

С.В. Сёмкин, В.П. Смагин

Приближенные методы в теории чистых и разбавленных магнетиков

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса (ВГУЭС)

С.В. Сёмкин В.П. Смагин

ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ В ТЕОРИИ ЧИСТЫХ И РАЗБАВЛЕННЫХ МАГНЕТИКОВ

Монография

Владивосток Издательство ВГУЭС 2019 Рецензенты: В.И. Белоконь, д-р физ.-мат. наук, профессор, кафедра теоретической и ядерной физики школы естественных наук ДВФУ; В.О. Осуховский, д-р физ.-мат. наук, профессор, кафедра физики и общетехнических дисциплин ТОВВМУ им. С.О. Макарова

Сёмкин, С.В.

СЗО Приближенные методы в теории чистых и разбавленных магнетиков : монография / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин ; Владивостокский государственный университет экономики и сервиса. – Владивосток: Изд-во ВГУЭС, 2019. – 220 с.

ISBN 978-5-9736-0562-9

Монография посвящена разработке приближенных методов анализа критических явлений и фазовых состояний в чистых и разбавленных магнетиках. В работе представлена система приближенных методов, охватывающая как известные методы, такие как метод среднего поля, метод Бете и т.д., так и методы, разработанные авторами. К их числу относятся кластерный метод, метод псевдохаотически распределенных примесей и другие. С помощью этих методов проанализировано поведение магнетиков Изинга, Поттса и Гейзенберга как чистых, так и с немагнитным разбавлением.

Может быть рекомендована студентам, аспирантам и научным работникам, специализирующимся в области физики твердого тела, физики магнитных явлений и ядерной физики.

УДК 537.611 ББК 22.334

ISBN 978-5-9736-0562-9

- © ФГБОУ ВО «Владивостокский государственный университет экономики и сервиса», оформление, 2019
- © Сёмкин С.В., Смагин В.П., текст, 2019

оглавление

ВЕДЕНИЕ5
Глава 1. МОДЕЛИ МАГНЕТИКОВ И МЕТОДЫ ИХ АНАЛИЗА8
1.1.Дискретная модель с парным взаимодействием
на регулярной решетке8
1.2. Решение для решетки Бете15
1.3. Усреднение по полям взаимодействия
1.4. Кластеры взаимодействующих спинов
1.5. Усреднение по полям взаимодействия
для разбавленных магнетиков
Глава 2. ОДНОМЕРНАЯ ЦЕПОЧКА ИЗИНГОВСКИХ СПИНОВ 36
2.1. Намагниченность и спиновые корреляции в цепочке
изинговских спинов без немагнитного разбавления
2.2. Одномерная модель Изинга с подвижными примесями45
2.3. Точное и приближенные решения для одномерной
модели Изинга разбавленного магнетика52
Глава 3. МОДЕЛЬ ИЗИНГА ЧИСТОГО И РАЗБАВЛЕННОГО
МАГНЕТИКА
3.1. Изинговский магнетик на квадратной решетке
с анизотропным взаимодействием62
3.2. Модель Изинга разбавленного ферромагнетика
в приближении самосогласованного поля
3.3. Корреляционные функции чистого и разбавленного
изинговского магнетика в приближении эффективного поля87
3.4. Способ построения приближения Бете в модели Изинга
разбавленного магнетика95
Глава 4. ПОДВИЖНЫЕ ПРИМЕСИ И ПСЕВДОХАОТИЧЕСКОЕ
ПРИБЛИЖЕНИЕ103
4.1. Применение метода среднего поля к модели Изинга
с подвижными примесями и к модели Поттса
с тремя состояниями105
4.2. Модель Изинга с подвижными примесями
на произвольной решетке Бете115
4.3. Корреляционные функции
и псевдохаотическое приближение126

Глава 5. МОДЕЛЬ ПОТТСА ЧИСТОГО И РАЗБАВЛЕННОГО
МАГНЕТИКА
5.1. Модель Поттса с тремя состояниями на решетке Бете137
5.2. Приближенные методы исследования фазовых состояний
в модели Поттса разбавленного магнетика148
5.3. Модель Поттса с немагнитными примесями
на решетке Бете в псевдохаотическом приближении162
Глава 6. ЦИКЛИЧЕСКИЕ КЛАСТЕРЫ
И РЕКУРСИВНЫЕ РЕШЕТКИ179
6.1. Метод циклических кластеров в модели Изинга
разбавленного магнетика180
6.2. Модель Изинга с немагнитным разбавлением
на рекурсивных решетках189
6.3. Приближение Бете для чистого и разбавленного
магнетиков как усреднение по локальным обменным полям197
6.4. Модель Гейзенберга с тремя состояниями на решетке Бете205
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

введение

Настоящая монография посвящена разработке приближенных методов анализа поведения систем многих взаимодействующих частиц, таких в первую очередь как магнетики. Весьма эффективным инструментом анализа этих 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. Кроме того, принцип универсальности позволяет распространить многие 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. 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.

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 для двумерной модели Изинга на квадратной решетке в отсутствии 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. Таким образом, актуальной представляется задача разработки таких приближенных методов анализа решеточных моделей, которые, с одной стороны, позволяли бы получать связи между макроскопическими параметрами, а с другой – отражали бы существенные особенности поведения системы, такие как влияние немагнитного разбавления, внешнего поля и других параметров на магнитные состояния и фазовые переходы. Решению именно этой задачи и посвящена данная работа.

Разумеется, эта задача неоднократно рассматривалась многими исследователями. Мы полагаем, что нам удалось разработать 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 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 данной работе.

Монография состоит из шести глав. В главе 1 рассмотрена решеточная модель с парным взаимодействием общего вида для чистого и разбавленного магнетиков. Найдено решение этой модели для чистого магнетика на решетке Бете, сформулирован и обоснован метод усреднения по локальным обменным полям (или в более общей форме – метод усреднения по конфигурациям соседних спинов). Описано 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. Кроме того, описана идея метода псевдохаотического приближения.

В главе 2 рассмотрена одномерная цепочка изинговских спинов как чистая, так и с немагнитным разбавлением. 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. 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 вмороженными примесями (псевдохаотическое приближение). Получено точное решение для одномерной модели Изинга с неподвижными, хаотично расположенными немагнитными примесями.

В главе 3 рассмотрено применение метода усреднения по полям обменного взаимодействия к кластерам из двух магнитных атомов в модели Изинга как без немагнитных примесей, так и с немагнитным разбавлением на простых решетках и построен вариант ренормгруппового преобразования фиксированного масштаба. Предложена интерпретация приближения Бете, основанная на сопоставлении спиновых кластеров различного

6

размера на дереве Кейли. На основе этой интерпретации развит метод построения приближения Бете для разбавленного по узлам или связям изинговского магнетика.

В главе 4 рассмотрено приближение среднего поля и приближение Бете применительно к разбавленному изинговскому магнетику с подвижными примесями и к модели Поттса с тремя состояниями. Найдены корреляционные функции и решение задачи о разбавленном изинговском магнетике на решетке Бете в псевдохаотическом приближении.

В главе 5 рассматривается модель Поттса с произвольным числом состояний во внешнем поле и с немагнитным разбавлением. Для анализа этой модели используется как «классический» метод среднего поля, так и его модификация, позволяющая более точно учитывать влияние немагнитного разбавления. 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.

В главе 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. 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. Кроме того, рассмотрена модель Гейзенберга с тремя состояниями на решетке Бете.

Нумерация формул, графиков и таблиц в пределах каждой главы отдельная, ссылки на цитируемые работы сквозные, библиографический список приведен в конце монографии.

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

8

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

$$\mathcal{H} = -\sum_{(i,j)} J_{ij} \hat{S}_i \, \hat{S}_i - g \mu_B H_s \sum_i \hat{S}_i \tag{1.1}$$

Здесь \tilde{S}_i – оператор спина, локализованного в i – м узле некоторой регулярной решетки, H_{e} – внешнее магнитное поле, g – фактор Ланде, μ_{B} – магнетон Бора. Первая сумма в выражении (1.1) – это сумма по всем (упорядоченным) парам узлов, вторая – по всем узлам. Константы *l_{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 гамильто-

ниану

$$H = -\sum_{(i,j)} J_{ij} \left(\alpha S_i^x S_j^x + \beta S_i^y S_j^y + \gamma S_i^z S_j^z \right) - g\mu_B(\vec{H}_e, \sum_i \vec{S}_i)$$
(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 (ХҮ – 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 \tilde{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» σ_i (i - номер узла), каждый из которых может принимать ^{*n*} различных дискретных значений *m*₁, *m*₂, ... *m*_n, скалярных или векторных. Гамильтониан модели с парным взаимодействием можно представить в таком виде

$$H(\{\sigma\}) = -\sum_{(i,j)} \varphi(\sigma_i, \sigma_j) - \sum_i \psi(H_e, \sigma_i)$$
(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 σ_i ; – это множество образует ансамбль состояний системы.

К дискретным моделям с парным взаимодействием относится, вопервых, известная модель Изинга [6]. Действительно, если n = 2, $m_1 = 1$, $m_2 = -1$, $\psi(H_e, \sigma_i) = H_e \sigma_i \ _{H} \varphi(\sigma_i, \sigma_j) = J_{ij} \sigma_i \sigma_j \ _{H3} (1)$ получим гамильтониан модели Изинга [6]. Если же $\varphi(\sigma_i, \sigma_j) = J_{ij} \delta(\sigma_i, \sigma_j)$, $\psi(H_e, \sigma_i) = H_e \delta(\sigma_i, m_1) \ _{\Gamma Z e} \delta(\sigma_i, \sigma_j) = \begin{cases} 1, \ \sigma_i = \sigma_j \ 0, \ \sigma_i \neq \sigma_j \ , \ _{H3} (1.3) \ _{$

Согласно общим принципам статистической механики [24, 25] равновесное значение (A) 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({σ})* (вероятности различных состояний) равна

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

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

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

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

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left(\frac{1}{kT} \sum_{(i,j)} \varphi(\sigma_i, \sigma_j) + \frac{1}{kT} \sum_i \psi(H_e, \sigma_i)\right)$$
(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 ξ_l , которая может быть равна 0 и 1, а ее среднее значение $(\xi_l) = b_s$ определяет вероятность заполнения l -го узла. Гамильтониан (1.3) заменяется на

$$H_{s}(\{\sigma\}) = -\sum_{(i,j)} \xi_{i}\xi_{j}\varphi(\sigma_{i},\sigma_{j}) - \sum_{i}\xi_{i}\psi(H_{e},\sigma_{i})$$
(1.5)

Такая модель называется моделью с разбавлением по узлам. Можно также сформулировать *модель замороженных связей*. В ней считается, что определенная доля $1 - p_b$ 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 взаимодействие вия двух соседних атомов примеси, U_{12} - энергию взаимодействия атома примеси и магнитного атома и U_{22} - энергию взаимодействия двух магнитных атомов. Пусть переменные σ_i принимают значения $m_1, m_2, ..., m_n$, если в узле находится магнитный атом и значение ε (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} $\tilde{\varphi}(\sigma_i, \sigma_j) = \varphi(\sigma_i, \sigma_j) + U_{22}(1 - \delta(\varepsilon, \sigma_j))(1 - \delta(\sigma_i, \varepsilon)), r = \frac{\mu}{kT} \mu_{T}(\mu_{-XUMU})$ ческий потенциал). Таким образом, модель с подвижными немагнитными

примесями с n состояниями спина можно рассматривать просто как модель без примесей, но с парным взаимодействием с n+1 состояниями.

Несколько сложнее обстоит дело с вмороженными примесями. Вычисление статистической суммы с гамильтонианом (1.5) должно, по идее, производиться при заданных значениях переменных ξ_1 , 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 ξ_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 σ_i и σ_j .) Если теперь полагать, что в каждой из таких подсистем реализуется свой случайный набор значений «параметров заполнения» [§], то по закону больших чисел свободную энергию системы можно представить как среднее значение по всем возможным конфигурациям { { }}:

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

где $Z(\{\xi\})$ – статистическая сумма, вычисленная при заданном значении параметров ξ_i , $P(\{\xi\})$ – 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 вмороженными и подвижными примесями. Обозначим

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

свободную энергию системы, вычисленную для заданного набора значений параметров *§*1. Предположим теперь, что примеси могут все же перемещаться по узлам решетки, то есть значения параметров ξ_1 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

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

или

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

а полная свободная энергия

$$F = -kT' \ln Z \tag{1.9}$$

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

$$\lim_{x \to 0} \frac{\ln(\sum_{i} P_{i} y_{i}^{x})}{x} = \sum_{i} P_{i} \ln y_{i} \sum_{i \neq i} P_{i} = 1$$

.....

Используя это соотношение в (1.9), получим $\lim_{T' \to \infty} F = -kT \sum_{\{\xi\}} P(\{\xi\}) \ln Z(\{\xi\}) + \sum_{\{\xi\}} P(\{\xi\}) U(\{\xi\})$

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]. 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.



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

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. Проделав эту процедуру N раз, получим так называемое дерево Кэйли. Решеткой Бете называется внутренняя (далекая от граничных точек) часть этого графа при $N \to \infty$ Рассмотрим вычисление статистической суммы (1.4) на решетке Бете мето-

дом, описанным в [6]. Статистическую сумму (1.4) представим в виде $Z = \sum V(\sigma)$

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

где

Вероятность P_i того, что центральный спин σ_0 принимает значение m_i

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

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

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

 $s^{(j)}$ обозначает все спины на j -м подграфе, кроме σ_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

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

И

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

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

$$P_{i} = \frac{\exp(\frac{\psi(H_{e},m_{i})}{kT})x_{i,N}^{q}}{\sum_{j}\exp(\frac{\psi(H_{e},m_{j})}{kT})x_{j,N}^{q}}_{M} \quad \text{для} \quad i = 1 \dots n - 1$$

$$(1.10)$$

И

$$P_n = \frac{\exp(\frac{\psi(H_{\mathcal{C}}, m_i)}{kT})}{\sum_j \exp(\frac{\psi(H_{\mathcal{C}}, m_j)}{kT}) x_{j,N}^q}$$

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

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

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

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

Отсюда получим рекуррентные соотношения для $\chi_{l,N}$

$$x_{i,N} = \frac{\exp\left(\kappa\varphi(m_n,m_i) + \frac{\psi(H_{\varrho},m_n)}{kT}\right) + \sum_{j=1}^{n-1}\exp\left(\kappa\varphi(m_j,m_i) + \frac{\psi(H_{\varrho},m_j)}{kT}\right) x_{j,N-1}^{q-1}}{\exp\left(\kappa\varphi(m_n,m_n) + \frac{\psi(H_{\varrho},m_n)}{kT}\right) + \sum_{j=1}^{n-1}\exp\left(\kappa\varphi(m_j,m_n) + \frac{\psi(H_{\varrho},m_j)}{kT}\right) x_{j,N-1}^{q-1}}$$
(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 $N \to \infty$. 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.

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 требующей непосредственного вычисления статистической суммы. Этот подход, который в дальнейшем будет называться методом усреднения по полям взаимодействия или методом среднего спина, можно описать следующим образом [1, 14].

Рассмотрим один из узлов решетки, содержащий спин σ_0 . Совокупность спинов, непосредственно взаимодействующих с σ_0 , будем обозначать $\{\sigma_j\}$. Если мы рассматриваем модель с взаимодействием только между ближайшими соседями, $\{\sigma_j\}$ состоит из q спинов, содержащихся в соседних к σ_0 узлах. Если же взаимодействие простирается на вторую координационную сферу или дальше, совокупность $\{\sigma_j\}$ содержит и соответствующие спины. В любом случае, будем полагать, что взаимодействие между спинами достаточно короткодействующее для того, чтобы можно было считать, что количество спинов q', содержащихся в $\{\sigma_j\}$ достаточно мало по сравнению с общим числом спинов. Выделим теперь в гамильтониане (1.3) слагаемые, связанные с взаимодействием спинов σ_0 и σ_j :

$H(\lbrace \sigma \rbrace) = H_1(\sigma_0, \lbrace \sigma_j \rbrace) + H_s(s, \lbrace \sigma_j \rbrace)$

Здесь ^s – множество спинов, не совпадающих с σ_0 и не входящих в $\{\sigma_j\}$

$$H_1(\sigma_0, \{\sigma_j\}) = -\sum_{j=1}^{q'} \varphi(\sigma_0, \sigma_j) - \psi(H_\varepsilon, \sigma_0)$$

Тогда статистическую сумму (1.4) можно записать в виде

$$Z = \sum_{\{\sigma_j\}} \left(\sum_{\sigma_0} \exp\left(-\frac{1}{kT} H_1(\sigma_0, \{\sigma_j\})\right) \right) Z_s(\{\sigma_j\}), \quad (1.12)$$

где

$$Z_{s}(\lbrace \sigma_{j}\rbrace) = \sum_{s} \exp\left(-\frac{1}{kT}H_{s}(s, \lbrace \sigma_{j}\rbrace)\right).$$

Вычисляя по (1.12) вероятность P_i того, что спин σ_0 имеет значение m_i , получим

$$P_i = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma_j\}} Z_s(\{\sigma_j\}) \exp\left(-\frac{1}{kT} H_1(m_i, \{\sigma_j\})\right),$$

а вероятность того, переменные $\{\sigma_j\}$ имеют заданные значения:

$$W(\lbrace \sigma_j \rbrace) = \frac{Z_s(\lbrace \sigma_j \rbrace)}{Z} \left(\sum_{\sigma_0} \exp\left(-\frac{1}{kT} H_1(\sigma_0, \lbrace \sigma_j \rbrace)\right) \right)$$

Значит,

$$P_{i} = \sum_{\{\sigma_{j}\}} p_{i}(\{\sigma_{j}\}) W(\{\sigma_{j}\}), \qquad (1.13)$$

где

$$p_i(\{\sigma_j\}) = \frac{\exp(-H_1(m_i,\{\sigma_j\})/kT)}{\sum_{k=1}^n \exp(-H_1(m_k,\{\sigma_j\})/kT)}$$
(1.14)

Выражение (1.13) можно интерпретировать следующим образом: $p_i(\{\sigma_j\})_{-}$ это условная вероятность того, что спин σ_0 имеет значение m_i при условии, что значения соседних спинов зафиксированы, а $W(\{\sigma_j\})_{-}$ вероятность того, что эти значения равны σ_j (вероятность условия). Если решетка не содержит вмороженных примесей, ее узлы эквивалентны в термодинамическом пределе и средние величины, найденные для конкретного спина σ_0 совпадают со средними по ансамблю. Иными словами, вероятность P_i того, что произвольно взятый спин решетки находится в состоянии m_i может быть получена усреднением (1.14) по ансамблю, или по функции распределения $W(\{\sigma_j\})$ конфигураций спинов, взаимодействующих с одним и тем же узлом.

$$P_{i} = \left\langle \frac{\exp\left(-H_{1}(m_{i},\{\sigma_{j}\})/kT\right)}{\sum_{i=1}^{n} \exp\left(-H_{1}(m_{i},\{\sigma_{j}\})/kT\right)} \right\rangle_{W(\{\sigma_{j}\})}$$
(1.15)

(Обобщение метода на случай разбавленных магнетиков рассмотрим ниже.)

Учитывая, что каждый из спинов σ_i может принимать только одно из n значений, при отсутствии анизотропии усреднение в (1.15) можно представить, как усреднение по «числам заполнения» N_i – количеству соседей, находящихся в состоянии m_i .

$$P_{l} = \left\langle \frac{\exp\left((\sum_{k=1}^{n} N_{k} \varphi(m_{i}, m_{k}) + \psi(H_{e}, m_{i}))/kT\right)}{\sum_{i=1}^{n} \exp\left((\sum_{k=1}^{n} N_{k} \varphi(m_{i}, m_{k}) + \psi(H_{e}, m_{i}))/kT\right)} \right\rangle_{W(N_{1}, \dots, N_{n})}$$
(1.16)

Выражения (1.15) или (1.16) можно использовать для построения приближенных способов нахождения величин P_i путем того или иного выбора приближенного вида функции W. Если в (1.16) 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

$$P_{i} = \frac{\exp((q \sum_{k=1}^{n} P_{k} \varphi(m_{i}, m_{k}) + \psi(H_{\ell}, m_{i}))/kT)}{\sum_{i=1}^{n} \exp((q \sum_{k=1}^{n} P_{k} \varphi(m_{i}, m_{k}) + \psi(H_{\ell}, m_{i}))/kT)}$$
(1.17)

Для модели Изинга или одноосной модели Гейзенберга $\varphi(m_i, m_k) = Jm_i m_k, \psi(H_{\varrho}, m_i) = H_{\varrho} m_i$. Поэтому

$$P_i = \frac{\exp\left(m_i(qKM+h)\right)}{\sum_{i=1}^n \exp\left(m_i(qKM+h)\right)},\tag{1.18}$$

где $M = \sum_{i=1}^{n} P_i m_i$ – средняя намагниченность, K = J/kT, $h = H_e/kT$. Умножив каждое из равенств (9) на m_i и складывая, получим

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

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

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

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 (8) получим

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

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

Другой способ выбора функции распределения в (1.15) или (1.16) 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

$$W(N_{1}, ..., N_{n}) = \sum_{L_{1}, L_{2}, ..., L_{n}} C_{L_{1}, L_{2}, ..., L_{n}}^{q} P_{1}^{L_{1}} P_{2}^{L_{2}} ..., P_{n}^{L_{n}} \prod_{i=1}^{n} \delta(N_{i} - L_{1})$$
(1.19)
$$C_{L_{1}, L_{2}, ..., L_{n}}^{q} = \frac{q!}{L_{1}!L_{2}!...L_{n}!}$$

Подставляя теперь такое полиномиальное распределение в (1.16), получим систему уравнений для определения величин P_i .

