Математические структуры и моделирование
2008, вып. 18, с. 58–62

УДК 536.763/764

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЗНАЧЕНИЯ ПАРАМЕТРА ДАЛЬНОДЕЙСТВИЯ НА ОСНОВЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ЗНАЧЕНИЙ КРИТИЧЕСКИХ ИНДЕКСОВ

С.В. Белим

В работе проведен анализ критического поведения систем, для которых экспериментальные значения критических индексов не совпадают с критическими индексами модели Гейзенберга. Осуществлена попытка обоснования значений критических индексов таких систем исходя из модели Гейзенберга с эффектами дальнодействия. На основе критического индекса γ вычислены значения параметра дальнодействия для различных экспериментально изученных систем, проведено сравнение теоретически вычисленного индекса β с опытными данными.

В ряде экспериментальных работ [1–5] обнаружено отличие критических индексов, измеряемых вблизи линии фазового перехода второго рода от предсказываемых теорией критических явлений как для трехмерной модели Гейзенберга ($\gamma = 1.386$, $\beta = 0.364$), так и для трехмерной XY-модели ($\gamma = 1.316$, $\beta = 0.345$) и модели Изинга ($\gamma = 1.241$, $\beta = 0.325$) [6]. Авторы этих работ объясняют расхождения с предсказаниями теории для модели Гейзенберга необходимостью учета взаимодействия не только ближайших соседей, но и следующих за ближайшими узлов. Влияние соседей, следующих за ближайшими, может быть учтено с помощью введения взаимодействия, убывающего с расстоянием по степенному закону $J(r) \sim r^{-D-\sigma}$, где D – размерность системы, σ – параметр дальнодействия [7].

В работе [1] исследуется магнитное критическое поведение EuO, найдены критические индексы $\gamma = 1.29 \pm 0.01$, $\beta = 0.368 \pm 0.005$, а также показано, что необходим учет соседей, следующих за ближайшими, для которых обменный интеграл $J_2 = (0.5 \pm 0.2)J_1$ (J_1 – обменный интеграл для ближайших соседей).

В работе [2] проведены измерения критических индексов для $La_{0.5}Sr_{0.5}CoO_3$ для фазового перехода парамагнетик - ферромагнетик. В данной работе получены значения критических индексов $\gamma = 1.351 \pm 0.009$, $\beta = 0.321 \pm 0.002$. Ранее [3] критические явления исследовались в сплавах $La_{1-x}Sr_xCoO_3$ ($0.2 \leq x \leq 0.3$) и дали значения критических индексов $0.43 \leq \beta \leq 0.46$, $1.39 \leq \gamma \leq 1.43$.

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского.
E-mail: belim@univer.omsk.su
Работа поддержана грантом РФФИ N 06-02-16018.

Отличие критических индексов от предсказаний теории короткодействующих систем также было обнаружено для ферромагнитного фазового перехода в $La_{0.1}Ba_{0.9}VS_3$ [4]. При этом критические индексы имеют значения $\gamma = 1.366$, $\beta = 0.501$. Аналогичные результаты были получены в работе [5] для сплавов $Fe_{90-x}Mn_xZr_{10}$ $(0 \leq x \leq 16)$.

Критические индексы трехмерных изингоподобных систем для различных значений параметра дальнодействия были получены в работе [8]. В данной работе показано, что значение индекса γ растет, а индекса β убывает с увеличением параметра дальнодействия σ. При этом влияние эффектов дальнодействия существенно лишь при $\sigma < 2$, при $\sigma \geq 2$ система демонстрирует короткодействующее критическое поведение. Новые классы универсальности возникают в интервале $1.5 < \sigma < 2$, при $\sigma \leq 1.5$ в системе наблюдается среднеполевое критическое поведение.

Таким образом, целью данной работы является расчет параметра дальнодействия для систем, требующих учета взаимодействия не только ближайших соседей, исходя из экспериментальных данных.

