Математические структуры и моделирование
2008, вып. 18, с. 63–70

УДК 536.763/764

КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ИЗОТРОПНЫХ ТРЕХМЕРНЫХ СИСТЕМ С ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ В ОДНОПЕТЛЕВОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

С.В. Белим

В работе проведен анализ критического поведения изотропных трехмерных систем с диполь-дипольным взаимодействием в однопетлевом приближении. Получены выражения для неподвижной фиксированной точки ренормгруппового преобразования и критических индексов в зависимости от относительной интенсивности диполь-дипольного взаимодействия.

Введение

Магнитное диполь-дипольное взаимодействие существует во всех магнитных материалах, но в большинстве ферромагнетиков упорядочивание обусловлено обменным взаимодействием, лишь в материалах с температурой перехода $T_c > 300K$ значительное влияние оказывают диполь-дипольные силы. Экспериментально существенное влияние диполь-дипольного взаимодействия на критические явления было обнаружено в ферромагнетике EuO [1] по отличию критических индексов от предсказываемых теорией с близкодействием. Так, согласно модели Гейзенберга критический индекс теплоемкости должен принимать значение $\alpha = -0.13$, тогда как экспериментальное значение для EuO $\alpha = -0.04 \pm 0.02$.

Впервые проблема описания критического поведения систем с диполь-дипольным взаимодействием была рассмотрена в работе [2] в рамках ε-разложения ($\varepsilon = 4 - D$, D – размерность пространства) в однопетлевом приближении для систем, размерность параметра порядка которых совпадает с размерностью пространства ($n = D$). Были получены приблизительные значения критических индексов, отличные от индексов систем с близкодействием. Авторы данной работы исследуют поведение системы вблизи не реальной критической точки, а некоторой смещенной точки, причем смещение находится в процессе расчетов и так же, как критические индексы, записывается в виде асимптотического ряда по параметру ε. Данный подход был развит в серии

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

статей [3–7], причем не только для изотропных, но и для анизотропных систем. В статье [4], посвященной изотропным системам, были вычислены значения критических индексов в рамках ε-разложения: $1/\gamma = 1 - 9/34\varepsilon + O(\varepsilon^2)$, $\eta = 0.023\varepsilon^2 + O(\varepsilon^3)$. В двухпетлевом приближении в рамках ε-разложения критические индексы систем с диполь-дипольным взаимодействием были получены в работе [8] ($\nu = 0.5(1 + (9/34)\varepsilon + (7013/58956)\varepsilon^2 + O(\varepsilon^3))$).

Теоретико-полевой подход в описании систем с диполь-дипольным взаимодействием был развит в работе [9]. Авторы этой статьи исследуют поведение системы вблизи реальной критической температуры в рамках ε-разложения в двухпетлевом приближении. В результате такого уточнения были найдены значения критических индексов, отличающиеся от полученных в предыдущих работах лишь в слагаемых второго порядка по ε ($\nu = 0.5(1 + (9/34)\varepsilon + (7013/58956)\varepsilon^2)$, $\gamma = 1 + (9/34)\varepsilon + (5687/58956)\varepsilon^2$, $\eta = (13/289)\varepsilon^2$).

Компьютерное моделирование методом Монте-Карло [10] продемонстрировало критическое поведение системы, описываемое критическим индексом $\alpha = -0.02$, что находится в не очень хорошем согласии с предсказаниями теории, построенной в рамках ε-разложения.

Таким образом, целью данной статьи ставится развитие теоретико-полевого подхода к описанию изотропных систем с диполь-дипольным взаимодействием непосредственно в трехмерном пространстве.