Во многих моделях может оказаться так, что «одночастичный» гамильтониан $H_1(\sigma_0, \{\sigma_j\})$, входящий в (1.14), оказывается зависящим от одной или нескольких функций величин σ_j , например, от суммы этих величин или от суммы их квадратов. В модели Изинга или Гейзенберга

$$H_1(\sigma_0, \{\sigma_j\}) = -J\sigma_0 \sum_{j=1}^{q'} \sigma_j - \sigma_0 H_e$$
(1.20)

в модели Поттса с тремя состояниями гамильтониан $H_1(\sigma_0, \{\sigma_j\})$ можно представить как функцию $\sum_{j=1}^{q'} \sigma_j = \sum_{j=1}^{q'} \sigma_j^2$. Такие функции можно назвать «полями взаимодействия», а усреднение в (1.15) становится, фактически, усреднением по функции распределения этих полей. Действительно, пусть, например, гамильтониан $H_1(\sigma_0, \{\sigma_j\})$ зависит только от $h = \sum_{j=1}^{q'} \sigma_j$. Тогда (1.13) примет вид

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

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_{in} .

Рассмотренное выше решение модели с парным взаимодействием на решетке Бете тоже можно трактовать как вариант усреднения по полям взаимодействия. Для этого можно рассмотреть следующее обобщение выражения (1.13). Пусть f – произвольная функция любых спинов $\{\sigma_j\}$, не зависящая от σ_0 . Тогда $\{f\}_i$ условное среднее значение функции f, при условии, что $\sigma_0 = m_i$, вычисляется так

$$\langle f \rangle_i = \frac{\sum_{\{\sigma_j\}} \left(f \exp\left(-\frac{1}{kT} H_1(m_i, \{\sigma_j\})\right) \right) Z(\{\sigma_j\})}{\sum_{\{\sigma_j\}} \left(\exp\left(-\frac{1}{kT} H_1(m_i, \{\sigma_j\})\right) \right) Z(\{\sigma_j\})}$$

что можно записать как

$$\langle f \rangle_i P_i = \sum_{\{\sigma_j\}} \left(\frac{f \exp\left(-\frac{1}{kT}H_1(m_i, \{\sigma_j\})\right)}{\sum_{\sigma_0} \exp\left(-\frac{1}{kT}H_1(\sigma_0, \{\sigma_j\})\right)} \right) W(\{\sigma_j\})$$

Переходя теперь к «числам заполнения» N_j , получим, что для модели с парным взаимодействием выполняется тождество

$$\langle f \rangle_i P_i = \langle \frac{f \exp\left(K \sum_{k=1}^n N_k \varphi(m_i, m_k) + \psi(h, m_i)\right)}{\sum_{i=1}^n \exp\left(K \sum_{k=1}^n N_k \varphi(m_i, m_k) + \psi(h, m_i)\right)} \rangle_{W(N_1, \dots, N_n)}$$
(1.21)

В частности, для модели Изинга [5]

$$\langle f\sigma_0 \rangle = \langle f \operatorname{th}(Kh + h_{ex}) \rangle$$

Кроме вероятностей P_i будем рассматривать матрицу условных вероятностей $\{P_{ij}\}$, где P_{ij} вероятность того, что ближайший сосед спина, находящегося в состоянии m_i , находится в состоянии m_j . Для величин P_{ij} можно записать n условий нормировки $\sum_j P_{ij} = 1$, кроме того, выполняются n условий $\sum_j P_{ij} P_j = P_i$, из которых только n-1 являются независимыми, поскольку сумма всех этих условий приводит к тождественному равенству. Таким образом, $n^2 + n$ вероятностей P_{ij} и P_i должны удовлетворять 2n независимым условиям. Остальные $n^2 - n$ условий для этих величин можно составить с помощью (1.21). Во-первых будем считать, что усреднение в правой части (1.21) проводится по функции

$$W(N_1, \dots N_n) = \sum P_i W_i$$

где W_i – полиномиальные распределения (1.19), в которых вместо P_j используется P_{ij} . Если в (1.21) положить f = 1 получим n-1 независимых уравнений. Еще n-1 уравнений получим из (1.21) полагая $f = \sum \sigma_i$, где σ_i – ближайшие соседи центрального спина σ_0 . Левая часть равенства (1.21) примет при этом вид $qP_i \sum P_{ij}m_j$. Взяв теперь $f = \sum \sigma_i^2$ получим в левой части (1.21) $qP_i \sum P_{ij}m_j^2$. Всего таким путем можно получить, согласно теореме Вандермонда [40], ровно n независимых групп по n-1уравнений в каждой, что в совокупности с 2n условиями нормировки дает $n^2 + n$ уравнений для $n^2 + n$ неизвестных. Решение этой системы и является решением для решетки Бете (1.10).

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 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 σ_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 $\{\sigma_i\}_c$. Как и в предыдущем разделе, обозначим $\{\sigma_j\}$ совокупность не входящих в кластер спинов, каждый из которых взаимодействует хотя бы с одним спином кластера и обозначим s множество всех остальных спинов решетки. Тогда гамильтониан (1.3) представляется в виде

$$H(\lbrace \sigma \rbrace) = H_c(\lbrace \sigma_i \rbrace_c, \lbrace \sigma_j \rbrace) + H_s(s, \lbrace \sigma_j \rbrace),$$

где

$$H_c(\{\sigma_i\}_c, \{\sigma_j\}) = -\sum_{\sigma_i \in \{\sigma_i\}_c} \sum_{\sigma_j \in \{\sigma_j\}} \varphi(\sigma_i, \sigma_j) - \sum_{\sigma_i \in \{\sigma_i\}_c} \psi(H_e, \sigma_i)$$

- «кластерный»

гамильтониан, а статистическая сумма (1.4) в виде

$$Z = \sum_{\{\sigma_j\}} \left(\sum_{\{\sigma_i\}_c} \exp\left(-\frac{1}{kT} H_c(\{\sigma_i\}_c, \{\sigma_j\})\right) \right) Z_s(\{\sigma_j\})$$

Тогда вероятность того, переменные $\{\sigma_j\}$ имеют заданные значения, то есть вероятность определенной конфигурации спинов, взаимодействующих со спинами кластера, есть

$$W(\lbrace \sigma_j \rbrace) = \frac{Z_s(\lbrace \sigma_j \rbrace)}{Z} \left(\sum_{\lbrace \sigma_i \rbrace_c} \exp\left(-\frac{1}{kT} H_c(\lbrace \sigma_i \rbrace_c, \lbrace \sigma_j \rbrace)\right) \right)$$

Вероятность определенной конфигурации спинов кластера $\{\sigma_i\}_c$

$$P(\{\sigma_i\}_c) = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma_j\}} Z_s(\{\sigma_j\}) \exp\left(-\frac{1}{kT} H_c(\{\sigma_i\}_c, \{\sigma_j\})\right)$$

Разделив и умножив каждое слагаемое в этой сумме на соответствующую «кластерную» статсумму

$$Z_c(\lbrace \sigma_j \rbrace) = \sum_{\lbrace \sigma_i \rbrace_c} \exp\left(-\frac{1}{kT}H_c(\lbrace \sigma_i \rbrace_c, \lbrace \sigma_j \rbrace)\right),$$

получим вероятность $P(\{\sigma_i\}_c)$ в виде аналогичном (1.13)

$$P(\{\sigma_i\}_c) = \sum_{\{\sigma_j\}} p(\{\sigma_i\}_c, \{\sigma_j\}) W(\{\sigma_j\})$$
(1.22)

где

$$p(\lbrace \sigma_i \rbrace_c, \lbrace \sigma_j \rbrace) = \frac{1}{Z_c(\lbrace \sigma_j \rbrace)} \exp\left(-\frac{1}{kT} H_c(\lbrace \sigma_i \rbrace_c, \lbrace \sigma_j \rbrace)\right)$$
(1.23)

условная вероятность определенной конфигурации $\{\sigma_i\}_c$ кластерных спинов, при условии, что взаимодействующие с ними спины $\{\sigma_j\}$ имеют заданные значения. Формулы (1.22) и (1.23) являются, конечно же, обобщением формул (1.13) и (1.14); в частном случае, когда множество $\{\sigma_i\}_c$ состоит только из одного спина σ_0 , формулы (1.22) и (1.23) описывают метод усреднения по обменным полям, описанный в предыдущем разделе.

Рассмотрим теперь кластер из двух соседних спинов σ_1 и σ_2 . Обозначим $\{\sigma_j^{(1)}\}$ спины, непосредственно взаимодействующие со спином σ_1 , но не взаимодействующие со спином σ_2 ; аналогично $\{\sigma_j^{(2)}\}$, а множество спинов, взаимодействующих с обоими кластерными спинами обозначим $\{\sigma_j^{(12)}\}$. Иными словами, если для некоторого спина σ в гамильтониане (1.3) есть слагаемое $\varphi(\sigma_1, \sigma)$, но не слагаемого $\varphi(\sigma_2, \sigma)$, то этот спин принадлежит множеству $\{\sigma_j^{(1)}\}$, если нет первого слагаемого, но есть второе – множеству $\{\sigma_j^{(2)}\}$, а если присутствуют оба этих слагаемых – множеству $\{\sigma_{j}^{(12)}\}$. Очевидно, множество $\{\sigma_{j}\}$ есть объединение непересекающихся $\{\sigma_{j}^{(1)}\}, \{\sigma_{j}^{(2)}\}, \{\sigma_{j}^{(12)}\}$.

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

$$P_{i} = \left\langle \frac{1}{2} \frac{\sum_{j} \exp\left(-H_{2}(m_{i},m_{j})/kT\right) + \sum_{j} \exp\left(-H_{2}(m_{j},m_{i})/kT\right)}{\sum_{(i,j)} \exp\left(-H_{2}(m_{i},m_{j})/kT\right)} \right\rangle_{W_{2}}, \quad (1.24)$$

где

$$H_{2}(m_{i}, m_{k}) = \varphi(m_{i}, m_{k}) + \psi(h, m_{i}) + \psi(h, m_{k}) + \sum_{j} \varphi\left(m_{i}, \sigma_{j}^{(1)}\right) + \sum_{j} \varphi\left(m_{k}, \sigma_{j}^{(2)}\right) + \sum_{j} \left(\varphi\left(m_{i}, \sigma_{j}^{(12)}\right) + \varphi\left(m_{k}, \sigma_{j}^{(12)}\right)\right)$$

Функция W_2 есть функция распределения для вероятностей различных конфигураций соседних спинов $\{\sigma_j^{(1)}\}, \{\sigma_j^{(2)}\}, u, \{\sigma_j^{(12)}\}\}$. 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 $H_c(\{\sigma_i\}_c, \{\sigma_j\})$ при увеличении числа кластерных спинов ⁿ. Однако даже при сравнительно небольшом числе ⁿ можно гораздо точнее учесть топологию решетки, чем при использовании «односпинового» кластера (1.13) и (1.14). Например, можно рассмотреть кластер в виде замкнутой цепочки спинов (цикличе-

ский 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 (1.22) вычислить некоторую вероятность, относящуюся к одному или нескольким спинам. Например, вероятности P_t 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 ^Фо, из (1.18) получим

$$M = \langle \operatorname{th}(Kh + h_e) \rangle_{W_1(h)}, \qquad (1.25)$$

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 σ_0 . Возьмем теперь кластер из двух соседних атомов. Множество $\{\sigma_i\}_c$ состоит теперь из двух спинов σ_1 и σ_2 , а «кластерный гамильтониан»

$$H_{2}(\sigma_{1},\sigma_{2}) = -J\sigma_{1}\sigma_{2} - (Jh_{1} + H_{e})\sigma_{1} - (Jh_{2} + H_{e})\sigma_{2},$$

где «поля взаимодействия» h_1 и h_2 являются суммами значений внешних спинов, взаимодействующих с кластерными спинами σ_1 и σ_2 соответственно. Вычисляя для этого кластера намагниченность с помощью (1.24), получим

$$M = \left\langle \frac{\mathrm{sh}(K(h_1+h_2)+2h_{\ell})}{\mathrm{ch}(K(h_1+h_2)+2h_{\ell})+\mathrm{e}^{-2K}\mathrm{ch}K(h_1-h_2)} \right\rangle_{W_2(h_1,h_2)}$$
(1.26)

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

Приравнивая теперь правые части (1.25) и (1.26), получим

$$\langle \operatorname{th}(Kh+h_e)\rangle_{W_1(h)} = \langle \frac{\operatorname{sh}(K(h_1+h_2)+2h_e)}{\operatorname{ch}(K(h_1+h_2)+2h_e)+e^{-2K}\operatorname{ch}(K(h_1-h_2))} \rangle_{W_2(h_1,h_2)}$$
(1.27)

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 (1.27) выполняется тождественно, а намагниченность ^{*M*} найдется из любого равенства (1.25) или (1.26). 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 (1.27) 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 μ – некоторый неизвестный параметр, то есть, заменим поля h, h_1 и h_2 их средними значениями, которые будем считать пропорциональными числу спинов, взаимодействующих с σ_0 , σ_1 и σ_2 , соответственно. Тогда из (1.27) получим

$$th(Kq\mu + h_e) = \frac{sh(2K(q-1)\mu + 2h_e)}{ch(2K(q-1)\mu + 2h_e) + e^{-2K}}$$
(1.28)

Решив теперь это уравнение относительно μ и подставив это решение в левую (или правую) часть (1.28), 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 (1.19), 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 (гл. 3 и 4), что приближение (1.28) 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 (1.14) выражение $-H_1(m_i, \{\sigma_j\})/kT$ может быть представлено в виде

$$-\frac{H_1(m_i,\{\sigma_j\})}{kT} = \sum_{l=1}^{n-1} K_l m_i^l \sum_{j=1}^q \sigma_j^l + \sum_{l=1}^{n-1} h_l m_i^l$$
(1.29)

Обозначив
$$\varphi_{1,l} = \sum_{j=1}^{q} \sigma_j^l$$
 из (1.14), получим
 $\overline{\sigma_0^s} = \frac{\sum_{l=1}^{n} m_l^s \exp(\sum_{l=1}^{n-1} (K_l \varphi_{1,l} + h_l) m_l^l)}{\sum_{l=1}^{n} \exp(\sum_{l=1}^{n-1} (K_l \varphi_{1,l} + h_l) m_l^l)},$
(1.30)

где σ_0^s есть условное среднее значение σ_0^s при фиксированных $\varphi_{1,l}$. Согласно (1.15) усреднение этого выражения по функции распределения величин $\varphi_{1,l}$ даст среднее значение σ_0^s по ансамблю.

Аналогичную процедуру можно построить и для кластера из двух атомов, используя выражение (1.22). Обозначив

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

где σ_{1j} совокупность спинов, находящихся во внешних, не входящих в кластер, узлов, соседних к первому атому кластера, σ_{2j} аналогичная сово-

купность спинов для второго атома. Теперь, используя (1.23), можно найти условные средние $\frac{1}{2}(\sigma_1^s + \sigma_2^s)$ 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

$$\overline{\sigma_0^s} = \frac{1}{2} \left(\sigma_1^s + \sigma_2^s \right) \tag{1.31}$$

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. Вопервых, 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 (1.29) не равны нулю, то система (1.31) в совокупности с указанными выше дополнительными условиями позволяет вычислить все величины $\varphi_{1,l}$. Средними по ансамблю (σ_0^s) будем теперь считать значения, вычисляемые по (1.30) при подстановке в это выражение полученных решений. Если же некоторые K_l в выражении (1.29) равны нулю, можно прибегнуть к следующему приему. Найдем (σ_0^s) 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 вмороженными 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 спинам 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, т.е. 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 вмороженными 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 = th(Kh), где h – среднее поле взаимодействия. Для чистого магнетика h = qM. Для магнетика с вмороженными примесями $h = (q_i \sigma_i)$ – среднее по ансамблю значение произведения спина σ_i на число его ближайших соседей q_i , которое является случайной величиной, принимающей целочисленные значения от 0 до q и в среднем равной q^b . В самом простом и грубом приближении, не учитывающем перколяционных свойств решетки, можно считать

$$h = \langle q_i \sigma_i \rangle \approx \langle q_i \rangle \langle \sigma_i \rangle = q b M$$

Если теперь приближенно учесть то обстоятельство, что в отсутствии 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 $(q_i\sigma_i)$, мы учитываем только спины бесконечного кластера. Тогда уравнение для нахождения спонтанной намагниченности в приближении среднего поля

$$M = \operatorname{th}(KqbP(b)M)$$

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

Граница этой области определяет зависимость температуры Кюри от концентрации магнитных атомов

$$T_c(b) = bP(b)T_c(1) \tag{1.32}$$

где $T_c(1) = qJ/k$ – температура Кюри чистого магнетика. Как показано в [8], равенство (1.32) 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 вмороженными 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 (1.32) по концентрационной зависимости температуры Кюри.

