

05,11

Корреляционные функции чистого и разбавленного изинговского магнетика в приближении эффективного поля

© С.В. Сёмкин, В.П. Смагин

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса,
Владивосток, Россия

E-mail: Li15@rambler.ru

(Поступила в Редакцию 16 января 2014 г.)

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.

1. Введение

Исследование фазовых переходов в разбавленных и неупорядоченных магнетиках является предметом теоретических и экспериментальных исследований уже на протяжении многих лет [1–3]. В работах [4,5] мы предложили классификацию самосогласованных методов расчета намагниченности и критических точек чистых и разбавленных магнетиков. Но в этих работах мы не касались вопроса о вычислении корреляционных функций и их поведения вблизи критической точки. Однако, как будет показано в настоящей работе, некоторые из описанных в [4,5] методов могут быть использованы и для расчета спиновых корреляций.

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

$$E = - \sum J_{ij} \sigma_i \sigma_j - H_{ex} \sum \sigma_i. \quad (1)$$

Здесь σ_i — изинговские переменные, принимающие значения $+1$ и -1 , J_{ij} — константы, определяющие величину обменного взаимодействия, H_{ex} пропорциональна внешнему магнитному полю. Величины J_{ij} не равны нулю только для ближайших соседей в кристаллической решетке, а для этих соседей J_{ij} равно J с вероятностью p и нулю с вероятностью $1 - p$. Вероятность p является долей „магнитных“ связей в решетке, при $p = 1$ магнетик является чистым. Целью настоящей работы является применение к этой модели некоторых из описанных в [4] самосогласованных методов и расчет с их помощью корреляционных функций как для чистого, так и для разбавленного магнетика.

2. Метод эффективного поля

Согласно [4], одним из способов приближенного решения задачи с гамильтонианом типа (1) является следующий. Рассмотрим кластер, состоящий из n атомов

Гамильтониан этого кластера выглядит так

$$E_n = - \sum J_{ij} \sigma_i \sigma_j - J \sum h_{in}^i \sigma_i - H_{ex} \sum \sigma_i. \quad (2)$$

Суммирование в первом слагаемом этого выражения производится по парам входящих в кластер атомов, являющихся ближайшими соседями. Второе слагаемое в (2) описывает взаимодействие атомов кластера с их ближайшими соседями, не входящими в кластер, а третье слагаемое — с внешним полем. Поля обменного взаимодействия h_{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 (2), 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 приравнявая эти два выражения, получим уравнение

$$\begin{aligned} \langle \sigma \rangle &= \left\langle \frac{\sum \left(\frac{\sum \sigma_i}{n} \right) \exp(-\beta E_n)}{\sum \exp(-\beta E_n)} \right\rangle \\ &= \left\langle \frac{\sum \left(\frac{\sum \sigma_i}{n'} \right) \exp(-\beta E_{n'})}{\sum \exp(-\beta E_{n'})} \right\rangle. \end{aligned} \quad (3)$$

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 n -го атома, μ — характеризующий намагниченность параметр, определяющийся из решения самосогласованного уравнения (3). Для чистого ($p = 1$) магнетика, взяв $n = 1$ и $n' = 2$ в этом приближении получим

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

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 (4) есть не что иное, как известное приближение Бете [6]. Действительно, обозначив $x = \exp(-2K\mu)$, перепишем (4) в виде

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

или

$$M = \frac{e^h - e^{-h}x^q}{e^h + e^{-h}x^q}, \quad x = \frac{e^{-K+h} + e^{K-h}x^{q-1}}{e^{K+h} + e^{-K-h}x^{q-1}}, \quad (5)$$

что совпадает с решением для модели Изинга на решетке Бете, приведенном в [6]. То есть, для вычисления намагниченности M приближение (4) можно рассматривать просто как вариант получения приближения Бете. Другими способами приближение Бете можно получить как решение задачи Изинга на решетке (дерево) Бете [6] или как соотношение, связывающее намагниченность центрального атома и атома первой координационной сферы [7]. Но наш способ (4) позволяет, как будет показано ниже, рассчитать не только намагниченность, но и корреляционные функции как для чистого, так и для разбавленного изинговского магнетика.