1. Гамильтониан системы

Как показано в [3], гамильтониан трехмерной системы с диполь-дипольным взаимодействием может быть записан в виде:

$$H = \frac{1}{2}\int d^3r\Big[(\tau_0+\nabla^2)\delta^{\alpha\beta}+v_0\frac{r^2\delta^{\alpha\beta}+x^\alpha x^\beta}{r^5}\Big]S_0^\alpha S_0^\beta+\frac{u_0}{4!}\int d^3r F^{\alpha\beta\gamma\delta}S_0^\alpha S_0^\beta S_0^\gamma S_0^\delta. \quad (1)$$

Здесь S_0^α – компонента α флуктуаций параметра порядка ($1 \le \alpha \le n$), роль которого для ферромагнитных систем играет намагниченность, $r_0 \sim |T - T_c|$, T_c – критическая температура, u_0 – положительная константа, g_0 – относительная интенсивность диполь-дипольного взаимодействия по сравнению с обменным взаимодействием, $F = 1/3(\delta^{\alpha\beta}\delta^{\gamma\delta} + \delta^{\alpha\beta}\delta^{\gamma\delta} + \delta^{\alpha\beta}\delta^{\gamma\delta})$. Из анализа первого слагаемого гамильтониана можно сделать вывод, что количество компонентов спина n должно совпадать с размерностью пространства D ($n = d$). Это требование вытекает из того, что необходимо производить свертку в слагаемом $x^\alpha x^\beta S_0^\alpha S_0^\beta$, описывающем диполь-дипольное взаимодействие, то есть мы имеем дело с моделью Гейзенберга.

Преобразование Фурье данного гамильтониана сталкивается с трудностью, вытекающей из расходимости интеграла

$$K = \int_0^\infty \frac{1}{r}\exp{(-iqr)}dr, \quad (2)$$

возникающего при вычислении Фурье-образа слагаемого, описывающего диполь - дипольное взаимодействие. Однако эта трудность, как будет показано далее, легко устраняется при вычислении критических индексов, которые, собственно, являются величинами, измеряемыми в эксперименте. Запишем формально гамильтониан системы после преобразования Фурье:

$$H = \frac{1}{2}\int d^D q\Big[(r_0+q^2)\delta^{\alpha\beta} + g_0\frac{q^\alpha q^\beta}{q^2}\Big] S_0^\alpha(\vec{q}) S_0^\beta(-\vec{q}) \tag{3}$$
$$+\frac{u_0}{4!}\int\int\int\int d^D q_1 d^D q_2 d^D q_3 F^{\alpha\beta\gamma\delta} S_0^\alpha(\vec{q_1}) S_0^\beta(\vec{q_2}) S_0^\gamma(\vec{q_3}) S_0^\delta(-\vec{q_1}-\vec{q_2}-\vec{q_3}).$$

Здесь введены обозначения

$$g_0 = K\cdot v_0, \quad r_0 = \tau_0 + K\cdot v_0. \tag{4}$$

В дальнейшем в рамках теоретико-полевого подхода производится ренормгрупповое преобразование затравочной величины r_0, которое позволяет устранять из нее расходимости. Константа же диполь-дипольного взаимодействия, как будет показано ниже, встречается лишь в выражениях вида $g = g_0/r_0$, что также приводит к конечным выражениям.

Дипольные силы вносят анизотропию в спиновые флуктуации, выделяя направления параллельно волнового вектора $\vec{q}$ и перпендикулярно ему. В связи с чем введем проективные операторы продольной $P_L^{\alpha\beta}$ и поперечной состовляющих $P_T^{\alpha\beta}$:

$$P_L^{\alpha\beta} = \frac{q^\alpha q^\beta}{q^2}, \qquad P_T^{\alpha\beta} = \delta^{\alpha\beta} - \frac{q^\alpha q^\beta}{q^2}. \tag{5}$$

После введения проективных операторов гамильтониан системы примет вид:

$$H = \frac{1}{2}\int d^D q\Big[(r_0+q^2)P_T^{\alpha\beta} + (r_0+g_0+q^2)P_L^{\alpha\beta}\Big] S_0^\alpha(\vec{q}) S_0^\beta(-\vec{q}) \tag{6}$$
$$+\frac{u_0}{4!}\int\int\int d^D q_1 d^D q_2 d^D q_3 F^{\alpha\beta\gamma\delta} S_0^\alpha(\vec{q_1}) S_0^\beta(\vec{q_2}) S_0^\gamma(\vec{q_3}) S_0^\delta(-\vec{q_1}-\vec{q_2}-\vec{q_3}).$$

Продольные и поперечные составляющие критических флуктуаций демонстрируют различные режимы критического поведения, обусловленного сдвигом критической температуры для продольной составляющей вследствие диполь-дипольного взаимодействия.

