этого выражения следует, что при  $M = 0$  (то есть, при  $H_{ex} = 0$  и  $K < K_c = \frac{1}{2} \ln \frac{q}{q-2}$ ) величина  $g_{12} = \text{th}K$  для любого  $q \geq 2$ . При  $K = K_c$ ,  $g_{12}$  достигает максимального (при  $H_{ex} = 0$ ) значения, равного  $1/(q-1)$ . При  $H_{ex} \neq 0$ , максимум  $g_{12}(K)$  сдвигается влево, а величина его уменьшается (рис. 3.7).

Рассмотрим теперь кластер, состоящий из трех атомов, гамильтониан которого имеет вид:

$$E_3 = -J\sigma_1\sigma_2 - J\sigma_2\sigma_3 - J(q-1)\mu(\sigma_1 + \sigma_3) - J(q-2)\mu\sigma_2 - H_{ex}(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) \quad (3.59)$$

Центральный спин кластера  $\sigma_2$  связан обменным взаимодействием с крайними спинами  $\sigma_1$  и  $\sigma_3$  и находится в поле  $J(q-2)\mu + H_{ex}$ ; каждый из крайних спинов – в поле  $J(q-1)\mu + H_{ex}$ . Вычислим средние значения  $\langle \sigma_2 \rangle$ ,  $\langle \frac{\sigma_1 + \sigma_3}{2} \rangle$ ,  $\langle \sigma_1\sigma_2 \rangle$  и  $\langle \sigma_1\sigma_3 \rangle$  по ансамблю с гамильтонианом (3.59).

Получим:

$$\langle \sigma_2 \rangle = \frac{\text{sh}x_1 + 2e^{-2K}\text{sh}x_2 - e^{-4K}\text{sh}x_3}{\text{ch}x_1 + 2e^{-2K}\text{ch}x_2 + e^{-4K}\text{ch}x_3} \quad (3.60)$$

$$\langle \frac{\sigma_1 + \sigma_3}{2} \rangle = \frac{\text{sh}x_1 + e^{-4K}\text{sh}x_3}{\text{ch}x_1 + 2e^{-2K}\text{ch}x_2 + e^{-4K}\text{ch}x_3} \quad (3.61)$$

$$\langle \sigma_1\sigma_3 \rangle = \frac{\text{ch}x_1 - e^{-4K}\text{ch}x_3}{\text{ch}x_1 + 2e^{-2K}\text{ch}x_2 + e^{-4K}\text{ch}x_3} \quad (3.62)$$

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = \frac{\text{ch}x_1 - 2e^{-2K}\text{ch}x_2 + e^{-4K}\text{ch}x_3}{\text{ch}x_1 + 2e^{-2K}\text{ch}x_2 + e^{-4K}\text{ch}x_3} \quad (3.63)$$

где

$$x_1 = (3q - 4)K\mu + 3h, \quad x_2 = (q - 2)K\mu + h, \quad x_3 = qK\mu + h$$

Все функции: (3.60), (3.61),  $\text{th}(qK\mu + h)$  и правая часть (3.54) равны между собой при некотором ненулевом (при  $K > K_c$ ) значении параметра  $\mu = \mu_0$ . Это означает, что при использовании кластера из трех атомов в приближении эффективного поля мы получаем такое же приближение (приближение Бете) что и при использовании кластеров из одного и двух атомов.

Корреляционная функция соседних атомов  $g_{12}$  теперь может быть вычислена по (3.63) при  $\mu = \mu_0$ . Этот способ тоже приводит к выражению (3.58). Функция  $g_{13}$  может быть вычислена по (3.61). Для линейной цепочки Изинга ( $q = 2$ ) корреляционные функции  $g_{12}$  и  $g_{13}$ , вычисленные указанным способом, совпадают с решением приведенным в [6]. Непосредственной проверкой можно убедиться в справедливости следующего соотношения:

$$\left( \frac{g_{12}}{1-M^2} \right)^2 = \frac{g_{13}}{1-M^2},$$

что позволяет предположить, что для произвольного  $q$ , функция  $g_{ij}$  имеет тот же вид, что и для одномерной цепочки:

$$g_{ij} = (1 - M^2)a^{|j-i|} = (1 - M^2)\exp(-|j - i|/\xi) \quad (3.64)$$

где  $a = \frac{g_{12}}{1-M^2} = \frac{g_{13}}{g_{12}}$ , а  $\xi$  - корреляционная длина. Из (3.63) и (3.57) получим зависимость  $\xi$  от  $K$  и намагнитченности  $M$ :

$$\xi = - \left( \ln \frac{g_{12}}{1-M^2} \right)^{-1} \quad (3.65)$$

В критической точке ( $H_{ex} = 0, K = K_c$ ) корреляционная длина  $\xi$  не стремится к бесконечности, хотя и имеет максимальное значение, равное  $1/\ln(q - 1)$ .

Определим корреляцию трех соседних спинов в соответствии с групповым представлением [25]:

$$g_{123} = \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \rangle - M(g_{12} + g_{13} + g_{23}) - M^3 \quad (3.66)$$

Рассмотрим сначала одномерную цепочку спинов. Среднее значение произведения спинов, находящихся в трех последовательных узлах цепочки  $\langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \rangle$  можно вычислить следующим образом [6]

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \rangle = \frac{\text{Tr} \mathbf{S} \mathbf{V} \mathbf{S} \mathbf{V} \mathbf{S} \mathbf{V} \mathbf{V}^{N-3}}{\text{Tr} \mathbf{V}^N},$$

Где  $\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ , а  $\mathbf{V} = \begin{pmatrix} e^{K+h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-h} \end{pmatrix}$  - трансфер-матрица. Проводя вычисления описанным в [6] способом, получим тройную корреляционную функцию

$$g_{123} = -2Mg_{13} \quad (3.67)$$



Рассматривая теперь кластер с  $n = 3$  уже для произвольного  $q$ , получим аналогично (3.60)-(3.63)

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \rangle = \frac{\text{sh}x_1 - 2e^{-2K}\text{sh}x_2 - e^{-4K}\text{sh}x_3}{\text{ch}x_1 + 2e^{-2K}\text{ch}x_2 + e^{-4K}\text{ch}x_3} \quad (3.68)$$

Вычисляя с помощью этого выражения  $g_{123}$ , получим, что равенство (3.66) выполняется для произвольного  $q$ .

Рассмотрим теперь модель Изинга с разбавлением по связям в случае, когда  $b \neq 1$ . Рассуждая так же, как в случае неразбавленного магнетика, получим самосогласованное уравнение для определения намагниченности  $M$  [3]:

$$\begin{aligned} \text{th}(Kqb\mu + h) &= \\ &= (1 - b)\text{th}(K(q - 1)b\mu + h) + b \frac{\text{sh}(2K(q - 1)b\mu + 2h)}{\text{ch}(2K(q - 1)b\mu + 2h) + e^{-2K}}, \end{aligned} \quad (3.69)$$

$$M = \text{th}(Kqb\mu + h)$$

Это уравнение переходит в (3.55) при  $b = 1$  и имеет при  $h = 0$  ненулевое решение при условии  $K > K_c$ , где

$$K_c(b) = \frac{1}{2} \ln \frac{b + b_c}{b - b_c}, \quad (3.70)$$

$b_c = 1/(q - 1)$  - перколяционный порог решетки Бете [8]. Заметим, что хотя уравнения (3.69) дают точное решение для модели Изинга на решетке Бете при  $b = 1$  и точное значение перколяционного порога  $b_c$  для этой решетки, их, все же, нельзя рассматривать как точное решение задачи Изинга для разбавленного магнетика на решетке Бете [3].

Зависимость намагниченности при нулевой температуре ( $K \rightarrow \infty$ ) и нулевом внешнем поле ( $h = 0$ ) от концентрации является, как известно [8], вероятностью того, что некоторый магнитный атом принадлежит бесконечному кластеру  $P(b)$ . Эта функция находится из решения уравнения

$$\begin{cases} \text{th}qb\mu = (1 - b)\text{th}(q - 1)b\mu + b\text{th}2(q - 1)b\mu \\ P(b) = \text{th}qb\mu \end{cases}.$$

Вычисляя среднее значение произведения спинов в кластере из двух атомов, получим:

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = (1 - b)\text{th}^2((q - 1)b\mu K + h) + b \frac{\text{ch}(2(q - 1)b\mu K + 2h) - e^{-2K}}{\text{ch}(2(q - 1)b\mu K + 2h) + e^{-2K}} \quad (3.71)$$

Вводя обозначение  $\gamma = (q - 1)b\mu K + h$  в уравнениях (3.69) и (3.71), запишем выражения для намагниченности  $M$  и корреляционной функции  $g_{12} = \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle - M^2$  в следующем виде:

$$g_{12} = (1 - b)\text{th}^2\gamma + b \frac{\text{ch}(2\gamma) - e^{-2K}}{\text{ch}(2\gamma) + e^{-2K}} - M^2 \quad (3.72)$$

$$M = (1 - b)\text{th}\gamma + b \frac{\text{sh}(2\gamma)}{\text{ch}(2\gamma) + e^{-2K}}.$$

Из этих уравнений следует, что  $g_{12}$  может быть выражена как не зависящая от  $q$  функция  $K$ ,  $M$  и  $b$  - аналогично (3.57).

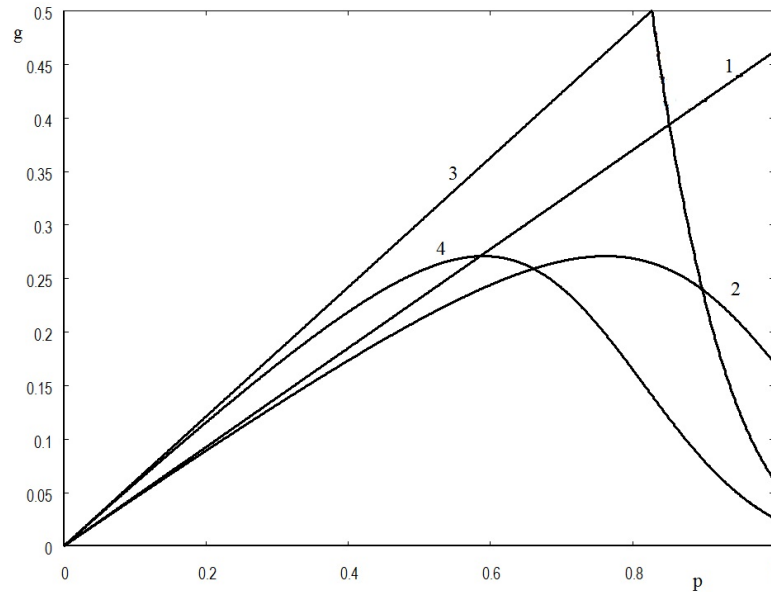


Рис. 3.8 Корреляция  $g_{12}$  как функция концентрации магнитных связей  $b$  при различных  $K$  и  $H_{ex}$ . 1 -  $K = 0,5$ ,  $H_{ex} = 0$ , 2 -  $K = 0,5$ ,  $H_{ex} = 0,05$ , 3 -  $K = 0,7$ ,  $H_{ex} = 0$ , 4 -  $K = 0,7$ ,  $H_{ex} = 0,07$

При отсутствии внешнего магнитного поля в области температур  $K < K_c$

$$g_{12}(p) = pg_{12}(1) = bthK$$

При  $K > K_c$  зависимость  $g_{12}$  от  $b$  более сложная (рис. 3.8)

Таким образом, в рамках приближения эффективного поля был исследован изинговский магнетик – как чистый, так и с разбавлением по связям. В результате этого исследования, приходим к следующим основным выводам.

1. Для чистого изинговского магнетика метод эффективного поля можно рассматривать как вариант получения приближения Бете. Преимущество этого варианта в том, что можно легко найти корреляционные функции и корреляционную длину (соотношения (3.57) и (3.64)).

2. Корреляционная длина в рассматриваемом приближении остается конечной в точке фазового перехода, хотя имеет в этой точке максимальное значение.

3. При отсутствии внешнего магнитного поля максимальное значение корреляции ближайших спинов (и корреляционной длины) достигается при  $K = K_c$ . При  $H_{ex} \neq 0$  максимум по  $K$  смещается влево (в сторону меньших значений  $K$ ), а его величина уменьшается.

4. Корреляция  $g_{12}$  в рассматриваемом приближении может быть выражена как не зависящая от  $q$  функция  $K$  и  $M$  для чистого магнетика (3.57) или как функция  $K$ ,  $M$  и  $b$  - для разбавленного (3.71).

5. В нулевом внешнем поле и в области температур  $K < K_c(b)$  зависимость корреляции  $g_{12}$  от концентрации магнитных связей  $b$  является линейной, а в более общем случае эта зависимость показана на рис. 3.8.

### 3.4. Способ построения приближения Бете в модели Изинга разбавленного магнетика

Здесь будет построена «кластерная» интерпретация метода Бете для чистого (не разбавленного) изинговского магнетика. Эта интерпретация основана на сопоставлении кластеров различного размера на решетке Бете, что можно трактовать как ренормгрупповое преобразование конечного масштаба, аналогично [3]. Затем будет показано, что это представление приближения Бете можно распространить на случай разбавленного по узлам или связям изинговского магнетика, причем возможны различные варианты такого распространения. В рассматриваемом приближении найден перколяционный порог (совпадающий с точным значением порога протекания для решетки Бете) и построена зависимость температуры Кюри от концентрации магнитных атомов. Для оценки точности нашего приближения средняя намагниченность при нулевой температуре как функция концентрации сравнивается с вероятностью того, что данный магнитный атом принадлежит бесконечному кластеру магнитных атомов на решетке Бете.

Построим решетку Бете следующим способом, который можно рассматривать как обобщение способа, описанного в [6]. Рассмотрим граф из  $n$  узлов, соединенных цепочкой. Крайние узлы этой цепочки соединим еще с  $q - 1$  новыми узлами (своими для каждого из крайних узлов), а каждый внутренний узел – с  $q - 2$  другими новыми узлами (опять-таки, своими для каждого из внутренних узлов). Назовем всю совокупность этих добавленных  $nq - 2(n - 1)$  узлов «первой оболочкой». Последующие оболочки определим рекуррентной процедурой: оболочка  $r + 1$  строится присоединением  $q - 1$  новых узлов к каждому из узлов оболочки  $r$ . Проведя эту процедуру  $N$  раз, получим так называемое дерево Кейли, внутренняя часть которого при  $N \rightarrow \infty$  и является решеткой Бете. Рассмотрим теперь модель Изинга на решетке Бете. Пусть  $\sigma_i$ ,  $i = 1, \dots, n$  - спины, расположенные в узлах первоначальной цепочки. Статистическая сумма системы  $Z_N = \sum P(\sigma)$ , где суммирование проводится по всем возможным конфигурациям  $\sigma$  и  $P(\sigma) = \exp(K \sum \sigma_i \sigma_j)$ . (Суммирование в последнем выражении проводится по всем связям решетки.) Запишем  $P(\sigma)$  в виде:

$$P(\sigma) = \exp\left(K \sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i \sigma_{i+1}\right) \prod_{j=1}^{q-1} Q_N(\sigma_1, s_{1,j}) \prod_{j=1}^{q-2} Q_N(\sigma_2, s_{2,j}) \dots \prod_{j=1}^{q-1} Q_N(\sigma_n, s_{n,j})$$

где  $s_{i,j}$  - совокупность спинов  $j$ -й ветки, отходящей от  $i$ -го узла цепочки, а

$$Q_N(\sigma_i, s_{i,j}) = \exp\left(K \sum s_i s_j + K s_1 \sigma_i\right)$$

Суммируя это выражение по всем  $s_{i,j}$  и введя обозначение  $g_N(\sigma_i) = \sum_{\{s_{i,j}\}} Q_N(\sigma_i, s_{i,j})$  (все суммы одинаковы для всех ветвей), получим:  $Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} p(\sigma_1, \sigma_2 \dots \sigma_n)$ , где

$$p(\sigma_1, \sigma_2 \dots \sigma_n) = \exp\left(K \sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i \sigma_{i+1}\right) g_N^{q-1}(\sigma_1) g_N^{q-2}(\sigma_2) \dots g_N^{q-1}(\sigma_n)$$

Если  $f(\sigma_1, \sigma_2 \dots \sigma_n)$  - некоторая функция спинов цепочки, то ее среднее значение, равное

$$\langle f(\sigma_1, \sigma_2 \dots \sigma_n) \rangle = \frac{\sum_{\{\sigma_i\}} f(\sigma_1, \sigma_2 \dots \sigma_n) p(\sigma_1, \sigma_2 \dots \sigma_n)}{\sum_{\{\sigma_i\}} p(\sigma_1, \sigma_2 \dots \sigma_n)}$$

можно представить в следующем виде. Обозначим  $x_N = g_N(-1)/g_N(+1)$  и запишем  $g_N(\sigma_i)/g_N(+1)$  как  $g_N(\sigma_i)/g_N(+1) = \exp\left(\frac{1-\sigma_i}{2} \ln x_N\right)$ . Тогда

$$\langle f(\sigma_1, \sigma_2 \dots \sigma_n) \rangle = \frac{\sum_{\{\sigma_i\}} f(\sigma_1, \sigma_2 \dots \sigma_n) \tilde{p}(\sigma_1, \sigma_2 \dots \sigma_n)}{\sum_{\{\sigma_i\}} \tilde{p}(\sigma_1, \sigma_2 \dots \sigma_n)} \quad (3.73)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{p}(\sigma_1, \sigma_2 \dots \sigma_n) &= \exp\left(K \sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i \sigma_{i+1} + K \sum_{i=1}^n h_{N,i} \sigma_i\right), \\ h_{N,1} &= h_{N,2} = (q-1)\mu_N, \quad h_{N,i} = (q-2)\mu_N \\ &(i = 2, \dots, n-1), \quad \mu_N = \frac{1}{2K} \ln \frac{1}{x_N}. \end{aligned}$$

Таким образом, среднее значение  $\langle f(\sigma_1, \sigma_2 \dots \sigma_n) \rangle$  можно интерпретировать как среднее по кластеру из  $n$  спинов  $\sigma_i$ , связанных обменным взаимодействием и находящихся в постоянных полях  $h_{N,i}$ . Для величин  $x_N$  (или  $\mu_N$ ) можно построить рекуррентное соотношение [6]

$$x_N = \frac{e^{-K} + e^K x_{N-1}^{q-1}}{e^K + e^{-K} x_{N-1}^{q-1}}, \quad x_0 = 1 \quad (3.74)$$

Переходя к термодинамическому пределу  $N \rightarrow \infty$ , получим из рекуррентного соотношения (3.74) самосогласованное уравнение для  $x = \lim_{N \rightarrow \infty} x_N$ . Решив это уравнение, можно вычислить среднее значение любой функции  $f(\sigma_1, \sigma_2 \dots \sigma_n)$ . Однако можно предложить другой способ определения величины  $\mu = \lim_{N \rightarrow \infty} \mu_N$ , основанный на представлении среднего  $\langle f(\sigma_1, \sigma_2 \dots \sigma_n) \rangle$  как среднего по кластеру (3.72). Вычислим по формуле (3.73) среднюю намагниченность  $M(n, \mu) = \langle \sum_{i=1}^n \sigma_i / n \rangle$ . Рассмотрим теперь два кластера с различным количеством спинов  $n$  и  $n'$ . Очевидно, что в термодинамическом пределе

$$M(n, \mu) = M(n', \mu). \quad (3.75)$$

Последнее равенство можно рассматривать как уравнение относительно  $\mu$ . (Кроме того, уравнение для  $\mu$  можно получить, приравнявая средние значения намагниченности различных частей одного и того же кластера, но следует учесть, что при этом может получиться тождественное равенство.)

Для магнетика без примесей, предложенная интерпретация метода Бете приводит, разумеется, к тем же результатам, что и традиционная [24]. Но, как будет показано ниже, эта интерпретация позволяет построить различные приближенные методы анализа магнитных свойств разбавленного магнетика на решетке Бете.

*Разбавленный изинговский магнетик* Запишем уравнение (3.75) применительно к кластерам с  $n = 1$  и  $n' = 2$ :

$$\text{th}(Kq\mu) = \frac{\text{sh}(2K(q-1)\mu)}{\text{ch}(2K(q-1)\mu) + e^{-2K}}$$

Это уравнение имеет ненулевое решение при  $K > K_c$ , где  $K_c = \frac{1}{2} \ln \frac{q}{q-2}$  - критическая точка для модели Изинга на решетке Бете [6]. Предположим теперь, что каждый узел решетки Бете заполнен изинговским спином с вероятностью  $b$  и немагнитным атомом с вероятностью  $1 - b$ . Для этой модели можно построить обобщение уравнения (3.74) следующим образом. Кластер из одного узла может быть заполнен немагнитным атомом, среднее значение намагниченности такого кластера очевидно равно нулю. Если же кластер заполнен магнитным атомом, обозначим через  $M_l$  условное среднее значение его намагниченности, при условии, что у него есть  $l$  магнитных соседей. Тогда средняя намагниченность на узел решетки  $M = b \langle M_l \rangle_{W_1(l)}$ , где треугольные скобки означают усреднение по функции распределения  $W_1(l)$  величины  $l$ . Сделаем теперь следующее приближение: будем считать  $M_l = \text{th}(Kl\mu)$ . То есть

$$M(1, \mu, b) = b \langle \text{th}(Kl\mu) \rangle_{W_1(l)}$$

Рассуждая аналогично для кластера из двух узлов, получим

$$M(2, \mu, b) = \frac{1}{2} b(1-b) \langle \text{th}(Kl_1\mu) + \text{th}(Kl_2\mu) \rangle_{W_2(l_1, l_2)} + b^2 \left\langle \frac{\text{sh}(K(l_1 + l_2)\mu)}{\text{ch}(K(l_1 + l_2)\mu) + e^{-2K} \text{ch}(K(l_1 - l_2)\mu)} \right\rangle_{W_2(l_1, l_2)}$$

Здесь  $l_1$  и  $l_2$  количества магнитных соседей у первого и второго узлов кластера, а  $W_2(l_1, l_2)$  - их функция распределения. Приравнявая теперь  $M(1, \mu, b)$  и  $M(2, \mu, b)$  получим уравнение относительно  $\mu$ , которое можно рассматривать как обобщение уравнения (3.75) для разбавленного магнетика.

Найдем сначала критическую точку  $K_c(b)$  разбавленного магнетика в рассматриваемом приближении. Приравнявая производные по  $\mu$  от  $M(1, \mu, b)$  и  $M(2, \mu, b)$  при  $\mu = 0$ , получим

$$\langle l \rangle_{W_1(l)} = \frac{1}{2} (1-b) \langle l_1 + l_2 \rangle_{W_2(l_1, l_2)} + \frac{b}{1 + e^{-2K_c}} \langle l_1 + l_2 \rangle_{W_2(l_1, l_2)}$$

Считая, что  $\langle l \rangle_{W_1(l)} = qb$ , а  $\langle l_1 + l_2 \rangle_{W_2(l_1, l_2)} = 2(q-1)b$ , получим выражение для  $K_c(b)$

$$K_c(b) = \frac{1}{2} \ln \frac{q-(q-1)(1-b)}{(q-1)(1+b)-q} = \frac{1}{2} \ln \frac{b+b_c}{b-b_c} \quad (3.76)$$

При  $b = 1$  получим известную [6] критическую точку модели Изинга на решетке Бете. Кроме того, видно, что  $K_c(b) \rightarrow \infty$  (то есть, температура Кюри  $T_c(b) \rightarrow 0$ ) при  $b \rightarrow b_c = \frac{1}{q-1}$ , что является перколяционным порогом для решетки Бете [8].

Найдем теперь  $M_0(b)$  – среднюю намагниченность магнитного атома при  $K \rightarrow \infty$ . Как известно [8] эта функция может быть интерпретирована как вероятность  $P(b)$  того, что взятый наугад магнитный атом принадлежит бесконечному кластеру таких атомов. Для решетки Бете существует точное выражение для этой вероятности [8]:

$$P(b) = 1 - z^q, \quad (3.77)$$

где  $z$  - корень уравнения  $\sum_{i=0}^{q-2} z^i = 1/b$ . Будем использовать степень близости  $M_0(b)$  к  $P(b)$  в качестве критерия точности рассматриваемых приближений.

Уравнение для  $M_0(b)$ , полученное сопоставлением кластеров из одного и двух атомов имеет, согласно сказанному выше, следующий вид:

$$M_0(b) = \langle \text{th}(yl) \rangle_{W_1(l)},$$

где  $y = \lim_{K \rightarrow \infty} K\mu(K)$  и является решением уравнения

$$\langle \text{th}(yl) \rangle_{W_1(l)} = \frac{1}{2} (1 - b) \langle \text{th}(yl_1) + \text{th}(yl_2) \rangle_{W_2(l_1, l_2)} + b \langle \text{th}(y(l_1 + l_2)) \rangle_{W_2(l_1, l_2)},$$

Дальнейший расчет зависит от выбора функций распределения  $W_1(l)$  и  $W_2(l_1, l_2)$ . Например, можно просто заменить усреднения по этим функциям подстановкой в соответствующие выражения средних значений  $\langle l \rangle_{W_1(l)} = qb$  и  $\langle l_1 \rangle_{W_2(l_1, l_2)} = \langle l_2 \rangle_{W_2(l_1, l_2)} = (q - 1)b$ . В этом случае приходим к выражениям

$$M_{0,a}(b) = \text{th}(yqb) \quad (3.78)$$

$$\text{th}(yqb) = (1 - b)\text{th}(y(q - 1)b) + b\text{th}(2y(q - 1)b)$$

Если же в качестве функций распределения  $W_1(l)$  и  $W_2(l_1, l_2)$  выбрать биномиальные распределения, получим:

$$M_{0,b}(b) = \sum_{l=0}^q C_q^l b^l (1 - b)^{q-l} \text{th}(yl) \quad (3.79)$$

$$\sum_{l=0}^q C_q^l b^l (1 - b)^{q-l} \text{th}(yl) = (1 - b) \sum_{l=0}^{q-1} C_{q-1}^l b^l (1 - b)^{q-1-l} \text{th}(yl) + b \sum_{l=0}^{2(q-1)} C_{2(q-1)}^l b^l (1 - b)^{2(q-1)-l} \text{th}(yl)$$

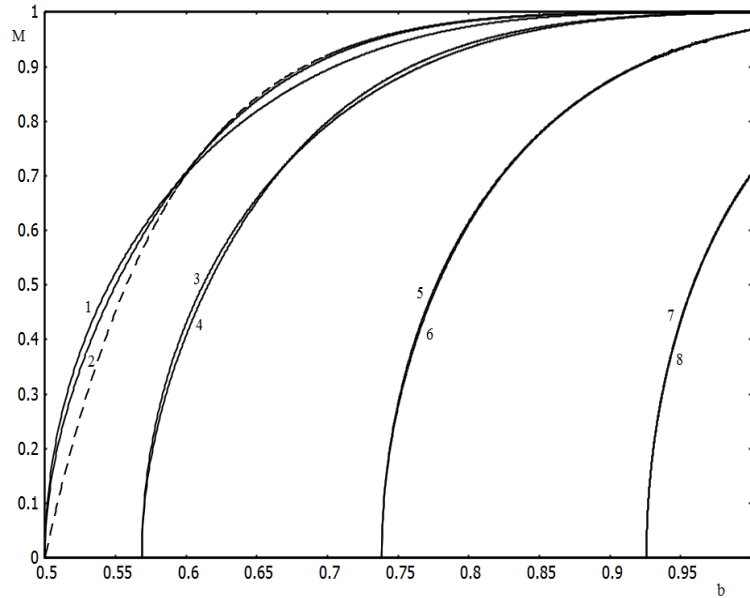


Рис. 3.9 Зависимость спонтанной намагниченности от концентрации магнитных атомов  $b$  при различных температурах для  $q = 3$ . Кривые 1 и 2 – спонтанная намагниченность при нулевой температуре в приближениях (6) и (7) соответственно. Пунктирная кривая – вероятность того, что магнитный атом принадлежит бесконечному кластеру (5). Кривые 3, 5 и 7 – спонтанная намагниченность в приближении (6) при  $K = 2.5K_c(1)$ ,  $1.5K_c(1)$ ,  $1.1K_c(1)$  соответственно. Кривые 4, 6, 8 – спонтанная намагниченность в приближении (7) при тех же значениях  $K$ .

На рисунке 3.9 приведены графики спонтанной намагниченности при нулевой температуре, вычисленные в приближениях (3.78) и (3.79) (кривые 1 и 2), пунктирная линия – вероятность (3.77). Видно, что все три кривые достаточно близки. На рис. 3.10 показаны разности  $\Delta = M_0(b) - P(b)$  для методов (3.78) и (3.79). Видно, что отличие спонтанной намагниченности от вероятности принадлежать бесконечному кластеру меньше для приближения (3.79), то есть в случае, когда в качестве функций распределения  $W_1(l)$  и  $W_2(l_1 l_2)$  выбирается биномиальное распределение. Кроме того, из этого рисунка видно, что разница  $M_0(b) - P(b)$  максимальна при концентрациях, несколько больших, чем порог протекания и практически исчезает при больших концентрациях магнитных атомов.

На рис. 3.9 показана так же спонтанная намагниченность как функция концентрации при конечных температурах (кривые 3 - 8). Видно, что различие между приближениями (3.78) и (3.79) становится меньше при увеличении температуры.

Таким образом, даже в простейшем варианте кластерного способа построения самосогласованных уравнений для модели Изинга разбавленного магнетика на решетке Бете, а именно – при использовании кластеров из одного и двух атомов, получаем хорошее согласование с известными точными результатами, относящимися к этой модели. Можно надеяться, что использование кластеров большего размера, по описанной выше методике, приведет к еще более точным результатам.

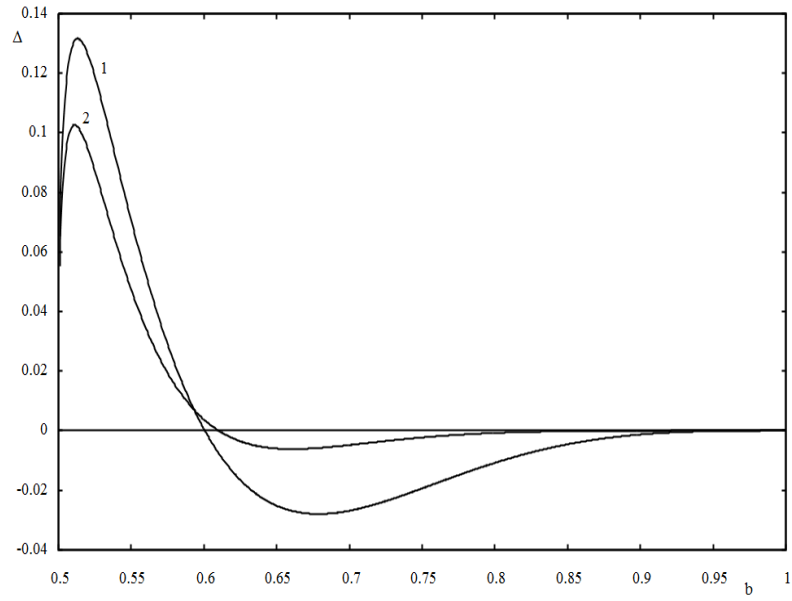


Рис. 3.10 Разница  $\Delta = M_0(b) - P(b)$  спонтанной намагниченности при нулевой температуре и вероятности для магнитного атома принадлежать бесконечному кластеру в зависимости от концентрации  $b$ . Кривые 1 и 2 – приближения (6) и (7) соответственно.



## Глава 4. Подвижные примеси и псевдохаотическое приближение

Известно, что магнитные свойства сплавов, состоящих из магнитных и не магнитных атомов, отличаются от свойств чистых магнетиков [8, 19, 22]. Теоретические [8, 19, 22, 32, 33] и экспериментальные [34, 35] исследования таких систем проводятся уже достаточно давно. В большинстве случаев хорошим приближением при описании разбавленных магнетиков является допущение о случайном распределении примесей по узлам решетки [32, 33]. Поэтому в теоретических работах, посвященных исследованию разбавленных магнетиков, случайное распределение примесей вводится, как правило, изначально.

Однако, если, например, в ходе химической реакции изменяется состав магнетика, то это означает, что магнитные атомы (или атомы примеси) могут перемещаться, и, если реакция идет достаточно медленно, система будет находиться в состоянии близком к термодинамическому равновесию. Кроме того, при изменении температуры должно происходить перераспределение немагнитных примесей по узлам решетки, которое может приводить к изменению магнитных свойств системы.

В параграфе 4.2 будет рассмотрено приближение среднего поля применительно к разбавленному изинговскому магнетиком с подвижными примесями. То есть, рассмотрено применение метода среднего поля к системе, состоящей из магнитных и немагнитных атомов, находящихся в термодинамическом равновесии. Построены фазовые диаграммы и найдена зависимость намагниченности от концентрации магнитных атомов для модели Изинга с подвижными немагнитными примесями. В этом же приближении исследован фазовый переход в модели Поттса с тремя состояниями.

В параграфе 4.3 рассмотрено применение приближения Бете к системе, состоящей из магнитных и немагнитных атомов, находящихся в термодинамическом равновесии. В этом приближении построены зависимости намагниченности и температуры Кюри от концентрации магнитных атомов для модели Изинга с подвижными немагнитными примесями и найдены предельные концентрации возникновения спонтанной намагниченности в основном состоянии. Для одномерной цепочки рассмотренное приближение является точным решением (глава 2). Для чистого магнетика приближение Бете можно получить как решение задачи Изинга на решетке (дерева) Бете [6] или как соотношение, связывающее намагниченность центрального атома и атома первой координационной сферы [24]. Однако на приближение Бете можно смотреть и как на один из самосогласованных методов, общая схема построения которых представлена в работах [2, 26, 37]. Эти методы основаны на усреднении по локальным обменным полям. Методика усреднения по локальным полям может быть использована и для анализа поведения

сплава двух типов магнитных атомов [32], и для анализа систем, в которых обменный интеграл является непрерывной функцией расстояния между атомами [15,33]. В работе [14] один из вариантов этой методики уже применялся для анализа равновесных состояний сплава магнитных и немагнитных атомов в отсутствие внешнего магнитного поля. В параграфе 4.3 рассмотрено другое приближение для той же модели, которое можно рассматривать как обобщение метода Бете.

Кроме того, в настоящей главе предлагается несколько иной подход к анализу свойств разбавленных магнетиков с замороженными немагнитными примесями. Вместо того чтобы с самого начала полагать, что примеси распределены в решетке случайно, рассмотрим магнетик, в котором магнитные атомы и атомы примеси могут перемещаться и находятся в термодинамическом равновесии. Энергия такой системы определяется не только ориентацией магнитных моментов, но и расположением атомов примеси по узлам решетки. Иными словами, гамильтониан той или иной модели магнетика с подвижными примесями будет состоять из слагаемых, связанных с обменным взаимодействием магнитных атомов и слагаемых, связанных с межатомным взаимодействием в кристаллической решетке, причем равновесное распределение атомов примеси зависит от параметров, характеризующих эти взаимодействия. Тогда для каждого значения температуры, внешнего магнитного поля и концентрации (доли) магнитных атомов в системе можно подобрать значения параметров межатомного взаимодействия с таким расчетом, чтобы равновесное распределение атомов примеси было бы как можно ближе к случайному.

В параграфе 4.4 рассматривается следующая реализация этой схемы. Рассмотрим модель Изинга на решетке с координационным числом  $q$ . Пусть часть магнитных атомов замещена атомами примеси, которые могут перемещаться по узлам решетки. В этом параграфе к анализу этой модели применяется приближение Бете в варианте самосогласованного приближения [2, 26, 37]. Преимущество трактовки метода Бете как самосогласованного метода заключается в том, что позволяет рассчитать помимо намагниченности или температуры Кюри еще и корреляционные функции, как было показано в работе [33]. В параграфе 4.4 также рассчитываются корреляционные функции, но для модели с подвижными примесями. Для такой модели можно определить несколько типов корреляционных функций – характеризующих взаимосвязь магнитных моментов и взаимосвязь расположения атомов примеси. В качестве условия близости распределения атомов примеси по узлам решетки к случайному, используется равенство нулю корреляции в расположении атомов примеси для двух ближайших узлов, что и является основой псевдохаотического приближения.

#### 4.1. Применение метода среднего поля к модели Изинга с подвижными примесями и к модели Поттса с тремя состояниями

В работах [2, 26, 37] был предложен ряд самосогласованных методов расчета намагниченности и критических точек чистых и разбавленных магнетиков. Эти методы основаны на усреднении по локальным обменным полям. Методика усреднения по локальным полям может быть использована и для анализа поведения сплава двух типов магнитных атомов [32], и для анализа систем, в которых обменный интеграл является непрерывной функцией расстояния между атомами [15, 33].

В этом параграфе мы рассмотрим применение самосогласованных уравнений к разбавленному магнетик с подвижными примесями. Эффекты, связанные с подвижностью примесей, можно условно разделить на две группы. К первой группе относятся динамические (неравновесные) явления, например – изменение с течением времени свойств быстро охлажденного разбавленного магнетика или динамика перераспределения примесей под влиянием внешнего магнитного поля. Такие динамические процессы постепенно приводят к установлению в системе термодинамического равновесия. К эффектам второй группы можно отнести влияние различных внутренних и внешних параметров, таких как температура, внешнее магнитное поле, концентрация примесей и т.д. на свойства равновесного состояния. В силу известных причин, исследование свойств равновесного состояния хотя и связано со значительными трудностями [41], все же легче, чем исследование неравновесных (релаксационных) процессов.

В работе [14] метод усреднения по обменным полям, примененный к модели Изинга с подвижными примесями, использовался для анализа равновесных состояний сплава магнитных и немагнитных атомов в отсутствие внешнего магнитного поля. Здесь будет рассмотрено более простое самосогласованное приближение для той же модели – метод среднего поля, но с учетом влияния внешнего магнитного поля на равновесное состояние. Кроме того, будет показано, что в этом же приближении может быть проанализирована модель Поттса [6] с тремя состояниями.

Рассмотрим кристаллическую решетку с координационным числом  $q$ , в узлах которой могут находиться магнитные и немагнитные атомы (атомы типа 1 и 2 соответственно). С каждым магнитным атомом связан изинговский спин  $s_i = \pm 1$ , так что энергия обменного взаимодействия двух магнитных атомов со спинами  $s_i$  и  $s_j$  есть  $-Js_i s_j$ , если атомы расположены в соседних узлах решетки и равна нулю в противном случае.

Аналогично тому, как это принято при изучении бинарных сплавов [6], допустим, что в системе существуют межатомные силы, радиус действия которых ограничен первой координационной сферой. Обозначим потенциал этих сил  $-U_{\alpha\beta}$ ,  $\alpha, \beta = 1, 2$ . Если теперь сопоставить каждому уз-

лу решетки переменную  $\sigma_i$ , равную  $s_i$  когда в данном узле находится магнитный атом и нулю, когда немагнитный, то энергию обменного взаимодействия  $E_{ex}$  и кулоновскую энергию  $E_k$  можно записать в виде сумм по всем упорядоченным парам соседних узлов:

$$E_{ex} = -\sum_{(i,j)} J \sigma_i \sigma_j,$$

$$E_k = -\sum_{(i,j)} \{U_{11} \sigma_i^2 \sigma_j^2 + U_{22} (1 - \sigma_i^2)(1 - \sigma_j^2) + U_{12} [\sigma_i^2 (1 - \sigma_j^2) + \sigma_j^2 (1 - \sigma_i^2)]\}.$$

Последнее выражение, с точностью до аддитивной константы, можно записать в виде:

$$E_k = -\sum_{(i,j)} U \sigma_i^2 \sigma_j^2 - \sum_i f \sigma_i^2,$$

где  $U = U_{11} + U_{22} - 2U_{12}$ ,  $f = q(U_{12} - U_{22})$ .

Учитывая, что число магнитных атомов в решетке есть  $\sum_i \sigma_i^2$ , запишем большую статистическую сумму системы следующим образом:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp\{(\sum_{(i,j)} (J \sigma_i \sigma_j + U \sigma_i^2 \sigma_j^2) + (f + \mu) \sum_i \sigma_i^2 + H_e \sum_i \sigma_i) / kT\}, \quad (4.1)$$

где  $\mu$  - химический потенциал,  $H_e$  - внешнее магнитное поле, а суммирование производится по всем возможным конфигурациям  $\{\sigma\}$ .

Введем величины  $b = \langle \sigma_i^2 \rangle$  и  $m = \langle \sigma_i \rangle / b$ . Ясно, что эти величины не зависят от  $i$ , поскольку все узлы решетки эквивалентны (в термодинамическом пределе) и имеют простой смысл:  $b$  - вероятность того, что в данном узле находится магнитный атом (концентрация),  $m$  - среднее значение его спина.

Для приближенного вычисления  $m$  и  $b$  используем следующий прием [2, 37]. Определим локальное обменное  $h_i$  и кристаллическое  $\varphi_i$  поля -го узла как  $h_i = \sum \sigma_j$  и  $\varphi_i = \sum \sigma_j^2$  (суммирование производится по всем соседним к  $i$ -му узлам). Величины  $h_i$  и  $\varphi_i$  будем рассматривать как значения случайных величин  $h$  и  $\varphi$  с совместной функцией распределения  $W(h, \varphi)$ . Тогда средние по ансамблю  $\langle \sigma_i \rangle$  и  $\langle \sigma_i^2 \rangle$  вычисляются как

$$\langle \sigma_i \rangle = \left\langle \frac{\text{sh}(Kh + h_e)}{\text{ch}(Kh + h_e) + x e^{-L\varphi}} \right\rangle_{W(h, \varphi)} \quad (4.2)$$

$$\langle \sigma_i^2 \rangle = \left\langle \frac{\text{ch}(Kh + h_e)}{\text{ch}(Kh + h_e) + x e^{-L\varphi}} \right\rangle_{W(h, \varphi)} \quad (4.3)$$

где  $K = J/kT$ ,  $L = U/kT$ ,  $h_e = H_e/kT$ ,  $x = \frac{1}{2} \exp(-(f + \mu)/kT)$  ( $k$  - постоянная Больцмана).

Нахождение точного вида функции распределения  $W(h, \varphi)$  эквивалентно точному решению задачи и не представляется возможным, за исключением нескольких тривиальных случаев. Поэтому, для применения формул (4.2) и (4.3) необходимо использовать то или иное приближение для  $W(h, \varphi)$ . Кроме того, можно получить самосогласованные уравнения для намагниченности и химического потенциала рассматривая кластеры с различным количеством узлов - аналогично тому, как это можно сделать для модели Изинга с замороженными примесями [2, 26].

Одним из самых простых приближений является замена в (2) и (3) полей  $h$  и  $\varphi$  их средними значениями  $\bar{h} = qbm$  и  $\bar{\varphi} = qb$ ; в этом и заключается метод среднего поля:

$$bm = \frac{\text{sh}(Kqbm+h_e)}{\text{ch}(Kqbm+h_e)+xe^{-Lqb}} \quad (4.4)$$

$$b = \frac{\text{ch}(Kqbm+h_e)}{\text{ch}(Kqbm+h_e)+xe^{-Lqb}} \quad (4.5)$$

Уравнения (4.4) и (4.5) можно переписать в следующем виде:

$$m = \text{th}(Kqbm + h_e) \quad (4.6)$$

$$x = \frac{1-b}{b} e^{Lqb} \text{ch}(Kqbm + h_e) \quad (4.7)$$

Из последнего выражения найдем химический потенциал  $\mu$  с точностью до аддитивной постоянной:

$$\mu = -kT \ln \frac{2(1-b)}{b} - kTLqb - kT \ln(\text{ch}(Kqbm + h_e)) \quad (4.8)$$

Первое слагаемое в этом выражении соответствует «идеальному решеточному газу», второе – учет влияния кулоновского взаимодействия, третье – влияние намагниченности и обменного взаимодействия.

