УДК 531.19

С.В. Сёмкин¹, В.П. Смагин²

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса
Владивосток. Россия

Точное и приближенные решения для одномерной модели Изинга разбавленного магнетика

Модель Изинга с немагнитным разбавлением применяется для теоретического описания многих объектов и явлений в физике конденсированных сред и ядерной физике. Влияние немагнитного разбавления на критическое поведение магнетиков, в том числе и тех, которые описываются моделью Изинга, представляет значительный научный интерес. Для модели Изинга с немагнитным разбавлением не удается построить точное решение для какой-либо кристаллической решетки. Свойства этой модели исследуются либо численно, либо в том или ином приближении. В настоящей работе получено точное решение для одномерной модели Изинга с неподвижными, хаотично расположенными немагнитными примесями. Это точное решение основано на составлении рекуррентных уравнений, через решения которых выражаются намагниченность и корреляция соседних спинов. Показано, что в пределе, когда разбавленный магнетик переходит в чистый, полученное нами решение переходит в известное точное решение для одномерной модели Изинга.

Затем полученное нами точное решение мы сравниваем с несколькими приближенными решениями. Были рассмотрены следующие приближенные методы: метод среднего поля, метод усреднения по обменным полям как с учетом, так и без учета корреляций и псевдохаотическое приближение. Наиболее грубым, как и следовало ожидать, оказывается метод среднего поля. Решения, полученные по методу усреднения по обменным полям, особенно с учетом корреляции, гораздо лучше согласуются с точным решением. Но наиболее близким к точному решению оказывается решение, полученное в псевдохаотическом приближении. Причем это приближение превосходит остальные по точности во всем диапазоне концентраций магнитных атомов.

Ключевые слова и словосочетания: фазовые переходы, модель Изинга, разбавленный магнетик.

¹ Сёмкин Сергей Викторович – канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры информационных технологий и систем, e-mail: Li15@rambler.ru

² Смагин Виктор Павлович – д-р физ.-мат. наук, зав. лабораторией фундаментальной и прикладной физики, e-mail: Li15@rambler.ru

S.V. Semkin, V.P. Smagin

Vladivostok State University of Economics and Service
Vladivostok. Russia

Exact and approximate solutions for the one-dimensional Ising model of a diluted magnet

The Ising model with nonmagnetic dilution is used for the theoretical description of many objects and phenomena in the physics of condensed matter and nuclear physics. The effect of nonmagnetic dilution on the critical behavior of magnets, including those described by the Ising model, is of considerable scientific interest. For the Ising model with nonmagnetic dilution, it is not possible to construct an exact solution for any crystal lattice. The properties of this model are investigated either numerically or in one or another approximation. In this paper, an exact solution is obtained for the one-dimensional Ising model with fixed, randomly located nonmagnetic impurities. This exact solution is based on the compilation of recurrent equations, through whose solutions the magnetization and correlation of neighboring spins are expressed. It is shown that in the limit when the diluted magnet goes into a pure one, the solution obtained by us goes into the well-known exact solution for the one-dimensional Ising model.

Then, we compare the exact solution obtained by us with several approximate solutions. The following approximate methods were considered: the mean field method, the averaging method over exchange fields both with and without correlations, and the pseudochaotic approximation. The roughest, as one would expect, is the mean field method. The solutions obtained by the averaging method over exchange fields, especially taking into account the correlation, are much better consistent with the exact solution. But the solution obtained in the pseudochaotic approximation turns out to be the closest to the exact solution. Moreover, this approximation exceeds the other approximations in accuracy in the entire range of concentrations of magnetic atoms.

Keywords: phase transitions, Ising model, dilute magnet.