Свободный пропогатор системы может быть записан в следующем виде:

$$G_0^{\alpha\beta}(r_0, g_0, \vec{q}) = G_0^L(r_0, g_0, \vec{q}) P_L^{\alpha\beta} + G_0^T(r_0, \vec{q}) P_T^{\alpha\beta}, \tag{7}$$

где

$$G_0^L(r_0, g_0, \vec{q}) = \frac{1}{r_0+g_0+q^2}, \qquad G_0^T(r_0, \vec{q}) = \frac{1}{r_0+q^2}. \tag{8}$$

2. Теоретико-полевое описание

Поведение системы в критической области определяется значениями эффективных зарядов в неподвижной точке ренормгруппового проеобразования, которое в рассматриваемом случае будет иметь вид:

$$
\begin{aligned}
&u_0 = b^{4-D} u Z_u, \quad r_0 = b^2 r Z_r, \quad g_0 = b^2 g Z_g, \\
&S_0^\alpha(\vec{q}) = Z_L^{1/2} P_L^{\alpha\beta} S^\beta(\vec{q}) + Z_T^{1/2} P_T^{\alpha\beta} S^\beta(\vec{q}).
\end{aligned} \tag{9}
$$

Масштабный параметр b вводится для обезразмеривания величин. Введение отдельных нормировочных факторов для продольной и поперечной составляющих флуктуаций намагниченности связано с анизотропией, описанной выше.

В силу наличия анизотропии вершинные функции так же, как и свободный пропогатор, будут зависеть от координат. Фейнмановские диаграммы для двухточечной вершинной функции со вставкой $\Gamma^{(2,1)\alpha\beta}$ и четырехточечной вершинной функции $\Gamma^{(4)\alpha\beta\gamma\delta}$ имеют такой же внешний вид, как и для обычных систем с близкодействием.

Аналитическое выражение для вершинной функции $\Gamma^{(4)\alpha\beta\gamma\delta}$ имеет вид

$$
\begin{aligned}
\Gamma^{(4)\alpha\beta\gamma\delta} \quad &= u_0 F^{\alpha\beta\gamma\delta} - \frac{22}{3} u_0^2 \sum_{i,j,l,m=1}^{3} (F^{\alpha\beta il} F^{jm\gamma\delta} + F^{\alpha\gamma il} F^{jm\beta\delta} + F^{\alpha\delta il} F^{jm\beta\gamma}) \cdot \\
&\cdot \int d^D q G_0^{ij}(\vec{q}) G_0^{lm}(-\vec{q}).
\end{aligned} \tag{10}
$$

После вычисления интеграла и выполнения суммирования по «немым» индексам (i, j, l, m) (подробности приведены в Приложении А) получаем выражение

$$
\begin{aligned}
&\Gamma^{(4)\alpha\beta\gamma\delta} = u_0 F^{\alpha\beta\gamma\delta} \Big(1 - 22 u_0 (I_1 - 2I_2 + \frac{47}{81} I_3)\Big), \\
&I_1 = \int \frac{q^2 dq}{(1+q^2)^2} = \pi^2, \\
&I_2 = \frac{4\pi g}{3} \int \frac{q^2 dq}{(1+q^2)^2 (1+g+q^2)} = \frac{\pi^2}{3} \Big(\frac{1}{\sqrt{1+g}} - \frac{1}{\sqrt{2+g+2\sqrt{1+g}}} \Big), \\
&I_3 = \frac{4\pi g^2}{5} \int \frac{q^2 dq}{(1+q^2)^2 (1+g+q^2)^2} = \frac{\pi^2}{5} \Big(1 + \frac{1}{\sqrt{1+g}} - \frac{4}{\sqrt{2+g+2\sqrt{1+g}}} \Big), \\
&g = g_0 / r_0.
\end{aligned} \tag{11}
$$

Аналитическое выражение для вершинной функции со вставкой $\Gamma^{(2,1)\alpha\beta}$ может быть записано в следующем виде:

$$
\begin{aligned}
\Gamma^{(2,1)\alpha\beta} &= r_0 \delta^{\alpha\beta} - \frac{20}{3} r_0 u_0 \sum_{i,j,l,m=1}^{3} F^{\alpha\beta ij} \delta^{lm} \int d^D q G_0^{ij}(\vec{q}) G_0^{lm}(-\vec{q}) \\
&= r_0 \delta^{\alpha\beta} \Big(1 - 20 u_0 (I_1 - 2I_2 + \frac{5}{3} I_3) \Big).
\end{aligned} \tag{12}
$$

Подробности вычисления аналитического выражения для $\Gamma^{(2,1)\alpha\beta}$ приведены в Приложении.