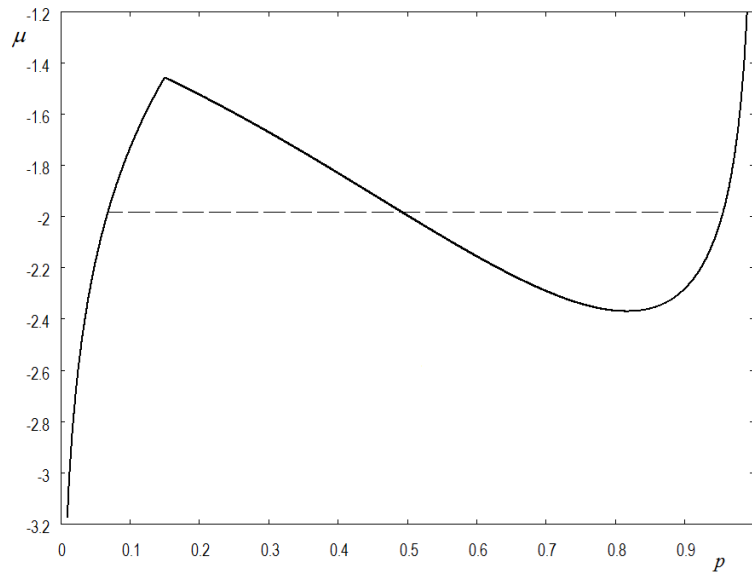


Рис 4.1. Концентрационная зависимость химического потенциала в области гетерофазности

Решая (4.6)-(4.8), нетрудно убедиться, что химический потенциал  $\mu$  является монотонно возрастающей функцией концентрации  $b$  только для  $T$  больших некоторого  $T_k$ , зависящего от отношения  $L/K$ . Если же  $T < T_k$ , то имеется область концентраций, где  $\frac{\partial \mu}{\partial b} < 0$  (рис. 1). Понятно, что состояние с  $\frac{\partial \mu}{\partial b} < 0$  является термодинамически неустойчивым, и в этом случае нужно дополнить (4.8) известным построением Максвелла [24], согласно которому на некотором отрезке  $[b_1, b_2]$  следует считать  $\mu(b)$  постоянной величиной  $\mu_p = \mu(b_1) = \mu(b_2)$ . При этом для

концентраций  $b_1 < b < b_2$  система является смесью двух фаз: «жидкой» с концентрацией  $b_2$  и намагниченностью  $m_2 = m(b_2, T)$  и «газообразной» с концентрацией  $b_1$  и намагниченностью  $m_1 = m(b_1, T)$ . Средняя намагниченность  $\bar{m}$  всей системы определяется «правилом рычага»:  $\bar{m} = ym_1 + (1 - y)m_2$ , где  $y = (b_2 - b)/(b_2 - b_1)$ . Нетрудно показать, что  $\mu_p$  определяется с помощью принципа «равных площадей» в координатах  $\mu$  и  $b$ . Действительно, условия фазового равновесия требуют равенства давлений и химических потенциалов фаз. Давление  $P$  связано с концентрацией соотношением

$$b = \left. \frac{\partial P}{\partial \mu} \right|_T \quad \text{или} \quad b = \left. \frac{\partial P}{\partial b} \right|_T \frac{\partial b}{\partial \mu} \Big|_T.$$

Отсюда  $P(b, T) = \mu(b, T)b - \int \mu(b, T)db$ . Применяя условия фазового равновесия, получим  $\mu_p(b_2 - b_1) = \int_{b_1}^{b_2} \mu(b, T)db$  - то есть как раз правило равных площадей.

При отсутствии внешнего магнитного поля ( $h_e = 0$ ) и достаточно больших положительных значениях  $U$  разделение на фазы при уменьшении температуры может начинаться раньше, чем в системе появится спонтанная намагниченность. Температуру  $T_k$  в этом случае легко вычислить, приравняв к нулю первую и вторую производную (4.8) по концентрации  $b$ . Получим  $T_k = \frac{qU}{4k}$ ; разделение на фазы при этой температуре начинается при  $b = 0,5$ .

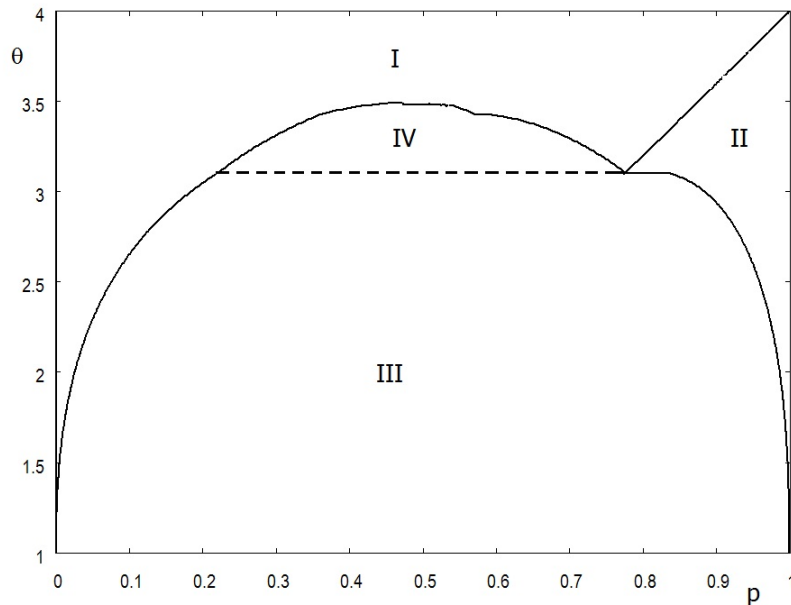


Рис. 4.2. Фазовая диаграмма при  $U/J = 3,5$  и  $h_e = 0$ . По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов  $p$ , по вертикальной – температурный параметр  $\theta = kT/J$ . Область I – гомогенная немагнитная фаза, II – гомогенная магнитная, III – гетерогенная магнитная и IV – гетерогенная немагнитная.

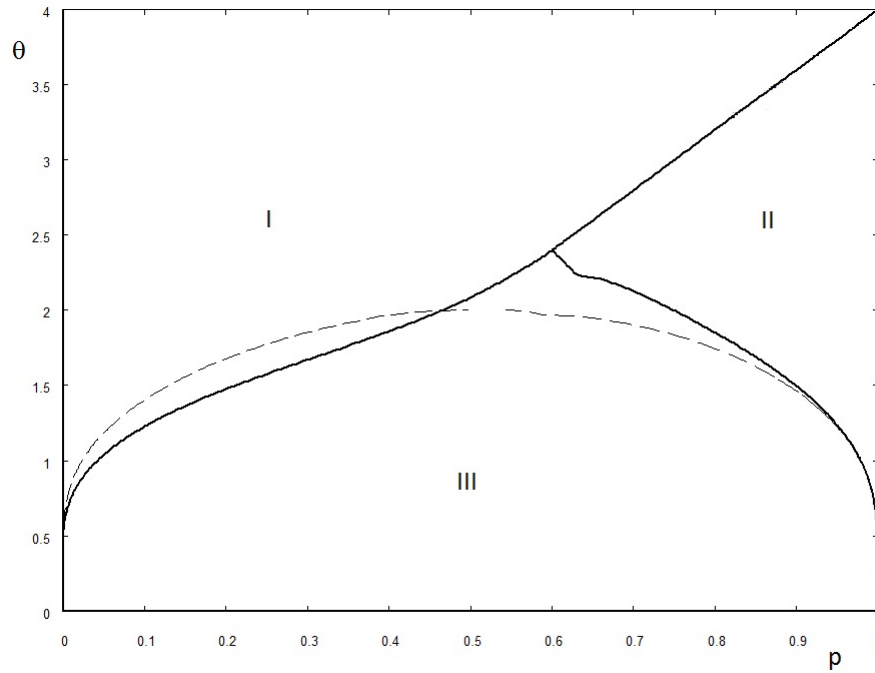


Рис 4.3. Фазовая диаграмма при  $U/J = 1$  и  $h_e = 0$ . По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов  $p$ , по вертикальной – температурный параметр  $\theta = kT/J$ . Область I – гомогенная немагнитная фаза, II – гомогенная магнитная, III – гетерогенная магнитная. Пунктирная линия – граница раздела гомогенной и гетерогенной областей при  $h_e kT = 1$

Уравнение для определения намагниченности (4.6) совпадает с уравнением для намагниченности модели Изинга с замороженными примесями в приближении среднего поля. Этот результат представляется вполне естественным, учитывая то, что модель среднего поля фактически является моделью с бесконечным радиусом взаимодействия [6].

Температура Кюри в рассматриваемом приближении равна  $T_c = \frac{Jqb}{k}$ . То есть, при условии  $U > 2J$  разделение на фазы при уменьшении температуры может начаться раньше появления спонтанной намагниченности. Фазовая диаграмма системы в этом случае имеет вид, показанный на рис. 4.2.

Если же  $U \leq -J$ , химический потенциал (4.8) монотонно возрастает как функция  $b$  при любой температуре - то есть разделения на фазы при понижении температуры в рассматриваемом приближении не происходит. Если  $-J < U < 2J$  разделение на фазы при понижении температуры происходит одновременно или после возникновения спонтанной намагниченности. Фазовая диаграмма в этом случае имеет вид, показанный на рис.4.3; видно, что немагнитная гетерогенная фаза в этом случае отсутствует.

Влияние внешнего магнитного поля на температуру, при которой происходит разделение на фазы проиллюстрировано на рис 4.3. Видно, что при малых концентрациях разделение на

фазы в присутствии внешнего поля происходит при более высокой температуре, чем без поля, а при больших концентрациях магнитных атомов – наоборот.

*Модель Поттса с тремя состояниями.* Модель Поттса [6] формулируется следующим образом. Рассмотрим некоторую регулярную решетку. Каждому узлу поставим в соответствие величину  $\sigma_i$  («спин») которая может принимать  $n$  различных значений, скажем  $1, 2, \dots, n$ . Два соседних спина  $\sigma_i$  и  $\sigma_j$  взаимодействуют с энергией  $-J_p \delta(\sigma_i, \sigma_j)$ , где

$$\delta(\sigma_i, \sigma_j) = \begin{cases} 1, & \sigma_i = \sigma_j \\ 0, & \sigma_i \neq \sigma_j \end{cases}$$

Поэтому полная энергия равна

$$E = -J_p \sum_{(i,j)} \delta(\sigma_i, \sigma_j),$$

где суммирование распространяется на все ребра решетки. Статистическая сумма имеет вид

$$Z = \sum \exp \left\{ \frac{J_p}{kT} \sum_{(i,j)} \delta(\sigma_i, \sigma_j) \right\}. \quad (4.9)$$

Нетрудно показать [6], что модель Поттса с  $n = 2$  эквивалентна обычной модели Изинга в отсутствии внешнего поля. Покажем, что статистическая сумма модели Поттса (4.9) с  $n = 3$  может быть записана в виде, аналогичном (4.1), а значит, ее можно исследовать теми же методами. Пусть каждый спин  $\sigma_i$  может принимать значения  $-1, 0, 1$ . Тогда энергию взаимодействия двух спинов можно записать так:

$$E_{ij} = -J_p \left\{ \frac{1}{2} \sigma_i \sigma_j + \frac{3}{2} \sigma_i^2 \sigma_j^2 - \sigma_i^2 - \sigma_j^2 + 1 \right\} \quad (4.10)$$

а энергию всей системы (с точностью до постоянной):

$$E = -J_p \sum_{(i,j)} \left\{ \frac{1}{2} \sigma_i \sigma_j + \frac{3}{2} \sigma_i^2 \sigma_j^2 \right\} + qJ_p \sum_i \sigma_i^2 \quad (4.11)$$

То есть, если в (4.1) принять  $J = J_p/2$ ,  $U = 3J_p/2$  и  $f + \mu = -qJ_p$  то как раз получим статсумму модели Поттса с  $n = 3$ . Обозначим вероятность того, что в данном узле решетки спин будет обнаружен в состоянии  $\alpha$ , через  $p_{(\alpha)}$  ( $\alpha = -1, 0, 1$ ). Тогда, если  $mp = \langle \sigma_i \rangle$ ,  $p = \langle \sigma_i^2 \rangle$  то  $p_{(+1)} = p \frac{1+m}{2}$ ,  $p_{(-1)} = p \frac{1-m}{2}$ ,  $p_{(0)} = 1 - p$ . И из (4.4) и (4.5) получим:

$$pm = \frac{\text{sh}(Kqpm)}{\text{ch}(Kqpm) + \frac{1}{2}e^{(2-3p)Kq}} \quad (4.12)$$

$$p = \frac{\text{ch}(Kqpm)}{\text{ch}(Kqpm) + \frac{1}{2}e^{(2-3p)Kq}} \quad (4.13)$$

Численное решение этих уравнений дает следующие результаты. Существует критическая температура  $T_c$ , такая, что при  $T > T_c$  имеется только симметричное решение  $p_{(+1)} = p_{(-1)} = p_{(0)} = \frac{1}{3}$ . При  $T < T_c$  появляются решения двух типов. В решении первого типа одна из концентраций, например  $p_{(0)}$ , делается больше  $p_{(+1)}$  и  $p_{(-1)}$ , причем  $p_{(+1)} = p_{(-1)}$ , а при понижении температуры  $p_{(0)} \rightarrow 1$ ,  $p_{(+1)}, p_{(-1)} \rightarrow 0$ . В решении второго типа две концентрации, например  $p_{(+1)}$  и



$p_{(-1)}$ , равны и при малых  $T$   $p_{(+1)}, p_{(-1)} \rightarrow \frac{1}{2}$ ,  $p_{(0)} \rightarrow 0$ . Поскольку только решение первого типа имеет минимальную энергию при  $T \rightarrow 0$ , его и следует считать истинным при  $T < T_c$ . Тогда найти  $T_c$  можно следующим образом. Примем в (4.12) и (4.13)  $m = 0$ . Получим

$$p = \frac{1}{1 + \frac{1}{2}e^{(2-3p)Kq}}.$$

Обозначив  $y = 2 - 3p$  и  $\beta = Kq$  запишем это уравнение в следующем виде:

$$e^{y\beta} = -2 - \frac{6}{y-2}. \quad (4.14)$$

Уравнение имеет корень  $y = 0$ , соответствующий симметричному решению. При  $\beta = \beta_c$  появляется ненулевое решение  $\tilde{y}$ , которое (вместе с  $\beta_c$ ) можно найти из (4.14) и условия равенства производных по  $y$  левой и правой части (4.14):

$$\beta e^{y\beta} = \frac{6}{(y-2)^2}. \quad (4.15)$$

Решая систему уравнений (4.14)-(4.15), получим

$$\tilde{y} = 2 - \frac{6}{3\beta_c + \sqrt{9\beta_c^2 - 12\beta_c}}, \quad (4.16)$$

где  $\beta_c$  является решением уравнения

$$\exp \left\{ \beta_c \left( 2 - \frac{6}{3\beta_c + \sqrt{9\beta_c^2 - 12\beta_c}} \right) \right\} = -2 + 3\beta_c + \sqrt{9\beta_c^2 - 12\beta_c}. \quad (4.17)$$

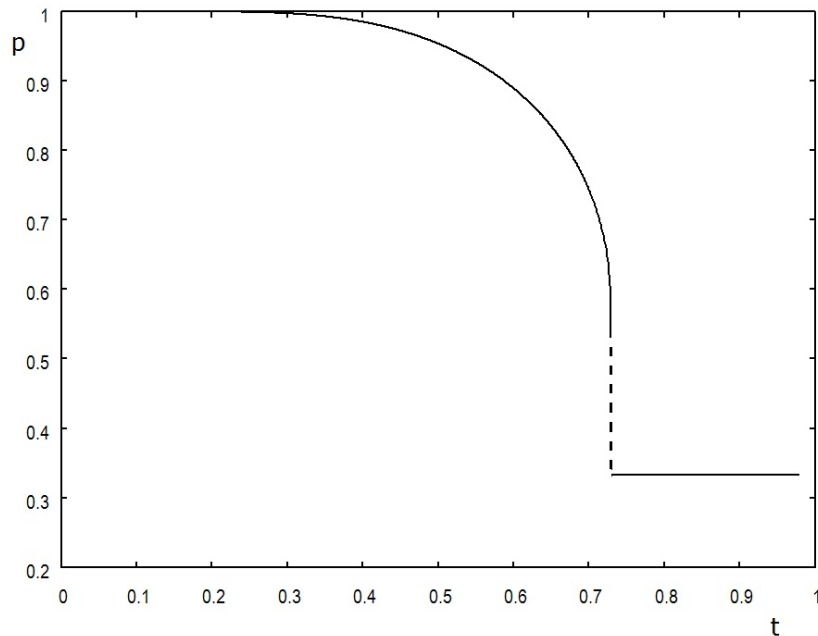


Рис 4.4. Зависимость вероятности  $p_0$  одного из состояний в модели Поттса с тремя состояниями от приведенной температуры  $t = kT/Jq$ .

Из (4.17) находим  $\beta_c \approx 1,373$ , а из (4.16)  $\tilde{y} \approx 0,585$ , то есть при температуре  $T_c = \frac{q}{2\beta_c} \frac{Jp}{k} \approx 0,364 \frac{qJp}{k}$  происходит фазовый переход – концентрация  $p_{(0)}$  скачком возрастает от величины  $\frac{1}{3}$

до 0,528, а концентрации  $p_{(+1)}$  и  $p_{(-1)}$  падают от  $\frac{1}{3}$  до 0,221. Зависимость концентрации  $p_{(0)}$  от температуры показана на рис. 4.4.

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

1. Приближенные самосогласованные методы, применимые к изинговским магнетикам без примесей или с замороженными примесями [26, 37], применимы так же и к более сложной модели – модели Изинга с подвижными примесями.

2. Простейший из самосогласованных методов – метод среднего поля позволяет построить фазовые диаграммы изинговского магнетика с подвижными примесями (рис 4.2, рис. 4.3). В общем случае в рассматриваемом приближении могут существовать четыре фазы – гомогенная немагнитная, гомогенная магнитная, гетерогенная магнитная и гетерогенная немагнитная.

3. Вследствие сходства статистической суммы модели Изинга с подвижными примесями и модели Поттса с тремя состояниями, эти модели можно исследовать одинаковыми способами. В частности, методом среднего поля можно найти критическую температуру и температурную зависимость параметра порядка для этой модели (рис. 4.4).

## 4.2 Модель Изинга с подвижными примесями на произвольной решетке Бете.

Решетка Бете строится следующим образом [6]. Центральный узел (узел 0 на рис. 4.5) соединяется с  $q$  другими узлами, каждый из которых, в свою очередь, с  $q - 1$  новыми. Прделав эту процедуру  $n$  раз получим так называемое дерево Кэйли. Решеткой Бете называется внутренняя (далекая от граничных точек) часть этого графа при  $n \rightarrow \infty$ . Рассмотрим вычисление статистической суммы (2) на решетке Бете методом, описанным в [6].

Перепишем (4.1) в виде:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} P(\sigma), \text{ где} \quad (4.18)$$

$$P(\sigma) = \exp[\sum(K\sigma_i\sigma_j + L\sigma_i^2\sigma_j^2) + \sum_i(r\sigma_i^2 + h_e\sigma_i)], \quad (4.19)$$

первое суммирование проводится по всем парам соседних узлов решетки, а второе – по всем узлам,  $r = (f + \mu)/kT$ . Тогда

$$b = \sum_{\{\sigma\}} \sigma_0^2 P(\sigma) / Z \quad \text{и} \quad Mb = \sum_{\{\sigma\}} \sigma_0 P(\sigma) / Z, \quad (4.20)$$

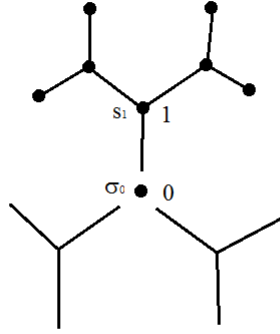


Рис. 4.5. Узлы и связи в решетке Бете при  $q = 3$ .

где  $\sigma_0$  - переменная, относящаяся к центральному узлу дерева Кэйли (рис. 4.5). Выделим в (4.19) слагаемое, соответствующее центральному узлу решетки. Тогда остальные слагаемые, соответствующие отдельным ветвям решетки, группируются в  $q$  независимых выражений и (4.19) переписывается так:

$$P(\sigma) = e^{r\sigma_0^2 + h_e\sigma_0} \prod_{j=1}^q Q_n(\sigma_0 | s^{(j)}),$$

где  $s^{(j)}$  - совокупность переменных, относящихся к  $j$ -ой ветви, а

$$Q_n(\sigma_0 | s) = \exp[\sum(Ks_i s_j + Ls_i^2 s_j^2) + \sum_i(r\sigma_i^2 + h_e\sigma_i) + Ks_1\sigma_0 + Ls_1^2\sigma_0^2]. \quad (4.21)$$

Выделяя теперь в (4.21) слагаемые, соответствующие начальному узлу ветви (узел 1 на рис. 4.5), запишем это выражение в виде:

$$Q_n(\sigma_0 | s) = e^{Ks_1\sigma_0 + Ls_1^2\sigma_0^2 + rs_1^2 + h_e s_1} \prod_{j=1}^{q-1} Q_{n-1}(s_1 | t^{(j)}). \quad (4.22)$$

Обозначим теперь  $G_n(\sigma_0) = \sum_s Q_n(\sigma_0 | s)$  и запишем (4.18) и (4.20) следующим образом:

$$Z = G_n^q(0) + e^{r+h_e} G_n^q(1) + e^{r-h_e} G_n^q(-1),$$

$$b = (e^{r+h_e} G_n^q(1) + e^{r-h_e} G_n^q(-1))/Z, \quad Mb = (e^{r+h_e} G_n^q(1) - e^{r-h_e} G_n^q(-1))/Z, \quad (4.23)$$

а из (4.22) получим

$$G_n(0) = G_{n-1}^{q-1}(0) + e^{r+h_e} G_{n-1}^{q-1}(1) + e^{r-h_e} G_{n-1}^{q-1}(-1)$$

$$G_n(1) = G_{n-1}^{q-1}(0) + e^{K+L+r+h_e} G_{n-1}^{q-1}(1) + e^{-K+L+r-h_e} G_{n-1}^{q-1}(-1) \quad (4.24)$$

$$G_n(-1) = G_{n-1}^{q-1}(0) + e^{-K+L+r+h_e} G_{n-1}^{q-1}(1) + e^{K+L+r-h_e} G_{n-1}^{q-1}(-1)$$

Вводя переменные  $x_n = G_n(-1)/G_n(1)$  и  $y_n = G_n(0)/G_n(1)$  запишем (4.23) в виде

$$M = \frac{e^{he-x_n^q} e^{-he}}{e^{he+x_n^q} e^{-he}}, \quad (4.25)$$

$$b = \frac{e^r(e^{he+x_n^q}e^{-he})}{y_n^q + e^r(e^{he+x_n^q}e^{-he})}. \quad (4.26)$$

А из (4.24) получим рекуррентные соотношения:

$$x_n = \frac{y_{n-1}^{q-1} + e^{L+r}(e^{-K+he+x_{n-1}^{q-1}}e^{K-he})}{y_{n-1}^{q-1} + e^{L+r}(e^{K+he+x_{n-1}^{q-1}}e^{-K-he})}, \quad y_n = \frac{y_{n-1}^{q-1} + e^r(e^{he+x_{n-1}^{q-1}}e^{-he})}{y_{n-1}^{q-1} + e^{L+r}(e^{K+he+x_{n-1}^{q-1}}e^{-K-he})}. \quad (4.27)$$

В пределе  $n \rightarrow \infty$   $x_n \rightarrow X$  и  $y_n \rightarrow Y$ . Введя переменную  $z = Y^{q-1}e^{-r}$  из (4.27) получим:

$$z = \frac{xe^L(e^{K+he+x^{q-1}}e^{-K-he}) - e^L(e^{-K+he+x^{q-1}}e^{K-he})}{1-x},$$

$$Y = \frac{z + e^{he+X^q}e^{-he}}{z + e^L(e^{K+he+X^{q-1}}e^{-K-he})}, \quad (4.28)$$

а из (4.26):

$$b = \frac{e^{he+X^q}e^{-he}}{YZ + e^{he+X^q}e^{-he}}. \quad (4.29)$$

Рассмотрим в этом пределе выражение для намагниченности (4.25):

$$M = \frac{e^{he-X^q}e^{-he}}{e^{he+X^q}e^{-he}}. \quad (4.30)$$

Для вычисления  $M$  и  $b$  можно использовать и следующий прием [2, 26, 37]. Определим локальное обменное  $h_i$  и кристаллическое  $\varphi_i$  поля  $i$ -го узла как  $h_i = \sum \sigma_j$  и  $\varphi_i = \sum \sigma_j^2$  (суммирование производится по всем соседним к  $i$ -му узлам). Величины  $h_i$  и  $\varphi_i$  будем рассматривать как значения случайных величин  $h$  и  $\varphi$  с совместной функцией распределения  $W_1(h, \varphi)$ . Тогда средние по ансамблю  $\langle \sigma_i \rangle$  и  $\langle \sigma_i^2 \rangle$  вычисляются как

$$pM = \left\langle \frac{\text{sh}(Kh+h_e)}{\text{ch}(Kh+h_e) + xe^{-L\varphi}} \right\rangle_{W_1(h,\varphi)} \quad (4.31)$$

$$b = \left\langle \frac{\text{ch}(Kh+h_e)}{\text{ch}(Kh+h_e) + xe^{-L\varphi}} \right\rangle_{W_1(h,\varphi)} \quad (4.32)$$

где  $x = \frac{1}{2} \exp(-(f + \mu)/kT)$ .

Рассмотрим теперь кластер, состоящий из двух соседних узлов и введем обменные  $h_1$  и  $h_2$  и кристаллические  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  поля для каждого узла кластера. Найдем средние значения величин  $(\sigma_1 + \sigma_2)/2$  и  $(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)/2$  по ансамблю с гамильтонианом

$E_2(\sigma_1, \sigma_2) = -J\sigma_1\sigma_2 - Jh_1\sigma_1 - Jh_2\sigma_2 - U\sigma_1^2\sigma_2^2 - U\varphi_1\sigma_1^2 - U\varphi_2\sigma_2^2 - \mu(\sigma_1^2 + \sigma_2^2) - H_e(\sigma_1 + \sigma_2)$  рассматривая  $h_1, h_2, \varphi_1$  и  $\varphi_2$  как постоянные. Затем введем совместную функцию распределения  $W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)$  и усредним результат по этой функции:

$$pM = \left\langle \frac{\frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} (\sigma_1 + \sigma_2) \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)}{\sum_{\sigma_1, \sigma_2} \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)} \right\rangle_{W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)} \quad (4.33)$$

$$p = \left\langle \frac{\frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} (\sigma_1^2 + \sigma_2^2) \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)}{\sum_{\sigma_1, \sigma_2} \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)} \right\rangle_{W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)} \quad (4.34)$$

Теперь можно построить приближенные методы нахождения  $M$  и  $b$  двумя способами. Первый способ заключается в том, что неизвестная функция распределения  $W_1(h, \varphi)$  в (4.31) и

(4.32) (или функция  $W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)$  в (4.33) и (4.34)) заменяется тем или иным приближенным выражением её через искомые значения  $M$  и  $b$ , в результате чего (4.31) и (4.32) (или (4.33) и (4.34)) превращаются в уравнения относительно  $M$  и  $b$ . Например, если взять  $W_1(h, \varphi) = \delta(h - qbM)\delta(\varphi - qb)$ , то есть, заменить поля их средними значениями, получим метод среднего поля, рассмотренный в предыдущем параграфе. Если же построить приближенное выражение для  $W_1(h, \varphi)$  с помощью биномиального распределения, получим способ, описанный в [1]. Подобные приближения можно, конечно же, построить и для функции  $W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)$ .

Второй способ состоит в том, что обе функции распределения  $W_1(h, \varphi)$  и  $W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)$  выражаются через одни и те же параметры  $t$  и  $\rho$ , уравнения для определения которых получаются приравниванием правых частей (4.31) и (4.33), а также (4.32) и (4.34). Такой способ получения приближенных уравнений можно назвать «ренормгрупповым» в том смысле, что вблизи критической точки переход от кластера с одним узлом к кластеру с двумя узлами можно рассматривать как ренормгрупповое преобразование фиксированного масштаба [16]. Применительно к изинговскому магнетизму без примесей одним из вариантов этого способа является известное приближение Бете [6]. Построим теперь приближение, аналогичное приближению Бете, но для модели Изинга с подвижными немагнитными примесями.

Используем, согласно изложенному выше, следующие приближения для функций распределения полей:

$$W_1(h, \varphi) = \delta(h - q\rho t)\delta(\varphi - q\rho),$$

$$W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2) = \delta(h_1 - (q-1)\rho t)\delta(h_2 - (q-1)\rho t)\delta(\varphi_1 - (q-1)\rho)\delta(\varphi_2 - (q-1)\rho)$$

где  $t$  и  $\rho$  некоторые неизвестные параметры. Тогда из (4.31) и (4.32) получим

$$bM = \frac{\text{sh}(Kq\rho t + h_e)}{\text{ch}(Kq\rho t + h_e) + xe^{-Lq\rho}} \quad (4.35)$$

$$b = \frac{\text{ch}(Kq\rho t + h_e)}{\text{ch}(Kq\rho t + h_e) + xe^{-Lq\rho}} \quad (4.36)$$

а из (4.33) и (4.34):

$$bM = \frac{\text{sh}(2K(q-1)\rho t + 2h_e) + 2xe^{-K-L-L(q-1)\rho}\text{sh}(K(q-1)\rho t + h_e)}{Z} \quad (4.37)$$

$$b = \frac{\text{ch}(2K(q-1)\rho t + 2h_e) + 2xe^{-K-L-L(q-1)\rho}\text{ch}(K(q-1)\rho t + h_e) + e^{-2K}}{Z} \quad (4.38)$$

где

$$Z = \text{ch}(2K(q-1)\rho t + 2h_e) + 4xe^{-K-L-L(q-1)\rho}\text{ch}(K(q-1)\rho t + h_e) + 2x^2e^{-K-L-2L(q-1)\rho} + e^{-2K}$$

При  $h_e > 0$  (в этом случае намагниченность  $M$  всегда положительна) систему уравнений (4.35) – (4.38) можно представить в следующем виде. Введем обозначения

$$w = K(q-1)\rho t + h_e, \quad y = xe^{-K-L-L(q-1)\rho}, \quad \gamma = \frac{L}{K} = \frac{U}{J}.$$

Тогда из (4.35) - (4.38) получим

$$M = \text{th}\left(\frac{qw-h_e}{q-1}\right) \quad (4.39)$$

$$b = \frac{2y\text{ch}(w)+\text{ch}(2w)+e^{-2K}}{2y^2e^{(1+\gamma)K}+4y\text{ch}(w)+\text{ch}(2w)+e^{-2K}} \quad (4.40)$$

$$\mu = -kT\ln(2y^q e^{q(1+\gamma)K} \left(\frac{b}{1-b}\right)^{q-1} (1-M^2)^{\frac{q-1}{2}}) \quad (4.41)$$

где

$$y = \frac{1}{2}(1 - e^{-2K}) \frac{\text{sh}\left(\frac{qw-h_e}{q-1}\right)}{\text{sh}\left(\frac{w-h_e}{q-1}\right)} - \text{ch}(w). \quad (4.42)$$

Фактически эти уравнения представляют собой параметрические зависимости  $M(b, K, h_e)$  и  $\mu(b, K, h_e)$ , поскольку, как в этом легко убедиться, при  $h_e > 0$  всегда существует такой интервал значений параметра  $w$ , для которого  $b$ , вычисленное по формуле (4.40), пробегает весь интервал от 0 до 1. Действительно, при  $w \rightarrow h_e + 0$ , из (4.40) и (4.42) следует, что  $y \rightarrow +\infty$ , а  $b \rightarrow 0$ . А рассматривая асимптотическое поведение  $y(w)$  при  $w \rightarrow +\infty$ , можно сделать вывод, что существует такое значение  $w$ , при котором  $y = 0$ , и, в соответствии с (4.40),  $b = 1$ .

Нетрудно показать, что уравнения (4.39) – (4.42) эквивалентны (4.28) – (4.30). Действительно, обозначив  $w = h_e - \frac{q-1}{2} \ln X$  получим из (4.30) выражение в точности совпадающее с (4.39), а из (4.28) и (4.29), выражение, совпадающее с (4.40). Таким образом, приближение, в котором получены формулы (4.39) – (4.42) можно рассматривать как точное решение задачи об изинговском магнетике с подвижными примесями на решетке Бете.

Рассмотрим теперь случай  $h_e = 0$ . Оказывается, что решение с  $M \neq 0$  у системы уравнений (4.39) – (4.42) существует только при  $K > K_c(b)$ , где  $K_c(b)$  определяется следующим образом. Приравнивая между собой частные от деления правых частей (4.39), (4.40) и (4.41), (4.42) получим:

$$\frac{\text{sh}(2w)+2y \text{sh}(w)}{\text{ch}(2w)+2y \text{ch}(w)+e^{-2K}} = \text{th}\left(\frac{qw}{q-1}\right). \quad (4.43)$$

где значение  $y$  выражается из (4.40) через  $b$  и  $w$ .

Положительный корень уравнения (4.43) (соответствующий ненулевой намагниченности) исчезает при условии равенства производных по  $w$  правой и левой частей (4.43) при  $w = 0$ . Это условие приводит к выражению

$$b = \frac{(q-1)\text{th}K_c}{e^{\gamma K_c}((q-1)\text{th}K_c-1)^2 \text{ch}K_c + 2(q-1)\text{th}K_c - 1} \quad (4.44)$$

определяющему  $K_c(b)$ . Другим способом этот результат можно получить перейдя к пределу  $w \rightarrow 0$  в выражениях (4.40) и (4.42) при  $h_e = 0$

Таким образом, при  $h_e = 0$  и  $K > K_c(1) = \frac{1}{2} \ln \frac{q}{q-2}$  для значений  $b$  из интервала  $[b_c, 1]$ ,

где

$$b_c = \frac{(q-1)\text{th}K}{e^{\gamma K}((q-1)\text{th}K-1)^2 \text{ch}K + 2(q-1)\text{th}K - 1} \quad (4.45)$$

Намагниченность и химический потенциал находится по формулам (4.39) – (4.42) с  $h_e = 0$ . А для значений  $b$  из интервала  $[0, b_c]$  или для всех значений  $b$  при  $K < K_c(1)$  намагниченность  $M = 0$ , а химический потенциал

$$\mu = -kT(q \ln(A) + (q-1) \ln \frac{b}{1-b}) \quad (4.46)$$

где

$$A = \frac{1}{2b} \left( (1-2b) + \sqrt{(1-2b)^2 + 2b(1-b)(1+e^{-2K})e^{(1+\gamma)K}} \right).$$

Расчет показывает, что химический потенциал  $\mu$ , вычисленный по формулам (4.41) и (4.46), является монотонно возрастающей функцией концентрации  $b$  при всех значениях температуры только в случае  $\gamma > -1$ . Если же  $\gamma \leq -1$ , то существует значение  $K_k$  такое, что при всех  $K > K_k$  есть участок концентраций, на котором  $\frac{\partial \mu}{\partial b} < 0$ . Это означает, что при  $\gamma > -1$  (то есть в случае, когда эффективный потенциал кулоновского взаимодействия  $U$  либо положителен, либо отрицателен, но не превосходит по абсолютной величине энергию обменного взаимодействия  $J$ ) кроме магнитного фазового перехода в системе существует переход типа «жидкость-газ», приводящий к образованию фаз с различной концентрацией магнитных атомов. Для исследования фазовой диаграммы системы в этом случае нужно дополнить уравнения (4.39) – (4.42) известным построением Максвелла [24], согласно которому химический потенциал с областью  $\frac{\partial \mu}{\partial b} < 0$  заменяется на некотором участке постоянной, определяемой по правилу «равных площадей». Однако в здесь не будем проводить это исследование и ограничимся анализом случая  $\gamma \leq -1$ .

Исследуем вначале зависимость критической температуры  $K_c^{-1}$  от концентрации магнитных атомов  $b$ . Эта зависимость определяется уравнением (4.44). При  $b = 1$  из (4.44) получим  $K_c(1) = \frac{1}{2} \ln \frac{q}{q-2}$  что соответствует температуре Кюри для чистого изинговского магнетика в приближении Бете [6]. При  $\gamma = -1$  функция  $K_c^{-1}(b)$  монотонно убывает при уменьшении  $b$  и обращается в ноль при  $b_{c1} = \frac{2(q-1)}{q^2-2}$  (кривая 1 на рис. 4.6). Если  $-3 < \gamma < -1$  функции  $K_c^{-1}(b)$  является неоднозначными и обращаются в ноль при  $b_{c2} = \frac{q-1}{2q-3}$  (кривая 2 на рис 4.6). При  $\gamma \leq -3$  функции  $K_c^{-1}(b)$  вновь становятся монотонно убывающими при уменьшении  $b$ , обращаясь в ноль при  $b_{c2}$  (кривая 3 на рис 4.6); при  $\gamma \rightarrow -\infty$  функции  $K_c^{-1}(b)$  приближаются к предельной кривой, показанной на рис 4.6 (кривая 4).

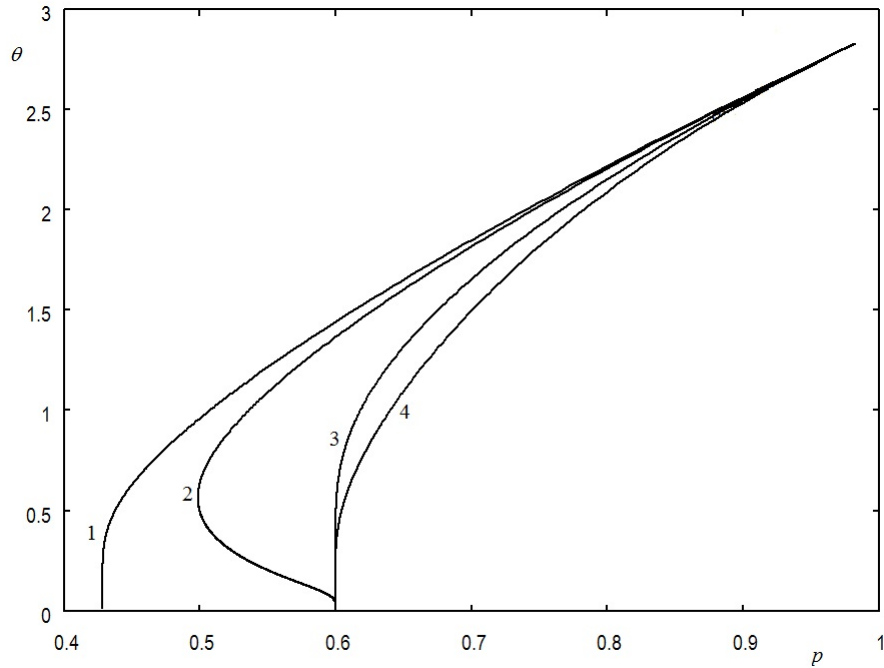


Рис. 4.6. Концентрационная зависимость температуры Кюри для  $q = 4$ . По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов  $p$ , по вертикальной – температурный параметр  $\theta = kT/J$ . Кривая 1 –  $\gamma = -1$ , кривая 2 –  $\gamma = -1,2$ , кривая 3 –  $\gamma = -3$  и кривая 4 –  $\gamma = -\infty$ .

Из уравнений (4.39) – (4.42) можно найти спонтанную намагниченность  $M$  как функцию концентрации  $b$  при постоянной температуре  $\theta = K^{-1}$ . В частности, при  $\theta \rightarrow 0$  функцию  $M_0(b)$  можно интерпретировать как вероятность того, что случайно выбранный магнитный атом принадлежит бесконечному кластеру таких атомов [19]. Если в формулах (4.39) – (4.42) перейти к пределу  $K \rightarrow \infty$ , получим, что при  $\gamma = -1$   $M(b) \rightarrow M_{01}(b)$ , а при  $\gamma < -1$   $M(b) \rightarrow M_{02}(b)$  – эти кривые показаны на рис 2 – кривая 1 и кривая 4 соответственно – они обращаются в ноль при  $b$  равном  $b_{c1}$  и  $b_{c2}$  соответственно. При любой температуре  $\theta$  спонтанная намагниченность является монотонно возрастающей функцией концентрации  $b$ ; при ненулевых температурах эта функция зависит от  $\theta$  и  $\gamma$  (рис. 4.7, кривые 2, 3 и 5). Как видно из рис.4.6, зависимость намагниченности  $M$  от температуры  $\theta = K^{-1}$  не всегда будет монотонной. Действительно, расчет показывает, что при  $\gamma = -1$  и при  $\gamma \leq -3$  намагниченность монотонно убывает с ростом температуры при любом значении концентрации  $b$ .



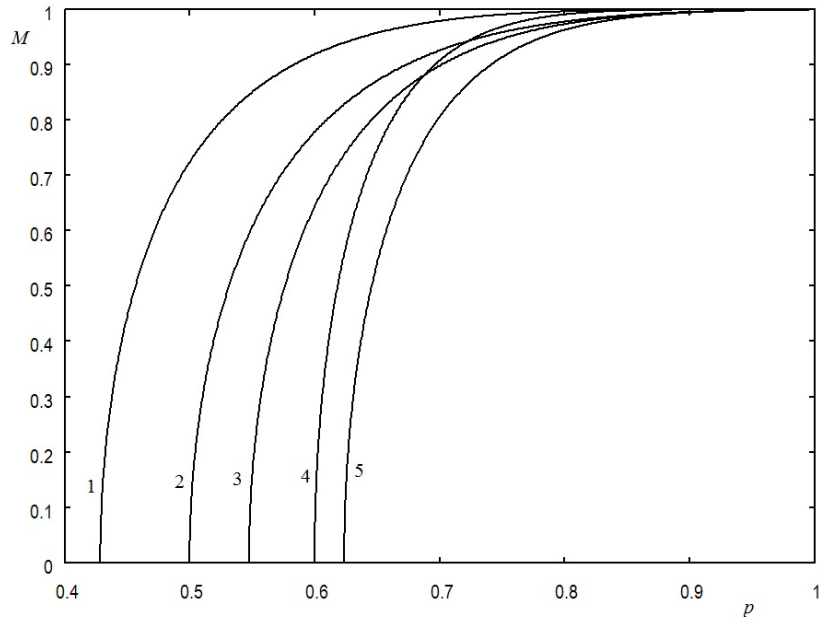


Рис. 4.7. Концентрационная зависимость спонтанной намагниченности для  $q = 4$ . По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов  $p$ , по вертикальной – спонтанная намагниченность  $M$ . Кривые 1 и 4 показывают предельные зависимости  $M(p)$  при  $\theta = 0$ ; кривая 1 -  $\gamma = -1$ , кривая 4 -  $\gamma < -1$ . Кривые 2, 3 и 5 построены при  $\theta = \frac{1}{3K_c(1)}$  для значений  $\gamma$  равных -1, -1,5 и -3,5 соответственно.

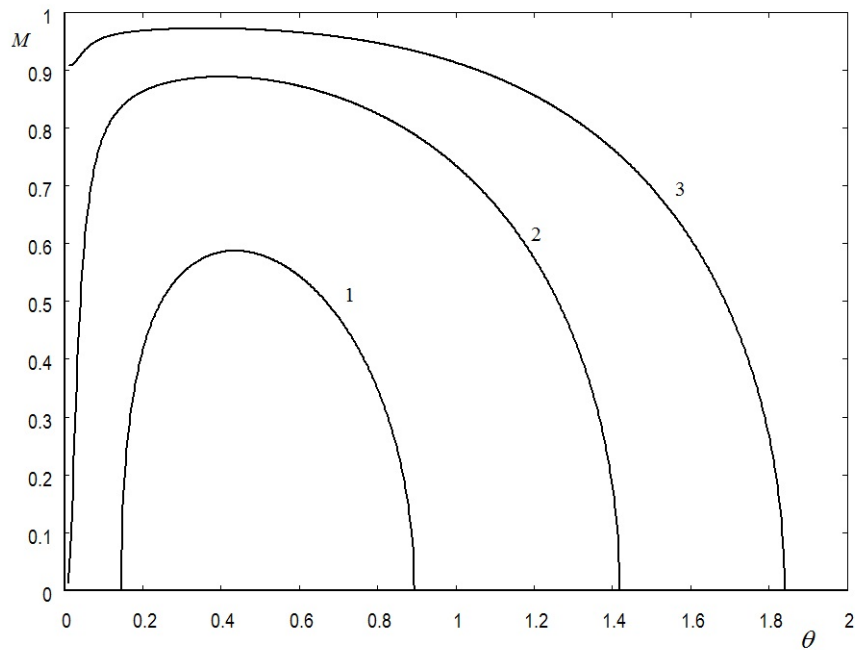


Рис. 4.8. Температурная зависимость спонтанной намагниченности при  $\gamma = -1,1$  и  $q = 4$ . По горизонтальной оси – температурный параметр  $\theta = kT/J$ , по вертикальной – спонтанная намагниченность  $M$ . Кривая 1 -  $b = 0,5$ , кривая 2 -  $b = 0,6$ , кривая 3 -  $b = 0,7$ .