Обобщим метод усреднения по обменным полям на случай магнетика с вмороженными примесями. Для модели с вмороженным разбавлением по узлам (или связям), например с гамильтонианом (1.5), основное выражение метода усреднения по полям взаимодействия $P_i = \sum_{\{\sigma_j\}} p_i(\{\sigma_j\}) W(\{\sigma_j\})$ все еще остается в силе. Но теперь вероятности P_i в общем случае различны для различных магнитных атомов. Согласно идее самоусреднения, для получения вероятности $\overline{P_i}$, связанных с макроскопическими наблюдаемыми величинами, вероятности P_i нужно усреднить по всем магнитным атомам решетки, т.е.

$$\bar{P}_i = \sum_{\{\sigma_j\}} p_i(\{\sigma_j\}) \, \bar{W}(\{\sigma_j\}) , \qquad (1.33)$$

где $\overline{W}(\{\sigma_j\})$ – функция распределения, усредненная по всем узлам решетки, занятыми магнитными атомами. Область определения функции $\overline{W}(\{\sigma_j\})$ состоит теперь не только из всех возможных конфигураций $\{\sigma_j\}$, 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 (1.33) можно строить приближенные методы нахождения $\bar{P}_{\bar{i}}$, используя те или иные приближения для $\bar{W}(\{\sigma_j\})$. Однако основная проблема с использованием этого выражения для построения приближенных методов решения заключается в упомянутой выше корреляции между значениями переменных σ_j 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 вмороженным беспорядком и взаимодействием только между ближайшими соседями. Тогда из (1.33) получим

$$M = \langle \operatorname{th}(Kh + h_e) \rangle_{W(h)}$$
(1.34)

Функцию распределения по полям взаимодействия построим в биноминальном приближении следующим образом

$$W(h) = \sum_{n=0}^{q} C_{q}^{n} b^{n} (1-b)^{q-n} W_{n}(h), \qquad (1.35)$$

где

$$W_n(h) = \sum_{k=0}^n C_n^k (P_1)^k (P_2)^{n-k} \delta(h - (2k - n))$$
(1.36)

 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 (1.35), (1.36) в (1.34), 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 $\{\sigma_i\}_c$ совокупность входящих в кластер спинов. Но теперь нужно учесть возможность того, что некоторые узлы кластера могут быть заняты немагнитными примесями. Обозначим $\{\xi_t\}_c$ совокупность «кластерных» переменных $\{i, onpedensemultum and another$ ние узлов кластера магнитными атомами или атомами примеси и усредним (1.22) по всем возможным вариантам распределения примесей в узлах решетки, не входящих в кластер. Получим

$$\overline{P}(\{\sigma_i\}_c, \{\xi_i\}_c) = \sum_{\{\sigma_j\}} p(\{\sigma_i\}_c, \{\xi_i\}_c, \{\sigma_j\}) \overline{W}(\{\sigma_j\})$$
(1.37)

По вероятностям $\overline{P}(\{\sigma_i\}_c, \{\xi_i\}_c)$ 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 (1.37), можно приближенно вычислять соответствующие средние, построив функцию $\overline{W}(\{\sigma_j\})$ 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 (гл. 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 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. 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, т.е. 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 приближения. А кроме того, одномерные структуры с обменным взаимодействием могут быть реализованы экспериментально [89], таким обра-

зом, 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 вмороженными 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 удается 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,

37

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]):

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

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

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

$$f_2(K,h,h_1,h_2) = \frac{\operatorname{sh}(K(h_1+h_2)+2h)}{\operatorname{ch}(K(h_1+h_2)+2h)+e^{-2K}\operatorname{ch}(K(h_1-h_2))}.$$
 (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 μ , через который выражается и намагниченность m. Возможны два способа реализации этой процедуры – «однокластерный» и «ренонормгрупповой» (глава 1). В однокластерном способе рассматривается один кластер из n атомов и используются равенства

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

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

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

И

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

Рассмотрим приближенную плотность вероятности

$$W_n^f(h_1, \dots, h_n, \mu) = \delta(h_1 - q_1 \mu) \dots \delta(h_n - q_n \mu)$$
(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 $W_n^s(h_1, ..., h_n, \mu)$ 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 биноминальное распределение, а совместное распределение $W_n^s(h_1, ..., h_n, \mu)$ 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, ..., N). Пусть в каждом узле этой цепочки находится изинговский «спин», при-

нимающий значения 1 и -1. Положим, что взаимодействуют только спины, находящиеся в соседних узлах. Тогда энергия системы имеет вид:

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

Здесь I – 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:

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

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

Этот результат можно получить, представив статистическую сумму (6) в виде следа N-й 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:

$$g_{ij} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle = (1 - M^2) \left(\frac{\mathrm{ch}h - \sqrt{\mathrm{sh}^2 h + \mathrm{e}^{-4K}}}{\mathrm{ch}h + \sqrt{\mathrm{sh}^2 h + \mathrm{e}^{-4K}}} \right)^{|j-i|}$$
(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 1а (для кластера из одного атома) и 1b (для кластера из двух атомов). Уравнения для намагниченности ^{*m*} в этих приближениях таковы

$$m = \text{th}(2Km + h) \qquad m = \frac{\frac{\sinh(2Km + 2h)}{\cosh(2Km + 2h) + e^{-2K}}}{(2.9)}$$

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 отсутствии 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 использовав функцию распределения (2.4), получим:

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

Этот метод (который мы в дальнейшем будем обозначать 1с) 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

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

Отсюда

$$x = (\sinh h + \sqrt{D})e^{2K-h}, \quad D = \sinh^2 h + e^{-4K}$$
$$m = \frac{x^2 e^h - e^{-h}}{x^2 e^h + e^{-h}} = \frac{\sinh}{\sqrt{\sinh^2 h + e^{-4K}}} = M(K, h)$$

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

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

где

$$A_{1} = (\operatorname{th}(2K+h) + \operatorname{th}(-2K+h) - 2\operatorname{th}h)/4,$$

$$B_{1} = (\operatorname{th}(2K+h) - \operatorname{th}(-2K+h) - 2)/2,$$

$$C_{1} = (\operatorname{th}(2K+h) + \operatorname{th}(-2K+h) + 2\operatorname{th}h)/4$$

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

$$A_2m^2 + B_2m + C_2 = 0, (2.12)$$

где

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

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

$$C_{2} = \left(\frac{\operatorname{sh}(2K+2h)}{\operatorname{ch}(2K+2h)+\mathrm{e}^{-2K}} + \frac{\operatorname{sh}(-2K+2h)}{\operatorname{ch}(-2K+2h)+\mathrm{e}^{-2K}} + 2\frac{\operatorname{sh}(2h)}{\operatorname{ch}(2h)+\mathrm{e}^{-2K}}\right)/4$$

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

$$m = A_{1}\mu^{2} + (B_{1} + 1)\mu + C_{1},$$

$$(A_{1} - A_{2})\mu^{2} + (B_{1} - B_{2})\mu + (C_{1} - C_{2}) = 0.$$
(2.13)

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:

$$W_{1}(h_{1}) = P_{1,1}\delta(h_{1}-2) + 2P_{1,-1}\delta(h_{1}) + P_{-1,-1}\delta(h_{1}+2)_{, (2.14)}$$

где

$$P_{1,1} = \frac{(1+M)^2}{4} + \frac{g_{12}}{4}, \quad P_{1,-1} = \frac{1-M^2}{4} - \frac{g_{13}}{4}, \quad P_{-1,-1} = \frac{(1-M)^2}{4} + \frac{g_{13}}{4}$$
$$W_2(h_1, h_2) = Q_{1,1}\delta(h_1 - 1)\delta(h_2 - 1) + Q_{1,-1}\delta(h_1 - 1)\delta(h_2 + 1) + Q_{1,-1}\delta(h_1 - 1)\delta(h_2 - 1) + Q_{1,-1}\delta(h_1 - 1)\delta(h_2 + 1) + Q_{1,-1}\delta(h_1 - 1)\delta(h_2 - 1) + Q_{1,-1}\delta(h_1 - 1)\delta(h_1 - 1)\delta(h_2 - 1) + Q_{1,-1}\delta(h_1 - 1)\delta(h_1 - 1)\delta(h_1$$

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

$$g_{14} = -(A_2M^2 + B_2M + C_2)/A_2$$

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):

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

Теперь можно найти корреляционную функцию ^{*g*}₁₂ по формуле

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

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 1a и 1b соответственно, кривые 3 и 4 – по методам 2a и 2b.



Рис. 2.1

Рис.2.2

Кривая 6 – точное решение, а кривая 5 – ренормгрупповой метод с усреднением по биноминальной 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 2b, кривая 3 – по методу 2c, а кривая 4 – точное решение 2.8.



На рисунке 2.3 представлены корреляционные функции \mathcal{G}_{13} найденные по методу 2b (кривая 2), 2c (кривая 3) и точное решение – кривая 4. Кривая 1 показывает корреляционную функцию \mathcal{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 \mathcal{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 ⁸ – 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 биноминальной функции распределения (2a и 2b), дают более точное значение намагниченности, чем методы среднего поля, основанные на кластерах тех же размеров (1a и 1b). Кроме того, эти методы позволяют получить разумную оценку для корреляционной функции спинов, находящихся на расстоянии, на единицу большем, 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:

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

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

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

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

Если λ_1 , λ_2 и λ_3 – собственные числа матрицы (2.20), то статистическая сумма (1) равна $Z_N = \lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N$. Пусть λ_1 есть максимальное из собственных чисел матрицы **V**. Тогда в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$) формулы (2.19) перейдут в

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

Собственные числа (2.20) находятся из характеристического уравнения:

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

где

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

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

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

Дифференцируя (2.21) по r и по h_{e} и используя (2.22), можно записать выражения для нахождения M и r через λ_{1} и производные коэффициентов A, B, u C:

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

Решая (2.22) численно или по формулам Кардано и находя λ_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 σ_i^2 и σ_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 σ_i и σ_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 σ_i и σ_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

$$\langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{\sigma\}} V(\sigma_1, \sigma_2) \dots V(\sigma_{i-1}, \sigma_i) \sigma_i^2 V(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \dots$$

$$\dots V(\sigma_{j-1}, \sigma_j) \sigma_j^2 V(\sigma_j, \sigma_{j+1}) \dots V(\sigma_N, \sigma_1),$$
(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.

$$S = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Введем матрицу $(0 \ 0 \ 1)'$ и запишем (2.24) в следующем виде:

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

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

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

Тогда (2.25) запишется в виде:

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

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

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

Выражая (2.26) через элементы матрицы ⁵, получим:

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

$$g_{ij}^{p} = \langle \sigma_{i}^{2} \sigma_{j}^{2} \rangle - b^{2} = A_{1} x_{1}^{j-i} + A_{2} x_{2}^{j-i}$$
(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

 $S_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$, что приводит для g_{ij}^{mp} к уравнению, аналогичному (2.28):

$$g_{ij}^{mp} = B_1 x_1^{j-i} + B_2 x_2^{j-i}$$
(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 λ_2 и λ_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 становится 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 $3 - g_{12}^{m}(b)$.

На рис. 2.5 и 2.6 показаны графики позиционной g_{12}^{p} (1), магнитнопозиционной 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 $h_e = 0,3$.



Рис. 2.6. Концентрационная зависимость корреляционных функций ближайших соседей в одномерной цепочке при K = 1, $h_{\sigma} = 0.3$, $\gamma = 1$. 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 $3 - g_{12}^{m}(b)$

Позиционная корреляционная функция g_{ij}^{μ} 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, $h_{\sigma} = 0$, $\gamma = \gamma_0$. 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}^{r} 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}^{ν} , то есть распределение 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 \mathcal{G}_{ij}^{r} , 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 γ , 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 удается 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 $\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_n$ $Z_n = \sum_{\sigma_1,...,\sigma_n} \exp(K \sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i \sigma_{i+1} + h \sum_{i=1}^n \sigma_i) = F_n(+1) + F_n(-1)$

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:

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

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

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

Вводя обозначения

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

получим

$$m_n = \frac{1}{n} \frac{y_n + z_n}{1 + x_n}$$

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

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

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

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

корни которого

$$X_{1,2} = e^{K-h} (-e^K \sinh h \pm R) R = \sqrt{e^{2K} \sinh^2 h + e^{-2K}}$$

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

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

где

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \alpha & \alpha e^{-2K} \\ \alpha e^{-2K-2h} & \alpha e^{-2h} \end{pmatrix}$$

 $\alpha = \frac{1}{1 + X_1 e^{-2K}}$

Поэтому

$$\binom{y}{Z}_{n} = \mathbf{A}^{n-1} \binom{y}{Z}_{1} + \left(\sum_{i=0}^{n-2} \mathbf{A}^{i} \right) \binom{1}{-X_{1}}$$

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

Пусть **W** – матрица, приводящая **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 $n \to \infty$

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

значит,

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

А предельное значение намагниченности

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

где W_{ij} – элементы матрицы W, W_{ij} – матрицы W^{-1} . Вычислив эти элементы, получим

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

то есть

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

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

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

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

из которого можно найти производные b^{bk} при b = 0. В частности

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

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

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

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

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

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 большего 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 σ_0 неразорванными связями, а $h_{in}^r = \sum \sigma_i$ сумма по всем q соседям σ_0 , в том числе и по тем, связи с которыми разорваны. Очевидно, что для чистого, не разбавленного магнетика $h_{in} = h_{in}^i$ для любого атома. Пусть $W_1(h_{in})$ функция распределения по полям h_{in} , а $W_2(h_{in}, h_{in}^r) dh_{in}^r)$ Тогда

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

И

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

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 = th(Kqbm + h). Более точное приближение получим используя для $W_1(h_{in})$ биноминальное 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 вмороженными, 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]:

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

где ^{*х*} – корень уравнения

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

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*}.)



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

Глава З. 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 удается 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 магнетику 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 известному 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 вмороженными 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:

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

Здесь σ_i – изинговские переменные, принимающие значения +1 и -1. (В моделях магнетиков эти переменные связаны с проекцией магнитного момента на выделенную ось.) I_{ij} – константы, определяющие величину обменного взаимодействия, H_{ex} пропорциональна внешнему магнитному полю. В решеточных моделях I_{ij} обычно принимается равной I 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 некоторых 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]:

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

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

В работе [5] получено выражение:

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

где

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

сумма обменного и внешнего полей, а (...) – 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

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

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,

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

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 σ_j , входящие в выражение для H_{in} , рассматриваются как независимые случайные переменные, принимающие значения +1 и -1 с вероятностями (1 + m)/2 и (1 - m)/2 соответственно. Применив эту процедуру для решеточной модели с координационным числом q, и $J_{ij} = J$ для ближайших соседей и нулю для всех остальных пар атомов, получим, при отсутствии внешнего поля, следующее уравнение для намагниченности m

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

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

$$\sum_{i=0}^{N} C_{q}^{i}(q-2i) \operatorname{th} K_{c}(q-2i) = 2^{q-1}$$
(3.7)

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

Таблица 3.1

q	Точные		Метод среднего		Метод усреднения		Ренорм-
	значения	- для решетки	поля		по обменным по-		группо-
	$K_{c,\pi\pi\sigma}$	Бете			ЛЯМ		вое пре-
	- для		<i>n</i> = 1	<i>n</i> = 2	n = 1	<i>n</i> = 2	образо-
	решеток						вание
3	0,658	0,549	0,333	0,369	0,475	0,503	0,630
4	0,370	0,347	0,250	0,263	0,324	0,331	0,358
	(тет.)						
	0,441 (кв.)						
6	0,214	0,203	0,167	0,171	0,197	0,198	0,206
	(куб.)					0,201	0,243
	0,275 (тр.)						

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 $J_2 = (1 - \varepsilon)J_{\mu}J_{ij} = 0_{\pi}$ для всех остальных пар атомов. Параметр ε определяет степень анизотропии – при $\varepsilon = 0$ анизотропия отсутствует, а при $\varepsilon = \pm 1$ квадратная решетка распадается на не связанные между собой горизонтальные или вертикальные линейные цепочки атомов. Точное значение критической точки как функции ε для этой модели находится из уравнения [4]:

$$\operatorname{sh}(2(1+\varepsilon)K_{c})\operatorname{sh}(2(1-\varepsilon)K_{c}) = 1$$
 (3.8)

Среднее значение обменного поля $(H_i) = 2(1 + \varepsilon)Jm + 2(1 - \varepsilon)Jm = 4Jm$ _{не зависит от параметра анизо-}тропии ε , а значит в приближении среднего поля $K_c(\varepsilon) = 1/4$. Если же

использовать процедуру усреднения по обменным полям, то для $K_{c}(\varepsilon)$ получим следующее уравнение:

$$th 4K_c + th 2(1+\varepsilon)K_c + th 2(1-\varepsilon)K_c = 2$$
(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 – единичный атом, усреднение по полям, 6 – среднее поле, кластер из двух пар атомов, 7 – среднее поле, единичный 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:

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

$$s_n = \frac{\sum \left(\frac{\sum \sigma_l}{n}\right) \exp(-\beta E_n)}{\sum \exp(-\beta E_n)}$$
(3.11)

Усредняя теперь это выражение по всей решетке и предполагая, что $\langle \sigma_i \rangle = \langle s_n \rangle = m_{, \text{ получим}}$

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

$$E_2 = -J(\sigma_1 \sigma_2 + h_1 \sigma_1 + h_2 \sigma_2)_{.}$$
(3.13)

Вычисляя средний спин по кластеру (3.11), получим:

$$s_{2} = \frac{\operatorname{sh}K(h_{1}+h_{2})}{\operatorname{ch}K(h_{1}+h_{2})+e^{-2K}\operatorname{ch}K(h_{1}-h_{2})}.$$
(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:

$$m = \frac{\operatorname{sh2}(z-1)Km}{\operatorname{ch2}(q-1)Km + \exp\left(-2K\right)}.$$
(3.15)

Отсюда получаем уравнение для критической точки:

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

Решения (3.16) при *q* = **3**, **4** *u* **6** указаны в табл. 3.1.

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

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



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

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

Среднюю намагниченность m одного атома можно приравнять μ – решению (3.17). Или считать $m = \text{th}(qK\mu + \beta H_{ex})$ - 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 специальным образом подобранных («бесконечномерных») решетках. На рис. 3.2 показаны графики $m(K^{-1})$ 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 m и K_c методом усреднения по обменным полям, левую часть (3.14) нужно приравнять m, а правую усреднить по функции распределения полей обменного взаимодействия $W_2(h_1, h_2)$, вычисленную в предположении, что спины всех соседних к кластеру атомов статистически независимы. Здесь возможны два случая. В одном случае может оказаться, что среди внешних атомов, соседних к первому атому кластера, нет ближайших соседей его второго атома. Так будет для шестиугольной решетки (q = 3), для квадратной или тетраэдрической (q = 4) и для кубической (q = 6). В другом случае может оказаться, что некоторые атомы, соседние к одному узлу кластера одновременно являются соседними и к его второму узлу – так, например, будет для плоской треугольной решетки (q = 6). В первом случае поля h_1 и h_2 являются (в рамках метода усреднения по обменным полям) статистически независимыми,

$$W_{2}(h_{1},h_{2}) = W_{1}(h_{1})W_{1}(h_{2})_{H}$$
$$W_{1}(h) = \sum_{i=0}^{q-1} C_{q-1}^{i} \left(\frac{1+m}{2}\right)^{i} \left(\frac{1-m}{2}\right)^{q-1-i} \delta(h+q-2i-1)_{.} (3.19)$$

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 биноминальные распределения, аналогичные (3.19).

Проделав описанную выше процедуру для решеток с координационными числами 3, 4 и 6, получим критические точки, приведенные в табл. 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) ($m = (s_1)(m)$), 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 – $m = \mu$.



Снова рассмотрим плоскую квадратную решетку с анизотропным обменным взаимодействием. Возьмем два кластера, состоящих из двух соседних атомов каждый. Атомы первого кластера расположены горизон-

тально, 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 $K_c(\varepsilon)$:

$$\frac{(3-\varepsilon)K_c}{1+\exp(-2(1+\varepsilon)K_c)} + \frac{(3+\varepsilon)K_c}{1+\exp(-2(1-\varepsilon)K_c)} = 1$$
(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 $(\sigma_i) = m$ – средней намагниченности атомов, окружающих кластер. Рассматривая два кластера, содержащих n и 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

$$\frac{\partial \langle s_n \rangle}{\partial m}\Big|_{m=0} = \frac{\partial \langle s_{\widetilde{n}} \rangle}{\partial \widetilde{m}}\Big|_{\widetilde{m}=0} . \tag{3.21}$$

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

$$K_c = \frac{1}{2} \ln \frac{q}{q-2} \tag{3.22}$$

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

Если (s_1) и (s_2) вычислить методом усреднения по обменным полям, из (3.21) получим:
$$f_1(K_c) = f_2(K_c)$$
(3.23)

$$f_{1}(K_{c}) = \frac{1}{2^{q}} \sum_{i=0}^{q} C_{q}^{i} (q-2i) thK_{c}(q-2i) _{M}$$

$$f_{2}(K_{c}) = \frac{1}{2^{2q-3}} \sum_{i=0}^{q-1} \sum_{j=0}^{q-1} C_{q-1}^{i} C_{q-1}^{j} ((q-1) - (i + j)) + j)) \frac{sh(2K_{c}((q-1) - (i+j)))}{ch(2K_{c}((q-1) - (i+j))) + e^{-2K_{c}}ch(2K_{c}(i-j))}$$

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

$$f_{2}(K_{c}) = \frac{1}{2^{2q-3}} \sum_{i=0}^{z} \sum_{j=0}^{z} \sum_{r=0}^{t} C_{z}^{i} C_{z}^{j} C_{t}^{r} (h_{1} + h_{2} + h_{12}) + h_{12} \frac{\operatorname{sh}(K_{c}(h_{1} + h_{2} + 2h_{12}))}{\operatorname{ch}(K_{c}(h_{1} + h_{2} + 2h_{12})) + e^{-2K_{c}} \operatorname{ch}(K_{c}(h_{1} - h_{2}))}$$

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 ν следующим образом.

Формально уравнение (3.21) совпадает с условием существования ненулевого решения в самосогласованной модели, получаемой приравни-

ванием правых частей (3.12) для кластеров, содержащих n и n атомов. Однако, с точки зрения ренормгруппового преобразования, смысл (3.21) заключается в стационарности критической точки при масштабных преобразованиях. Критический показатель корреляционной длины ν рассчитывается при линеаризации (3.21) вблизи критической точки и использования соотношения [16]

$$\frac{\partial \tilde{K}}{\partial K}\Big|_{K=K_{\mathcal{C}}} = \left(\frac{n}{\tilde{n}}\right)^{\frac{1}{\nu D}}, \qquad (3.24)$$

где ^D – размерность пространства. Из (3.21) получим

$$\frac{\partial \vec{K}}{\partial K}\Big|_{K=K_{c}} = \frac{f_{n}'}{f_{n}'}\Big|_{K=K_{c}}, \quad f_{n}(K) = \frac{\partial \langle s_{n} \rangle}{\partial m}\Big|_{m=0}. \quad (3.25)$$

Применяя описанную процедуру к кластерам из одного и двух атомов и вычисляя (s_n) 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:

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

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

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 ^{*v*} приведены в табл. 3.2.

q	Точные значения 1/v 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	

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]

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

Здесь σ_l – обычные изинговские переменные, определяющие ориентацию магнитного момента атома и принимающие значения +1 и -1; l – обменный интеграл, H пропорциональна внешнему магнитному полю. Случайная переменная ξ_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:

$$\langle \sigma \rangle = \langle \text{th}\beta J h_1 \rangle \tag{3.28}$$

где $h_1 = \sum \sigma_j$ (суммирование производится по соседним к данному узлу спинам) – «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:

$$E_n = -J \sum \sigma_i \sigma_j - J \sum h_{in}^i \sigma_i$$
(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 обменного взаимодействия h_{in}^i вычисляются для каждого атома кластера суммированием изинговских переменных, соответствующих внешним атомам, соседним к данному.

