

05,11

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

© С.В. Сёмкин, В.П. Смагин

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса,
Владивосток, Россия

E-mail: Li15@rambler.ru

(Поступила в Редакцию 29 мая 2014 г.)

Рассмотрено применение метода среднего поля к системе, состоящей из магнитных и немагнитных атомов, находящихся в термодинамическом равновесии. Построены фазовые диаграммы и найдена зависимость намагниченности от концентрации магнитных атомов для модели Изинга с подвижными немагнитными примесями. В этом же приближении исследован фазовый переход в модели Поттса с тремя состояниями.

1. Введение

Магнитные свойства разбавленных и неупорядоченных магнетиков являются предметом теоретических и экспериментальных исследований уже на протяжении многих лет [1–4]. В работах [5–7] мы предложили 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 [8], и для анализа систем, в которых обменный интеграл является непрерывной функцией расстояния между атомами [9,10].

В настоящей работе мы рассмотрим применение самосогласованных уравнений для разбавленного магнетика 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 быстроохлажденного 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 [11], но все же легче, чем исследование неравновесных (релаксационных) процессов.

В работе [12] метод усреднения по обменным полям, примененный к модели Изинга с подвижными примесями, использовался для анализа равновесных состояний сплава магнитных и немагнитных атомов в отсутствие внешнего магнитного поля. В настоящей работе рассматривается более простое самосогласованное приближение для той же модели — метод среднего поля, но при этом учитывается влияние внешнего магнитного поля на

равновесное состояние. Кроме того, показано, что в этом же приближении может быть проанализирована модель Поттса [13] с тремя состояниями.

2. Модель Изинга с подвижными примесями

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

Аналогично тому как это принято при изучении бинарных сплавов [13], допустим, что в системе существуют межатомные кулоновские 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 в нем находится немагнитный атом, 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:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp \left\{ \left(\sum_{(i,j)} (J\sigma_i\sigma_j + U\sigma_i^2\sigma_j^2) + (f + \mu) \sum_i \sigma_i^2 + H_e \sum_i \sigma_i \right) / kT \right\}, \quad (1)$$

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

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

Для приближенного вычисления m и p используем следующий прием [5,7]. Определим локальное обменное h_i и кристаллическое φ_i поля i -го узла как $h_i = \sum \sigma_j$ и $\varphi_i = \sum \sigma_j^2$ (суммирование производится по всем соседним к i -му узлам). Величины h_i и φ_i будем рассматривать как значения случайных величин h и φ с совместной функцией распределения $W(h, \varphi)$. Тогда средние по ансамблю $\langle \sigma_i \rangle$ и $\langle \sigma_i^2 \rangle$ вычисляются как

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

$$\langle \sigma_i^2 \rangle = \left\langle \frac{\text{ch}(Kh + h_e)}{\text{ch}(Kh + h_e) + xe^{-L\varphi}} \right\rangle W(h, \varphi), \quad (3)$$

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

Нахождение точного вида функции распределения $W(h, \varphi)$ эквивалентно точному решению задачи и не представляется возможным, за исключением нескольких тривиальных случаев. Поэтому для применения формул (2) и (3) необходимо использовать то или иное приближение для $W(h, \varphi)$. Кроме того, можно получить самосогласованные уравнения для намагниченности и химического потенциала, рассматривая кластеры с различным количеством узлов, аналогично тому, как это можно сделать для модели Изинга с замороженными примесями [5,6].

3. Приближение среднего поля

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

$$pm = \frac{\text{sh}(Kqpm + h_e)}{\text{ch}(Kqpm + h_e) + xe^{-Lqp}}, \quad (4)$$

$$p = \frac{\text{ch}(Kqpm + h_e)}{\text{ch}(Kqpm + h_e) + xe^{-Lqp}}. \quad (5)$$

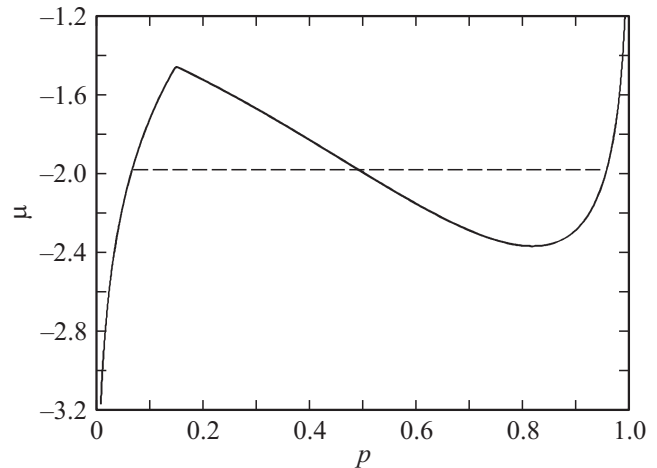


Рис. 1. Концентрационная зависимость химического потенциала μ в области гетерофазности.