3. Корреляционные функции

Корреляцию соседних спинов в приближении (4) можно найти следующим образом. Рассмотрим кластер, состоящий из двух атомов. Усредняя произведение спиновых переменных атомов кластера по ансамблю с гамильтонианом (2) и приравнявая $h_{in}^1 = h_{in}^2 = (q-1)\mu$, получим

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = \frac{\text{ch}(2(q-1)K\mu + 2h) - e^{-2K}}{\text{ch}(2(q-1)K\mu + 2h) + e^{-K}}. \quad (6)$$

Корреляция $g_{12} = \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle - M^2$ вычисляется по (6), в котором параметр μ является решением уравнения (4). Эту корреляцию можно также выразить через K и намагниченность M :

$$g_{12} = \text{th} K + \frac{1 - \sqrt{1 - (1 - \exp(-4K))M^2}}{\text{sh} 2K} - M^2. \quad (7)$$

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

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

$$E_3 = -J\sigma_1\sigma_2 - J\sigma_2\sigma_3 - J(q-1)\mu(\sigma_1 + \sigma_3) - J(q-2)\mu\sigma_2 - H_{ex}(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3). \quad (8)$$

Центральный спин кластера σ_2 связан обменным взаимодействием с крайними спинами σ_1 и σ_3 и находится

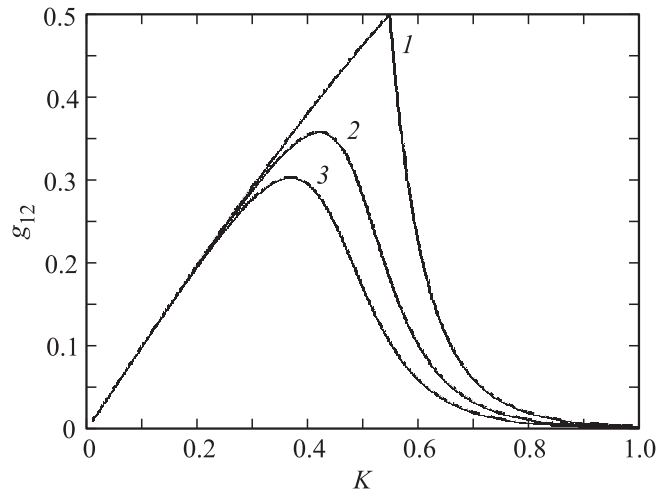


Рис. 1. Корреляция g_{12} как функция параметра $K = J/kT$ при различных значениях внешнего поля H_{ex} : 1 — 0, 2 — 0.1, 3 — 0.2.

в поле $J(q-2)\mu + H_{ex}$; каждый из крайних спинов — в поле $J(q-1)\mu + H_{ex}$. Вычислим средние значения $\langle \sigma_2 \rangle$, $\langle \frac{\sigma_1 + \sigma_3}{2} \rangle$, $\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle$ и $\langle \sigma_1 \sigma_3 \rangle$ по ансамблю с гамильтонианом (8). Получим

$$\langle \sigma_2 \rangle = \frac{\text{sh} x_1 + 2e^{-2K} \text{sh} x_2 - e^{-4K} \text{sh} x_3}{\text{ch} x_1 + 2e^{-2K} \text{ch} x_2 + e^{-4K} \text{ch} x_3}, \quad (9)$$

$$\left\langle \frac{\sigma_1 + \sigma_3}{2} \right\rangle = \frac{\text{sh} x_1 + e^{-4K} \text{sh} x_3}{\text{ch} x_1 + 2e^{-2K} \text{ch} x_2 + e^{-4K} \text{ch} x_3}, \quad (10)$$

$$\langle \sigma_1 \sigma_3 \rangle = \frac{\text{ch} x_1 - e^{-4K} \text{ch} x_3}{\text{ch} x_1 + 2e^{-2K} \text{ch} x_2 + e^{-4K} \text{ch} x_3}, \quad (11)$$

