

05,11

Приближение среднего поля для модели Поттса разбавленного магнетика во внешнем поле

© С.В. Сёмкин, В.П. Смагин

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса,
Владивосток, Россия

E-mail: Li15@rambler.ru

(Поступила в Редакцию 29 декабря 2015 г.)

Рассмотрена модель Поттса разбавленного магнетика с произвольным числом состояний, находящегося во внешнем поле. Методом среднего поля исследованы фазовые переходы в этой модели, найдена зависимость критической температуры от внешнего поля и концентрации магнитных атомов и рассчитана магнитная восприимчивость. Предложен усовершенствованный метод среднего поля, позволяющий более точно учесть эффекты, связанные с немагнитным разбавлением. С помощью этого метода исследовано влияние разбавления на кривую фазовых переходов первого рода и скачок намагниченности при фазовом переходе.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ по заданию № 2014/292 на выполнение государственных работ в сфере научной деятельности в рамках базовой части государственного задания.

1. Введение

Модель Поттса [1] — одна из наиболее часто используемых моделей в статистической физике, она является теоретическим инструментом, применяемым для изучения широкого класса явлений в физике конденсированных сред [2,3] и ядерной физике [4,5]. Точных результатов для модели Поттса существует немного. Известно, что если число спиновых состояний в модели Поттса больше некоторого критического значения (зависящего от размерности решетки), то в нулевом внешнем поле наблюдается фазовый переход первого рода, а если меньше — переход второго рода [1,6,7]. В отличие от модели Изинга модель Поттса с числом состояний не меньших трех имеет фазовые переходы и в ненулевом внешнем поле [4,5]. Точки этих фазовых переходов первого рода образуют на плоскости температура–внешнее поле линию, которая заканчивается точкой фазового перехода второго рода [4,5]. Влияние немагнитного разбавления на критическое поведение модели Поттса в нулевом внешнем поле рассматривалось, в частности, в работах [3,8,9]. Однако исследования влияния немагнитного разбавления на всю линию фазовых переходов первого рода, настолько нам известно, ранее не проводилось.

В настоящей работе рассматривается модель Поттса с произвольным числом состояний во внешнем поле и немагнитным разбавлением методом среднего поля. Мы используем как „классический метод“ среднего поля, так и его модификацию, позволяющую более точно учитывать влияние немагнитного разбавления.

2. Модель Поттса

Модель Поттса [1] формулируется следующим образом. Рассмотрим некоторую регулярную решетку.

Каждому узлу поставим в соответствие величину σ_i („спин“), которая может принимать s различных значений (например, $1, 2, \dots, s$). 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, соответственно $1 - b$ — доля примесей в решетке. 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. Наибольший интерес представляет модель с вмороженными примесями, поскольку подавляющее большинство магнетиков с примесями относится именно к этому типу.

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 $W(n_1, n_2, \dots, n_s)$. Пусть p_j — вероятность обнаружить магнитный атом в состоянии j . Очевидно, что для вмороженных примесей

$$\langle n_j \rangle_W = q b p_j. \quad (1)$$

Будем исходить из соотношения

$$\left\langle \frac{e^{Kn_j+h\delta(j,1)}}{\sum_i e^{Kn_i+h\delta(i,1)}} \right\rangle_w = p_j, \quad (2)$$

которое является обобщением формулы, приведенной в работе [10], $K = J_p/kT$, $h = H/kT$ (k — постоянная Больцмана). Определим намагниченность для модели Поттса следующим образом [3]:

$$M = \frac{sp_1 - 1}{s - 1}.$$

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 (1), приводит к выражению

$$M = \left\langle \frac{e^{Kn_1+h} - \frac{1}{s-1} \sum_{i=2}^s e^{Kn_i}}{e^{Kn_1+h} + \sum_{i=2}^s e^{Kn_i}} \right\rangle_w. \quad (3)$$