Уравнения (4) и (5) можно переписать в следующем виде:

$$m = \text{th}(Kqpm + h_e), \quad (6)$$

$$x = \frac{1-p}{p} e^{Lqp} \text{ch}(Kqpm + h_e). \quad (7)$$

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

$$\mu = -kT \ln \frac{2(1-p)}{p} - kTLqp - kT \ln(\text{ch}(Kqpm + h_e)). \quad (8)$$

Первое слагаемое в этом выражении соответствует „идеальному решеточному газу“, второе учитывает влияние кулоновского взаимодействия, третье — влияние намагниченности и обменного взаимодействия.

Решая (6)–(8), нетрудно убедиться, что химический потенциал μ является монотонно возрастающей функцией концентрации p только для T , больших некоторого T_k , зависящего от отношения L/K . Если же $T < T_k$, то имеется область концентраций, где $\frac{\partial \mu}{\partial p} < 0$ (рис. 1). Понятно, что состояние с $\frac{\partial \mu}{\partial p} < 0$ является термодинамически неустойчивым, в этом случае нужно дополнить (8) известным построением Максвелла [13], согласно которому на некотором отрезке $[p_1, p_2]$ следует считать $\mu(p)$ постоянной величиной $\mu_p = \mu(p_1) = \mu(p_2)$. При этом для концентраций $p_1 < p < p_2$ система является смесью двух фаз: „жидкой“ с концентрацией p_2 и намагниченностью $m_2 = m(p_2, T)$ и „газообразной“ с концентрацией p_1 и намагниченностью $m_1 = m(p_1, T)$. Средняя намагниченность \bar{m} всей системы определяется „правилом рычага“: $\bar{m} = ym_1 + (1-y)m_2$, где $y = (p_2 - p)/(p_2 - p_1)$. Нетрудно показать, что μ_p определяется с помощью принципа „равных площадей“ в координатах μ и p . Действительно, условия фазового равновесия требуют равенства давлений и химических

потенциалов фаз. Давление P связано с концентрацией соотношением

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

Отсюда $P(p, T) = \mu(p, T)p - \int \mu(p, T)dp$. Применяя условия фазового равновесия, получим $\mu_p(p_2 - p_1) = \int_{p_1}^{p_2} \mu(p, T)dp$, т.е. как раз правило равных площадей.

При отсутствии внешнего магнитного поля ($h_e = 0$) для достаточно больших положительных значений U разделение на фазы при уменьшении температуры может начинаться раньше, чем в системе появится спонтанная намагниченность. Температуру T_k в этом случае легко вычислить, приравняв к нулю первую и вторую производную (8) по концентрации p . Получим $T_k = \frac{qU}{4k}$; разделение на фазы при этой температуре начинается при $p = 0.5$.

Уравнение для определения намагниченности (6) совпадает с уравнением для намагниченности модели Изинга с вмороженными примесями в приближении среднего поля. Этот результат представляется вполне естественным, если учесть, что модель среднего поля фактически является моделью с бесконечным радиусом взаимодействия [13]. Температура Кюри в рассматриваемом приближении равна $T_C = \frac{Jqp}{k}$, т.е. 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. 2. Если же $U \leq -J$, химический потенциал (8) монотонно возрастает как функция p при любой температуре, т.е. разделения на фазы при понижении температуры в рассматриваемом приближении не происходит. Если $-J < U < 2J$, разделение на фазы при понижении температуры происходит одновременно