1. Теоретико-полевое описание

Гамильтониан системы с учетом эффектов дальнодействия может быть записан в виде:

$$H = \int d^D q \Big\{ \frac{1}{2}(\tau_0 + q^\sigma)\varphi^2 + u_0\varphi^4 \Big\}, \tag{1}$$

где φ – флуктуации n-мерного параметра порядка, D – размерность пространства, $\tau_0 \sim |T - T_c|$, T_c – критическая температура, u_0 - положительная константа. Критическое поведение существенно зависит от параметра σ, задающего скорость убывания взаимодействия с расстоянием. Как показано в работе [7], влияние эффектов дальнодействия существенно при $0 < \sigma < 2$, а при $\sigma \geq 2$ критическое поведение эквивалентно короткодействующим системам. Поэтому в дальнейшем мы ограничимся случаем $0 < \sigma < 2$.

Проводя стандартную ренормгрупповую процедуру на основе техники фейнмановских диаграмм [6] с пропогатором $G(\vec{k}) = 1/(\tau + |\vec{k}|^\sigma)$, получаем выражения для функций β,γ_φ и γ_t, задающих дифференциальное уравнение ренормгруппы.

$$\begin{aligned}
&\beta = -(2\sigma - D)\Big[1 - 4(n+8)v + \Big(64(5n+22)(2\widetilde{J}_1 - 1) - 128(n+2)\widetilde{G}\Big)v^2)\Big],\\
&\gamma_t = (2\sigma - D)\Big(-2(n+2)v + 48(n+2)\Big(2\widetilde{J}_1 - 1 - \frac{1}{3}\widetilde{G}\Big)v^2\Big),\\
&\gamma_\varphi = 64(n+2)\widetilde{G}v^2,\\
&v = u \cdot J_0, \quad \widetilde{J}_1 = \frac{J_1}{J_0^2} \quad \widetilde{G} = \frac{G}{J_0^2}.
\end{aligned} \tag{2}$$

$$J_1 = \int \frac{d^D q d^D p}{(1+|\vec{q}|^\sigma)^2 (1+|\vec{p}|^\sigma)(1+|q^2+p^2+2\vec{p}\vec{q}|^{\sigma/2})},$$
$$J_0 = \int \frac{d^D q}{(1+|\vec{q}|^\sigma)^2},$$
$$G = -\frac{\partial}{\partial |\vec{k}|^\sigma} \int \frac{d^D q d^D p}{(1+|q^2+k^2+2\vec{k}\vec{q}|^\sigma)(1+|\vec{p}|^\sigma)(1+|q^2+p^2+2\vec{p}\vec{q}|^{\sigma/2})}.$$

Полученное выражение для β-функции представляет собой асимптотический ряд, и для извлечения из него нужной физической информации необходимо применить метод суммирования. В данной работе было использовано преобразование Бореля-Леруа, дающее адекватные результаты в применении к рядам, возникающим в теории критических явлений:

$$\begin{aligned} f(v) &= \sum_i c_i v^i = \int_0^\infty e^{-t} t^b F(vt) dt, \\ F(v) &= \sum_i \frac{c_i}{(i+b)!} v^i. \end{aligned} \tag{3}$$

В двухпетлевом приближении для вычисления β-функции был использован аппроксимант [2/1] с варьированием параметра b. Такое варьирование b позволяет выяснить, в каких пределах изменяется значение эффективного заряда, и оценить погрешность полученных критических индексов.

