

МОДЕЛЬ ПОТТСА НА РЕШЕТКЕ БЕТЕ С НЕМАГНИТНЫМИ ПРИМЕСЯМИ

С. В. Сёмкин, В. П. Смагин*

*Владивостокский государственный университет экономики и сервиса (ВГУЭС)
690600, Владивосток, Россия*

Поступила в редакцию 17 апреля 2015 г.

Получено решение для модели Поттса на решетке Бете с подвижными немагнитными примесями. Предложен метод построения «псевдохаотического» распределения примесей с помощью обращения в нуль корреляции в расположении атомов примеси для ближайших узлов. Для псевдохаотического распределения примесей найдены температура фазового перехода, намагниченность и величина скачка спонтанной намагниченности при температуре фазового перехода.

DOI: 10.7868/S0044451015100090

1. ВВЕДЕНИЕ

Модель Поттса [1] формулируется следующим образом. Рассмотрим некоторую регулярную решетку. Каждому узлу поставим в соответствие величину σ_i («спин»), которая может принимать n различных значений, скажем $1, 2, \dots, n$. Два соседних спина σ_i и σ_j взаимодействуют с энергией $-J_p \delta(\sigma_i, \sigma_j)$, где

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

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, 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 $1, 2, \dots, n$, принимать значения нуль, 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-mail: li15@rambler.ru

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

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:

$$Z = \Sigma \exp \{ K \Sigma_{(i,j)} \varphi(\sigma_i, \sigma_j) + h \Sigma_i \delta(\sigma_i, 1) + x \Sigma_i \delta(\sigma_i, 0) \}, \quad (1)$$

где $K = J_p/kT$, $h = H/kT$, $x = \mu/kT$ (μ — химический потенциал),

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

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

2. РЕШЕНИЕ ДЛЯ РЕШЕТКИ БЕТЕ

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 $N \rightarrow \infty$. Для вычисления статистической суммы (1) на решетке Бете воспользуемся приемом, аналогичным использованному в работе [1] для модели Изинга. Большая статистическая сумма (1) является суммой по всем возможным спиновым конфигурациям $\{\sigma\}$:

$$Z = \Sigma_{\{\sigma\}} P(\sigma);$$

$$P(\sigma) = \Sigma \exp \{ K \Sigma_{(i,j)} \varphi(\sigma_i, \sigma_j) + h \Sigma_i \delta(\sigma_i, 1) + x \Sigma_i \delta(\sigma_i, 0) \}.$$

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 соответственно совокупности спинов на j -й и l -й ветвях узлов 1 и 2.

Обозначив $G_N(\sigma) = \Sigma_{\{s\}} Q_N(\sigma | s)$ запишем статистическую сумму в следующем виде:

$$Z_N = \Sigma_{\sigma_1, \sigma_2} e^{\psi(\sigma_1, \sigma_2)} G_N^{q-1}(\sigma_1) G_N^{q-1}(\sigma_2). \quad (2)$$

С помощью (2) 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):

$$p_i = \frac{1}{Z_N} \Sigma_{\sigma_1, \sigma_2} \frac{1}{2} (\delta(\sigma_1, i) + \delta(\sigma_2, i)) \times e^{\psi(\sigma_1, \sigma_2)} G_N^{q-1}(\sigma_1) G_N^{q-1}(\sigma_2). \quad (3)$$

В соответствии со сказанным выше, концентрация магнитных атомов в решетке $b = 1 - p_0$. Ковариацию расположения примесей в узлах 1 и 2 вычислим так:

$$g_{12} = \frac{1}{Z} \Sigma_{\sigma_1, \sigma_2} \delta(\sigma_1, 0) \delta(\sigma_2, 0) e^{\psi(\sigma_1, \sigma_2)} \times G_N^{q-1}(\sigma_1) G_N^{q-1}(\sigma_2) - p_0^2. \quad (4)$$

Для функций $G_N(\sigma)$ можно построить рекуррентные соотношения, представив $Q_N(\sigma | s)$ в виде

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

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

$$G_N(\sigma) = \Sigma_{s_1} \exp \{ K \varphi(\sigma, s_1) + h \delta(s_1, 1) + x \delta(s_1, 0) \} G_{N-1}^{q-1}(s_1). \quad (5)$$