Будем искать решение, в котором все p_i для $i > 1$ одинаковы и равны p . Тогда

$$p_1 = M + \frac{1 - M}{s} \quad \text{и} \quad p = \frac{1 - M}{s}. \quad (4)$$

3. Классический метод среднего поля

Самым простым способом использования формулы (3) является метод среднего поля. Он заключается в подстановке в правую часть (3) вместо n_i их средних значений (1), выраженных через намагниченность M по формулам (4). Эта подстановка дает самосогласованное уравнение для M

$$M = \frac{e^{yM+h} - 1}{e^{yM+h} - 1 + s}, \quad (5)$$

где $y = qKb$. Это уравнение определяет зависимость намагниченности M от температуры, концентрации и внешнего магнитного поля. Из (5) 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 отсутствие внешнего поля [2], так и (для $s = 3$) в ненулевом внешнем поле [5]. Однако его непосредственное обобщение на случай разбавленного магнетика не приводит, как видно из (5), к каким-либо нетривиальным результатам: концентрация b входит в (5) только через произведение qb .

В настоящей работе предлагается модификация метода среднего поля, которая, как мы надеемся, 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) применительно к разбавленному магнетик.

При $h = 0$ у (5) всегда есть решение $M = 0$. Однако это решение является устойчивым, только если производная по M от правой части (5) меньше единицы при $M = 0$. Вычислив эту производную, можно убедиться, что нулевое решение устойчиво при $y \leq s$, что приводит к следующей зависимости температуры фазового перехода $T_0 = 1/K_0$ от концентрации b , числа состояний s и координационного числа q :

$$T_0 = \frac{qb}{s}, \quad (6)$$

т.е. 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) при $h = 0$. Это ненулевое решение при $s = 2$ стремится к нулю при $y \rightarrow s + 0$, что означает отсутствие разрыва в критической точке $y = s$, т.е. фазовый переход — 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) стремится при $y \rightarrow s + 0$ к конечному значению M^* , определяемому с помощью уравнения

$$M^* = \frac{e^{sM^*} - 1}{e^{sM^*} - 1 + s}, \quad (7)$$

т.е. фазовый переход является переходом первого рода. В несколько ином варианте метода среднего поля, описанном в [2], получена аналогичная зависимость $M_1^*(s) = \frac{s-2}{s-1}$.

Восприимчивость

$$\chi = \left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_{H=0} = \left. \frac{K}{J_p} \frac{\partial M}{\partial h} \right|_{h=0}$$

при $y < s$ определяется по формуле (5) и равна $\chi = \frac{K}{J_p} \frac{1}{s-y}$. Если $y > s$, выражение для восприимчивости имеет следующий вид:

$$\chi = \frac{K}{J_p} \left(\frac{s}{(1 + (s-1)M)(1-M)} - y \right)^{-1}. \quad (8)$$

При $s = 2$ это выражение при $y \rightarrow 2 + 0$ приближенно равно $\chi \approx \frac{1}{2} \frac{K}{J_p} \frac{1}{y-2}$. Если же $s > 2$, восприимчивость (8) остается конечной при $y \rightarrow s + 0$ и имеет в точке $y = s$ максимальное значение, определяемое подстановкой в (8) $M = M^*$.

Как известно [4,5], в модели Поттса при $s > 2$ в отличие от модели Изинга имеет место не одна точка фазового перехода при $h = 0$, а линия фазовых переходов первого рода на плоскости (K, h) , которая начинается в точке $(K_0, 0)$ и заканчивается в точке (K_e, h_e) , в которой фазовый переход является переходом второго рода. Точки линии фазовых переходов находятся из условий