Если же  $-3 < \gamma < -1$ , температурная зависимость намагниченности более сложна (рис. 4.8). В этом случае существует такой интервал концентраций магнитных атомов, в котором спонтанная намагниченность в системе возникает только при некотором ненулевом значении

температуры  $\theta_1$ , растет с ростом температуры, проходя через максимум, и вновь обращается в ноль при температуре  $\theta_2$  (кривая 1 на рис. 4.8). Температура  $\theta_1$  обращается в ноль при  $b = b_{c2}$  (кривая 2 на рис. 3), а при  $b > b$  спонтанная намагниченность в системе существует и при  $\theta = 0$  (кривая 3 на рис. 4.8), хотя зависимость  $M(\theta)$  все равно остается немонотонной.

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

1. Приближенные самосогласованные методы, такие как приближение Бете, применимые к изинговским магнетикам без примесей или с замороженными примесями [2, 3, 26], применимы так же и к более сложной модели – модели Изинга с подвижными примесями. Приближение Бете, примененное к этой модели, дает следующие результаты.

2. Состояния системы определяются главным образом параметром  $\gamma$  - отношением эффективного потенциала кулоновского взаимодействия  $U$  и константы обменного взаимодействия  $J$ . При  $\gamma > -1$  в системе возможно разделение на две макроскопические фазы с различной равновесной концентрацией магнитных атомов, а при  $\gamma \leq -1$  система остается гомогенной при всех значениях параметров.

3. Если значение параметра  $\gamma \leq -1$ , то есть когда энергия кулоновского отталкивания магнитных атомов не меньше, чем энергия обменного взаимодействия, существует предельное значение их концентрации (аналогичное перколяционному порогу) ниже которого отсутствует намагниченность в основном состоянии. Это предельное значение равно  $b_{c1} = \frac{2(q-1)}{q^2-2}$  при  $\gamma = -1$  и  $b_{c2} = \frac{q-1}{2q-3}$  при  $\gamma < -1$ .

4. При  $-3 < \gamma < -1$  существует область концентраций, в которой намагниченность в основном состоянии отсутствует, но при повышении температуры появляется, исчезая вновь при дальнейшем повышении температуры (рис. 4.6 и рис. 4.8).

### 4.3. Корреляционные функции и псевдохаотическое приближение

Определим для модели Изинга с подвижными примесями корреляционные функции. Ковариацию величин  $\sigma_i^2$  и  $\sigma_j^2$  (средние значения которых равны концентрации магнитных атомов  $b$ ), рассматриваемую как функция от расстояния между этими узлами, будем называть «позиционной» корреляционной функцией:

$$g_{ij}^b = \langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle - b^2.$$

Эта функция показывает коррелированность в расположении магнитных атомов (или атомов примеси); впрочем, даже если все  $g_{ij}^b$  равны нулю, это еще не означает, что примеси распределены в решетке полностью хаотично. Ковариацию самих величин  $\sigma_i$  и  $\sigma_j$

$$g_{ij}^{mb} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - b^2 M^2$$

будем называть «магнитно-позиционной» корреляционной функцией, поскольку она характеризует связь между расположением и магнитными моментами атомов одновременно. Для того чтобы описать корреляцию только между величинами магнитных моментов, определим «магнитную» корреляционную функцию:

$$g_{ij}^m = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle / \langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle - M^2 = (g_{ij}^{mb} + b^2 M^2) / (g_{ij}^p + b^2) - M^2.$$

Значения этой функции есть разницы условных средних от произведений  $\sigma_i \sigma_j$  и произведений условных средних  $\sigma_i$  и  $\sigma_j$  при условии, что обе эти величины не равны нулю.

Позиционную корреляцию двух соседних узлов можно рассчитать по формуле, аналогичной (4.33) и (4.34):

$$g_{12}^p + b^2 = \langle \sigma_1^2 \sigma_2^2 \rangle = \left\langle \frac{\frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} (\sigma_1^2 \sigma_2^2) \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)}{\sum_{\sigma_1, \sigma_2} \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)} \right\rangle_{W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)} \quad (4.47)$$

Подставив значение  $W_2$ , получим:

$$\langle \sigma_1^2 \sigma_2^2 \rangle = \frac{\text{ch}(2w) + e^{-2K}}{2y^2 e^{(1+\gamma)K} + 4y \text{ch}(w) + \text{ch}(2w) + e^{-2K}} \quad (4.48)$$

Аналогично

$$g_{12}^{mb} + M^2 b^2 = \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = \frac{\text{ch}(2w) - e^{-2K}}{2y^2 e^{(1+\gamma)K} + 4y \text{ch}(w) + \text{ch}(2w) + e^{-2K}} \quad (4.49)$$

По этим формулам корреляционные функции можно рассчитать если  $h_e > 0$  или  $h_e = 0$  и  $b_c(K) < b < 1$ , где  $b_c(K)$  определяется по формуле (4.45). Если же  $h_e = 0$  и  $0 < b < b_c(K)$ , то

$$\langle \sigma_1^2 \sigma_2^2 \rangle = \frac{1 + e^{-2K}}{2y^2 e^{(1+\gamma)K} + 4y + 1 + e^{-2K}} \quad (4.50)$$

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = \frac{1 - e^{-2K}}{2y^2 e^{(1+\gamma)K} + 4y + 1 + e^{-2K}} \quad (4.51)$$

а значение  $b$  находится по формуле (4.43).

Рассмотрим теперь кластер из трех соседних атомов на решетке Бете. Вначале установим, что рассмотрение этого кластера приводит к тем же самым уравнениям для намагниченности и химического потенциала, которые получались при рассмотрении одноатомного и двухатомного кластеров, то есть к уравнениям (4.39) – (4.42). Рассуждая так же, как для двухатомного кластера, найдем для центрального узла кластера средние значения  $\langle \sigma_2 \rangle = bM$  и  $\langle \sigma_2^2 \rangle = b$ :

$$bM = \left\langle \frac{\sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3} (\sigma_2) \exp(-E_3(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)/kT)}{\sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3} \exp(-E_3(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)/kT)} \right\rangle_{W_3(h_1, h_2, h_3, \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)} \quad (4.52)$$

$$b = \left\langle \frac{\sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3} (\sigma_2^2) \exp(-E_3(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)/kT)}{\sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3} \exp(-E_3(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)/kT)} \right\rangle_{W_3(h_1, h_2, h_3, \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)} \quad (4.53)$$

Где

$$W_3(h_1, h_2, h_3, \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3) = W_2(h_1, h_3, \varphi_1, \varphi_3) \delta(h_2 - (q-2)\rho m) \delta(\varphi_2 - (q-2)\rho)$$

Произведя вычисления, получим:

$$bM = \frac{Z_1 - Z_{-1}}{Z}, \quad b = \frac{Z_1 + Z_{-1}}{Z} \quad \text{и} \quad M = \frac{Z_1 - Z_{-1}}{Z_1 + Z_{-1}} \quad (4.54)$$

где

$$Z_\sigma = e^{A\sigma+B\sigma^2} (1 + 2e^{v+L\sigma^2} \text{ch}(w + K\sigma))^2, \quad \sigma = 0, +1, -1,$$

$$Z = Z_0 + Z_1 + Z_{-1}, \quad A = \frac{(q-2)w+h_e}{q-1}, \quad B = \frac{(q-2)v+r}{q-1}, \quad e^v = \frac{e^{-(1+\gamma)K}}{2y}$$

Можно показать, что если для  $y$  и  $\mu = kTr$  использовать выражения (4.42) и (4.41) соответственно, то (4.54) будут эквивалентны (4.39) и (4.40).

Вычисляя теперь средние значения  $\langle \sigma_1 \sigma_3 \rangle$  и  $\langle \sigma_1^2 \sigma_3^2 \rangle$  получим:

$$\langle \sigma_1 \sigma_3 \rangle = \frac{Z_0^{(1)} + Z_1^{(1)} + Z_{-1}^{(1)}}{Z} \quad \text{и} \quad \langle \sigma_1^2 \sigma_3^2 \rangle = \frac{Z_0^{(2)} + Z_1^{(2)} + Z_{-1}^{(2)}}{Z} \quad (4.55)$$

где

$$Z_\sigma^{(1)} = e^{A\sigma+B\sigma^2} (2e^{v+L\sigma^2} \text{sh}(w + K\sigma))^2,$$

$$Z_\sigma^{(2)} = e^{A\sigma+B\sigma^2} (2e^{v+L\sigma^2} \text{ch}(w + K\sigma))^2$$

$$\sigma = 0, +1, -1$$

Предположим, что в случае произвольного  $q$ , как и для одномерной цепочки (глава 2), позиционная и магнитно-позиционная корреляционные функции являются суммами двух убывающих геометрических прогрессий:

$$g_{ij}^b = \langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle - b^2 = A_1 x_1^{j-i} + A_2 x_2^{j-i},$$

$$g_{ij}^{mb} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - M^2 b^2 = B_1 x_1^{j-i} + B_2 x_2^{j-i}.$$

Коэффициенты  $A_1, A_2, B_1, B_2$  и знаменатели прогрессий  $x_1$  и  $x_2$  найдем из системы уравнений

$$A_1 + A_2 = g_{11}^b = b(1 - b), \quad A_1 x_1 + A_2 x_2 = g_{12}^b, \quad A_1 x_1^2 + A_2 x_2^2 = g_{13}^b,$$

$$B_1 + B_2 = g_{11}^{mb} = b(1 - M^2 b), \quad (4.56)$$

$$B_1 x_1 + B_2 x_2 = g_{12}^{mb}, \quad B_1 x_1^2 + B_2 x_2^2 = g_{13}^{mb},$$

где значения корреляций  $g_{12}^b, g_{12}^{mb}$  находятся с помощью (4.50) и (4.51), а значения  $g_{13}^b$  и  $g_{13}^{mb}$  - с помощью (4.55).

Расчет показывает, что при  $h_e = 0$  и  $0 < b < b_c(K)$  (в этой области спонтанная намагниченность  $M = 0$ ) коэффициенты  $A_1$  и  $B_2$  (или  $A_2$  и  $B_1$ ) обращаются в ноль, то есть позиционная и магнитно-позиционная корреляционные функции имеют вид убывающих геометрических прогрессий, но с разными знаменателями. В области же существования спонтанной намагниченности ( $h_e = 0, b_c(K) < b < 1$  и  $K > K_c(1)$ ) не равны нулю в общем случае все четыре коэффициента  $A_1, A_2, B_1$  и  $B_2$ . На рис. 4.9 показаны графики позиционной  $g_{12}^b$  (1), магнитно-позиционной  $g_{12}^{mb}$  (2) и магнитной  $g_{12}^m$  (3) корреляционных функций в зависимости от концентрации магнитных атомов  $b$  при  $h_e = 0, q = 4, K = 0,5$  и  $\gamma = -3$ .

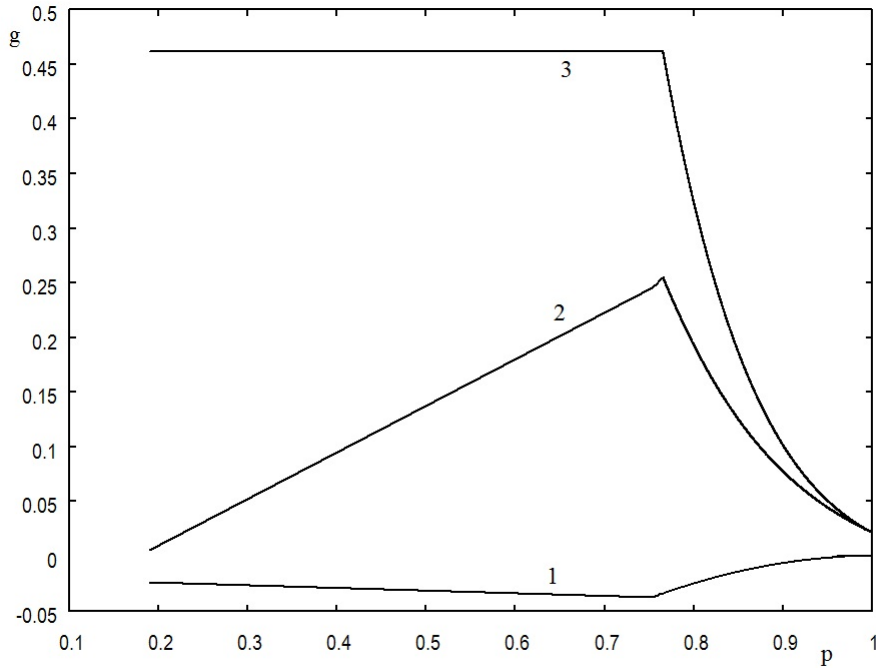


Рис 4.9 Концентрационная зависимость корреляционных функций ближайших соседей на решетке Бете с  $q = 4$  при  $K = 0,5$ ,  $h_e = 0$ ,  $\gamma = -3$ . По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов  $p$ , по вертикальной – значение корреляционной функции. Кривая 1 –  $g_{12}^p(p)$ , кривая 2 –  $g_{12}^{mp}(p)$ , кривая 3 –  $g_{12}^m(p)$ .

Видно, что магнитная корреляционная функция не зависит от  $b$  до возникновения спонтанной намагниченности, а магнитно-позиционная имеет максимум в точке фазового перехода. На рис. 4.10 приведены графики этих же функций при  $h_e = 0,2$ .

Рассмотрим теперь модель Изинга с подвижными примесями в «псевдохаотичном» случае, то есть когда параметр  $\gamma$  выбирается так, чтобы  $g_{12}^b$  обращалась в ноль. Это значение  $\gamma$  (зависящее от  $b$ ,  $K$  и  $h_e$ ) будем обозначать  $\gamma_0$ . Выражение для  $\gamma_0$  можно получить, приравняв  $b^2$  правую часть (4.48):

$$e^{(1+\gamma_0)K} = \frac{1}{2y^2} \left( \frac{\text{ch}(2w) + e^{-2K}}{p^2} - (4y\text{ch}(w) + \text{ch}(2w) + e^{-2K}) \right), \quad (4.57)$$

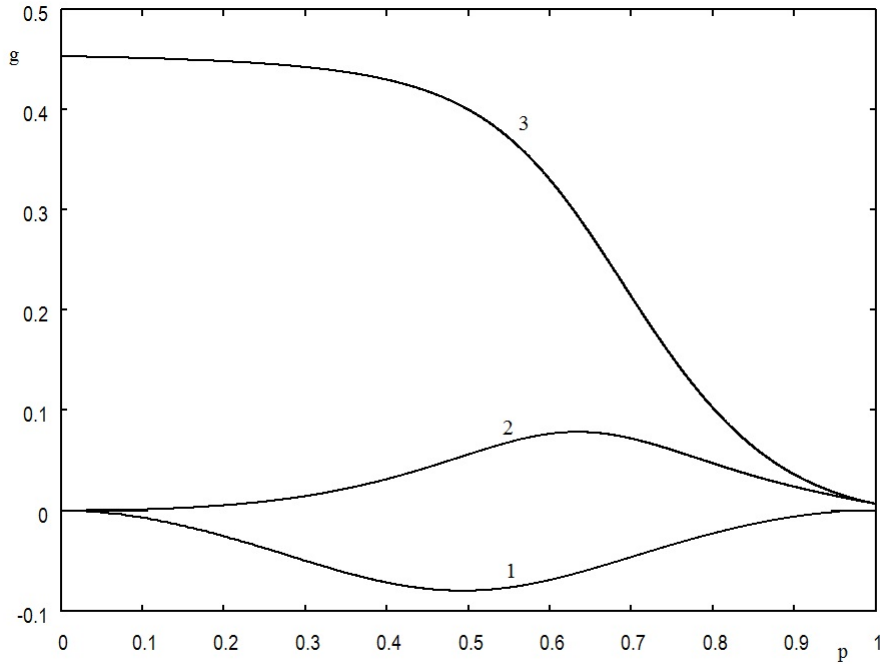


Рис 4.10 Концентрационная зависимость корреляционных функций ближайших соседей на решетке Бете с  $q = 4$  при  $K = 0,5$ ,  $h_e = 0,2$ ,  $\gamma = -3$ . По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов  $p$ , по вертикальной – значение корреляционной функции. Кривая 1 –  $g_{12}^p(p)$ , кривая 2 –  $g_{12}^{mp}(p)$ , кривая 3 –  $g_{12}^m(p)$ .

а используя формулу (4.39), получим:

$$b = \frac{\text{ch}(2w) + e^{-2K}}{2\text{yч}(w) + \text{ch}(2w) + e^{-2K}}. \quad (4.58)$$

Из (4.58) следует, что спонтанная намагниченность в системе может существовать только при  $b > b_c(K) = \frac{1}{(q-1)\text{th}K}$ , то есть температура Кюри обращается в ноль при  $b = \frac{1}{q-1}$ .

В работе [38] с помощью метода самосогласованных уравнений, рассмотрен разбавленный изинговский магнетик с неподвижными примесями. Получены такие уравнения для определения намагниченности в зависимости от температуры, внешнего поля и концентрации магнитных атомов:

$$\begin{aligned} \text{th}(Kqb\mu + h_e) &= (1 - b)\text{th}(K(q - 1)b\mu + h_e) + \\ &b \frac{\text{sh}(2K(q-1)b\mu + 2h_e)}{\text{ch}(2K(q-1)b\mu + 2h_e) + e^{-2K}} \end{aligned} \quad (4.59)$$

$$M = \text{th}(Kqb\mu + h_e),$$

где  $\mu$  – некоторый параметр, определяющийся из решения уравнения (4.59). Покажем теперь, что уравнения (4.59) в точности эквивалентны уравнениям (4.39), (4.58) и (4.42), то есть рассмотренная в [38] модель является, в сущности, разбавленным изинговским магнетиком на решетке Бете с псевдохаотичным распределением примесей. Действительно, вводя в (4.59) вместо  $\mu$  параметр  $w = (q - 1)Kb\mu + h_e$ , получим из второго уравнения (4.59) выражение (4.39), а из первого уравнения такое выражение для  $b(w)$ :

$$b = \frac{\operatorname{th} \frac{qw - h_e - thw}{q-1}}{\frac{\operatorname{sh}(2w)}{\operatorname{ch}(2w) + e^{-2K}} - thw}. \quad (4.60)$$

Преобразуя теперь (4.58), в котором  $u$  находится по формуле (4.41), получим в точности (4.60).

В работе [38] была так же найдена спиновая корреляционная функция, но в предположении, что она является убывающей геометрической прогрессией. Однако, как показано в работе [64], это предположение верно только в области  $h_e = 0$  и  $K < K_c(b)$  в общем же случае корреляционные функции представляются в виде суммы двух геометрических прогрессий. Поэтому рассмотрим поведение корреляционных функций в случае псевдохаотического распределения примесей. Оказывается, что это поведение существенно зависит от наличия намагниченности в системе. Если  $M = 0$ , то есть  $h_e = 0$  и  $K < K_c(b)$ , то условие  $g_{12}^b = 0$  автоматически приводит к равенству нулю всех значений  $g_{ij}^b$ . Значение  $\gamma_0$  в этом случае не зависит от  $b$  и равно

$$\tilde{\gamma}_0 = \frac{1}{K} \ln \frac{2}{1 + e^{-2K}} - 1. \quad (4.61)$$

На рис.4.11 приведены графики  $\gamma_0(b)$  при различных значениях  $K$  и  $h_e$ . Кривые 2 и 4 на этом рисунке соответствуют случаю  $h_e = 0$ . Из формул (4.50) и (4.51) следует, что при  $M = 0$   $g_{12}^{mb} = b^2 \operatorname{th} K$ . Учитывая, что  $g_{11}^{mb} = b$  и что магнитно-позиционная функция является в этом случае убывающей геометрической прогрессией, получим

$$g_{ij}^{mp} = p(\operatorname{th} K)^{|j-i|} \quad (4.62)$$

Магнитная корреляционная функция равна

$$g_{ij}^m = (\operatorname{th} K)^{|j-i|} / p \quad (4.63)$$

Если же  $M \neq 0$  условие  $g_{12}^b = 0$  уже не приводит к обращению в ноль позиционной корреляционной функции на любых расстояниях. Однако, ее значения на тех же межатомных расстояниях при  $\gamma = \gamma_0$  меньше, чем при других значениях  $\gamma$  (рис. 4.12).

Основные результаты этого параграфа можно сформулировать следующим образом:

1. Получено решение модели Изинга с подвижными примесями на решетке Бете с произвольным координационным числом. В этой модели присутствуют два параметра, определяющих взаимодействие между атомами – обменный интеграл  $J$  и эффективный потенциал кулоновского взаимодействия  $U$ .

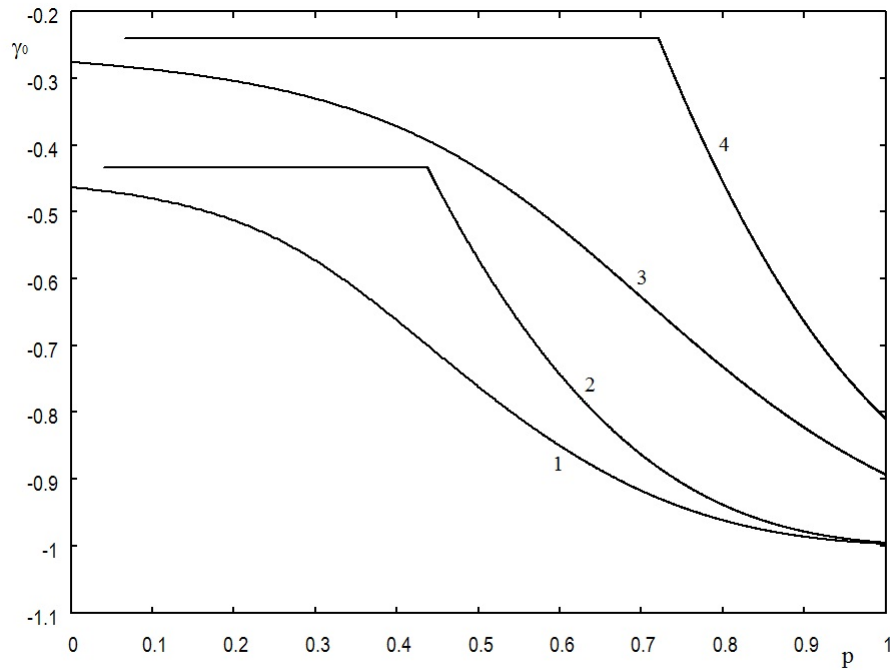


Рис 4.11. Зависимость от концентрации величины  $\gamma_0$  для  $q = 4$ . Кривая (1) – при  $K = 1, h_e = 0,2$ , кривая (2) – при  $K = 1, h_e = 0$ , кривая (3) – при  $K = 0,5, h_e = 0,2$  и кривая (4) – при  $K = 0,5, h_e = 0$ .

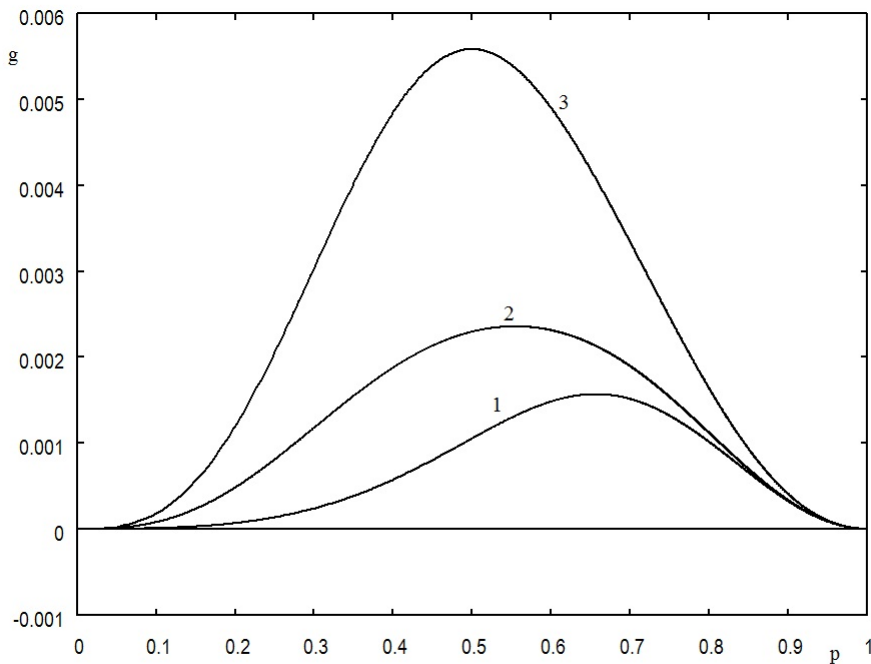


Рис 4.12. Концентрационная зависимость корреляционных функций для соседей, следующих за ближайшими на решетке Бете с  $q = 4$  при  $K = 0,5, h_e = 0,2, \gamma = \gamma_0$ . По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов  $p$ , по вертикальной – значение корреляционной функции. Кривая 1 –  $g_{13}^p(p)$ , кривая 2 –  $g_{13}^{mp}(p)$ , кривая 3 –  $g_{13}^m(p)$ .

2. Показано, что корреляционные функции, характеризующие распределение магнитных атомов по узлам решетки и взаимосвязь их магнитных моментов являются убывающими геометрическими прогрессиями если в системе отсутствует намагниченность и являются суммами двух прогрессий при  $M \neq 0$ .



3. Рассмотрено псевдохаотическое распределение атомов примеси – то есть такой выбор параметра  $U$ , при котором отсутствует корреляция в положении атомов примеси для двух соседних узлов ( $g_{12}^b = 0$ ). Показано, что это условие приводит к приближенному рассмотрению модели с замороженными примесями, описанному в [38].

4. Если в системе отсутствует макроскопическая намагниченность, то при псевдохаотическом распределении парная корреляционная функция, характеризующая расположение атомов, обращается в ноль на любом расстоянии ( $g_{ij}^b = 0$ ). То есть можно считать, что псевдохаотическое распределение в этом случае является полностью случайным.

5. Если макроскопическая намагниченность присутствует, то при псевдохаотическом распределении есть корреляция в расположении атомов примеси по узлам решетки (кроме соседних узлов). Однако в этом случае значения корреляционной функции  $g_{ij}^b$  минимальны.

## Глава 5. Модель Поттса чистого и разбавленного магнетика

Модель Поттса [6] - одна из наиболее часто используемых моделей в статистической физике и она является теоретическим инструментом, применяемым для изучения широкого класса явлений в физике конденсированных сред [46, 47] и ядерной физике [50, 51]. Точных результатов для модели Поттса существует немного. Известно, что если число спиновых состояний в модели Поттса больше некоторого критического значения (зависящего от размерности решетки) наблюдается фазовый переход первого рода, а если меньше – второго рода [6, 46, 47]. Существуют материалы, такие как  $\text{SrTiO}_2$ , структурные фазовые переходы в которых относятся к классу универсальности модели Поттса с тремя состояниями [46]. Кроме того, модель Поттса является основой теоретического описания сложных анизотропных ферромагнетиков кубической структуры, многокомпонентных сплавов и жидких смесей [47].

В параграфе 5.2 будет построено точное решение модели Поттса с тремя состояниями на решетке Бете с произвольным координационным числом методом самосогласованных уравнений [36, 48]. Метод самосогласованных уравнений позволяет строить различные приближенные решения для модели Изинга как чистого, так и разбавленного магнетиков [26, 36, 38]. Этим же методом можно строить и приближенные решения для модели Поттса основываясь на том, что модель Поттса с тремя состояниями можно рассматривать как частный случай модели Изинга с подвижными немагнитными примесями [36]. Оказывается, что одно из таких решений можно интерпретировать как точное решение модели Поттса с тремя состояниями на решетке Бете. Для этого случая мы в настоящей работе найдем температуру фазового перехода, температурную зависимость параметра порядка, парную корреляционную функцию и корреляционную длину как функцию температуры.

В отличие от модели Изинга, модель Поттса с числом состояний не меньше трех имеет фазовые переходы и в ненулевом внешнем поле [5, 7]. Точки этих фазовых переходов первого рода образуют на плоскости температура – внешнее поле линию, которая заканчивается точкой фазового перехода второго рода [5, 7]. Влияние немагнитного разбавления на критическое поведение модели Поттса в нулевом внешнем поле рассматривалось, в частности, в работах [7, 47, 49]. Однако исследования влияния немагнитного разбавления на всю линию фазовых переходов первого рода, насколько нам известно, ранее не проводилось.

В параграфе 5.3 рассматривается модель Поттса с произвольным числом состояний во внешнем поле и с немагнитным разбавлением методом среднего поля. Используется как «классический метод» среднего поля, так и его модификация, позволяющую более точно учитывать влияние немагнитного разбавления. Кроме того к модели Поттса разбавленного магнетика при-

меняется Метод усреднения по локальным полям межатомного взаимодействия. 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.

В параграфе 5.4 получено решение для модели Поттса на решетке Бете с подвижными немагнитными примесями. Использован метод «псевдохаотического» распределения примесей, основанный на обращении в ноль корреляции в расположении атомов примеси для ближайших узлов. Для псевдохаотического распределения примесей найдена температура фазового перехода, намагниченность и величина скачка спонтанной намагниченности при температуре фазового перехода. Показано, что псевдохаотическое распределение примесей имеет ряд свойств, аналогичных замороженным примесям. Установлено, что при псевдохаотическом распределении примесей фазовый переход в модели Поттса на решетке Бете остается переходом первого рода, но величина скачка намагниченности уменьшается при увеличении концентрации немагнитных примесей.

В этом же параграфе рассмотрена модель Поттса с немагнитным разбавлением (по узлам) и с произвольным числом состояний на решетке Бете во внешнем поле. В отличие от метода среднего поля (параграф 5.3), в решении задачи в псевдохаотическом приближении присутствует, как будет показано, перколяционный переход при ненулевом значении концентрации магнитных атомов.

### 5.1. Модель Поттса с тремя состояниями на решетке Бете

В предыдущей главе была рассмотрена модель Изинга с подвижными немагнитными примесями и показано, что большую статистическую сумму этой модели можно представить в следующем виде:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left\{(\sum_{(i,j)} J\sigma_i\sigma_j + U\sigma_i^2\sigma_j^2) + (f + \mu)\sum_i \sigma_i^2 + H_e \sum_i \sigma_i\right\}/kT \quad (5.1)$$

где  $\mu$  - химический потенциал,  $H_e$  - внешнее магнитное поле, а суммирование производится по всем возможным конфигурациям  $\{\sigma\}$ . Величины  $b = \langle \sigma_i^2 \rangle$  и  $M = \langle \sigma_i \rangle / b$  не зависят от  $i$ , поскольку все узлы решетки эквивалентны (в термодинамическом пределе) и имеют простой смысл:  $b$  - вероятность того, что в данном узле находится магнитный атом (концентрация),  $M$  - среднее значение его спина.

Модель Поттса [6] формулируется следующим образом. Каждому узлу решетки поставим в соответствие величину  $\sigma_i$  («спин») которая может принимать  $n$  различных значений, скажем  $1, 2, \dots, n$ . Два соседних спина  $\sigma_i$  и  $\sigma_j$  взаимодействуют с энергией  $-J_p \delta(\sigma_i, \sigma_j)$  где

$$\delta(\sigma_i, \sigma_j) = \begin{cases} 1, & \sigma_i = \sigma_j \\ 0, & \sigma_i \neq \sigma_j \end{cases}$$

Поэтому полная энергия равна

$$E = -J_p \sum_{(i,j)} \delta(\sigma_i, \sigma_j),$$

где суммирование распространяется на все ребра решетки. Статистическая сумма имеет вид

$$Z = \sum \exp \left\{ \frac{J_p}{kT} \sum_{(i,j)} \delta(\sigma_i, \sigma_j) \right\}. \quad (5.2)$$

Нетрудно показать [6], что модель Поттса с  $n = 2$  эквивалентна обычной модели Изинга в отсутствии внешнего поля. Покажем, что статистическая сумма модели Поттса (5.2) с  $n = 3$  является частным случаем (5.1). Действительно, пусть каждый спин  $\sigma_i$  может принимать значения  $-1, 0, 1$ . Тогда энергию взаимодействия двух спинов в модели Поттса можно записать так:

$$E_{ij} = -J_p \left\{ \frac{1}{2} \sigma_i \sigma_j + \frac{3}{2} \sigma_i^2 \sigma_j^2 - \sigma_i^2 - \sigma_j^2 + 1 \right\} \quad (5.3)$$

а энергию всей системы (с точностью до постоянной):

$$E = -J_p \sum_{(i,j)} \left\{ \frac{1}{2} \sigma_i \sigma_j + \frac{3}{2} \sigma_i^2 \sigma_j^2 \right\} + qJ_p \sum_i \sigma_i^2 \quad (5.4)$$

То есть, если в (5.1) принять  $J = J_p/2$ ,  $U = 3J_p/2$  и  $f + \mu = -qJ_p$  то как раз получим из (5.1) статсумму модели Поттса с  $n = 3$ . Обозначим вероятность того, что в данном узле решетки спин будет обнаружен в состоянии  $\alpha$ , через  $p_{(\alpha)}$  ( $\alpha = -1, 0, 1$ ). Тогда, если  $Mb = \langle \sigma_i \rangle$ ,  $b = \langle \sigma_i^2 \rangle$  то  $p_{(+1)} = b \frac{1+M}{2}$ ,  $p_{(-1)} = b \frac{1-M}{2}$ ,  $p_{(0)} = 1 - b$ .

Как показано в главе 4, решение задачи с гамильтонианом (5.1) на решетке Бете можно получить следующим способом [36]. Рассмотрим некоторый  $i$ -й узел решетки. Определим локальное обменное  $h_i$  и кристаллическое  $\varphi_i$  поля  $i$ -го узла как  $h_i = \sum \sigma_j$  и  $\varphi_i = \sum \sigma_j^2$  (суммирование производится по всем соседним к  $i$ -му узлам). Величины  $h_i$  и  $\varphi_i$  будем рассматривать как значения случайных величин  $h$  и  $\varphi$  с совместной функцией распределения  $W(h, \varphi)$ . Тогда средние по ансамблю  $\langle \sigma_i \rangle = bM$  и  $\langle \sigma_i^2 \rangle = b$  вычисляются так:

$$\langle \sigma_i \rangle = \left\langle \frac{\text{sh}(Kh+h_e)}{\text{ch}(Kh+h_e)+e^{-L\varphi-r/2}} \right\rangle_{W(h,\varphi)} \quad (5.5)$$

$$\langle \sigma_i^2 \rangle = \left\langle \frac{\text{ch}(Kh+h_e)}{\text{ch}(Kh+h_e)+e^{-L\varphi-r/2}} \right\rangle_{W(h,\varphi)}, \quad (5.6)$$

где  $K = J/kT$ ,  $L = U/kT$ ,  $h_e = H_e/kT$ ,  $r = (f + \mu)/kT$ .

Рассмотрим теперь кластер, состоящий из двух соседних узлов и введем обменные  $h_1$  и  $h_2$  и кристаллические  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  поля для каждого узла кластера. Найдем средние значения величин  $(\sigma_1 + \sigma_2)/2$  и  $(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)/2$  по ансамблю с гамильтонианом

$E_2(\sigma_1, \sigma_2) = -J\sigma_1\sigma_2 - Jh_1\sigma_1 - Jh_2\sigma_2 - U\sigma_1^2\sigma_2^2 - U\varphi_1\sigma_1^2 - U\varphi_2\sigma_2^2 - \mu(\sigma_1^2 + \sigma_2^2) - H_e(\sigma_1 + \sigma_2)$  рассматривая  $h_1, h_2, \varphi_1$  и  $\varphi_2$  как постоянные. Затем введем совместную функцию распределения  $W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)$  и усредним результат по этой функции:

$$bM = \left\langle \frac{\frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} (\sigma_1 + \sigma_2) \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)}{\sum_{\sigma_1, \sigma_2} \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)} \right\rangle_{W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)} \quad (5.7)$$

$$b = \left\langle \frac{\frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} (\sigma_1^2 + \sigma_2^2) \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)}{\sum_{\sigma_1, \sigma_2} \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)} \right\rangle_{W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)} \quad (5.8)$$

Используем следующие выражения для функций распределения полей:

$$\begin{aligned} W(h, \varphi) &= \delta(h - q\rho t) \delta(\varphi - q\rho), \\ W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2) &= \delta(h_1 - (q-1)\rho t) \delta(h_2 - (q-1)\rho t) \times \\ &\times \delta(\varphi_1 - (q-1)\rho) \delta(\varphi_2 - (q-1)\rho), \end{aligned}$$

где  $t$  и  $\rho$  некоторые неизвестные параметры. Тогда из (5.5) - (5.8) получим

$$M = \text{th}\left(\frac{qw - h_e}{q-1}\right) \quad (5.9)$$

$$b = \frac{2y \text{ch}(w) + \text{ch}(2w) + e^{-2K}}{2y^2 e^{(1+\gamma)K} + 4y \text{ch}(w) + \text{ch}(2w) + e^{-2K}} \quad (5.10)$$

$$\mu = -kT \ln(2y^q e^{q(1+\gamma)K} \left(\frac{b}{1-b}\right)^{q-1} (1 - M^2)^{\frac{q-1}{2}}), \quad (5.11)$$

где

$$y = \frac{1}{2} (1 - e^{-2K}) \frac{\text{sh}\left(\frac{qw - h_e}{q-1}\right)}{\text{sh}\left(\frac{w - h_e}{q-1}\right)} - \text{ch}(w), \quad (5.12)$$

$$w = K(q-1)\rho t + h_e, \quad y = e^{-K-L-L(q-1)\rho-r}/2, \quad \gamma = \frac{L}{K} = \frac{U}{J}.$$

Эти уравнения представляют собой параметрические зависимости  $M = M(w, h_e)$ ,  $b = b(w, h_e, K)$  и  $\mu = \mu(w, h_e, K)$ , а параметр  $w$  меняется в пределах от  $h_e$  до такого значения  $w^*$  при котором  $y$  (формула 5.12) обращается в ноль. Уравнения (5.9) – (5.12) дают точное решение задачи об изинговском магнетике с подвижными примесями на решетке Бете.

Для того чтобы перейти к модели Поттса с тремя состояниями нужно, в соответствии со сказанным выше, сделать в (5.9) – (5.12) замену  $K = K_p/2$  ( $K_p = J_p/kT$ ),  $\gamma = 3$ ,  $r = -qK_p$ ,  $h_e = 0$ . Анализ уравнений, полученных в результате этой замены, дает следующее. Существует критическая температура  $T_c$ , такая, что при  $T > T_c$  имеется только симметричное решение  $p_{(+1)} = p_{(-1)} = p_{(0)} = \frac{1}{3}$ . При  $T < T_c$  появляются решения двух типов. В решении первого типа одна из концентраций, например  $p_{(0)}$ , делается больше  $p_{(+1)}$  и  $p_{(-1)}$ , причем  $p_{(+1)} = p_{(-1)}$ , а при понижении температуры  $p_{(0)} \rightarrow 1$ ,  $p_{(+1)}, p_{(-1)} \rightarrow 0$ . В решении второго типа две концентрации, например  $p_{(+1)}$  и  $p_{(-1)}$ , равны и при малых  $T$   $p_{(+1)}, p_{(-1)} \rightarrow \frac{1}{2}$ ,  $p_{(0)} \rightarrow 0$ . Поскольку только решение первого типа имеет минимальную энергию при  $T \rightarrow 0$ , его и следует считать истинным при  $T < T_c$ . Найти это решение можно следующим образом. Примем в (5.9) и (5.11)  $M = 0$  и  $w = 0$ . Из (5.11) и (5.12) получим

$$qK_p = \ln(2y^q e^{2qK_p} \left(\frac{b}{1-b}\right)^{q-1}) \quad (5.13)$$

$$b = \frac{2y+1+e^{-Kp}}{2y^2e^{2Kp}+4y+1+e^{-Kp}}, \quad (5.14)$$

а из (5.13) и (5.14):

$$F(y) = ye^{qKp} \left[ \frac{2y+1+e^{-Kp}}{ye^{2Kp}+1} \right]^{q-1} - 2^{q-2} = 0 \quad (5.15)$$

Решая (5.15) относительно  $y$  и подставляя решение в (5.14), получим  $b = b(K_p)$ .

Для того чтобы построить решение модели Поттса при  $T < T_c$  и найти само значение  $T_c$  проанализируем поведение функции  $F(y)$ , определяемой уравнением (5.15).

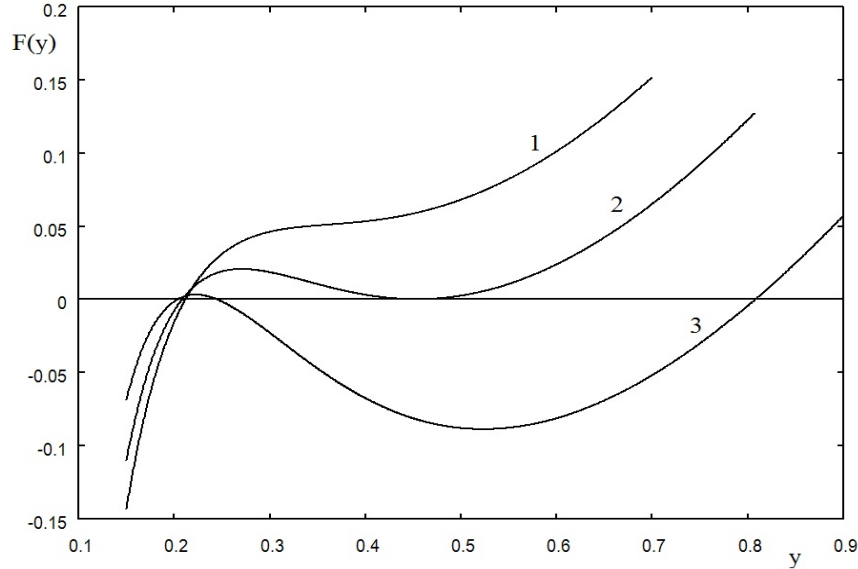


Рис. 5.1. Функции  $F(y)$  (формула (5.15) при различных значениях  $K_p$ . По горизонтальной оси – параметр  $y$ , по вертикальной – значения  $F(y)$  для  $q = 4$ . Кривая 1 –  $K_p = 0,86$ , кривая 2 –  $K_p = 0,877$ , кривая 3 –  $K_p = 0,9$ .

На рисунке 5.1 приведены графики функций  $F(y)$  для различных значений  $T$ : кривая 1 –  $T > T_c$ , кривая 3 –  $T < T_c$  и кривая 2 –  $T = T_c$ . При  $T < T_c$  термодинамически устойчивому решению соответствует максимальный из корней уравнения  $F(y) = 0$  (кривая 3 на рис. 5.1), а при  $T > T_c$  устойчиво только решение  $p_{(+1)} = p_{(-1)} = p_{(0)} = \frac{1}{3}$  (отброшенное при выводе уравнений (5.13) – (3.15)). Следовательно, температура фазового перехода  $T_c$  определяется из решения системы

уравнений  $\begin{cases} F(y) = 0 \\ F'(y) = 0 \end{cases}$ , где

$$F'(y) = e^{qKp} \left[ \frac{2y+1+e^{-Kp}}{ye^{2Kp}+1} \right]^{q-1} + y(q-1)e^{qKp} \left[ \frac{2y+1+e^{-Kp}}{ye^{2Kp}+1} \right]^{q-2} \left( \frac{2 - e^{2Kp} - e^{Kp}}{(ye^{2Kp}+1)^2} \right)$$

Приравнявая  $F'(y)$  нулю, получим

$$2e^{2Kp}y^2 - \{(q-2)e^{2Kp}(1+e^{-Kp}) - 2q\}y + (1+e^{-Kp}) = 0 \quad (5.16)$$

Решение (5.16):

$$y_1 = \frac{\{(q-2)e^{2Kp}(1+e^{-Kp})-2q\} + \sqrt{\{(q-2)e^{2Kp}(1+e^{-Kp})-2q\}^2 - 8e^{2Kp}(1+e^{-Kp})}}{4e^{2Kp}} \quad (5.17)$$

Находя теперь корень  $K_{pc}$  уравнения  $F(y_1) = 0$ , получим значения критической температуры  $T_c = 1/K_{pc}$  для различных  $q$  (таблица 5.1, второй столбец).