Поскольку в дальнейшем мы собираемся перейти к термодинамическому пределу ($N \rightarrow \infty$), вместо функций $G_N(\sigma)$ введем отношения $y_{i,N} = G_N(i) / G_N(1)$. Из формулы (5) 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 (3) и (4) получим

$$p_1 = \frac{1}{Z_N} (e^{K+2h} + t_N e^h + (n-1) e^h y_N^{q-1}), \quad (6)$$

$$1 - b = \frac{1}{Z_N} (t_N^2 e^{K\gamma} + t_N e^h + (n-1) t_N y_N^{q-1}), \quad (7)$$

$$g_{12} = \frac{t_N^2 e^{K\gamma}}{\tilde{Z}_N} - (1-b)^2, \quad (8)$$

где $\tilde{Z}_N = Z_N / G_N^{2(q-1)}(1)$,

$$\begin{aligned} \tilde{Z}_N &= t_N^2 e^{K\gamma} + e^{K+2h} + 2t_N e^h + \\ &+ (n-1)y_N^{q-1} (2t_N + 2e^h + e^K y_N^{q-1} + (n-2)y_N^{q-1}). \end{aligned} \quad (9)$$

Из (5) получим рекуррентные соотношения

$$y_{0,N} = \frac{e^{\gamma K} t_{N-1} + e^h + (n-1)y_{N-1}^{q-1}}{t_{N-1} + e^{K+h} + (n-1)y_{N-1}^{q-1}}, \quad (10)$$

$$y_N = \frac{t_{N-1} + e^h + (e^K + (n-2))y_{N-1}^{q-1}}{t_{N-1} + e^{K+h} + (n-1)y_{N-1}^{q-1}}. \quad (11)$$

Рассмотрим выражения (6)–(11) в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$). В этом пределе $y_{0,N} \rightarrow y_0$, $y_N \rightarrow y$, $t_N \rightarrow t$ и $Z_N \rightarrow Z$. Теперь, в соответствии со сказанным выше, возьмем такую величину γ , чтобы g_{12} обратилось бы в нуль. Соответствующую величину γ будем обозначать γ_0 . Тогда из (7) и (8) получим

$$1-b = \frac{te^{K\gamma_0}}{te^{K\gamma_0} + e^h + (n-1)y^{q-1}}.$$

Отсюда

$$e^{K\gamma_0} = \frac{1-b}{bt} (e^h + (n-1)y^{q-1}). \quad (12)$$

Подставив это выражение в (8), получим

$$\begin{aligned} t &= \frac{1-b}{b} \times \\ &\times \frac{e^{K+2h} + (n-1)y^{q-1} (2e^h + y^{q-1}(e^K + n-2))}{e^h + (n-1)y^{q-1}}, \end{aligned} \quad (13)$$

из (6)

$$p_1 = \frac{1}{\tilde{Z}_0} (e^{K+2h} + te^h + (n-1)e^h y^{q-1}); \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \tilde{Z}_0 &= t \frac{1+b}{b} (e^h + (n-1)y^{q-1}) + \\ &+ [e^{K+2h} + (n-1)y^{q-1} (2e^h + y^{q-1}(e^K + n-2))] \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} p_1 &= b^2 \times \\ &\times \frac{e^{K+2h} + te^h + (n-1)e^h y^{q-1}}{e^{K+2h} + (n-1)y^{q-1} (2e^h + y^{q-1}(e^K + n-2))}. \end{aligned} \quad (15)$$

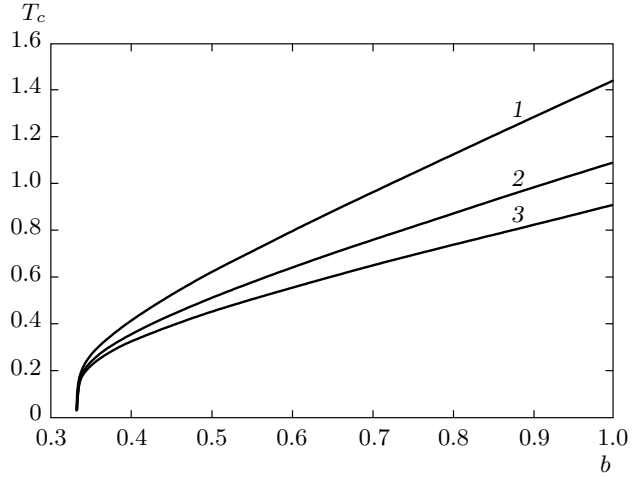


Рис. 1. Зависимость температуры Кюри от концентрации магнитных атомов при $q = 4$. Кривая 1 — $n = 2$ (модель Изинга), кривая 2 — $n = 3$ и кривая 3 — $n = 4$

