05,11

Построение приближенного решения для разбавленного магнетика на основе решения для чистого магнетика на той же решетке

© С.В. Сёмкин, В.П. Смагин

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса,
Владивосток, Россия

E-mail: Li15@rambler.ru

Поступила в Редакцию 8 августа 2022 г.
В окончательной редакции 8 августа 2022 г.
Принята к публикации 9 августа 2022 г.

Предложен способ приближенного расчета намагниченности разбавленного изинговского магнетика на некоторой решетке, основанный на использовании точного или приближенного решения для чистого изинговского магнетика на этой же решетке. С помощью предложенного способа можно для разбавленного магнетика рассчитать зависимость намагниченности от температуры и концентрации немагнитных примесей и температуру Кюри как функцию концентрации. Предложенный способ в работе применяется к решению в приближении среднего поля, к решению в приближении бете и к точному решению на квадратной решетке.

Ключевые слова: фазовые переходы, модель Изинга, немагнитное разбавление.

DOI: 10.21883/FTT.2022.12.53647.456

1. Введение

Свойства разбавленных и неупорядоченных магнетиков отличаются от свойств чистых магнетиков [1–5]. Однако точные решения для моделей магнитных систем с разбавлением удается получить только в редких случаях [6]. Поэтому имеет смысл построение приближенных решений для разбавленных магнетиков. Некоторые из этих решений можно построить с помощью усреднения по полям взаимодействия.

В нашей работе [7] развит общий подход, основанный на усреднении по полям обменного взаимодействия применительно к спиновым кластерам на магнитной решетке. В настоящей работе, также на основе метода усреднения по обменным полям, вводится „функция отношения эффективных полей обменного взаимодействия“. Эту функцию мы определяем как отношение таких значений полей обменного взаимодействия, при которых кластерное среднее спина равно среднему по ансамблю. При этом мы ограничиваемся только кластерами из одного и двух магнитных атомов. В работе установлена связь между функцией отношения и спонтанной намагниченностью как функцией температуры. Связь позволяет вычислить функцию отношения если есть приближенное или точное решение для модели Изинга. В настоящей работе мы полагаем, что при немагнитном разбавлении функция отношения как функция спонтанной намагниченности приближенно такая же, как и для чистого магнетика. Это предположение основано на том, что, как показано в работах [6,8,9], для решетки Бете аналогичное допущение дает разумные результаты. Поэтому целью настоящей работы является исследование того, к чему допущение о независимости функции отношения от немагнитного разбавления приводит в более общем случае.

2. Усреднение по полям взаимодействия, функция отношения для чистого и разбавленного магнетика

Рассмотрим модель Изинга на некоторой решетке. Пусть в каждом узле решетки содержится изинговский „спин“, принимающий значения $+1$ и -1, а взаимодействуют только спины, находящиеся в соседних узлах. Тогда гамильтониан модели Изинга можно записать так [10]:

$$\mathscr{H} = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j - H_{ex} \sum_i \sigma_i, \tag{1}$$

где J — энергия обменного взаимодействия, H_{ex} — внешнее поле; суммирование в первой сумме проводится по всем парам соседних спинов, во второй — по всем узлам.

Выделим теперь на решетке некоторый спин σ_0. Пусть h — сумма значений спинов, непосредственно взаимодействующих с σ_0 (спинов первой координационной сферы). Будем называть эту сумму „полем взаимодействия“. Тогда, как показано в [7], термодинамическое среднее $\langle\sigma_0\rangle$ получается усреднением $\mathrm{th}(Kh)$ по функции распределения $W(h)$:

$$\langle\sigma_0\rangle = \sum_h W(h)\,\mathrm{th}(Kh), \tag{2}$$

где $K = \frac{J}{kT}$, k — постоянная Больцмана, T — температура. В общем случае $\langle\sigma_0\rangle$ и $W(h)$ зависят от узла, в котором расположен спин σ_0. Если же модель Изинга задана на простой решетке с координационным числом q, то все $\langle\sigma_0\rangle = M$, где M — средняя намагниченность на узел, а функция $W(h)$ не зависит от номера узла. В этом случае, поскольку намагниченность M принимает значения от 0 до 1, для любой функции распределения $W(h)$ существует такое значение $h = \chi_1$ для которого

$$M = \operatorname{th}(K\chi_1). \qquad (3)$$

Это значение χ_1 будем называть „эффективным полем“.