Графики функций  $p_{(0)}(T)$  для разных значений  $q$  приведены на рис. 5.2: кривая 1 –  $q = 3$ , кривая 2 –  $q = 4$  и кривая 3 –  $q = 6$ . Для всех  $q$  происходит скачек параметра  $p_{(0)}$  в критической точке – то есть, фазовый переход первого рода. Величина скачка слабо зависит от  $q$  и ее значения приведены в таблице 5.1 (третий столбец).

В параграфе 4.2 предыдущей главы была рассмотрена модель Поттса с тремя состояниями в приближении среднего поля. Оказывается, что это приближение получается из приведенного здесь путем предельного перехода  $q \rightarrow \infty$  а  $J_p \rightarrow 0$  так, что произведение  $qJ_p$  остается постоянным.

Действительно, перейдем в уравнениях (5.15) и (5.16) к пределу  $q \rightarrow \infty$ . Обозначим  $x = \lim_{q \rightarrow \infty} q K_{pc}(q)$  и  $\tilde{y} = \lim_{q \rightarrow \infty} y(q)$ . Тогда из (5.16) получим

$$2\tilde{y}^2 - \{3x - 4\}\tilde{y} + 2 = 0, \quad (5.18)$$

а из (5.15)

$$\tilde{y} \exp \left[ x \frac{1-2\tilde{y}}{2(1+\tilde{y})} \right] = \frac{1}{2} \quad (5.19)$$

Из (5.18)

$$x = \frac{2(1+\tilde{y})^2}{3\tilde{y}} \quad (5.20)$$

Подставив это выражение в (5.19), получим выражение для  $\tilde{y}$ :

$$\tilde{y} \exp \left[ \frac{(1+\tilde{y})(1-2\tilde{y})}{3\tilde{y}} \right] = \frac{1}{2}.$$

Решив это уравнение, найдем скачек  $\delta p_{(0)} = 0.25147$  и значение  $x = 2,747$ , что в точности совпадает с результатами, полученными в [9].

Рассмотрим теперь спиновые корреляции в модели Поттса с тремя состояниями на решетке Бете. Определим корреляционную функцию следующим образом. Обозначим  $p_{(0,0)}^{ij}$  вероятность того, что атомы, находящиеся в  $i$ -ом и  $j$ -ом узлах решетки находятся в состоянии (0). ( $j$ -й узел находится на  $(j-i)$ -й оболочке  $i$ -го узла в решетке Бете.) Тогда корреляционной функцией будем считать такую величину:

$$g_{ij} = p_{(0,0)}^{ij} - p_{(0)}^2 \quad (5.21)$$

Тогда при  $K_p > K_{pc}$

$$g_{12} = \frac{1+e^{-Kp}}{2y^2 e^{2Kp} + 4y + 1 + e^{-Kp}} - p^2 = \frac{2y^2(e^{2Kp} + e^{Kp} - 2)}{(2y^2 e^{2Kp} + 4y + 1 + e^{-Kp})^2}, \quad (5.22)$$

где  $y$  определяется из решения (15), а  $p$  - по формуле (14). При  $K_p < K_{pc}$

$$g_{12} = \frac{2}{3} \frac{1+e^{-Kp}}{1+2e^{-Kp}} - \left(\frac{2}{3}\right)^2 = \frac{2}{9} \frac{1-e^{-Kp}}{1+2e^{-Kp}} \quad (5.23)$$

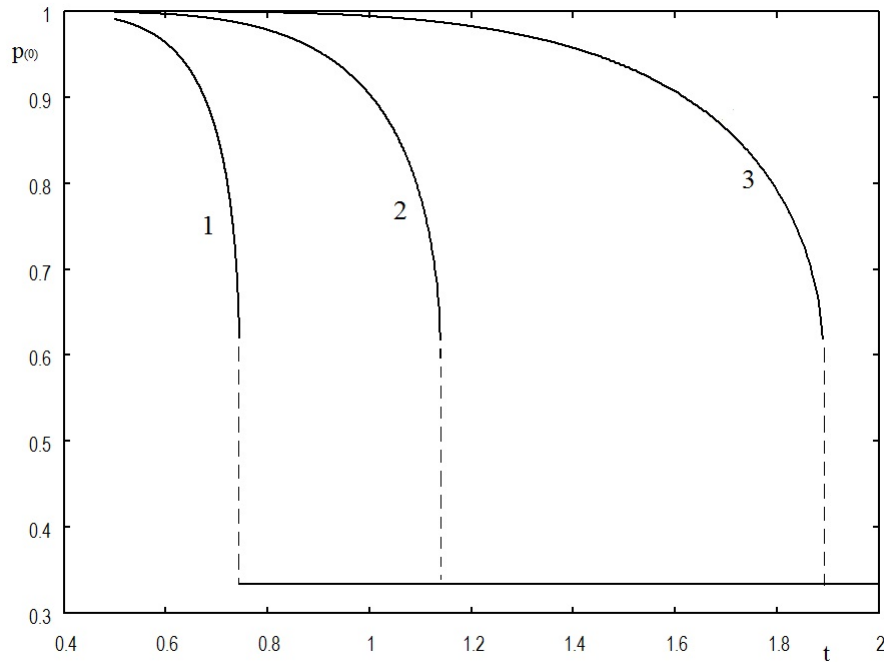


Рис. 5.2. Температурная зависимость параметра порядка  $p_{(0)}$  для различных значений  $q$ . По горизонтальной оси – безразмерная температура  $t = 1/K_p$ , по вертикальной – значения  $p_{(0)}$ . Кривая 1 –  $q = 3$ , кривая 2 –  $q = 4$ , кривая 3 –  $q = 6$ .

Как было сказано выше, модель Поттса с тремя состояниями рассматривается как частный случай модели Изинга с подвижными примесями, решение которой на решетке Бете дается уравнениями (5.9) – (5.12). Расчет показывает, что для этой модели корреляционная функция является в общем случае суммой двух убывающих геометрических прогрессий  $g_{ij} = ax_1^{j-i} + bx_2^{j-i}$ . (Для линейной цепочки ( $q = 2$ ) этот результат можно доказать строго и предположить его справедливость для произвольного  $q$  (глава 2, глава 4)). Предполагая такой же вид корреляционной функции для модели Поттса с тремя состояниями, можно убедиться, что в данном случае одна из геометрических прогрессий исчезает и корреляционная функция принимает вид:

$$g_{ij} = g_0 e^{-|j-i|/\lambda}$$

где  $g_0 = b(1 - b)$ , а корреляционная длина  $\lambda$ :

$$\lambda = \begin{cases} -1/\ln\left(\frac{y(e^{2Kp} + e^{Kp-2})}{(2y+1+e^{-Kp})(ye^{2Kp}+1)}\right), & K_p > K_{pc} \\ -1/\ln\left(\frac{1-e^{-Kp}}{1+2e^{-Kp}}\right), & K_p < K_{pc} \end{cases} \quad (5.24)$$



$q$	$T_{c(mf)}$	$T_c$	$\delta p_{(0)}$	$\delta g_{12}$	$\delta \lambda$
3	1,092	0,745	0,25245	0.01348	0.05962
4	1,456	1,140	0,25230	0.01006	0.03562
5	1.820	1,519	0,25217	0.00802	0.02685
6	2,184	1,892	0,25208	0.00666	0.02215
7	2,548	2,261	0,25201	0.00570	0.01916
8	2,912	2,630	0,25195	0.00498	0.01706

Таблица 5.1. Критические температуры и скачки величин в точке фазового перехода (ФП).  $q$  – координационное число,  $T_{c(mf)}$  – температура ФП по методу среднего поля,  $T_c$  – температура ФП для решетки Бете,  $\delta p_{(0)}$  – скачек параметра порядка,  $\delta g_{12}$  – скачек корреляционной функции для ближайших соседей и  $\delta \lambda$  – скачек корреляционной длины.

На рис. 5.4 приведены графики корреляционной длины  $\lambda$  для тех же значений  $q$ . Видно, что и корреляционная функция, и корреляционная длина имеют в точке фазового перехода разрывы, величина которых убывает с ростом  $q$ . В таблице 5.1 приведены величины скачков корреляционной функции (столбец 4) и корреляционной длины (столбец 5) для различных  $q$ .

Основные результаты этого параграфа можно сформулировать следующим образом:

1. Получено решение модели Поттса с тремя состояниями на решетке Бете с произвольным координационным числом. Найдена критическая температура и температурная зависимость параметра порядка; показано, что фазовый переход является переходом 1-го рода.
2. Величина скачка параметра порядка в точке фазового перехода слабо зависит от координационного числа решетки  $q$  и близко к его значению в пределе, соответствующем среднему полю.
3. Найдена парная корреляционная функция и корреляционная длина в рассматриваемой модели. Корреляционная длина не стремится к бесконечности в точке фазового перехода, однако имеет в этой точке максимальное значение. Корреляционная длина имеет разрыв в точке фазового перехода, величина разрыва убывает с ростом  $q$ .

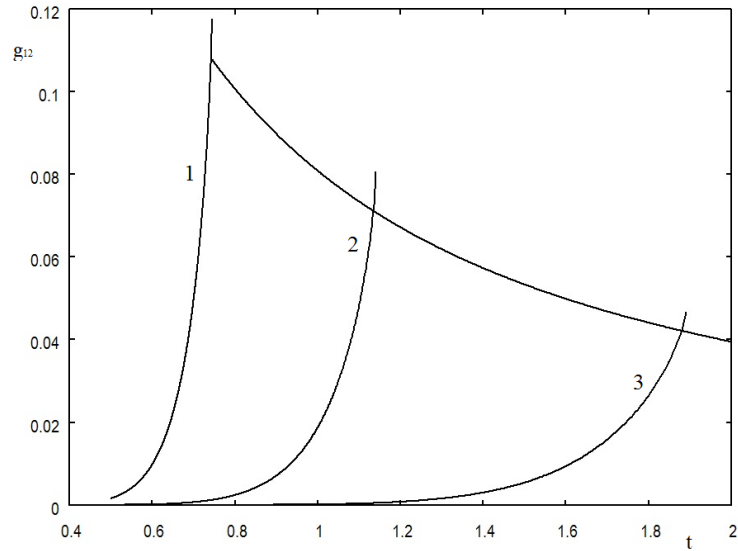


Рис. 5.3. Температурная зависимость корреляционной функций ближайших соседей  $g_{12}$  для различных значений  $q$ . По горизонтальной оси – безразмерная температура  $t = 1/K_p$ , по вертикальной – значения  $g_{12}$ . Кривая 1 –  $q = 3$ , кривая 2 –  $q = 4$ , кривая 3 –  $q = 6$ .

Как видно из формул (5.23) и (5.24) корреляционная функция и корреляционная длина не зависят от  $q$  при  $K_p < K_{pc}$  ( $T > T_c$ ). На рис. 5.3 показаны графики корреляционной функции  $g_{12}$  для  $q = 3$  (кривая 1),  $q = 4$  (кривая 2) и  $q = 6$  (кривая 3).

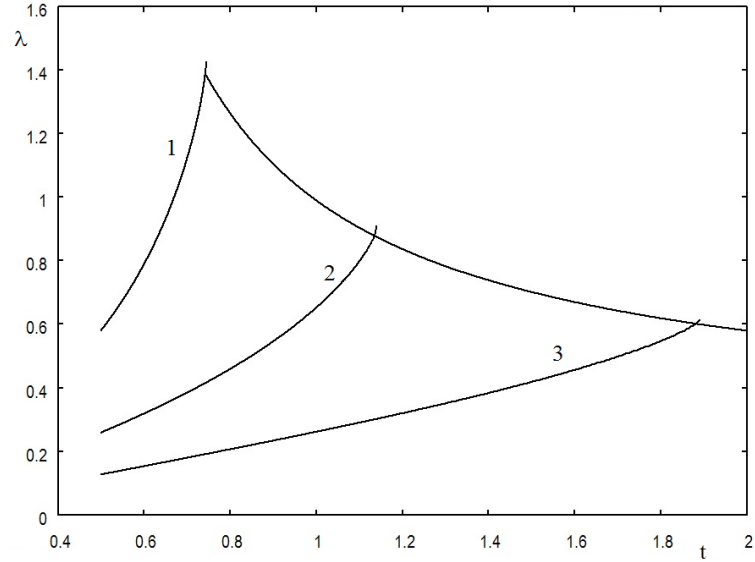


Рис. 5.4. Температурная зависимость корреляционной длины  $\lambda$  для различных значений  $q$ . По горизонтальной оси – безразмерная температура  $t = 1/K_p$ , по вертикальной – значения  $\lambda$ . Кривая 1 –  $q = 3$ , кривая 2 –  $q = 4$ , кривая 3 –  $q = 6$ .

## 5.2 Приближенные методы исследования фазовых состояний в модели Поттса разбавленного магнетика

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 замороженными примесями. Каждому узлу, содержащему магнитный атом, поставим в соответствие величину  $\sigma_i$  («спин») которая может принимать  $s$  различных значений, скажем  $1, 2, \dots, s$  [1]. Два соседних спина  $\sigma_i$  и  $\sigma_j$  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  $\xi_i$  равны 1 для узлов, занятых магнитными атомами и равны нулю для узлов, занятых атомами примеси.

В работах [47, 49] 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 [7] было рассмотрено поведение модели Поттса разбавленного магнетика на решетке Бете в случае, когда немагнитные примеси распределены псевдохаотически. Здесь предлагается 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

$$\left\langle \frac{e^{Kn_j + h\delta(j,1)}}{\sum_i e^{Kn_i + h\delta(i,1)}} \right\rangle_W = p_j \quad (5.25)$$

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 [47]

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

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

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

что согласно (5.25) приводит к выражению

$$M = \left\langle \frac{e^{Kn_1+h} - \frac{1}{s-1} \sum_{i=2}^s e^{Kn_i}}{e^{Kn_1+h} + \sum_{i=2}^s e^{Kn_i}} \right\rangle_W \quad (5.26)$$

Для дальнейшего анализа необходимо построить функцию  $W(n_1, n_2 \dots n_s)$  по которой производится усреднение в правой части (5.26). Здесь возможны различные приближения. В этом параграфе будет рассмотрено три таких приближения.

*Классический метод среднего поля.* Самым простым способом использования формулы (5.26) является метод среднего поля. Он заключается в подстановке в правую часть (5.26) вместо  $n_i$  их средних значений  $\langle n_j \rangle_W = qbp_j$ , выраженных через намагниченность  $M$  по формулам

$$p_1 = M + \frac{1-M}{s} \quad \text{и} \quad p = \frac{1-M}{s}$$

Эта подстановка дает самосогласованное уравнение для  $M$ :

$$M = \frac{e^{yM+h} - 1}{e^{yM+h} - 1 + s}, \quad (5.27)$$

где  $y = qKb$ . Это уравнение определяет зависимость намагниченности  $M$  от температуры, концентрации и внешнего магнитного поля. Из (5.27) видно, что зависимость намагниченности от температуры, концентрации и координационного числа решетки сводится к зависимости от  $y$ , что типично для приближения среднего поля. Для неразбавленного ( $b = 1$ ) магнетика Поттса этот метод применялся как в отсутствии внешнего поля [47], так и (для  $s = 3$ ) в ненулевом внешнем поле [51]. Однако его непосредственное обобщение на случай разбавленного магнетика не приводит, как видно из (5.27) к каким-либо нетривиальным результатам – концентрация  $b$  входит в (5.27) только через произведение  $qb$ . Ниже будет предложена модификация метода среднего поля, которая дает более точное описание влияния немагнитного разбавления на критическое поведение модели Поттса. Но прежде чем ввести эту модификацию, рассмотрим, что дает классический метод среднего поля (5.27) применительно к разбавленному магнетику.

При  $h = 0$  у (5.27) всегда есть решение  $M = 0$ . Однако это решение является устойчивым только если производная по  $M$  от правой части (5.27) меньше 1 при  $M = 0$ . Вычислив эту производную, можно убедиться, что нулевое решение устойчиво при  $y \leq s$ , что приводит к следующей зависимости температуры фазового перехода  $T_0 = 1/K_0$  от концентрации  $b$ , числа состояний спина  $s$  и координационного числа  $q$

$$T_0 = \frac{qb}{s}. \quad (5.28)$$

То есть, температура фазового перехода при  $h = 0$  в рассматриваемом приближении просто пропорциональна концентрации магнитных атомов  $b$ .

При  $y > s$  ( $T < T_0$ ) спонтанная намагниченность определяется ненулевым решением (5.27) при  $h = 0$ . Это ненулевое решение при  $s = 2$  стремится к нулю при  $y \rightarrow s + 0$ , что означает отсутствие разрыва в критической точке  $y = s$  то есть, фазовый переход второго рода. Напомним, что при  $s = 2$  модель Поттса эквивалентна модели Изинга, у которой магнитный фазовый переход всегда второго рода. Если же  $s > 2$ , ненулевое решение (5.27) стремится при  $y \rightarrow s + 0$  к конечному значению  $M^*$ , определяемому из уравнения

$$M^* = \frac{e^{sM^*} - 1}{e^{sM^*} - 1 + s} \quad (5.29)$$

то есть, фазовый переход является переходом первого рода. В несколько ином варианте метода среднего поля, описанном в [46] получена аналогичная зависимость  $M_1^*(s) = \frac{s-2}{s-1}$ .

Восприимчивость  $\chi = \left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_{H=0} = \frac{K}{J_p} \left. \frac{\partial M}{\partial h} \right|_{h=0}$  при  $y < s$  определяется из (5.27) и равна  $\chi = \frac{K}{J_p} \frac{1}{s-y}$ . Если  $y > s$ , выражение для восприимчивости имеет следующий вид:

$$\chi = \frac{K}{J_p} \left( \frac{s}{(1+(s-1)M)(1-M)} - y \right)^{-1} \quad (5.30)$$

При  $s = 2$  это выражение при  $y \rightarrow 2 + 0$  приближенно равно  $\chi \approx \frac{1}{2} \frac{K}{J_p} \frac{1}{y-2}$ . Если же  $s > 2$ , восприимчивость (5.30) остается конечной при  $y \rightarrow s + 0$  и имеет в точке  $y = s$  максимальное значение, определяемое подстановкой в (5.30)  $M = M^*$ .

Как известно [50, 51], в модели Поттса при  $s > 2$  имеет место, в отличие от модели Изинга, не одна точка фазового перехода при  $h = 0$ , а линия фазовых переходов первого рода на плоскости  $(K, h)$ , которая начинается в точке  $(K_0, 0)$  и заканчивается в точке  $(K_e, h_e)$  в которой фазовый переход является переходом второго рода. Точки линии фазовых переходов находятся из условий

$$\begin{cases} F(M, h) = M \\ \frac{dF(M, h)}{dM} = 1 \end{cases}, \text{ где } F(M, h) = 1 - s/(e^{yM+h} - 1 + s)$$

Отсюда

$$e^h = \left( \frac{s}{1-M} - s + 1 \right) e^{-yM}, \quad (5.31)$$

а намагниченность  $M$  определяется из уравнения

$$y(s-1)x^2 - ysx + s = 0, \quad (x = 1 - M) \quad (5.32)$$

Это уравнение имеет решение только для  $y \in \left[ \frac{4(s-1)}{s}, s \right]$ . Верхняя граница этого отрезка соответствует температуре фазового перехода (5.28) при  $h = 0$ , а нижняя – температуре  $T_e = \frac{qbs}{4(s-1)}$ .

Из (5.31) и (5.32)

$$h_e = \ln(s-1) - 2(s-2)/s.$$

В работе [51] найдена методом среднего поля конечная точка линии фазовых переходов первого рода для частного случая  $s = 3$  и  $q = 6$  (кубическая решетка) в модели Поттса без разбавления ( $b = 1$ ). Наш результат при подстановке этих значений в точности совпадает с приведенным в указанной работе. Уравнение линии фазовых переходов первого рода можно из (5.31) и (5.32) записать в следующем виде

$$h(y) = \ln\left(\frac{s}{x_c(y)} - s + 1\right) - y(1 - x_c(y)),$$

$$x_c(y) = \frac{ys + \sqrt{y^2s^2 - 4ys(s-1)}}{2y(s-1)}, \quad y = Kqb$$

Иными словами, влияние концентрации магнитных атомов  $b$  (как и координационного числа решетки  $q$ ) сводится в классическом приближении среднего поля просто к изменению масштаба по оси температур. В частности,  $h_e$  не зависит от  $b$ , а намагниченность в точке  $(K_e, h_e)$  не зависит от  $b$  и  $q$  и равна

$$M_e = 1 - \frac{s}{2(s-1)}.$$

*Модифицированный метод среднего поля.* Функцию  $W(n_1, n_2 \dots n_s)$ , по которой производится усреднение в правой части (5.26), можно представить в следующем виде

$$W(n_1, n_2 \dots n_s) = \sum_{z=0}^q P(z) W_z(n_1, n_2 \dots n_s) \quad (5.33)$$

где  $P(z)$  - вероятность обнаружить  $z$  магнитных атомов в первой координационной сфере узла, занятого магнитным атомом. Для замороженных примесей, очевидно

$$P(z) = C_q^z b^z (1 - b)^{q-z}, \quad (5.34)$$

где  $C_q^z = \frac{q!}{z!(q-z)!}$  - биномиальные коэффициенты

Приближенно построим  $W_z(n_1, n_2 \dots n_s)$  следующим образом. Обозначим  $\Omega_z$  совокупность таких магнитных атомов, которые являются соседними к магнитным атомам, имеющим ровно  $z$  магнитных соседей. Пусть  $p_j(z)$  - вероятность обнаружить в состоянии  $j$  атом из  $\Omega_z$ . Будем считать, что  $p_j(z) = p_j$ . Тогда средние значения  $n_j$ , вычисленные по функциям распределения  $W_z(n_1, n_2 \dots n_s)$  равны  $z p_j$ . Зададим функции  $W_z(n_1, n_2 \dots n_s)$  следующим образом:

$$W_z(n_1, n_2 \dots n_s) = \prod_{j=1}^s \delta(n_j - z p_j), \quad (5.35)$$

то есть, для каждого конкретного значения  $z$  приравняем  $n_j$  их средним значениям. В этом и заключается предлагаемая модификация классического метода среднего поля. Для чистого ( $b = 1$ ) магнетика Поттса это соответствует обычному приближению среднего поля. В общем случае, получим самосогласованное уравнение для определения  $M$

$$M = \sum_{z=0}^q C_q^z b^z (1 - b)^{q-z} \frac{e^{KzM+h-1}}{e^{KzM+h-1+s}} \quad (5.36)$$

Температура фазового перехода при  $h = 0$  находится аналогично предыдущему случаю:

$$1 = \frac{K_0}{s} \sum_{z=0}^q z C_q^z b^z (1-b)^{q-z} = \frac{K_0 q b}{s}$$

то есть, температура фазового перехода определяется по формуле (5.28) как и в предыдущем случае. Аналогично уравнению (5.27) у уравнения (5.36) существует при  $T < T_0$  устойчивое ненулевое решение, которое и определяет спонтанную намагниченность. Если  $s = 2$  (модель Изинга) это решение обращается в ноль при  $T \rightarrow T_0 - 0$ , а при  $s > 2$   $M \rightarrow M^* > 0$ . То есть, фазовый переход при  $s = 2$  является переходом второго рода, а при  $s > 2$  - первого.

Однако между поведением решения (5.27) и решения (5.36) есть, все же, некоторое различие. Решение (5.27) зависит только от параметра  $y = qKb$ , а зависимость решения (5.36) от  $q$ ,  $K$  и  $b$  является более сложной. В частности, величина  $M^*$  зависит теперь не только от  $s$ , как в предыдущем случае, но и от  $q$  и  $b$  и определяется из уравнения

$$M^* = \sum_{z=0}^q C_q^z b^z (1-b)^{q-z} \frac{\exp(\frac{zsM^*}{qb}) - 1}{\exp(\frac{zsM^*}{qb}) - 1 + s}, \quad (5.37)$$

которое совпадает с (5.29) только при  $b = 1$ .

Дифференцируя (5.36) по  $H$  найдем магнитную восприимчивость. При  $T > T_c$  (в этом случае спонтанная намагниченности равна нулю), получим:

$$\chi = \frac{K}{J_p} \sum_{z=0}^q \frac{Kz\chi + 1}{s} C_q^z b^z (1-b)^{q-z},$$

что сводится к  $\chi = \frac{K}{J_p} \frac{1}{s-y}$ , как и в предыдущем случае. При  $T < T_c$  получим следующее уравнение для восприимчивости

$$\chi = \frac{K}{J_p} \frac{\langle \varphi(z) \rangle}{1 - K\chi \langle z\varphi(z) \rangle} \quad (5.38)$$

где

$$\varphi(z) = \frac{e^{KzM}}{e^{KzM} - 1 + s} - \frac{(e^{KzM} - 1)e^{KzM}}{(e^{KzM} - 1 + s)^2},$$

а треугольные скобки означают усреднение по биномиальному распределению (5.34).

При  $T < T_0$  восприимчивость  $\chi$  монотонно растет с ростом температуры, достигая конечного предельного значения при  $T = T_0 - 0$ . Величина этого предельного значения  $\chi^*$  показана как функция концентрации магнитных атомов на рис.5.5. Видно, что  $\chi^*$  немонотонна и стремится к конечному пределу при  $b \rightarrow 0$ . В классическом методе среднего поля, как это видно из формул (5) и (6), предельная восприимчивость  $\chi_c^*$  обратно пропорциональна  $b$ :  $\chi_c^*(b) = \frac{\chi_c^*(1)}{b}$  и расходится при  $b \rightarrow 0$ .

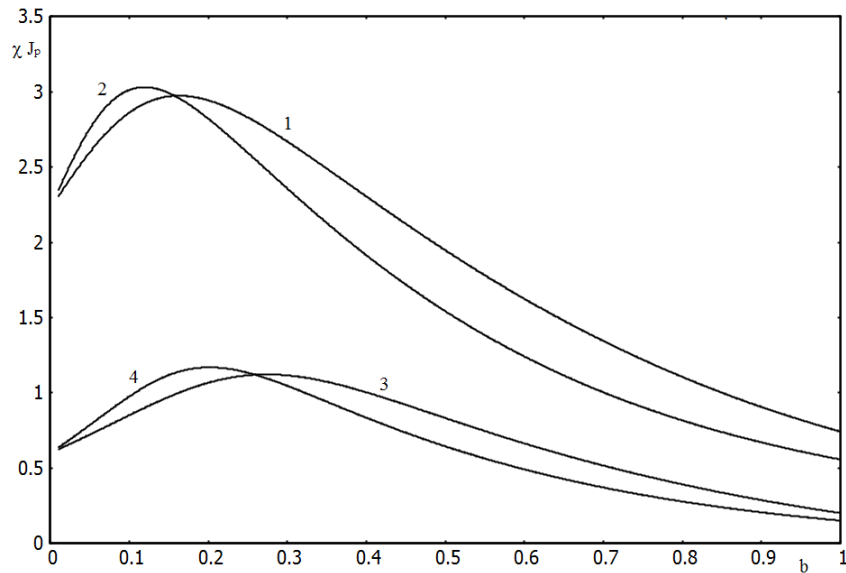


Рис. 5.5. Зависимость магнитной восприимчивости при  $T = T_c - 0$  от концентрации магнитных атомов в модифицированном методе среднего поля. По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов  $b$ , по вертикальной – восприимчивость. Кривая 1 -  $q = 3, s = 3$ , кривая 2 -  $q = 4, s = 3$ . Кривая 3 -  $q = 3, s = 4$ , кривая 4 -  $q = 4, s = 4$ .

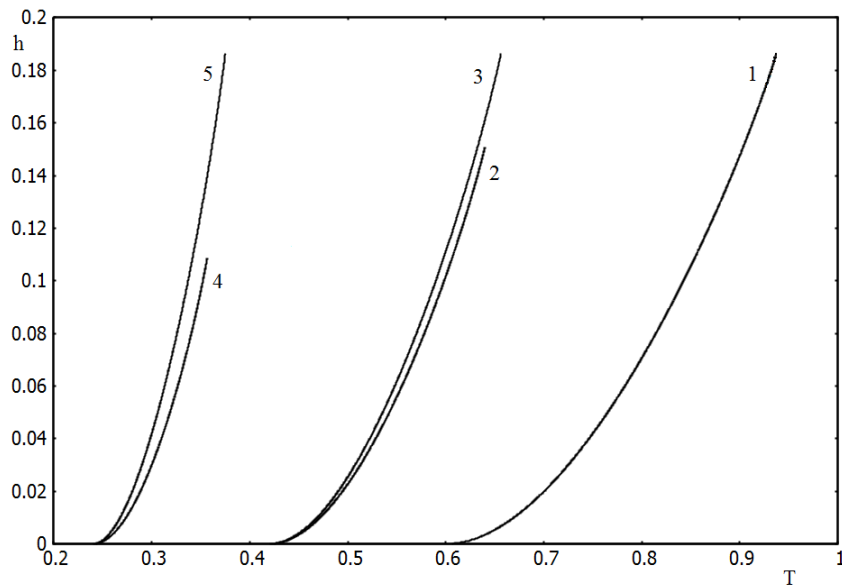


Рис. 5.6. Линии фазовых переходов первого рода, вычисленные в приближениях среднего поля для модели Поттса с  $s = 5$  и  $q = 3$  при различных концентрациях магнитных атомов. По горизонтальной оси – температура, по вертикальной – внешнее поле. Кривые 1, 3, 5 – приближение классического среднего поля, кривые 1, 2, 4 – приближение модифицированного среднего поля. Концентрация магнитных атомов  $b$  равна 1 для кривой 1, 0,7 – для кривых 2 и 3 и 0,4 – для кривых 4 и 5.

Рассмотрим теперь нахождение линии фазовых переходов первого рода в рамках модифицированного метода среднего поля. Для определения точек этой линии необходимо найти совместное решение (5.36) и условия равенства единице производной по  $M$  от правой части (5.36). Результаты расчета показаны на рис. 5.6. При расчете классическим методом среднего поля не обнаруживается зависимости  $h_e$  от концентрации  $b$  (кривые 1, 3, 5 на рис. 5.6), в то



время как при расчете модифицированным методом  $h_e$  убывает при уменьшении  $b$  (кривые 1, 2, 4).

Величину скачка намагниченности на кривой фазовых переходов первого рода иллюстрирует рис.5.7. Верхние ветви кривых на этом рисунке соответствуют значениям намагниченности на кривой фазовых переходов при приближении «сверху» - со стороны меньших значений температуры или больших значений внешнего поля, нижние – соответственно, «снизу». Величина скачка намагниченности при некотором  $h \in [0, h_e]$  равна разности этих значений. В приближении классического среднего поля эта величина не зависит от концентрации  $b$  и намагниченность на линии фазовых переходов описывается кривой 1 на рис.5.7 для любого значения концентрации. В приближении модифицированного среднего поля величина скачка оказывается зависящей от  $b$  и с уменьшением  $b$  убывает (кривые 2 и 3).

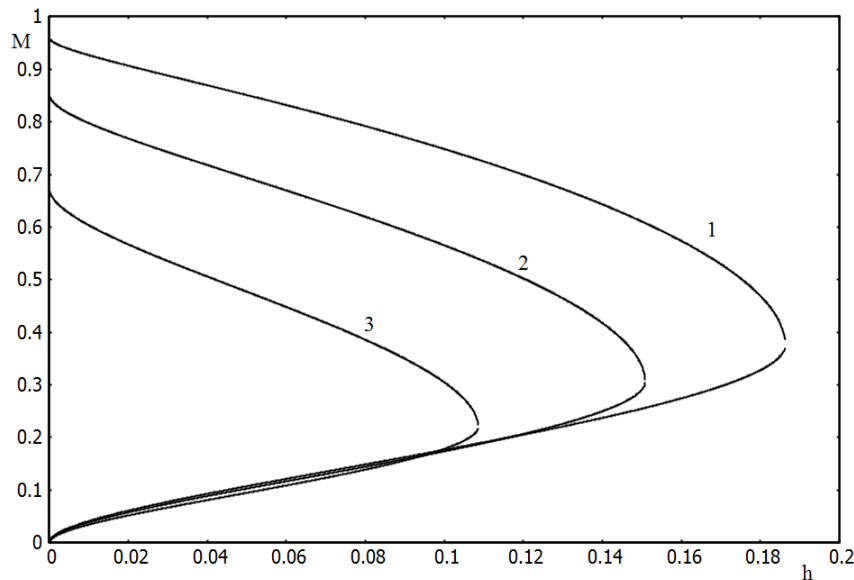


Рис. 5.7. Скачек намагниченности на линии фазовых переходов первого рода для модели Поттса с  $s = 5$  и  $q = 3$  в приближении среднего поля при различных концентрациях магнитных атомов. По горизонтальной оси – внешнее поле, по вертикальной – намагниченность. Кривая 1 –  $b = 1$ , кривая 2 –  $b = 0,7$  и кривая 3 –  $b = 0,4$ .

*Метод усреднения по локальным полям.* Будем теперь 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:

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

Здесь  $C_q^z = \frac{q!}{z!(q-z)!}$  - биномиальные коэффициенты, а  $C_z^{n_1, n_2, \dots, n_s} = \frac{z!}{n_1! n_2! \dots n_s!}$  - полиномиальные 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 (5.26) самосогласованное уравнение для определения  $M$ :

$$M = \sum_{z=0}^q C_q^z b^z (1-b)^{q-z} \sum_{n_1=0}^z C_z^{n_1} \left(M + \frac{1-M}{s}\right)^{n_1} \left(\frac{1-M}{s}\right)^{z-n_1} \Lambda_{z,s}^{n_1}(K, h), \quad (5.39)$$

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

При  $h = 0$  уравнение (5.39) 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, приравняв к 1 производную по  $M$  правой части (5.39) при  $M = 0$ :

$$1 = \sum_{z=0}^q C_q^z b^z (1-b)^{q-z} \sum_{n_1=0}^z C_z^{n_1} \frac{n_1 s^{-z}}{s^z} \Lambda_{z,s}^{n_1}(K_c(b), 0) \quad (5.40)$$

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.

При  $q = 3$  из основного уравнения (5.39) получим уравнение для намагниченности для шестиугольной решетки. Это уравнение имеет достаточно громоздкий вид, но существенно упрощается в пределе  $K \rightarrow \infty$  (то есть, при нулевой температуре). Полагая внешнее поле равным нулю, получим:

$$M_0 = M_0 \left( -\frac{s-1}{s} M_0^2 + \frac{s-2}{s} M_0 + \frac{1}{s} \right) \left( \frac{b}{1-b} \right)^3. \quad (5.41)$$

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

$$b_c = \frac{\sqrt[3]{s}}{1+\sqrt[3]{s}} \quad (5.42)$$

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. 5.8 приведены температуры фазового перехода  $T_c(b) = 1/K_c(b)$ , найденные из (5.40), 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.

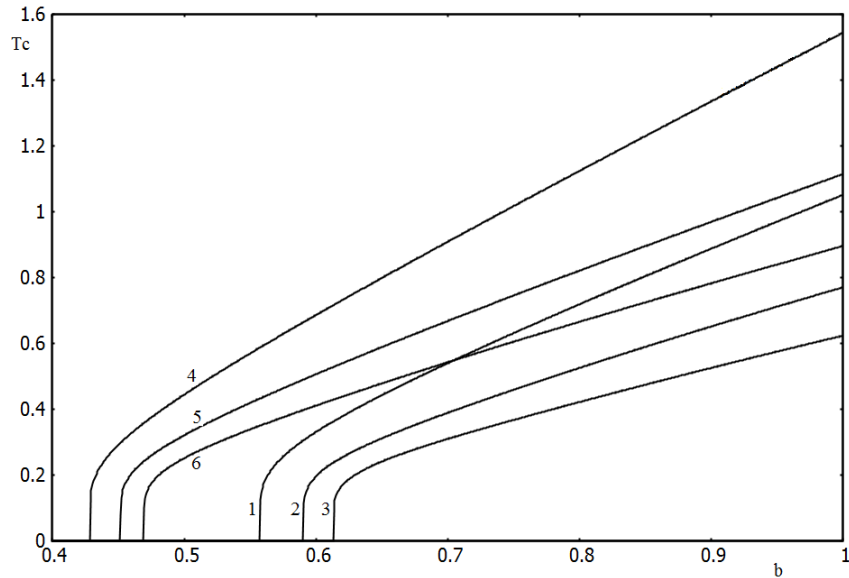


Рис. 5.8. Зависимость критической температуры от концентрации магнитных атомов. Кривые 1, 2 и 3 построены для координационного числа  $q = 3$ ; кривые 4, 5, 6 – для  $q = 4$ . Количество состояний спина  $s = 2$  для кривых 1 и 4,  $s = 3$  для кривых 2 и 5 и  $s = 4$  для кривых 3 и 6.

При  $b > b_c$  спонтанная намагниченность, согласно (5.41), определяется выражением:

$$M_0 = \frac{s-2 + \sqrt{s^2 - 4(s-1)s\left(\frac{1-b}{b}\right)^3}}{2(s-1)} \quad (5.43)$$

При  $b = b_c$  величина  $M_0$  скачком возрастает от нуля до значения  $\Delta M_0 = \frac{s-2}{s-1}$ .

На рисунке 5.9 показаны графики функций  $M_0(b)$  для значений  $s$  равных 2, 3 и 4 (кривые 1, 2 и 3 соответственно). Видно, что кривые фактически совпадают при больших значениях концентрации  $b$ , но заметно различаются вблизи перколяционных порогов.

На рисунке 5.10 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 [47] и [49], но все же, величина скачка намагниченности в критической точке уменьшается с уменьшением  $b$ .

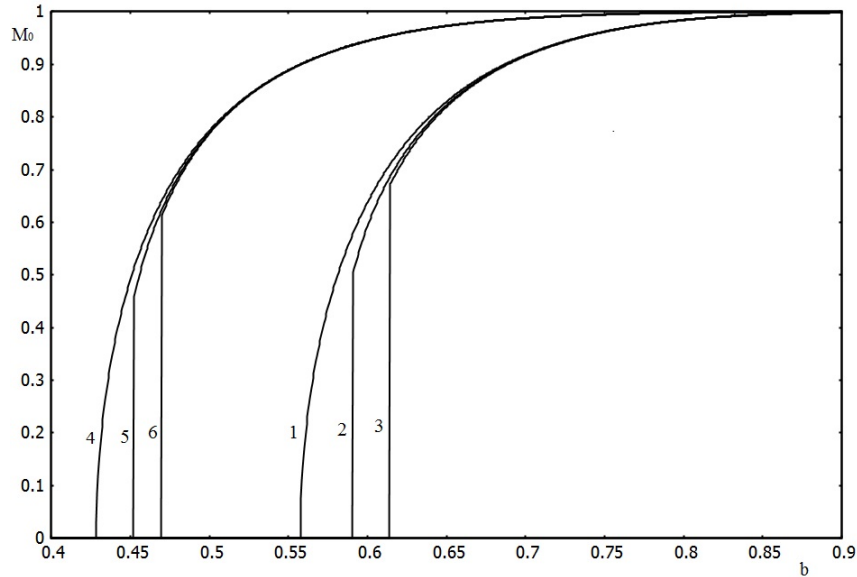


Рис. 5.9. Зависимость спонтанной намагниченности от концентрации магнитных атомов при нулевой температуре. Кривые 1, 2 и 3 построены для координационного числа  $q = 3$ ; кривые 4, 5, 6 – для  $q = 4$ . Количество состояний спина  $s = 2$  для кривых 1 и 4,  $s = 3$  для кривых 2 и 5 и  $s = 4$  для кривых 3 и 6.

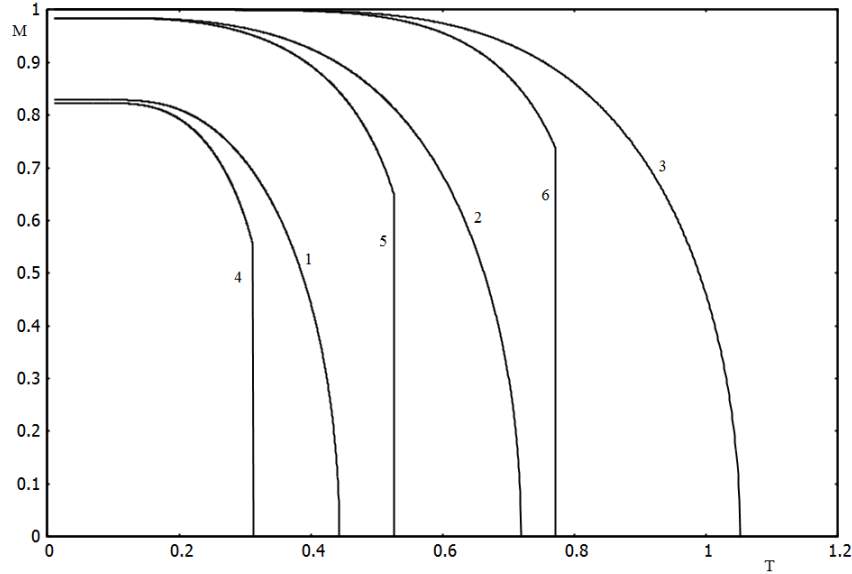


Рис. 5.10. Зависимость спонтанной намагниченности от температуры для разбавленного магнетика с координационным числом решетки  $q = 3$ . Кривые 1, 2 и 3 построены для  $s = 2$  (модель Изинга) при концентрациях магнитных атомов 0,65, 0,8 и 1,0 соответственно. Кривые 4, 5 и 6 – для  $s = 3$  при тех же значениях концентрации.

Для  $q = 4$  из (5.39) получим при  $K \rightarrow \infty$  уравнение для спонтанной намагниченности при нулевой температуре:

$$(1 - b)^4 = 4b^3(1 - b) \left( -\frac{s-1}{s} M_0^2 + \frac{s-2}{s} M_0 + \frac{1}{s} \right) + b^4 \left( \frac{2(s-2)(s-1)}{s^2} M_0^3 - \frac{5s^2 - 15s + 12}{s^2} M_0^2 + \frac{3(s-2)^2}{s^2} M_0 + \frac{3s-4}{s^2} \right) \quad (5.44)$$

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

$$(1 - b_c)^4 = 4b_c^3(1 - b_c) \frac{1}{s} + \frac{3s-4}{s^2} b_c^4 \quad (5.45)$$

Как и в случае  $q = 3$ , перколяционный порог  $b_c$  оказывается зависящим от  $s$ . Для  $s = 2$  уравнение (5.44) сводится к явной зависимости

$$M_0(b) = \sqrt{1 - \frac{2(1-b)^4}{4b^3(1-b)+b^4}} \quad (5.46)$$

График этой функции, а так же решение (5.44) при  $s = 3$  и  $4$  показаны на рис 5.9 (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. 5.5 и 5.7).

Таким образом, с помощью классического метода среднего поля было проанализировано критическое поведение разбавленного магнетика Поттса с произвольным числом состояний, находящегося в ненулевом внешнем поле. Результаты этого анализа можно рассматривать как обобщение полученных ранее в работах [5, 47].

Для разбавленного магнетика Поттса была построена модификация метода среднего поля, совпадающая с классическим методом при  $b = 1$ . С помощью этого метода была проанализировано влияние немагнитного разбавления на кривую фазовых переходов первого рода и получены следующие основные результаты.

1. Магнитная восприимчивость в нулевом внешнем поле при  $T = T_0 - 0$  является монотонной функцией концентрации  $b$  и имеет максимум при некотором значении  $b$ , зависящем от  $s$  и  $q$  (рис. 5.5).

2. Координаты конечной точки линии фазовых переходов  $(T_e, h_e)$  являются функциями концентрации  $b$  и обе эти функции убывают с уменьшением  $b$  (рис. 5.6).

3. Скачек намагниченности на линии фазовых переходов зависит от  $b$  и его величина убывает при всех значениях  $h \in [0, h_e(b)]$  (рис.5.7).

### 5.3. Модель Поттса с немагнитными примесями на решетке Бете в псевдохаотическом приближении

Как сказано выше, модель Поттса формулируется следующим образом. Рассмотрим некоторую регулярную решетку. Каждому узлу поставим в соответствие величину  $\sigma_i$  («спин») которая может принимать  $s$  различных значений, скажем  $1, 2, \dots, s$ . Два соседних спина  $\sigma_i$  и  $\sigma_j$  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 есть внешнее поле  $H$ , которое действует на состояние 1. Тогда полная энергия равна

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

Допустим, что в некоторых узлах решетки вместо спинов могут быть немагнитные атомы («примеси»). Пусть  $b$  доля спинов и, соответственно,  $1 - b$  – доля примесей в решетке.