Усредним величину $\frac{\sum \sigma_{\bar{i}}}{n}$ по ансамблю с гамильтонианом (3.29), рассматривая h_{in}^i как постоянные, а затем усредним полученное выражение по совместной функции распределения полей обменного взаимодействия $W_n(h_1, ..., h_n)$. Приравнивая результат этого усреднения к $\langle \sigma \rangle$, получим:

$$\langle \sigma \rangle = \left\langle \frac{\Sigma(\frac{\Sigma \sigma_i}{n}) \exp(-\beta E_n)}{\Sigma \exp(-\beta E_n)} \right\rangle_{;}$$
(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 $W_n(h_1, ..., h_n)$ тем или иным приближенным выражением, в которое средняя намагниченность $m = \langle \sigma \rangle$ входит как неизвестный параметр. Например, взяв в (3.28) $W_1(h_1) = \delta(h_1 - qm)$, где q - координационное число решетки, получим известное приближение среднего поля [6]. Если же использовать для ^{W₁(h₁)} биноминальное 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

$$\langle \sigma_{\mathbf{1}} \rangle = \langle \text{th}Kh \rangle_{W_{\mathbf{1}}^{q}(h)}_{W} \tag{3.31}$$

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

ИЛИ

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

$$b_s(\sigma_1) = b_s(\operatorname{th} Kh)_{W_1^q(h)}, \qquad (3.33)$$

а для кластера из двух узлов –

$$b_{s}(\sigma_{2}) = b_{s}^{2} \left\langle \frac{\operatorname{shK}(h_{1}+h_{2})}{\operatorname{chK}(h_{1}+h_{2})+\mathrm{e}^{-2K}\operatorname{chK}(h_{1}-h_{2})} \right\rangle_{W_{2}^{q}(h_{1},h_{2})} + b_{s}(1 - b_{s}) \frac{1}{2} \left\langle \operatorname{thK}h_{1} + \operatorname{thK}h_{2} \right\rangle_{W_{2}^{q}(h_{1},h_{2})}$$

$$(3.34)$$

В этих выражениях $\langle \sigma_1 \rangle_{\rm H} \langle \sigma_2 \rangle_{-}$ 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:

$$W_1^q(h) = \delta(h - mqb) \tag{3.35}$$

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

$$(3.36)$$

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:

$$m = \text{th}Kqbm \tag{3.37}$$

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

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

имеет ненулевое решение при любых значениях ^{*b*}.

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

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

Среднюю намагниченность m одного магнитного атома можно приравнять μ – решению (13). Или считать $m = \text{th}Kqb\mu$ – 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

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

 $b_{c} = 1/(q-1)_{- \text{ перколяционный порог решетки Бете.}}$



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 ($K \to \infty$) от концентрации m(b) является, как известно [8], вероятностью того, что некоторый магнитный атом принадлежит бес-

конечному кластеру ^{*P*(*b*)}. Согласно (3.39) эта функция находится из решения уравнения

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

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



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

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. 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:

$$1 - V = bP_0(b)$$
(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

$$V = (1 - b) + bZ^{q}$$
(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:

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

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

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

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

$$P_{0}(b) = 1 - Z^{q}$$
(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 $b_c < b \le 1$, 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 $b = b_c Z = 1$)

$$P_0'(b_c) = \frac{2q(q-1)}{q-2}.$$
(3.46)

На рисунке 3.6 показаны также графики функции $P(b)_{dля} q = 3$ (кривая 1) и для q = 4 (кривая 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 qразличие 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 отличии от производной $P_0(b)$) бесконечна. 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 $b = b_c$

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

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



где

Рис. 3.6

В работе [1] предложен другой приближенный метод нахождения функций распределения и основанная на нем методика нахождения спонтанной намагниченности. Величины σ_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 биноминальному закону от 0 до q с параметром b. Функция распределения $W_1^q(h)$ выглядит в этом случае следующим образом:

$$W_{1}^{q}(h) = \sum_{i=0}^{q} C_{q}^{i} b^{i} (1-b)^{q-i} \sum_{j=0}^{i} C_{j}^{j} \left(\frac{1+m}{2}\right)^{j} \left(\frac{1-m}{2}\right)^{i-j} \delta(h-(2j-i)).$$
(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. Предельным переходом $K \to \infty$ можно найти перколяционную кривую в этом приближении $P_{01}(b)$. Например, для q = 3 (шестиугольная решетка) получим:

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

Эта функция обращается в ноль при $b \le b_c$, 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 отличии 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) (табл. 3.3, столбец «1»).

Таблица 3.3

Точные и приближенные значения перколяционных порогов простых решеток

Тип решетки (коор- динационное 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
Тетраедр. (4)	0,430 0,390	0,333	0,428	0,429	0,434

Тип решетки (коор- динационное число)	точно	Бете	1	2	1-2
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

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, 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 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 независи-

мыми: $W_2^q(h_1,h_2) = W_1^{q-1}(h_1)W_1^{q-1}(h_2)$. 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 биноминальные 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:

$$W_{2}^{6}(h_{1},h_{2}) = W_{1}^{3}(h_{1}')W_{1}^{3}(h_{2}')W_{1}^{2}(h^{com})\,\delta(h_{1}-(h_{1}'+h^{com}))\delta(h_{2}-(h_{2}'+h^{com})).$$
(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 $W(h_1^{com}, h_2^{com})$.

$$W(-2,0) = 2(1-b)^{2}b^{2}\left(\frac{1-m}{2}\right)^{2},$$

$$W(-1,-1) = (1-b)^{2}b^{2}\left((1-m)^{2} + (1-m^{2})/2\right),$$

$$W(-1,0) = (1-b)^{3}b(1-m) + (1-b)b^{3}(1-m^{2})/2,$$

$$W(-1,1) = (1-b)^{2}b^{2}(1-m^{2})/2,$$

$$W(-2,-1) = 2(1-b)b^{3}\left(\frac{1-m}{2}\right)^{2},$$

$$W(0,0) = (1-b)^{2}b^{2}(1-m^{2}) + b^{4}(1-m^{2})/2 + (1-b)^{4},$$

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

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» табл. 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 $P_{12}(b)$:

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

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

Здесь σ_i – изинговские переменные, принимающие значения +1 и -1. I_{ij} – константы, определяющие величину обменного взаимодействия, H_{ex} пропорциональна внешнему магнитному полю. Величины I_{ij} не равны нулю только для ближайших соседей в кристаллической решетке, а для этих соседей I_{ij} равно I 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:

$$E_n = -\sum J_{ij}\sigma_i \sigma_j - J\sum h_{in}^i \sigma_i - H_{ex}\sum \sigma_i$$
(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 n по ансамблю с гамильтонианом (3.53), рассматривая h_{in}^{i} как постоянные, а затем усредним полученное выражение по совместной функции распределения полей обменного взаимодействия $W_n(h_{in}^i)$. Построив аналогичное выражение для другого кластера, содержащего $n' \neq n$ атомов и приравнивая эти два выражения, получим уравнение:

$$\langle \sigma \rangle = \langle \frac{\Sigma(\frac{\Sigma \sigma_i}{n}) \exp(-\beta E_n)}{\Sigma \exp(-\beta E_n)} \rangle = \langle \frac{\Sigma(\frac{\Sigma \sigma_i}{n'}) \exp(-\beta E_{n'})}{\Sigma \exp(-\beta E_{n'})} \rangle$$
(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 -го атома, μ – 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:

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

$$M = \frac{e^{h} - e^{-h} x^{q}}{e^{h} + e^{-h} x^{q}}, \qquad x = \frac{e^{-K+h} + e^{K-h} x^{q-1}}{e^{K+h} + e^{-K-h} x^{q-1}}$$
(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 (дереве) 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 приравнивая $h_{in}^1 = h_{in}^2 = (q - 1)\mu$, получим

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

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

$$g_{12} = \text{th}K + \frac{1 - \sqrt{1 - (1 - \exp(-4K))M^2}}{\sinh 2K} - M^2$$
(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 $q \ge 2$. 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:

$$E_{3} = -J\sigma_{1}\sigma_{2} - J\sigma_{2}\sigma_{3} - J(q-1)\mu(\sigma_{1} + \sigma_{3}) - J(q-2)\mu\sigma_{2} - H_{ex}(\sigma_{1} + \sigma_{2} + \sigma_{3})$$
(3.59)

Центральный спин кластера σ_2 связан обменным взаимодействием с крайними спинами σ_1 и σ_3 и находится в поле $I(q-2)\mu + H_{ex}$; каждый из крайних спинов – в поле $I(q-1)\mu + H_{ex}$. Вычислим средние значения $\langle \sigma_2 \rangle_{,} \left(\frac{\sigma_1 + \sigma_3}{2} \right)_{,} \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle_{,\mu} \langle \sigma_1 \sigma_3 \rangle_{,\Pi O}$ ансамблю с гамильтонианом (3.59). Получим:

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

$$\left\langle \frac{\sigma_1 + \sigma_3}{2} \right\rangle = \frac{\operatorname{sh} x_1 + \mathrm{e}^{-4K} \operatorname{sh} x_3}{\operatorname{ch} x_1 + 2\mathrm{e}^{-2K} \operatorname{ch} x_2 + \mathrm{e}^{-4K} \operatorname{ch} x_3} \tag{3.61}$$

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

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = \frac{chx_1 - 2e^{-2K}chx_2 + e^{-4K}chx_3}{chx_1 + 2e^{-2K}chx_2 + e^{-4K}chx_3}$$
 (3.63)

где

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

Все функции: (3.60), (3.61), 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 получает 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_{12} 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:

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

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

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

В критической точке ($H_{ex} = 0$, $K = K_c$) корреляционная длина ξ 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]:

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

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

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \rangle = \frac{\mathrm{Tr} \mathrm{SV} \mathrm{SV} \mathrm{SV} \mathrm{V}^{N-3}}{\mathrm{Tr} \mathrm{V}^N},$$

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

$$g_{123} = -2Mg_{13} \tag{3.67}$$

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

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \rangle = \frac{\mathrm{sh}x_1 - 2\mathrm{e}^{-2K} \mathrm{sh}x_2 - \mathrm{e}^{-4K} \mathrm{sh}x_3}{\mathrm{ch}x_1 + 2\mathrm{e}^{-2K} \mathrm{ch}x_2 + \mathrm{e}^{-4K} \mathrm{ch}x_3}$$
(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]:

$$\begin{aligned} & \th(Kqb\mu+h) = \\ &= (1-b)\th(K(q-1)b\mu+h) + b \frac{\sinh(2K(q-1)b\mu+2h)}{\cosh(2K(q-1)bm+2h) + e^{-2K}}, \end{aligned}$$
(3.69)

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

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

$$K_{c}(b) = \frac{1}{2} \ln \frac{b + b_{c}}{b - b_{c}},$$
 (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 ($^{K \to \infty}$) 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

$$\begin{aligned} (\operatorname{th} q b x = (1 - b) \operatorname{th} (q - 1) b x + b \operatorname{th} 2(q - 1) b x \\ P(b) = \operatorname{th} q b x \end{aligned}$$

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

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

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

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

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

Из этих уравнений следует, что g_{12} может быть выражена как не зависящая от q функция K, M и b - аналогично (3.57). При отсутствии внешнего магнитного поля в области температур $K < K_c$

 $g_{12}(p) = pg_{12}(1) = b \text{th} K$

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



Рис. 3.8. Корреляция \mathcal{G}_{12} как функция концентрации магнитных связей bпри различных $K_{11} H_{ex}$. 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, $H_{ex} = 0.07$

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. Проделав эту процедуру N раз, получим так называемое дерево Кейли, внутренняя часть которого при $N \to \infty$ и является решеткой Бете. Рассмотрим теперь модель Изинга на решетке Бете. Пусть σ_i , i = 1, ..., nспины, расположенные в узлах первоначальной цепочки. Статистическая сумма системы $Z_N = \sum P(\sigma)$, где суммирование проводится по всем возможным конфигурациям σ и $P(\sigma) = \exp(K \sum \sigma_i \sigma_j)$. (Суммирование в последнем выражении проводится по всем связям решетки.) Запишем $P(\sigma)$ в виде:

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

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

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

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

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

Если $f(\sigma_1, \sigma_2 ... \sigma_n)$ - 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 $g_N(\sigma_i)/g_N(+1)_{KAK} g_N(\sigma_i)/g_N(+1) = \exp(\frac{1-\sigma_i}{2}\ln x_N)_{.}$ Тогда

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

где

$$\tilde{p}(\sigma_{1}, \sigma_{2} \dots \sigma_{n}) = \exp(K \sum_{i=1}^{n-1} \sigma_{i} \sigma_{i+1} + K \sum_{i=1}^{n} h_{N,i} \sigma_{i})$$

$$h_{N,1} = h_{N,2} = (q-1)\mu_{N,} \quad h_{N,i} = (q-2)\mu_{N}$$

$$(i = 2, \dots n-1), \quad \mu_{N} = \frac{1}{2K} \ln \frac{1}{x_{N}}$$

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

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

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

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

Последнее равенство можно рассматривать как уравнение относительно μ . (Кроме того, уравнение для μ можно получить, приравнивая 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:

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

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 $M = b(M_l)_{W_1(l)}$, 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

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

Рассуждая аналогично для кластера из двух узлов, получим

$$\begin{split} M(2,\mu,b) &= \frac{1}{2}b(1-b)(\operatorname{th}(Kl_{1}\mu) + \operatorname{th}(Kl_{2}\mu))_{W_{2}(l_{1},l_{2})} \\ &+ b^{2} \left\langle \frac{\operatorname{sh}(K(l_{1}+l_{2})\mu)}{\operatorname{ch}(K(l_{1}+l_{2})\mu) + e^{-2K}\operatorname{ch}(K(l_{1}-l_{2})\mu)} \right\rangle_{W_{2}(l_{1},l_{2})} \end{split}$$

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. Приравнивая теперь $M(1, \mu, b)$ и $M(2, \mu, b)$ получим уравнение относительно μ , которое можно рассматривать как обобщение уравнения (3.75) для разбавленного магнетика.

Найдем сначала критическую точку $K_c(b)$ разбавленного магнетика в рассматриваемом приближении. Приравнивая производные по μ от $M(1,\mu,b)_{\mu} M(2,\mu,b)_{\text{при}} \mu = 0_{\text{, получим}}$

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

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

$$K_{c}(b) = \frac{1}{2} \ln \frac{q - (q - 1)(1 - b)}{(q - 1)(1 + b) - q} = \frac{1}{2} \ln \frac{b + b_{c}}{b - b_{c}}$$
(3.76)

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

Найдем теперь $M_0(b)$ – среднюю намагниченность магнитного атома при $K \to \infty$. 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]:

$$P(b) = 1 - z^{q}, (3.77)$$

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:

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

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

$$\begin{aligned} \langle \text{th}(yl) \rangle_{W_1(l)} &= \frac{1}{2} (1-b) \langle \text{th}(yl_1) + \text{th}(yl_2) \rangle_{W_2(l_1,l_2)} \\ &+ b \langle \text{th}(y(l_1+l_2)) \rangle_{W_2(l_1l_2)}, \end{aligned}$$

Дальнейший расчет зависит от выбора функций распределения $W_1(l)_{\rm H} W_2(l_1l_2)$. Например, можно просто заменить усреднения по этим функциям подстановкой в соответствующие выражения средних значений $\langle l \rangle_{W_1(l)} = q b_{\rm H} \langle l_1 \rangle_{W_2(l_1,l_2)} = \langle l_2 \rangle_{W_2(l_1,l_2)} = (q-1)b_{\rm B}$ этом случае приходим к выражениям

$$M_{\mathbf{0},a}(b) = \mathrm{th}(yqb) \tag{3.78}$$

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

Если же в качестве функций распределения $W_1(l)_{U} W_2(l_1l_2)_{Bb-}$ брать биноминальные распределения, получим:

$$M_{0,b}(b) = \sum_{l=0}^{q} C_{q}^{l} b^{l} (1-b)^{q-l} \operatorname{th}(yl)$$

$$\sum_{l=0}^{q} C_{q}^{l} b^{l} (1-b)^{q-l} \operatorname{th}(yl) =$$

$$= (1-b) \sum_{l=0}^{q-1} C_{q-1}^{l} b^{l} (1-b)^{q-1-l} \operatorname{th}(yl)$$

$$+ b \sum_{l=0}^{2(q-1)} C_{2(q-1)}^{l} b^{l} (1-b)^{2(q-1)-l} \operatorname{th}(yl)$$
(3.79)



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 ^К.

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 Ha 3.10 кривые достаточно рис. показаны близки. 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 $W_1(l)_{\rm H} W_2(l_1l_2)$ выбирается биноминальное 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 магнетику 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 намагниченность 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 (дереве) 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 отсутствии 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 вмороженными 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 самосо-

104

гласованного 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 магнетику 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 отсутствии 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 $-Js_is_j$, если атомы расположены в соседних узлах решетки и равна нулю в противном случае. Аналогично тому, как это принято при изучении бинарных сплавов [6],

плалоги по тому, как ото прилите при поутелии оппарных спларов (о), 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 узлу решетки переменную σ_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:

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

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

Введем величины $b = \langle \sigma_i^2 \rangle_{\mu} m = \langle \sigma_i \rangle / b$. 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 φ_i поля го узла как $h_i = \sum \sigma_j \ \mu \ \varphi_i = \sum \sigma_j^2$ (суммирование производится по всем соседним к ^{*i*}-му узлам). Величины h_i и φ_i будем рассматривать как значения случайных величин ^{*h*} и φ с совместной функцией распределения $W(h, \varphi)$. Тогда средние по ансамблю (σ_i) и (σ_i^2) вычисляются как

$$\langle \sigma_i \rangle = \langle \frac{\operatorname{sh}(Kh+h_e)}{\operatorname{ch}(Kh+h_e)+xe^{-L\varphi}} \rangle_{W(h,\varphi)}$$
(4.2)

$$\langle \sigma_i^2 \rangle = \langle \frac{\operatorname{ch}(Kh+h_{\mathcal{E}})}{\operatorname{ch}(Kh+h_{\mathcal{E}})+xe^{-L\varphi}} \rangle_{W(h,\varphi)}$$
(4.3)

где K = J/kT, L = U/kT, $h_{\varrho} = H_{\varrho}/kT$, $x = \frac{1}{2} \exp(-(f + \mu)/kT)$ (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 вмороженными примесями [2, 26].
Одним из самых простых приближений является замена в (2) и (3) полей $h_{\rm u} \varphi_{\rm ux}$ средними значениями $\bar{h} = qbm_{\rm u} \bar{\varphi} = qb_{\rm ; B}$ этом и заключается метод среднего поля:

$$bm = \frac{\operatorname{sh}(Kqbm + h_{\varrho})}{\operatorname{ch}(Kqbm + h_{\varrho}) + xe^{-Lqb}}$$
(4.4)

$$b = \frac{\operatorname{ch}(Kqbm+h_{\varrho})}{\operatorname{ch}(Kqbm+h_{\varrho})+xe^{-Lqb}}$$
(4.5)

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

$$m = \operatorname{th}(Kqbm + h_e) \tag{4.6}$$

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

Из последнего выражения найдем химический потенциал ^µ с точностью до аддитивной постоянной:

$$\mu = -kT\ln\frac{2(1-b)}{b} - kTLqb - kT\ln(ch(Kqbm + h_e))$$
(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 ^µ 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 \overline{m} всей системы определяется «правилом рычага»: $\overline{m} = ym_1 + (1 - y)m_2$, где $y = (b_2 - b)/(b_2 - b_1)$. Нетрудно показать, что μ_p определяется с помощью принципа «равных площадей» в координатах μ и b. Действительно, условия фазового равновесия требуют равенства давлений и химических потенциалов фаз. Давление ^{*P*} связано с концентрацией соотношением

$$b = \frac{\partial P}{\partial \mu}\Big|_{T} b = \frac{\partial P}{\partial b}\Big|_{T} \frac{\partial b}{\partial \mu}\Big|_{T}.$$

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 ($h_{g} = 0$) 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, приравнивая 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. Уравнение для определения намагниченности (4.6) совпадает с уравнением для намагниченности модели Изинга с вмороженными примесями в приближении среднего поля. Этот результат представляется вполне естественным, учитывая то, что модель среднего поля фактически является моделью с бесконечным радиусом взаимодействия [6].