$$\begin{cases} F(M, h) = M, \\ \frac{dF(M, h)}{dM} = 1, \end{cases}$$

где $F(M, h) = 1 - s / (e^{yM+h} - 1 + s)$. Отсюда

$$e^h = \left(\frac{s}{1-M} - s + 1 \right) e^{-yM}, \quad (9)$$

а намагниченность M определяется с помощью уравнения

$$y(s-1)x^2 - ysx + s = 0 \quad (x = 1 - M). \quad (10)$$

Это уравнение имеет решение только для $y \in \left[\frac{4(s-1)}{s}, s \right]$. Верхняя граница этого отрезка соответствует температуре фазового перехода (6) при $h = 0$, а нижняя — температуре $T_e = \frac{qbs}{4(s-1)}$. Из (9) и (10) следует, что $h_e = \ln(s-1) - 2(s-2)/s$. В работе [5] 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 исходя из (9) и (10) записать в следующем виде:

$$h(y) = \ln \left(\frac{s}{x_c(y)} - s + 1 \right) - y(1 - x_c(y)),$$

$$x_c(y) = \frac{ys + \sqrt{y^2s^2 - 4ys(s-1)}}{2y(s-1)}, \quad y = qKb,$$

т.е. 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

$$M_e = 1 - \frac{s}{2(s-1)}.$$

4. Модифицированный метод среднего поля

Функцию $W(n_1, n_2, \dots, n_s)$, по которой производится усреднение в правой части (3), можно представить в следующем виде:

$$W(n_1, n_2, \dots, n_s) = \sum_{z=0}^q P(z) W_z(n_1, n_2, \dots, n_s), \quad (11)$$

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

$$P(z) = C_q^z b^z (1-b)^{q-z}, \quad (12)$$

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 через 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 $z p_j$. Зададим функции $W_z(n_1, n_2, \dots, n_s)$ следующим образом:

$$W_z(n_1, n_2, \dots, n_s) = \prod_{j=1}^s \delta(n_j - z p_j), \quad (13)$$

т.е. для каждого конкретного значения z приравняем n_j к их средним значениям. В этом и заключается наша модификация классического метода среднего поля. Для чистого ($b = 1$) магнетика Поттса это соответствует обычному приближению среднего поля. Используя (4), получим самосогласованное уравнение для определения M

$$M = \sum_{z=0}^q C_q^z b^z (1-b)^{q-z} \frac{e^{KzM+h} - 1}{e^{KzM+h} - 1 + s}. \quad (14)$$

Температура фазового перехода при $h = 0$ находится аналогично предыдущему случаю:

$$1 = \frac{K_0}{s} \sum_{z=0}^q z C_q^z b^z (1-b)^{q-z} = \frac{K_0 q b}{s},$$

т.е. температура фазового перехода определяется по формуле (6), как и в предыдущем случае. Аналогично уравнению (5) уравнение (14) имеет при $T < T_0$ устойчивое ненулевое решение, которое и определяет спонтанную намагниченность. Если $s = 2$ (модель Изинга), это решение обращается в нуль при $T \rightarrow T_0 - 0$, а при $s > 2$ $M \rightarrow M^* > 0$, т.е. фазовый переход при $s = 2$ является переходом второго рода, а при $s > 2$ — первого.

Однако между поведением решения (5) и решения (14) есть все же некоторое различие. Решение (5) зависит только от параметра $y = qKb$, а зависимость решения (14) 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 с помощью уравнения

$$M^* = \sum_{z=0}^q C_q^z b^z (1-b)^{q-z} \frac{\exp\left(\frac{zM^*}{qb}\right) - 1}{\exp\left(\frac{zM^*}{qb}\right) - 1 + s}, \quad (15)$$

которое совпадает с (7) только при $b = 1$.

