

07,10

Фрустрации в основном состоянии разбавленной цепочки Изинга в магнитном поле

© Ю.Д. Панов

Институт естественных наук и математики, Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

E-mail: yuri.panov@urfu.ru

Поступила в Редакцию 17 апреля 2023 г.

В окончательной редакции 17 апреля 2023 г.

Принята к публикации 11 мая 2023 г.

Свойства основного состояния одной из простейших моделей фрустрированных магнитных систем, разбавленной цепочки Изинга в магнитном поле, рассмотрены для всех значений концентрации заряженных немагнитных примесей. Предложен аналитический метод вычисления остаточной энтропии фрустрированных состояний, включая состояния на границах между фазами основного состояния, который основан на марковском свойстве рассматриваемой системы и допускает непосредственное обобщение на другие одномерные спиновые модели со взаимодействиями типа Изинга. Исследованы свойства локальных распределений и концентрационные зависимости состава, корреляционных функций, намагниченности и энтропии фаз основного состояния модели. Показано, что индуцированный полем переход из антиферромагнитного основного состояния во фрустрированное сопровождается зарядовым упорядочением и доказано отсутствие псевдопереходов в разбавленной изинговской цепочке.

Ключевые слова: фрустрации, разбавленные магнетики, псевдопереходы.

DOI: 10.21883/FTT.2023.07.55845.38H

1. Введение

Основой необычного поведения низкоразмерных спиновых и псевдоспиновых систем является отсутствие или сложность формирования дальнего порядка. Для одномерных спиновых цепочек, включая популярные в последние несколько лет одномерные обобщенные модели Изинга [1], характерной особенностью является наличие фрустрированных фаз в основном состоянии. С фрустрированными состояниями могут быть связаны разные экзотические свойства этих систем, такие, как плато намагниченности, квазифазы или псевдопереходы, обнаруженные в декорированных изинговских системах [2–12].

Источником фрустраций в магнетиках, помимо геометрии решетки, могут быть примеси. Простейшей моделью системы, где основное состояние фрустрировано из-за наличия примесей, является разбавленная цепочка Изинга. В нулевом магнитном поле эта модель имеет точное решение [13]. Его различные свойства подробно изучены в статьях [14–16], а в наиболее общем виде точное решение проанализировано в работе Балагурова, Вакса и Зайцева [17]. С учетом магнитного поля, стандартный метод трансфер-матрицы позволяет изучить термодинамические свойства данной модели с помощью численного решения системы нелинейных алгебраических уравнений. Этим методом были рассмотрены энтропия и магнитный параметр Грюнайсена при конечных температурах [18]. Однако, свойства основного состояния, особенно концентрационные зависимости различных физических величин, в рамках стандартного могут

быть исследованы только на качественном уровне из анализа численного решения при низких температурах.

В статье предложен аналитический метод расчета различных физических свойств основного состояния разбавленной цепочки Изинга в продольном магнитном поле при всех возможных значениях параметров модели. Состав состояний на границах между фазами основного состояния определен из принципа максимума остаточной энтропии, явное выражение для которой получено из марковского свойства рассматриваемой системы [19]. Предложенный метод допускает очевидные обобщения для одномерных псевдоспиновых моделей с анизотропными взаимодействиями, таких как модели Изинга, Поттса, Блюма–Капеля и Блюма–Эмери–Гриффитса. Детально изучено основное состояние разбавленной цепочки Изинга в продольном магнитном поле и его трансформации, вызванные магнитным полем, и, в частности, показано, что при определенных параметрах возникает своеобразный магнитоэлектрический эффект, когда изменение внешнего магнитного поля вызывает упорядочение немагнитных примесей.

Статья организована следующим образом. В разд. 2 построены и исследованы фазовые диаграммы основного состояния, получены корреляционные функции и свойства локальных распределений фрустрированных фаз основного состояния. В разд. 3 получена общая формула и найдены концентрационные зависимости для остаточной энтропии фрустрированных фаз. Метод определения состава состояний и остаточной энтропии на межфазных границах представлен в разд. 4, где приведено также сравнение с результатами точного решения в нулевом

поле. В разд. 5 обсуждается намагниченность для состояний на границах фаз. Краткие выводы сформулированы в разд. 6.