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 $h_e kT = 1$

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 про-исходит 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 σ_i («спин») которая может принимать n различных значений, скажем 1,2,...n. Два соседних спина σ_i и σ_j взаимодействуют с энергией $-J_p \delta(\sigma_i, \sigma_j)$, где

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

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

$$Z = \sum \exp\left\{\frac{J_p}{kT} \sum_{(i,j)} \delta(\sigma_i, \sigma_j)\right\}.$$
(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 σ_i может принимать значения -1, 0, 1. Тогда энергию взаимодействия двух спинов можно записать так:

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

а энергию всей системы (с точностью до постоянной):

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

То есть, если в (4.1) принять $I = J_p/2$, $U = 3J_p/2$ 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 α , 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: $pm = \frac{\text{sh}(Kqpm)}{\text{ch}(Kqpm) + \frac{1}{2}e^{(2-3p)Kq}}$ (4.12)

$$p = \frac{\operatorname{ch}(Kqpm)}{\operatorname{ch}(Kqpm) + \frac{1}{2} \mathrm{e}^{(2-3p)Kq}}$$
(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 $T \to 0$, 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 $y = 2 - 3p_{\rm H} \beta = Kq_{\rm J}$ запишем это уравнение в следующем виде:

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

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

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

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

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

где β_c является решением уравнения

$$\exp\left\{\beta_c \left(2 - \frac{6}{_{3\beta_c} + \sqrt{9\beta_c^2 - 12\beta_c}}\right)\right\} = -2 + 3\beta_c + \sqrt{9\beta_c^2 - 12\beta_c}$$
(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 $T_c = \frac{q}{2\beta_c} \frac{J_p}{k} \approx 0,364 \frac{qJ_p}{k}$ 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 вмороженными 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. Проделав эту процедуру n раз получим так называемое дерево Кэйли. Решеткой Бете называется внутренняя (далекая от граничных точек) часть этого графа при $n \to \infty$. Рассмотрим вычисление статистической суммы (2) на решетке Бете методом, описанным в [6].

Перепишем (4.1) в виде:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} P(\sigma), \qquad (4.18)$$



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

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

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

$$b = \sum_{\{\sigma\}} \sigma_0^2 P(\sigma) / Z \qquad Mb = \sum_{\{\sigma\}} \sigma_0 P(\sigma) / Z \qquad (4.20)$$

где σ_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 $j_{-\check{u}}$ ветви, а $Q_n(\sigma_0|s) = \exp\left[\sum(Ks_is_j + Ls_i^2s_j^2) + \sum_i(r\sigma_i^2 + h_e\sigma_i) + Ks_1\sigma_0 + Ls_1^2\sigma_0^2\right]$

(4.21)

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

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

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

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

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

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

а из (4.22) получим

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

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

$$G_{n}(-1) = G_{n-1}^{q-1}(0) + e^{-K+L+r+h_{e}}G_{n-1}^{q-1}(1) + e^{K+L+r-h_{e}}G_{n-1}^{q-1}(-1)$$
(4.24)

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

$$M = \frac{\mathbf{e}^{he} - x_n^q \mathbf{e}^{-he}}{\mathbf{e}^{he} + x_n^q \mathbf{e}^{-he}}, \tag{4.25}$$

$$b = \frac{\mathbf{e}^{r}(\mathbf{e}^{h\varrho} + x_{n}^{q}\mathbf{e}^{-h\varrho})}{y_{n}^{q} + \mathbf{e}^{r}(\mathbf{e}^{h\varrho} + x_{n}^{q}\mathbf{e}^{-h\varrho})}.$$
(4.26)

А из (4.24) получим рекуррентные соотношения:

$$x_{n} = \frac{y_{n-1}^{q-1} + e^{L+r}(e^{-K+h_{\ell}} + x_{n-1}^{q-1}e^{K-h_{\ell}})}{y_{n-1}^{q-1} + e^{L+r}(e^{K+h_{\ell}} + x_{n-1}^{q-1}e^{-K-h_{\ell}})}, \quad y_{n} = \frac{y_{n-1}^{q-1} + e^{r}(e^{h_{\ell}} + x_{n-1}^{q-1}e^{-h_{\ell}})}{y_{n-1}^{q-1} + e^{L+r}(e^{K+h_{\ell}} + x_{n-1}^{q-1}e^{-K-h_{\ell}})}, \quad (4.27)$$

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

$$Z = \frac{x e^{L} (e^{K+h_{e+x}q-1} e^{-K-h_{e}}) - e^{L} (e^{-K+h_{e+x}q-1} e^{K-h_{e}})}{1-x},$$

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

а из (4.26):

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

Рассмотрим в этом пределе выражение для намагниченности (4.25):

$$M = \frac{\mathbf{e}^{h_e} - x^q \mathbf{e}^{-h_e}}{\mathbf{e}^{h_e} + x^q \mathbf{e}^{-h_e}}.$$
(4.30)

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

$$pM = \left\langle \frac{\operatorname{sn}(\kappa h + h_e)}{\operatorname{ch}(\kappa h + h_e) + x e^{-L\varphi}} \right\rangle_{W_1(h,\varphi)}$$
(4.31)

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

 $_{\Gamma \neq e} x = \frac{1}{2} \exp(-(f + \mu)/kT)$.

Рассмотрим теперь кластер, состоящий из двух соседних узлов и введем обменные h_1 и h_2 и кристаллические φ_1 и φ_2 поля для каждого узла кластера. Найдем средние значения величин $(\sigma_1 + \sigma_2)/2_{\rm H} (\sigma_1^2 + \sigma_2^2)/2$ 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 , φ_1 и φ_2 как постоянные. Затем введем совместную функцию распределения $W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)$ и усредним результат по этой функции:

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

$$p = \left\langle \frac{\frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} (\sigma_1^2 + \sigma_2^2) \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)}{\sum_{\sigma_1, \sigma_2} \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)} \right\rangle_{W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)}$$
(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 биноминального 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 $W_1(h, \varphi)_{\rm H} W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)_{\rm выражаются через одни и те же параметры <math>m_{\rm H}$

^{*P*}, 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 магнетику 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:

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

$$W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)$$

$$= \delta(h_1 - (q - 1)\rho m)\delta(h_2 - (q - 1)\rho m)\delta(\varphi_1 - (q - 1)\rho)\delta(\varphi_2 - (q - 1)\rho)$$

где m и ρ некоторые неизвестные параметры. Тогда из (4.31) и (4.32) получим

$$bM = \frac{\operatorname{sh}(Kq\rho m + h_e)}{\operatorname{ch}(Kq\rho m + h_e) + xe^{-Lq\rho}}$$
(4.35)

$$b = \frac{\operatorname{ch}(Kq\rho m + h_{\varrho})}{\operatorname{ch}(Kq\rho m + h_{\varrho}) + x \operatorname{e}^{-Lq\rho}}$$
(4.36)

а из (4.33) и (4.34):

$$bM = \frac{\text{sh}(2K(q-1)\rho m + 2h_{\varrho}) + 2xe^{-K - L - L(q-1)\rho} \text{sh}(K(q-1)\rho m + h_{\varrho})}{Z}$$
(4.37)

$$b = \frac{ch(2K(q-1)\rho m + 2h_{e}) + 2xe^{-K-L-L(q-1)\rho}ch(K(q-1)\rho m + h_{e}) + e^{-2K}}{Z}$$
(4.38)

где

$$Z = ch(2K(q-1)\rho m + 2h_e) + 4xe^{-K-L-L(q-1)\rho}ch(K(q-1)\rho m + h_e) + 2x^2e^{-K-L-2L(q-1)\rho} + e^{-2K}$$

При $h_e > 0$ (в этом случае намагниченность ^M всегда положительна) систему уравнений (4.35) – (4.38) можно представить в следующем виде. Введем обозначения

$$w = K(q-1)\rho m + h_{e_{j}}$$
 $y = xe^{-K-L-L(q-1)\rho_{j}}$ $\gamma = \frac{L}{K} = \frac{\sigma}{J}$

Тогда из (4.35) - (4.38) получим

$$M = \operatorname{th}(\frac{qw - h_{\varrho}}{q - 1}) \tag{4.39}$$

$$b = \frac{2y \operatorname{ch}(w) + \operatorname{ch}(2w) + \mathrm{e}^{-2K}}{2y^2 \mathrm{e}^{(1+\gamma)K} + 4y \operatorname{ch}(w) + \operatorname{ch}(2w) + \mathrm{e}^{-2K}}$$
(4.40)

$$\mu = -kT \ln(2y^{q} e^{q(1+\gamma)K} \left(\frac{b}{1-b}\right)^{q-1} (1-M^{2})^{\frac{q-1}{2}})$$
(4.41)

где

$$y = \frac{1}{2} \left(1 - e^{-2K} \right) \frac{\frac{\sinh(\frac{qw - h_{e}}{q - 1})}{\sinh(\frac{w - h_{e}}{q - 1})} - ch(w)$$
(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 $w = h_e - \frac{q-1}{2} \ln X$ получим из (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:

$$\frac{\operatorname{sh}(2w) + 2y \operatorname{sh}(w)}{\operatorname{ch}(2w) + 2y \operatorname{ch}(w) + e^{-2K}} = \operatorname{th}\left(\frac{qw}{q-1}\right).$$
(4.43)

где значение \mathcal{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

$$b = \frac{(q-1)\text{th}K_{c}}{e^{\gamma K_{c}}((q-1)\text{th}K_{c}-1)^{2}\text{ch}K_{c}+2(q-1)\text{th}K_{c}-1}$$
(4.44)

определяющему $K_c(b)$. Другим способом этот результат можно получить перейдя к пределу $w \to 0$ 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

$$b_{c} = \frac{(q-1) \text{th}K}{e^{\gamma K} ((q-1) \text{th}K - 1)^{2} \text{ch}K + 2(q-1) \text{th}K - 1}$$
(4.45)

Намагниченность и химический потенциал находится по формулам (4.39) – (4.42) с $h_e = 0$. А для значений b из интервала $\begin{bmatrix} 0, b_c \end{bmatrix}$ или для всех значений $b_{\text{при}} K < K_c(1)_{\text{намагниченность}} M = 0$, а химический потенциал

$$\mu = -kT(q\ln(A) + (q-1)\ln\frac{b}{1-b})$$
(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 μ , 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 ис-

следование 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 обращается 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 $\gamma \to -\infty$ 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 $\theta \to 0$ 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 $K \to \infty$, получим, что при $\gamma = -1$ $M(b) \to M_{01}(b)$, а при $\gamma < -1 M(b) \to M_{02}(b)$ – 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 θ спонтанная намагниченность является монотонно возрастающей функцией концентрации b; при ненулевых температурах эта функция зависит от θ и γ (рис. 4.7, кривые 2, 3 и 5).



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 $\theta = \frac{1}{3K_c(1)}$ для значений γ 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

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 . 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 $b = b_{c^2}$ (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 вмороженными 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 γ – 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 $b_{c1} = \frac{2(q-1)}{q^2-2} \prod_{n \neq u} \gamma = -1 \prod_{u} b_{c2} = \frac{q-1}{2q-3} \prod_{n \neq u} \gamma < -1$. 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 σ_i^2 и σ_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 σ_i и σ_j

$$g_{ij}^{mb} = \langle \sigma_l \sigma_j \rangle - b^2 M^2$$

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 σ_i и σ_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):

$$g_{12}^{p} + b^{2} = \langle \sigma_{1}^{2} \sigma_{2}^{2} \rangle = \langle \frac{\frac{1}{2} \sum_{\sigma_{1}, \sigma_{2}} (\sigma_{1}^{2} \sigma_{2}^{2}) \exp(-E_{2}(\sigma_{1}, \sigma_{2})/kT)}{\sum_{\sigma_{1}, \sigma_{2}} \exp(-E_{2}(\sigma_{1}, \sigma_{2})/kT)} \rangle_{W_{2}(h_{1}, h_{2}, \varphi_{1}, \varphi_{2})}$$
(4.47)

Подставив значение W_2 , получим:

$$(\sigma_1^2 \sigma_2^2) = \frac{\operatorname{ch}(2w) + \mathrm{e}^{-2K}}{2y^2 \mathrm{e}^{(1+\gamma)K} + 4y \operatorname{ch}(w) + \operatorname{ch}(2w) + \mathrm{e}^{-2K}}$$
(4.48)

Аналогично

$$g_{12}^{mb} + M^2 b^2 = \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = \frac{\operatorname{ch}(2w) - \mathrm{e}^{-2K}}{2y^2 \mathrm{e}^{(1+\gamma)K} + 4y \operatorname{ch}(w) + \operatorname{ch}(2w) + \mathrm{e}^{-2K}}$$
(4.49)

По этим формулам корреляционные функции можно рассчитать если $h_e > 0_{\rm ИЛИ} h_e = 0_{\rm II} b_c(K) < b < 1_{\rm, ГДе} b_c(K)$ определяется по формуле (4.45). Если же $h_e = 0_{\rm II} 0 < b < b_c(K)_{\rm, TO}$

$$\langle \sigma_1^2 \sigma_2^2 \rangle = \frac{1 + e^{-2K}}{2y^2 e^{(1+\gamma)K} + 4y + 1 + e^{-2K}}$$
(4.50)

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = \frac{1 - e^{-2K}}{2y^2 e^{(1+\gamma)K} + 4y + 1 + e^{-2K}}$$
(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 $\langle \sigma_2 \rangle = bM_{\rm H} \langle \sigma_2^2 \rangle = b_{\rm H}$

$$bM = \left\langle \frac{\sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3} (\sigma_2) \exp(-E_3(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)/kT)}{\sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3} \exp(-E_3(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)/kT)} \right\rangle_{W_3(h_1, h_2, h_3, \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)}$$
(4.52)

$$b = \left\langle \frac{\sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3} (\sigma_2^2) \exp(-E_3(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)/kT)}{\sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3} \exp(-E_3(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)/kT)} \right\rangle_{W_3(h_1, h_2, h_3, \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)}$$
(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:

$$bM = \frac{Z_1 - Z_{-1}}{Z}, \ b = \frac{Z_1 + Z_{-1}}{Z}, \ M = \frac{Z_1 - Z_{-1}}{Z_1 + Z_{-1}}$$
(4.54)

где

$$Z_{\sigma} = e^{A\sigma + B\sigma^{2}} (1 + 2e^{v + L\sigma^{2}} \operatorname{ch}(w + K\sigma))^{2}, \sigma = 0, +1, -1,$$
$$Z = Z_{0} + Z_{1} + Z_{-1}, A = \frac{(q-2)w + h_{e}}{q-1}, B = \frac{(q-2)v + r}{q-1}, e^{v} = \frac{e^{-(1+\gamma)K}}{2y}$$

Можно показать, что если для $\mathcal{Y}_{\mu} = kTr$ использовать выражения (4.42) и (4.41) соответственно, то (4.54) будут эквивалентны (4.39) и (4.40).

Вычисляя теперь средние значения $(\sigma_1 \sigma_3)_{\rm H} (\sigma_1^2 \sigma_3^2)_{\rm получим:}$

$$\langle \sigma_1 \sigma_3 \rangle = \frac{Z_0^{(1)} + Z_1^{(1)} + Z_{-1}^{(1)}}{Z} _{_{\rm H}} \langle \sigma_1^2 \sigma_3^2 \rangle = \frac{Z_0^{(2)} + Z_1^{(2)} + Z_{-1}^{(2)}}{Z}$$
(4.55)

где

$$Z_{\sigma}^{(1)} = e^{A\sigma + B\sigma^{2}} (2e^{v + L\sigma^{2}} \operatorname{sh}(w + K\sigma))^{2},$$

$$Z_{\sigma}^{(2)} = e^{A\sigma + B\sigma^{2}} (2e^{v + L\sigma^{2}} \operatorname{ch}(w + K\sigma))^{2},$$

$$\sigma = 0, +1, -1$$

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

$$A_{1} + A_{2} = g_{11}^{b} = b(1-b), A_{1}x_{1} + A_{2}x_{2} = g_{12}^{b}, A_{1}x_{1}^{2} + A_{2}x_{2}^{2} = g_{13}^{b},$$

$$B_{1} + B_{2} = g_{11}^{mb} = b(1-M^{2}b), \qquad (4.56)$$

$$B_1 x_1 + B_2 x_2 = g_{12}^{mb}, \quad B_1 x_1^2 + B_2 x_2^2 = g_{13}^{mb}$$

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 (4.554).

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 $g_{12}^{b_2}(1)$, магнитно-позиционной $g_{12}^{m_b}(2)$ и магнитной $g_{12}^{m_b}(3)$ корреляционных функций в зависимости от концентрации магнитных атомов b при $h_e = 0$, q = 4, K = 0,5 и $\gamma = -3$.

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 $h_e = 0.2$.



Рис. 4.9. Концентрационная зависимость корреляционных функций ближайших соседей на решетке Бете с $q = 4_{\text{при}} K = 0, 5, h_e = 0, \gamma = -3$. 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 $3 - g_{12}^{m}(p)$

Рассмотрим теперь модель Изинга с подвижными примесями в «псевдохаотичном» случае, то есть когда параметр γ выбирается так, чтобы g_{12}^{b} обращалась в ноль. Это значение γ (зависящее от b, K и h_{e}) будем обозначать γ_{0} . Выражение для γ_{0} можно получить, приравнивая b^{2} правую часть (4.48):

$$e^{(1+\gamma_0)K} = \frac{1}{2y^2} \left(\frac{\operatorname{ch}(2w) + e^{-2K}}{p^2} - (4y\operatorname{ch}(w) + \operatorname{ch}(2w) + e^{-2K}) \right)_{, (4.57)}$$



Рис 4.10. Концентрационная зависимость корреляционных функций ближайших соседей на решетке Бете с $q = 4_{\text{при}} K = 0.5$, $h_{e} = 0.2$, $\gamma = -3$. 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:

$$b = \frac{ch(2w) + e^{-2K}}{2ych(w) + ch(2w) + e^{-2K}}.$$
(4.58)

Из (4.58) следует, что спонтанная намагниченность в системе может $b > b_c(K) = \frac{1}{(q-1)\text{th}K}$, 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:

$$th(Kqb\mu + h_e) = (1 - b)th(K(q - 1)b\mu + h_e) + b\frac{sh(2K(q - 1)b\mu + 2h_e)}{ch(2K(q - 1)bm + 2h_e) + e^{-2K}}$$
(4.59)

$M = \operatorname{th}(Kqb\mu + h_e)$

где μ – 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 μ 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):

$$b = \frac{\operatorname{th}\frac{qw-h_{\mathcal{B}}}{q-1} - \operatorname{th}w}{\frac{sh(2w)}{\operatorname{ch}(2w) + e^{-2K}} - \operatorname{th}w}.$$
(4.60)

Преобразуя теперь (4.58), в котором y 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 γ_0 в этом случае не зависит от b и равно

$$\tilde{\gamma}_0 = \frac{1}{K} \ln \frac{2}{1 + e^{-2K}} - 1$$
(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 $g_{12}^{mb} = b^2 \text{th} K$. Учитывая, что

g^{*mb*}₁₁ = *b* _{и что магнитно-позиционная функция является в этом случае убывающей геометрической прогрессией, получим}

$$g_{ij}^{mp} = p(p \operatorname{th} K)^{|j-i|}$$
(4.62)

Магнитная корреляционная функция равна

$$g_{ij}^m = (p \text{th}K)^{|j-i|}/p$$
(4.63)



Рис. 4.11. Зависимость от концентрации величины \mathcal{V}_0 для q = 4. Кривая (1) – при K = 1, $h_{\varepsilon} = 0_r 2$, кривая (2) – при K = 1, $h_{\varepsilon} = 0$, кривая (3) – при K = 0.5, $h_{\varepsilon} = 0.2$ и кривая (4) – при K = 0.5, $h_{\varepsilon} = 0$



Рис. 4.12. Концентрационная зависимость корреляционных функций для соседей, следующих за ближайшими на решетке Бете с $q = 4_{\text{при}} K = 0,5, h_e = 0,2, \gamma = \gamma_0$. 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 $2 - g_{13}^{mp}(p)$, кривая $3 - g_{13}^{m}(p)$

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 γ (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 / и эффективный потенциал кулоновского взаимодействия *U*.

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 вмороженными примесями, описанному в [38].

4. Если в системе отсутствует макроскопическая намагниченность, то при псевдохаютическом распределении парная корреляционная функция, характеризующая расположение атомов, обращается в ноль на любом расстоянии ($g_{ij}^{b} = 0$). То есть можно считать, что псевдохаютическое распределение в этом случае является полностью случайным.

5. Если макроскопическая намагниченность присутствует, то при псевдохаютическом 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 **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 [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 применяется 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 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.