Известно [1], что критическое поведение разбавленных или аморфных магнетиков может сильно отличаться от критического поведения магнетиков, имеющих трансляционную симметрию решетки. Однако даже для простых моделей магнетика с разбавлением, например, для модели Изинга с немагнитными примесями, не удастся построить точного решения для плоских или объемных решеток. В настоящей работе мы рассмотрим полученное нами точное решение для одномерной модели Изинга с немагнитным разбавлением. Решение для одномерной модели без разбавления хорошо известно [2], но одномерная модель с разбавлением обычно не рассматривается ввиду ее тривиальных перколяционных свойств. Если нас интересуют не сколько перколяционные свойства, сколько влияние немагнитного разбавления на намагниченность или магнитную восприимчивость или же оценка точности приближенных методов, представляется вполне разумным использовать одномерную модель Изинга с немагнитным разбавлением.

Итак, рассмотрим одномерный изинговский магнетик (цепочку), в котором некоторые магнитные атомы заменены на неподвижные немагнитные примеси, так что вероятность обнаружить в любом узле цепочки магнитный атом равна b , а вероятность обнаружить там примесь $1 - b$. При таком разбавлении цепочка

разбивается на отрезки магнитных атомов разной длины, разделенные немагнитными примесями. Среднее значение изинговского спина в расчете на один магнитный атом (намагниченность) может быть вычислена так:

$$M = \sum_{n=1}^{\infty} m_n p_n,$$

где m_n – средняя намагниченность атома отрезка длиной n , p_n – вероятность того, что произвольно взятый магнитный атом принадлежит такому отрезку. Очевидно, что $p_n = nb^{n-1}(1-b)^2$, а намагниченность m_n вычислим следующим образом. Пусть Z_n – статистическая сумма для отрезка из n изинговских спинов $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n$

$$Z_n = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} \left[\exp \left(K \sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i \sigma_{i+1} \right) + h \sum_{i=1}^n \sigma_i \right] = F_n(+1) + F_n(-1)$$

где

$$F_n(\sigma_n) = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_{n-1}} \left[\exp \left(K \sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i \sigma_{i+1} \right) + h \sum_{i=1}^n \sigma_i \right]$$

Здесь $K = \frac{J}{kT}$ (J – обменный интеграл, T – температура, k – постоянная Больцмана), $h = \frac{H_{ex}}{kT}$ (H_{ex} – внешнее поле). Эти безразмерные параметры имеют простой смысл: K показывает отношение энергии обменного взаимодействия к тепловой энергии, а h – отношение энергии взаимодействия спина с внешним полем к тепловой.

Тогда

$$m_n = \frac{1}{n} \frac{\partial}{\partial h} \ln Z_n = \frac{1}{n} \frac{F_{n,h}(+1) + F_{n,h}(-1)}{F_n(+1) + F_n(-1)}$$

Для величин $F_n(\pm 1)$ и их производных по h $F_{n,h}(\pm 1)$ можно составить рекуррентные соотношения:

$$\begin{aligned} F_{n+1}(\sigma) &= \sum_{\sigma'=\pm 1} F_n(\sigma') e^{K\sigma\sigma'+h\sigma} = F_n(+1) e^{K\sigma+h\sigma} + F_n(-1) e^{-K\sigma+h\sigma} \\ F_{n+1,h}(\sigma) &= (F_{n,h}(+1) + \sigma F_n(+1)) e^{K\sigma+h\sigma} + (F_{n,h}(-1) + \sigma F_n(-1)) e^{-K\sigma+h\sigma} \\ F_1(+1) &= F_{1,h}(+1) = e^h, F_1(-1) = e^{-h}, F_{1,h}(-1) = -e^{-h}. \end{aligned}$$

Вводя обозначения

$$x_n = \frac{F_n(-1)}{F_n(+1)}, y_n = \frac{F_{n,h}(+1)}{F_n(+1)} \text{ и } z_n = \frac{F_{n,h}(-1)}{F_n(+1)},$$

получим

$$\begin{aligned}
m_n &= \frac{1}{n} \frac{y_n + z_n}{1 + x_n}, \\
x_{n+1} &= \frac{e^{-2K} + x_n}{1 + x_n e^{-2K}} e^{-2h}, \quad y_{n+1} = \frac{y_n + z_n e^{-2K}}{1 + x_n e^{-2K}} + 1, \\
z_{n+1} &= \frac{z_n + y_n e^{-2K}}{1 + x_n e^{-2K}} e^{-2h} - x_{n+1} \\
x_1 &= e^{-2h}, \quad y_1 = 1, \quad z_1 = -e^{-2h}.
\end{aligned}$$