Можно рассматривать два типа примесей – «вмороженные» неподвижные примеси (параграф 5.3) случайно и без корреляции разбросанные по узлам решетки и «подвижные» примеси – способные перемещаться по узлам и находящиеся в термодинамическом равновесии с матрицей. Наибольший интерес представляет модель с вмороженными примесями, поскольку подавляющее большинство магнетиков с примесями относится именно к этому типу. Однако точное решение задачи с вмороженными примесями оказывается невозможным даже для простых решеток. Но оказывается, как будет показано ниже, можно получить точное решение задачи с подвижными примесями на решетке Бете. Это решение, интересное, возможно, и само по себе, позволяет подойти и к анализу поведения системы с вмороженными примесями. Для подвижных примесей можно рассчитать корреляцию (ковариацию) в расположении примесей для соседних узлов решетки. Накладывая условие равенства нулю этой корреляции, получим распределение примесей, которое мы назвали «псевдохаотическим». И хотя такое распределение примесей по узлам решетки не является совершенно случайным, перколяционный порог, например, при псевдохаотическом распределении на решетке Бете совпадает с порогом для вмороженных примесей. Мы полагаем, что поведение системы с псевдохаотическими подвижными примесями является хорошим приближением для магнетика с вмороженными примесями.

Итак, рассмотрим модель Поттса с подвижными примесями. Пусть переменные  $\sigma_i$  могут, кроме значений  $1, 2, \dots, s$ , принимать значения  $0$ , когда в узле находится немагнитная примесь. Допустим, что силы взаимодействия действуют только между соседними атомами. Тогда вклад в энергию системы от двух соседних узлов можно представить в следующем виде

$$E_{ij} = -J_p \delta(\sigma_i, \sigma_j) - (U_{11} - J_p) \delta(0, \sigma_j) \delta(\sigma_i, 0) - \\ - U_{12} \left\{ \delta(\sigma_i, 0) (1 - \delta(0, \sigma_j)) + \delta(0, \sigma_j) (1 - \delta(\sigma_i, 0)) \right\} - \\ - U_{22} (1 - \delta(0, \sigma_j)) (1 - \delta(\sigma_i, 0))$$

Здесь  $U_{11}$  - энергия взаимодействия двух соседних атомов примеси,  $U_{12}$  - энергия взаимодействия атома примеси и магнитного атома и  $U_{22}$  - энергия взаимодействия двух магнитных атомов.

Большая статистическая сумма системы имеет следующий вид:

$$Z = \sum \exp \left\{ K \sum_{(i,j)} \varphi(\sigma_i, \sigma_j) + h \sum_i \delta(\sigma_i, 1) + x \sum_i \delta(\sigma_i, 0) \right\}, \quad (5.47)$$

где  $K = \frac{J_p}{kT}$ ,  $h = \frac{H}{kT}$ ,  $x = \frac{\mu}{kT}$  ( $\mu$  - химический потенциал).

$$\varphi(\sigma_i, \sigma_j) = \delta(\sigma_i, \sigma_j) + (\gamma - 1) \delta(0, \sigma_j) \delta(\sigma_i, 0),$$

$$\gamma = \frac{U}{J_p}, \quad U = U_{11} - 2U_{12} + U_{22}.$$

Решетку Бете построим следующим образом. Рассмотрим два соседних узла со значениями спиновых переменных  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$ . Присоединим к каждому узлу  $q - 1$  внешних соседей (узлы первой оболочки). К каждому узлу первой оболочки снова присоединим  $q - 1$  узлов второй

оболочки и продолжим этот процесс  $N$  раз. В результате получим так называемое дерево Кейли; решетка Бете – это внутренняя (далекая от граничных узлов) часть дерева Кейли при  $N \rightarrow \infty$ . Для вычисления статистической суммы (5.47) на решетке Бете воспользуемся приемом, аналогичным использованному в [6] для модели Изинга. Большая статистическая сумма (5.47) является суммой по всем возможным спиновым конфигурациям  $\{\sigma\}$

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} P(\sigma),$$

$$\text{где } P(\sigma) = \exp\{K \sum_{(i,j)} \varphi(\sigma_i, \sigma_j) + h \sum_i \delta(\sigma_i, 1) + x \sum_i \delta(\sigma_i, 0)\}.$$

Выделяя в этом выражении члены содержащие  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$  запишем его в следующем виде:

$$P(\sigma) = e^{\psi(\sigma_1, \sigma_2)} \prod_{j=1}^{q-1} Q_N(\sigma_1 | s_1^{(j)}) \prod_{l=1}^{q-1} Q_N(\sigma_2 | s_2^{(l)}),$$

где

$$\psi(\sigma_1, \sigma_2) = K\varphi(\sigma_1, \sigma_2) + h(\delta(\sigma_1, 1) + \delta(\sigma_2, 1)) + x(\delta(\sigma_1, 0) + \delta(\sigma_2, 0)),$$

$s_1^{(j)}$  и  $s_2^{(l)}$  обозначают совокупности спинов на  $j$ -ой и  $l$ -ой ветвях узлов 1 и 2 соответственно.

Обозначив  $G_N(\sigma) = \sum_{\{s\}} Q_N(\sigma | S)$ , запишем статсумму в следующем виде:

$$Z_N = \sum_{\sigma_1, \sigma_2} e^{\psi(\sigma_1, \sigma_2)} G_N^{q-1}(\sigma_1) G_N^{q-1}(\sigma_2) \quad (5.48)$$

С помощью (5.48) можно теперь найти вероятность  $p_i$  того, что спин  $\sigma_1$  примет значение  $i$ . (Вероятности соответствующих значений переменной  $\sigma_2$  будут, в силу симметрии, точно такими же.)

$$p_i = \frac{1}{Z_N} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \frac{1}{2} (\delta(\sigma_1, i) + \delta(\sigma_2, i)) e^{\psi(\sigma_1, \sigma_2)} G_N^{q-1}(\sigma_1) G_N^{q-1}(\sigma_2) \quad (5.49)$$

В соответствии со сказанным выше, концентрация магнитных атомов в решетке  $b = 1 - p_0$ . Ковариацию расположения примесей в узлах 1 и 2 вычислим так:

$$g_{12} = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \delta(\sigma_1, 0) \delta(\sigma_2, 0) e^{\psi(\sigma_1, \sigma_2)} G_N^{q-1}(\sigma_1) G_N^{q-1}(\sigma_2) - p_0^2 \quad (5.50)$$

Для функций  $G_N(\sigma)$  можно построить рекуррентные соотношения, представив  $Q_N(\sigma | S)$  в виде

$$Q_N(\sigma | S) = e^{K\varphi(\sigma, s_1) + h\delta(s_1, 1) + x\delta(s_1, 0)} \prod_{j=1}^{q-1} Q_{N-1}(s_1 | t^{(j)}),$$

где  $s_1$  – один из спинов первой оболочки, а  $t^{(j)}$  – совокупность спинов одной из отходящих от него ветвей. Суммируя это выражение по совокупности спинов  $S$ , получим

$$G_N(\sigma) = \sum_{s_1} e^{K\varphi(\sigma, s_1) + h\delta(s_1, 1) + x\delta(s_1, 0)} G_{N-1}^{q-1}(s_1) \quad (5.51)$$

Поскольку в дальнейшем предполагается перейти к термодинамическому пределу ( $N \rightarrow \infty$ ), вместо функций  $G_N(\sigma)$  введем отношения  $y_{i,N} = \frac{G_N(i)}{G_N(1)}$ . Из (5.51) можно получить рекуррентные соотношения, выражающие  $y_{i,k}$  через  $y_{i,k-1}$  (очевидно, что  $y_{i,0} = 1$ ), а из (3) и (4) получим выражения для  $p_i$  и  $g_{12}$  через  $y_{i,N}$ .

Будем искать решение, в котором все  $p_i$  для  $i > 1$  равны между собой.  $y_{i,k}$  при  $i > 1$  обозначим просто  $y_k$  и, кроме того, введем обозначение  $t_k = e^x y_{0,k}^{q-1}$ . Тогда из (5.49) и (5.50) получим

$$p_1 = \frac{1}{\tilde{Z}_N} (e^{K+2h} + t_N e^h + (s-1)e^h y_N^{q-1}) \quad (5.52)$$

$$1 - b = \frac{1}{\tilde{Z}_N} (t_N^2 e^{K\gamma} + t_N e^h + (s-1)t_N y_N^{q-1}) \quad (5.53)$$

$$g_{12} = \frac{t_N^2 e^{K\gamma}}{\tilde{Z}_N} - (1-b)^2 \quad (5.54)$$

где  $\tilde{Z}_N = \frac{Z_N}{G_N^{2(q-1)}(1)}$ .

$$\tilde{Z}_N = t_N^2 e^{K\gamma} + e^{K+2h} + 2t_N e^h + (s-1)y_N^{q-1}(2t_N + 2e^h + e^K y_N^{q-1} + (s-2)y_N^{q-1}) \quad (5.55)$$

Из (5.51) получим рекуррентные соотношения:

$$y_{0,N} = \frac{e^{\gamma K} t_{N-1} + e^h + (s-1)y_{N-1}^{q-1}}{t_{N-1} + e^{K+h} + (s-1)y_{N-1}^{q-1}} \quad (5.56)$$

$$y_N = \frac{t_{N-1} + e^h + (e^K + (s-2))y_{N-1}^{q-1}}{t_{N-1} + e^{K+h} + (s-1)y_{N-1}^{q-1}} \quad (5.57)$$

Рассмотрим выражения (5.52)-(5.57) в термодинамическом пределе ( $N \rightarrow \infty$ ). В этом пределе  $y_{0,N} \rightarrow y_0$ ,  $y_N \rightarrow y$ ,  $t_N \rightarrow t$  и  $Z_N \rightarrow Z$ . Теперь, в соответствии со сказанным выше, возьмем такую величину  $\gamma$ , чтобы  $g_{12}$  обратилось бы в ноль. Соответствующую величину  $\gamma$  будем обозначать  $\gamma_0$ . Тогда из (5.53) и (5.54) получим

$$1 - b = \frac{t e^{K\gamma_0}}{t e^{K\gamma_0} + e^h + (s-1)y^{q-1}}$$

Отсюда

$$e^{K\gamma_0} = \frac{1-b}{bt} (e^h + (s-1)y^{q-1}), \quad (5.58)$$

Подставив это выражение в (5.54), получим

$$t = \frac{1-b}{b} \frac{e^{K+2h} + (s-1)y^{q-1}(2e^h + y^{q-1}(e^K + s-2))}{e^h + (s-1)y^{q-1}} \quad (5.59)$$

из (5.52)

$$p_1 = \frac{1}{\tilde{Z}_0} (e^{K+2h} + t e^h + (s-1)e^h y^{q-1}), \text{ где} \quad (5.60)$$

$$\tilde{Z}_0 = t \frac{1+b}{b} (e^h + (s-1)y^{q-1}) + [e^{K+2h} + (s-1)y^{q-1}(2e^h + y^{q-1}(e^K + s-2))]$$

или

$$p_1 = b^2 \frac{e^{K+2h} + t e^h + (s-1)e^h y^{q-1}}{e^{K+2h} + (s-1)y^{q-1}(2e^h + y^{q-1}(e^K + s-2))} \quad (5.61)$$

Кроме того, из рекуррентного соотношения (5.57) получим при  $N \rightarrow \infty$

$$y = \frac{t + e^h + (e^K + (s-2))y^{q-1}}{t + e^{K+h} + (s-1)y^{q-1}}. \quad (5.62)$$



Формулы (5.59) – (5.62) представляют собой решение задачи о нахождении величин, характеризующих состояние поттсовского магнетика в зависимости от температуры, внешнего поля и концентрации атомов примеси в случае псевдохаотического распределения последних. Кроме того, эти формулы позволяют найти температуру фазового перехода  $K_c(b) = \frac{J_p}{kT_c(b)}$  в зависимости от концентрации магнитных атомов.

Анализ выражений (5.59) – (5.62) показывает, что при  $K < K_c(b)$  и  $h = 0$  единственным устойчивым решением (5.62) является  $y = 1$  и (из (5.61))  $p_1 = b/s$ . При  $K = K_c(b)$  происходит (при  $s > 2$ ) скачкообразное увеличение вероятности  $p_1$  (фазовый переход 1-го рода). Найдем из выражений (5.59) и (5.62) температуру фазового перехода. При  $K = K_c$  производная по  $y$  правой части (5.62) должна быть равна 1 при  $y = 1$  (если эта производная больше 1, решение  $y = 1$  становится неустойчивым). Взяв производную (5.62) (используя (5.59) для определения  $t(y)$ ), получим

$$K_c(b) = \ln \frac{s-1+(q-1)b}{(q-1)b-1}. \quad (5.63)$$

При  $b = 1$ , то есть для модели Поттса без примесей, (5.63) совпадает с критической температурой модели Поттса на решетке Бете, приведенной в [46]. При  $s = 2$  (в этом случае модель Поттса эквивалентна модели Изинга) из (5.63) получается тот же результат, который приведен в [3]. На рис.5.11 приведены графики критической температуры  $T_c(b) = 1/K_c(b)$  для  $q = 4$  и  $s = 2,3,4$  (кривые 1,2 и 3 соответственно).

Видно, что  $T_c(b)$  имеют бесконечную производную при  $b = b_c$  и практически линейно зависят от  $b$  вблизи  $b = 1$ , что соответствует известным свойствам зависимости критической температуры от концентрации магнитных атомов [8]. Кроме того, из (5.63) видно, что при произвольном  $s$  критическая температура обращается в ноль при концентрации, совпадающей с порогом протекания решетки Бете ( $b_c = 1/(q - 1)$ ), в этом смысле псевдохаотическое распределение примесей ведет себя как истинно хаотическое [26, 47].

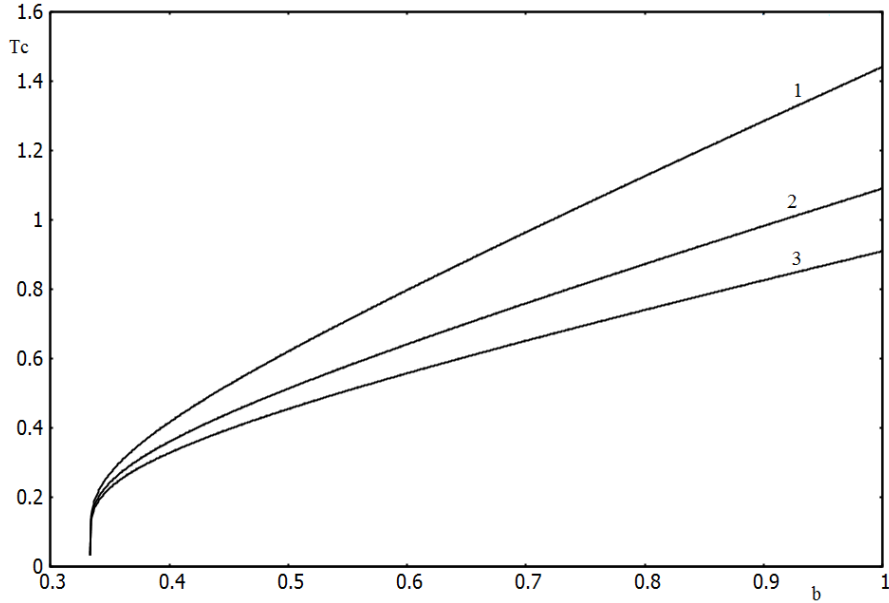


Рис. 5.11 Зависимость температуры Кюри от концентрации магнитных атомов при  $q = 4$ . Кривая 1 -  $s = 2$  (модель Изинга), кривая 2 -  $s = 3$  и кривая 3 -  $s = 4$ .

Различие между этими распределениями можно проиллюстрировать, вычислив вероятность того, что взятый наугад магнитный атом принадлежит бесконечному кластеру магнитных атомов. Если определить намагниченность для модели Поттса с  $s$  состояниями аналогично [47]

$$M = \frac{sp_1 - b}{b(s-1)},$$

то нетрудно показать, что вероятность для магнитного атома принадлежать бесконечному кластеру и есть намагниченность  $M$  при  $T = 0$  и  $h = 0$ . Переходя в (5.59), (5.61) и (5.62) к пределу  $K \rightarrow \infty$ , получим

$$M_0(y) = \frac{1}{s-1} \left( \frac{1-b(y)}{1+(s-1)y^{q-1}} + \frac{b(y)}{1+(s-1)y^{2(q-1)}} \right) s - 1$$

$$b(y) = \left( 1 + \frac{1+(s-1)y^{q-1}}{1+(s-1)y^{2(q-1)}} \sum_{i=1}^{q-2} y^i \right)^{-1} \quad (0 < y < 1)$$

Эти выражения определяют в параметрическом виде зависимость  $M_0(b)$ . На рисунке 5.12 приведены графики  $M_0(b)$  для  $s = 2$  (кривая 2) и  $s = 4$  (кривая 3). На этом же рисунке приведена функция  $P(b)$  (кривая 1), определяющая вероятность для магнитного атома принадлежать бесконечному кластеру при хаотическом распределении атомов примеси по узлам решетки Бете. (Эта вероятность находится по формулам [8]  $P(b) = 1 - S^q$ ,  $\sum_{i=0}^{q-2} S^i = 1/b$ .) Видно, что хотя функции  $M_0(b)$  и  $P(b)$  достаточно близки, при любом  $n$  эти функции обращаются в ноль при одном и том же значении  $b_c = 1/(q-1)$ , что соответствует перколяционному порогу для решетки Бете, между ними есть, все же, некоторое различие.

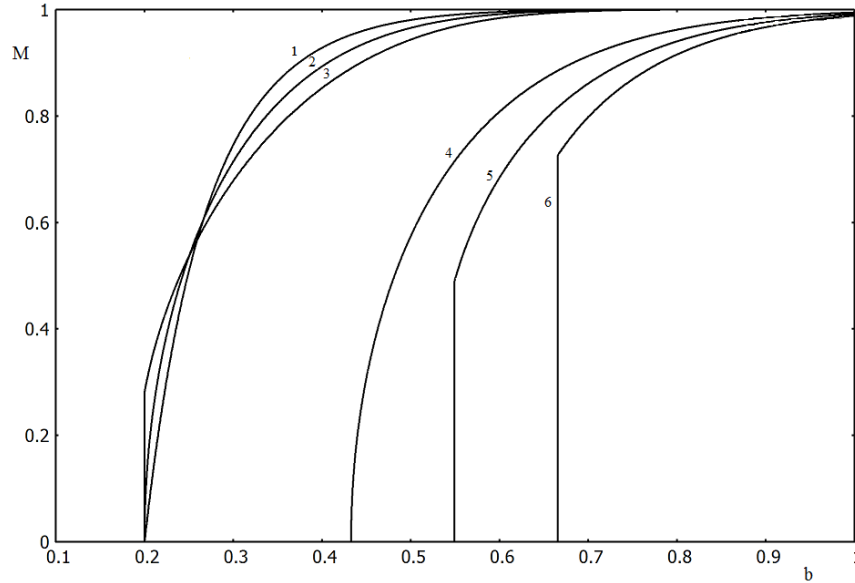


Рис. 5.12. Концентрационная зависимость спонтанной намагниченности. По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов  $b$ , по вертикальной – намагниченность. Кривая 1 – вероятность для магнитного атома принадлежать бесконечному кластеру в решетке Бете со случайным разбавлением, кривые 2 и 3 – намагниченность при нулевой температуре в модели Поттса с псевдохаотическим распределением при  $s = 2$  и  $s = 3$  соответственно. Кривые 4, 5 и 6 – намагниченность при  $K = 1$  для  $s = 2$ ,  $s = 3$  и  $s = 4$  соответственно.

На рисунке 5.12 показана так же и намагниченность при конечной температуре ( $K = 1$ ) как функция концентрации магнитных атомов для  $s = 2$  (кривая 4),  $s = 3$  (кривая 5) и  $s = 4$  (кривая 6). Видно, что при  $s = 2$  (модель Изинга) фазовый переход является переходом второго рода, а при  $s > 2$  – первого рода. Как следует из формулы (5.63), значение концентрации  $b_0(K)$ , при котором возникает спонтанная намагниченность при конечном  $K$ , определяется выражением:

$$b_0(K) = b_c \frac{1+(s-1)e^{-K}}{1-e^{-K}}. \quad (5.64)$$

Видно, что  $b_0(K)$  растет с ростом  $s$  и при любом  $s$  больше  $b_c$ . При  $K \rightarrow \infty$   $b_0(K) \rightarrow b_c$  для любого  $n > 1$ .

На рис. 5.13 показана зависимость величины скачка намагниченности  $M$  при фазовом переходе в зависимости от концентрации магнитных атомов для различных координационных чисел решетки  $q$  и числа спиновых состояний  $s$ . Следует отметить, что температура фазового перехода (5.63) сама по себе зависит от концентрации магнитных атомов  $b$ , поэтому для каждой кривой на рис. 5.13 ее различные точки соответствуют разным температурам. Видно, что величина скачка для всех значений параметров монотонно убывает с уменьшением концентрации  $b$  до некоторого ненулевого значения при  $b = b_c$ . При фиксированном  $b$  величина скачка растет с ростом  $s$  при постоянном  $q$  и с ростом  $q$  при постоянном  $s$ . Зависимость величины скачка от координационного числа решетки  $q$  (при одинаковом  $s$ ) слабо выражена для чистого магнетика ( $b = 1$ ), но становится более заметной при  $b < 1$ .

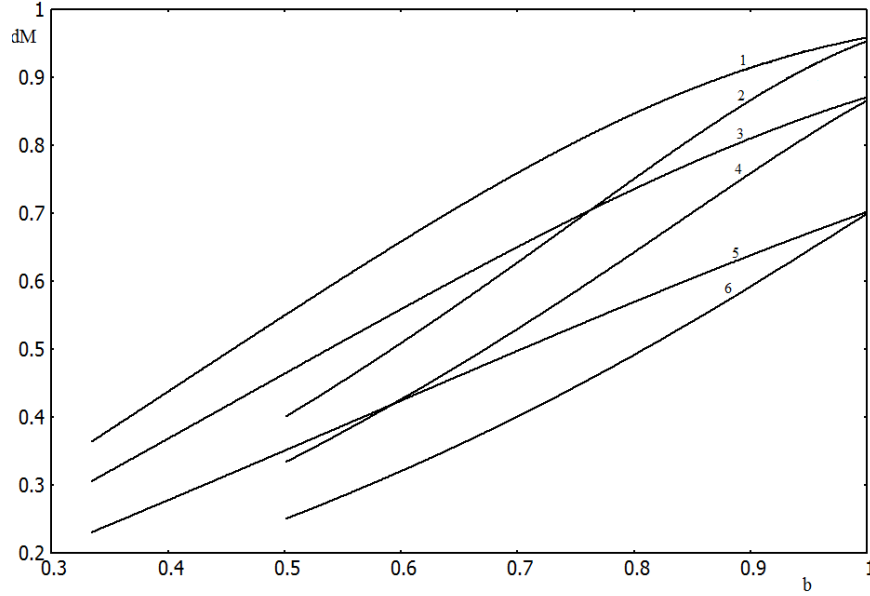


Рис. 5.13 Зависимость от концентрации скачка намагниченности при фазовом переходе в модели Поттса с псевдохаотическими примесями. По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов  $b$ , по вертикальной – величина скачка намагниченности  $dM$ . Кривые 1, 3 и 5 построены для координационного числа  $q = 4$ , а кривые 2, 4 и 6 – для  $q = 3$ . Число состояний  $s = 6$  для кривых 1 и 2,  $s = 4$  для кривых 3 и 4 и  $s = 3$  для кривых 5 и 6.

*Чистый магнетик Поттса.* Если в уравнениях (5.59) – (5.62) положить  $b = 1$ , получим решение модели Поттса для чистого (без примесей) магнетика на решетке Бете. Из (5.59) – (5.62) получим

$$p_1 = \frac{e^h}{e^{h+(s-1)x^q}}, \quad (5.65)$$

$$x = F(K, h, x) = \frac{e^{h+(e^K+s-2)x^{q-1}}}{e^{K+h+(s-1)x^{q-1}}}. \quad (5.66)$$

Значение  $p_1$  определяется корнем уравнения (5.66)  $x(K, h)$ . Поскольку уравнение (5.66) получено предельным переходом из рекуррентного уравнения (5.57), его решение должно быть устойчивым в том смысле, что рекуррентная процедура  $x_n = F(K, h, x_{n-1})$  должна сходиться к решению. То есть, при  $x = x(K, h)$  должно выполняться условие  $\frac{\partial F(K, h, x)}{\partial x} \leq 1$ . Если у уравнения (5.66) существует несколько устойчивых решений, следует выбрать то из них, которое ближе к единице. Анализ (5.66) показывает, что этот критерий выбора корня дает функцию  $x(K, h)$  непрерывную на плоскости  $(K, h)$  всюду, кроме точек некоторой кривой  $h = h_c(K)$ . Эта кривая и является линией фазовых переходов первого рода, поскольку  $p_1 = -\frac{\partial f}{\partial H}$ , где  $f$  – свободная энергия на один узел решетки, а скачек  $x(K, h)$  означает, согласно (5.65), скачек  $p_1$ . Она начинается в точке  $(K_0, 0)$ , где  $K_0$  точка фазового перехода для модели Поттса на решетке Бете без внешнего магнитного поля [46], и заканчивается в точке  $(K_e, h_e)$ , в которой фазовый переход является переходом второго рода.

В соответствии со сказанным выше, для точек линии  $h = h_c(K)$  должны выполняться условия

$$x = F(K, h, x), \quad \frac{\partial F(K, h, x)}{\partial x} = 1.$$

Используя (5.66), получим

$$\begin{aligned} e^h + (e^K + (s-2))x^{q-1} &= xe^{K+h} + (s-1)x^q, \\ (q-1)(e^K + (s-2))x^{q-2} - (q-1)(s-1)x^{q-1} &= e^{K+h} + (s-1)x^{q-1}. \end{aligned}$$

Отсюда

$$x^2 - \left( \frac{(q-2)(e^K+s-2)}{q-1} \frac{1}{s-1} + \frac{q}{q-1} e^{-K} \right) x + \frac{e^K+s-2}{s-1} e^{-K} = 0, \quad (5.67)$$

$$e^h = \frac{(s-1)x^q - (e^K+(s-2))x^{q-1}}{1-xe^K}. \quad (5.68)$$

Начальная точка линии  $(K_0, h_0)$  определяется условием  $h_0 = 0$ . Это приводит к  $x_0 = 1$  и

$$e^{K_0} = \frac{s}{q-2} + 1, \quad (5.69)$$

что совпадает с известным результатом [46] для модели Поттса на решетке Бете в отсутствие внешнего поля. Конечная точка линии  $(K_e, h_e)$  определяется условием исчезновения вещественных корней у квадратного уравнения (5.67). Это условие приводит к

$$e^{K_e} = \frac{1}{2} \left[ -(s-2) + \sqrt{(s-2)^2 + \frac{4q^2(s-1)}{(q-2)^2}} \right], \quad (5.70)$$

$$e^{h_e} = (s-1) \left( \frac{(q-2)(e^{K_e}+s-2)}{q(s-1)} \right)^q, \quad (5.71)$$

а из (5.65) следует, что в точке  $(K_e, h_e)$   $p_1 = 1/2$ . В работе [52] найдена конечная точка линии фазовых переходов первого рода на плоскости  $(K, h)$  для модели Поттса с тремя состояниями на трехмерной кубической решетке  $(K_e, h_e) = (0.54938(2), 0.000775(10))$ . Вычисление по формулам (5.70), (5.71) при  $s = 3$  и  $q = 6$  дает  $(K_e, h_e) = (0.51847, 0.01514)$ . То есть, значение  $K_e$  довольно близко к полученному в [52], но значение  $h_e$  заметно отличается. В более ранней работе [51] положение конечной точки линии фазовых переходов первого рода для модели Поттса с тремя состояниями было найдено в приближении среднего поля. Для кубической решетки было получено  $K_e = 4/9$  и  $h_e = \ln 2 - 2/3 \approx 0,02648$ .

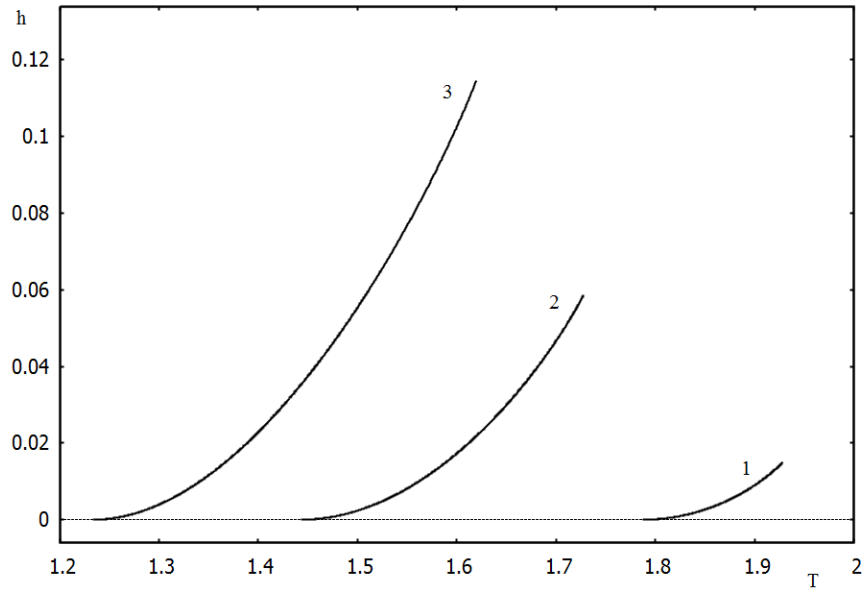


Рис. 5.14. Линии фазовых переходов первого рода для модели Поттса с  $s$  состояниями на решетке Бете с координационным числом  $q = 6$ . Кривая 1 -  $s = 3$ , кривая 2 -  $s = 4$  и кривая 3 -  $s = 5$ . По горизонтальной оси температура  $T = 1/K$ , по вертикальной - внешнее поле  $h$ .

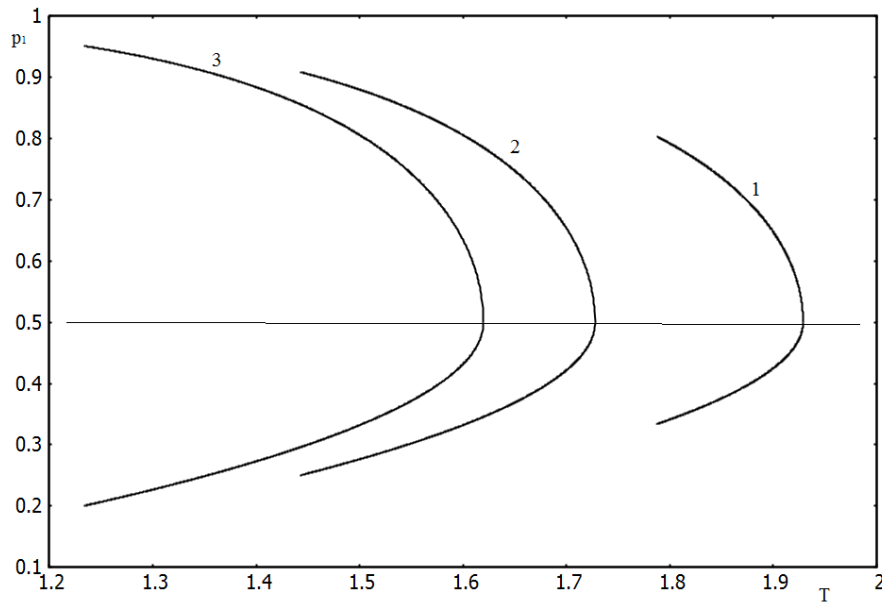


Рис. 5.15. Скачек вероятности  $p_1$  на линиях фазовых переходов в модели Поттса с  $s$  состояниями на решетке Бете с координационным числом  $q = 6$  в зависимости от температуры. Кривая 1 -  $s = 3$ , кривая 2 -  $s = 4$  и кривая 3 -  $s = 5$ . По горизонтальной оси температура  $T = 1/K$ , по вертикальной - вероятность  $p_1$ .

На рисунке 5.14 показаны линии  $h = h_c(T)$  ( $T = 1/K$ ) для  $q = 6$  и  $s = 3, 4, 5$  (кривые 1, 2, 3 соответственно). Видно, что  $T_0$  и  $T_e$  - температуры начальной и конечной точек линии уменьшаются с ростом  $s$ , а величина  $h_e$  растет. (При  $s = 2$ , когда модель Поттса переходит в модель Изинга, вся кривая  $h = h_c(T)$  вырождается в единственную точку фазового перехода второго рода.)

На рисунке 5.15 показаны значения  $p_1$  вблизи линии  $h = h_c(T)$  при  $q = 6$  и  $s = 3, 4, 5$  (кривые 1, 2, 3 соответственно) в зависимости от  $T \in [T_0, T_e]$ . Каждая из кривых имеет две ветви

– нижняя ( $p_1 < 1/2$ ) соответствует  $h = h_c(T) - 0$ , а верхняя ( $p_1 > 1/2$ ) -  $h = h_c(T) + 0$ . Величина скачка  $p_1$  падает от максимального значения при  $T = T_0$  до нуля при  $T = T_e$ .

*Магнетик Поттса с примесями.* Перейдем теперь к рассмотрению влияния немагнитного разбавления на фазовые переходы в модели Поттса в присутствии внешнего поля. Линия фазовых переходов первого рода будет теперь зависеть от концентрации магнитных атомов  $h = h_c(K, b)$ . Для нахождения этой зависимости запишем уравнение (5.62) (используя (5.59)) в виде:

$$(a_2 e^{2h} + a_1 e^h + a_0) e^K = b_2 e^{2h} + b_1 e^h + b_0, \quad (5.72)$$

где

$$\begin{aligned} a_2 &= -(1 + \beta)y + \beta, \quad a_1 = -(s - 1)y^q + y^{q-1} \\ a_0 &= -\beta(s - 1)y^{2q-1} + (1 + \beta)(s - 1)y^{2q-2}, \\ b_2 &= -1, \quad b_1 = -(2\beta(s - 1) + 2s - 3)y^{q-1} + (1 + 2\beta)(s - 1)y^q, \\ b_0 &= -(1 + \beta)(s - 1)(s - 2)y^{2q-2} + ((s - 1)^2 + \beta(s - 1)(s - 2))y^{2q-1}, \\ \beta &= (1 - b)/b. \end{aligned}$$

Поскольку уравнение (5.62) является рекуррентным уравнением [49], его корень должен быть устойчивым в смысле рекуррентной процедуры [3, 6], что приводит к условию  $F'(y) \leq 1$ , где  $F(y)$  - правая часть уравнения (5.62). Следовательно, для нахождения линии фазовых переходов  $h = h_c(K, b)$  нужно решить систему из уравнения (5.72) и условия равенства производных по  $y$  от правой и левой частей (5.72). Для нахождения конечной точки этой линии, к предыдущей системе нужно добавить третье уравнение – равенство вторых производных по  $y$  от правой и левой частей (5.72).

На рисунке 5.16 приведены концентрационные зависимости температуры начальной точки линии фазовых переходов  $T_0(b)$ , вычисленные по формуле (5.63), и конечной ее точки  $T_e(b) = 1/K_e(b)$ . Кривые построены для  $q = 3$  и значений  $s$  равных 3 и 6. Функции  $T_0(b)$  (кривые 2 и 4 на рис. 5.16) начинаются, как это и следует из формулы (5.63), при значении  $b$ , равном  $1/(q - 1)$ , что соответствует перколяционному порогу решетки Бете [8] и монотонно растут с ростом  $b$  до значения, соответствующего неразбавленному магнетику Поттса [46].

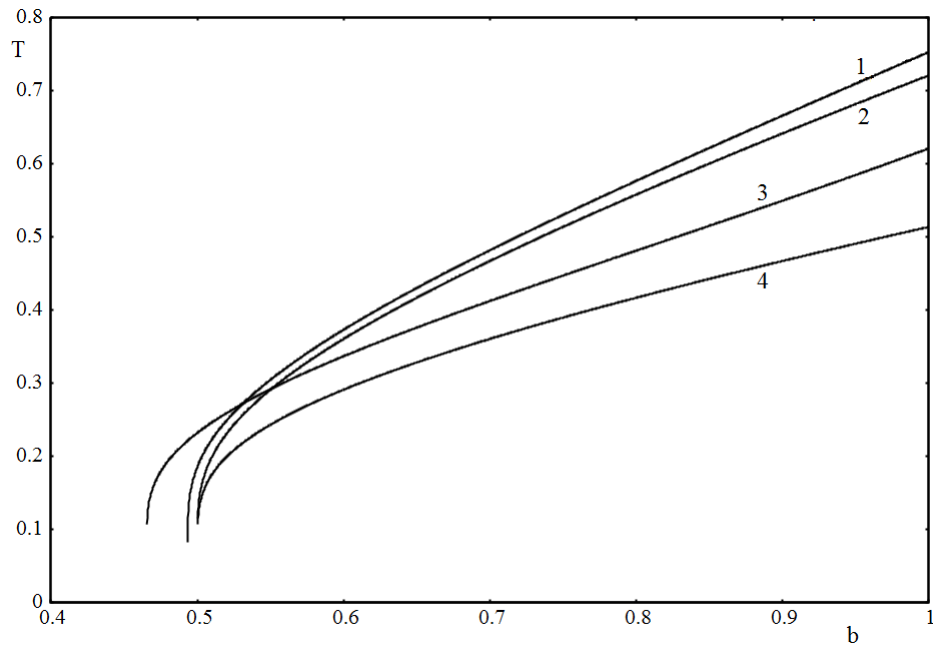


Рис. 5.16. Зависимость температуры начальной  $T_0(b)$  (кривые 2 и 4) и конечной  $T_e(b)$  (кривые 1 и 3) точек линии фазовых переходов от концентрации магнитных атомов при  $q = 3$ . По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов  $b$ , по вертикальной – температура. Кривые 1 и 2 построены для  $s = 3$ , кривые 3 и 4 – для  $s = 6$ .

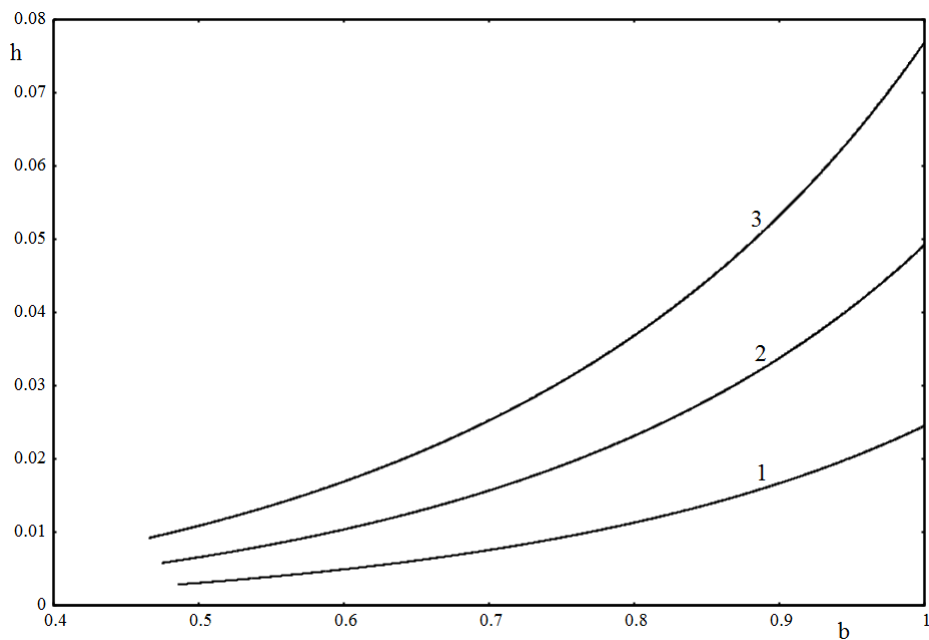


Рис. 5.17. Зависимость  $h_e = H_e/kT$  от концентрации магнитных атомов при  $q = 3$ . По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов  $b$ , по вертикальной –  $h$ . Кривая 1 -  $s = 4$ , кривая 2 -  $s = 5$  и кривая 3 -  $s = 6$ .

Однако, расчет  $T_e(b)$  (кривые 1 и 3 на рис. 5.16) показывает, что эти функции начинаются при некоторых (зависящих от  $s$ ) значениях  $b$ , меньших, чем  $1/(q - 1)$ . Например, при  $q = 3$  и  $s = 3$  кривая  $T_e(b)$  начинается от точки  $b \approx 0,4934$  при пороге протекания  $b_c = 0,5$  (рис. 5.16). Мы полагаем, что такое поведение  $T_e(b)$  связано со свойствами псевдохаотического распределения немагнитных примесей. Условие псевдохаотического распределения (равенство нулю корреляции в расположении примесей для соседних узлов решетки) оставляет атомам при-



меси возможность перемещаться по узлам решетки. В следствие этого, магнитные атомы могут образовать перколяционный кластер даже при концентрациях, меньших порога протекания.

На рис. 5.17 показаны зависимости  $h_e(b) = H_e/kT$  при различных  $s$  и  $q = 3$ . Величина  $h_e(b)$  монотонно растет с ростом  $b$ , достигая максимального значения при  $b = 1$ . При значениях концентрации, соответствующих исчезновению кривой фазовых переходов, величина  $h_e(b)$  стремится к некоторому конечному значению. (Поскольку в этих точках  $T_e(b)$  стремится к нулю,  $H_e(b)$  так же обращается в ноль.)

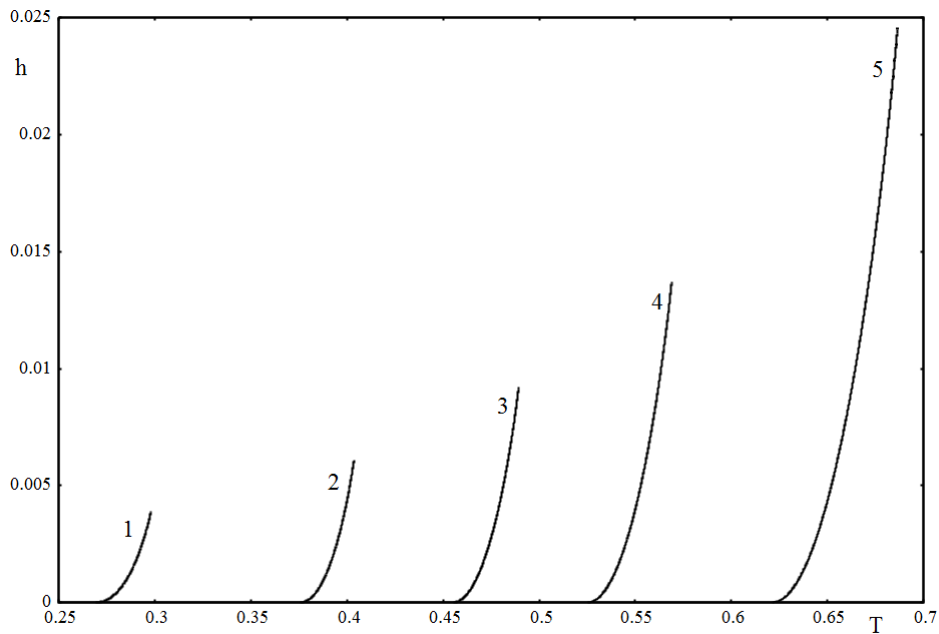


Рис. 5.18. Линии фазовых переходов для  $q = 3$  и  $s = 4$  при различных концентрациях магнитных атомов. По горизонтальной оси – температура  $T$ , по вертикальной –  $h$ . Кривые 1 – 5 соответствуют значениям концентрации магнитных атомов 0,55, 0,65, 0,75, 0,85 и 1.

Рассмотрим теперь влияние немагнитного разбавления на всю линию фазовых переходов в модели Поттса на решетке Бете. Анализируя (5.72) и условие равенства производных по  $u$  от обеих частей этого уравнения, можно показать, что зависимость  $h = h_c(T, b)$  обладает следующими свойствами. Производная  $\partial h_c / \partial T$  равна нулю при  $T = T_0$  для всех  $b > 1/(q - 1)$  и больше нуля при  $T_0 < T \leq T_e$ . Эти особенности зависимости  $h = h_c(T, b)$  проиллюстрированы на рис. 5.18.