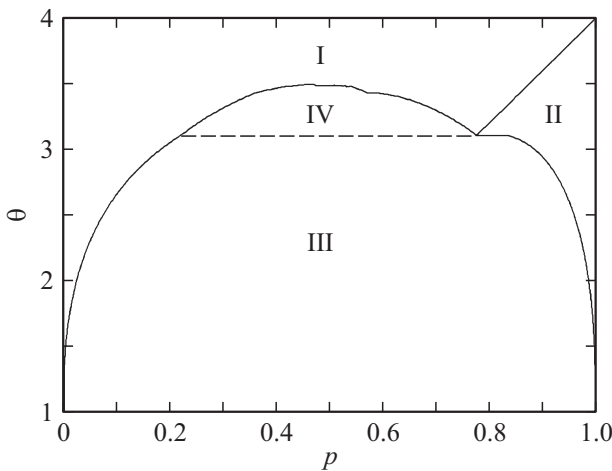


Рис. 2. Фазовая диаграмма при $U/J = 3.5$ и $h_e = 0$. По оси абсцисс отложена концентрация магнитных атомов p , по оси ординат — температурный параметр $\theta = kT/J$. Область I — однородная немагнитная фаза, II — однородная магнитная, III — гетерогенная магнитная, IV — гетерогенная немагнитная.

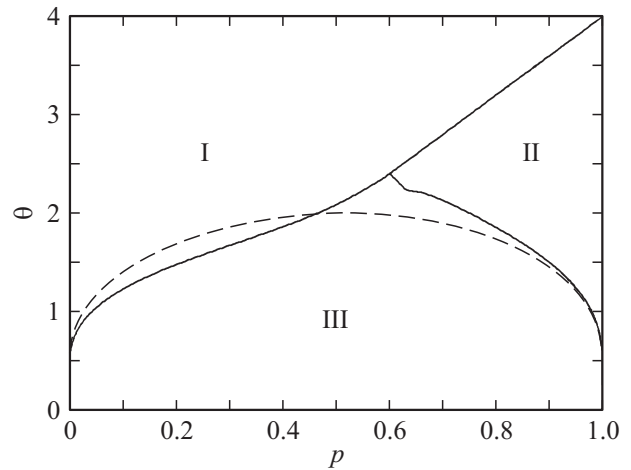


Рис. 3. Фазовая диаграмма при $U/J = 1$ и $h_e = 0$. Штриховая линия — граница раздела гомогенной и гетерогенной областей при $h_e kT = 1$. Остальные обозначения те же, что на рис. 2.

или после возникновения спонтанной намагниченности. Фазовая диаграмма в этом случае имеет вид, показанный на рис. 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. 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.

4. Модель Поттса

Модель Поттса [13] формулируется следующим образом. Рассмотрим некоторую регулярную решетку. Каждому узлу поставим в соответствие величину σ_i („спин“), которая может принимать n различных значений, например $1, 2, \dots, n$. 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

$$Z = Z \exp \left\{ \frac{J_p}{kT} \sum_{(i,j)} \delta(\sigma_i, \sigma_j) \right\}. \quad (9)$$

Нетрудно показать [13], что модель Поттса с $n = 2$ эквивалентна обычной модели Изинга в отсутствие

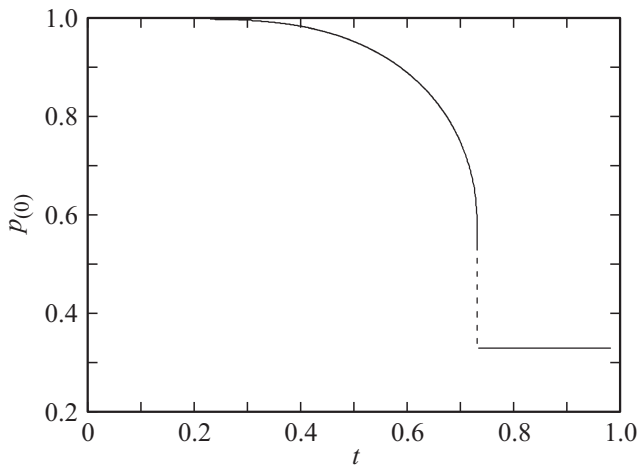


Рис. 4. Зависимость концентрации $p_{(0)}$ одного из состояний в модели Поттса с тремя состояниями от приведенной температуры $t = kT/Jq$.