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = \frac{\text{ch} x_1 - 2e^{-2K} \text{ch} x_2 + e^{-4K} \text{ch} x_3}{\text{ch} x_1 + 2e^{-2K} \text{ch} x_2 + e^{-4K} \text{ch} x_3}, \quad (12)$$

где

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

$$x_3 = qK\mu + h.$$

Все функции: (9), (10), $\text{th}(qK\mu + h)$ и правая часть (4) равны между собой при некотором ненулевом (при $K > K_c$) значении параметра $\mu = \mu_0$. Это означает, что при использовании кластера из трех атомов в приближении эффективного поля мы получаем такое же приближение (приближение Бете), что и при использовании кластеров из одного и двух атомов.

Корреляционная функция соседних атомов g_{12} теперь может быть вычислена по (12) при $\mu = \mu_0$. Этот способ тоже приводит к выражению (7). Функция g_{13} может быть вычислена по (11). Для линейной цепочки Изинга ($q = 2$) корреляционные функции g_{12} и g_{13} , вычисленные указанным способом, совпадают с решением, приведенным в [6]. Непосредственной проверкой можно убедиться в справедливости следующего соотношения:

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

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

$$g_{ij} = (1 - M^2)a^{|j-i|} = (1 - M^2) \exp(-|j - i|/\xi), \quad (13)$$

где $a = \frac{g_{12}}{1-M^2} = \frac{g_{13}}{g_{12}}$, а ξ — корреляционная длина. Из (13) и (7) получим зависимость ξ от K и намагниченности M

$$\xi = - \left(\ln \frac{g_{12}}{1 - M^2} \right)^{-1}. \quad (14)$$

В критической точке ($x_{ex} = 0, K = K_c$) 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 [8]

$$g_{123} = \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \rangle - M(g_{12} + g_{13} + g_{23}) - M^3. \quad (15)$$

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

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

где

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a} \quad \mathbf{V} = \begin{pmatrix} e^{K+h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-h} \end{pmatrix}$$

— трансфер-матрица. Проводя вычисления описанным в [6] способом, получим тройную корреляционную функцию

$$g_{123} = -2Mg_{13}. \quad (16)$$

Рассматривая теперь кластер с $n = 3$ уже для произвольного q , получим аналогично (9)–(12)

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \rangle = \frac{\text{sh } x_1 - 2e^{-2K} \text{sh } x_2 - e^{-4K} \text{sh } x_3}{\text{ch } x_1 + 2e^{-2K} \text{ch } x_2 + e^{-4K} \text{ch } x_3}. \quad (17)$$

Вычисляя с помощью этого выражения g_{123} , получим, что равенство (16) выполняется для произвольного q .

4. Разбавление по связям

Рассмотрим теперь модель Изинга с разбавлением по связям в случае, когда $p \neq 1$. Рассуждая так же, как в случае неразбавленного магнетика, получим самосогласованное уравнение для определения намагниченности M [5]

$$\text{th}(Kqp\mu + h) = (1 - p) \text{th}(K(q - 1)p\mu + h) + p \frac{\text{sh}(2K(q - 1)p\mu + 2h)}{\text{ch}(2K(q - 1)p\mu + 2h) + e^{-2K}}, \quad (18)$$