## Глава 6. Циклические кластеры и рекурсивные решетки

Для модели Изинга с немагнитным разбавлением не удастся построить точное решение для какой-либо кристаллической решетки. Свойства этой модели исследуются либо численно, либо в том или ином приближении. В приближенных методах, предложенных и исследованных в предыдущих главах работы, рассматривались кластеры различного размера, выделяемые на решетке. Было показано, что если рассматриваемые кластеры не содержат замкнутых путей, полученные с их помощью приближения являются тем или иным обобщенным вариантом приближения Бете, что согласуется с тем, что приближение Бете можно рассматривать как точное решение на решетке без замкнутых путей (дерево Кейли). В настоящей главе будет рассмотрено применение циклических кластеров для анализа свойств модели Изинга разбавленного магнетика, то есть кластеров, содержащих замкнутый путь. С помощью этого метода можно построить приближенные концентрационные зависимости намагниченности, критической температуры и найти приближенные значения порогов протекания по узлам и по связям. Полученные таким путем результаты являются, как показано в параграфе 6.2, более точными, чем получаемые методом Бете или его модификациями.

В параграфе 6.3 методом составления самосогласованных уравнений построен класс приближенных решений задачи Изинга, являющийся обобщением приближения Бете. Показано, что некоторые из приближений этого класса можно интерпретировать как точные решения для модели Изинга на рекурсивных решетках. Для этих рекурсивных решеток найдены точные значения порогов протекания по узлам и связям и показано, что для модели Изинга разбавленного магнетика метод приводит к точным значениям для этих порогов.

В параграфе 6.4 предложена интерпретация приближения Бете, основанная на методе усреднения по локальным обменным полям с учетом корреляции соседних спинов. На основе этой интерпретации построен приближенный метод анализа изинговских магнетиков с немагнитным разбавлением. В рассмотренном приближении вычислены перколяционные пороги и зависимости температуры Кюри от концентрации магнитных атомов для решеток с различными координационными числами.

Как правило, в теоретических исследованиях критического поведения магнетиков используется модель Изинга – модель с максимально простым гамильтонианом. Это объясняется гипотезой универсальности, согласно которой это критическое поведение определяется только симметрией гамильтониана системы и не зависит от его деталей. То есть, одно и то же критическое поведение (например, критические показатели) характерно не для каждого конкретного гамильтониана, а относится к целому классу гамильтонианов с одинаковой симметрией. Однако

гипотеза универсальности сама по себе не содержит способов определения того, к какому классу универсальности принадлежит каждый конкретный гамильтониан. Поэтому, не лишено смысла и рассмотрение более сложных решеточных моделей, таких, как модель Гейзенберга.

В параграфе 6.5 рассмотрена модель Гейзенберга с тремя состояниями на решетке Бете. Задача заключается в нахождении равновесных вероятностей этих состояний при заданной температуре и внешнем поле. Эта задача может быть решена точно с помощью составления системы рекуррентных уравнений, что и проделано в этом параграфе. Однако главная цель заключалась даже не в решении самой задачи для модели Гейзенберга. В отношении модели Изинга известно, что ее решение на решетке Бете может быть интерпретировано как ренорм-групповое преобразование фиксированного масштаба в постоянном эффективном поле. В параграфе 6.5 была исследована возможность аналогичной интерпретации для модели Гейзенберга. Оказалось, что она невозможна для исходной модели Гейзенберга, но оказывается возможной для модели с более общим видом гамильтониана, а модель Гейзенберга получается из него предельным переходом.

В параграфе 6.6 построено самосогласованное приближение для вычисления намагниченности и температуры Кюри в модели Изинга на произвольной решетке, основанное на использовании намагниченности и парной корреляции ближайших соседей. В этом приближении найдены температуры Кюри для простых решеток. Приближение обобщено на случай разбавленных по узлам или связям решеток, для которых найдены приближенные значения порогов протекания.

### 6.1. Метод циклических кластеров в модели Изинга разбавленного магнетика

Для исследования фазовых переходов в нерегулярных спиновых системах часто используется модель Изинга для разбавленного магнетика. [32, 58 - 60]. Эта модель характеризуется гамильтонианом [8]

$$E = - \sum_{(l, l')} \xi_l \xi_{l'} J \sigma_l \sigma_{l'} - H_{ex} \sum_l \xi_l \sigma_l. \quad (6.1)$$

Здесь  $\sigma_l$  - обычные изинговские переменные, определяющие ориентацию магнитного момента атома и принимающие значения +1 и -1;  $J$  - обменный интеграл,  $H_{ex}$  пропорциональна внешнему магнитному полю. Случайная переменная  $\xi_l$  может быть равна 0 и 1, ее среднее значение  $\langle \xi_l \rangle = b_{(s)}$  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 разбавления по узлам, мы будем рассматривать *модель замороженных связей*. В ней считается, что определенная доля  $1 - b_{(b)}$  всех обменных интегралов искусственно исключена. Известно [32], что критическое значение  $K_c$  параметра  $K = J/kT$ , при котором происходит фазовый переход, зависит от концентрации  $b_{(s)}$  в модели с разбавлением по узлам (или  $b_{(b)}$  при разбавлении по связям). При некотором значении  $b_{(s)} = b_{c(s)}$  (или  $b_{(b)} = b_{c(b)}$ )  $K_c$  обращается в бесконечность, то есть в системе отсутствует спонтанная намагниченность при любой температуре. Величины  $b_{c(s)}$  и  $b_{c(b)}$  являются перколяционными порогами по узлам и по связям для решетки, на которой рассматривается модель Изинга с разбавлением. В качестве типичного примера разбавленного магнетика, поведение которого может быть описано моделью Изинга с разбавлением по узлам, можно привести сплав  $Fe_b Zn_{1-b} F_2$  исследованный в работе [61].

Для модели Изинга с немагнитным разбавлением не удастся построить точное решение для какой-либо кристаллической решетки. Свойства этой модели исследуются либо численно [60], либо в том или ином приближении [32, 58, 59, 2, 7, 9]. В приближенных методах [2, 7, 9, 10] рассматривались кластеры различного размера, выделяемые на решетке. Было показано, что если рассматриваемые кластеры не содержат замкнутых путей, полученные с их помощью приближения являются тем или иным обобщенным вариантом приближения Бете, что согласуется с тем, что приближение Бете можно рассматривать как точное решение на решетке без замкнутых путей (дерево Кейли) [6]. Здесь будет рассмотрено применение циклических кластеров для анализа свойств модели Изинга разбавленного магнетика, то есть кластеров, содержащих замкнутый путь. С помощью этого метода можно построить приближенные концентрационные зависимости намагниченности, критической температуры и найти приближенные значения порогов протекания  $b_{c(s)}$  и  $b_{c(b)}$ . Полученные таким путем результаты являются, как будет показано ниже, более точными, чем получаемые методом Бете или его модификациями.

Суть предлагаемого метода заключается в следующем. Рассмотрим вначале модель Изинга без разбавления на некоторой регулярной решетке. Выделим на решетке замкнутую цепочку из  $N$  узлов так, чтобы каждый узел цепочки имел ровно два ближайших соседа, принадлежащих этой цепочке. Взаимодействие между спинами, находящимися в узлах цепочки, будем учитывать точно, а взаимодействие их со всеми остальными спинами заменим кристаллическим полем  $h_N = (q - 2)\mu$ , где  $q$  - координационное число решетки,  $\mu$  - некоторый неизвестный параметр. Теперь можно вычислить среднюю намагниченность на узел цепочки  $M_N(K, \mu)$  как функцию  $K$  и  $\mu$ , а составив самосогласованное уравнение для  $\mu$  (можно предложить несколько способов составления такого уравнения), получим намагниченность как функцию  $K$ . В случае же немагнитного разбавления – по узлам или по связям – циклический кластер разбивается на совокупность фрагментов, а кристаллическое поле уменьшается.

*Циклические кластеры в магнетике без разбавления.* Рассмотрим кластер, состоящий из одного атома, находящегося в кристаллическом поле  $h_1$ . Средняя намагниченность этого атома равна

$$M_1(h_1) = \text{th}(Kh_1 + h_{ex}), \quad (6.2)$$

где  $h_{ex} = H_{ex}/kT$ ,  $K = J/kT$ ,  $k$  - постоянная Больцмана,  $T$  - температура. (Если принять  $h_1 = qt$ , где  $q$  - координационное число решетки,  $t = M_1(h_1)$  - средняя намагниченность атома, то из (6.2) получим известное приближение среднего поля [6].)

Рассмотрим теперь кластер из двух соседних атомов, находящихся в кристаллическом поле  $h_2$ . Средняя намагниченность атома кластера [8]

$$M_2(h_2) = \frac{\text{sh}(2Kh_2 + 2h_{ex})}{\text{ch}(2Kh_2 + 2h_{ex}) + e^{-2K}} \quad (6.3)$$

(Приняв  $h_2 = (q - 1)t$ ,  $t = M_2(h_2)$ , получим несколько улучшенный метод среднего поля.)

Рассмотрим замкнутую цепочку из  $N$  изинговских спинов  $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N$ , находящихся в кристаллическом поле  $h_N$ . Статистическая сумма этой системы имеет следующий вид:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left\{ \sum_{i=1}^N (K\sigma_i \sigma_{i+1} + (Kh_N + h_{ex})\sigma_i) \right\}$$

Здесь  $h_{ex} = H/kT$ ,  $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ . Для вычисления этой статистической суммы рассмотрим трансфер-матрицу [6]

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} e^{K+h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-h} \end{pmatrix}, \quad h = Kh_N + h_{ex}$$

Тогда  $Z = \text{Sp } \mathbf{V}^N$ .

Обозначим  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  собственные числа трансфер-матрицы  $\mathbf{V}$  и запишем статсумму в виде

$$Z = \lambda_1^N + \lambda_2^N, \quad \lambda_{1,2} = e^K \text{ch} h \pm \sqrt{e^{2K} \text{sh}^2 h + e^{-2K}}.$$

Среднее значение спина (намагниченность  $M_N(h_N)$ ) находится так:

$$M_N(h_N) = \frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial h} = \frac{\lambda_1^N - \lambda_2^N}{\lambda_1^N + \lambda_2^N} \frac{e^K \text{sh}(Kh_N + h_{ex})}{\sqrt{e^{2K} \text{sh}^2(Kh_N + h_{ex}) + e^{-2K}}} \quad (6.4)$$

(И для этого случая можно построить улучшенный метод среднего поля, приняв  $h_N = (q - 2)t$  и  $t = M_N(h_N)$ .)

Оказывается, что к более точным результатам приводят не улучшения метода среднего поля, описанные выше, а сопоставление кластеров разного размера между собой. При этом мы не считаем поля  $h_1$ ,  $h_2$  и  $h_N$ , входящие в выражения (6.2) – (6.4), пропорциональными намагниченности  $t$ , но по-прежнему полагаем их попарно пропорциональными. То есть, будем полагать  $h_1 = q\mu$ ,  $h_2 = (q - 1)\mu$ ,  $h_N = (q - 2)\mu$ ,  $\mu$  - некоторый неизвестный параметр.

Сопоставляя теперь друг с другом описанные выше кластеры, получим три варианта самосогласованных уравнений для определения параметра  $\mu$  и намагниченности  $t$

$$m = M_1(h_1) = M_2(h_2), \quad (6.5)$$

$$m = M_1(h_1) = M_N(h_N), \quad (6.6)$$

$$m = M_2(h_2) = M_N(h_N). \quad (6.7)$$

Можно показать [2, 9], что уравнения (6.5) не что иное, как известный метод Бете, являющийся точным решением для модели Изинга на дереве Кейли (глава 3), а уравнения (6.6) и (6.7) приводят, как будет показано ниже, к результатам более точным, чем метод Бете.

Критическое значение параметра  $K = K_c$  находится из условия  $h_{ex} = 0$  и  $\left. \frac{\partial M_i}{\partial \mu} \right|_{\mu=0} = \left. \frac{\partial M_j}{\partial \mu} \right|_{\mu=0}$

Что приводит для уравнения (6.6) к

$$\frac{1-y^N}{1+y^N} \frac{1+y}{1-y} = \frac{q}{q-2}, \text{ где } y = \text{th}K_c, \quad (6.8)$$

а для уравнения (6.7) к

$$\frac{1-y^N}{1+y^N} = \frac{q-1}{q-2} (1-y) \quad (6.9)$$

Значения  $K_c$  для простых решеток, найденные из уравнений (6.8) и (6.9) приведены в табл. 6.1. (В качестве  $N$  брался размер минимального простого цикла для соответствующей решетки.) В этой же таблице приведены точные значения  $K_c$  для этих решеток и  $K_c$  найденные в приближении Бете. Для приближенных значений указано отклонение (в процентах) от соответствующего точного значения.

Таким образом, как видно из табл. 6.1, использование циклических кластеров приводит к более точному определению критической точки по сравнению с приближением Бете, особенно для плоских решеток. Однако улучшение точности представляется не слишком существенным и это, по нашему мнению, связано с тем, что в приближениях (6.6) и (6.7) кристаллические поля, действующие на атомы кластера, считаются одинаковыми.

Решетка	(q,N)	точное значение	приближение Бете	формула (7)	формула (8)
квадратная	(4, 4)	0,441	0,347 (21%)	0,361 (18%)	0,370 (16%)
шестиугольная	(3, 6)	0,658	0,549 (16%)	0,568 (14%)	0,575 (13%)
треугольная	(6, 3)	0,275	0,203 (26%)	0,212 (23%)	0,219 (20%)
кубическая	(6, 4)	0,214	0,203 (5,1%)	0,204 (4,7%)	0,206 (3,7%)
Тетраэдрическая	(4, 6)	0,370	0,347 (6,2%)	0,348 (5,9%)	0,349 (5,7%)

Таблица 6.1: Значения  $K_c = J/kT_c$  ( $T_c$  - температура Кюри) в различных приближениях для простых решеток.

*Циклические кластеры в разбавленном магнетике.* При разбавлении по узлам или связям, цепочка может разбиваться на некоторое количество линейных фрагментов, а кроме того кристаллическое поле  $h_N$  становится пропорциональным концентрации магнитных атомов или связей. Вычислив среднюю на атом намагниченность каждого такого фрагмента, а затем среднюю на узел намагниченность цепочки, получим последнюю как функцию  $K$ ,  $\mu$  и  $b_{(s)}$  (или  $b_{(b)}$ ). Обозначим  $m_i$  среднюю на атом намагниченность не замкнутого осколка цепочки, содержащего  $i \leq N$  магнитных атомов и  $m_N^c$  – намагниченность на атом замкнутой цепочки из  $N$  магнитных атомов. (Очевидно, что для чистого магнетика  $M_N(K, \mu) = m_N^c$ .) Тогда, при разбавлении по узлам

$$M_N(K, \mu, b_{(s)}) = \sum_{l=1}^{N-1} b_{(s)}^l (1 - b_{(s)})^{N-l} \sum_{\{l, N\}} \left( \frac{1}{N} \sum_k i_k m_{i_k} \right) + b_{(s)}^N m_N^c \quad (6.10)$$

Суммы в этом выражении строятся так. Внешняя сумма – это сумма по количеству магнитных атомов в цепочке. Сумма по  $\{l, N\}$  – это сумма по всем возможным способам разместить  $l$  магнитных атомов по  $N$  узлам замкнутой цепочки. Для каждого такого способа эти  $l$  атомов образуют фрагменты, содержащие  $i_1, i_2 \dots$  атомов. Внутренняя сумма – это сумма по этим фрагментам. Аналогично, при разбавлении по связям

$$\begin{aligned} M_N(K, \mu, b_{(b)}) &= \\ &= (1 - b_{(b)})^N m_1 + \sum_{l=1}^{N-1} b_{(b)}^l (1 - b_{(b)})^{N-l} \sum_{\{l, N\}} \left( \frac{1}{N} \sum_k i_k m_{i_k} \right) + b_{(b)}^N m_N^c \end{aligned} \quad (6.11)$$

Неизвестную величину  $\mu$ , входящую в выражения (6.10) и (6.11) можно найти, составив самосогласованное уравнение следующим образом. Рассмотрим некоторый узел решетки. Заменяя действие атомов, находящихся в соседних узлах кристаллическим полем  $h_1$ , найдем среднюю на узел намагниченность

$$M_1(K, \mu, b_{(s)}) = b_{(s)} \text{th}(Kh_1), \quad h_1 = q\mu b_{(s)}, \quad (6.12)$$

для разбавления по узлам, и

$$M_1(K, \mu, b_{(b)}) = \text{th}(Kh_1), \quad h_1 = q\mu b_{(b)} \quad (6.13)$$

для разбавления по связям.

Также рассмотрим кластер из двух соседних узлов, находящихся в кристаллическом поле  $h_2$ . Средняя намагниченность на узел кластера при разбавлении по узлам

$$\begin{aligned} M_2(K, \mu, b_{(s)}) &= 2b_{(s)}(1 - b_{(s)})\text{th}(Kh_2) + b_{(s)}^2 \frac{\text{sh}(2Kh_2)}{\text{ch}(2Kh_2) + e^{-2K}}, \\ h_2 &= (q - 1)\mu b_{(s)} \end{aligned} \quad (6.14)$$

и

$$\begin{aligned} M_2(K, \mu, b_{(b)}) &= (1 - b_{(b)})\text{th}(Kh_2) + b_{(b)} \frac{\text{sh}(2Kh_2)}{\text{ch}(2Kh_2) + e^{-2K}}, \\ h_2 &= (q - 1)\mu b_{(b)} \end{aligned} \quad (6.15)$$

при разбавлении по связям.

Заметим, что если приравнять правые части равенств (6.12) и (6.14) (или (6.13) и (6.15)) получим решение модели для разбавленного изинговского магнетика на решетке Бете с псевдохаотическим распределением примесей [7, 10], глава 4.

Построим теперь самосогласованные уравнения для  $\mu$ , приравнивая правые части равенств (6.10) и (6.12), (6.10) и (6.14) для разбавления по узлам, а также (6.11) и (6.13), (6.11) и (6.15) – для разбавления по связям. Решив эти уравнения, получим зависимости намагниченности от концентрации и температуры в различных приближениях. Оказывается, что ненулевое решение относительно  $\mu$  существуют у всех этих уравнений при условии  $K > K_c$ , причем  $K_c$  определяется из равенства производных по  $\mu$  от правых частей соответствующих равенств при  $\mu = 0$ . Переходя теперь к пределу  $K_c \rightarrow \infty$ , получим уравнения для перколяционных порогов  $b_{c(s)}$  и  $b_{c(b)}$ . Оказывается, что

$$\lim_{K_c \rightarrow \infty} \left. \frac{\partial M_N}{\partial \mu} \right|_{\mu=0} = (-(N-1)b_{(s)}^{N-1} + 2 \frac{b_{(s)} - b_{(s)}^N}{1-b_{(s)}} + 1)(q-2)b_{(s)}^2 \quad (6.16)$$

для равенства (10), и

$$\lim_{K_c \rightarrow \infty} \left. \frac{\partial M_N}{\partial \mu} \right|_{\mu=0} = (-(N-3)b_{(b)}^{N-1} + 2 \frac{b_{(b)} - b_{(b)}^{N-1}}{1-b_{(b)}} + 1)(q-2)b_{(b)} \quad (6.17)$$

для равенства (6.11). Из (6.12) и (6.13) получим

$$\lim_{K_c \rightarrow \infty} \left. \frac{\partial M_1}{\partial \mu} \right|_{\mu=0} = qb_{(s)}^2, \quad \lim_{K_c \rightarrow \infty} \left. \frac{\partial M_1}{\partial \mu} \right|_{\mu=0} = qb_{(b)}, \quad (6.18)$$

а из (6.14) и (6.15):

$$\begin{aligned} \lim_{K_c \rightarrow \infty} \left. \frac{\partial M_2}{\partial \mu} \right|_{\mu=0} &= (q-1)b_{(s)}^2(1+b_{(s)}), \\ \lim_{K_c \rightarrow \infty} \left. \frac{\partial M_1}{\partial \mu} \right|_{\mu=0} &= (q-1)(1+b_{(b)})b_{(b)}. \end{aligned} \quad (6.19)$$

Результаты вычислений порогов протекания по узлам и связям представлены в табл. 6.2. Перколяционные пороги в столбцах «(1-N)» и «(2-N)» получены приравниванием правых частей (6.16) – (6.17) и (6.18) и (6.19) соответственно.

Решетка	(q,N)	точное значение $b_{c(s)}$	точное значение $b_{c(b)}$	$b_{c(s)}$ (1-N)	$b_{c(b)}$ (1-N)	$b_{c(s)}$ (2-N)	$b_{c(b)}$ (2-N)
квадратная	(4, 4)	0,590	0,500	0,382	0,354	0,427	0,368
шестиугольная	(3, 6)	0,700	0,653	0,538	0,522	0,558	0,532



треугольная	(6, 3)	0,500	0,347	0,250	0,214	0,333	0,227
кубическая	(6, 4)	0,310	0,250	0,210	0,203	0,219	0,205
тетраэдри- ческая	(4, 6)	0,430	0,390	0,339	0,336	0,343	0,337
К.О.Ц.	(8, 6)	0,240	0,180	0,143	0,144	0,150	0,144

Таблица 6.2: Значения перколяционных порогов по узлам и связям в различных приближениях для простых решеток.

Таким образом, использование циклических кластеров позволяет различить задачи протекания по узлам и по связям (в отличие от приближения Бете) и дает удовлетворительное согласование с известными точными значениями порогов протекания (табл. 6.2). В результате проведенного анализа, приходим к следующим выводам.

1. Использование циклических кластеров для приближенного расчета критической температуры  $T_c = 1/K_c$  в модели Изинга неразбавленного магнетика приводит к несколько более точному результату, по сравнению с методом Бете (табл. 6.1).

2. Применение циклических кластеров к модели Изинга для магнетика с немагнитным разбавлением приводит к различным результатам для разбавления по узлам и связям; в частности пороги протекания для этих видов разбавления различны (табл. 6.2).

3. Приближенные значения порогов протекания для простых решеток, вычисленные с использованием циклических кластеров, ближе к истинным значениям, чем те, что получены для решетки Бете (табл. 6.2).

## 6.2. Модель Изинга с немагнитным разбавлением на рекурсивных решетках

В этом параграфе будет построен класс самосогласованных уравнений, которые могут служить для приближенного решения модели Изинга на различных кристаллических решетках. Частным (и простейшим) примером уравнений этого класса является известное приближение Бете [6], в связи с чем, этот класс самосогласованных уравнений можно рассматривать как обобщение приближения Бете. Как известно [6], приближение Бете можно интерпретировать как замену реальной кристаллической решетки так называемой решеткой Бете, являющейся внутренней частью дерева Кейли [6]. Подобно этому решения некоторых из предлагаемых здесь самосогласованных уравнений могут быть интерпретированы как точные решения задачи Изинга на особым образом построенных рекурсивных решетках, что и будет показано ниже. Кроме того, этот метод будет распространен на модель Изинга с немагнитным разбавлением по узлам или связям. Будет показано, что в тех случаях, когда для чистого магнетика метод дает

точное решение на рекурсивной решетке, его обобщение на разбавленный магнетик приводит к точному значению порога протекания для этой решетки.

Итак, рассмотрим некоторую простую кристаллическую решетку с координационным числом  $q$ , в узлах которой находятся изинговские спины  $\sigma = \pm 1$ , а обменное взаимодействие не равно нулю только для соседних спинов. (Метод можно обобщить на случай, когда решетка не является простой, но это обобщение выходит за рамки данной работы.) Средний магнитный момент (намагниченность) узла этой решетки будем искать в виде

$$M_1(h_1) = \text{th}(Kh_1 + h_e),$$

где  $K = J/kT$  ( $J$  - обменный интеграл,  $k$  - постоянная Больцмана,  $T$  - температура),  $h_e = H_e/kT$ ;  $H_e$  - внешнее поле.  $h_1$  в этом выражении имеет смысл «эффективного обменного поля», создаваемого соседними спинами.

Рассмотрим теперь на решетке кластер из двух соседних атомов (димер). Полагая, что оба атома димера находятся в эффективном обменном поле  $h_2$ , найдем среднюю намагниченность атома димера

$$M_2(h_2) = \frac{\text{sh}(2Kh_2 + 2h_{ex})}{\text{ch}(2Kh_2 + 2h_{ex}) + e^{-2K}}$$

Если теперь принять  $h_2 = \frac{q-1}{q} h_1$  (на том основании, что у каждого атома димера  $q - 1$  внешних соседей), то равенство  $M_1(h_1) = M_2(h_2)$  будет представлять собой самосогласованное уравнение, решение которого и есть приближение Бете [62].

Выделим теперь на решетке замкнутую цепочку из  $N$  узлов минимальной возможной длины (зависящей от вида решетки). Полагая, что каждый атом цепочки находится в эффективном поле  $h_N$ , найдем намагниченность атома этого циклического кластера (параграф 6.2):

$$M_N(h_N) = \frac{\lambda_1^N - \lambda_2^N}{\lambda_1^N + \lambda_2^N} \frac{e^K \text{sh}(Kh_N + h_e)}{\sqrt{e^{2K} \text{sh}^2(Kh_N + h_e) + e^{-2K}}}$$

$$\lambda_{1,2} = e^K \text{ch}(Kh_N + h_e) \pm \sqrt{e^{2K} \text{sh}^2(Kh_N + h_e) + e^{-2K}}$$

Полагая теперь  $h_N = \frac{q-2}{q} h_1$ , можно составить самосогласованное уравнение

$$M_1(h_1) = M_N(h_N) \tag{6.20}$$

Покажем теперь, что полученное уравнение при четных значениях  $q$  дает точное решение задачи Изинга для рекурсивной решетки, построенной следующим образом. Возьмем  $N$  узлов и связей, образующих замкнутый  $N$  - угольник. От каждой вершины этого  $N$  - угольника построим  $L$  таких же не пересекающихся между собой  $N$  - угольников. Повторяя это построение для каждой вершины новых  $N$  - угольников, получим рекуррентную решетку, являющуюся бесконечным кактусом (кактусом Хусими) [76]. Координационное число такой решетки  $q = 2L + 2$ .

Поместим в узлы этой решетки изинговские спины  $\sigma_i$  и будем полагать, что соседние спины взаимодействуют между собой с энергией  $-J\sigma_1\sigma_2$ , а кроме того вся система находится во внешнем поле  $H_{ex}$ . Найдем намагниченность - среднее значение каждого такого спина. Это можно сделать следующим способом. Рассмотрим отдельный узел решетки, содержащий спин  $\sigma$ . Этот узел является общей вершиной  $L + 1$   $N$  – угольников, образующих  $L + 1$  не пересекающихся ветвей с корневой точкой  $\sigma$ . Обозначив  $s_i$  совокупность спинов (кроме  $\sigma$ )  $i$ -ой ветки, представим статистическую сумму системы в виде:

$$Z = \sum_{\sigma, s_1, \dots, s_{L+1}} e^{\sigma h_{ex}} \Omega(\sigma, s_1) \dots \Omega(\sigma, s_{L+1}),$$

где  $\Omega(\sigma, s_i)$  – множитель, зависящий только от  $\sigma$  и совокупности спинов  $s_i$ . Обозначим  $g(\sigma) = \sum_s \Omega(\sigma, s)$  (в силу симметрии эта величина одинакова для всех ветвей, то есть не зависит от  $i$ ). Тогда статистическая сумма

$$Z = e^{h_{ex}} g^{L+1}(+1) + e^{-h_{ex}} g^{L+1}(-1),$$

а средняя намагниченность спина  $\sigma$

$$m_1 = \frac{e^{h_{ex}} g^{L+1}(+1) - e^{-h_{ex}} g^{L+1}(-1)}{e^{h_{ex}} g^{L+1}(+1) + e^{-h_{ex}} g^{L+1}(-1)} = \frac{e^{h_{ex} - x^{L+1}} e^{-h_{ex}}}{e^{h_{ex} + x^{L+1}} e^{-h_{ex}}},$$

где  $x = g(-1)/g(+1)$ . Если обозначить  $h_1 = -\frac{L+1}{2K} \ln x$ , то выражение для намагниченности  $m_1$  принимает вид

$$m_1 = \text{th}(Kh_1 + h_{ex})$$

Рассмотрим теперь один из  $N$  – угольников рекуррентной решетки. Каждая вершина этого  $N$  – угольника является корневой точкой  $L$  не пересекающихся ветвей, таких же, как и рассмотренные выше. Поэтому статистическую сумму можно представить как

$$Z = (g(+1)x^{1/2})^{NL} \sum_{\sigma_i} e^{K \sum \sigma_i \sigma_{i+1} + (Kh_N + h_{ex}) \sum \sigma_i},$$

где  $h_N = -\frac{L}{2K} \ln x$ . Вычислив эту статистическую сумму, найдем среднее значение  $m_N = \langle \sum \sigma_i / N \rangle$ :

$$m_N = \frac{\lambda_1^N - \lambda_2^N}{\lambda_1^N + \lambda_2^N} \frac{e^K \text{sh}(Kh_N + h_{ex})}{\sqrt{e^{2K} \text{sh}^2(Kh_N + h_{ex}) + e^{-2K}}}$$

Приравнявая теперь  $m_1$  и  $m_N$  и учитывая, что  $h_N = \frac{L}{L+1} h_1 = \frac{q-2}{q} h_1$ , получим уравнение, в точности совпадающее с приведенным выше самосогласованным уравнением (6.20). То есть, точно так же, как приближение Бете можно интерпретировать как замену кристаллической решетки деревом Кейли с тем же координационным числом, приближение основанное на уравнении (6.20) для четных  $q$  можно понимать как замену исходной решетки на описанную выше рекуррентную решетку с соответствующим значением  $L$ .

Эти два примера (решетка Бете и рекурсивная решетка из  $N$  – угольников) подсказывают следующее обобщение. Рассмотрим рекурсивную решетку, построенную из одинаковых кла-

стеров. Например, можно взять кубический кластер – узлы, являющиеся вершинами куба со связями вдоль ребер этого куба или замкнутый  $N$  – угольник с одним или несколькими внутренними узлами, связанными со всеми  $N$  вершинами, такие, например, как в работах [77, 78]. Рекурсивная решетка строится из этих кластеров так же, как и решетка из  $N$  – угольников, т.е. присоединением к каждой внешней вершине кластера  $L$  таких же кластеров и т.д. Тогда каждый внешний узел любого кластера в бесконечной рекурсивной решетке можно, с одной стороны, рассматривать как корневую точку для  $L + 1$  одинаковых ветвей, а с другой стороны, рассматривая этот узел в составе кластера, считать его корневой точкой для  $L$  таких же ветвей. Поэтому, если поместить в узлы этой рекурсивной решетки изинговские спины, среднюю намагниченность внешнего узла можно вычислить как

$$m_1 = \text{th}(Kh_1 + h_{ex})$$

где  $h_1 = -\frac{L+1}{2K} \ln x$ ,  $x = g(-1)/g(+1)$ ,  $g(\pm 1)$  - множители статистической суммы, связанные со спинами одной из  $L + 1$  ветвей. А с другой стороны, вычисляя намагниченность  $m_N$  этого узла как узла принадлежащего кластеру ее можно выразить как функцию  $h_N = -\frac{L}{2K} \ln x$ . Следовательно, решив относительно  $x$  уравнение  $m_1 = m_N$ , получим точное решение задачи Изинга на рекурсивной решетке. Однако на уравнение  $m_1 = m_N$  можно смотреть так же, как на уравнение (6.20), то есть как на самосогласованное уравнение, в котором  $h_1$  и  $h_N$  являются эффективными обменными полями. Эти поля связаны соотношением  $h_N = \frac{q-q'}{q} h_1$ , где  $q'$  - число связей внешнего атома кластера с другими атомами этого же кластера,  $q = q'(L + 1)$  координационное число. Самосогласованное уравнение  $m_1 = m_N$  можно рассматривать для любого  $q > q'$ , но если условие  $q = q'(L + 1)$  не выполнено, решение этого уравнения уже нельзя интерпретировать как точное решение для модели Изинга на рекурсивной решетке.

На описанных выше рекурсивных решетках из  $N$  – угольников можно сформулировать задачу протекания. Предположим, что каждый узел решетки случайно и независимо от других узлов «вырезается» с вероятностью  $1 - b$ , т.е. обрезаются все выходящие из этого узла связи, а с вероятностью  $b$  остается неизменным. Невырезанные узлы решетки принадлежат различного размера кластерам. При малых значениях  $b$  каждый такой кластер содержит конечное число узлов, а если  $b$  достаточно велико, существует кластер, содержащий бесконечно много узлов. Минимальное значение  $b$ , при котором существует бесконечный кластер, является порогом протекания или перколяционным порогом по узлам  $b_s$ . Если же с вероятностью  $1 - b$  обрезаются каждая отдельная связь, то минимальное значение  $b$ , при котором существует бесконечный кластер, будет порогом протекания по связям  $b_b$ .

Найдем пороги протекания по узлам и связям для рекуррентных решеток, построенных описанным выше способом. Пусть  $x$  - вероятность того, что ветвь кластера с не вырезанной начальной вершиной конечна. Уравнение для  $x$  можно получить следующим простым рассуждением. Ветвь будет конечна в четырех взаимоисключающих случаях:

- 1) соседние с начальной вершиной узлы вырезаны – вероятность этого  $(1 - b)^2$ ;
- 2) присутствуют все узлы  $N$  – угольника, но все выходящие из них ветви конечны – вероятность этого  $b^{N-1}x^{(N-1)L}$ ;
- 3) отсутствует одна из вершин  $N$  – угольника, а ветви, выходящие из остальных вершин конечны – вероятность этого  $(N - 1)(1 - b)b^{N-2}x^{(N-2)L}$ ;
- 4) отсутствуют две вершины  $N$  – угольника, а ветви, выходящие из вершин, связанных с начальной конечны - вероятность этого  $(1 - b)^2 \sum_{k=1}^{N-3} (k + 1)b^k x^{kL}$ ;

Складывая эти вероятности, получим уравнение для  $x$

$$x = (1 - b)^2 + (1 - b)^2 \sum_{k=1}^{N-3} (k + 1)b^k x^{kL} + (N - 1)(1 - b)b^{N-2}x^{(N-2)L} + b^{N-1}x^{(N-1)L}$$

У этого уравнения при любом  $b$  есть решение  $x = 1$ . Обозначим правую часть этого уравнения  $F(x)$ . Поскольку  $F(0) = (1 - b)^2 > 0$ , у  $x = F(x)$  есть нетривиальное решение в интервале  $(0, 1)$  при условии  $F'(1) \geq 1$ . Следовательно, перколяционный порог  $b_s$  должен удовлетворять уравнению  $F'(1) = 1$ , т.е.

$$(1 - b_s)^2 \sum_{k=1}^{N-3} k(k + 1)b_s^k + (N - 1)(N - 2)(1 - b_s)b_s^{N-2} + (N - 1)b_s^{N-1} = 1/L,$$

что преобразуется к виду

$$(N - 3)b_s^{N-1} - 2 \sum_{i=1}^{N-2} b_s^i + \frac{1}{L} = 0 \quad (6.21)$$

Аналогично, для порога протекания по связям получим

$$(N - 1)b_b^N - 2 \sum_{i=1}^{N-1} b_b^i + \frac{1}{L} = 0 \quad (6.22)$$

Рассмотрим теперь модель Изинга с немагнитным разбавлением на некоторой решетке. Возьмем на решетке замкнутую цепочку из  $N$  узлов. При разбавлении по узлам или связям, цепочка может разбиваться на некоторое количество линейных фрагментов. Вычислив среднюю на атом намагниченность каждого такого фрагмента, а затем среднюю на узел намагниченность цепочки, получим последнюю как функцию  $K$ ,  $h_N$  и  $b$ . Обозначим  $m_i$  среднюю на атом намагниченность не замкнутого осколка цепочки, содержащего  $i \leq N$  магнитных атомов и  $m_N^c$  – намагниченность на атом замкнутой цепочки из  $N$  магнитных атомов. (Очевидно, что для чистого магнетика  $M_N(K) = m_N^c$ .) Тогда, при разбавлении по узлам

$$M_N(K, b) = \sum_{l=1}^{N-1} b^l (1 - b)^{N-l} \sum_{\{l, N\}} \left( \frac{1}{N} \sum_k i_k m_{i_k} \right) + b^N m_N^c \quad (6.23)$$

Суммы в этом выражении строятся так. Внешняя сумма – это сумма по количеству магнитных атомов в цепочке. Сумма по  $\{l, N\}$  – это сумма по всем возможным способам разместить  $l$  магнитных атомов по  $N$  узлам замкнутой цепочки. Для каждого такого способа эти  $l$  атомов образуют фрагменты, содержащие  $i_1, i_2 \dots$  атомов. Внутренняя сумма – это сумма по этим фрагментам. Аналогично, при разбавлении по связям

$$M_N(K, b) = (1 - b)^N m_1 + \sum_{l=1}^{N-1} b^l (1 - b)^{N-l} \sum_{\{l, N\}} \left( \frac{1}{N} \sum_k i_k m_{i_k} \right) + b^N m_N^c \quad (6.24)$$

Неизвестную величину  $h_N$ , входящую в выражения для  $m_N$  можно найти, составив самосогласованное уравнение следующим образом. Рассмотрим некоторый узел решетки. Заменяя действие атомов, находящихся в соседних узлах кристаллическим полем  $h_1$ , найдем среднюю на узел намагниченность

$$M_1(K, b) = b \operatorname{th}(Kh_1), \quad (6.25)$$

для разбавления по узлам, и

$$M_1(K, b) = \operatorname{th}(Kh_1), \quad (6.26)$$

для разбавления по связям.

Также рассмотрим кластер из двух соседних узлов, находящихся в кристаллическом поле  $h_2$ . Средняя намагниченность на узел кластера при разбавлении по узлам

$$M_2(K, b) = 2b(1 - b) \operatorname{th}(Kh_2) + b^2 \frac{\operatorname{sh}(2Kh_2)}{\operatorname{ch}(2Kh_2) + e^{-2K}}, \quad (6.27)$$

и

$$M_2(K, b) = (1 - b) \operatorname{th}(Kh_2) + b \frac{\operatorname{sh}(2Kh_2)}{\operatorname{ch}(2Kh_2) + e^{-2K}}, \quad (6.28)$$

при разбавлении по связям.

Заметим, что если приравнять правые части равенств (6.25) и (6.27) (или (6.26) и (6.28)) при дополнительном условии  $h_2 = \frac{q-1}{q} h_1$  получим решение модели для разбавленного изинговского магнетика на решетке Бете с псевдохаотическим распределением примесей [7, 10].

Построим теперь самосогласованные уравнения приравнивая правые части равенств (6.23) и (6.25), для разбавления по узлам, а также (6.24) и (6.26) для разбавления по связям при условии  $h_N = \frac{q-2}{q} h_1$ . Решив эти уравнения, получим зависимости намагниченности от концентрации и температуры в различных приближениях. Оказывается, что ненулевые решения относительно  $h_N$  существуют у всех этих уравнений при условии  $K > K_c$ , причем  $K_c$  определяется из равенства производных по  $h_N$  от правых частей соответствующих равенств при  $h_N = 0$ . Переходя теперь к пределу  $K_c \rightarrow \infty$ , получим уравнения для перколяционных порогов  $b_s$  и  $b_b$ . Оказывается, что

$$(N - 3)b_s^{N-1} - 2 \sum_{i=1}^{N-2} b_s^i + \frac{2}{q-2} = 0 \quad \text{и}$$

$$(N - 1)b_b^N - 2 \sum_{i=1}^{N-1} b_b^i + \frac{2}{q-2} = 0$$

Видно, что при  $q = 2L + 2$  эти уравнения совпадают с уравнениями (6.21) и (6.22).

### 6.3. Приближение Бете для чистого и разбавленного магнетиков как усреднение по локальным обменным полям

Классическая интерпретация приближения Бете заключается в точном учете обменного взаимодействия некоторого атома решетки с его ближайшими соседями. Взаимодействие с остальными атомами решетки учитывается посредством введения эффективного поля, величина которого определяется из условия равенства средней намагниченности центрального атома и его соседа [8]. Кроме того, приближение Бете для модели Изинга можно интерпретировать как точное решение задачи на решетке Бете [6]. И, как показано в главе 3, приближение Бете может быть интерпретировано как ренормгрупповое преобразование фиксированного масштаба, примененное к определенным образом построенным кластерам [62]. Различные интерпретации метода Бете, эквивалентные для чистого (без немагнитных примесей) магнетика, при обобщении их на случай разбавленного магнетика, приводят к различным способам расчета намагниченности и критической температуры как функций концентрации магнитных атомов.

Поэтому здесь предлагается еще одна возможная интерпретация метода Бете, построенная с помощью усреднения по функциям распределения обменных полей. Вначале она будет построена для чистого изинговского магнетика, а затем обобщена на магнетик с немагнитными примесями. С помощью этого приближения будут вычислены концентрационные зависимости намагниченности, температуры Кюри и найдены приближенные значения порогов протекания для решеток с различными координационными числами.

В работе [1] предложен метод усреднения по полям взаимодействия, с помощью которого можно находить критические точки и макроскопические параметры в различных системах взаимодействующих частиц. Этот метод в применении к модели Изинга основывается на использовании полученной в [5] формулы

$$\langle \sigma_i \rangle = \langle \text{th} \beta H_i \rangle, \quad (6.29)$$

где  $\beta = 1/kT$ ,  $k$  - постоянная Больцмана,  $T$  температура,  $H_i = \sum_j J_{ij} \sigma_j + H_{ex}$ , сумма обменного  $H_{in} = \sum_j J_{ij} \sigma_j$  и внешнего  $H_{ex}$  полей, а  $\langle \dots \rangle$  - усреднение по ансамблю, которое, в сущности, является усреднением по функции распределения полей  $H_i$ . Обменные интегралы  $J_{ij}$  будем считать равными  $J$  для ближайших соседей и нулю для остальных пар атомов.

Рассмотрим функцию распределения  $W(h)$  для поля обменного взаимодействия  $h = H_{in}/J$ , действующего на некоторый спин  $\sigma_0$ . Эту функцию всегда можно представить в виде

$$W(h) = \frac{1+m}{2} W_1(h) + \frac{1-m}{2} W_2(h) \quad (6.30)$$

где  $W_1(h)$  и  $W_2(h)$  условные функции распределения для значений  $\sigma_0$  равных  $+1$  и  $-1$  соответственно. Среднее значение  $\langle h \rangle$ , равное  $qm$ , с помощью (6.30), можно представить в виде:

$$qm = \frac{1+m}{2} \langle h \rangle_1 + \frac{1-m}{2} \langle h \rangle_2$$

$\langle h \rangle_{1,2}$  - средние значения, вычисленные по функциям  $W_{1,2}(h)$ . Вводя величины  $\mu_{1,2} = \langle h \rangle_{1,2}/q$ , запишем предыдущее равенство в виде

$$2m = (1+m)\mu_1 + (1-m)\mu_2 \quad (6.31)$$

Величины  $(1 \pm \mu_{1,2})/2$  есть вероятности того, что спин, являющийся соседом положительно (отрицательно) ориентированного спина, сам направлен положительно (отрицательно). Вычислим среднее значение  $V$  произведения двух соседних спинов  $\sigma$  и  $\sigma'$ :

$$V = \langle \sigma \sigma' \rangle = \frac{1+m}{2} \left( \frac{1+\mu_1}{2} - \frac{1-\mu_1}{2} \right) + \frac{1-m}{2} \left( \frac{1-\mu_2}{2} - \frac{1+\mu_2}{2} \right),$$

что можно переписать в виде

$$2V = (1+m)\mu_1 - (1-m)\mu_2. \quad (6.32)$$

Из (6.31) и (6.32) легко выразить  $\mu_1$  и  $\mu_2$  через  $m$  и  $V$ :

$$\mu_1 = \frac{m+V}{1+m}, \quad \mu_2 = \frac{m-V}{1-m} \quad (6.33)$$

Выражение (6.29), полученное в работе [5], является частным случаем формулы (полученной в той же работе):

$$\langle f \sigma_0 \rangle = \langle f \text{th}(Kh + h_{ex}) \rangle$$

где  $f$  - произвольная функция любых спинов, кроме  $\sigma_0$ . Взяв  $f = h$ , получим

$$\langle h \sigma_0 \rangle = qV = \langle h \text{th}(Kh + h_{ex}) \rangle. \quad (6.34)$$

Используя функцию распределения (6.30), из (6.29) и (6.34) получим:

$$m = \frac{1+m}{2} \langle \text{th}(Kh + h_{ex}) \rangle_1 + \frac{1-m}{2} \langle \text{th}(Kh + h_{ex}) \rangle_2 \quad \text{и} \quad (6.35)$$

$$qV = \frac{1+m}{2} \langle h \text{th}(Kh + h_{ex}) \rangle_1 + \frac{1-m}{2} \langle h \text{th}(Kh + h_{ex}) \rangle_2. \quad (6.36)$$

Уравнения (6.33), (6.35) и (6.36) могут использоваться для построения приближенных методов определения величин  $m$  и  $V$ , если задать тот или иной приближенный вид функций распределения  $W_1(h)$  и  $W_2(h)$ . Оказывается, некоторые известные приближенные методы могут быть получены из системы (6.35), (6.36) при соответствующем выборе функций  $W_1(h)$  и  $W_2(h)$ . Например, если положить  $W_{1,2}(h) = \delta(h - q\mu_{1,2})$ , где  $\delta$  - дельта-функция, получим известный метод среднего поля, т.е.  $m = \text{th}(qKm + h_{ex})$ ,  $V = m^2$ . Если же в (6.33) принять  $V = m^2$  (то есть, пренебречь корреляцией между спином и его ближайшими соседями), то получим  $\mu_1 =$



$\mu_2 = m$ . Если, кроме того, положить  $W_1(h) = W_2(h) = W(h)$  и в качестве  $W(h)$  взять биномиальное распределение с параметром  $(1 + m)/2$ , получим уравнение для определения намагниченности  $m$  по методу усреднения по обменным полям [1].

