

Сёмкин Сергей Викторович

Смагин Виктор Павлович

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса
Россия. Владивосток

Перколяционная кривая в приближении самосогласованного поля

Для модели Изинга разбавленного магнетика построена зависимость намагниченности от концентрации примеси при нулевой температуре в приближении самосогласованного поля. Проведено сравнение полученной зависимости с перколяционной кривой решетки Бете.

Ключевые слова и словосочетания: фазовые переходы, перколяционная кривая, модель Изинга, решетка Бете.

Исследование фазовых переходов в разбавленных и неупорядоченных магнетиках является предметом теоретических и экспериментальных исследований уже на протяжении многих лет [5]. В работах [1-4] мы предложили классификацию самосогласованных методов расчета намагниченности и критических точек чистых и разбавленных магнетиков. Известно, что намагниченность в модели Изинга разбавленного ферромагнетика в нулевом внешнем магнитном поле и при нулевой температуре совпадает с перколяционной кривой решетки – вероятностью (в зависимости от концентрации магнитных атомов) того, что данный магнитный атом принадлежит бесконечному кластеру таких атомов [5]. В настоящей работе мы вычисляем намагниченность разбавленного по узлам изинговского магнетика с координационным числом решетки q при нулевой температуре. Эту намагниченность (в зависимости от концентрации магнитных атомов) мы сравниваем с известной перколяционной кривой решетки Бете [5]. Рассмотрим модель Изинга с разбавлением по узлам. Гамильтониан этой модели имеет вид:

$$E(p) = -\sum_{\langle i, i' \rangle} \xi_i \xi_{i'} J \sigma_i \sigma_{i'} - H \sum_i \xi_i \sigma_i, \quad (1)$$

где σ_i - обычные изинговские переменные, определяющие ориентацию магнитного момента атома и принимающие значения +1 и -1;

J - обменный интеграл,

H - пропорциональна внешнему магнитному полю.

Случайная переменная ξ_i может быть равна 0 и 1, ее среднее значение $\langle \xi_i \rangle = p$ определяет вероятность заполнения i -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).

Согласно [1-4] одним из способов приближенного решения задачи с гамильтонианом типа (1) является следующий.

Рассмотрим кластер, состоящий из n атомов. Гамильтониан этого кластера выглядит так:

$$E_n = -\sum J \xi_i \sigma_i \xi_j \sigma_j - J \sum h_{im}^i \xi_i \sigma_i - H_{ext} \sum \xi_i \sigma_i. \quad (2)$$

Суммирование в первом слагаемом этого выражения производится по парам входящих в кластер атомов, являющихся ближайшими соседями. Второе слагаемое в (2) описывает взаимодействие атомов кластера с их ближайшими соседями, не входящими в кластер, а третье слагаемое – с внешним полем. Поля обменного взаимодействия h_{im}^i вычисляются для каждого атома кластера суммированием изинговских переменных (с учетом разбавления), соответствующих внешним атомам, соседним к данному.

Усредним величину $\frac{\sum q_i}{n}$ по ансамблю с гамильтонианом (2), рассматривая h_{im}^i как постоянные, а затем усредним полученное выражение по совместной функции распределения полей обменного взаимодействия $W_n(h_{im}^i)$. Построив аналогичное выражение для другого кластера, содержащего $n' \neq n$ атомов, и приравнявая эти два выражения, получим уравнение:

$$\langle \sigma \rangle = \left\langle \frac{\sum \left(\frac{\sum q_i}{n} \right) \exp(-\beta E_n)}{\sum \exp(-\beta E_n)} \right\rangle = \left\langle \frac{\sum \left(\frac{\sum q_i}{n'} \right) \exp(-\beta E_{n'})}{\sum \exp(-\beta E_{n'})} \right\rangle, \quad (3)$$

где $\beta = 1/kT$.

Дальнейший расчет зависит от того, в каком приближении рассматривать функцию распределения полей обменного взаимодействия $W_n(h_{im}^i)$. Простейшее приближение получим, если принять все h_{im}^i постоянными величинами, равными $q_i p \mu$, где q_i - число «внешних» соседей i -го атома, μ - характеризующий намагниченность параметр, определяющийся из решения самосогласованного уравнения (3). Для чистого ($p = 1$) магнетика, взяв $n = 1$ и $n' = 2$ в этом приближении, получим:

$$M = \text{th}(qK\mu + h) = \frac{\text{sh}(2(q-1)K\mu + 2h)}{\text{ch}(2(q-1)K\mu + 2h) + e^{-2K}}, \quad (4)$$

где $M = \langle \sigma \rangle$ - средняя намагниченность на узел,

$K = J/kT$ (k – постоянная Больцмана),
 $h = H_{\text{вн}}/kT$,
 q - координационное число решетки.

Нетрудно показать, что приближение (4) есть не что иное, как известное приближение Бете [3; 5].

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

$$\text{th}(Kqp\mu + h) = (1 - p)\text{th}(K(q - 1)p\mu + h) + p \frac{\text{sh}(2K(q-1)p\mu + 2h)}{\text{ch}(2K(q-1)p\mu + 2h) + e^{-2K}}, \quad (5)$$

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

Это уравнение переходит в (4) при $p = 1$ и имеет при $h = 0$ ненулевое решение при условии $K > K_c$,

где $K_c(p) = \frac{1}{2} \ln \frac{p+1}{p-1}$, (6)
 $p_c = \frac{1}{q} / (\frac{1}{q} - p_c)$ - перколяционный порог решетки Бете [5].

