Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

С. В. Сёмкин, В. П. Смагин, Е. Г. Гусев, Модель Поттса на решетке Бете с немагнитными примесями во внешнем поле, *ТМФ*, 2018, том 197, номер 2, 290–295

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9527>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 34.229.45.116

26 апреля 2023 г., 17:41:32

© 2018 г. С. В. Сёмкин*, В. П. Смагин*, Е. Г. Гусев*

МОДЕЛЬ ПОТТСА НА РЕШЕТКЕ БЕТЕ С НЕМАГНИТНЫМИ ПРИМЕСЯМИ ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ

Получено решение для модели Поттса на решетке Бете во внешнем поле с подвижными немагнитными примесями. С помощью метода “псевдохаотического” распределения примесей (обращения в ноль корреляции в расположении атомов примеси для ближайших узлов) получена система уравнений для определения кривой фазовых переходов первого рода на плоскости “температура–внешнее поле”. Найдена зависимость от концентрации магнитных атомов конечной точки линии фазовых переходов.

Ключевые слова: разбавленный магнетик, модель Поттса, решетка Бете, фазовый переход.

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9527>

1. ВВЕДЕНИЕ

Модель Поттса [1] – одна из наиболее часто используемых моделей в статистической [2], [3] и ядерной физике [4]–[6]. Фазовый переход в модели Поттса в отсутствие внешнего поля неоднократно рассматривался как для чистого магнетика [1]–[4], так и для магнетика с немагнитными примесями [7], [8]. Однако несомненный интерес представляет и критическое поведение модели Поттса в присутствии внешнего поля [5], [6]. Существуют материалы, такие как SrTiO_2 , структурные фазовые переходы в которых относятся к классу универсальности модели Поттса с тремя состояниями [2].

Кроме того, модель Поттса является основой теоретического описания сложных анизотропных ферромагнетиков кубической структуры, многокомпонентных сплавов и жидких смесей [3].

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

---

*Владивостокский государственный университет экономики и сервиса, Владивосток, Россия. E-mail: archvitos@yahoo.com

В настоящей работе мы рассматриваем модель Поттса с немагнитным разбавлением (по узлам) и с произвольным числом состояний на решетке Бете во внешнем поле. Для того чтобы учесть влияние немагнитного разбавления, мы используем метод псевдохаотически распределенных примесей, изложенный в работе [8]. Суть метода заключается в использовании условия равенства нулю корреляции в расположении примесей для соседних узлов решетки в задаче с подвижными немагнитными примесями. Ранее [9] эта модель рассматривалась нами с помощью метода среднего поля и его модификаций. В этом приближении были получены линии фазовых переходов первого рода на плоскости температура–внешнее поле в зависимости от концентрации магнитных атомов и вычислена магнитная восприимчивость вблизи точки фазового перехода. Однако при вычислениях по методу среднего поля фазовый переход оказывается возможным при любой концентрации магнитных атомов, что не соответствует наличию перколяционного порога у реальных решеток. В отличие от метода среднего поля, при решении задачи в псевдохаотическом приближении присутствует, как показано ниже, перколяционный переход при ненулевом значении концентрации магнитных атомов.

2. МОДЕЛЬ ПОТТСА НА РЕШЕТКЕ БЕТЕ С ПСЕВДОХАОТИЧЕСКИМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ ПРИМЕСЕЙ

Сформулируем модель следующим образом. Рассмотрим решетку Бете с координационным числом q . Каждому узлу решетки поставим в соответствие величину σ_i которая может принимать s различных значений $1, 2, \dots, s$, когда в узле находится магнитный атом. Два соседних магнитных атома взаимодействуют с энергией $-J_p \delta(\sigma_i, \sigma_j)$, где

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

Допустим, что в некоторых узлах решетки могут находиться немагнитные атомы (“примеси”). Пусть b – доля магнитных атомов и соответственно $1 - b$ есть доля примесей в решетке. Пусть переменные σ_i принимают нулевые значения, когда в узле находится немагнитная примесь. Допустим, что силы взаимодействия действуют только между соседними атомами и есть внешнее поле H , которое действует на состояние “1”. Тогда вклад в энергию системы от двух соседних узлов можно представить в виде

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

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:

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

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

$$\phi(\sigma_i, \sigma_j) = \delta(\sigma_i, \sigma_j) + (\gamma - 1)\delta(0, \sigma_j)\delta(\sigma_i, 0), \quad \gamma = \frac{U}{J_p}, \quad U = U_{11} - 2U_{12} + U_{22}.$$

Используя выражение (1), для псевдохаотически распределенных примесей можно вычислить вероятность p_1 того, что в узле решетки находится магнитный атом в состоянии “1” [8]:

$$p_1 = b^2 \frac{e^{K+2h} + te^h + (n-1)e^h y^{q-1}}{e^{K+2h} + (n-1)y^{q-1}(2e^h + y^{q-1}(e^K + n-2))}, \quad (2)$$

где

$$t = \frac{1-b}{b} \frac{e^{K+2h} + (n-1)y^{q-1}(2e^h + y^{q-1}(e^K + n-2))}{e^h + (n-1)y^{q-1}} \quad (3)$$

и

$$y = \frac{t + e^h + (e^K + (n-2))y^{q-1}}{t + e^{K+h} + (n-1)y^{q-1}}. \quad (4)$$

В частном случае $h = 0$ (при отсутствии внешнего поля) система (2)–(4) была проанализирована в работе [8]. В ней, в частности, было показано, что уравнения (2)–(4) описывают фазовый переход (первого рода, если $s > 2$, и второго рода при $s = 2$) при условии, что $b > 1/(q-1)$, т. е. при концентрации магнитных атомов, превышающей порог протекания решетки Бете [10]. Температура $T_0(b)$, при которой происходит этот фазовый переход, определяется формулой [8]

$$T_0(b) = \left(\ln \frac{s-1+(q-1)b}{(q-1)b-1} \right)^{-1}. \quad (5)$$

Другой частный случай мы получим, выбирая $b = 1$ (модель Поттса без разбавления). Система (2)–(4) сводится в этом случае к системе

$$p_1 = \frac{e^h}{e^h + (s-1)y^q}, \quad y = \frac{e^h + (e^K + s-2)y^{q-1}}{e^{K+h} + (s-1)y^{q-1}}. \quad (6)$$

Этот результат совпадает с результатом, полученным в работе [11]. Анализ системы (6) показывает, что функция $y(K, h)$ непрерывна на плоскости (K, h) всюду, кроме точек некоторой кривой $h = h_c(K)$. Эта кривая является линией фазовых переходов первого рода. Она начинается в точке $(K_0, 0)$, где $K_0 = \ln(s/(q-2)+1)$ – точка фазового перехода для модели Поттса на решетке Бете без внешнего магнитного поля [2], и заканчивается в точке (K_e, h_e) , в которой фазовый переход является переходом второго рода. Из соотношений (6) легко получить, что

$$e^{K_e} = \frac{1}{2} \left[-(s-2) + \sqrt{(s-2)^2 + \frac{4q^2(s-1)}{(q-2)^2}} \right], \quad e^{h_e} = (s-1) \left(\frac{(q-2)(e^{K_e} + s-2)}{q(s-1)} \right)^q. \quad (7)$$

3. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МОДЕЛИ ПОТТСА С РАЗБАВЛЕНИЕМ

Перейдем теперь к рассмотрению влияния немагнитного разбавления на фазовые переходы в модели Поттса в присутствии внешнего поля. Линия фазовых переходов первого рода теперь зависит от концентрации магнитных атомов $h = h_c(K, b)$. Для нахождения этой зависимости запишем уравнение (4) (используя равенство (3)) в виде

$$(a_2 e^{2h} + a_1 e^h + a_0) e^K = b_2 e^{2h} + b_1 e^h + b_0, \quad (8)$$

где

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

Поскольку уравнение (4) является рекуррентным уравнением [8], его корень должен быть устойчивым в смысле рекуррентной процедуры [1], [11], что приводит к условию $F'(y) \leq 1$, где $F(y)$ – правая часть уравнения (4). Следовательно, для нахождения линии фазовых переходов $h = h_c(K, b)$ нужно решить систему из уравнения (8) и условия равенства производных по y от правой и левой частей (8). Для определения конечной точки этой линии к предыдущей системе нужно добавить третье уравнение – равенство вторых производных по y от правой и левой частей (8).