Возьмем теперь кластер из двух соседних спинов σ_1 и σ_2 (димер). В работе [7] показано, что термодинамическое среднее $\langle\frac{\sigma_1+\sigma_2}{2}\rangle$ равно

$$\left\langle \frac{\sigma_1+\sigma_2}{2} \right\rangle = \sum_{h_1,h_2} W(h_1,h_2) \times \frac{\operatorname{sh}\big(K(h_1+h_2)\big)}{\operatorname{ch}\big(K(h_1+h_2)\big)+\operatorname{ch}\big(K(h_1-h_2)\big)\exp(-2K)}, \qquad (4)$$

где h_1 и h_2 — поля взаимодействия, связанные с σ_1 и σ_2, $W(h_1,h_2)$ — их совместная функция распределения. Аналогично кластеру из одного атома, из условия нормировки для $W(h_1,h_2)$ следует, что существует такое значение $h_1 = h_2 = \chi_2$ при котором

$$M = \frac{\operatorname{sh}(2K\chi_2)}{\operatorname{ch}(2K\chi_2)+x}, \qquad (5)$$

где $x = \exp(-2K)$, а χ_2 — эффективное поле димера.

Многие приближенные методы в теории магнетизма можно трактовать как введение дополнительных соотношений между эффективными полями χ_1, χ_2 и намагниченностью M. Например, если принять $\chi_1 = qM$, получим известное приближение среднего поля [11], а соотношение $\chi_2 = (q-1)M$ приводит к обобщению приближения среднего поля, рассмотренного в [8]. Если же равенства (3) и (5) дополнить соотношением $\chi_2 = \frac{(q-1)}{q}\chi_1$ получим приближение Бете [10,11]. Рассмотрим более общее соотношение, которое можно представить в виде $\chi_2 = y(M)\chi_1$. Функцию $y(M)$ будем называть функцией отношения. Если известно точное или приближенное значение спонтанной намагниченности как функции температуры $M = M(x)$, то из (3) и (5) можно найти χ_1, χ_2 и функцию отношения $y(M)$. И наоборот, если из каких-либо соображений известна функция $y(M)$, то из (3) и (5) можно найти соответствующую этой функции зависимость $M = M(x)$. Используя низкотемпературное разложение статсуммы [10] можно показать, что для простых решеток с координационным числом $q\chi_1 \to q$ и $\chi_2 \to q-1$ при $x \to 0$, т.е. в пределе низких температур $y(M)$ стремится к $\frac{q-1}{q}$.

Рассмотрим теперь модель Изинга с немагнитным разбавлением. Наибольший интерес [4] представляет случай так называемого „вмороженного“ разбавления: когда часть узлов случайно и без корреляции заполняется немагнитными примесями, так что в любом узле решетки может находиться магнитный атом с вероятностью b или примесь с вероятностью $1-b$. (Аналогично можно рассматривать разбавление по связям: связь между соседними спинами существует с вероятностью b или разорвана с вероятностью $1-b$ [12].) Главное отличие систем с вмороженными примесями от чистых магнетиков заключается в нарушении трансляционной симметрии решетки — термодинамические средние, такие, например, как $\langle\sigma_0\rangle$ в общем случае не равны для различных спинов системы. Здесь можно прибегнуть к усреднению по различным конфигурациям примесей, либо согласно идее самоусреднения [4] — по различным спинам в одной и той же конфигурации. Тогда, для разбавления и по узлам, и по связям „самоусредненная“ намагниченность магнитного атома представляется в виде [7]:

$$M = \operatorname{th}(K\tilde{\chi}_1). \qquad (6)$$

Здесь $\tilde{\chi}_1$ — зависящее от b эффективное обменное поле. Аналогично, для димера

$$M = (1-b)\operatorname{th}(K\tilde{\chi}_2) + b\,\frac{\operatorname{sh}(2K\tilde{\chi}_2)}{\operatorname{ch}(2K\tilde{\chi}_2)+x}. \qquad (7)$$

Нахождение точного вида функций $\tilde{\chi}_1(x,b)$ (или $\tilde{\chi}_2(x,b)$) для разбавления по узлам или по связям эквивалентно точному решению задачи о намагниченности разбавленного изинговского магнетика. Рассмотрим такой способ приближенного решения этой задачи. Будем считать, что отношение эффективных обменных полей $\tilde{\chi}_2/\tilde{\chi}_1$, выраженное как функция M, не зависит от b. Т.е., будем полагать, что $\tilde{\chi}_2 = y(M)\tilde{\chi}_1$, где $y(M)$ — функция отношения, определенная выше для чистого магнетика. Как будет показано ниже, для решетки Бете это предположение эквивалентно рассмотрению примесей на этой решетке в псевдохаотическом приближении [8,9].