В этом же параграфе рассмотрена модель Поттса с немагнитным разбавлением (по узлам) и с произвольным числом состояний на решетке Бете во внешнем поле. В отличии 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:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left\{ \left(\sum_{(i,j)} (J\sigma_i \sigma_j + U\sigma_i^2 \sigma_j^2) + (f + \mu) \sum_i \sigma_i^2 + H_e \sum_i \sigma_i) / kT \right\}$$
(5.1)

где μ – химический потенциал, H_e – внешнее магнитное поле, а суммирование производится по всем возможным конфигурациям $\{\sigma\}$. Величины $b = \langle \sigma_i^2 \rangle_{\mu} M = \langle \sigma_i \rangle / b_{\mu}$ 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 σ_i («спин») которая может принимать n различных значений, скажем 1,2,...n. Два соседних спина σ_i и σ_j взаимодействуют с энергией $-J_p \delta(\sigma_i, \sigma_j)$ где

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

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

$$Z = \sum \exp\left\{\frac{J_p}{kT} \sum_{(i,j)} \delta(\sigma_i, \sigma_j)\right\}.$$
(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 σ_i может принимать значения -1, 0, 1. Тогда энергию взаимодействия двух спинов в модели Поттса можно записать так:

$$E_{ij} = -J_p \left\{ \frac{1}{2} \sigma_i \sigma_j + \frac{3}{2} \sigma_i^2 \sigma_j^2 - \sigma_i^2 - \sigma_j^2 + 1 \right\}$$
(5.3)

а энергию всей системы (с точностью до постоянной):

$$E = -J_p \sum_{(i,j)} \left\{ \frac{1}{2} \sigma_i \sigma_j + \frac{3}{2} \sigma_i^2 \sigma_j^2 \right\} + q J_p \sum_i \sigma_i^2$$
(5.4)

В общем, если в (5.1) принять $I = J_p/2$, $U = 3J_p/2$ 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 α , 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 -й узел решетки. Определим локальное обменное h_i и кристаллическое φ_i поля -го узла как $h_i = \sum \sigma_j \ \varphi_i = \sum \sigma_j^2$ (суммирование производится по всем соседним к ^{*i*}-му узлам). Величины h_i и φ_i будем рассматривать как значения случайных величин h и φ 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:

$$\langle \sigma_i \rangle = \langle \frac{\operatorname{sh}(Kh+h_{\varrho})}{\operatorname{ch}(Kh+h_{\varrho})+\mathrm{e}^{-L\varphi-r/2}} \rangle_{W(h,\varphi)}$$
(5.5)

$$\langle \sigma_i^2 \rangle = \langle \frac{\operatorname{ch}(Kh+h_{\mathscr{G}})}{\operatorname{ch}(Kh+h_{\mathscr{G}}) + \mathrm{e}^{-L\varphi - r/2}} \rangle_{W(h,\varphi)}, \qquad (5.6)$$

_{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 φ_1 и φ_2 поля для каждого узла кластера. Найдем средние значения величин $(\sigma_1 + \sigma_2)/2_{\rm H} (\sigma_1^2 + \sigma_2^2)/2$ 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 , φ_1 и φ_2 как постоянные. Затем введем совместную функцию распределения $W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)$ и усредним результат по этой функции:

$$bM = \left\langle \frac{\frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} (\sigma_1 + \sigma_2) \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)}{\sum_{\sigma_1, \sigma_2} \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)} \right\rangle_{W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)}$$
(5.7)

$$b = \left\langle \frac{\frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} (\sigma_1^2 + \sigma_2^2) \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)}{\sum_{\sigma_1, \sigma_2} \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)} \right\rangle_{W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)}$$
(5.8)

Используем следующие выражения для функций распределения полей:

$$W(h,\varphi) = \delta(h - q\rho m)\delta(\varphi - q\rho),$$

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

где ^{*m*} и ^{*р*} некоторые неизвестные параметры. Тогда из (5.5–5.8) получим

$$M = \operatorname{th}(\frac{qw - h_{\mathfrak{g}}}{q - 1}) \tag{5.9}$$

$$b = \frac{2y \operatorname{ch}(w) + \operatorname{ch}(2w) + \mathrm{e}^{-2K}}{2y^2 \mathrm{e}^{(1+\gamma)K} + 4y \operatorname{ch}(w) + \operatorname{ch}(2w) + \mathrm{e}^{-2K}}$$
(5.10)

$$\mu = -kT \ln(2y^{q} e^{q(1+\gamma)K} \left(\frac{b}{1-b}\right)^{q-1} (1-M^{2})^{\frac{q-1}{2}}), \qquad (5.11)$$

где

$$y = \frac{1}{2} (1 - e^{-2K}) \frac{\frac{\operatorname{sh}(\frac{qw - h_{\mathscr{G}}}{q - 1})}{\operatorname{sh}(\frac{w - h_{\mathscr{G}}}{q - 1})} - \operatorname{ch}(w)}{\operatorname{sh}(\frac{w - h_{\mathscr{G}}}{q - 1})}, \qquad (5.12)$$

$$w = K(q-1)\rho m + h_{e_{,}} y = e^{-K-L-L(q-1)\rho-r}/2, \gamma = \frac{L}{K} = \frac{U}{J}$$

Эти уравнения представляют собой параметрические зависимости $M = M(w, h_e) \ b = b(w, h_e, K)_{\mu} \ \mu = \mu(w, h_e, K)_{,a}$ 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 $p_{(+1)}, p_{(-1)} \to 0$. В решении второго типа две концентрации, например $p_{(0)} \to 1, \ p_{(+1)}, p_{(-1)} \to 0$. В решении второго типа две концентрации, например $p_{(+1)}$ и $p_{(-1)}$, равны и при малых $T \ p_{(+1)}, p_{(-1)} \to \frac{1}{2}, \ p_{(0)} \to 0$. Поскольку только решение первого типа имеет минимальную энергию при $T \to 0$, 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

$$qK_p = \ln(2y^q e^{2qK_p} \left(\frac{b}{1-b}\right)^{q-1})$$
(5.13)

$$b = \frac{2y+1+e^{-K_p}}{2y^2 e^{2K_p} + 4y+1+e^{-K_p}},$$
 (5.14)

а из (5.13) и (5.14):

$$F(y) = y e^{qK_p} \left[\frac{2y + 1 + e^{-K_p}}{y e^{2K_p} + 1} \right]^{q-1} - 2^{q-2} = 0$$
(5.15)

Решая (5.15) относительно ^у 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 F'(y) = 0, где

$$F'(y) = e^{qK_p} \left[\frac{2y + 1 + e^{-K_p}}{y e^{2K_p} + 1} \right]^{q-1} + y(q-1)e^{qK_p} \left[\frac{2y + 1 + e^{-K_p}}{y e^{2K_p} + 1} \right]^{q-2} \left(\frac{2 - e^{2K_p} - e^{K_p}}{(y e^{2K_p} + 1)^2} \right)$$

Приравнивая *F* '(у) нулю, получим

$$2e^{2K_p}y^2 - \{(q-2)e^{2K_p}(1+e^{-K_p}) - 2q\}y + (1+e^{-K_p}) = 0$$
(5.16)

Решение (5.16):

$$y_{1} = \frac{\{(q-2)e^{2Kp}(1+e^{-Kp})-2q\} + \sqrt{\{(q-2)e^{2Kp}(1+e^{-Kp})-2q\}^{2} - 8e^{2Kp}(1+e^{-Kp})}{4e^{2Kp}}$$
(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 $q \to \infty$ а $J_p \to 0$ так, что произведение qJ_p остается постоянным.

Действительно, перейдем в уравнениях (5.15) и (5.16) к пределу $q \to \infty$. Обозначим $x = \lim_{q \to \infty} q K_{pc}(q)_{H} \mathcal{Y} = \lim_{q \to \infty} y(q)$. Тогда из (5.16) получим

$$2\tilde{y}^2 - \{3x - 4\}\tilde{y} + 2 = 0, \qquad (5.18)$$

а из (5.15)

$$\tilde{y} \exp\left[x \frac{1-2\tilde{y}}{2(1+\tilde{y})}\right] = \frac{1}{2}$$
(5.19)

Из (5.18)

$$\boldsymbol{x} = \frac{2}{3} \frac{(1+\tilde{\boldsymbol{y}})^2}{\tilde{\boldsymbol{y}}}$$
(5.20)


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.

Подставив это выражение в (5.19), получим выражение для ^ŷ:

$$\tilde{y}\exp\left[\frac{(1+\tilde{y})(1-2\tilde{y})}{3\tilde{y}}\right] = \frac{1}{2}$$

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:

$$g_{ij} = p_{(0,0)}^{ij} - p_{(0)}^2$$
(5.21)

Тогда при $K_p > K_{pc}$

$$g_{12} = \frac{1 + e^{-Kp}}{2y^2 e^{2Kp} + 4y + 1 + e^{-Kp}} - p^2 = \frac{2y^2 (e^{2Kp} + e^{Kp} - 2)}{(2y^2 e^{2Kp} + 4y + 1 + e^{-Kp})^2}, \quad (5.22)$$

$$Ta \delta mug 5.1$$

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

q	$T_{c(mf)}$	T _c	δp ₍₀₎	δg_{12}	δλ
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

где ^у определяется из решения (15), а p – по формуле (14). При $K_p < K_{pc}$

$$g_{12} = \frac{2}{3} \frac{1 + e^{-Kp}}{1 + 2e^{-Kp}} - \left(\frac{2}{3}\right)^2 = \frac{2}{9} \frac{1 - e^{-Kp}}{1 + 2e^{-Kp}}$$
(5.23)

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 $g_{ij} = a x_1^{j-i} + b x_2^{j-i}$. (Для линейной цепочки (q = 2) этот результат можно доказать строго и предположить его справедливость для произвольного q(гл. 2, 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:

$$g_{ii} = g_0 \mathrm{e}^{-|j-i|/\lambda}$$

где $g_0 = b(1-b)$, а корреляционная длина λ : $\lambda = \begin{cases} -1/\ln\left(\frac{y(e^{2Kp} + e^{Kp} - 2)}{(2y+1+e^{-Kp})(ye^{2Kp} + 1)}\right), & K_p > K_{pc} \\ -1/\ln\left(\frac{1-e^{-Kp}}{1+2e^{-Kp}}\right), & K_p < K_{pc} \end{cases}$. (5.24)

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). На рис. 5.4 приведены графики корреляционной длины λ 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.



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



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

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.

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 вмороженными примесями. Каждому узлу, содержащему магнитный атом, поставим в соответствие величину σ_i («спин») которая может принимать s различных значений, скажем 1,2,...s [1]. Два соседних спина σ_i и σ_j взаимодействуют с энергией $-J_p \delta(\sigma_i, \sigma_j)$ где

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

Пусть также есть внешнее поле *H*, которое действует на состояние 1. Тогда полная энергия системы равна

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

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

В работах [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

$$\langle \frac{\mathrm{e}^{Kn_j + h\,\delta(j,1)}}{\sum_i \mathrm{e}^{Kn_i + h\,\delta(i,1)}} \rangle_W = p_j \tag{5.25}$$

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

$$M = \left\langle \frac{e^{Kn_1 + h} - \frac{1}{s-1} \sum_{i=2}^{s} e^{Kn_i}}{e^{Kn_1 + h} + \sum_{i=2}^{s} e^{Kn_i}} \right\rangle_W$$
(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 $\langle n_j \rangle_w = q b p_j$, выраженных через намагниченность M по формулам

$$p_1 = M + \frac{1-M}{s} \quad p = \frac{1-M}{s}$$

Эта подстановка дает самосогласованное уравнение для ^{*M*}:

$$M = \frac{e^{yM+h} - 1}{e^{yM+h} - 1 + s},$$
 (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 разбавленном к разбавленном к разбавление к в средение модели.

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 $y \le s$, что приводит к следующей зависимости температуры фазового перехода $T_0 = 1/K_0$ от концентрации b, числа состояний спина s и координационного числа q

$$T_0 = \frac{qb}{s}.$$
 (5.28)

Одним словом, 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 = 2стремится к нулю при $y \to s + 0$, 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 $y \to s + 0$ к конечному значению M^* , определяемому из уравнения

$$M^* = \frac{e^{sM^*} - 1}{e^{sM^*} - 1 + s}$$
(5.29)

то есть, фазовый переход является переходом первого рода. В несколько ином варианте метода среднего поля, описанном в [46] получена анало-

гичная зависимость $M_1^*(s) = \frac{s-2}{s-1}$. Восприимчивость $\chi = \frac{\partial M}{\partial H}\Big|_{H=0} = \frac{K}{J_p} \frac{\partial M}{\partial h}\Big|_{h=0}$ при y < s определяется из $\chi = \frac{K}{J_p} \frac{1}{s-y}$. Если y > s, выражение для восприимчивости имеет следующий вид:

$$\chi = \frac{\kappa}{J_p} \left(\frac{s}{(1 + (s - 1)M)(1 - M)} - \gamma \right)^{-1}$$
(5.30)

При s = 2 это выражение при $y \to 2 + 0$ приближенно равно $\chi \approx \frac{1}{2} \frac{K}{I_p} \frac{1}{y^{-2}}$. Если же s > 2, восприимчивость (5.30) остается конечной при $y \to s + 0$ 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 отличии 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_o, h_o) в которой фазовый переход является переходом второго рода. Точки линии фазовых переходов находятся из условий

$$\begin{cases} F(M,h) = M \\ \frac{dF(M,h)}{dM} = 1 \\ , \text{ rge } F(M,h) = 1 - s/(e^{yM+h} - 1 + s) \end{cases}$$

Отсюда

$$\mathbf{e}^{h} = \left(\frac{s}{1-M} - s + 1\right) \mathbf{e}^{-yM},\tag{5.31}$$

а намагниченность M определяется из уравнения

$$y(s-1)x^{2} - ysx + s = 0, (x = 1 - M)$$
(5.32)

Это уравнение имеет решение только для $y \in [\frac{4(s-1)}{s}, s]$. 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

$$h(y) = \ln\left(\frac{s}{x_{c}(y)} - s + 1\right) - y(1 - x_{c}(y))$$
$$x_{c}(y) = \frac{ys + \sqrt{y^{2}s^{2} - 4ys(s-1)}}{2y(s-1)}, \quad y = Kqb$$

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

$$W(n_1, n_2 \dots n_s) = \sum_{z=0}^{q} P(z) W_z(n_1, n_2 \dots n_s)$$
(5.33)

где P(z) – вероятность обнаружить z магнитных атомов в первой координационной сфере узла, занятого магнитным атомом. Для вмороженных примесей, очевидно

$$P(z) = C_q^z b^z (1-b)^{q-z}, (5.34)$$

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 Ω_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 Ω_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 zp_j . Зададим функции $W_z(n_1, n_2 \dots n_s)$ следующим образом:

$$W_z(n_1, n_2 \dots n_s) = \prod_{j=1}^s \delta(n_j - zp_j),$$
 (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*}

$$M = \sum_{z=0}^{q} C_q^z b^z (1-b)^{q-z} \frac{e^{KzM+h}-1}{e^{KzM+h}-1+s}$$
(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 $T \to T_0 - 0$, а при s > 2 $M \to M^* > 0$. 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

$$M^* = \sum_{z=0}^{q} C_q^z b^z (1-b)^{q-z} \frac{\exp(\frac{zsM^*}{qb}) - 1}{\exp(\frac{zsM^*}{qb}) - 1 + s}, \qquad (5.37)$$

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:

$$\chi = \frac{\kappa}{J_p} \sum_{z=0}^q \frac{\kappa z \chi + 1}{s} C_q^z b^z (1-b)^{q-z}$$

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

$$\chi = \frac{K}{J_p} \frac{\langle \varphi(z) \rangle}{1 - K_\chi \langle z \varphi(z) \rangle}$$
(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 биноминальному распределению (5.34).

При $T < T_0$ восприимчивость \mathcal{X} монотонно растет с ростом температуры, достигая конечного предельного значения при $T = T_0 - 0$. Величина этого предельного значения \mathcal{X}^* показана как функция концентрации магнитных атомов на рис.5.5. Видно, что \mathcal{X}^* немонотонна и стремится к конечному пределу при $b \to 0$. В классическом методе среднего поля, как это видно из формул (5) и (6), предельная восприимчивость \mathcal{X}^*_c обратно пропорциональна $b: \mathcal{X}^*_c(b) = \frac{\mathcal{X}^{*}(1)}{b}$ и расходится при $b \to 0$.



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. 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).



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.

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 = 0.7и 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 $C_q^z = \frac{q!}{z!(q-z)!} - 6$ иномиальные 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:

$$M = \sum_{z=0}^{q} C_{q}^{z} b^{z} (1-b)^{q-z} \sum_{n_{1}=0}^{z} C_{z}^{n_{1}} \left(M + \frac{1-M}{s}\right)^{n_{1}} \left(\frac{1-M}{s}\right)^{z-n_{1}} \Lambda_{z,s}^{n_{1}}(K,h),$$
(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, приравнивая к 1 производную по M правой части (5.39) при M = 0.

$$1 = \sum_{z=0}^{q} C_{q}^{z} b^{z} (1-b)^{q-z} \sum_{n_{1}=0}^{z} C_{z}^{n_{1}} \frac{n_{1}s-z}{s^{z}} \Lambda_{z,s}^{n_{1}} (K_{c}(b), 0)$$
(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 $K \to \infty$ (то есть, при нулевой температуре). Полагая внешнее поле равным нулю, получим:

$$M_{0} = M_{0} \left(-\frac{s-1}{s} M_{0}^{2} + \frac{s-2}{s} M_{0} + \frac{1}{s} \right) \left(\frac{b}{1-b} \right)^{3}$$
(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

$$b_c = \frac{\sqrt[3]{s}}{1+\sqrt[3]{s}} \tag{5.42}$$

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:

$$M_0 = \frac{s - 2 + \sqrt{s^2 - 4(s - 1)s\left(\frac{1 - b}{b}\right)^3}}{2(s - 1)} \tag{5.42}$$

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 = 3при тех же значениях концентрации

Для q = 4 из (5.39) получим при $K \to \infty$ уравнение для спонтанной намагниченности при нулевой температуре:

$$(1-b)^{4} = 4b^{3}(1-b)\left(-\frac{s-1}{s}M_{0}^{2} + \frac{s-2}{s}M_{0} + \frac{1}{s}\right) + b^{4}\left(\frac{2(s-2)(s-1)}{s^{2}}M_{0}^{3} - \frac{5s^{2}-15s+12}{s^{2}}M_{0}^{2} + \frac{3(s-2)^{2}}{s^{2}}M_{0} + \frac{3s-4}{s^{2}}\right)$$
(5.44)

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

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

$$M_0(b) = \sqrt{1 - \frac{2(1-b)^4}{4b^3(1-b) + b^4}}$$
(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 получины следующие основные результаты.