На рис. 1 приведены концентрационные зависимости температуры начальной точки линии фазовых переходов $T_0(b)$, вычисленные по формуле (5), и конечной ее точки $T_e(b) = 1/K_e(b)$. Кривые построены для $q = 3$ и значений $s = 3$ и $s = 6$. Функции $T_0(b)$ (кривые 2 и 4 на рис. 1) начинаются, как это и следует из формулы (5), при значении b , равном $1/(q - 1)$, что соответствует перколяционному порогу решетки Бете [9], и монотонно растут с ростом b до значения, соответствующего неразбавленному магнетику Поттса [2]. Однако расчет $T_e(b)$ (кривые 1 и 3 на рис. 1) 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 $b_c = 0,5$ (см. рис. 1). 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. Вследствие этого магнитные атомы могут образовать перколяционный кластер даже при концентрациях, меньших порога протекания.

На рис. 2 показаны зависимости $h_e(b) = H_e/kT$ при различных значениях 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, $H_e(b)$ также обращается в ноль).

Рис. 1. Зависимость температуры начальной $T_0(b)$ (кривые 2 и 4) и конечной $T_e(b)$ (кривые 1 и 3) точек линии фазовых переходов от концентрации магнитных атомов при $q = 3$. По горизонтальной оси отложена концентрация магнитных атомов b , по вертикальной – температура. Кривые 1 и 2 построены для значения $s = 3$, кривые 3 и 4 – для $s = 6$.

Рис. 2. Зависимость $h_e = H_e/kT$ от концентрации магнитных атомов при $q = 3$. По горизонтальной оси отложена концентрация магнитных атомов b , по вертикальной – величина h . Кривая 1 построена при $s = 4$, кривая 2 – при $s = 5$, кривая 3 – при $s = 6$.

Рассмотрим теперь влияние немагнитного разбавления на всю линию фазовых переходов в модели Поттса на решетке Бете. Анализируя уравнение (8) и условие равенства производных по y 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. 3.

Рис. 3. Линии фазовых переходов для $q = 3$ и $s = 4$ при различных концентрациях магнитных атомов. По горизонтальной оси отложена температура T , по вертикальной – величина h . Кривые 1–5 соответствуют значениям концентрации магнитных атомов 0,55, 0,65, 0,75, 0,85 и 1 соответственно.

Список литературы

- [1] Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, М., 1985.
- [2] F. Y. Wu, “The Potts model”, *Rev. Modern Phys.*, **54**:1 (1982), 235–268.
- [3] А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Азнаурова, “Исследование влияния замороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в трехмерной модели Поттса”, *ФТТ*, **50**:4 (2008), 703–708.
- [4] W. Janke, R. Villanova, “Three-dimensional 3-state Potts model revisited with new techniques”, *Nucl. Phys. B*, **489**:3 (1997), 679–696.
- [5] T. A. DeGrand, C. Detar, “Phase structure of QCD at high temperature with massive quarks and finite quark density: A $Z(3)$ paradigm”, *Nucl. Phys. B*, **225**:4 (1983), 590–620.
- [6] F. Karsch, S. Stickan, “The three-dimensional, three-state Potts model in an external field”, *Phys. Lett. B*, **488**:3–4 (2000), 319.
- [7] С. В. Сёмкин, В. П. Смагин, “Приближение Бете в модели Изинга с подвижными примесями”, *ФТТ*, **57**:5 (2015), 926–931.
- [8] С. В. Сёмкин, В. П. Смагин, “Модель Поттса на решетке бете с немагнитными примесями”, *ЖЭТФ*, **148**:4(10) (2015), 729–733.
- [9] С. В. Сёмкин, В. П. Смагин, “Приближение среднего поля для модели Поттса разбавленного магнетика во внешнем поле”, *ФТТ*, **58**:7 (2016), 1306–1310.
- [10] Дж. Займан, *Модели беспорядка. Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем*, Мир, М., 1982.
- [11] R. G. Ghulghazaryan, N. S. Ananikian, P. M. A. Sloom, “Yang–Lee zeros of the Q-state Potts model on recursive lattices”, [arXiv:cond-mat/0202441](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0202441).

Поступила в редакцию 23.12.2017,
после доработки 16.05.2018