Когда в качестве  $W_1(h)$  и  $W_2(h)$  берутся биномиальные распределения с параметрами  $(1 + \mu_1)/2$  и  $(1 + \mu_2)/2$  соответственно:

$$W_{1,2}(h) = \sum_{i=0}^q C_q^i \left(\frac{1+\mu_{1,2}}{2}\right)^i \left(\frac{1-\mu_{1,2}}{2}\right)^{q-i} \delta(h - (2i - q)), \quad (6.37)$$

где  $C_q^i$  - биномиальные коэффициенты, получается известное приближение Бете. Используя (6.37) для вычисления средних в (6.35) и (6.36) и выразив  $\mu_{1,2}$  через  $m$  и  $V$  с помощью (6.33), получим систему двух уравнений для определения двух неизвестных величин  $m$  и  $V$ .

$$m = \sum_{n=0}^q F_{q,n}(m, V) \text{th}((2n - q)K + h_{ex}) \quad (6.38)$$

$$qV = \sum_{n=0}^q F_{q,n}(m, V) (2n - q) \text{th}((2n - q)K + h_{ex}) \quad (6.39)$$

где

$$F_{q,n}(m, V) = C_q^n \left[ \frac{1+m}{2} \left(\frac{1+\mu_1}{2}\right)^n \left(\frac{1-\mu_1}{2}\right)^{q-n} + \frac{1-m}{2} \left(\frac{1+\mu_2}{2}\right)^n \left(\frac{1-\mu_2}{2}\right)^{q-n} \right]$$

Если  $h_{ex} = 0$ , то

$$m = \sum_{n=0}^{\lfloor \frac{q-1}{2} \rfloor} (F_{q,q-n}(m, V) - F_{q,n}(m, V)) \text{th}((q - 2n)K) \quad (6.40)$$

$$qV = \sum_{n=0}^{\lfloor \frac{q-1}{2} \rfloor} (F_{q,q-n}(m, V) + F_{q,n}(m, V)) (q - 2n) \text{th}((q - 2n)K) \quad (6.41)$$

Легко убедиться аналитически, что намагниченность  $m(K, h_{ex})$ , получаемая из системы уравнений (6.38)-(6.39) для  $q = 2$  совпадает с известным решением для одномерной цепочки спинов [6], которая есть частный случай решетки Бете (глава 2). И хотя не удается получить аналитическое доказательство равенства решения системы (6.38)-(6.39) и намагниченности, рассчитанной в приближении Бете для произвольного  $q$ , это равенство было проверено численно для  $q = 3$  и  $q = 4$ . Во всех случаях получено совпадение решения (6.38)-(6.39) с приближением Бете, поэтому, можно предположить, что это решение и есть приближение Бете для произвольного  $q$ .

Уравнение для температуры Кюри  $T_c = 1/K_c$  получим из (6.40)-(6.41) следующим образом. Уравнение (6.40) дифференцируем по  $m$  и полагаем  $m = 0$  в этой производной и в уравнении (6.41). Можно убедиться, что полученные уравнения совпадают при  $V = 1/(q - 1)$  и приводят к следующему условию

$$\sum_{n=0}^{\lfloor \frac{q-1}{2} \rfloor} A_q^n \text{th}((q - 2n)K_c) = 1, \quad (6.42)$$

где

$$A_q^n = \frac{C_q^n (q-2n) (q^n (q-2)^{q-n} + q^{q-n} (q-2)^n)}{2^q q (q-1)^{q-1}} \quad (6.43)$$

В приближении Бете  $K_c = \frac{1}{2} \ln \frac{q}{q-2}$  [8]. Можно показать, что подстановка этого значения  $K_c$  в уравнение (6.42) приводит к тождественному равенству.

*Разбавленный магнетик.* Возможны различные варианты обобщения рассматриваемого приближения на разбавленный магнетик. Ниже будет исследован один из таких вариантов. Рассмотрим магнетик с разбавлением по связям. Пусть  $h = \sum \sigma_i$  сумма по соседям, связанным с  $\sigma_0$  неразорванными связями, а  $h' = \sum \sigma_i$  сумма по всем  $q$  соседям  $\sigma_0$ , в том числе и по тем, связи с которыми разорваны. Очевидно, что для чистого, не разбавленного магнетика  $h = h'$  для любого атома. Пусть  $W_1(h)$  функция распределения по полям  $h$ , а  $W_2(h, h')$  совместная функция распределения полей  $h$  и  $h'$ . ( $W_1(h) = \int W_2(h, h') dh'$ ) Тогда

$$m = \langle \text{th}(Kh) \rangle_{W_1(h)} \quad \text{и} \quad qV = \langle h' \text{th}(Kh) \rangle_{W_2(h, h')}$$

где  $V = \langle \sigma \sigma_0 \rangle$  по всем парам соседних спинов. Функции  $W_1(h)$  и  $W_2(h, h')$  построим следующим образом. Пусть среди  $q$  соседей спина  $\sigma_0$   $n$  направлено в положительную сторону и, соответственно,  $q - n$  в отрицательную. Будем полагать, что вероятность этого, как и для чистого магнетика, определяется выражением

$$F_{q,n}(m, V) = C_q^n \left[ \frac{1+m}{2} \left( \frac{1+\mu_1}{2} \right)^n \left( \frac{1-\mu_1}{2} \right)^{q-n} + \frac{1-m}{2} \left( \frac{1+\mu_2}{2} \right)^n \left( \frac{1-\mu_2}{2} \right)^{q-n} \right]$$

где  $\mu_1$  и  $\mu_2$  выражаются через  $m$  и  $V$  также, как и для чистого магнетика (формула (6.33)). Влияние разбавления учтем так: будем считать, что среди  $n$  «положительных» соседей только  $i$  связано с центральным спином  $\sigma_0$ , а среди  $q - n$  «отрицательных»  $j$  связано с центральным. Полагая, что каждая связь присутствует с вероятностью  $b$  и разорвана с вероятностью  $1 - b$ , найдем условную функцию распределения  $G_{q,n}(b, h)$  по полям  $h$ , при условии, что есть  $n$  положительных и  $q - n$  отрицательных соседей

$$G_{q,n}(b, h) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^{q-n} C_n^i C_{q-n}^j b^{i+j} (1-b)^{q-(i+j)} \delta(h - (i - j))$$

Таким образом,

$$W_1(h) = \sum_{n=0}^q F_{q,n}(m, V) G_{q,n}(b, h)$$

$$W_2(h, h') = \sum_{n=0}^q F_{q,n}(m, V) \delta(h' - (2n - q)) G_{q,n}(b, h)$$

Окончательно получаем (для магнетика в нулевом внешнем поле)

$$m = \sum_{n=0}^{\lfloor \frac{q-1}{2} \rfloor} (F_{q,q-n}(m, V) - F_{q,n}(m, V)) \Phi_{q,n}(b, K) \quad (6.44)$$

$$qV = \sum_{n=0}^{\lfloor \frac{q-1}{2} \rfloor} (F_{q,q-n}(m, V) + F_{q,n}(m, V)) (q - 2n) \Phi_{q,n}(b, K), \quad (6.45)$$

где

$$\Phi_{q,n}(b, K) = - \int \text{th}(Kh) G_{q,n}(b, h) dh = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^{q-n} C_n^i C_{q-n}^j b^{i+j} (1-b)^{q-(i+j)} \text{th}(K(j-i))$$

Уравнение для температуры Кюри, как функции концентрации  $b$  получается как и для чистого магнетика:

$$\sum_{n=0}^{\lfloor \frac{q-1}{2} \rfloor} A_q^n \Phi_{q,n}(b, K_c) = 1 \quad (6.46)$$

и переходит в уравнение (6.42) при  $b = 1$ . Температура Кюри, получаемая из (6.46), обращается в ноль при некотором  $b = b_c$ , значение которого зависит от  $q$ . Это значение  $b_c$  следует интерпретировать как приближенное значение порога протекания для решетки с соответствующим координационным числом, вычисленного в рассматриваемом приближении.

Тип решетки (ко- орд. число)	1	2	3
Шестиугольная (3)	0,700 0,653	0,557	0,614
Квадратная (4)	0,590 0,500	0,428	0,452
Тетраedr. (4)	0,430 0,390	0,428	0,452
Кубическая (6)	0,310 0,250	0,293	0,300
Треугольная (6)	0,500 0,347	0,293	0,300

Таблица 6.3. Критические значения концентрации, при которых исчезает спонтанная намагниченность (перколяционные пороги) для различных решеток. Столбец 1 – точные значения [8], столбец 2 – вычисленные в приближении усреднения по обменным полям [1], столбец 3 – вычисленные в приближении, предложенном в настоящей работе.

В таблице 6.3 приведены значения  $b_c$ , полученные из (6.46) (столбец 3). В этой же таблице приведены значения  $b_c$  вычисленные методом усреднения по обменным полям [1] (столбец 2) и точные значения порогов протекания по узлам и связям для простых решеток (столбец 1). Видно, что значения  $b_c$ , найденные предлагаемым в настоящей работе методом, ближе к истинным значениям порогов протекания, чем полученные методом усреднения по обменным полям.

Зависимости температуры Кюри от концентрации магнитных атомов, вычисленные из (6.46) для  $q = 3, 4$  и  $6$  приведены на рис.6.1 (кривые 1, 3, 5 соответственно). На этом же рисунке приведены концентрационные зависимости температуры Кюри для тех же координационных чисел, вычисленные методом усреднения по обменным полям [1] (кривые 2, 4, 6).

Видно, что все кривые качественно похожи: имеют бесконечную производную при  $b = b_c$  и линейно зависят от  $b$  при  $b$  близких к 1. Из рис. 6.1 также видно, что значения температур Кюри при  $b = 1$  (т.е. для чистых магнетиков), найденные из (6.46), ближе к значениям для простых решеток с соответствующими координационными числами [6], чем те, что получены методом усреднения по обменным полям.

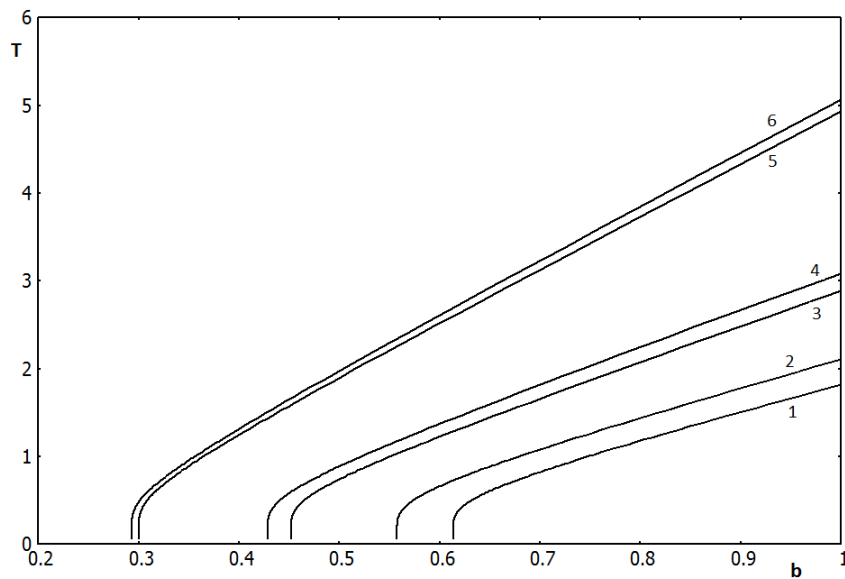


Рис.6.1. Температуры Кюри в зависимости от концентрации магнитных атомов для решеток с различными координационными числами  $q$ , вычисленные методом усреднения по обменным полям (кривые 2, 4, 6 для  $q = 3, 4$  и 6 соответственно) и методом, рассмотренным в настоящей работе (кривые 1, 3, 5 для  $q = 3, 4$  и 6 соответственно).

Таким образом, в результате проведенного анализа приходим к следующим выводам.

1. Рассмотренное в этом параграфе приближение, примененное к чистому магнетик, включает в себя известные приближения, такие как метод среднего поля, метод усреднения по обменным полям [1] и метод Бете. Кроме того, на его основе можно построить и другие приближения, путем выбора функций распределения обменных полей, отличных от биномиальных.

2. Будучи примененным к разбавленным магнетикам, это приближение дает новый и более точный результат для перколяционных порогов и концентрационных зависимостей температуры Кюри и спонтанной намагниченности чем метод усреднения по обменным полям и известные обобщения метода Бете на разбавленный магнетик.

3. Структура предлагаемого приближения позволяет строить различные варианты его обобщения на случай разбавленного магнетика. Например, можно учесть различие корреляции спинов связанных и не связанных атомов, что, как можно предположить, приведет к более точным результатам для модели разбавленного магнетика.

#### 6.4. Модель Гейзенберга с тремя состояниями на решетке Бете

В главе 3 показано, что известное приближение Бете [6] для модели Изинга может быть получено с помощью сопоставления кластеров различного размера, находящихся в одном и том же эффективном поле. Такой способ получения приближения Бете можно назвать «ренорм-групповым» в том смысле, что вблизи критической точки переход от кластера с одним узлом к кластеру с двумя узлами можно рассматривать как ренормгрупповое преобразование фиксированного масштаба [16]. Здесь будет показано, что такой способ возможен и для более сложной модели магнетика, а именно – модели Гейзенберга с тремя состояниями. Сформулируем эту модель следующим образом.

Пусть в каждом узле некоторой регулярной решетки с координационным числом  $q$  находятся «спины»  $\sigma_i$  ( $i$  - номер узла), каждый из которых может принимать 3 различных значений  $-1, 0, +1$ . Гамильтониан модели Гейзенберга можно представить в таком виде

$$H(\{\sigma\}) = -\sum_{(i,j)} J\sigma_i\sigma_j - \sum_i H_e\sigma_i \quad (6.47)$$

Здесь  $J$  - константа обменного взаимодействия,  $H_e$  - внешнее поле. Первая сумма в выражении (6.47) это сумма по всем парам соседних узлов, вторая – по всем узлам. Будем полагать, что все узлы решетки эквивалентны в термодинамическом пределе. Для нахождения равновесных средних величин в системе с гамильтонианом (6.47) необходимо вычислить статистическую сумму

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp (K \sum_{(i,j)} \sigma_i\sigma_j + \sum_i h\sigma_i) \quad (6.48)$$

$$K = \frac{J}{kT}, \quad h = \frac{H_e}{kT}$$

Эта задача имеет точное решение для решетки Бете. Статистическую сумму (6.48) представим в виде  $Z = \sum V(\sigma)$ , где

$$V(\sigma) = \exp (K \sum_{(i,j)} \sigma_i\sigma_j + \sum_i h\sigma_i)$$

Вероятность  $P_i$  того, что центральный спин  $\sigma_0$  принимает значение  $m_i = -1, 0, +1$

$$P_i = \frac{\sum \delta(\sigma_0, m_i) V(\sigma)}{Z}$$

Преобразуем  $V(\sigma)$  с учетом того, что вершина со спином  $\sigma_0$  является корневой точкой  $q$  независимых подграфов:

$$V(\sigma) = \exp(h\sigma_0) \prod_{j=1}^q Q_N(\sigma_0 | s^{(j)})$$

$s^{(j)}$  обозначает все спины на  $j$ -ом подграфе, кроме  $\sigma_0$ , а

$$Q_N(\sigma_0 | s) = \exp\left(K \sum_{(i,j)} s_i s_j + K s_1 \sigma_0 + \sum_i h s_i\right)$$

Пусть  $g_N(\sigma_0) = \sum_s Q_N(\sigma_0 | s)$ . Тогда

$$Z = \sum_{\sigma_0} \exp(h\sigma_0) [g_N(\sigma_0)]^q$$

и

$$P_i = \frac{1}{Z} \sum \delta(\sigma_0, m_i) \exp(h\sigma_0) [g_N(\sigma_0)]^q$$

Обозначим  $x_N = \frac{g_N(-1)}{g_N(+1)}$ ,  $y_N = \frac{g_N(0)}{g_N(+1)}$ . Тогда

$$P_{+1} = \frac{e^h}{e^h + x_N^q e^{-h} + y_N^q}, P_0 = \frac{y_N^q}{e^h + x_N^q e^{-h} + y_N^q} \text{ и } P_{-1} = \frac{x_N^q e^{-h}}{e^h + x_N^q e^{-h} + y_N^q}. \quad (6.49)$$

То есть

$$\langle \sigma_0 \rangle = \frac{e^h - x_N^q e^{-h}}{e^h + x_N^q e^{-h} + y_N^q} \text{ и } \langle \sigma_0^2 \rangle = \frac{e^h + x_N^q e^{-h}}{e^h + x_N^q e^{-h} + y_N^q}$$

Для величин  $x_N$  и  $y_N$  можно составить рекуррентные соотношения. Очевидно, что

$$Q_N(\sigma_0 | s) = \exp(K s_1 \sigma_0 + h s_1) \prod_{j=1}^{q-1} Q_{N-1}(s_1 | t^{(j)})$$

где  $t^{(j)}$  обозначает все спины (кроме  $s_1$ ) на  $j$ -ой ветви подграфа. Следовательно

$$g_N(\sigma_0) = \sum_{s_1} \exp(K s_1 \sigma_0 + h s_1) [g_{N-1}(s_1)]^{q-1}.$$

Отсюда получим рекуррентные соотношения для  $x_N$  и  $y_N$

$$x_N = \frac{y_{N-1}^{q-1} + e^{-K+h} + x_{N-1}^{q-1} e^{K-h}}{y_{N-1}^{q-1} + e^{K+h} + x_{N-1}^{q-1} e^{-K-h}}, \quad y_N = \frac{y_{N-1}^{q-1} + e^h + x_{N-1}^{q-1} e^{-h}}{y_{N-1}^{q-1} + e^{K+h} + x_{N-1}^{q-1} e^{-K-h}} \quad (6.50)$$

Используя рекуррентные уравнения (6.50) (с начальным условием  $x_0 = y_0 = 1$ ) и соотношения (6.49), можно вычислить вероятности  $P_i$  для корневой точки дерева Кейли с  $N$  оболочками. Решение для решетки Бете получим переходя к пределу  $N \rightarrow \infty$ . Для нахождения этого предела в рекуррентных соотношениях (6.50) положим  $x_N = x_{N-1} = x$ ,  $y_N = y_{N-1} = y$  и будем рассматривать полученные равенства как уравнения относительно  $x$  и  $y$ . Подставив решения этих уравнений в (6.49), найдем вероятности  $P_i$  для решетки Бете.

При  $h = 0$  и  $N \rightarrow \infty$  рекуррентные уравнения (6.50) переходят в

$$x = \frac{y^{q-1} + e^{-K} + x^{q-1} e^K}{y^{q-1} + e^K + x^{q-1} e^{-K}}, \quad y = \frac{y^{q-1} + 1 + x^{q-1}}{y^{q-1} + e^K + x^{q-1} e^{-K}} \quad (6.51)$$

Средние по ансамблю значения вероятностей состояния спина находятся из (6.49) при подстановке в них решений (6.51):

$$P_{+1} = \frac{e^h}{e^{h+x^q}e^{-h+yq}}, P_0 = \frac{y^q}{e^{h+x^q}e^{-h+yq}} \text{ и } P_{-1} = \frac{x^q e^{-h}}{e^{h+x^q}e^{-h+yq}}. \quad (6.52)$$

При любом значении  $K$  у системы (6.51) есть корень  $x = 1$  (у находится из второго уравнения (6.51) при  $x = 1$ ). Это решение соответствует отсутствию в системе спонтанной намагниченности и оно теряет устойчивость в точке фазового перехода  $K = K_c$ . То есть, производная по  $x$  от правой части первого уравнения (6.51) должна быть равна 1 при  $x = 1$  и  $K = K_c$ . Это условие приводит к

$$\frac{2(q-1)\text{sh}K_c}{y^{q-1}+2\text{ch}K_c} = 1 \quad \text{и} \quad \frac{y^{q-1}+2}{y^{q-1}+2\text{ch}K_c} = y$$

Исключая из этих уравнений  $y$ , получим уравнение для определения  $K_c$

$$(q-1)\text{sh}K_c - \text{ch}K_c = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\text{th}(K_c/2)}{q-1} \right)^{q-1}$$

Обозначив  $z = \text{th}(K_c/2)$ , получим

$$2(q-1)z - (1+z^2) = \frac{1}{2}(1-z^2) \left( 1 - \frac{z}{q-1} \right)^{q-1} \quad (6.53)$$

Рассмотрим модель с гамильтонианом несколько более общего вида, чем (6.47):

$$H(\{\sigma\}) = -\sum_{(i,j)} J \sigma_i \sigma_j - \sum_{(i,j)} J_1 \sigma_i^2 \sigma_j^2 - \sum_i H_e \sigma_i \quad (6.54)$$

Возьмем теперь один из узлов решетки, содержащий спин  $\sigma_0$ . Спины, содержащиеся в соседних узлах будем обозначать  $\sigma_j$ . Пусть  $H_1 = K \sum \sigma_j + h$  и  $\varphi_1 = \sum \sigma_j^2$ . Найдем условные средние  $\overline{\sigma_0}$  и  $\overline{\sigma_0^2}$  при фиксированных  $H_1$  и  $\varphi_1$ :

$$\overline{\sigma_0} = \frac{\text{sh}H_1}{\text{ch}H_1+x_1/2}, \quad \overline{\sigma_0^2} = \frac{\text{ch}H_1}{\text{ch}H_1+x_1/2} \quad (6.55)$$

где  $x_1 = e^{-K_1\varphi_1}$ ,  $K_1 = J_1/kT$ .  $H_1$  и  $\varphi_1$  ( $x_1$ ), входящие в уравнения (6.55) будем рассматривать как неизвестные параметры, определяющие взаимодействие спина  $\sigma_0$  с остальными атомами решетки. Если  $K_1 \rightarrow 0$ , то модель с гамильтонианом (6.54) переходит в модель Гейзенберга с тремя состояниями.

Рассмотрим на решетке кластер из двух соседних узлов, содержащих спины  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$ . Будем считать, что энергия  $E(\sigma_1, \sigma_2)$  взаимодействия этих спинов друг с другом и с атомами, не входящими в кластер определяется выражением

$$-\frac{E(\sigma_1, \sigma_2)}{kT} = K \sigma_1 \sigma_2 + K_1 \sigma_1^2 \sigma_2^2 + H_2(\sigma_1 + \sigma_2) + K_1 \varphi_2(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)$$

где  $H_2$  и  $\varphi_2$  – параметры, описывающие взаимодействие атомов кластера с внешним окружением. Тогда средние значения  $\overline{\frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2)}$  и  $\overline{\frac{1}{2}(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)}$  находятся из формул ( $x_2 = e^{-K_1\varphi_2}$ )

$$\frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2) = \frac{e^{K+K_1}\text{sh}2H_2 + x_2\text{sh}H_2}{e^{K+K_1}\text{ch}2H_2 + e^{-K+K_1} + 2x_2\text{ch}H_2 + x_2^2/2} \quad (6.56)$$

$$\frac{1}{2}(\sigma_1^2 + \sigma_2^2) = \frac{e^{K+K_1}\text{ch}2H_2 + e^{-K+K_1} + x_2\text{ch}H_2}{e^{K+K_1}\text{ch}2H_2 + e^{-K+K_1} + 2x_2\text{ch}H_2 + x_2^2/2}$$

Приравняем теперь правые части (6.55) и (6.56) и будем полагать, что  $x_1$  и  $x_2$  в этих выражениях просто некоторые неизвестные параметры, которые не обязательно должны выражаться как функции окружающих кластеры спинов, так что при  $K_1 \rightarrow 0$ ,  $x_1$  и  $x_2$  остаются неопределенными. Аналогично, положим, что  $H_1 = Kh_1 + h$  и  $H_2 = Kh_2 + h$ , где  $h_1$  и  $h_2$  - неизвестные параметры. Таким образом мы получим два уравнения относительно четырех неизвестных:  $x_1$ ,  $x_2$ ,  $h_1$  и  $h_2$ . Если на эти неизвестные наложить еще два дополнительных независимых условия, то полученную систему можно будет решить. Подставив это решение в правые части (6.55) или (6.56) можно рассматривать полученные выражения как приближенные значения средних по ансамблю  $\langle \sigma \rangle$  и  $\langle \sigma^2 \rangle$ . Например, предположив, что  $h_1$  и  $h_2$  (а также  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$ ) пропорциональны количеству внешних атомов, соседних к атому кластера, получим

$$\frac{h_1}{h_2} = \frac{\ln x_1}{\ln x_2} = \frac{q}{q-1} \quad (6.57)$$

Можно показать, что при таком выборе дополнительных условий и при  $K_1 \rightarrow 0$  описанная процедура приводит к решению для модели Гейзенберга на решетке Бете (6.51), (6.52). При отсутствии внешнего поля ( $h = 0$ ) и в пределе  $K_1 \rightarrow 0$  получим:

$$\text{th}Kh_1 = \frac{e^K\text{sh}2Kh_2 + x_2\text{sh}Kh_2}{e^K\text{ch}2Kh_2 + e^{-K} + x_2\text{ch}Kh_2} \quad (6.58)$$

$$\frac{\text{ch}Kh_1}{\text{ch}Kh_1 + x_1/2} = \frac{e^K\text{ch}2Kh_2 + e^{-K} + x_2\text{ch}Kh_2}{e^K\text{ch}2Kh_2 + e^{-K} + 2x_2\text{ch}Kh_2 + x_2^2/2}$$

Уравнение для критического значения  $K_c$ , при котором возникает спонтанная намагниченность получается приравниванием производных по  $h_2$  от первого уравнения (6.57) при  $h_1 = h_2 = 0$ . С учетом (6.57), получим

$$\frac{q}{q-1} = \frac{2e^{Kc+x_2}}{e^{Kc+e^{-Kc+x_2}}}, \quad \frac{1}{1+x_1/2} = \frac{e^{Kc+e^{-Kc+x_2}}}{e^{Kc+e^{-Kc+2x_2+x_2^2/2}}, \quad x_1 = x_2^{q/(q-1)}$$

Обозначив  $z = \text{th}(K_c/2)$ , получим после несложных преобразований:

$$\frac{4qz - 2(1+z)^2}{1-z^2} = \left(1 + \frac{z}{q-1}\right)^{q-1}$$

что совпадает с уравнением (6.53) для критической точки модели Гейзенберга с тремя состояниями на решетке Бете.



Таким образом, непосредственное построение ренормгруппового преобразования с гамильтонианом (6.47) не приводит к точному решению на решетке Бете, так как это означало бы наложение дополнительного условия  $x_1 = x_2 = 1$  в равенствах (6.55) – (6.58). Однако, замена гамильтониана модели Гейзенберга (6.47) гамильтонианом более общего вида (6.54) позволяет, построив для (6.54) ренормгрупповое преобразование, получить решение для модели Гейзенберга на решетке Бете путем возвращения к частному случаю (6.47) в полученных уравнениях.

### 6.5. Самосогласованное приближение в модели Изинга чистого и разбавленного магнетика с использованием парной корреляции

Рассмотрим некоторую простую кристаллическую решетку с координационным числом  $q$ , в узлах которой находятся изинговские спины  $\sigma = \pm 1$ , а обменное взаимодействие не равно нулю только для соседних спинов. Пусть  $J$  - обменный интеграл,  $k$  - постоянная Больцмана,  $T$  - температура. Температурный параметр  $K = J/kT$ . Предположим, что внешнее поле равно нулю, а температура  $T < T_c$ , где  $T_c$  - температура Кюри. Тогда в решетке существует спонтанная намагниченность  $M(K)$ . На этой решетке рассмотрим кластер из двух соседних атомов (димер). Тогда  $M(K)$  - средняя намагниченность атома димера, а  $S(K)$  - среднее значение произведения его спинов. При  $T > T_c$  спонтанная намагниченность  $M(K)$  обращается в ноль.

Рассмотрим теперь систему, состоящую только из двух связанных обменным взаимодействием спинов, находящихся в поле  $h_2$  (в единицах  $kT$ ), и найдем среднюю намагниченность атома такого отдельного димера  $m_2(h_2, K_2)$  и  $s_2(h_2, K_2)$  - среднее значение произведения его спинов

$$m_2(h_2, K_2) = \frac{\text{sh}(2h_2)}{\text{ch}(2h_2) + e^{-2K_2}} \quad (6.59)$$

$$s_2(h_2, K_2) = \frac{\text{ch}(2h_2) - e^{-2K_2}}{\text{ch}(2h_2) + e^{-2K_2}} \quad (6.60)$$

Будем полагать, что для любой решетки всегда можно подобрать значения параметров  $h_2$  и  $K_2$  так, чтобы выполнялись равенства

$$M(K) = m_2(h_2, K_2) \quad (6.61)$$

$$S(K) = s_2(h_2, K_2) \quad (6.62)$$

Разумеется, точное указание этих значений для любого  $K$  эквивалентно точному решению задачи Изинга на этой решетке. Суть предлагаемого в настоящей работе метода заключается в построении самосогласованных уравнений, решая которые можно приближенно найти значения  $h_2$  и  $K_2$ , при которых выполняются равенства (6.61)-(6.62).

Для построения этих самосогласованных уравнений рассмотрим систему изинговских спинов, расположенных в вершинах  $L$  одинаковых непересекающихся  $N$  - угольников с общей стороной. Спины, находящиеся в вершинах этой общей стороны будем рассматривать как димер. Пусть атомы димера находятся в поле  $h'$ , а остальные атомы  $N$  - угольников - в поле  $h$ . Кроме того, положим, что между любыми соседними спинами этой структуры существует обменное взаимодействие с температурным параметром  $K$ . Тогда средняя намагниченность атома димера  $m_{N,L}(h, h')$  и среднее значение произведения его спинов  $s_{N,L}(h, h')$  равны

$$m_{N,L}(h, h') = \frac{e^{K+2h'} Z_N^L(+1, +1) - e^{K-2h'} Z_N^L(-1, -1)}{Z}$$

$$s_{N,L}(h, h') = \frac{e^{K+2h'} Z_N^L(+1, +1) + e^{K-2h'} Z_N^L(-1, -1) - 2e^{-K} Z_N^L(+1, -1)}{Z}$$

где

$$Z = e^{K+2h'} Z_N^L(+1, +1) + e^{K-2h'} Z_N^L(-1, -1) + 2e^{-K} Z_N^L(+1, -1)$$

$$Z_N(\sigma_1, \sigma_2) = \sum_{s_1 \dots s_{N-2}} \exp(K(\sigma_1 s_1 + s_1 s_2 + \dots + s_{N-2} \sigma_2) + h(s_1 + \dots + s_{N-2}))$$

или

$$m_{N,L}(h, h') = \frac{e^{2h'} - e^{-2h'} X_N^L(h)}{e^{+2h'} + e^{-2h'} X_N^L(h) + 2e^{-2K} Y_N^L(h)} \quad (6.63)$$

$$s_{N,L}(h, h') = \frac{e^{2h'} + e^{-2h'} X_N^L(h) - 2e^{-2K} Y_N^L(h)}{e^{2h'} + e^{-2h'} X_N^L(h) + 2e^{-2K} Y_N^L(h)} \quad (6.64)$$

где  $X_N(h) = \frac{Z_N(-1, -1)}{Z_N(+1, +1)}$  и  $Y_N(h) = \frac{Z_N(+1, -1)}{Z_N(+1, +1)}$

Так же, как и для системы из двух спинов, предположим, что существуют такие значения параметров  $h$  и  $h'$ , что для любой решетки выполняются равенства

$$M(K) = m_{N,L}(h, h') \quad (6.65)$$

$$S(K) = s_{N,L}(h, h') \quad (6.66)$$

Приравнивая теперь правые части (3)-(4) и (7)-(8), получим

$$m_2(h_2, K_2) = m_{N,L}(h, h') \quad (6.67)$$

$$s_2(h_2, K_2) = s_{N,L}(h, h') \quad (6.68)$$

Система (6.67)-(6.68) это и есть система самосогласованных уравнений для определения неизвестных  $K_2, h_2, h$  и  $h'$ . Разумеется, двух уравнений в общем случае недостаточно для определения четырех неизвестных параметров, поэтому систему (6.67)-(6.68) необходимо дополнить еще двумя условиями. Прежде чем мы это сделаем, заметим, что из (6.67)-(6.68), учитывая (6.59)-(6.60) и (6.63)-(6.64) легко получить уравнение, не содержащее  $K_2$

$$X_N(h) = \exp\left(-\frac{4(h_2 - h')}{L}\right) \quad (6.69)$$

Нулевой спонтанной намагниченности соответствуют, как видно из (6.58) и (6.63) значения  $h_2 = 0$  и  $h = h_0$  и  $h' = h'_0$ , которые связаны условием

$$X_N(h_0) = \exp\left(\frac{4h'_0}{L}\right) \quad (6.70)$$

Значение  $S(K)$  (равное при  $M(K) = 0$  корреляции соседних спинов) равно, как видно из (6.64), с учетом (6.70):

$$S(K) = \frac{X_N^{L/2}(h_0) - e^{-2K} Y_N^L(h_0)}{X_N^2(h_0) + e^{-2K} Y_N^L(h_0)} \quad (6.71)$$

В области существования спонтанной намагниченности ( $T < T_c$ ) нулевое решение является неустойчивым, а при  $T = T_c$  производные по  $h_2$  левой и правой частей (6.69), взятые при  $h_2 = 0$ , равны между собой [2]. Следовательно, при  $T = T_c$

$$\left. \frac{\partial \ln(X_N(h))}{\partial h} \right|_{h=h_0} = \frac{4(\beta-1)}{\alpha L} \quad (6.72)$$

где  $\alpha = \left. \frac{\partial h}{\partial h_2} \right|_{h_2=0}$ ,  $\beta = \left. \frac{\partial h'}{\partial h_2} \right|_{h_2=0}$ .

Вернемся теперь в вопросу о дополнительных условиях, которые необходимо наложить на поля  $h_2, h$  и  $h'$  для однозначного решения системы (6.67)-(6.68). Эти условия можно получить из тех или иных эвристических соображений. Например (как мы и поступим в дальней-

шем), сопоставляя описанные выше построения с конкретной решеткой, можно считать  $N$  количеством узлов, содержащихся в минимальном замкнутом пути по связям решетки. Например, для шестиугольной решетки  $N = 3$ , для квадратной или простой кубической  $N = 4$  и т.д. Значение  $L$  - количество различных замкнутых путей длины  $N$ , которые содержат димер. Для плоских решеток  $L = 2$ , для объемных  $L \geq 3$ . Поля  $h_2$ ,  $h$  и  $h'$  можно считать эффективными обменными полями, связанными с взаимодействием со спинами, не входящими в описанные выше структуры. Будем считать  $h_2$ ,  $h$  и  $h'$  пропорциональными количеству атомов решетки, соседних атомам димера и не входящим в  $N$  - угольники, то есть  $h_2 = (q - 1)\mu$ ,  $h = (q - 2)\mu$  и  $h' = (q - 1 - L)\mu$ , где  $q$  - координационное число, а  $\mu$  - некоторый неизвестный параметр.

При этих условиях уравнение (11) переходит в уравнение относительно  $\mu$

$$X_N((q - 2)\mu) = \exp(-4\mu), \quad (6.73)$$

решив которое, найдем намагниченность  $m(K)$  и среднее произведение соседних спинов  $s(K)$  по формулам (6.63)-(6.64). Разумеется, эти величины уже нельзя рассматривать как точное решение задачи, однако, как показывают приведенные ниже расчеты, полученное приближение оказывается достаточно точным в сравнении с другими известными.

В области нулевой спонтанной намагниченности ( $T \geq T_c$ )  $h_0 = h'_0 = 0$ , а условие (6.70) выполняется автоматически. Поскольку  $X_N(0) = 1$  (в силу симметрии гамильтониана модели Изинга в нулевом внешнем поле относительно одновременного изменения знаков всех спинов) из (6.71) получим

$$s(K) = \frac{1 - e^{-2K} Y_N^L(0)}{1 + e^{-2K} Y_N^L(0)}. \quad (6.74)$$

Уравнение (6.72) превращается в условие, из которого определяется температура Кюри:

$$\left. \frac{\partial \ln(X_N(h))}{\partial h} \right|_{h=0} = -\frac{4}{q-2}. \quad (6.75)$$

Для плоской треугольной решетки  $N = 3$ ,  $L = 2$ ,  $q = 6$ .

$$X_3(h) = \frac{\text{ch}(2K-h)}{\text{ch}(2K+h)}, \quad Y_3(h) = \frac{\text{ch}(h)}{\text{ch}(2K+h)}.$$

Корреляция соседних спинов в области отсутствия спонтанной намагниченности, согласно (6.74)

$$s(K) = \frac{\text{ch}(2K)^2 - e^{-2K}}{\text{ch}(2K)^2 + e^{-2K}}$$

Критический температурный параметр  $K_c = J/kT_c$  находится из (6.75) и равен  $K_c = \frac{1}{4} \ln 3 \approx 0,275$ , что совпадает с точным значением для этой решетки [2]; корреляция соседних спинов в критической точке  $s(K_c) = \frac{19-8\sqrt{3}}{13} \approx 0,396$ .

Уравнение (6.73) приводится к виду  $e^{4K} = 2\text{ch}4\mu + 1$ , с учетом которого, а так же выражений (6.63)-(6.64), зависимости  $m(K)$  и  $s(K)$  можно представить в параметрическом виде:

$$m(K) = \frac{1-x^5}{1+x^5+\varphi(x)}, \quad s(K) = \frac{1+x^5-\varphi(x)}{1+x^5+\varphi(x)}, \quad K = \frac{1}{4} \ln \left( x + \frac{1}{x} + 1 \right),$$

где

$$\varphi(x) = \frac{2x^3\sqrt{x^2+x+1}}{(1+x)^2} \quad \text{и} \quad 0 < x \leq 1.$$

Расчет по этим формулам показывает, что корреляция соседних спинов  $r(K) = s(K) - m^2(K)$  максимальна при  $K = K_c$ , а ее производная по  $K$  имеет в этой точке разрыв. Аналогично ведет себя зависимость  $r(K)$  и для других простых решеток, а значения  $K_c$  и  $s(K_c)$  найденные для них в этом же приближении, приведены в таблице 6.4. Кроме того, в таблице 6.4 приведе-

ны, для сравнения, значения  $K_c$  в известном приближении Бете [2] и в наиболее точном варианте приближения из работы [3]. Видно, что в приближении, рассмотренном здесь значения  $K_c$  оказываются ближе к точным для всех решеток, а для треугольной решетки – совпадает с точным значением.

Решетка	(q,N,L)	точное значение	приближение Бете	Приближение [3]	$K_c$	$s(K_c)$
квадратная	(4, 4, 2)	0,441	0,347	0,370	0,402	0,473
шестиугольная	(3, 6, 2)	0,658	0,549	0,575	0,592	0,664
треугольная	(6, 3, 2)	0,275	0,203	0,219	0,275	0,396
кубическая	(6, 4, 4)	0,214	0,203	0,206	0,212	0,243
Тетраэдрическая	(4, 6, 3)	0,370	0,347	0,349	0,351	0,437

Таблица 6.4: Значения  $K_c = J/kT_c$  ( $T_c$  - температура Кюри) в различных приближениях для простых решеток.

Для модели Изинга с разбавлением по узлам или связям редко удается получить точное решение даже в тех случаях, когда для модели без разбавления такое решение есть [5]. Описанный выше метод можно обобщить на случай разбавленных магнетиков например следующим образом. Для вычисления  $m(K)$  и  $s(K)$  при разбавлении по узлам или связям правые части уравнений (6.67)-(6.68) можно усреднить по конфигурациям разбавления  $\xi_i$  каждого отдельного  $N$  – угольника:

$$m(K) = \left\langle \frac{e^{2h'} - e^{-2h'} \prod_{i=1}^L X_N(h, \xi_i)}{e^{2h'} + e^{-2h'} \prod_{i=1}^L X_N(h, \xi_i) + 2e^{-2K} \prod_{i=1}^L Y_N(h, \xi_i)} \right\rangle_{W(\xi_1, \dots, \xi_L)} \quad (6.76)$$

$$s(K) = \left\langle \frac{e^{2h'} + e^{-2h'} \prod_{i=1}^L X_N(h, \xi_i) - 2e^{-2K} \prod_{i=1}^L Y_N(h, \xi_i)}{e^{2h'} + e^{-2h'} \prod_{i=1}^L X_N(h, \xi_i) + 2e^{-2K} \prod_{i=1}^L Y_N(h, \xi_i)} \right\rangle_{W(\xi_1, \dots, \xi_L)} \quad (6.77)$$

Здесь  $X_N(h, \xi_i)$  и  $Y_N(h, \xi_i)$  это, как и ранее, отношения статистических сумм  $\frac{Z_N(-1, -1)}{Z_N(+1, +1)}$  и  $\frac{Z_N(+1, -1)}{Z_N(+1, +1)}$  соответственно, но вычисленных для  $N$  – угольника с конфигурацией разбавления  $\xi_i$ .

Будем теперь полагать, что кристаллические поля  $h$  и  $h'$ , одинаковы во всех слагаемых в правых частях (6.76) и (6.77) и, как и в случае чистого магнетика, пропорциональны количеству соседних атомов решетки с одинаковым коэффициентом пропорциональности  $\mu$ . Величина этого коэффициента пропорциональность зависит, конечно же, от концентрации магнитных атомов или связей решетки. Для определения  $\mu$  будем использовать аналог уравнения (6.69), усредненный по конфигурациям всех  $N$  – угольников:

$$\left\langle \prod_{i=1}^L X_N(h, \xi_i) \right\rangle_{W(\xi_1, \dots, \xi_L)} = \exp(-4L\mu) \quad (6.78)$$

Вероятность  $W(\xi_1, \dots, \xi_L)$  вычисляется как произведение вероятностей конфигураций для каждого  $N$  – угольника в отдельности:

$$W(\xi_1, \dots, \xi_L) = \prod_{i=1}^L P(\xi_i) \quad (6.79)$$

Тогда уравнение для критической температуры найдем, как и для чистого магнетика, из условия потери устойчивости нулевого (относительно  $\mu$ ) решения (6.78). То есть, производные по  $\mu$  от правой и левой частей (6.78) должны быть равны при  $\mu = 0$ :

$$\langle \sum_{i=1}^L \chi_N(\xi_i) \rangle_{W(\xi_1, \dots, \xi_L)} = \frac{2}{q-2} \quad (6.80)$$

где  $\chi_N(\xi_i) = -\frac{1}{2} \frac{\partial X_N(\xi_i)}{\partial h} \Big|_{h=0}$  и учитывается, что при  $\mu = 0$  все  $X_N(\xi_i) = 1$ . Используя (6.79), получим:

$$\sum_{\xi} \chi_N(\xi) P(\xi) = \frac{2}{q-2} \quad (6.81)$$

При разбавлении по узлам конфигурацию  $\xi$  можно определить задав для каждого из  $N - 2$  узлов  $N -$  угольника (кроме узлов, образующих димер) переменную  $\varepsilon_j$  равную 1 если в узле  $j$  магнитный атом и равную 0 если немагнитная примесь, при разбавлении по связям, аналогичную переменную необходимо определить для каждой из  $N - 1$  связей  $N -$  угольника. Тогда вероятности  $P(\xi)$ , входящие в (6.81), можно вычислить, полагая, что каждый магнитный атом присутствует в  $N -$  угольнике с вероятностью  $b_s$  и отсутствует с вероятностью  $1 - b_s$ , независимо от других. Аналогично, для разбавления по связям, каждая связь присутствует с вероятностью  $b_b$  и разорвана с вероятностью  $1 - b_b$ . Подставив вычисленные таким образом вероятности  $P(\xi)$  в (6.81), получим уравнение, определяющее критический температурный параметр  $K_c$  как функцию концентрации узлов или связей.

