Известия НАН Армении, Физика, т.38, №1, с.12-17 (2003)

УДК 531.19

ФЕРРОМАГНИТНАЯ РЕДУЦИРОВАННАЯ *N*-ВЕКТОРНАЯ МОДЕЛЬ С КУБИЧЕСКОЙ СИММЕТРИЕЙ НА РЕШЕТКЕ БЕТЕ

Н.С. АНАНИКЯН[1], В.Р. ОГАНЯН[1,2]

[1]Ереванский физический институт

[2]Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 16 июля 2002 г.)

Рассмотрена дискретизированная версия *N*-векторной модели, обладающая кубической симметрией на решетке Бете. Получена система рекуррентных соотношений, посредством которой вычисляются термодинамические характеристики модели. Для ферромагнитного случая получена линия фазовых переходов ферро-пара.

1. Введение

Как известно, наиболее адекватное микроскопическое описание магнитных свойств вещества осуществляется посредством решеточных моделей, основанных на гамильтониане Гейзенберга [1]

$$H = J\sum_{\langle i,j\rangle}\hat{\mathbf{s}}_i\,\hat{\mathbf{s}}_j, \tag{1}$$

где $\hat{\mathbf{s}}_i$ обозначает оператор спина, находящегося в i-ом узле (для $s=1/2$ $\hat{\mathbf{s}}=(\sigma_x,\ \sigma_y,\sigma_z)$, где σ_α – матрицы Паули). Сумма в простейшем случае распространяется только на пары ближайших соседей. Несмотря на значительные достижения последних лет в области точно решаемых моделей в статмеханике (см., например, [2]), решение целого ряда реалистических задач теории магнетизма с использованием (1) натыкается на серьезные математические затруднения. В связи с этим возникает необходимость в том или ином приближении модельного гамильтониана Гейзенберга. Одним из таких приближений является так называемая $O(3)$-модель, или классическая модель Гейзенберга, сущность которой заключается в формальной замене операторов $\hat{\mathbf{s}}_i$ в (1) на классические трехмерные векторы единичной длины. Можно рассмотреть естественное обобщение данной системы, считая спиновую переменную не трехмерным, а N-мерным вектором с длиной равной 1 [3]. Такую модель называют N-векторной или $O(N)$-моделью, поскольку группой симметрии в этом случае является ортогональная группа в N-мерии.

Среди моделей с N компонентными спиновыми переменными немаловажную роль играют такие, в которых непрерывные переменные редуцируются к дискретным. Так, в начале 70-х годов было показано [4], что модели, обладающие кубической симметрией, могут быть успешно использованы для описания критического поведения некоторых соединений редкоземельных элементов, в частности, антимонида гольмия HoSb.

Рассмотрим решетку, в каждом узле которой находится N-мерный вектор **s**, число возможных ориентаций которого ограничено положениями, ортогональными граням N-мерного гиперкуба:

$$\mathbf{s} \in \{(\pm 1,0,\ldots 0),(0,\pm 1,\ldots 0),\ldots(0,\ldots 0,\pm 1)\}, \tag{2}$$

всего $2N$ ориентаций. Аналогом гамильтониана (1) для такой системы будет

$$\mathrm{H} = J\sum_{\langle i,j\rangle}\mathbf{s}_i\cdot\mathbf{s}_j = J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j\delta_{\alpha_i\alpha_j}, \tag{3}$$

где $\sigma_i = \pm 1, \alpha_i = 1,\ldots,N$, а $\delta_{\alpha_i\alpha_j}$ – символ Кронекера. Данную модель, обладающую кубической симметрией, принято называть FC_N-моделью (Face Cubic) [4,5].

В настоящей работе исследуется FC_N-модель с ферромагнитным взаимодействием (J<0) на решетке Бете [6]. Техника расчетов с использованием решеток типа Бете (рекуррентных решеток) является одним из приближенных методов в статмеханике, в основу которого положено не упрощение характера или интенсивности взаимодействия между элементами системы, а изменение топологии самой решетки. При надлежащем учете граничных условий расчеты, выполненные на подобных решетках, являются неплохим приближением для стандартных решеток. Эффективность данного подхода была продемонстрирована для целого ряда систем [7-21].

2. Решетка

Рассмотрим следующее построение: выберем некоторую центральную точку O, затем соединим ее ребрами с еще q точками. Данную совокупность q точек назовем первой оболочкой. Вторая оболочка строится повторением вышеописанной процедуры для каждой из точек первой оболочки: каждая из q точек последней соединяется ребрами с q–1 новыми точками.