Режим критического поведения полностью определяется устойчивыми неподвижными точками ренормгруппового преобразования, которые могут быть найдены из условия равенства нулю β-функции:

$$\beta(v^*) = 0. \tag{4}$$

Условием устойчивости является положительность производной β-функции в неподвижной точке:

$$\lambda = \frac{\partial \beta(v^*)}{\partial v} > 0. \tag{5}$$

Индекс ν, характеризующий рост радиуса корелляции в окрестности критической точки ($R_c \sim |T - T_c|^{-\nu}$), находится на основе соотношения:

$$\nu = v(\sigma + \gamma_t)^{-1}.$$

Индекс Фишера η, описывающий поведение корелляционной функции в окрестности критической точки в пространстве волновых векторов ($G \sim k^{\sigma+\eta}$), определяется на основе скейлинговой функции γ_φ: $\eta = 2 - \sigma + \gamma_\varphi$. Значение критических индексов γ и β может быть определено исходя из скейлинговых соотношений:

$$\gamma = \nu(\sigma - \eta), \qquad \beta = \frac{\nu}{2}(D - \sigma + \eta). \tag{6}$$

Следут отметить, что процедура суммирования Паде-Леруа возможна не при любых значениях параметра b, что существенно снижает возможности использования метода. Это ограничение связано с появлением у аппроксимант полюсов вблизи решений уравнения (4), что приводит к невозможности определения положения фиксированных точек. В данной работе проводилось варьирование параметра b в интервале от 0 до значения, начиная с которого определение устойчивой фиксированной точки невозможно. На данном интервале выбиралось 10 значений параметра b, для которых производился поиск фиксированных точек. В качестве значения эффективных зарядов в фиксированной точке выбирались средние значения с некоторой погрешностью, определяемой разбросом значений при различных b.

2. Значения параметра дальнодействия

Рассмотрим применимость модели дальнодействующих систем к экспериментальным данным, приведенным во введении. Будем вычислять значение параметра дальнодействия σ по критическому индексу γ и проводить сравнение вычисленного теоретически индекса β с соответствующим значением, полученным опытным путем.

Для EuO [1] экспериментальные критические индексы $\gamma = 1.29 \pm 0.01$, $\beta = 0.368 \pm 0.005$. В рамках модели Гейзенберга ($n = 3$) соответствующее значение индекса $\gamma = 1.290 \pm 0.002$ может быть получено при $\sigma = 1.941$, при этом для индекса $\beta = 0.376 \pm 0.008$. В рамках XY-модели ($n = 2$) значение индекса $\gamma = 1.29 \pm 0.03$ может быть получено при $\sigma = 1.991$, при этом для индекса $\beta = 0.354 \pm 0.007$. Как видно из сравнения теоретических расчетов с экспериментальными значениями, модель Гейзенберга с эффектами дальнодействия демонстриует хорошее согласие с опытными данными.

Для $La_{0.5}Sr_{0.5}CoO_3$ [2] экспериментальные критические индексы $\gamma = 1.351 \pm 0.009$, $\beta = 0.321 \pm 0.002$. В рамках модели Гейзенберга ($n = 3$) значение индекса $\gamma = 1.351 \pm 0.002$ может быть получено при $\sigma = 1.980$, при этом индекс $\beta = 0.368 \pm 0.004$. В рамках XY-модели ($n = 2$) значение индекса $\gamma = 1.351$ получить невозможно, так как максимальное значение индекса достигается при $\sigma = 2$ и равно $\gamma = 1.316$. Как видим, расхождение значений, предсказываемых теорией и наблюдаемых в эксперименте, значительно. Однако, как указано в работе [2], индекс γ, по которому определялся параметр дальнодействия, вычислялся исходя из значения критической температуры $T_c = 223.18\ K$, а индекс β исходя из значения $T_c = 222.82\ K$. Тогда как хорошо известно, что значения критических индексов весьма чувствительны к выбору критической температуры.

Для $La_{0.1}Ba_{0.9}VS_3$ [4] экспериментальные критические индексы $\gamma = 1.366$, $\beta = 0.501$. В рамках модели Гейзенберга ($n = 3$) значение индекса $\gamma = 1.366 \pm 0.002$ может быть получено при $\sigma = 1.990$, при этом для индекса $\beta = 0.369 \pm 0.009$. Как и в предыдущем случае, применение XY-модели невозможно. Как видим, совпадения теоретического значения индекса β с экспериментальным не наблюдается. Однако следует отметить, что экспериментальное значение индекса $\beta = 0.501$ выглядит достаточно странно, так как всегда выполняется ограничение $\beta \leq 0.5$, причем максимальное значение $\beta = 0.5$ достигается только в рамках теории среднего поля, для которого $\gamma = 1$.