Запишем уравнение Каллана-Симанзика для объемных вершинных функций:

$$\left[b\frac{\partial}{\partial b} + \beta\frac{\partial}{\partial u} - \gamma_\varphi\frac{m}{2}b\frac{\partial \ln Z_\varphi}{\partial b} - \gamma_r r\frac{\partial}{\partial r}\right] \cdot \Gamma^{(m)\alpha\beta}(q; r, u, b) = 0. \qquad (13)$$

В этом уравнении введены функции

$$\beta = b\frac{\partial u}{\partial b}, \quad \gamma_r = b\frac{\partial r}{\partial b}, \quad \gamma_\varphi = b\frac{\partial S_q}{\partial b}, \qquad (14)$$

определяющие поведение системы в критической области.

Выражения для $\beta-$ и γ-функций в однопетлевом приближении:

$$\begin{aligned} \beta &= -u\Big[1 - 44u(I_1 - 2I_2 + \frac{47}{81}I_3)\Big], \\ \gamma_t &= -20u\Big(I_1 - 2I_2 + \frac{5}{3}I_3\Big). \end{aligned}$$

Режим критического поведения полностью определяется устойчивой неподвижной точкой ренормгруппового преобразования u^*, которая может быть найдена из условия равенства нулю β-функции:

$$\beta_i(u^*) = 0. \qquad (15)$$

Требование устойчивости фиксированной точки сводится к условию

$$\frac{\partial \beta(u^*)}{\partial u} > 0. \qquad (16)$$

Аналитическое выражение для устойчивой фиксированной точки имеет вид:

$$u^* = \frac{405\sqrt{1+g}(1+\sqrt{1+g})}{44\pi^2(452g + 311\sqrt{1+g} + 229)}. \qquad (17)$$

Из выражения для u^* видно, что при $g = 0$ фиксированная точка совпадает со значением, получаемым для систем без диполь-дипольного взаимодействия $u^* = 0.00422$, а далее значение эффективного заряда очень быстро переходит к своему предельному значению $u^* = 0.00252$, в котором диполь-дипольное взаимодействие играет доминирующую роль ($g \to \infty$).

3. Критические индексы

Как хорошо известно, в однопетлевом приближении индекс Фишера η, определяющий поведение корелляционной функции в пространстве волновых векторов (($G \sim k^{2+\eta}$)), равен нулю. Остановимся на индексе ν, характеризующем рост радиуса корелляции в окрестности критической точки ($R_c \sim |T - T_c|^{-\nu}$), который может быть найден на основе соотношения:

$$\nu = \frac{1}{2}(1+\gamma_t)^{-1} = \frac{1}{2}\Big[1 + 10u\Big(I_1 - 2I_2 + \frac{5}{3}I_3\Big)\Big]. \qquad (18)$$

Подстановка значения эффективного заряда для устойчивой фиксированной точки приводит к выражению

$$\nu = \frac{27}{44} + \frac{I_3}{81(I_1 - 2I_2 + 47/81 I_3)} = \frac{27}{44} + \frac{(1-\sqrt{1+g})^2}{452g + 311\sqrt{1+g} + 229}.$$

В предельном случае отсутствия диполь-дипольного взаимодействия $g = 0$ получаем результат для обычных короткодействующих систем $\nu = 7/12 \approx 0.58333$, в предельном случае полного доминирования диполь-дипольного взаимодействия $g \to \infty$ имеем $\nu = 271/452 \approx 0.59956$.