2. Диаграмма основного состояния

Основное состояние разбавленной изинговской цепочки в нулевом магнитном поле рассмотрено в работе [19], и с учетом магнитного поля качественно описано в работе [18]. В этом разделе представлена строгая процедура получения фазовых диаграмм основного состояния модели при фиксированной концентрации примесей во внешнем магнитном поле.

Гамильтониан модели может быть записан в следующем виде [18]:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{j=1}^N S_{z,j} S_{z,j+1} + V \sum_{j=1}^N P_{0,j} P_{0,j+1} - h \sum_{j=1}^N S_{z,j}. \quad (1)$$

Здесь используется псевдоспиновый $S = 1$ оператор, где состояния спинового дублета и немагнитной примеси соответствуют проекциям $S_z = \pm 1$ и $S_z = 0$, J — обменный интеграл, $V > 0$ — эффективное межузельное взаимодействие для примесей, $P_0 = 1 - S_z^2$ — проекционный оператор на состояние примеси. Концентрация немагнитных примесей $n = \langle \sum_j P_{0,j} \rangle / N$ предполагается фиксированной. Далее будем предполагать, что рассматривается ситуация отожженной системы. Как известно, взаимодействие с $V = V_0 + V_1 - 2V_{01}$ эквивалентно взаимодействию более общего вида: $V_0 \sum_j P_{0,j} P_{0,j+1} + V_1 \sum_j P_{s,j} P_{s,j+1} + V_{01} \sum_j (P_{0,j} P_{s,j+1} + P_{s,j} P_{0,j+1})$, где $P_s = S_z^2$ — проектор на магнитные состояния.

Для заданного n энергия системы может быть выражена в виде суммы по связям. Обозначим через $N_{a,b}$ количество связей с левым узлом в состоянии a и правым узлом в состоянии b , где $a, b = 1, 0, -1$, так что $\sum_{ab} N_{a,b} = N$, и определим концентрации x_α выражениями $x_{a,a} = N_{a,a} / N$, $x_{a,b} = (N_{a,b} + N_{b,a}) / N$, $a \neq b$. Далее, индекс α соответствует неупорядоченной паре (a, b) , и $\sum_\alpha x_\alpha = 1$. Величины x_α зависят в общем случае от температуры и всех других параметров модели и выражаются через соответствующие парные функции распределения [19]. В основном состоянии энергия системы в расчете на узел, $\varepsilon = E/N$, является линейной функцией переменных x_α :

$$\varepsilon = -J(x_{1,1} + x_{-1,-1} - x_{1,-1}) + Vx_{0,0} - h \left(x_{1,1} - x_{-1,-1} + \frac{1}{2}(x_{0,1} - x_{0,-1}) \right). \quad (2)$$

Поиск минимума энергии основного состояния сводится к решению канонической задачи линейного программи-

рования

$$\begin{cases} \varepsilon(x_\alpha) \rightarrow \min, \\ x_{0,0} + \frac{1}{2}(x_{0,1} + x_{0,-1}) = n, \\ x_{1,1} + x_{-1,-1} + x_{1,-1} + \frac{1}{2}(x_{0,1} + x_{0,-1}) = n_s, \\ x_\alpha \geq 0, \end{cases} \quad (3)$$

где $n_s = 1 - n$ — концентрация спиновых узлов.

Решения задачи (3) соответствуют вершинам, ребрам или граням многогранника допустимых решений x_α . Решения в вершинах перечислены в табл. 1. Они определяют области существования фаз основного состояния на диаграмме, показанной на рис. 1. Здесь и далее m означает отклонение от половинного заполнения для концентрации примесей, $m = n - 1/2$. Намагниченность системы определяется выражением

$$M = x_{1,1} - x_{-1,-1} + \frac{1}{2}(x_{0,1} - x_{0,-1}). \quad (4)$$

Решения с 1 по 3 существуют при всех n , $0 \leq n < 1$. В отсутствие примесей, при $n = 0$, реализуется только ферромагнитное (FM) упорядочение (решения 1 и 2) и антиферромагнитное (AFM) упорядочение (решение 3), которые разделены критическим полем $|h| = -2J$ (поле спин-флип перехода). Фазовая диаграмма для этого случая показана на рис. 1, *a*. При $n \neq 0$ решения 1 и 2 описывают FM-фазы, в которых макроскопические домены ферромагнитно упорядоченных и направленных вдоль поля спинов разделены доменами немагнитных примесей. В этом случае $x_{0,0} \neq 0$ и $x_{\pm 1, \pm 1} \neq 0$, и при этом $x_{0, \pm 1} = 0$ в термодинамическом пределе. FM-фазы имеют наименьшую энергию при $J > V > 0$, $h \neq 0$. Намагниченность FM-фаз равна концентрации спиновых узлов, $M = n_s$. AFM-фаза 3 реализуется при $J < -V - |h|$, состоит из чередующихся макроскопических доменов антиферромагнитно упорядоченных спинов и примесных доменов, и имеет нулевую намагниченность.