внешнего поля. Покажем, что статистическая сумма модели Поттса (9) с $n = 3$ может быть записана в виде, аналогичном (1), а значит, ее можно исследовать аналогичными методами. Пусть каждый спин σ_i может принимать значения $-1, 0, 1$. Тогда энергию взаимодействия двух спинов можно записать следующим образом:

$$E_{ij} = -J_p \left\{ \frac{1}{2} \sigma_i \sigma_j + \frac{3}{2} \sigma_i^2 \sigma_j^2 - \sigma_i^2 - \sigma_j^2 + 1 \right\}, \quad (10)$$

а энергию всей системы (с точностью до постоянной) — как

$$E = -J_p \sum_{(i,j)} \left\{ \frac{1}{2} \sigma_i \sigma_j + \frac{3}{2} \sigma_i^2 \sigma_j^2 \right\} + qJ_p \sum_i \sigma_i^2, \quad (11)$$

т.е. если в (1) принять $J = J_p/2$, $U = 3J_p/2$ и $f + \mu = -1J_p$, то как раз получим статистическую сумму 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) и (5) получим

$$pm = \frac{\text{sh}(Kqpm)}{\text{ch}((Kqpm) + \frac{1}{2} e^{(2-3p)Kq})}, \quad (12)$$

$$p = \frac{\text{ch}(Kqpm)}{\text{ch}(Kqpm) + \frac{1}{2} e^{(2-3p)Kq}}. \quad (13)$$

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

две концентрации, например $p_{(+1)}$ и $p_{(-1)}$, равны и при малых T $p_{(+1)}, p_{(-1)} \rightarrow \frac{1}{2}$, $p_{(0)} \rightarrow 0$. Поскольку только решение первого типа имеет минимальную энергию при $T \rightarrow 0$, его и следует считать истинным при $T < T_c$. Тогда найти T_c можно следующим образом. Примем в (12) и (13) $m = 0$. Получим

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

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

$$e^{y\beta} = -2 - \frac{6}{y-2}. \quad (14)$$

Уравнение имеет корень $y = 0$, соответствующий симметричному решению. При $\beta = \beta_c$ появляется ненулевое решение \tilde{y} , которое (вместе с β_c) можно найти из (14) и условия равенства производных по y левой и правой части (14):

$$\beta e^{y\beta} = \frac{6}{(y-2)^2}. \quad (15)$$

Решая систему уравнений (14), (15), получим

$$\tilde{y} = 2 \frac{6}{3\beta_c + \sqrt{9\beta_c^2 - 12\beta_c}}, \quad (16)$$

где β_c является решением уравнения

$$\begin{aligned} \exp \left\{ \beta_c \left(2 - \frac{6}{3\beta_c + \sqrt{9\beta_c^2 - 12\beta_c}} \right) \right\} \\ = -2 + 3\beta_c + \sqrt{9\beta_c^2 - 12\beta_c}. \end{aligned} \quad (17)$$

Из (17) находим $\beta_c \approx 1.373$, а из (16) — $\tilde{y} \approx 0.585$, т.е. при температуре $T_c = \frac{q}{2\beta_c} \frac{J_p}{k} \approx 0.364 \frac{qJ_p}{k}$ 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.

5. Заключение

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

1. Приближенные самосогласованные методы, применимые к изинговским магнетикам без примесей или с замороженными примесями [6,7], применимы также 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. 2, 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 модели Поттса (рис. 4).

Список литературы

- [1] Ю.А. Изюмов, М.В. Медведев. Теория магнитоупорядоченных кристаллов с примесями. Наука, М. (1970). 271 с.
- [2] Дж. Займан. Модели беспорядка: теоретическая физика однородно неупорядоченных систем. Мир, М. (1982). 591 с.
- [3] Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский. УФН **173**, 175 (2003).
- [4] Б.Н. Шалаев. ФТТ **52**, 83 (2010).
- [5] С.В. Сёмкин, В.П. Смагин. ФТТ **55**, 892 (2013).
- [6] С.В. Сёмкин, В.П. Смагин. ФТТ **56**, 1064 (2014).
- [7] С.В. Сёмкин, В.П. Смагин. Изв. вузов. Физика **56**, 9 (2013).
- [8] Е.З. Мейлихов, Р.М. Фарзетдинова. ФТТ **56**, 679 (2014).
- [9] Е.З. Мейлихов, Р.М. Фарзетдинова. ФТТ **47**, 1085 (2005).
- [10] В.И. Белоконь, К.В. Нефедев. ЖЭТФ **120**, 156 (2001).
- [11] J.M. Sanchez, C.H. Lin. Phys. Rev. B **30** 1448 (1984).
- [12] В.И. Белоконь, С.В. Сёмкин. ЖЭТФ **102**, 1254 (1992).
- [13] Р. Бэкстер. Точно решаемые модели в статистической механике. Мир, М. (1985). 486 с.