Построенная таким образом вторая оболочка состоит из $q(q–1)$ точек. Таким образом, продолжая построение некоторое число шагов n, мы получим некий связный граф, который не содержит замкнутых петель, с координационным числом q и полным числом узлов

$$N_n = \sum_{k=1}^{n} q(q-1)^{k-1} + 1 = \frac{q(q-1)^n - 2}{q-2}. \qquad (4)$$

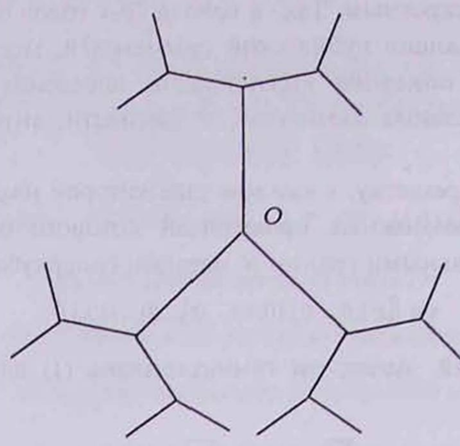

Рис.1 Дерево Кейли с координационным числом $q = 3$. Показаны первые три оболочки.

Граф, построенный подобным образом, принято называть деревом Кэйли. Отличительной особенностью моделей, рассматриваемых на дереве Кэйли, является невозможность пренебрежения граничными эффектами. Как легко видеть, все точки графа, которые принадлежат первым n–1 оболочкам, совершенно эквивалентны, поскольку имеют по q ближайших соседей каждая, точки же последней n-ой оболочки имеют лишь по одному соседу. Более того, отношение числа граничных точек к полному числу точек графа не стремится к нулю при $n \to \infty$:

$$\lim_{n\to\infty} \frac{N_{n-1}}{q(q-1)^{n-1}} = \lim_{n\to\infty} \frac{q(q-1)^{n-1} - 2}{(q-2)\,q\,(q-1)^{n-1}} = \frac{1}{q-2}. \qquad (5)$$

Решеткой Бете называется объект, тесно связанный с деревом Кэйли, но, в отличие от него, лишенный последнего недостатка. При вычислениях на решетке Бете за основу берется дерево Кэйли, но при написании статсуммы уклад граничных узлов просто не учитывается и, таким образом, все узлы рассматриваются как идентичные. Эта ситуация аналогична тому, как если бы мы находились глубоко внутри дерева Кэйли, вдали от граничных точек, так чтобы их влияние на термодинамические свойства было пренебрежительно малым. Таким образом, можно сказать, что решетка Бете представляет из себя "внутренность" дерева Кэйли.

3. Рекуррентные соотношения

Рассмотрим FC_N-модель, описываемую гамильтонианом (3) на решетке Бете во внешнем магнитном поле:

$$-\beta \mathrm{H} = J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j\delta_{\alpha_i\alpha_j} + h\sum_i \sigma_i\delta_{\alpha_i 1}. \qquad (6)$$

Здесь предполагается, что поле направлено параллельно одной из осей N-мерной декартовой системы координат.

Статсумма для модели, описываемой гамильтонианом (6) на графе, изображенном на рис.1, можно представить в виде

$$Z = \sum_{(\sigma,\alpha)}\exp\left\{J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j\delta_{\alpha_i\alpha_j} + h\sum_i \sigma_i\delta_{\alpha_i 1}\right\}. \qquad (7)$$

Первое суммирование в экспоненте выполняется по всем ребрам графа, а второе – по всем узлам. На рис.1 видно, что если разрезать граф в точке О, то он распадется на q совершенно идентичных ветвей (подграфов). Если в (7) сначала осуществить суммирование по всем спиновым конфигурациям на каждом из этих подграфов, а затем просуммировать по состояниям центрального спина, то выражение (7) примет вид

$$Z = \sum_{(\sigma_0\alpha_0)}\exp\left\{h\sigma_0\delta_{\alpha_0 1}\right\}g_n^q(\sigma_0,\alpha_0). \qquad (8)$$

Здесь $g_n(\sigma_0,\alpha_0)$ обозначает частичную статсумму, посчитанную для одной ветки; индекс n отражает тот факт, что исходный граф состоит из n оболочек, а q – координационное число.