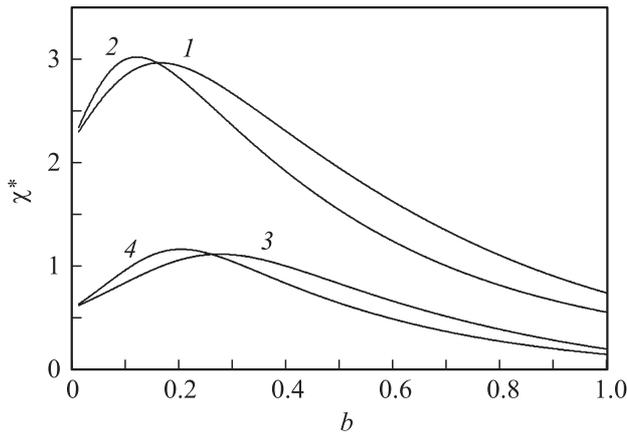


Рис. 1. Зависимость магнитной восприимчивости, умноженной на J_p , при $T = T_c - 0$ от концентрации магнитных атомов b в модифицированном методе среднего поля. Кривая 1 — $q = 3, s = 3$; 2 — $q = 4, s = 3$; 3 — $q = 3, s = 4$; 4 — $q = 4, s = 4$.

Дифференцируя (14) по H , найдем магнитную восприимчивость. При $T > T_c$ (в этом случае спонтанная намагниченность равна нулю) получим

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

что сводится к $\chi = \frac{K}{J_p} \frac{1}{s-y}$, как и в предыдущем случае. При $T < T_c$ получим следующее уравнение для восприимчивости:

$$\chi = \frac{K}{J_p} \frac{\langle \varphi(z) \rangle}{1 - K\chi \langle z\varphi(z) \rangle}, \tag{16}$$

где

$$\varphi(z) = \frac{e^{KzM}}{e^{KzM} - 1 + s} - \frac{(e^{KzM} - 1)e^{KzM}}{(e^{KzM} - 1 + s)^2},$$

угловые скобки означают усреднение по биномиальному распределению (12).

При $T < T_0$ восприимчивость χ монотонно растет с ростом температуры, достигая конечного предельного значения при $T = T_0 - 0$. Величина этого предельного значения χ^* показана как функция концентрации магнитных атомов на рис. 1. Видно, что χ^* немонотонна и стремится к конечному пределу при $b \rightarrow 0$. В классическом методе среднего поля, как это видно из формул (7) и (8), предельная восприимчивость χ_c^* обратно пропорциональна b

$$\chi_c^*(b) = \frac{\chi^*(1)}{b}$$

и расходится при $b \rightarrow 0$.

Рассмотрим теперь нахождение линии фазовых переходов первого рода в рамках модифицированного метода среднего поля. Для определения точек этой линии необходимо найти совместное решение (14) и

условия равенства единице производной по M от правой части (14). Результаты расчета показаны на рис. 2. При расчете классическим методом среднего поля не обнаруживается зависимости h_e от концентрации b (кривые 1, 3, 5 на рис. 2), в то время как при расчете модифицированным методом h_e убывает при уменьшении b (кривые 1, 2, 4).

Величину скачка намагниченности на кривой фазовых переходов первого рода иллюстрирует рис. 3. Верхние ветви кривых на этом рисунке соответствуют значениям намагниченности на кривой фазовых переходов при приближении „сверху“ (со стороны меньших значений