1. Магнитная восприимчивость в нулевом внешнем поле при $T = T_0 - 0$ является немонотонной 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 σ_i («спин») которая может принимать s различных значений, скажем 1,2,...s. Два соседних спина σ_i и σ_j взаимодействуют с энергией $-J_p \delta(\sigma_i, \sigma_j)$ где

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

Пусть 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 σ_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

$$E_{ij} = -J_p \delta(\sigma_i, \sigma_j) - (U_{11} - J_p) \delta(0, \sigma_j) \delta(\sigma_i, 0) - U_{12} \left\{ \delta(\sigma_i, 0) \left(1 - \delta(0, \sigma_j) \right) + \delta(0, \sigma_j) \left(1 - \delta(\sigma_i, 0) \right) \right\} - U_{22} (1 - \delta(0, \sigma_j)) (1 - \delta(\sigma_l, 0))$$

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:

$$Z = \sum \exp\left\{K\sum_{(i,j)}\varphi(\sigma_i,\sigma_j) + h\sum_i \delta(\sigma_i,1) + x\sum_i \delta(\sigma_i,0)\right\}_{(5.47)}$$

$$K = \frac{J_p}{kT}, h = \frac{H}{kT}, x = \frac{\mu}{kT}(\mu - xимический потенциал).$$

$$\varphi(\sigma_i,\sigma_j) = \delta(\sigma_i,\sigma_j) + (\gamma - 1)\delta(0,\sigma_j)\delta(\sigma_i,0),$$

$$\gamma = \frac{U}{J_p}, U = U_{11} - 2U_{12} + U_{22}.$$

Решетку Бете построим следующим образом. Рассмотрим два соседних узла со значениями спиновых переменных σ_1 и σ_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 $N \to \infty$. 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 $\{\sigma\}$

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} P(\sigma),$$

$$P(\sigma) = \exp\{K\sum_{(i,j)}\varphi(\sigma_i,\sigma_j) + h\sum_i\delta(\sigma_i,1) + x\sum_i\delta(\sigma_i,0)\}$$

Выделяя в этом выражении члены содержащие σ_1 и σ_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 -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:

$$Z_N = \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \mathrm{e}^{\psi(\sigma_1, \sigma_2)} G_N^{q-1}(\sigma_1) G_N^{q-1}(\sigma_2)$$
(5.48)

С помощью (5.48) можно теперь найти вероятность p_i того, что спин σ_1 примет значение i. (Вероятности соответствующих значений переменной σ_2 будут, в силу симметрии, точно такими же.)

$$p_{i} = \frac{1}{z_{N}} \sum_{\sigma_{1},\sigma_{2}} \frac{1}{2} (\delta(\sigma_{1},i) + \delta(\sigma_{2},i)) e^{\psi(\sigma_{1},\sigma_{2})} G_{N}^{q-1}(\sigma_{1}) G_{N}^{q-1}(\sigma_{2})$$
(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:

$$g_{12} = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \delta(\sigma_1, 0) \delta(\sigma_2, 0) e^{\psi(\sigma_1, \sigma_2)} G_N^{q-1}(\sigma_1) G_N^{q-1}(\sigma_2) - p_0^2$$
(5.50)

$$Q_N(\sigma|s) = e^{K\varphi(\sigma,s_1) + h\delta(s_1,1) + x\delta(s_1,0)} \prod_{j=1}^{q-1} Q_{N-1}(s_1|t^{(j)})$$

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

$$G_N(\sigma) = \sum_{s_1} e^{K\varphi(\sigma, s_1) + h\delta(s_1, 1) + x\delta(s_1, 0)} G_{N-1}^{q-1}(s_1)$$
(5.51)

Поскольку в дальнейшем предполагается перейти к термодинамическому пределу ($^{N \to \infty}$), 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

$$p_{1} = \frac{1}{\tilde{z}_{N}} \left(e^{K+2h} + t_{N} e^{h} + (s-1) e^{h} y_{N}^{q-1} \right)$$
(5.52)

$$1 - b = \frac{1}{\tilde{z}_N} (t_N^2 e^{K\gamma} + t_N e^h + (s - 1) t_N y_N^{q-1})$$
(5.53)

$$g_{12} = \frac{t_N^2 e^{K\gamma}}{\tilde{z}_N} - (1-b)^2$$
(5.54)

где $\widetilde{Z}_{N} = \frac{Z_{N}}{G_{N}^{2(q-1)}(1)}.$ $\widetilde{Z}_{N} = t_{N}^{2} e^{K\gamma} + e^{K+2h} + 2t_{N}e^{h} + (s-1)y_{N}^{q-1}(2t_{N} + 2e^{h} + e^{K}y_{N}^{q-1} + (s-2)y_{N}^{q-1})$ (5.55)

Из (5.51) получим рекуррентные соотношения:

$$y_{0,N} = \frac{e^{\gamma K} t_{N-1} + e^{h} + (s-1)y_{N-1}^{q-1}}{t_{N-1} + e^{K+h} + (n-1)y_{N-1}^{q-1}}$$
(5.56)

$$y_N = \frac{t_{N-1} + e^h + (e^K + (s-2))y_{N-1}^{q-1}}{t_{N-1} + e^{K+h} + (s-1)y_{N-1}^{q-1}}$$
(5.57)

Рассмотрим выражения (5.52–5.57) в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$). В этом пределе $y_{0,N} \rightarrow y_0$, $y_N \rightarrow y$, $t_N \rightarrow t_{-_H} Z_N \rightarrow Z$. Теперь, в соответствии со сказанным выше, возьмем такую величину γ , чтобы g_{12} обратилось бы в ноль. Соответствующую величину γ будем обозначать γ_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

$$e^{K\gamma_0} = \frac{1-b}{bt} (e^h + (s-1)y^{q-1}), \qquad (5.58)$$

Подставив это выражение в (5.54), получим

$$t = \frac{1-b}{b} \frac{e^{K+2h} + (s-1)y^{q-1}(2e^{h} + y^{q-1}(e^{K} + s-2))}{e^{h} + (s-1)y^{q-1}}$$
(5.59)

из (5.52)

$$p_{1} = \frac{1}{\tilde{z}_{0}} \left(e^{K+2h} + t e^{h} + (s-1) e^{h} y^{q-1} \right), \qquad (5.60)$$

где

$$\tilde{Z}_{0} = t \frac{1+b}{b} \left(e^{h} + (s-1)y^{q-1} \right) + \left[e^{K+2h} + (s-1)y^{q-1} (2e^{h} + y^{q-1}(e^{K} + s - 2)) \right]$$

ИЛИ

$$p_{1} = b^{2} \frac{e^{K+2h} + te^{h} + (s-1)e^{h}y^{q-1}}{e^{K+2h} + (s-1)y^{q-1}(2e^{h} + y^{q-1}(e^{K} + s-2))}$$
(5.61)

Кроме того, из рекуррентного соотношения (5.57) получим при $N \to \infty$

$$y = \frac{t + e^{h} + (e^{K} + (s - 2))y^{q - 1}}{t + e^{K + h} + (s - 1)y^{q - 1}}$$
(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,

формулы позволяют найти температуру фазового перехода ЭТИ $K_{c}(b) = \frac{I_{p}}{kT_{c}(b)}$ в зависимости от концентрации магнитных атомов. K < 0

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

$$K_c(b) = \ln \frac{s^{-1+(q-1)b}}{(q-1)b-1}.$$
(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 рисунке 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).



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

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]. 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 $K \to \infty$, получим

$$M_{0}(y) = \frac{1}{s-1} \left(\left(\frac{1-b(y)}{1+(s-1)y^{q-1}} + \frac{b(y)}{1+(s-1)y^{2(q-1)}} \right) s - 1 \right)$$
$$b(y) = \left(1 + \frac{1+(s-1)y^{q-1}}{1+(s-1)y^{2(q-1)}} \sum_{i=1}^{q-2} y^{i} \right)^{-1} \quad (0 < y < 1)$$

Эти выражения определяют в параметрическом виде зависимость $M_0(b)$. На рисунке 5.12 приведены графики $M_0(b)_{\text{для}} s = 2$ (кривая 2) и s = 4 (кривая 3).



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 псевдохаютическим 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 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.

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 года, 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:

$$b_0(K) = b_c \frac{1 + (s-1)e^{-K}}{1 - e^{-K}}.$$
(5.64)

Видно, что $b_0(K)$ растет с ростом s и при любом s больше b_c . При $K \to \infty$ $b_0(K) \to b_c$ 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

$$p_1 = \frac{e^h}{e^{h} + (s-1)x^q},$$
(5.65)

$$x = F(K, h, x) = \frac{e^{h} + (e^{K} + s - 2)x^{q-1}}{e^{K+h} + (s-1)x^{q-1}}.$$
(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

$$e^{h} + (e^{K} + (s-2))x^{q-1} = xe^{K+h} + (s-1)x^{q},$$

(q-1)(e^K + (s-2))x^{q-2} - (q-1)(s-1)x^{q-1} = e^{K+h} + (s-1)x^{q-1}

Отсюда

$$x^{2} - \left(\frac{(q-2)}{q-1}\frac{(e^{K}+s-2)}{s-1} + \frac{q}{q-1}e^{-K}\right)x + \frac{e^{K}+s-2}{s-1}e^{-K} = 0, \quad (5.67)$$
$$e^{h} = \frac{(s-1)x^{q} - (e^{K}+(s-2))x^{q-1}}{1-xe^{K}}. \quad (5.68)$$

И

Начальная точка линии (K_0, h_0) определяется условием $h_0 = 0$. Это приводит к $x_0 = 1$ и

$$e^{K_0} = \frac{s}{q^{-2}} + 1, \tag{5.69}$$

что совпадает с известным результатом [46] для модели Поттса на решетке Бете в отсутствии внешнего поля. Конечная точка линии (K_e, h_e) определяется условием исчезновения вещественных корней у квадратного уравнения (5.67). Это условие приводит к

$$e^{K_{e}} = \frac{1}{2} \left[-(s-2) + \sqrt{(s-2)^{2} + \frac{4q^{2}(s-1)}{(q-2)^{2}}} \right], \quad (5.70)$$

$$e^{h_{\ell}} = (s-1) \left(\frac{(q-2)(e^{K_{\ell}}+s-2)}{q(s-1)} \right)^{q}, \qquad (5.71)$$

а из (5.65) следует, что в точке $(K_e, h_e) p_1 = 1/2$.



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

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. 5.15. Скачек вероятности p_1 на линиях фазовых переходов в модели Поттса с ^S состояниями на решетке Бете с координационным числом q = 6в 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 $h = h_c(T) (T = 1/K) для q = 6_{\rm H}$ 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:

$$(a_2 e^{2h} + a_1 e^h + a_0) e^K = b_2 e^{2h} + b_1 e^h + b_0, \qquad (5.72)$$

где

$$\begin{aligned} a_2 &= -(1+\beta)y + \beta, \ a_1 = -(s-1)y^q + y^{q-1} \\ a_0 &= -\beta(s-1)y^{2q-1} + (1+\beta)(s-1)y^{2q-2}, \\ b_2 &= -1, \ b_1 = -(2\beta(s-1)+2s-3)y^{q-1} + (1+2\beta)(s-1)y^q, \\ b_0 &= -(1+\beta)(s-1)(s-2)y^{2q-2} + ((s-1)^2 + \beta(s-1)(s-2)y^{2q-1}), \\ c_1 &= -2)y^{2q-1}, \end{aligned}$$

$$\beta = (1-b)/b$$

Ввиду того, что уравнение (5.62) является рекуррентным уравнением [49], его корень должен быть устойчивым в смысле рекуррентной процедуры [3, 6], что приводит к условию $F'(y) \le 1$, 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 ^у от правой и левой частей (5.72). Для нахождения конечной точки этой линии, к предыдущей системе нужно добавить третье уравнение – равенство вторых производных по ^у 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]. 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).



Рис. 5.16. Зависимость температуры начальной $T_0(b)$ (кривые 2 и 4) и конечной $T_s(b)$ (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

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 примеси 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 ^у 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 удается 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 (дереве Кейли). В настоящей главе будет рассмотрено применение циклических кластеров для анализа свойств модели Изинга разбавленного магнетика, то есть кластеров, содержащих замкнутый путь. С помощь 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 ренормгрупповое 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.

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]

$$\boldsymbol{E} = -\sum_{(l,l')} \xi_l \,\xi_{l'} J \sigma_l \sigma_{l'} - \boldsymbol{H}_{ex} \sum_l \xi_l \,\sigma_l \,. \tag{6.1}$$

Здесь ^{*Ф*_{*l*} – обычные изинговские переменные, определяющие ориентацию магнитного момента атома и принимающие значения +1 и -1; *I* – обмен-}

ный интеграл, H_{ex} пропорциональна внешнему магнитному полю. Случайная переменная ξ_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 $b_{(s)} = b_{c(s)} (_{UЛИ} b_{(b)} = b_{c(b)}) K_c$ 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 удается 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 (дереве 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, μ – некоторый неизвестный параметр. Теперь можно вычислить среднюю намагниченность на узел цепочки $M_N(K,\mu)$ как функцию K и μ , а составив самосогласованное уравнение для μ (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

$$M_1(h_1) = \text{th}(Kh_1 + h_{ex}),$$
 (6.2)

где $h_{ex} = H_{ex}/kT$, K = J/kT, k_{-} постоянная Больцмана, T_{-} температура. (Если принять $h_1 = qm$, где q_{-} координационное число решетки, $m = M_1(h_1)$ – 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]

$$M_2(h_2) = \frac{\operatorname{sh}(2Kh_2 + 2h_{ex})}{\operatorname{ch}(2Kh_2 + 2h_{ex}) + e^{-2K}}$$
(6.3)

Приняв $h_2 = (q-1)m$, $m = M_2(h_2)$, получим несколько улучшенный метод среднего поля.

Рассмотрим замкнутую цепочку из N изинговских спинов $\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_N$, находящихся в кристаллическом поле h_N . Статистическая сумма этой системы имеет следующий вид:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp\{\sum_{i=1}^{N} (K\sigma_i \sigma_{i+1} + (Kh_N + h_{ex})\sigma_i)\}$$

Здесь $h_{ex} = H/kT$, $\sigma_{N+1} = \sigma_1$. Для вычисления этой статистической суммы рассмотрим трансфер-матрицу [6]

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \mathbf{e}^{K+h} & \mathbf{e}^{-K} \\ \mathbf{e}^{-K} & \mathbf{e}^{K-h} \end{pmatrix}, \quad h = Kh_N + h_{ex}$$

Тогда $Z = Sp \mathbf{V}^N$

Обозначим λ_1 и λ_2 собственные числа трансфер-матрицы **V** и запишем статсумму в виде

$$Z = \lambda_1^N + \lambda_2^N,$$
$$\lambda_{1,2} = e^K chh \pm \sqrt{e^{2K} sh^2 h} + e^{-2K}$$

Среднее значение спина (намагниченность $M_N(h_N)$) находится так:

$$M_N(h_N) = \frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial h} = \frac{\lambda_1^N - \lambda_2^N}{\lambda_1^N + \lambda_2^N} \frac{e^{K} \operatorname{sh}(Kh_N + h_{eX})}{\sqrt{e^{2K} \operatorname{sh}^2(Kh_N + h_{eX}) + e^{-2K}}}$$
(6.4)

(Для этого случая можно построить улучшенный метод среднего поля, приняв $h_N = (q-2)m_{\rm H}m = M_N(h_N)_{.)}$

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 m, но по-прежнему полагаем их попарно пропорциональными. То есть, будем полагать

$$h_1 = q\mu, \quad h_2 = (q-1)\mu, \quad h_N = (q-2)\mu$$

µ – некоторый неизвестный параметр.

Сопоставляя теперь друг с другом описанные выше кластеры, получим три варианта самосогласованных уравнений для определения параметра $^{\mu}$ и намагниченности m

$$m = M_1(h_1) = M_2(h_2), \tag{6.5}$$

$$m = M_1(h_1) = M_N(h_N)_{,}$$
 (6.6)

$$m = M_2(h_2) = M_N(h_N)_{.}$$
 (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

$$\frac{\partial M_i}{\partial \mu}\Big|_{\mu=0} = \frac{\partial M_j}{\partial \mu}\Big|_{\mu=0}$$

Что приводит для уравнения (6.6) к

$$\frac{1-y^{N}}{1+y^{N}}\frac{1+y}{1-y} = \frac{q}{q-2}, \text{ rge } y = \text{th}K_{c}, \tag{6.8}$$

а для уравнения (6.7) к

$$\frac{1-y^N}{1+y^N} = \frac{q-1}{q-2} \left(1-y\right) \tag{6.9}$$

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.

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%)
шестиуголь- ная	(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%)
Тетраэдри- ческая	(4, 6)	0,370	0,347 (6,2%)	0,348 (5,9%)	0,349 (5,7%)

Значения $K_c = J/kT_c$ (T_c - температура Кюри) в различных приближениях для простых решеток

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.

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, μ 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

$$M_N(K,\mu,b_{(s)}) = \sum_{l=1}^{N-1} b_{(s)}^l (1-b_{(s)})^{N-l} \sum_{\{i,N\}} \left(\frac{1}{N} \sum_k i_k m_{i_k}\right) + b_{(s)}^N m_N^c$$
(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 — атомов. Внутренняя сумма – это сумма по этим фрагментам. Аналогично, при разбавлении по связям

$$M_{N}(K,\mu,b_{(b)}) = = (1-b_{(b)})^{N}m_{1} + \sum_{l=1}^{N-1} b_{(b)}^{l} (1-b_{(b)})^{N-l} \sum_{\{l,N\}} \left(\frac{1}{N} \sum_{k} i_{k} m_{i_{k}}\right) + b_{(b)}^{N}m_{N}^{c}$$
(6.11)

Неизвестную величину μ , 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

$$M_1(K, \mu, b_{(s)}) = b_{(s)} \operatorname{th}(Kh_1), \quad h_1 = q\mu b_{(s)}, \quad (6.12)$$

для разбавления по узлам, и

$$M_1(K,\mu,b_{(b)}) = \text{th}(Kh_1), \quad h_1 = q\mu b_{(b)}$$
(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

$$M_{2}(K,\mu,b_{(s)}) = 2b_{(s)}(1-b_{(s)})\operatorname{th}(Kh_{2}) + b_{(s)}^{2} \frac{\operatorname{sh}(2Kh_{2})}{\operatorname{ch}(2Kh_{2})+e^{-2K}},$$

$$h_{2} = (q-1)\mu b_{(s)} \tag{6.14}$$

$$M_{2}(K,\mu,b_{(b)}) = (1-b_{(b)})\operatorname{th}(Kh_{2}) + b_{(b)} \frac{\operatorname{sh}(2Kh_{2})}{\operatorname{ch}(2Kh_{2})+e^{-2K}},$$

$$h_{2} = (q-1)\mu b_{(b)} \tag{6.15}$$

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 μ , 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 μ существуют у всех этих уравнений при условии $K > K_c$, причем K_c определяется из равенства производных по μ от правых частей соответствующих равенств при $\mu = 0$. Переходя теперь к пределу $K_c \to \infty$, получим уравнения для перколяционных порогов $b_{c(s)}$ и $b_{c(b)}$. Оказывается, что

$$\lim_{K_{c} \to \infty} \frac{\partial M_{N}}{\partial \mu} \Big|_{\mu=0} = (-(N-1)b_{(s)}^{N-1} + 2\frac{b_{(s)} - b_{(s)}^{N}}{1 - b_{(s)}} + 1)(q-2)b_{(s)}^{2}$$
(6.16)

для равенства (10), и

$$\lim_{K_{\mathcal{C}}\to\infty} \frac{\partial M_{N}}{\partial \mu}\Big|_{\mu=0} = (-(N-3)b_{(b)}^{N-1} + 2\frac{b_{(b)}-b_{(b)}^{N-1}}{1-b_{(b)}} + 1)(q-2)b_{(b)}$$
(6.17)

для равенства (6.11). Из (6.12) и (6.13) получим

$$\lim_{K_{c}\to\infty}\frac{\partial M_{1}}{\partial \mu}\Big|_{\mu=0} = q b_{(s)}^{2}, \qquad \lim_{K_{c}\to\infty}\frac{\partial M_{1}}{\partial \mu}\Big|_{\mu=0} = q b_{(b)}, \qquad (6.18)$$

а из (6.14) и (6.15):

$$\lim_{K_c \to \infty} \frac{\partial M_2}{\partial \mu} \Big|_{\mu=0} = (q-1)b_{(s)}^2(1+b_{(s)})$$

$$\lim_{K_{c}\to\infty}\frac{\partial M_{1}}{\partial \mu}\Big|_{\mu=0} = (q-1)(1+b_{(b)})b_{(b)}$$
(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.