Кроме того, из рекуррентного соотношения (11) получим при $N \rightarrow \infty$

$$y = \frac{t + e^h + (e^K + (n-2))y^{q-1}}{t + e^{K+h} + (n-1)y^{q-1}}. \quad (16)$$

Формулы (13)–(16) 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, эти формулы позволяют найти температуру фазового перехода $K_c(b) = J_p/kT_c(b)$ в зависимости от концентрации магнитных атомов.

Анализ выражений (13)–(16) показывает, что при $K < K_c(b)$ и $h = 0$ единственным устойчивым решением (16) является $y = 1$ и $p_1 = b/n$ (из (15)). При $K = K_c(b)$ происходит (при $n > 2$) скачкообразное увеличение вероятности p_1 (фазовый переход первого рода). Найдем из выражений (13) и (16) температуру фазового перехода. При $K = K_c$ производная по y правой части (16) должна быть равна единице при $y = 1$ (если эта производная больше единицы, то решение $y = 1$ становится неустойчивым). Взяв производную (16) (используя (13) для определения $t(y)$), получим

$$K_c(b) = \ln \frac{n-1 + (q-1)b}{(q-1)b-1}. \quad (17)$$

При $b = 1$, т. е. для модели Поттса без примесей, (17) совпадает с критической температурой моде-

ли Поттса на решетке Бете, приведенной в работе [2]. При $n = 2$ (в этом случае модель Поттса эквивалентна модели Изинга) из (17) получается тот же результат, который приведен в работе [3]. На рис. 1 приведены графики критической температуры $T_c(b) = 1/K_c(b)$ для $q = 4$ и $n = 2, 3, 4$ (соответственно кривые 1, 2 и 3). 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 [4]. Кроме того, из (17) видно, что при произвольном n критическая температура обращается в нуль при концентрации, совпадающей с порогом протекания решетки Бете ($b_c = 1/(q - 1)$), в этом смысле псевдохаотическое распределение примесей ведет себя как истинно хаотическое [5, 6]. 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 n состояниями аналогично [7],

$$M = \frac{np_1 - b}{b(n - 1)},$$

то нетрудно показать, что вероятность для магнитного атома принадлежать бесконечному кластеру и есть намагниченность M при $T = 0$ и $h = 0$. Переходя в (13), (15) и (16) к пределу $K \rightarrow \infty$, получим

$$M_0(y) = \frac{1}{(s - 1)} \times \left(\left(\frac{1 - b(y)}{1 + (s - 1)y^{q-1}} + \frac{b(y)}{1 + (s - 1)y^{2(q-1)}} \right) s - 1 \right)^{-1},$$

$$b(y) = \left(1 + \frac{1 + (n - 1)y^{q-1}}{1 + (n - 1)y^{2(q-1)}} \sum_{i=1}^{q-2} y^i \right)^{-1},$$

$0 < y < 1.$

Эти выражения определяют в параметрическом виде зависимость $M_0(b)$. На рис. 2 приведены графики $M_0(b)$ для $n = 2$ (кривая 2) и $n = 4$ (кривая 3). 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 [4] $P(b) = 1 - s^q$, $\sum_{i=0}^{q-2} s^i = 1/b$.) Видно, что хотя функции $M_0(b)$ и $P(b)$ достаточно близки, при любом n эти функции обращаются в нуль 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.