Решения с 4 по 7 существуют только для слабо разбавленной спиновой цепочки, $0 < n < 1/2$, и их энергии не зависят от V (см. рис. 1, *b*). Значения концентраций $x_{0,0} = 0$ и $x_{0, \pm 1} = 2n$ показывают, что реализуется разбавленное AFM- или FM-состояние, где (A)FM спиновые кластеры разного размера, включая одиночные спины, разделены одиночными немагнитными примесями. Эти решения, как будет показано ниже, имеют ненулевую остаточную энтропию, поэтому фазы 4 и 5 можно назвать фрустрированными ферромагнитными (FR-FM), а фазы 6 и 7 — фрустрированными антиферромагнитными (FR-AFM). Выражения для остаточной энтропии также приведены в табл. 1. При $n = 1/2$ возникает зарядово-упорядоченное состояние, в котором спиновые и примесные узлы чередуются, а энергия не

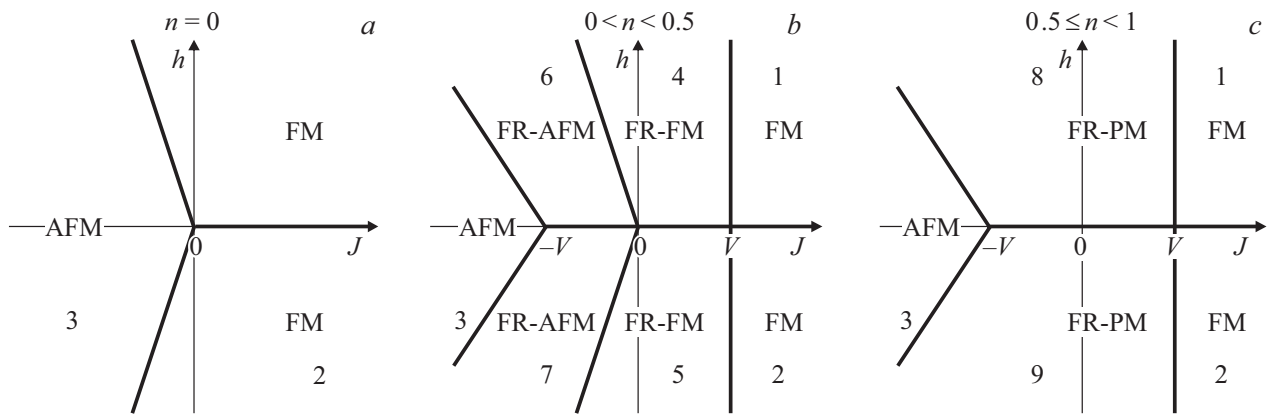


Рис. 1. Фазовые диаграммы основного состояния разбавленной одномерной модели Изинга в продольном магнитном поле в (h, J) -плоскости для (a) чистой спиновой цепочки, $n = 0$; (b) слабо разбавленной спиновой цепочки, $0 < n < 1/2$; (c) сильно разбавленной спиновой цепочки, $1/2 < n < 1$. Цифры на диаграмме соответствуют решениям в табл. 1.

Таблица 1. Состав $\{x_\alpha\}$ решений задачи (3) в вершинах многогранника допустимых решений и соответствующие значения остаточной энтропии s_0