Покажем, что при $n \rightarrow \infty$ значение m_n стремится к известному значению [2]. При $n \rightarrow \infty$ последовательность x_n имеет конечный предел X , определяемый из уравнения

$$\begin{aligned}
X &= \frac{e^{-2K} + X}{1 + X e^{-2K}} e^{-2h}, \\
e^{-2K} X^2 + (1 - e^{-2h})X - e^{-2K-2h} &= 0,
\end{aligned}$$

корни которого

$$X_{1,2} = e^{K-h} (-e^K \sinh h \pm R) \quad \text{где} \quad R = \sqrt{e^{2K} \sinh^2 h + e^{-2K}}.$$

Рекуррентные уравнения для y_{n+1} и z_{n+1} после подстановки вместо x_n и x_{n+1} предельного значения X можно записать в матричном виде:

$$\begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}_{n+1} = A \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}_n + \begin{pmatrix} 1 \\ -X \end{pmatrix},$$

где

$$A = \begin{pmatrix} \alpha & \alpha e^{-2K} \\ \alpha e^{-2K-2h} & \alpha e^{-2h} \end{pmatrix}, \quad \text{где} \quad \alpha = \frac{1}{1 + X_1 e^{-2K}}.$$

Поэтому

$$\begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}_n = A^{n-1} \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}_1 + \left(\sum_{i=0}^{n-2} A^i \right) \begin{pmatrix} 1 \\ -X_1 \end{pmatrix}.$$

Собственные числа матрицы A есть 1 и $\lambda = \frac{1 + X_2 e^{-2K}}{1 + X_1 e^{-2K}}$.

Пусть W – матрица, приводящая A к диагональному виду:

$$A = W \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} W^{-1},$$

тогда

$$\begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}_n = W \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \lambda^{n-1} \end{pmatrix} W^{-1} \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}_1 + W \begin{pmatrix} n-1 & 0 \\ 0 & \sum_{i=0}^{n-2} \lambda^i \end{pmatrix} W^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ -X_1 \end{pmatrix}.$$

Учитывая теперь, что $|\lambda| < 1$, получим в пределе $n \rightarrow \infty$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}_n = W \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} W^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ -X_1 \end{pmatrix}.$$

значит

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{y_n + z_n}{n} = (w_{11} + w_{21})(w'_{11} - X_1 w'_{12}).$$

А предельное значение намагниченности

$$M = \frac{(w_{11} + w_{21})(w'_{11} - X_1 w'_{12})}{1 + X_1},$$

где w_{ij} – элементы матрицы $\mathbf{W}$, w'_{ij} – матрицы $\mathbf{W}^{-1}$. Вычислив эти элементы, получим

$$w_{11} = 1, w_{21} = X_1, w'_{11} = -\frac{X_2}{X_1 - X_2}, w'_{12} = \frac{1}{X_1 - X_2}.$$

То есть

$$M = -\frac{X_1 + X_2}{X_1 - X_2} = \frac{e^K \operatorname{sh} h}{\sqrt{e^{2K} \operatorname{sh}^2 h + e^{-2K}}}$$

Это выражение совпадает с полученной в [2] намагниченностью бесконечной изинговской цепочки.

Выражение для намагниченности M можно представить в виде степенного ряда по концентрации магнитных атомов b :

$$M = m_1 + 2(m_2 - m_1)b + \sum_{k=2}^{\infty} [((k+1)m_{k+1} - 2k)m_k + (k-1)m_{k-1}]b^k,$$

из которого можно найти производные $\frac{\partial^k M}{\partial b^k}$ при $b = 0$. В частности,

$$\left. \frac{\partial M}{\partial b} \right|_{b=0} = 2(m_2 - m_1) = 2 \left(\frac{\operatorname{sh}(2h)}{\operatorname{ch}(2h) + e^{-2K}} - \operatorname{th}(h) \right).$$