Индекс теплоемкости α вычисляется из скейлингового соотношения $\alpha = 2 - \nu D$ ($D = 3$ – размерность пространства). Подстановка выражения для ν приводит к результату:

$$\alpha = \frac{1}{4} - \frac{3(1-\sqrt{1+g})^2}{452g + 311\sqrt{1+g} + 229}. \tag{19}$$

Для двух предельных случаев получаем: при $g = 0$ индекс $\alpha = 0.25$, при $g \to \infty$ индекс $\alpha = 91/452 \approx 0.20133$.

Приложение. Вычисление аналитических выражений для вершинных функций $\Gamma^{(4)\alpha\beta\gamma\delta}$ и $\Gamma^{(2,1)\alpha\beta}$

Для нахождения вершинных функций в однопетлевом приближении введем обозначение для интеграла

$$J^{ijlm} = \int d^D q G_0^{ij}(\vec{q}) G_0^{lm}(-\vec{q}). \tag{20}$$

Как было показано выше,

$$G_0^{\alpha\beta}(r_0, g_0, \vec{q}) = G_0^L(r_0, g_0, \vec{q}) P_L^{\alpha\beta} + G_0^T(r_0, \vec{q}) P_T^{\alpha\beta}, \tag{21}$$

где

$$G_0^L(r_0, g_0, \vec{q}) = \frac{1}{r_0 + g_0 + q^2}, \quad G_0^T(r_0, \vec{q}) = \frac{1}{r_0 + q^2}, \tag{22}$$
$$P_L^{\alpha\beta} = \frac{q^\alpha q^\beta}{q^2}, \quad P_T^{\alpha\beta} = \delta^{\alpha\beta} - \frac{q^\alpha q^\beta}{q^2}.$$

После подстановки свободного пропогатора в выражение для интеграла J^{ijlm} и замены $g = g_0/r_0$ получим

$$J^{ijlm} = J_1^{ijlm} - 2J_2^{ijlm} + J_3^{ijlm}. \tag{23}$$
$$J_1^{ijlm} = \delta^{ij}\delta^{lm} I_1, \quad I_1 = \int \frac{d^D q}{(1+q^2)^2} = \pi^2,$$
$$J_2^{ijlm} = \delta^{ij} g \int \frac{q^l q^m d^D q}{q^2(1+q^2)^2(1+g+q^2)},$$
$$J_3^{ijlm} = g^2 \int \frac{q^i q^j q^l q^m d^D q}{q^4(1+q^2)^2(1+g+q^2)^2}.$$

Для интеграла J_2^{ijlm} прямая подстановка различных значений пары индексов $l, m = 1, 2, 3$ и интегрирование по угловым переменным в сферических координатах показала, что ненулевыми являются только интергалы, в которых $l = m$. Таким образом, можно записать, что

$$J_2^{ijlm} = \delta^{ij}\delta^{lm} I_2, \tag{24}$$
$$I_2 = \frac{4\pi g}{3}\int_0^\infty \frac{q^2 dq}{(1+q^2)^2(1+g+q^2)} = \frac{\pi^2}{3\sqrt{1+g}(1+\sqrt{1+g})}.$$

Для вычисления интеграла J_3^{ijlm} необходимо учесть, что он симметричен относительно любой перестановки своих индексов, что существенно уменьшает число случаев, требующих рассмотрения. Проведение аналогичной предыдущему случаю подстановки всех возможных значений $i, j, l, m = 1, 2, 3$ и вычисление соответствующих интегралов по угловым переменным в сферических координатах показало, что не зануляются только интегралы, в которых две пары повторяющихся индексов ($i = j,\ l = m$, или $i = l,\ j = m$, или $i = m,\ j = l$). Вычисления приводят к результату

$$J_3^{ijlm} = F^{ijlm} I_3, \tag{25}$$
$$I_3 = \frac{4\pi g^2}{5}\int_0^\infty \frac{q^2 dq}{(1+q^2)^2(1+g+q^2)^2} = \frac{\pi^2(1-\sqrt{1+g})^2}{5\sqrt{1+g}(1+\sqrt{1+g})}.$$