Рассмотрим критические индексы, характерные для сплавов $Fe_{90-x}Mn_xZr_{10}$ $(0 \leq x \leq 16)$, как показано в работе [5], они существенно зависят от параметра x. Значения критических индексов, полученных экспериментально в [5], приведено в таблице. В этой же таблице приведены значения параметра дальнодействия σ и индекса β_H, полученные на основе модели Гейзенберга с эффектами дальнодействия, опираясь на экспериментальное значение индекса γ.

x	γ	β	σ	β_H
0	1.376	0.369	1.995	0.36 ± 0.01
4	1.383	0.373	1.998	0.37 ± 0.01
6	1.359	0.358	1.984	0.37 ± 0.02
8	1.364	0.355	1.987	0.36 ± 0.02
10	1.406	0.356	-	-
12	1.395	0.376	-	-
16	1.412	0.362	-	-

При значениях $x > 8$ определить параметр дальнодействия σ невозможно в силу того, что максимально возможное значение индекса $\gamma = 1.386$ для модели Гейзенберга с дальнодействием достигается при $\sigma = 2$. Как видим, в интервале $0 \leq x \leq 8$ наблюдается достаточно хорошее совпадение теоретических предсказаний с опытными данными. Для $x > 8$ модель Гейзенберга с эффектами дальнодействия, по-видимому, неприменима.

Как видно из расчетов, использование модели Гейзенберга с эффектами дальнодействия позволяет в ряде случаев объяснить отклонение значений критических индексов от предсказаний обычной модели Гейзенберга. Однако параметр дальнодействия, вычисленный на основе индекса γ, не всегда приводит к совпадению предсказываемого индекса β с наблюдаемым на опыте.

Литература

1. Menyuk N., Dwight K., Reed T. B. Critical Magnetic Properties and Exchange Interactions in EuO // Phys. Rev. B. 1971. V. 3. P. 1689–1698.
2. Mukherjee S., Raychaudhuri P., Nigman A. K. Critical behavior in $La_{0.5}Sr_{0.5}CoO_3$ // Phys. Rev. B. 2000. V. 61. P. 8651–8653.
3. Mira J., Rivas J., Vazquez M., Garcia-Beneytes J.M., Arcas J., Sanchez R.D., Senaris-Rodriguez M.A. Critical exponents of the ferromagnetic-paramagnetic phase transition of $La_{1-x}Sr_xCoO_3$ (0.20< x< 0.30) // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 59. P. 123–126.
4. Cabassi R., Bolzoni F., Gauzzi A., Licci F. Critical exponents and amplitudes of the ferromagnetic transition in $La_{0.1}Ba_{0.9}VS_3$ // Phys. Rev. B. 2006. V. 74, P. 184425–184430.
5. Perumal A., Srinivas V. Critical behavior of weak itinerant ferromagnet $Fe_{90-x}Mn_xZr_{10}$ (0< x< 16) alloys // Phys. Rev. B. 2003. V. 67. P. 094418–094423.
6. Le Guillou J. C., Zinn-Justin J. Critical exponents from field theory // Phys.Rev. B. 1980. V. 21. P. 3976–3998.
7. Fisher M. E., Ma S.-K., Nickel B.G. Critical Exponents for Long-Range Interactions // Phys. Rev. Lett. 1972. V. 29. P. 917–920.
8. Белим С.В. Влияние эффектов дальнодействия на критическое поведение трехмерных систем // Письма в ЖЭТФ. 2003. Т. 77. В. 2. С. 118–120.