Аналогично вычисляется среднее значение произведения спинов соседних магнитных атомов.

$$S = \sum_{n=2}^{\infty} s_n \tilde{p}_n,$$

где s_n – среднее значение произведения спинов, принадлежащих отрезку длиной n , а $\tilde{p}_n$ – вероятность того, что пара соседних магнитных атомов принадлежит такому отрезку. $\tilde{p}_n = (n-1)b^{n-2}(1-b)^2$, а s_n найдем так

$$s_n = \frac{1}{n-1} \frac{\partial}{\partial K} \ln Z_n = \frac{1}{n-1} \frac{F_{n,K}(+1) + F_{n,K}(-1)}{F_n(+1) + F_n(-1)}.$$

Вводя обозначения $t_n = \frac{F_{n,K}(+1)}{F_n(+1)}$ и $w_n = \frac{F_{n,K}(-1)}{F_n(+1)}$, получим

$$s_n = \frac{1}{n-1} \frac{t_n + w_n}{1 + x_n}$$

$$t_{n+1} = \frac{t_n + w_n e^{-2K}}{1 + x_n e^{-2K}} + \frac{1 - x_n e^{-2K}}{1 + x_n e^{-2K}}, \quad w_{n+1} = \frac{w_n + t_n e^{-2K}}{1 + x_n e^{-2K}} e^{-2h} - \frac{e^{-2K} - x_n}{1 + x_n e^{-2K}} e^{-2h}$$

$$x_2 = \frac{\text{ch}(-K+h)}{\text{ch}(K+h)} e^{-2h}, \quad t_2 = \text{th}(K+h), \quad w_2 = -\frac{\text{sh}(-K+h)}{\text{ch}(K+h)} e^{-2h}.$$

Если $h = 0$, то все $m_n = 0$, а все $s_n = \text{th}K$, поэтому $M = 0$ и $S = \text{th}K$.

Можно также представить S в виде ряда по степеням b :

$$S = s_2 + 2(s_3 - s_2)b + \sum_{k=2}^{\infty} [(k+1)s_{k+2} - 2k]s_{k+1} + (k-1)s_k b^k$$

Полученное точное решение можно использовать для оценки точности различных приближенных решений для модели Изинга разбавленного магнетика [3, 4]. Построение большего числа приближенных методов можно описать в рамках следующего общего подхода. Рассмотрим изинговский магнетик с разбавлением

$$h_{in} = \sum \sigma_i$$

по связям на решетке с координационным числом q . Пусть σ_i — сумма

$$h'_{in} = \sum \sigma_i$$

по соседям, связанным со спином σ_0 неразорванными связями, а

сумма по всем q соседям σ_0 , в том числе и по тем, связи с которыми разорваны.

Очевидно, что для чистого, не разбавленного магнетика $h_{in} = h'_{in}$ для любого атома. Пусть $W_1(h_{in})$ функция распределения по полям h_{in} , а $W_2(h_{in}, h'_{in})$ со-

вместная функция распределения полей h_{in} и h'_{in} .

$$(W_1(h_{in}) = \int W_2(h_{in}, h'_{in}) dh'_{in}).$$

Тогда

$$m = \langle \text{th}(Kh_{in} + h) \rangle_{W_1(h_{in})} \quad (1)$$

и

$$qV = \langle h'_{in} \text{th}(Kh_{in} + h) \rangle_{W_2(h_{in}, h'_{in})}, \quad (2)$$

где m — средняя намагниченность, $V = \langle \sigma \sigma_0 \rangle$ по всем парам соседних спинов,

$h = \frac{H_{\text{вн}}}{kT}$ ($H_{\text{вн}}$ — внешнее поле, T — температура, k — постоянная Больцмана).