Т.е., предлагаемое приближение к анализу разбавленного магнетика заключается в следующем. Пусть есть точное или приближенное значение намагниченности чистого магнетика как функции температуры $M = \mu(x)$ (или обратной функции $x = \nu(M)$). Это может быть, например, решение в приближении среднего поля [10] или в приближении Бете [11] (которое можно интерпретировать как точное решение на решетке Бете [10]) или же точное решение Онзагера на квадратной решетке [10]. Используя это решение, получим из соотношений (3) и (5) выражение для функции отношения $y(M)$:

$$y(M) = \frac{\ln\big(\nu M + \sqrt{(\nu M)^2 + (1-M^2)}\big) - \ln(1-M)}{\ln(1+M) - \ln(1-M)}. \qquad (8)$$

Используя это выражение, получим из (6) и (7):

$$x(M,b) = \frac{\nu(M) - \gamma F_1(M)}{1 - \gamma F_2(M)}, \qquad (9)$$

где $\gamma = \frac{1-b}{1+b}$ — мера „разбавленности“ магнетика,

$$F_1(M) = 2\,\frac{R-\nu}{R+1}\left(\frac{\nu M}{1-M} + \frac{1}{R+\nu M}\right) + \nu,$$

$$F_2(M) = \frac{1-R+2\nu}{R+1}, \tag{10}$$

здесь $R = \sqrt{(\nu M)^2 + (1-M^2)}$. Для того, чтобы найти концентрационную зависимость температуры Кюри $T_c(b)$ или $K_c(b) = J/kT_c(b)$ перейдем в (9) и (10) к пределу $M \to 0$. Обозначив $x_c(b) = \exp\bigl(-2K_c(b)\bigr)$, получим

$$x_c(b) = \frac{x_c(1) - \gamma}{1 - \gamma x_c(1)} \text{ или } \operatorname{th} K_c(b) = \frac{1}{b}\operatorname{th} K_c(1). \tag{11}$$

Из формулы (11) следует, что температура Кюри обращается в ноль при $b = \operatorname{th} K_c(1)$. Значит, величину $b_c = \operatorname{th} K_c(1)$ можно считать оценкой значения перколяционного порога в данном приближении [12]. Для модели Изинга с разбавлением значение спонтанной намагниченности $M_0(b)$ при $T = 0$ есть вероятность того, что данный магнитный атом принадлежит бесконечному кластеру [12]. Это значение можно получить из (9)–(10) в пределе $T \to 0$. $M_0(b)$ удовлетворяет уравнению

$$\nu(M_0) = \gamma F_1(M_0). \tag{12}$$

Отметим, что описанный выше способ, можно использовать не только для кластеров из одного и двух атомов, но и для двух кластеров произвольного размера. Определив соответствующую функцию отношения для чистого магнетика и предполагая ее независимость от b, получим более общую форму представленного в настоящей работе приближения. В такой общей форме возникнет различие в разбавлении по узлам и по связям, но в настоящей работе мы рассмотрим только простейшую реализацию способа, в которой этого различия нет.

3. Теория среднего поля, приближение Бете и решение Онзагера

Применим теперь описанный выше способ к модели Изинга на квадратной решетке. Этот выбор решетки обусловлен тем, что для этой решетки кроме приближенных решений существует и точное решение Онзагера [10]. Рассмотрим вначале приближенные решения. В приближении среднего поля [11] спонтанная намагниченность для этой решетки определяется выражением $M = \operatorname{th}(4KM)$, откуда

$$\nu(M) = \left(\frac{1-M}{1+M}\right)^{\frac{1}{4M}}. \tag{13}$$

Подставляя эту функцию в (8), получим функцию отношения $y_a(M)$ в приближении среднего поля. График этой функции показан на рис. 1 (кривая *1*). Нетрудно

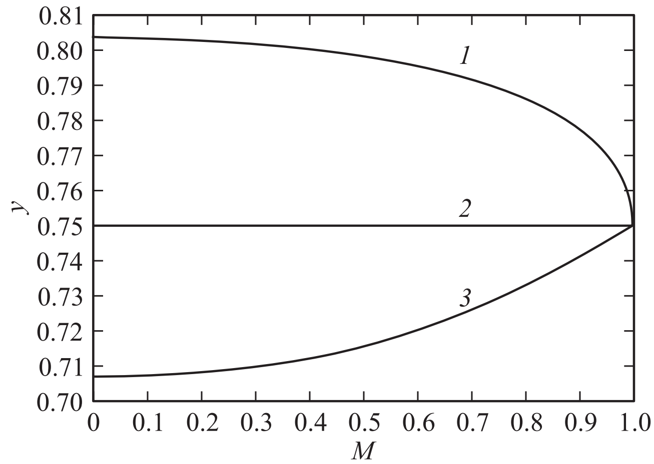

Рис. 1. Функции отношения эффективных полей в различных приближениях в зависимости от спонтанной намагниченности для квадратной решетки. Кривая *1* — приближение среднего поля, кривая *2* — приближение Бете и кривая *3* — точное решение.