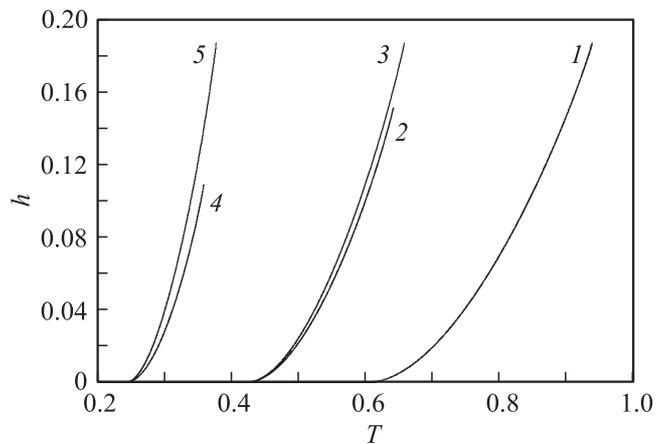


Рис. 2. Линии фазовых переходов первого рода, вычисленные в приближении среднего поля для модели Поттса с $s = 5$ и $q = 3$ при различных концентрациях магнитных атомов. По оси абсцисс отложена температура T , по оси ординат — внешнее поле h . Кривые 1, 3, 5 — приближение классического среднего поля, кривые 1, 2, 4 — приближение модифицированного среднего поля. Концентрация магнитных атомов $b = 1$ (1), 0.7 (2 и 3) и 0.4 (4 и 5). Для $b = 1$ (кривая 1) оба метода дают одинаковый результат.

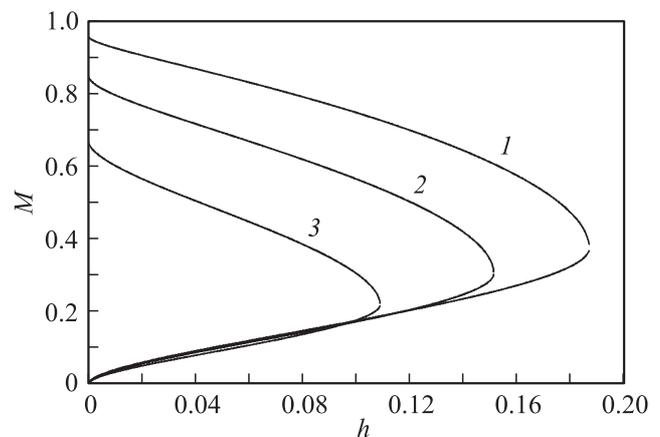


Рис. 3. Скачок намагниченности на линии фазовых переходов первого рода для модели Поттса с $s = 5$ и $q = 3$ в приближении среднего поля при различных концентрациях магнитных атомов. По оси абсцисс отложено внешнее поле h , по оси ординат — намагниченность M . $b = 1$ (1), 0.7 (2) и 0.4 (3).

температуры или ббльших 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. 3 для любого значения концентрации. В приближении модифицированного среднего поля величина скачка оказывается зависящей от b и с уменьшением b убывает (кривые 2 и 3).

5. Заключение

С помощью классического метода среднего поля мы проанализировали 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 [2,5].

Для разбавленного магнетика Поттса мы построили модификацию метода среднего поля, совпадающую с классическим методом при $b = 1$. С помощью этого метода мы проанализировали влияние немагнитного разбавления на кривую фазовых переходов первого рода и получили 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. 1).

2. Координаты конечной точки линии фазовых переходов (T_e, h_e) являются функциями концентрации b , и обе эти функции убывают с уменьшением b (рис. 2).

3. Скачок намагниченности на линии фазовых переходов зависит от b и его величина убывает при всех значениях $h \in [0, h_e(b)]$ (рис. 3).

Список литературы

- [1] Р. Бэкстер. Точно решаемые модели в статистической механике. Мир, М.(1985). 486 с.
- [2] F.Y. Wu. Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [3] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабасев, Г.Я. Азнаурова. ФТТ **50**, 703 (2008).
- [4] W. Janke, R. Villanova. Nucl. Phys. B **489**, 679 (1997).
- [5] T.A. DeGrand, C. DeTar. Nucl. Phys. B **225**, 590 (1983).
- [6] M. Louldi. Physica A **287**, 177 (2000).
- [7] A.J. Guttmann, I.G. Enting. J. Phys. A **27**, 5801 (1994).
- [8] С.В. Сёмкин, В.П. Смагин. ЖЭТФ **148**, 729 (2015).
- [9] С.В. Сёмкин, В.П. Смагин. ФТТ **56**, 2341 (2014).
- [10] H.V. Callen. Phys. Lett. **4**, 161 (1963).