Если теперь использовать ту или иную оценку для функций $W_1(h_{in})$ и

$W_2(h_{in}, h'_{in})$, можно построить различные приближенные методы для опре-

деления намагниченности в модели Изинга разбавленного магнетика. Напри-

мер, полагая $W_1(h_{in}) = \delta(h_{in} - qbm)$, $W_2(h_{in}, h'_{in}) = W_1(h_{in})\delta(h'_{in} - qm)$, где

b — вероятность того, что связь между соседними узлами окажется не разо-

рванной, получим из (1) и (2) метод среднего поля: $m = \text{th}(Kqbm + h)$. Более

точное приближение получим, используя для $W_1(h_{in})$ биномиальное рас-

пределение:

$$W_1(h_{in}) = \sum_{n=0}^q C_q^n b^n (1-b)^{q-n} \sum_{i=0}^n C_n^i \left(\frac{1+m}{2}\right)^i \left(\frac{1-m}{2}\right)^{n-i} \delta(h_{in} - (2i - n))$$

При использовании такого распределения из (1) следует метод усреднения по локальным полям или метод среднего спина, рассмотренный в работе [3]. Если в методе среднего спина учесть корреляцию V , получим

$$W_1(h) = \sum_{n=0}^q F_{q,n}(m, V) G_{q,n}(b, h)$$

$$W_2(h, h') = \sum_{n=0}^q F_{q,n}(m, V) \delta(h' - (2n - q)) G_{q,n}(b, h)$$

где

$$G_{q,n}(b, h) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^{q-n} C_n^i C_{q-n}^j b^{i+j} (1-b)^{q-(i+j)} \delta(h - (i-j))$$

и

$$F_{q,n}(m, V) = C_q^n \left[\frac{1+m}{2} \left(\frac{1+\mu_1}{2} \right)^n \left(\frac{1-\mu_1}{2} \right)^{q-n} + \frac{1-m}{2} \left(\frac{1+\mu_2}{2} \right)^n \left(\frac{1-\mu_2}{2} \right)^{q-n} \right]$$

$$\mu_1 = \frac{m+V}{1+m}, \quad \mu_2 = \frac{m-V}{1-m}.$$

Уравнение для намагниченности по методу среднего спина получается из (1), если положить $V = m^2$; уравнение (2) в этом случае нужно отбросить.

Другой подход к построению приближенных методов заключается в использовании модели Изинга не с замороженными, а с подвижными немагнитными примесями, находящимися в термодинамическом равновесии. В этом случае в гамильтониан войдет дополнительный параметр, связанный с энергией взаимодействия магнитных атомов и атомов примеси. Для подвижных примесей можно рассчитать корреляцию (ковариацию) в расположении примесей для соседних узлов решетки. Подбирая теперь параметр взаимодействия так, чтобы эта корреляция обращалась в ноль, получим распределение примесей, которое мы назвали «псевдохаотическим» [4–6]. Применительно к решетке Бете этот метод приводит к следующему результату [4]:

$$M = \text{th} \frac{qx - h}{q - 1},$$

где x – корень уравнения

$$\text{th} \frac{qx - h}{q - 1} = (1 - b) \text{th}(x) + b \frac{\text{sh}(2x)}{\text{ch}(2x) + e^{-2x}}.$$

На рисунке 1 показаны зависимости намагниченности в расчете на один магнитный атом как функция концентрации магнитных атомов b при значениях $h = 0.05$. Кривые 1 и 2 – точное решение и решение, полученное в псевдохаотическом приближении. (Эти две кривые в точности не совпадают, но различие между ними не видно в масштабе рис. 1.) Кривая 3 – намагниченность, полученная методом «среднего спина» без учета корреляции, а кривая 4 – с учетом корреляции V . На рисунке 1 не приведена зависимость $M(b)$ соответствующая приближению среднего поля, так как эта зависимость очень сильно отличается от точного решения (и других приближений) в области больших значений b .

Однако при малых b метод среднего поля дает, как ни странно, более близкое к точному значение M , чем варианты метода среднего спина. При b , близких к нулю, все приближения совпадают с точным решением, что, впрочем, и следовало ожидать, т.к. система в этом случае приближается к парамагнитной. При $b = 1$, т. е. при отсутствии немагнитного разбавления, метод среднего спина с учетом корреляции и псевдохаотическое приближение дают точное решение. (Такое совпадение будет иметь место не только для одномерной цепочки, но и для решетки Бете с произвольным координационным числом q .)