Таблица 6.2

Решетка	(q,N)	точное значе- ние ^b c(s)	точное значе- ние ^b c(b)	b _{c(s)} (1- N)	b _{с(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
шести- угольная	(3, 6)	0,700	0,653	0,538	0,522	0,558	0,532
треуголь- ная	(6, 3)	0,500	0,347	0,250	0,214	0,333	0.227
кубиче- ская	(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

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 отличии 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

$$M_1(h_1) = \operatorname{th}(Kh_1 + h_e)$$

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

$$M_2(h_2) = \frac{\operatorname{sh}(2Kh_2 + 2h_{ex})}{\operatorname{ch}(2Kh_2 + 2h_{ex}) + e^{-2K}}$$

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):

$$M_N(h_N) = \frac{\lambda_1^N - \lambda_2^N}{\lambda_1^N + \lambda_2^N} \frac{\mathrm{e}^K \mathrm{sh}(Kh_N + h_e)}{\sqrt{\mathrm{e}^{2K} \mathrm{sh}^2(Kh_N + h_e) + \mathrm{e}^{-2K}}}$$
$$\lambda_{1,2} = \mathrm{e}^K \mathrm{ch}(Kh_N + h_e) \pm \sqrt{\mathrm{e}^{2K} \mathrm{sh}^2(Kh_N + h_e) + \mathrm{e}^{-2K}}$$
$$h_N = \frac{q^{-2}}{q} h_1$$
 MOXHO, COCTABUTE, CAMOCOFHACOBAL

Полагая теперь $n_N - \frac{n_1}{q}$, можно составить самосогласованное уравнение

$$M_1(h_1) = M_N(h_N)$$
(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 достроим 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 σ_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 σ . Этот узел является общей вершиной L + 1N – угольников, образующих L + 1 не пересекающихся ветвей с корневой точкой σ . Обозначив s_i совокупность спинов (кроме σ) i-й ветки, представим статистическую сумму системы в виде:

$$Z = \sum_{\sigma, s_1, \dots, s_{L+1}} e^{\sigma h_{\theta X}} \Omega(\sigma, s_1) \dots \Omega(\sigma, s_{L+1}),$$

где $\Omega(\sigma, s_i)$ – множитель, зависящий только от σ 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

$$m_1 = \operatorname{th}(Kh_1 + h_{ex})$$

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 $h_N = -\frac{L}{2\kappa} \ln x$. Вычислив эту статистическую сумму, найдем среднее значение $m_N = \langle \sum \sigma_i / N \rangle_i$

$$m_N = \frac{\lambda_1^N - \lambda_2^N}{\lambda_1^N + \lambda_2^N} \frac{\mathrm{e}^K \mathrm{sh}(Kh_N + h_{ex})}{\sqrt{\mathrm{e}^{2K} \mathrm{sh}^2(Kh_N + h_{ex}) + \mathrm{e}^{-2K}}}$$

Приравнивая 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 кластеров. 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

 $m_1 = \operatorname{th}(Kh_1 + h_{ex})$

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 $h_N = -\frac{L}{2\kappa} \ln x$. 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 обрезается 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 ^{*х*} можно получить следующим простым рассуждением. Ветвь будет конечна в четырех взаимоисключающих случаях:

1) соседние с начальной вершиной узлы вырезаны – вероятность $_{\text{ЭТОГО}} (1-b)^2$;

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 ^ж

$$x = (1-b)^{2} + (1-b)^{2} \sum_{k=1}^{N-3} (k+1)b^{k} x^{kL} + (N-1)(1-b)b^{N-2} x^{(N-2)L} + b^{N-1} x^{(N-1)L}$$

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 $F'(1) \ge 1$. Следовательно, перколяционный порог b_s должен удовлетворять уравнению F'(1) = 1, т.е.

$$(1 - b_s)^2 \sum_{k=1}^{N-3} k(k+1) b_s^{k} + (N-1)(N-2)(1-b) b_s^{N-2} + (N-1) b_s^{N-1} = 1/L$$

что преобразуется к виду

$$(N-3)b_s^{N-1} - 2\sum_{i=1}^{N-2} b_s^i + \frac{1}{L} = 0$$
(6.21)

Аналогично, для порога протекания по связям получим

$$(N-1)b_b^{\ N} - 2\sum_{i=1}^{N-1} b_b^{\ i} + \frac{1}{L} = 0$$
(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

$$M_N(K,b) = \sum_{l=1}^{N-1} b^l (1-b)^{N-l} \sum_{\{l,N\}} \left(\frac{1}{N} \sum_k i_k m_{i_k}\right) + b^N m_N^c$$
(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 ... атомов. Внутренняя сумма – это сумма по этим фрагментам. Аналогично, при разбавлении по связям

$$M_N(K,b) = (1-b)^N m_1 + \sum_{l=1}^{N-1} b^l (1-b)^{N-l} \sum_{\{l,N\}} \left(\frac{1}{N} \sum_k i_k m_{i_k}\right) + b^N m_N^c$$
(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

$$M_1(K,b) = b \operatorname{th}(Kh_1) \tag{6.25}$$

для разбавления по узлам, и

$$M_1(K, b) = \operatorname{th}(Kh_1) \tag{6.26}$$

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

$$M_2(K,b) = (1-b)\text{th}(Kh_2) + b \frac{\text{sh}(2Kh_2)}{\text{ch}(2Kh_2) + e^{-2K}},$$
 (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

$$(N-3)b_s^{N-1} - 2\sum_{i=1}^{N-2} b_s^i + \frac{2}{q-2} = 0$$

$$(N-1)b_b^N - 2\sum_{i=1}^{N-1} b_b^i + \frac{2}{q-2} = 0$$

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

$$\langle \sigma_i \rangle = \langle \text{th}\beta H_i \rangle, \qquad (6.29)$$

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 $H_{\varrho x}$ полей, а $\langle ... \rangle$ - 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 σ_0 . Эту функцию всегда можно представить в виде

$$W(h) = \frac{1+m}{2}W_1(h) + \frac{1-m}{2}W_2(h)$$
(6.30)

где $W_1(h)$ и $W_2(h)$ условные функции распределения для значений σ_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

$$2m = (1+m)\mu_1 + (1-m)\mu_2$$
(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 Vпроизведения двух соседних спинов σ и σ' :

$$V = \langle \sigma \sigma' \rangle = \frac{1+m}{2} \left(\frac{1+\mu_1}{2} - \frac{1-\mu_1}{2} \right) + \frac{1-m}{2} \left(\frac{1-\mu_2}{2} - \frac{1+\mu_2}{2} \right)$$

что можно переписать в виде

$$2V = (1+m)\mu_1 - (1-m)\mu_2$$
(6.32)

Из (6.31) и (6.32) легко выразить μ_1 и μ_2 через m и V:

$$\mu_1 = \frac{m+V}{1+m}, \quad \mu_2 = \frac{m-V}{1-m}$$
 (6.33)

Выражение (6.29), полученное в работе [5], является частным случаем формулы (полученной в той же работе):

$$\langle f\sigma_0 \rangle = \langle f \operatorname{th}(Kh + h_{ex}) \rangle$$

где f – произвольная функция любых спинов, кроме σ_0 . Взяв f = h, получим

$$\langle h\sigma_0 \rangle = qV = \langle hth(Kh + h_{ex}) \rangle_{.}$$
 (6.34)

Используя функцию распределения (6.30), из (6.29) и (6.34) получим:

$$m = \frac{1+m}{2} \langle \ln(Kh + h_{ex}) \rangle_1 + \frac{1-m}{2} \langle \ln(Kh + h_{ex}) \rangle_2$$
 (6.35)

$$qV = \frac{1+m}{2} \langle hth(Kh+h_{ex}) \rangle_1 + \frac{1-m}{2} \langle hth(Kh+h_{ex}) \rangle_2$$
(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 δ 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 биноминальное распределение с параметром (1+m)/2, получим уравнение для определения намагниченности m по методу усреднения по обменным полям [1].

Когда в качестве $W_1(h)_{\rm H} W_2(h)$ берутся биноминальные распределения с параметрами $(1 + \mu_1)/2_{\rm H} (1 + \mu_2)/2_{\rm соответственно}$:

$$W_{1,2}(h) = \sum_{i=0}^{q} C_q^i \left(\frac{1+\mu_{1,2}}{2}\right)^i \left(\frac{1-\mu_{1,2}}{2}\right)^{q-i} \delta(h-(2i-q)), \quad (6.37)$$

где C_q^i – биноминальные 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.

$$m = \sum_{n=0}^{q} F_{q,n}(m, V) \text{th}((2n-q)K + h_{ex})$$
(6.38)

$$qV = \sum_{n=0}^{q} F_{q,n}(m, V)(2n-q) \text{th}((2n-q)K + h_{ex})$$
(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

$$m = \sum_{n=0}^{\left[\frac{q-1}{2}\right]} (F_{q,q-n}(m,V) - F_{q,n}(m,V)) \operatorname{th}((q-2n)K)$$
(6.40)

$$qV = \sum_{n=0}^{\left[\frac{q-1}{2}\right]} (F_{q,q-n}(m,V) + F_{q,n}(m,V))(q-2n) \operatorname{th}((q-2n)K)_{(6.41)}$$

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 (гл. 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

$$\sum_{n=0}^{\left[\frac{q-1}{2}\right]} A_q^n \text{th}((q-2n)K_c) = 1, \qquad (6.42)$$

где

$$A_q^n = \frac{C_q^n (q-2n)(q^n (q-2)^{q-n} + q^{q-n} (q-2)^n)}{2^q q (q-1)^{q-1}}$$
(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 σ_0 неразорванными связями, а $h' = \sum \sigma_i$ сумма по всем q соседям σ_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 $h_{\rm u} h'$. ($W_1(h) = \int W_2(h, h') dh'$)Тогда

$$m = \langle \operatorname{th}(Kh) \rangle_{W_1(h)}$$

$$qV = \langle h' \operatorname{th}(Kh) \rangle_{W_2(h,h')}$$

где $V = \langle \sigma \sigma_0 \rangle$ по всем парам соседних спинов. Функции $W_1(h)_{\mu} W_2(h,h')$ 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 μ_1 и μ_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 σ_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)

$$m = \sum_{n=0}^{\left[\frac{q-1}{2}\right]} (F_{q,q-n}(m,V) - F_{q,n}(m,V)) \Phi_{q,n}(b,K)$$
(6.44)

$$qV = \sum_{n=0}^{\left[\frac{q-1}{2}\right]} (F_{q,q-n}(m,V) + F_{q,n}(m,V))(q-2n)\Phi_{q,n}(b,K)_{, (6.45)}$$

где

$$\Phi_{q,n}(b,K) = -\int \operatorname{th}(Kh) G_{q,n}(b,h) dh$$

= $\sum_{i=0}^{n} \sum_{j=0}^{q-n} C_n^i C_{q-n}^j b^{i+j} (1-b)^{q-(i+j)} \operatorname{th}(K(j-i))$

Уравнение для температуры Кюри, как функции концентрации ^b получается как и для чистого магнетика:

$$\sum_{n=0}^{\left[\frac{q-1}{2}\right]} A_q^n \Phi_{q,n}(b, K_c) = 1$$
(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.

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

Тип решетки (координационное число)	1	2	3
Шестиугольная (3)	0,700 0,653	0,557	0,614
Квадратная (4)	0,590 0,500	0,428	0,452

Тип решетки (координационное число)	1	2	3
Тетраедр. (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

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 $q = 3, 4 \, u \, 6$ 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).



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 *u* ⁶ соответственно) и методом, рассмотренным в настоящей работе (кривые 1, 3, 5

 $_{\rm для} q = 3, 4 u 6$ соответственно)

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.

Таким образом, в результате проведенного анализа приходим к следующим выводам.

1. Рассмотренное в этом параграфе приближение, примененное к чистому магнетику, 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 биноминальных.

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 «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]. 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» σ_i (i – номер узла), каждый из которых может принимать ³ различных значений -1,0,+1. Гамильтониан модели Гейзенберга можно представить в таком виде

$$H(\{\sigma\}) = -\sum_{(i,j)} J\sigma_i \sigma_j - \sum_i H_e \sigma_i$$
(6.47)

Здесь I – 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

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp(K \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j + \sum_i h \sigma_i)$$

$$K = \frac{J}{kT}, \qquad h = \frac{H_e}{kT}$$
(6.48)

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 σ_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 σ_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 -м подграфе, кроме σ_0 , а

$$Q_N(\sigma_0|s) = \exp(K\sum_{(i,j)}s_is_j + Ks_1\sigma_0 + \sum_i hs_i)$$

 $_{\Pi \text{усть}} g_N(\sigma_0) = \sum_s Q_N(\sigma_0|s)_{. \text{ Тогда}}$

$$Z = \sum_{\sigma_0} \exp(h\sigma_0) [g_N(\sigma_0)]^q$$

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

$$P_{+1} = \frac{\mathbf{e}^{h}}{\mathbf{e}^{h} + x_{N}^{q} \mathbf{e}^{-h} + y_{N}^{q}}, P_{0} = \frac{y_{N}^{q}}{\mathbf{e}^{h} + x_{N}^{q} \mathbf{e}^{-h} + y_{N}^{q}}, P_{-1} = \frac{x_{N}^{q} \mathbf{e}^{-h}}{\mathbf{e}^{h} + x_{N}^{q} \mathbf{e}^{-h} + y_{N}^{q}}, (6.49)$$

То есть

$$\langle \sigma_0 \rangle = \frac{\mathrm{e}^{h} - x_N^q \mathrm{e}^{-h}}{\mathrm{e}^{h} + x_N^q \mathrm{e}^{-h} + y_N^q} \qquad \langle \sigma_0^2 \rangle = \frac{\mathrm{e}^{h} + x_N^q \mathrm{e}^{-h}}{\mathrm{e}^{h} + x_N^q \mathrm{e}^{-h} + y_N^q}$$

Для величин x_N и y_N можно составить рекуррентные соотношения. Очевидно, что

$$Q_N(\sigma_0|s) = \exp(Ks_1\sigma_0 + hs_1) \prod_{j=1}^{q-1} Q_{N-1}(s_1|t^{(j)})$$

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

$$g_N(\sigma_0) = \sum_{s_1} \exp(Ks_1\sigma_0 + hs_1) [g_{N-1}(s_1)]^{q-1}$$

Отсюда получим рекуррентные соотношения для x_N и y_N

$$x_{N} = \frac{y_{N-1}^{q-1} + e^{-K+h} + x_{N-1}^{q-1} e^{K-h}}{y_{N-1}^{q-1} + e^{K+h} + x_{N-1}^{q-1} e^{-K-h}}, \quad y_{N} = \frac{y_{N-1}^{q-1} + e^{h} + x_{N-1}^{q-1} e^{-h}}{y_{N-1}^{q-1} + e^{K+h} + x_{N-1}^{q-1} e^{-K-h}}$$
(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 $N \to \infty$ рекуррентные уравнения (6.50) переходят в

$$x = \frac{y^{q-1} + e^{-K} + x^{q-1} e^{K}}{y^{q-1} + e^{K} + x^{q-1} e^{-K}}, \quad y = \frac{y^{q-1} + 1 + x^{q-1}}{y^{q-1} + e^{K} + x^{q-1} e^{-K}}$$
(6.51)

Средние по ансамблю значения вероятностей состояния спина находятся из (6.49) при подстановке в них решений (6.51):

$$P_{+1} = \frac{e^{h}}{e^{h} + x^{q} e^{-h} + y^{q}}, P_{0} = \frac{y^{q}}{e^{h} + x^{q} e^{-h} + y^{q}}_{H} P_{-1} = \frac{x^{q} e^{-h}}{e^{h} + x^{q} e^{-h} + y^{q}}.$$
(6.52)

При любом значении K у системы (6.51) есть корень x = 1 (y 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

$$\frac{2(q-1)\mathrm{sh}K_c}{y^{q-1}+2\mathrm{ch}K_c} = 1 \quad \frac{y^{q-1}+2}{y^{q-1}+2\mathrm{ch}K_c} = y$$

Исключая из этих уравнений \mathcal{Y} , получим уравнение для определения K_c

$$(q-1) \operatorname{sh} K_c - \operatorname{ch} K_c = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\operatorname{th} (K_c/2)}{q-1} \right)^{q-1}$$

Обозначив $z = \text{th}(K_c/2)$, получим

$$2(q-1)z - (1+z^2) = \frac{1}{2}(1-z^2)\left(1-\frac{z}{q-1}\right)^{q-1}$$
(6.53)

1

Рассмотрим модель с гамильтонианом несколько более общего вида, чем (6.47):

$$H(\lbrace \sigma \rbrace) = -\sum_{(i,j)} J\sigma_i \sigma_j - \sum_{(i,j)} J_1 \sigma_i^2 \sigma_j^2 - \sum_i H_{\varrho} \sigma_i$$
(6.54)

Возьмем теперь один из узлов решетки, содержащий спин σ_0 . Спины, содержащиеся в соседних узлах будем обозначать σ_j . Пусть $H_1 = K \sum \sigma_j + h_{\mu} \varphi_1 = \sum \sigma_j^2$. Найдем условные средние $\overline{\sigma_0}_{\mu} = \overline{\sigma_0}_{\mu}^2$ при фиксированных $H_1 \mu \varphi_1$:

$$\overline{\sigma_0} = \frac{\operatorname{sh} H_1}{\operatorname{ch} H_1 + x_1/2}, \quad \overline{\sigma_0^2} = \frac{\operatorname{ch} H_1}{\operatorname{ch} H_1 + x_1/2}$$
(6.55)

где $x_1 = e^{-K_1 \varphi_1}$, $K_1 = J_1/kT_1$, $H_1 \omega \varphi_1 (x_1)$, входящие к уравнения (6.55) будем рассматривать как неизвестные параметры, определяющие взаимодействие спина σ_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 σ_1 и σ_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 φ_2 – параметры, описывающие взаимодействие атомов кластера с внешним окружением. Тогда средние значения $\frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2)$ и $\frac{1}{2}(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)$ находятся из формул ($x_2 = e^{-\kappa_1 \varphi_2}$)

$$\overline{\frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2)} = \frac{e^{K + K_1} \operatorname{sh} 2H_2 + x_2 \operatorname{sh} H_2}{e^{K + K_1} \operatorname{ch} 2H_2 + e^{-K + K_1} + 2x_2 \operatorname{ch} H_2 + x_2^2/2}$$
(6.56)

$$\overline{\frac{1}{2}(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)} = \frac{e^{K + K_1} ch 2H_2 + e^{-K + K_1} + x_2 ch H_2}{e^{K + K_1} ch 2H_2 + e^{-K + K_1} + 2x_2 ch H_2 + x_2^2/2}$$

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 $H_1 = Kh_1 + h_{\ H} H_2 = Kh_2 + h_{\ CD} h_1$ 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 φ_1 и φ_2) пропорциональны количеству внешних атомов, соседних к атому кластера, получим

$$\frac{h_1}{h_2} = \frac{\ln x_1}{\ln x_2} = \frac{q}{q-1}$$
(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:

$$thKh_{1} = \frac{e^{K}sh2Kh_{2} + x_{2}shKh_{2}}{e^{K}ch2Kh_{2} + e^{-K} + x_{2}chKh_{2}}$$
(6.58)

$$\frac{\mathrm{ch}Kh_1}{\mathrm{ch}Kh_1 + x_1/2} = \frac{\mathrm{e}^K \mathrm{ch}2Kh_2 + \mathrm{e}^{-K} + x_2 \mathrm{ch}Kh_2}{\mathrm{e}^K \mathrm{ch}2Kh_2 + \mathrm{e}^{-K} + 2x_2 \mathrm{ch}Kh_2 + x_2^2/2}$$

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

$$\frac{q}{q-1} = \frac{2e^{K_c} + x_2}{e^{K_c} + e^{-K_c} + x_2}, \quad \frac{1}{1+x_1/2} = \frac{e^{K_c} + e^{-K_c} + x_2}{e^{K_c} + e^{-K_c} + 2x_2 + x_2^2/2}, \quad x_1 = x_2^{q/(q-1)}$$

Обозначив $z = th(K_c/2)$, 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.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

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. Белокнь, 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 / Б.Н. Шалаев // 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. Сёмкин. – Владивосток, 1994.

31. Семкин, С.В. Химическая намагниченность системы взаимодействующих частиц с изменяющейся точкой Кюри / С.В. Сёмкин, В.И. Белоконь, Е.Н. Макишина: тез. докл. XXXV Всерос. 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 α - FeMn alloys / C. Paduani, E. Galvao da Silva, G.A. Perez-Alcazar, M. McElfresh, J. Appl // Phys. – 1991. – No 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. Сёмкин, С.В. Применение метода среднего поля к модели Изинга с подвижными примесями и к модели Поттса с тремя состояниями / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Физика твердого тела. –2014. – Т. 56, вып. 12. – С. 2341–2345.

37. 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.

38. Сёмкин, С.В. Корреляционные функции чистого и разбавленного изинговского магнетика в приближении эффективного поля / С.В. Сёмкин, 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. – B 30 1448 (1984).

42. Семкин, С.В. Ренормгрупповые преобразования фиксированного масштаба для анизотропного изинговского магнетика / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин: материалы 55-й Всерос. науч. конф. – Владивосток, 2012. – С. 198–200.

43. Семкин, С.В. Точное и приближенные решения для одномерной цепочки изинговских спинов / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин: материалы 56-й Всерос. 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 Всерос. науч. конф. – Владивосток, 2014. – Т. 3. – С. 181–183.

46. Wu, F.Y. The Potts model / F.Y. Wu // Rev. Mod. Phys. – 1982. – N_{254} . – 235 p.

47. Муртазаев, А.К. Исследование влияния вмороженных 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 / C.B. Chatelain, Berche, W. Janke, P.-E. Berche // 2005. – B 719/3. – 275p.

50. Janke, W. Nucl. Phys. R. / W. Janke, Villanova // 1997. – B 489. – 679 p.

51. DeGrand, T.A. C. DeTar // Nucl. Phys. – 1983. – B 225. – 590 p.

52. Karsch, F. S. Stickan // Phys. Lett. – 2000. – B 488. – 319 p.
53. Kaneyoshi, T. Physica A, // 1995. – № 218(1-2). – 46 p.54. Ghulghazaryan, R.G. P.M.A. Sloot / 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 Всерос. 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 Всерос. 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. – A 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 р.

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. – Р. 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 Всерос. 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 Всерос. 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 Всерос. 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. – Р. 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 Всерос. 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 Всерос. 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 Всерос. 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. Чахмахчян // 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 Nonmagnetic Impurities in an External Magnetic Field. Theoretical and Mathematical Physics. – 2018. – № 197(2). – Р. 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 Всерос. 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 Всерос. 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 Всерос. 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. – Р. 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.

Научное издание

Сёмкин Сергей Викторович Смагин Виктор Павлович

ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ В ТЕОРИИ ЧИСТЫХ И РАЗБАВЛЕННЫХ МАГНЕТИКОВ

Монография

Отпечатано с оригинал-макета, предоставленного авторами, минуя редподготовку в издательстве ВГУЭС

Подписано в печать 22.07.2019. Формат 60 × 84/16. Бумага писчая. Печать цифровая. Усл.-печ. л. 12,78 Тираж 600 экз. Заказ 772

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса 690014, Владивосток, ул. Гоголя, 41 Отпечатано во множительном участке ВГУЭС 690014, Владивосток, ул. Гоголя, 41