Как известно [8] спонтанная намагниченность в модели Изинга с разбавлением исчезает при концентрации магнитных атомов (или связей) равной порогу протекания соответствующей решетки. Поэтому при  $K_c \rightarrow \infty$  решение (6.81) относительно концентрации дает приближенное значение этого порога протекания. При  $K_c \rightarrow \infty$   $\chi_N(\xi)$  стремится к  $n(\xi)$  - количеству узлов многоугольника, до которых можно дойти от атома димера по неразорванным связям. Поэтому, из (6.81) получим уравнение для определения порога протекания:

$$\sum_{\xi} n(\xi) P(\xi) = \frac{2}{q-2}. \quad (6.82)$$

Для плоской треугольной решетки при разбавлении по узлам из (6.81) имеем

$$\text{th}(2K_c) = \frac{1}{2b_s}$$

а при разбавлении по связям

$$b_b^2 \text{th}(2K_c) + 2b_b(1 - b_b) \text{th}(K_c) = \frac{1}{2}$$

Пороги протекания по узлам  $b_s^c$  и связям  $b_b^c$  для этой решетки оказываются такими  $b_s^c = 0,5$ ,  $b_b^c = 1 - 1/\sqrt{2} \approx 0,293$ . Приближенное значение порога протекания по узлам в этом случае совпадает с точным значением [8]. В таблице 6.5 приведены точные значения порогов протекания по узлам и связям (1-й и 2-й столбцы) и значение критической концентрации в приближении Бете [8] (3-й столбец; задачи протекания по узлам и связям в этом приближении не различаются). Кроме того, в таблице 6.5 приведено наилучшие приближенные значения порогов протекания, полученных в работе [3] (4-й и 5-й столбцы) и значения, найденные по уравнению (6.82) настоящей работы (6-й и 7-й столбцы). Видно, что во всех случаях (6.82) дает более близкие к точным значения пороги протекания и по узлам и по связям.

Решетка	точное значение $b_s^c$	точное значение $b_b^c$	Приближение Бете	$b_s^c$ [3]	$b_b^c$ [3]	$b_s^c$	$b_b^c$
квадратная	0,590	0,500	0,333	0,427	0,368	0,500	0,403
шестиугольная	0,700	0,653	0,500	0,558	0,532	0,581	0,546
треугольная	0,500	0,347	0,200	0,333	0,227	0,500	0,293
кубическая	0,310	0,250	0,200	0,219	0,205	0,250	0,214
тетраэдрическая	0,430	0,390	0,333	0,343	0,337	0,350	0,340

Таблица 6.5: Значения перколяционных порогов по узлам и связям в различных приближениях для простых решеток.

Таким образом показано, что использование для самосогласования, вместе с намагниченностью, среднего произведения соседних спинов, позволяет построить приближенное решение модели Изинга как для чистого, так и для разбавленного магнетиков. Оказывается (таблица 1) что значения критического температурного параметра, вычисленное в этом приближении, лучше согласуется с известными точными значениями, чем полученные в работе [3]. Для порогов протекания разбавленных по узлам и связям решеток, данное приближение также дает более точные значения, чем в [3] (таблица 6.5).

## Заключение

В ходе выполнения работы был построен ряд эффективных методов учета влияния подвижных и замороженных примесей на макроскопические характеристики разбавленных магнетиков. С помощью этих методов были исследованы магнитные фазовые переходы и магнитные состояния в моделях разбавленных магнетиков.

Основные результаты работы заключаются в следующем.

1. Теоретически обоснован и обобщен метод усреднения по локальным полям взаимодействия. Доказано, что в системе взаимодействующих частиц любое термодинамическое среднее некоторой величины всегда может быть вычислено в два этапа. На первом этапе величина вычисляется по кластеру частиц, при фиксированном внешнем окружении. На втором – производится усреднение по конфигурациям этого окружения.

На основе такого представления термодинамических средних построена общая схема получения самосогласованных уравнений, включающая в себя как известные способы (метод среднего поля, приближение Бете, метод усреднения по обменным полям), так новые. Построение самосогласованных уравнений возможно двумя путями. Во-первых, вычисление термодинамических средних для кластера взаимодействующих спинов можно проделать с помощью функции распределения по обменным полям, выраженной через эти же средние. Во-вторых, можно, задав два различных кластера, найти среднее одной и той же величины с помощью функций распределения полей, выраженных через один и тот же параметр, который не имеет в этом случае смысла какой-либо термодинамической средней. Проведенный анализ показал, что между этими подходами нет принципиального различия – один и тот же результат может быть получен в разных подходах.

2. Решена одномерная модель Изинга с неподвижными случайно распределенными немагнитными примесями и одномерная модель Изинга с подвижными немагнитными примесями. Для второй модели найдены корреляционные функции. Показано, что с помощью подбора параметров межатомного взаимодействия, систему с подвижными примесями, находящимися в термодинамическом равновесии, можно приблизить к системе с замороженными примесями (псевдохаотическое приближение).

Полученное точное решение для одномерной модели Изинга с разбавлением сравнивается с несколькими приближенными решениями. Для сравнения были рассмотрены следующие приближенные методы: метод среднего поля, метод усреднения по обменным полям как с учетом, так и без учета корреляций и псевдохаотическое приближение. Наиболее грубым, как и следовало ожидать, оказывается метод среднего поля. Решения, полученные по методу усред-

нения по обменным полям, особенно с учетом корреляции, гораздо лучше согласуются с точным решением. Но наиболее близким к точному решению оказывается решение, полученное в псевдохаотическом приближении. Причем это приближение превосходит остальные приближения по точности во всем диапазоне концентраций магнитных атомов.

3. В диссертационной работе развит следующий подход к анализу свойств разбавленных магнетиков с замороженными немагнитными примесями. Вместо того чтобы с самого начала полагать, что примеси распределены в решетке случайно, рассматривается магнетик, в котором магнитные атомы и атомы примеси могут перемещаться и находятся в термодинамическом равновесии. Энергия такой системы определяется не только ориентацией магнитных моментов, но и расположением атомов примеси по узлам решетки. Иными словами, гамильтониан той или иной модели магнетика с подвижными примесями будет состоять из слагаемых, связанных с обменным взаимодействием магнитных атомов и слагаемых, связанных с межатомным взаимодействием в кристаллической решетке, причем равновесное распределение атомов примеси зависит от параметров, характеризующих эти взаимодействия. Тогда для каждого значения температуры, внешнего магнитного поля и концентрации (доли) магнитных атомов в системе можно подобрать значения параметров межатомного взаимодействия с таким расчетом, чтобы равновесное распределение атомов примеси было бы как можно ближе к случайному.

В работе рассматривается следующая реализация этой схемы. Рассмотрена модель Изинга на решетке с координационным числом  $q$ , причем часть магнитных атомов замещена атомами примеси, которые могут перемещаться по узлам решетки. Для этой модели исследованы фазовые состояния, найдена зависимость намагниченность от концентрации магнитных атомов и предельные значения концентраций при которых исчезает спонтанная намагниченность. Для такой модели можно определить несколько типов корреляционных функций – характеризующих взаимосвязь магнитных моментов и взаимосвязь расположения атомов примеси. В качестве условия близости распределения атомов примеси по узлам решетки к случайному, используется равенство нулю корреляции в расположении атомов примеси для двух ближайших узлов, что и является основой псевдохаотического приближения. В этом приближении найдена намагниченность как функция температуры и концентрации магнитных атомов, температура Кюри и перколяционные пороги.

5. Получено решение для модели Поттса на решетке Бете с подвижными немагнитными примесями. Использован метод псевдохаотического распределения примесей, основанный на обращении в ноль корреляции в расположении атомов примеси для ближайших узлов. Для псевдохаотического распределения примесей найдена температура фазового перехода, намагниченность и величина скачка спонтанной намагниченности при температуре фазового перехода. Показано, что псевдохаотическое распределение примесей имеет ряд свойств, аналогичных



вмороженным примесям. Установлено, что при псевдохаотическом распределении примесей фазовый переход в модели Поттса на решетке Бете остается переходом первого рода, но величина скачка намагниченности уменьшается при увеличении концентрации немагнитных примесей. Так же рассмотрена модель Поттса с немагнитным разбавлением и с произвольным числом состояний на решетке Бете во внешнем поле. С помощью метода псевдохаотического распределения примесей получена система уравнений для определения кривой фазовых переходов первого рода на плоскости «температура – внешнее поле». Найдена зависимость от концентрации магнитных атомов конечной точки линии фазовых переходов.

6. Методом составления самосогласованных уравнений построен класс приближенных решений задачи Изинга, являющийся обобщением приближения Бете. Показано, что некоторые из приближений этого класса можно интерпретировать как точные решения для модели Изинга на рекурсивных решетках. Для этих рекурсивных решеток найдены точные значения порогов протекания по узлам и связям и показано, что для модели Изинга разбавленного магнетика метод приводит к точным значениям для этих порогов.

## Основные публикации автора по теме диссертации

1. Белоконь В.И., Семкин С.В. Метод случайного поля в модели Изинга разбавленного ферромагнетика // **ЖЭТФ**, 1992, т. 102, вып 4(10), с 1254 – 1258.

2. В.И. Белоконь, С.В. Семкин, Метод случайного поля в теории ферромагнетизма бинарных сплавов // **ЖЭТФ** 1993, т. 104 вып. 11, с. 3784 -3791.

3. В.И. Белоконь, Н.Н. Гусаков, С.В. Семкин, И.В.Соппа, «К вопросу об образовании химической намагниченности» - **Геофизический журнал**, т. 14, № 3, 1992.

4. В.И. Белоконь, С.В. Семкин, «Магнитные свойства и химическая намагниченность систем взаимодействующих частиц разбавленного ферромагнетика» - **Физика Земли**, 1994, № 1, с. 1-6,

5. С.В. Семкин, В.П. Смагин, Использование метода усреднения по полям взаимодействия для построения ренормгруппового преобразования фиксированного масштаба // **Физика твердого тела**, 2013, т. 55, вып. 5, с. 892 – 895 (S.V. Semkin, V. P. Smagin, Method of Averaging over Interaction Fields for Constructing the Fixed\_Scale Renormalization Group Transformation, **Physics of the Solid State**, 2013, Vol. 55, No. 5, pp. 970–973)

6. С.В. Семкин, В.П. Смагин, Методы получения самосогласованных уравнений для изинговского магнетика // **Известия вузов.Физика**, 2013, т. 56, вып. 2, с. 9 – 14 (S.V. Semkin, V. P. Smagin, Methods of derivation of self-consistent equations for an Ising magnet, **Russian physics journal**, 2013, Vol. 56, No. 2, pp. 118-124.)

7. С.В. Семкин, В.П. Смагин, Модель Изинга разбавленного ферромагнетика в приближении самосогласованного поля, **Физика твердого тела**, 2014, т. 56, вып. 6, с. 1064 – 1068 (S.V. Semkin, V. P. Smagin, Ising Model of a Dilute Ferromagnet in the Self-Consistent Field Approximation, **Physics of the Solid State**, 2014, Vol. 56, No. 6, pp. 1105–1109).

8. С.В. Семкин, В.П. Смагин, Корреляционные функции чистого и разбавленного изинговского магнетика в приближении эффективного поля, **Физика твердого тела**, 2014, т. 56, вып. 7, с. 1288 – 129 (S.V. Semkin, V. P. Smagin, Correlation Functions of Pure and Diluted Ising Magnets in the Mean\_Field Approximation **Physics of the Solid State**, 2014, Vol. 56, No. 7, pp. 1338–1341)

9. С.В. Семкин, В.П. Смагин, Применение метода среднего поля к модели Изинга с подвижными примесями и к модели Поттса с тремя состояниями, **Физика твердого тела**, 2014, т. 56, вып. 12, с. 2341 – 2345 (S.V. Semkin, V. P. Smagin, Mean Field Theory as Applied to the Ising Model with Mobile Impurities and to the Three State Potts Model, **Physics of the Solid State**, 2014, Vol. 56, No. 12, pp. 2425–2429)

10. **С.В. Сёмкин**, В.П. Смагин, «Самосогласованные уравнения в модели Изинга разбавленного магнетика», **Известия вузов.Физика**, 2014, т. 57, вып. 10, с. 54 – 60 (**S.V. Semkin**, V. P. Smagin, Self-consistent equations in the Ising model of a dilute magnet, **Russian physics journal**, 2015, Vol. 57, No. 10, pp. 1356 - 1363)
11. **С.В. Сёмкин**, В.П. Смагин, Модель Поттса на решетке Бете с немагнитными примесями, **ЖЭТФ**, 2015, т.148, вып.4(10), с. 729-733 (**S.V. Semkin**, V. P. Smagin, The Potts Model on a Bethe Lattice with Nonmagnetic Impurities, **Journal of Experimental and Theoretical Physics**, 2015, Vol. 121, No 4, pp. 636-639)
12. **С.В. Сёмкин**, В.П. Смагин, Приближение Бете в модели Изинга с подвижными примесями, **Физика твердого тела**, 2015, т. 57, вып. 5, с. 926 – 931 (**S.V. Semkin**, V. P. Smagin, Bethe Approximation in the Ising Model with Mobile Impurities, **Physics of the Solid State**, 2015, Vol. 57, No. 5, pp. 943–948)
13. **С.В. Сёмкин**, В.П. Смагин, Разбавленный изинговский магнетик на решетке Бете, **Известия вузов.Физика**, 2015, т. 58, вып. 12, с. 159 – 167 (**S.V. Semkin**, V. P. Smagin, Diluted Ising Magnet on the Bethe Lattice, **Russian physics journal**, 2016, Vol. 58, No. 12, pp. 1848 – 1858)
14. **С.В. Сёмкин**, В.П. Смагин, Приближение среднего поля для модели Поттса разбавленного магнетика во внешнем поле, **Физика твердого тела**, 2016, т. 58, вып. 7, с. 1306 – 1310 (**S.V. Semkin**, V. P. Smagin, Mean-Field Approximation for the Potts Model of a Diluted Magnet in the External Field, **Physics of the Solid State**, 2016, Vol. 58, No. 7, pp. 1350 –1354)
15. **С.В. Сёмкин**, В.П. Смагин, Исследование модели Поттса разбавленного магнетика методом усреднения по локальным полям, **Физика твердого тела**, 2016, т. 58, вып. 8, с. 1534 – 1536 (**S.V. Semkin**, V. P. Smagin, Investigation of the Potts Model of a Diluted Magnet by Local Field Averaging Technique, **Physics of the Solid State**, 2016, Vol. 58, No. 8, pp. 1587 –1589)
16. **С.В. Сёмкин**, В.П. Смагин, Модель Поттса на решетке Бете во внешнем поле, **Известия вузов.Физика**, 2016, т. 59, вып. 10, с. 120 – 125 (**S.V. Semkin**, V. P. Smagin, The Potts Model on a Bethe Lattice in an External Field, **Russian physics journal**, 2017, Vol. 59, No. 10, pp. 1656 – 1662)
17. **С.В. Сёмкин**, В.П. Смагин, «Кластерный способ построения приближения Бете для модели Изинга разбавленного магнетика», **Известия вузов.Физика**, 2017, т. 60, вып. 10, с. 140 – 145 (**S.V. Semkin**, V. P. Smagin, Cluster Method of Constructing Bethe Approximation for the Ising Model of a Dilute Magnet, **Russian physics journal**, 2018, Vol. 60, No. 10, pp. 1803 – 1810)
18. **С.В. Сёмкин**, В.П. Смагин, Е. Г. Гусев, «Модель Поттса на решетке Бете с немагнитными примесями во внешнем поле», **ТМФ**, 197:2 (2018), 290–295 (**S.V. Sjomkin**, V.P. Smagin, E.G. Gusev, «Potts Model on Bethe Lattice with Nonmagnetic Impurities in an External Magnetic Field» **Theoretical and Mathematical Physics** 197:2 (2018), 1645–1649)

19. **С.В. Сёмкин**, В.П. Смагин, «Приближение Бете для чистого и разбавленного магнетика как усреднение по локальным обменным полям», **Известия вузов.Физика**, 2019, т. 62, вып. 1, с. 153 – 158. (**S.V. Semkin**, V. P. Smagin, «Bethe Approximation for Pure and Diluted Magnets as Averaging over Local Exchange Fields», **Russian physics journal**, 2019, Vol. 62, No. 1, pp. 172 – 178)

20. **С.В. Сёмкин**, В.П. Смагин, Е. Г. Гусев, «Магнитная восприимчивость разбавленного изинговского магнетика» **ТМФ**, 2019, Т. 201, No. 2, С. 280-290 (**S.V. Semkin**, V.P. Smagin, E.G. Gusev, «Magnetic susceptibility of a diluted Ising magnet» **Theoretical and Mathematical Physics** 201:2 (2019), 1653–1661)

21. **С.В. Сёмкин**, В.П. Смагин, Е. Г. Гусев, «Модель Изинга с немагнитным разбавлением на рекурсивных решетках» **ТМФ**, 2020, Т. 202, No. 2, С. 304-311 (**S.V. Semkin**, V.P. Smagin, E.G. Gusev, «Ising model with nonmagnetic dilution on recursive lattices» **Theoretical and Mathematical Physics** 202:2 (2020), 265–271)

22. **С.В. Сёмкин**, В.П. Смагин, В.И. Люлько «Использование усреднения по полям взаимодействия для построения приближенных методов в модели Изинга разбавленного магнетика», **Физика твердого тела**, 2020, т. 62, вып. 8, с. 1209 – 1214

23. **С.В. Сёмкин**, В.П. Смагин, П.В. Юдин «Самосогласованное приближение в модели Изинга чистого и разбавленного магнетика с использованием парной корреляции» **ТМФ**, 2020 (принята к публикации)

24. **С.В. Семкин**, «Исследование магнитных состояний неоднородных магнетиков методом усреднения по локальным обменным полям», Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико – математических наук, Владивосток, 74 с., 1994.

25. **С.В. Семкин**, «Исследование магнитных состояний неоднородных магнетиков методом усреднения по локальным обменным полям» Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико – математических наук, Владивосток, 1994

26. **С.В. Семкин**, В.П. Смагин, Приближенные методы в теории чистых и разбавленных магнетиков, монография, Владивостокский государственный университет экономики и сервиса. – Владивосток: из-во ВГУЭС, 2019, - 220 с.

27. В.И. Белоконь, **С.В. Семкин**, И.В.Соппа, «Образование остаточной намагниченности в процессе роста спонтанной намагниченности продуктов реакции» - **Сб. «Химическая намагниченность. Теория и эксперимент»** изд-во ДВГУ, Владивосток, 1991

28. **С.В. Семкин**, В.П. Смагин, Метод среднего поля и метод усреднения по обменным полям для кластеров магнитных атомов // **Вестник Владивостокского государственного университета экономики и сервиса**, Владивосток 2012, № 3(16), с. 266-270.

29. **С.В. Семкин**, В.П. Смагин, «Одномерная цепочка изинговских спинов», **Вестник Владивостокского государственного университета экономики и сервиса**, Владивосток 2013, № 3(16), с. 266-270.

30. **С.В. Семкин**, В.П. Смагин, «Перколяционная кривая в приближении самосогласованного поля», **Вестник Владивостокского государственного университета экономики и сервиса**, Владивосток 2014, № 4(17), с. 233-237.

31. **С.В. Семкин**, В.П. Смагин, «Модель Поттса с тремя состояниями на решетке Бете», **Вестник Владивостокского государственного университета экономики и сервиса**, Владивосток 2015, № 4(31), с. 171-182.

32. **С.В. Семкин**, В.П. Смагин, «Одномерная модель Изинга с подвижными примесями», **Вестник Владивостокского государственного университета экономики и сервиса**, Владивосток 2016, № 2, с. 114-120.

33. **С.В. Семкин**, В.П. Смагин, «Модель Поттса на решетке Бете во внешнем поле», **Вестник Владивостокского государственного университета экономики и сервиса**, Владивосток 2016, № 3, с. 103-108.

34. **С.В. Семкин**, В.П. Смагин, «Приближенные методы исследования фазовых состояний в модели Поттса разбавленного магнетика», **Вестник Владивостокского государственного университета экономики и сервиса**, Владивосток 2017, т.9, № 2, с. 140-151.

35. В.П. Смагин, **С.В. Семкин**, «Метод циклических кластеров в модели Изинга разбавленного магнетика», **Территория новых возможностей. Вестник ВГУЭС**, Владивосток 2018, № 1, с. 116-123.

36. **С.В. Семкин**, В.П. Смагин, «Точное и приближенные решения для одномерной модели Изинга разбавленного магнетика», **Территория новых возможностей. Вестник ВГУЭС**, Владивосток 2018, № 4, с. 122-130.

37. **С.В. Семкин**, В.П. Смагин, «Модель Гейзенберга с тремя состояниями на решетке Бете», **Территория новых возможностей. Вестник ВГУЭС**, Владивосток 2019, № 1, с. 75-81.

38. В.П. Смагин, **С.В. Семкин**, «Рекуррентные решетки и самосогласованные уравнения в модели Изинга», **Территория новых возможностей. Вестник ВГУЭС**, Владивосток 2019, № 2, с. 139-149.

39. В.П. Смагин, **С.В. Семкин**, «Асимптотическое поведение восприимчивости и намагниченности разбавленного изинговского магнетика», **Территория новых возможностей. Вестник ВГУЭС**, Владивосток 2020, № 1, с. 105-114.

40. В.И. Белоконь, **С.В. Семкин**, И.В.Соппа, «Химическая намагниченность продуктов превращения титаномаггемита при инверсиях поля» - **Тез. докл. IV Всесоюзного съезда по геомагнетизму**, часть 3, с. 7-8, Владимир-Суздаль, 1991

41. В.И. Белоконь, С.В. Семкин, «К теории ферромагнетизма бинарных сплавов» - Тез. докл. XXXV Всероссийской межвузовской научно-технической конференции. Владивосток, 1992
42. С.В. Семкин, В.П. Смагин, «Точное и приближенные решения для одномерной цепочки изинговских спинов» - **Материалы 56-й Всероссийской научной конференции.** Владивосток, 2013. Т.3, с. 276-279
43. С.В. Семкин, В.П. Смагин, «Приближение среднего поля в модели Поттса с тремя состояниями», **Материалы 57-й Всероссийской научной конференции.** Владивосток, 2014. Т.3, с. 174-176.
44. С.В. Семкин, В.П. Смагин, «Фазовые состояния разбавленного изинговского магнетика в приближении среднего поля», **Материалы 57-й Всероссийской научной конференции.** Владивосток, 2014. Т.3, с. 177-180.
45. С.В. Семкин, В.П. Смагин, «Цепочка изинговских спинов с подвижными примесями», **Материалы 57-й Всероссийской научной конференции.** Владивосток, 2014. Т.3, с. 181-183
46. С.В. Семкин, В.П. Смагин, «Усреднение по полям обменного взаимодействия в модели Поттса с произвольным числом состояний», **Материалы 58-й Всероссийской научной конференции.** Владивосток, 2015.
47. С.В. Семкин, В.П. Смагин, «Модель Поттса на решетке Бете с псевдохаотически распределенными немагнитными примесями», **Материалы 58-й Всероссийской научной конференции.** Владивосток, 2015.
48. С.В. Семкин, В.П. Смагин, «К вопросу о влиянии кристаллической анизотропии на температуру Кюри», **Материалы 58-й Всероссийской научной конференции.** Владивосток, 2015.
49. С.В. Семкин, В.П. Смагин, «Метод усреднения по локальным обменным полям и метод Бете», **Материалы 59-й Всероссийской научной конференции.** Владивосток, 2016. Т., с. 225-227.
50. С.В. Семкин, В.П. Смагин, «Использование различных кластеров для получения самосогласованных уравнений в модели Изинга», **Материалы 59-й Всероссийской научной конференции.** Владивосток, 2016. Т., с. 228-230.
51. С.В. Семкин, В.П. Смагин, «Циклические кластеры в модели Изинга разбавленного магнетика», **Материалы 59-й Всероссийской научной конференции.** Владивосток, 2016. Т., с. 231-234.

52. **С.В. Семкин**, В.П. Смагин, «Оценка точности различных приближенных методов в модели Изинга разбавленного магнетика», **Материалы 60-й Всероссийской научной конференции**. Владивосток, 2017. Т. III, с. 182-185.

53. **С.В. Семкин**, В.П. Смагин, «Точное решение для одномерной модели Изинга с немагнитным разбавлением», **Материалы 60-й Всероссийской научной конференции**. Владивосток, 2017. Т. III, с. 186-189

54. **С.В. Семкин**, В.П. Смагин, «Модель Поттса на решетке Бете с немагнитным разбавлением», **Материалы 60-й Всероссийской научной конференции**. Владивосток, 2017. Т. III, с. 190-193

55. **С.В. Семкин**, В.П. Смагин, «Перколяционные пороги некоторых рекуррентных решеток», **Материалы 62-й Всероссийской научной конференции**. Владивосток, 2019. Т. III, с. 182 – 184

56. **С.В. Семкин**, В.П. Смагин, «Одномерная цепочка изинговских спинов с немагнитным разбавлением», **Материалы 62-й Всероссийской научной конференции**. Владивосток, 2019. Т. III, с. 185 - 187

57. **С.В. Семкин**, В.П. Смагин, «Рекурсивные решетки и самосогласованные уравнения в модели Изинга», **Материалы 62-й Всероссийской научной конференции**. Владивосток, 2019. Т. III, с. 188 - 191

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 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.
2. Сёмкин, С.В. Использование метода усреднения по полям взаимодействия для построения ренормгруппового преобразования фиксированного масштаба / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Физика твердого тела. – 2013. – Т. 55, вып. 5. – С. 892–895.
3. Сёмкин, С.В. Методы получения самосогласованных уравнений для изинговского магнетика / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Известия вузов. Физика. – 2013. – Т. 56, вып. 2. – С. 9–14.
4. Семкин, С.В. Метод среднего поля и метод усреднения по обменным полям для кластеров магнитных атомов / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Территория новых возможностей. Вестник ВГУЭС. – 2012. – № 3(16). – С. 266–270.
5. Callen, H.B. A note on Green functions and the Ising model / H.B. Callen // Phys. Lett. – 1963. – V. 4. – P. 161–175.
6. Бэкстер, Р. Точно решаемые модели в статистической механике / Р. Бекстер. – М.: Мир, 1985, 486 с.
7. Сёмкин, С.В. Модель Поттса на решетке Бете с немагнитными примесями / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // ЖЭТФ. – 2015. – Т. 148, вып.4(10). – С. 729–733.
8. Займан, Дж. Модели беспорядка: Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем / Дж. Займан. – М.: Мир, 1982. – 591 с.
9. Сёмкин, С.В. Модель Поттса на решетке Бете во внешнем поле / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Известия вузов. Физика. – 2016. – Т. 59, вып. 10. – С. 120–125.
10. Сёмкин, С.В. Приближение Бете в модели Изинга с подвижными примесями / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Физика твердого тела. – 2015. – Т. 57, вып. 5. – С. 926–931.
11. Белоконь, В.И. Образование остаточной намагниченности в процессе роста спонтанной намагниченности продуктов реакции / В.И. Белоконь, С.В. Семкин, И.В. Соппа // «Химическая намагниченность. Теория и эксперимент». – Владивосток: Изд-во Дальневост. ун-та, 1991.
12. Белоконь, В.И. Химическая намагниченность продуктов превращения титаномаггемита при инверсиях поля / В.И. Белоконь, С.В. Семкин, И.В. Соппа // Тез. докл. IV Всесоюзного съезда по геомагнетизму. Ч. 3. – Владимир-Суздаль, 1991. – С. 7–8.
13. Белоконь, В.И. К вопросу об образовании химической намагниченности / В.И. Белоконь, Н.Н. Гусаков, С.В. Семкин, И.В. Соппа // Геофизический журнал. – 1992. – Т. 14, № 3.
14. Белоконь, В.И. Метод случайного поля в теории ферромагнетизма бинарных сплавов / В.И. Белоконь, С.В. Семкин // ЖЭТФ. – 1993. – Т. 104, вып. 11. – С. 3784–3791.



15. Белоконь, В.И. Функция распределения случайных полей взаимодействия в неупорядоченных магнетиках. Спиновое и макроспиновое стекло / В.И. Белоконь, К.В. Нефедев // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2001. – Т. 120, № 1. – С. 156–163.
16. Серков, Л.А. Название Преобразование фиксированного масштаба с близкодействующими спиновыми корреляциями / Л.А. Серков // Теоретическая и математическая физика. – 1992. – Т. 92, № 1. – С. 759–762.
17. Indekeu, J.O. A. Maritan, A.L. Stella // *Jornal of Physics A*. 15, 291 (1982).
18. Ма, Ш. Современная теория критических явлений / Ш. Ма. – М.: Мир, 1980. – 296 с.
19. Изюмов, Ю.А. Теория магнитоупорядоченных кристаллов с примесями / Ю.А. Изюмов, М.В. Медведев. – М.: Наука, 1970. – 271 с.
20. Фольк, Р. Критические показатели трехмерной слабо разбавленной замороженной модели Изинга / Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский // УФН. – 2003. – Т. 173 (2). – С. 175–200.
21. Вик, С. Доценко, Критические явления в спиновых системах с беспорядком / С. Вик // УФН. – 1995. – Т. 165 (5). – С. 481–528.
22. Шалаев, Б.Н. Дуальные симметрии и универсальность критического поведения неупорядоченного изинговского ферромагнетика // ФТТ. – 2010. – Т. 52, вып. 1. – С. 83–86.
23. Пахнин, Д.В. Нелинейные восприимчивости одноосного слабонеупорядоченного ферромагнетика в критической области / Д.В. Пахнин, А.И. Соколов, Б.Н. Шалаев // Письма в ЖЭТФ. – 2002. – Т. 75 (8). – С. 459–462
24. Квасников, И.А. Термодинамика и статистическая физика / И.А. Квасников. – М.: Едиториал УРСС, 2002. Т. 2. Теория равновесных систем. – 432 с.
25. Балеску, Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика / Р. Балеску. – М.: Мир, 1978. Т. 1. – 405 с.
26. Сёмкин, С.В. Модель Изинга разбавленного ферромагнетика в приближении самосогласованного поля / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Физика твердого тела. – 2014. – Т. 56, вып. 6. – С. 1064–1068.
27. Белоконь, В.И. К теории ферромагнетизма бинарных сплавов / В.И. Белоконь, С.В. Семкин // Тез. докл. XXXV Всероссийской межвузовской научно-технической конференции. – Владивосток, 1992.
28. Белоконь, В.И. Магнитные свойства и химическая намагниченность систем взаимодействующих частиц разбавленного ферромагнетика / В.И. Белоконь, С.В. Семкин, – Физика Земли, 1994, № 1, с. 1-6,
29. Семкин, С.В. Исследование магнитных состояний неоднородных магнетиков методом усреднения по локальным обменным полям: дис. ... канд. физ.-мат. наук / С.В. Сёмкин. – Владивосток, 1994. – 74 с.

30. Семкин, С.В. Исследование магнитных состояний неоднородных магнетиков методом усреднения по локальным обменным полям: авторефер. дис. ...канд. физ.-мат. наук / С.В. Семкин. – Владивосток, 1994.
31. Семкин, С.В. Химическая намагниченность системы взаимодействующих частиц с изменяющейся точкой Кюри / С.В. Семкин, В.И. Белоконь, Е.Н. Макишина // Тез. докл. XXXV Всеросс. межвузовской науч.-техн. конф. – Владивосток, 1999
32. Мейлихов, Е.З. Теория эффективного поля для разупорядоченных магнитных сплавов / Е.З. Мейлихов, Р.М. Фарзетдинова // Физика твердого тела. – 2014. – Т. 56, №4. – С. 679–686.
33. Мейлихов, Е.З. Обобщенная теория среднего поля для решеточных магнитных систем и ферромагнетизм полупроводников с магнитными примесями / Е.З. Мейлихов, Р.М.Фарзетдинова // Физика твердого тела. – 2005. – Т. 47, №6. – С. 1085–1091.
34. Paduani, C. Mössbauer effect and magnetization studies of  $\alpha$  - FeMn alloys / C. Paduani, E. Galvao da Silva, G.A. Perez-Alcazar, M. McElfresh, J. Appl // Phys. – 1991. – № 70. – 7524.
35. Murani, A.P. Ferromagnet or spin glass? Magnetic ordering in Au-Fe alloys / A.P. Murani // Journal of Physics F: Metal Physics, 1974, т. 4, 757.
36. Семкин, С.В. Применение метода среднего поля к модели Изинга с подвижными примесями и к модели Поттса с тремя состояниями / С.В. Семкин, В.П. Смагин // Физика твердого тела. –2014. – Т. 56, вып. 12. – С. 2341–2345.
37. Семкин, С.В. Методы получения самосогласованных уравнений для изинговского магнетика / С.В. Семкин, В.П. Смагин // Известия вузов. Физика. – 2013. – Т. 56, вып. 2. – С. 9–14.
38. Семкин, С.В. Корреляционные функции чистого и разбавленного изинговского магнетика в приближении эффективного поля / С.В. Семкин, В.П. Смагин // Физика твердого тела. – 2014. – Т. 56, вып. 7. – С. 128–129.
39. Murani, A.P. Magnetic nanoparticles / A.P. Murani // J. Magn. Magn. Mater. – 1999. – № 200. – P. 359–372.
40. Корн, Г. Справочник по математике (для научных работников и инженеров) / Г. Корн, Т. Корн. – М.: Наука, 1973. – 832 с.
41. Sanchez, J.M. Phys. Rev / J.M. Sanchez, C.H. Lin. – В 30 1448 (1984).
42. Семкин, С.В. Ренормгрупповые преобразования фиксированного масштаба для анизотропного изинговского магнетика. / С.В. Семкин, В.П. Смагин // Материалы 55-й Всеросс. науч. конф. – Владивосток, 2012. – С. 198–200.
43. Семкин, С.В. Точное и приближенные решения для одномерной цепочки изинговских спинов / С.В. Семкин, В.П. Смагин // Материалы 56-й Всеросс. науч. конф. – Владивосток, 2013. Т. 3. – С. 276–279.

44. Семкин, С.В. Одномерная цепочка изинговских спинов / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Территория новых возможностей. Вестник ВГУЭС. – 2013. – № 3(16). – С. 266–270.
45. Семкин, С.В. Цепочка изинговских спинов с подвижными примесями / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Материалы 57-й Всеросс. науч. конф. – Владивосток, 2014. Т. 3. – С. 181–183.
46. Wu, F.Y. The Potts model / F.Y. Wu // *Rev. Mod. Phys.* – 1982. – №54. – 235 p.
47. Муртазаев, А.К. Исследование влияния замороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в трехмерной модели Поттса / А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Азнаурова // ФТТ. – 2008. – № 50. – 703 с.
48. Сёмкин, С.В. Самосогласованные уравнения в модели Изинга разбавленного магнетика / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // *Изв. вузов. Физика.* – 2014. – № 57. – 54 с.
49. Chatelain, C. *Nucl. Phys* / С.В. Chatelain, Berche, W. Janke, P.-E. Berche // 2005. – В 719/3. – 275p.
50. Janke, W. *Nucl. Phys. R.* / W. Janke, Villanova // 1997. – В 489. – 679 p.
51. DeGrand, T.A. C. DeTar // *Nucl. Phys.* – 1983. – В 225. – 590 p.
52. Karsch, F. S. Stickan // *Phys. Lett.* – 2000. – В 488. – 319 p.
53. Kaneyoshi, T. *Physica A*, // 1995. – № 218(1-2). – 46 p.
54. Ghulghazaryan, R.G. P.M.A. Sloom / R.G. Ghulghazaryan, N.S. Ananikian. *ArXiv cond-mat/0202441v2*
55. Семкин, С.В. Перколяционная кривая в приближении самосогласованного поля / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Территория новых возможностей. Вестник ВГУЭС. – 2014. – № 4(17). – С. 233–237.
56. Семкин, С.В. Приближение среднего поля в модели Поттса с тремя состояниями / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Материалы 57-й Всеросс. науч. конф. – Владивосток, 2014. Т. 3. – С. 174–176.
57. Семкин, С.В. Фазовые состояния разбавленного изинговского магнетика в приближении среднего поля / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Материалы 57-й Всеросс. науч. конф. – Владивосток, 2014. Т. 3. – С. 177–180.
58. Freitas, A.S. *Physica* / A.S. Freitas, D.F. de Albuquerque, N.O. Moreno // 2012. – А 391. – 6332.
59. Belokon, V. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* / V. Belokon, V. Kapitan, O. Dyachenko // 2016. – №401. – 651.
60. Муртазаев, А.К. Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло / А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, М.К. Рамазанов // ФТТ. – 2005. – № 47(6). – 1125 p.
61. Birgeneau R J et al., *Phys. Rev. B*, 27, 6747 (1983)

62. Сёмкин, С.В. Кластерный способ построения приближения Бете для модели Изинга разбавленного магнетика / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин, Известия вузов. Физика. – 2017. Т. 60(10). – 140 р.
63. Смагин, В.П. Метод циклических кластеров в модели Изинга разбавленного магнетика / В.П. Смагин, С.В. Сёмкин / Территория новых возможностей. Вестник ВГУЭС. – 2018. – № 1. – С. 124–136.
64. Сёмкин, С.В. Разбавленный изинговский магнетик на решетке Бете / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Известия вузов. Физика. – 2015. – Т. 58, вып. 12. – С. 159–167. Semkin, S.V. Diluted Ising Magnet on the Bethe Lattice / S.V. Semkin, V. P. Smagin // Russian physics journal. – 2016. – Vol. 58, № 12. – P. 1848–1858.
65. Семкин, С.В. Модель Поттса с тремя состояниями на решетке Бете / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Территория новых возможностей. Вестник ВГУЭС. – 2015. – № 4(31). – С. 171–182.
66. Семкин, С.В. Усреднение по полям обменного взаимодействия в модели Поттса с произвольным числом состояний / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Материалы 58-й Всеросс. науч. конф. – Владивосток, 2015.
67. Семкин, С.В. Модель Поттса на решетке Бете с псевдохаотически распределенными немагнитными примесями / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Материалы 58-й Всеросс. науч. конф. – Владивосток, 2015.
68. Семкин, С.В. К вопросу о влиянии кристаллической анизотропии на температуру Кюри / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Материалы 58-й Всеросс. науч. конф. – Владивосток, 2015.
69. Сёмкин, С.В. Приближение среднего поля для модели Поттса разбавленного магнетика во внешнем поле / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Физика твердого тела. – 2016. – Т. 58, вып. 7. – С. 1306–1310; Semkin, S.V. Mean-Field Approximation for the Potts Model of a Diluted Magnet in the External Field / S.V. Semkin, V. P. Smagin // Physics of the Solid State. – 2016. – Vol. 58, № 7. – P. 1350–1354.
70. Сёмкин, С.В. Исследование модели Поттса разбавленного магнетика методом усреднения по локальным полям / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Физика твердого тела. – 2016. – Т. 58, вып. 8. – С. 1534–1536; Semkin, S.V. Investigation of the Potts Model of a Diluted Magnet by Local Field Averaging Technique / S.V. Semkin, V. P. Smagin // Physics of the Solid State. – 2016. – Vol. 58, №8. – P. 1587–1589.
71. Семкин, С.В. Одномерная модель Изинга с подвижными примесями / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Территория новых возможностей. Вестник ВГУЭС. – 2016. – № 2. – С. 114–120.
72. Семкин, С.В. Модель Поттса на решетке Бете во внешнем поле / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Территория новых возможностей. Вестник ВГУЭС. – 2016. – № 3. – С. 103–108.

73. Семкин, С.В. Метод усреднения по локальным обменным полям и метод Бете / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // *Материалы 59-й Всеросс. науч. конф.* – Владивосток, 2016. – С. 225–227.
74. Семкин, С.В. Использование различных кластеров для получения самосогласованных уравнений в модели Изинга / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // *Материалы 59-й Всеросс. науч. конф.* – Владивосток, 2016. – С. 228–230.
75. Семкин, С.В. Циклические кластеры в модели Изинга разбавленного магнетика / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // *Материалы 59-й Всеросс. науч. конф.* – Владивосток, 2016. – С. 231–234.
76. Зыков, А.А. Основы теории графов / А.А. Зыков. – М.: Вузовская книга, 2004.
77. Ананикян, Л.Н. Известия НАН Армении / Л.Н. Ананикян // *Физика.* – 2007. – № 42(1). – С. 17.
78. Ананикян, Н.С. Письма // Н.С. Ананикян, Л.Н. Ананикян, Л.А. Чахмакчян // *ЖЭТФ.* – 2011. – № 94(1). – С. 40.
79. Сёмкин, С.В. Модель Поттса на решетке Бете с немагнитными примесями во внешнем поле / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин, Е.Г. Гусев // *ТМФ.* – 2018. – № 197(2). – С. 290–295; *Theoret. and Math. Phys* / S.V. Sjomkin, V.P. Smagin, E.G. Gusev // *Potts Model on Bethe Lattice with Non-magnetic Impurities in an External Magnetic Field. Theoretical and Mathematical Physics.* – 2018. – № 197(2). – P. 1645–1649.
80. Семкин, С.В. Точное и приближенные решения для одномерной модели Изинга разбавленного магнетика / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // *Территория новых возможностей. Вестник ВГУЭС.* – 2018. – № 4. – С. 122–130.
81. Семкин, С.В. Приближенные методы исследования фазовых состояний в модели Поттса разбавленного магнетика / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // *Территория новых возможностей. Вестник ВГУЭС.* – 2017. – Т. 9, № 2. – С. 140–151.
82. Семкин, С.В. Оценка точности различных приближенных методов в модели Изинга разбавленного магнетика / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // *Материалы 60-й Всеросс. науч. конф.* – Владивосток, 2017. Т. III. – С. 182–185.
83. Семкин, С.В. Точное решение для одномерной модели Изинга с немагнитным разбавлением / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // *Материалы 60-й Всеросс. науч. конф.* – Владивосток, 2017. Т. III. – С. 186–189.
84. Семкин, С.В. Модель Поттса на решетке Бете с немагнитным разбавлением / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // *Материалы 60-й Всеросс. науч. конф.* – Владивосток, 2017. Т. III. – С. 190–193.

85. Сёмкин, С.В. Приближение Бете для чистого и разбавленного магнетика как усреднение по локальным обменным полям / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Известия вузов. Физика. – 2019. – Т. 62, вып. 1. – С. 153–158; Semkin, S.V. Bethe Approximation for Pure and Diluted Magnets as Averaging over Local Exchange Fields / S.V. Semkin, V.P. Smagin // Russian physics journal. – 2019. – Vol. 62. – № 1. – P. 172–178.
86. Смагин, В.П. Модель Гейзенберга с тремя состояниями на решетке Бете / В.П. Смагин, С.В. Семкин // Территория новых возможностей. Вестник ВГУЭС. – 2019. – № 1. – С. 75–81.
87. Афремов, Л.Л. Зависимость температуры Кюри от толщины ультратонкой пленки / Л.Л. Афремов, Ю.В. Кириенко, А.А.Петров // Известия Российской академии наук. Сер. физическая. – 2014. – Т. 78(2). – С. 172.
88. Афремов, Л.Л. Метод случайного поля в магнетизме наночастиц / Л.Л. Афремов, В.И. Белоконь, О.И. Дьяченко, А.А. Петров. – Владивосток: Изд-во ДВФУ, 2016. – 110 с.
89. Удодов, В.Н. Новые следствия гипотезы статистического подобия при низких температурах / В.Н. Удодов // ФТТ. – 2015. – Т. 57(10). – С. 2073–2077.
90. Дзюба, Ж.В. Критический индекс восприимчивости 1D-изинговского ферромагнетика замкнутого в кольцо / Ж.В. Дзюба, В.Н. Удодов // ФТТ. – 2018. – Т. 60(7). – С. 1323–1325.
91. Вонсовский, С.В. Магнетизм / С.В. Вонсовский. – М.: Наука, 1971. – С. 1032.
92. Parisi G Statistical Field Theory (Addison-Wesley, 1988)
93. Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов (М: Наука, 1982)
94. Mezard M, Parisi G, Virasoro M Spin-Glass Theory and Beyond (Singapore: World Scientific 1987)