Рис. 1. Зависимость намагниченности от концентрации магнитных атомов.

Кривые 1 и 2 – точное решение и решение, полученное в псевдохаотическом приближении. Кривая 3 – намагниченность, полученная методом «среднего спина» без учета корреляции, а кривая 4 – с учетом корреляции

Рис. 2. Разница между точным решением и решением в псевдохаотическом приближении при $K = 0.5$ и $h = 0.3, 0.5, 0.7$ и 1.0 (кривые 1 – 4 соответственно)

Разница между псевдохаотическим приближением и точным решением показана на рис.2. Здесь приведены графики разницы при $K = 0.5$ и $h = 0.3, 0.5, 0.7$ и 1.0 (кривые 1–4 соответственно). Расчет показывает, что эта разница не превосходит по абсолютной величине $10^{-3} - 10^{-4}$.

Таким образом, для одномерной модели Изинга с разбавлением расчет намагниченности в псевдохаотическом приближении с очень высокой точностью совпадает с точным решением, что позволяет надеяться, что и для более сложных решеток это приближение окажется достаточно хорошим.

1. Займан Дж. Модели беспорядка: Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем. М.: Мир, 1982. 591 с.
2. Бэкстер С. Р. Точно решаемые модели в статистической механике. М.: Мир, 1985. 486 с.
3. Белоконов В.И., Семкин С.В. Метод случайного поля в модели Изинга разбавленного ферромагнетика // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1992. Т. 102, № 4. С. 1254.
4. Семкин С.В., Смагин В.П. Модель Поттса на решетке Бете во внешнем поле // Изв. вузов. Физика. 2016. Т. 59, №10. С. 120.
5. Семкин С.В., Смагин В.П. Модель Поттса на решетке Бете с немагнитными примесями // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2015. Т. 148, №4. С. 729.
6. Семкин С.В., Смагин В.П. Приближение Бете в модели Изинга с подвижными примесями // Физика твердого тела. 2015. Т. 57, № 5. С. 926.

Транслитерация

1. Zajman Dzh. Modeli besporyadka: Teoreticheskaya fizika odnorodno neuporyadochennyh sistem. M.: Mir, 1982. 591 p.
2. Behkster C. R. Tochno reshaemye modeli v statisticheskoy mekhanike. M.: Mir, 1985. 486 p.
3. Belokon' V.I., Semkin S.V. Metod sluchajного polya v modeli Izinga razbavlenного ferro-magnetika, *ZHurnal ehksperimental'noj i teoreticheskoy fiziki*. 1992. T. 102, №4. P. 1254.
4. Syomkin S.V., Smagin V.P. Model' Potts na reshetke Bete vo vneshnem pole, *Izv. vuzov. Fizika*. 2016. T.59, №10. P. 120.
5. Semkin S.V., Smagin V.P. Model' Potts na reshetke Bete s nemagnitnymi primesyami, *ZHurnal ehksperimental'noj i teoreticheskoy fiziki*. 2015. T.148, №4. P. 729.
6. Syomkin S.V., Smagin V.P. Priblizhenie Bete v modeli Izinga s podvizhnymi primesyami, *Fizika tverdogo tela*. 2015. T. 57, № 5. P. 926

© С.В. Семкин, 2018

© В.П. Смагин, 2018

Для цитирования: Семкин С.В., Смагин В.П. Точное и приближенные решения для одномерной модели Изинга разбавленного магнетика // Территория новых возможностей. Вестник Владивостокского государственного университета экономики и сервиса. 2018. Т. 10. № 4. С. 122–130.

For citation: Semkin S.V., Smagin V.P. Exact and approximate solutions for the one-dimensional Ising model of a diluted magnet // *The Territory of New Opportunities. The Herald of Vladivostok State University of Economics and Service*, 2018, Vol. 10, №4, pp. 122–130.

DOI dx.doi.org/10.24866/VVSU/2073-3984/2018-4/122-130

Дата поступления: 14.08.18