Заметим, что хотя уравнения (5) дают точное решение для модели Изинга на решетке Бете при $p = 1$ и точное значение перколяционного порога p_c для этой решетки, их все же нельзя рассматривать как точное решение задачи Изинга для разбавленного магнетика на решетке Бете.

Зависимость намагниченности при нулевой температуре ($K \rightarrow \infty$) и нулевом внешнем поле ($h = 0$) от концентрации является, как известно, вероятностью того, что некоторый магнитный атом принадлежит бесконечному кластеру $W(p)$ [5]. Эта функция находится из решения уравнения

$$\begin{cases} \text{th}(qpx) = (1 - p)\text{th}((q - 1)px) + p\text{th}(2(q - 1)px) \\ W(p) = \text{th}(qpx) \end{cases}. \quad (7)$$

На рисунке 1 показаны графики функции $W(p)$ для $q = 3$ (кривая 1) и для $q = 4$ (кривая 3).

Для решетки Бете перколяционная кривая $W_0(p)$ может быть вычислена точно [5]. Для построения этой кривой можно использовать метод производящей функции, как в [5], но тот же результат может быть получен и из простых комбинаторных соображений. Обозначим V вероятность того, что выбранный случайно узел решетки Бете разбавленного магнетика не принадлежит бесконечному кластеру магнитных атомов. Очевидно, что V связано с $W_0(p)$ простым соотношением:

$$1 - V = pW_0(p). \quad (8)$$

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

$$V = (1 - p) + pZ^q. \quad (9)$$

Первое слагаемое в этом выражении – вероятность того, что данный узел не занят магнитным атомом. Второе – вероятность того, что в узле находится магнитный атом, но все соседние узлы не принадлежат бесконечному кластеру.

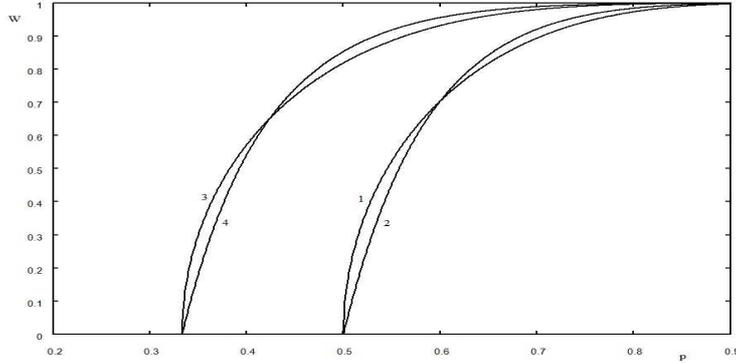


Рис. 1. Графики функции $w(p)$

Рассматривая теперь один из узлов, соседних к данному, можно записать следующее соотношение для вероятности Z :

$$Z = (1 - p) + pZ^{q-1}. \quad (10)$$

Уравнение (10) имеет тривиальное решение $Z = 1$. Исключив этот корень, получим

$$\sum_{i=0}^{q-2} Z^i = 1/p. \quad (11)$$

Из уравнений (8) и (9) получим выражение $W_0(p)$ через Z :

$$W_0(p) = 1 - Z^q. \quad (12)$$

Уравнения (10) - (12) дают решение задачи о нахождении перколяционной кривой $W_0(p)$ для решетки Бете. Графики функций $W_0(p)$ для $q = 3$ и $q = 4$ приведены на рис. 1 (кривые 2 и 4 соответственно). Функция $W_0(p)$ обладает следующими свойствами. Она не равна нулю только в интервале $p_c < p \leq 1$, где $p_c = 1/(q - 1)$, и монотонно возрастает до 1 с ростом p . При $p = p_c$ функция $W_0(p)$ имеет конечную производную, которую можно определить из (11) и (12). Дифференцируя эти уравнения по p и исключив производную от Z , получим (с учетом того, что при $p = p_c$ $Z = 1$):

$$W'_0(p_c) = \frac{2q(q-1)}{q-2}. \quad (13)$$

Вернемся теперь к функции $W(p)$, определяемой уравнениями (7). Как видно из рис. 1, эта функция близка к $W_0(p)$; с ростом q различие между ними уменьшается. Однако наблюдается различие в поведении этих функций вблизи p_c . Покажем, что при $p = p_c$ производная функции $W(p)$ (в отличие от производной $W_0(p)$) бесконечна. Обозначим в (7) $y = qpx$ и разложим все гиперболические тангенсы в (7) до второго ненулевого члена вблизи $y = 0$. В результате получим, что вблизи $p = p_c$

$$W(p) = A(q)(p - p_c)^{1/2}, \quad (14)$$

где $A(q) = \frac{3(1+p_c)^2}{\sqrt{p_c(4-3p_c-p_c^2)}}$, т.е. $W'(p) = \frac{1}{2}A(q)(p - p_c)^{-1/2}$.

1. 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.
2. Сёмкин, С.В. Методы получения самосогласованных уравнений для изинговского магнетика / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Изв. вузов. Физика. – 2013. - Т. 56. - Вып. 2. - С. 9 – 14.
3. 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 Владивостокского государственного университета экономики и сервиса. – 2012. - №3(16). - С. 266-270.
4. Семкин, С.В. Одномерная цепочка изинговских спинов / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Территория новых возможностей. Вестник Владивостокского государственного университета экономики и сервиса. – 2013. - №3(16). - С. 266-270.
5. Займан, Дж. Модели беспорядка: Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем / Дж. Займан // Мир. - М., 1982. - 591 с.