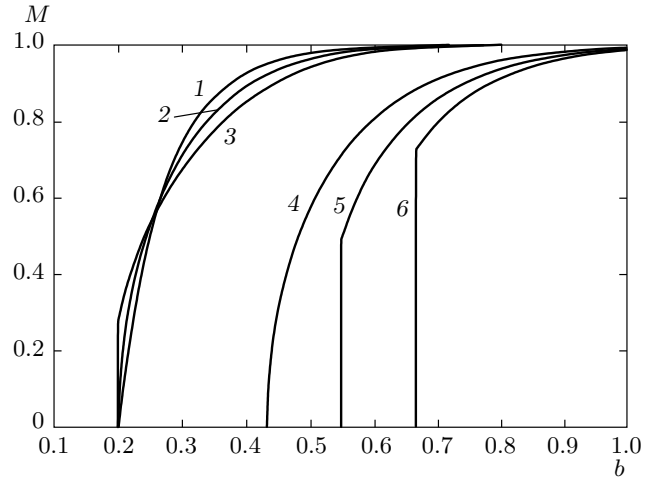


Рис. 2. Концентрационная зависимость спонтанной намагниченности. По горизонтальной оси — концентрация магнитных атомов b , по вертикальной — намагниченность. Кривая 1 — вероятность для магнитного атома принадлежать бесконечному кластеру в решетке Бете со случайным разбавлением, кривые 2 и 3 — намагниченность при нулевой температуре в модели Поттса с псевдохаотическим распределением соответственно при $n = 2$ и $n = 3$. Кривые 4, 5 и 6 — намагниченность при $K = 1$ соответственно для $n = 2$, $n = 3$ и $n = 4$

На рис. 2 показана также и намагниченность при конечной температуре ($K = 1$) как функция концентрации магнитных атомов для $n = 2$ (кривая 4), $n = 3$ (кривая 5) и $n = 4$ (кривая 6). Видно, что при $n = 2$ (модель Изинга) фазовый переход является переходом второго рода, а при $n > 2$ — первого рода. Как следует из формулы (17), значение концентрации $b_0(K)$, при котором возникает спонтанная намагниченность при конечном K , определяется выражением

$$b_0(K) = b_c \frac{1 + (n - 1)e^{-K}}{1 - e^{-K}}. \tag{18}$$

Видно, что $b_0(K)$ растет с ростом n и при любом n больше b_c . При $K \rightarrow \infty$, $b_0(K) \rightarrow b_c$ для любого $n > 1$.

На рис. 3 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 n . Следует отметить, что температура фазового перехода (17) сама по себе зависит от концентрации магнитных атомов b , поэтому для каждой кривой на рис. 3 ее различные точки соответствуют разным

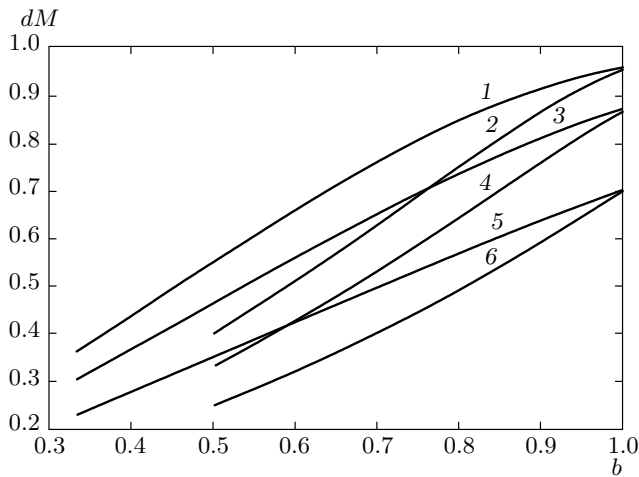


Рис. 3. Зависимость от концентрации скачка намагниченности при фазовом переходе в модели Поттса с псевдохаотическими примесями. По горизонтальной оси — концентрация магнитных атомов b , по вертикальной — величина скачка намагниченности dM . Кривые 1, 3 и 5 построены для координационного числа $q = 4$, а кривые 2, 4 и 6 — для $q = 3$. Число состояний $n = 6$ для кривых 1 и 2, $n = 4$ для кривых 3 и 4 и $n = 3$ для кривых 5 и 6

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 n при посто-

янном q и с ростом q при постоянном n . Зависимость величины скачка от координационного числа решетки q (при одинаковом n) слабо выражена для чистого магнетика ($b = 1$), но становится более заметной при $b < 1$.

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.

ЛИТЕРАТУРА

1. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва (1985).
2. F. Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
3. С. В. Сёмкин, В. П. Смагин, *ФТТ* **56**, 1064 (2014).
4. Т. Kaneyoshi, *Physica A* **218**, 46 (1995).
5. Дж. Займан, *Модели беспорядка. Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем*, Мир, Москва (1982).
6. С. В. Сёмкин, В. П. Смагин, *Изв. ВУЗов, сер. физ.* **57**, 54 (2014).
7. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Азнаурова, *ФТТ* **50**, 703 (2008).