Для вершинной функции $\Gamma^{(4)\alpha\beta\gamma\delta}$ исходя из Фейнмановской диаграммы, изображенной на рисунке 1(a), можем записать:

$$\Gamma^{(4)\alpha\beta\gamma\delta} = u_0 F^{\alpha\beta\gamma\delta} \tag{26}$$
$$-\frac{22}{3}u_0^2 \sum_{i,j,l,m=1}^{3} (F^{\alpha\beta il}F^{jm\gamma\delta} + F^{\alpha\gamma il}F^{jm\beta\delta} + F^{\alpha\delta il}F^{jm\beta\gamma}) \int d^D q G_0^{ij}(\vec{q}) G_0^{lm}(-\vec{q})$$
$$= u_0 F^{\alpha\beta\gamma\delta} - \frac{22}{3}u_0^2 \sum_{i,j,l,m=1}^{3} (F^{\alpha\beta il}F^{jm\gamma\delta} + F^{\alpha\gamma il}F^{jm\beta\delta} + F^{\alpha\delta il}F^{jm\beta\gamma})$$
$$\cdot\Big(\delta^{ij}\delta^{lm}(I_1 - 2I_2) + F^{ijlm}I_3\Big) = u_0 F^{\alpha\beta\gamma\delta}\Big(1 - 22u_0(I_1 - 2I_2 + \frac{47}{81}I_3)\Big).$$

Для вершинной функции $\Gamma^{(2,1)\alpha\beta}$, которой соответствует Фейнмановская диаграмма, изображенная на рисунке 1(b), имеем

$$\Gamma^{(2,1)\alpha\beta} = r_0\delta^{\alpha\beta} - \frac{20}{3}r_0 u_0 \sum_{i,j,l,m=1}^{3} F^{\alpha\beta ij}\delta^{lm} \int d^D q G_0^{ij}(\vec{q}) G_0^{lm}(-\vec{q}) \tag{27}$$
$$= r_0\delta^{\alpha\beta} - \frac{20}{3}r_0 u_0 \sum_{i,j,l,m=1}^{3} F^{\alpha\beta ij}\delta^{lm}\Big(\delta^{ij}\delta^{lm}(I_1 - 2I_2) + F^{ijlm}I_3\Big)$$
$$= r_0\delta^{\alpha\beta}\Big(1 - 20u_0(I_1 - 2I_2 + \frac{5}{3}I_3)\Big).$$

Литература

1. Lederman F.L., Salamon M.B., Shacklette L.W. Experimental verification of scaling and test of the universality hypothesis from specific-heat data // Phys. Rev. B. 1974. V. 9. P. 2981–2988.
2. Fisher M. E., Aharony A. Dipolar Interactions at Ferromagnetic Critical Points // Phys. Rev. Lett. 1973. V. 30. P. 559–562.
3. Aharony A., Fisher M.E. Critical Behavior of Magnets with Dipolar Interactions. I. Renormalization Group near Four Dimensions // Phys. Rev. B. 1973 V. 8. P. 3323–3341.
4. Aharony A. Critical Behavior of Magnets with Dipolar Interactions. II. Feynman-Graph Expansion for Ferromagnets near Four Dimensions // Phys. Rev. B. 1973. V. 8. P. 3342–3348.
5. Aharony A. Critical Behavior of Magnets with Dipolar Interactions. III. Antiferromagnets // Phys. Rev. B. 1973. V. 8. P. 3349–3357.
6. Aharony A. Critical Behavior of Magnets with Dipolar Interactions. IV. Anisotropy // Phys. Rev. B. 1973. V. 8. P. 3358–3362.
7. Aharony A. Critical Behavior of Magnets with Dipolar Interactions. V. Uniaxial Magnets in d Dimensions // Phys. Rev. B. 1973. V. 8. P. 3363–3370.
8. Bruce A. D., Aharony A. Critical exponents of ferromagnets with dipolar interactions: Second-order ε-expansion // Phys. Rev. B. 1974. V. 10. P. 2078–2087.
9. Frey E., Schwabl F. Renormalized field theory for the static crossover in isotropic dipolar ferromagnets // Phys. Rev. B. 1991. V. 43. P. 833–841.
10. Bouchaud J.P., Zerah P.G. Dipolar ferromagnetism: A Monte Carlo study // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 9095–9097.