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

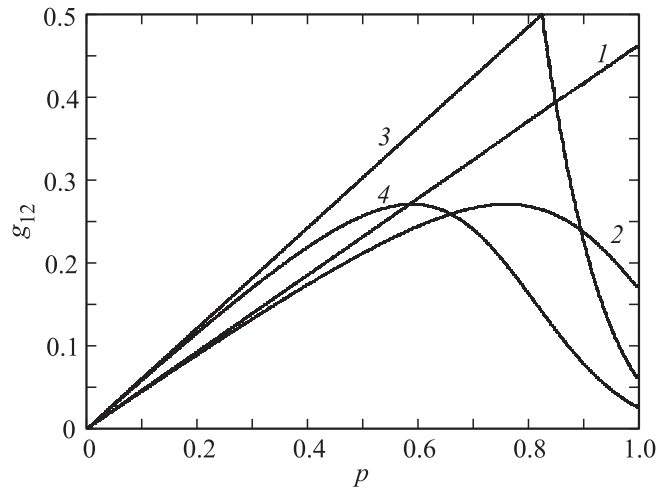


Рис. 2. Корреляция g_{12} как функция концентрации магнитных связей p при различных K и H_{ex} : 1 — 0.5 и 0, 2 — 0.5 и 0.05, 3 — 0.7 и 0, 4 — 0.7 и 0.7.

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

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

$p_c = 1/(q - 1)$ — перколяционный порог решетки Бете [9]. Заметим, что хотя уравнения (18) дают точное решение для модели Изинга на решетке Бете при $p = 1$ и точное значение перколяционного порога p_c для этой решетки, их, все же, нельзя рассматривать как точное решение задачи Изинга для разбавленного магнетика на решетке Бете [5].

Зависимость намагниченности при нулевой температуре ($K \rightarrow \infty$) и нулевом внешнем поле ($h = 0$) от концентрации является, как известно [9], вероятностью того, что некоторый магнитный атом принадлежит бесконечному кластеру $P(p)$. Эта функция находится из решения уравнения

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

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

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = (1 - p) \text{th}^2((q - 1)p\mu K + h) + p \frac{\text{ch}(2(q - 1)p\mu K + 2h) - e^{-2K}}{\text{ch}(2(q - 1)p\mu K + 2h) + e^{-2K}}. \quad (20)$$

Вводя обозначение $\gamma = (q - 1)p\mu K + h$ в уравнениях (18) и (20), запишем выражения для намагниченности M и корреляционной функции $g_{12} = \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle - M^2$ в следующем виде:

$$g_{12} = (1 - p) \text{th}^2 \gamma + p \frac{\text{ch}(2\gamma) - e^{-2K}}{\text{ch}(2\gamma) + e^{-2K}} - M^2, \quad (21)$$

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

Из этих уравнений следует, что g_{12} может быть выражена как не зависящая от q функция K , M и p — аналогично (7). При отсутствии внешнего магнитного поля в области температур $K < K_c$

$$g_{12}(p) = pg_{12}(1) = p \operatorname{th} K.$$

При $K > K_c$ зависимость g_{12} от p более сложная (рис. 2)

5. Выводы

Таким образом, в рамках приближения эффективного поля мы исследовали изинговский магнетик — как чистый, так и с разбавлением по связям. В результате этого исследования мы пришли 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 (7) и (14)).

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 (7) или как функция K , M и p — для разбавленного (21).

5. В нулевом внешнем поле и в области температур $K < K_c(p)$ зависимость корреляции g_{12} от концентрации магнитных связей p является линейной, а в более общем случае эта зависимость показана на рис. 2.

Список литературы

- [1] Ю.А. Изюмов, М.В. Медведев. Теория магнитоупорядоченных кристаллов с примесями, Наука, М. (1970), 271 с.
- [2] Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский. УФН **173**, 175 (2003).
- [3] Б.Н. Шалаев. ФТТ **52**, 83 (2010).
- [4] С.В. Сёмкин, В.П. Смагин. ФТТ **55**, 892 (2013).
- [5] С.В. Сёмкин, В.П. Смагин. Изв. вузов. Физика **56**, 9 (2013).
- [6] Р. Бэкстер. Точно решаемые модели в статистической механике. Мир, М. (1985). 486 с.
- [7] И.А. Квасников. Термодинамика и статистическая физика. Т. 2. Теория равновесных систем. Едиториал УРСС, М. (2002). 432 с.
- [8] Р. Балеску. Равновесная и неравновесная статистическая механика. Т. 1. Мир, М. (1978). 405 с.
- [9] Дж. Займан. Модели беспорядка: Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем. Мир, М. (1982). 591 с.