Если мы повторим вышеописанную процедуру для одного из подграфов, то он в свою очередь распадется на q–1 подграфов, каждый из которых состоит из n–1 оболочек. Выписав соотношения, аналогичные (8), можно получить рекуррентные соотношения, связывающие g_n и g_{n-1}:

$$g_n(\sigma,\alpha) = \sum_{(\sigma',\alpha')}\exp\left\{J\sigma\sigma'\delta_{\alpha\alpha'} + h\sigma'\delta_{\alpha' 1}\right\}g_{n-1}^{q-1}(\sigma',\alpha'). \qquad (9)$$

Легко заметить, что для данного подграфа $g_n(\sigma,\alpha) = g_n(\sigma',\alpha')$, если $\alpha \neq 1$. Таким образом, (9) представляет из себя систему из 3-х рекуррентных соотношений

$$\begin{aligned}
g_n(+,1) &= e^{J+h}\, g_{n-1}^{q-1}(+,1) + e^{-J-h}\, g_{n-1}^{q-1}(-,1) + 2\,(N-1)\, g_{n-1}^{q-1}(\sigma,\alpha\neq 1),\\
g_n(-,1) &= e^{-J+h}\, g_{n-1}^{q-1}(+,1) + e^{J-h}\, g_{n-1}^{q-1}(-,1) + 2\,(N-1)\, g_{n-1}^{q-1}(\sigma,\alpha\neq 1), \qquad (10)\\
g_n(\sigma,\alpha\neq 1) &= e^{h}\, g_{n-1}^{q-1}(+,1) + e^{-h}\, g_{n-1}^{q-1}(-,1) + (e^{J} + e^{-J} + 2\,(N-2))\, g_{n-1}^{q-1}(\sigma,\alpha\neq 1).
\end{aligned}$$

Введя новые переменные

$$x_n = \frac{g_n(+,1)}{g_n(\sigma,\alpha\neq 1)} \quad \text{и} \quad y_n = \frac{g_n(-,1)}{g_n(\sigma,\alpha\neq 1)}, \qquad (11)$$

число рекуррентных соотношений можно сократить до двух:

$$\begin{cases} x_n = f_1(x_{n-1}, y_{n-1}), \\ y_n = f_2(x_{n-1}, y_{n-1}), \end{cases} \tag{12}$$

где

$$\begin{aligned} f_1 &= \frac{\mu z x^{q-1} + \mu^{-1} z^{-1} y^{q-1} + 2(N-1)}{\mu x^{q-1} + \mu^{-1} y^{q-1} + z + z^{-1} + 2(N-2)} = \frac{P_1(x,y)}{Q(x,y)}, \\ f_2 &= \frac{\mu z^{-1} x^{q-1} + \mu^{-1} z y^{q-1} + 2(N-1)}{\mu x^{q-1} + \mu^{-1} y^{q-1} + z + z^{-1} + 2(N-2)} = \frac{P_2(x,y)}{Q(x,y)}, \end{aligned} \tag{13}$$

и введены обозначения $\mu = e^{\frac{h}{T}}$, $z = e^{\frac{J}{T}}$.

Аналогичным способом можно получить выражение для намагниченности центрального узла, точнее, ее проекцию на направление внешнего поля

$$m = \langle S_{0_1} \rangle = \langle \sigma \delta_{\alpha 1} \rangle = \frac{\mu x^q - \mu^{-1} y^q}{\mu x^q + \mu^{-1} y^q + 2(N-1)}. \tag{14}$$

4. Линия фазовых переходов ферро–пара для $J > 0$

Рассмотрим случай ферромагнитной связи между спинами $J > 0$. Как известно [22], в этом случае линия фазовых переходов ферро–пара определяется из условия равенства единице максимального собственного значения матрицы якобиана двумерного отображения (13) в парамагнитной неподвижной точке, то есть при таких значениях x^* и y^*, $x^* = f_1(x^*, y^*)$, $y^* = f_2(x^*, y^*)$, что $m = 0$ при $h = 0\,(\mu = 1)$. В нашем случае эти условия имеют вид

$$\begin{cases} xQ = P_1, \\ yQ = P_2, \\ \operatorname{Det} A = \operatorname{Sp} A - 1, \end{cases} \tag{15}$$

где A есть матрица якобиана двумерного отображения (13), посчитанная в парамагнитной неподвижной точке:

$$A = \frac{(q-1)x^{q-2}}{Q} \begin{pmatrix} z - x, & z^{-1} - x \\ z^{-1} - x, & z - x \end{pmatrix}. \tag{16}$$

Условия (15) сводятся к следующей системе алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} 2x^q - (z + z^{-1})x^{q-1} + (z + z^{-1} + 2(N-2))x - 2(N-2) = 0, \\ (q-1)^2 (z - z^{-1})(z + z^{-1} - 2x) x^{2(q-2)} = 2Q(q-1)(z-x)x^{q-2} - Q^2. \end{cases} \tag{17}$$