убедиться, что при $M \to 1$ $y_a(M) \to 3/4$, а $\nu(M) \to 0$. K_c в приближении среднего поля равно 1/4, значит $x_c(1) = \exp(-1/2) \approx 0.607$.

Применим теперь это решение к анализу разбавленного магнетика в соответствии с изложенным в предыдущем пункте подходом. Из (11) $b_c = \operatorname{th}(1/4) \approx 0.245$. Эта величина не слишком хорошо согласуется с точными значениями порогов протекания по узлам и по связям ни для квадратной, ни для тетраэдрической решеток [12]. Однако, в обычном приближении среднего поля для разбавленного магнетика [12] вообще нет перколяционного перехода и порога протекания. Используя теперь (13) и (12) построим график функции $M_0(b)$ — он показан на рис. 2 (кривая *1*).

В приближении Бете [10] спонтанная намагниченность на решетке с координационным числом q равна $M = (1-p^q)/(1+p^q)$, где p корень уравнения $p = (x + p^{q-1})/(1 + x p^{q-1})$. Нетрудно показать, что при $q = 4$

$$\nu(M) = \frac{\sqrt[4]{1-M^2}}{\sqrt{1+M} + \sqrt{1-M}}. \tag{14}$$

Подставляя это выражение в (8), получим, что функция отношения в этом приближении $y_b(M) = 3/4$, то есть, не зависит от M. Как уже было сказано, утверждение о том, что функция отношения эффективных полей, входящих в (3) и (5) равна $(q-1)/q$ можно считать определением приближения Бете [8,9]. Из (14) видно, что спонтанная намагниченность в приближении Бете исчезает при $x_c(1) = 1/2$ или $K_c = (1/2)\ln 2$. Используем теперь приближение Бете в выражениях (9)–(12). Получим $\operatorname{th} K_c(b) = 1/(3b)$ или $b_c = 1/3$. График функции $M_0(b)$ в приближении Бете показан на рис. 2, кривая *2*.

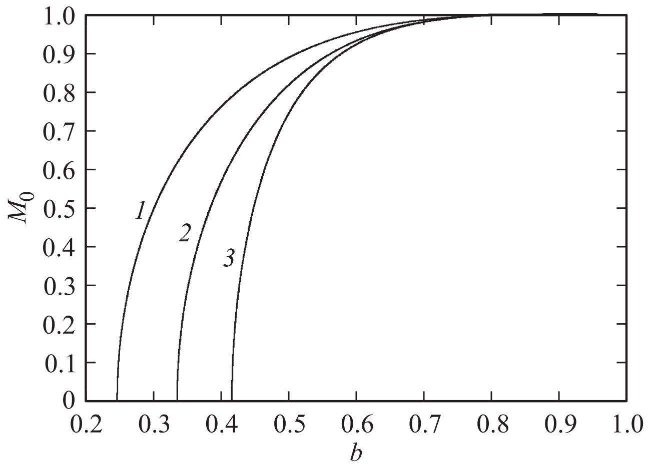

Рис. 2. Спонтанная намагниченность $M_0(b)$ как функция концентрации магнитных атомов b на квадратной решетке. Графики построены на основе приближения среднего поля (кривая *1*), на основе приближения Бете (кривая *2*) и на основе точного решения (кривая *3*).

В работе [8] рассмотрено приближение Бете для разбавленного магнетика „псевдохаотическом“ приближении. Суть этого приближения в том, что вместо вмороженных примесей на решетке Бете, рассматриваются подвижные примеси с дополнительным условием равенства нулю корреляции в расположении примесей в соседних узлах. Оказывается, что все результаты, получаемые из (9)−(12) при использовании приближения Бете совпадают с полученными в псевдохаотическом приближении для решетки Бете [8,9]. Это позволяет предположить, что предлагаемый в настоящей работе подход к анализу разбавленного магнетика, основанный на допущении о независимости от b функции отношения, в общем случае можно физически интерпретировать как некоторый вариант псевдохаотического приближения.