Здесь x обозначает неподвижную точку отображенния (13), а переменная y пропала вследствие того, что, как легко видеть из (14), из условия $m=0$ при $h=0$ следует $x=y$. Из первого уравнения системы (17) следует, что $x=1$ является неподвижной точкой. Подставляя это решение во второе уравнение системы (17) и полагая для простоты $q=3$, получим следующее уравнение 4-ой степени относительно z:

$$z^4-4Nz^3+2(2N^2-3)z^2+4(N+2)z-3=0\,. \tag{18}$$

Решения этого уравнения и определяют искомые линии фазовых переходов. Однако, из 4-х решений

$$\begin{gathered} z_1=N+1-\sqrt{N(N+2)},\quad z_2=N+1+\sqrt{N(N+2)},\\ z_3=N-1-\sqrt{(N-2)^2+2N},\quad z_4=N-1+\sqrt{(N-2)^2+2N} \end{gathered} \tag{19}$$

линии фазовых переходов ферро–пара будет соответствовать то, которое при N=1 переходит в известный результат для модели Изинга на решетке Бете [2] $z=\sqrt{3}$. Этим свойством обладает толькко z_4. Таким образом, линия фазовых переходов ферро–пара для FC_N-модели на решетке Бете с координационным числом 3 в плоскости (J,T) задается соотношением

$$J=\log(N-1+\sqrt{(N-2)^2+2N})\,T=K(N)T\,. \tag{20}$$

ЛИТЕРАТУРА

1. **W.Heisenberg**. Z. Phys., **49**, 619 (1928).
2. **Р.Бэкстер**. Точнорешаемые модели в статистической механике, М., Мир (1985).
3. **G.Stanley**. Phys. Rev. Lett., **20**, 589 (1968); Phys. Rev., **176**, 718 (1968).
4. **D.Kim, P.M.Levy**, and **L.F.Uffer**. Phys. Rev. **B, 12**, 989 (1975).
5. **D.Kim, P.M.Levy**. Phys. Rev. **B, 12**, 5105 (1975); **D.Kim, P.M. Levy**, and **J.J.Sudano**, Phys. Rev. **B, 13**, 2054 (1976); **A.Aharony**. J. Phys. **A, 10**, 389 (1977).
6. **H.A.Bethe**. Proc. Roy. Soc. (London) **A, 150**, 552 (1935).
7. **L.K.Runnels**, J. Math. Phys., **8**, 2081 (1967).
8. **E.Muller-Hartmann**. Z. Phys. **B, 27**, 161 (1977).
9. **C.J.Thompson**. J. Stat. Phys., **27**, 441 (1982).
10. **C.S.O. Yokoi, M.J.de Oliveira, S.R.Salinas**. Phys. Rev. Lett., **54**, 163 (1985).
11. **A.Z.Akheyan, N.S.Ananikian**. J. Phys. **A, 25**, 3111 (1992).
12. **A.T.Bernardes, M.J.de Oliveira**. J.Phys. **A, 25**, 1405 (1992).
13. **Н.С.Ананикян, А.З.Ахеян**. ЖЭТФ, **107**, 196 (1995).
14. **M.H.R. Tragtenberg, C.S.O. Yokoi**. Phys. Rev. **E, 52**, 2187 (1995).
15. **N.S.Ananikian, R.R.Shcherbakov**. Phys. Lett. **A, 200**, 27 (1995).
16. **N.S.Ananikian, S.K.Dallakian**. Physica **D, 107**, 75 (1997).
17. **N.S.Ananikian, S.K.Dallakian, N.Sh.Izmailian, K.A.Oganessyan**. Fractals, **5**, 175 (1997).
18. **N.S.Ananikian, S.K.Dallakian, B.Hu, N.Sh.Izmailian, K.A.Oganessyan**. Phys. Lett. **A, 248**, 381 (1998).
19. **A.E.Alahverdian, N.S.Ananikian, S.K.Dallakian**. Phys. Rev. **E, 57**, 2425 (1998).
20. **N.S.Ananikian, R.G.Ghulghazaryan**. Phys. Lett. **A, 277**, 249 (2000).
21. **T.A.Arakelyan, V.R.Ohanyan, L.N.Ananikyan, N.S.Ananikyan, M.Roger**. Phys. Rev. B (в печати).
22. **J.Vannimenus**. Z. Phys. **B, 43**, 141 (1981).