Напомним, что предлагаемый в настоящей работе подход к анализу разбавленного магнетика, основан на использовании приближенного или точного решения для чистого магнетика на соответствующей решетке. Как известно [10] для модели Изинга на квадратной решетке можно найти точное выражение для спонтанной намагниченности как функции температуры

$$M^8 = 1 - \frac{1}{\mathrm{sh}^4(2K)}. \qquad (15)$$

Отсюда

$$y(M) = \sqrt[4]{1-M^2}\,\frac{\sqrt[4]{(1+M^2)(1+M^4)}}{1+\sqrt{1+\sqrt{1-M^8}}}. \qquad (16)$$

Из этих выражений следует, что спонтанная намагниченность исчезает при $x_c(1) = \sqrt{2}-1$ или $K_c = (1/2)\ln(\sqrt{2}+1)$. Функция отношения $y_e(M)$, соответствующая решению (16) показана на рис. 1, кривая *3*. Можно показать, что при $M \to 1$ $y_e(M) \to 3/4$.

Используем теперь точное решение (16) в качестве основы для анализа разбавленного магнетика. Из (9)−(12) получим $b_c = \sqrt{2}-1 \approx 0.414$. На рис. 2 (кривая *3*) показан график функции $M_0(b)$ рассчитанной по (12) для решения (16).

4. Заключение

В настоящей работе построена универсальная функция отношения для модели Изинга без немагнитного разбавления $y(M, x)$, связывающая эффективные поля одноатомного и двухатомного кластеров. Эта функция зависит от спонтанной намагниченности M и температурного параметра $x = \exp(-2K)$. То есть, связь между M и x, полученная из точного или приближенного решения, определяет функцию отношения $y(M)$ или $y(x)$.

Предположив, что для магнетика с немагнитным разбавлением функция $y(M)$ имеет тот же вид, что и для чистого, мы получили следующие основные результаты.

1. Следствием принятого предположения является вид концентрационной зависимость критического температурного параметра $K_c(b) = J/kT_c(b)$, где $T_c(b)$ — температура Кюри. Этот вид выражается простым соотношением $b\,\mathrm{th}\,K_c(b) = \mathrm{th}\,K_c(1)$.

2. Основываясь на любом решении для чистого изинговского магнетика, получаем существование перколяционного перехода при концентрации $b_c = \mathrm{th}\,K_c(1)$. В частности, основываясь на приближении среднего поля для решетки с координационным числом q, получим $b_c = \mathrm{th}(1/q)$.

3. Концентрационная зависимость спонтанной намагниченности при нулевой температуре (которую для модели Изинга можно понимать как вероятность того, что данный магнитный атом принадлежит бесконечному кластеру) определяется выражением (12).

4. Универсальность функции отношения для чистого и разбавленного изинговских магнетиков на решетке Бете эквивалентна рассмотрению немагнитных примесей в псевдохаотическом приближении [8,9]. Сделано предположение, что такая универсальность в общем случае эквивалентна тем или иным дополнительным условиям на корреляцию в расположении примесей в модели с подвижными примесями.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

[1] Ю.А. Изюмов, М.В. Медведев. Теория магнитоупорядоченных кристаллов с примесями. Наука, М. (1970). 271 с.
[2] Б.Н. Шалаев. ФТТ **52**, 83 (2010).
[3] Д.Н. Ясинская, В.А. Улитко, Ю.Д. Панов. ФТТ **62**, 1543 (2020).
[4] Вик.С. Доценко. УФН **165**, *5*, 481 (1995).
[5] А.К. Муртазаева, А.Б. Бабаев. ЖЭТФ **161**, 847 (2022).

[6] С.В. Сёмкин, В.П. Смагин, Е.Г. Гусев. ТМФ **201**, *2*, 278 (2019).
[7] С.В. Сёмкин, В.П. Смагин, В.И. Люлько. ФТТ **62**, 1209 (2020).
[8] С.В. Сёмкин, В.П. Смагин. ФТТ **56**, 1064 (2014).
[9] С.В. Семкин, В.П. Смагин. ЖЭТФ **148**, 729 (2015).
[10] Р. Бэкстер, Точно решаемые модели в статистической механике. Мир, М. (1985). [R.J. Baxter. Exactly solved models in statistical mechanics. Academic Press, N.Y. (1982)].
[11] И.А. Квасников. Термодинамика и статистическая физика. Едиториал УРСС, М. (2002). 432 с.
[12] Дж. Займан, Модели беспорядка: Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем. Мир, М. (1982). 591 с.

Редактор Д.В. Жуманов