Решение	Условие	ϵ	$x_{0,0}$	$x_{1,1}$	$x_{-1,-1}$	$x_{1,-1}$	$x_{0,1}$	$x_{0,-1}$
1		$-(J+h)n_s + Vn$	n	n_s	0	0	0	0
2		$-(J-h)n_s + Vn$	n	0	n_s	0	0	0
3		$Jn_s + Vn$	n	0	0	n_s	0	0
$s_0 = 0$ □								
4	$m < 0$	$2Jm - hn_s$	0	$-2m$	0	0	$2n$	0
5	$m < 0$	$2Jm + hn_s$	0	0	$-2m$	0	0	$2n$
$s_0 = -2 m \ln(2 m) - (\frac{1}{2} - m) \ln(\frac{1}{2} - m) + (\frac{1}{2} + m) \ln(\frac{1}{2} + m)$								
6	$m < 0$	$-2Jm - hn$	0	0	0	$-2m$	$2n$	0
7	$m < 0$	$-2Jm + hn$	0	0	0	$-2m$	0	$2n$
$s_0 = - m \ln m - (\frac{1}{2} - m) \ln(\frac{1}{2} - m) - \frac{1}{2} \ln 2$								
8	$m \geq 0$	$2Vm - hn_s$	$2m$	0	0	0	$2n_s$	0
9	$m \geq 0$	$2Vm + hn_s$	$2m$	0	0	0	0	$2n_s$
$s_0 = -2 m \ln(2 m) - (\frac{1}{2} - m) \ln(\frac{1}{2} - m) + (\frac{1}{2} + m) \ln(\frac{1}{2} + m)$								
10	$m \leq 0$	$2(J+h)m + hn$	0	$-2m$	0	0	0	$2n$
11	$m \leq 0$	$2(J-h)m - hn$	0	0	$-2m$	0	$2n$	0

зависит от констант взаимодействия J и V . Намагниченность в FR–FM-фазах равна концентрации спиновых центров, $M = n_s$, и уменьшается с увеличением n , а в FR–AFM-фазах $M = n$.

Решения с номерами 8 и 9 существуют только для сильно разбавленной спиновой цепочки, $1/2 \leq n < 1$, при $-V - |h| < J < V$ (см. рис. 1, c). Для этих решений $x_{\pm 1, \pm 1} = 0$, $x_{1, -1} = 0$, $x_{0,0} = 2m$, и при этом $x_{0, \pm 1} = 2n_s$, что соответствует фрустрированным парамагнитным фазам (FR–PM). В этих фазах направленные вдоль поля одиночные спины разделены кластерами примесей разного размера, намагниченность $M = n_s$ и энергия не зависит от J .

Для решений 10 и 11 энергия всегда выше минимальной при $h \neq 0$, но, как будет показано ниже, эти решения входят в состав состояний на границе раздела фаз $h = 0$.

Переход от AFM-фазы к фазе FR–AFM или FR–PM при заданной концентрации примесей может быть вызван изменением магнитного поля. Поле $|h| = -J - V$ (где $J < -V < 0$), которое определяет границу между AFM и фрустрированными фазами, можно назвать полем фрустрации. Когда магнитное поле становится больше поля фрустрации, проявляется своеобразный магнитоэлектрический эффект: в системе возникает зарядовое упорядочение, вызванное изменением магнитного поля. Маркерами зарядового упорядочения являются

ненулевые значения $x_{0,\pm 1}$ в фазах FR–AFM и FR–PM (см. табл. 1), в то время как в фазе AFM $x_{0,\pm 1} = 0$. Параметр зарядового порядка достигает максимума при половинном заполнении, $m = 0$, и в этом случае изменение основного состояния проявится наиболее отчетливо: разбавленное AFM-состояние при $|h| < -J - V$, которое состоит из макроскопических AFM-доменов и примесных доменов и имеет нулевую намагниченность, сменяется зарядово-упорядоченным состоянием при $|h| > -J - V$, в котором спиновые и примесные центры чередуются, а намагниченность принимает значение $M = 1/2$.

С помощью данных в табл. 1 можно также определить вид корреляционных функций и вычислить характеристики локальных распределений состояний в спиновой цепочке [19], которые дополняют описание фазовых состояний системы.

Парные функции распределения $\langle P_{a,k} P_{b,k+l} \rangle$, где $P_{a,k}$ — проектор на состояние $a = 1, 0, -1$ на узле k , можно найти [19] с помощью матрицы условных вероятностей $\mathcal{P}_{ab} = P(a|b)$:

$$\langle P_{a,k} P_{b,k+l} \rangle = \mathcal{P}_{ab}^l P(b). \quad (5)$$

Условная вероятность $P(a|b)$, что i -й узел находится в состоянии a , при условии, что $(i+1)$ -й узел находится в состоянии b однозначно определяется типом связи. Если $a = b$, то $x_{a,a} = P(aa) = P(a)P(a|a)$. Вероятности $P(a)$ равны концентрациям узлов в соответствующих состояниях, $P(a) = x_{a,a} + 1/2 \sum_{b \neq a} x_{a,b}$. Учитывая равноправие двух направлений вдоль цепочки, получим, что для $a \neq b$ должны выполняться равенства $N_{a,b} = N_{b,a} = 1/2 x_{a,b} N$ и $P(ab) = P(ba)$, откуда следует, что $x_{a,b} = 2P(ab) = 2P(a|b)P(b)$. Далее можно вычислить корреляционные функции $K_{ab}(l) = \langle P_{a,k} P_{b,k+l} \rangle - \langle P_a \rangle \langle P_b \rangle$, и, с учетом равенства $S_{z,k} = P_{1,k} - P_{-1,k}$, спиновую корреляционную функцию $C(l) = \langle S_{z,k} S_{z,k+l} \rangle - \langle S_z \rangle^2$.

Для FR–FM-фазы при $h > 0$ и $m < 0$ состояния $a = -1$ нет, $P(1) = 1/2 + |m|$, $P(0) = 1/2 - |m|$. Матрица условных вероятностей на состояниях $a = 1, 0$ имеет вид

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} \frac{4|m|}{1+2|m|} & 1 \\ \frac{1-2|m|}{1+2|m|} & 0 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Используя (5), найдем парные функции распределения для примесей и для спинов

$$\langle P_{0,k} P_{0,k+l} \rangle = \left(\frac{1}{2} - |m| \right)^2 + (-1)^l \left(\frac{1}{4} - m^2 \right) \left(\frac{1-2|m|}{1+2|m|} \right)^l, \quad (7)$$

$$\langle S_{z,k} S_{z,k+l} \rangle = \left(\frac{1}{2} + |m| \right)^2 + (-1)^l \left(\frac{1}{4} - m^2 \right) \left(\frac{1-2|m|}{1+2|m|} \right)^l. \quad (8)$$

Первые слагаемые в этих выражениях равны $\langle P_0 \rangle^2$ и $\langle S_z \rangle^2$ соответственно, поэтому

$$K_{00}(l) = C(l) = (-1)^l \left(\frac{1}{4} - m^2 \right) e^{-l/\xi},$$

$$\xi = \left[\ln \left(\frac{1+2|m|}{1-2|m|} \right) \right]^{-1}. \quad (9)$$

Корреляционная длина ξ становится бесконечной при $m = 0$, то есть при половинном заполнении цепочки примесями.

Для FR–AFM-фазы при $h > 0$ и $m < 0$ имеем $P(1) = 1/2$, $P(0) = 1/2 - |m|$, $P(-1) = |m|$, и матрица условных вероятностей на состояниях $a = 1, 0, -1$ принимает вид

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1-2|m| & 0 & 0 \\ |m| & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Соответствующие корреляционные функции характеризуются бесконечной корреляционной длиной

$$K_{00}(l) = (-1)^l \left(\frac{1}{2} - |m| \right)^2, \quad C(l) = (-1)^l \left(\frac{1}{2} + |m| \right)^2. \quad (11)$$

Отметим, что в нулевом поле [19] при $|J| < V$ примесные корреляционные функции одинаковы для $J > 0$ и $J < 0$, и корреляционная длина при $T = 0$ для примесей описывается выражением (9). Спиновая корреляционная длина ξ_{s0} также конечна, но имеет другое значение

$$C_0(l) = (\pm 1)^l \left(\frac{1}{2} + |m| \right) e^{-l/\xi_{s0}}, \quad \xi_{s0} = \left[\ln \left(\frac{1+2|m|}{4|m|} \right) \right]^{-1}, \quad (12)$$

где $+1$ и -1 соответствуют $J > 0$ и $J < 0$.

Для FR–PM-фазы при $h > 0$ и $m > 0$ состояния $a = -1$ нет, $P(1) = 1/2 + |m|$, $P(0) = 1/2 - |m|$. Матрица условных вероятностей на состояниях $a = 1, 0$ имеет вид

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1-2|m|}{1+2|m|} \\ 1 & \frac{4|m|}{1+2|m|} \end{pmatrix}. \quad (13)$$

а выражения для корреляционных функций FR–PM- и FR–FM-фаз совпадают. На границе FR–PM-фазы, при $h = 0$ и $m > 0$, примесная корреляционная функция сохраняет свой вид, а спиновая корреляционная функция равна нулю [19].

В дополнение, рассмотрим характеристики локальных распределений состояний по узлам цепочки. Обозначим σ упорядоченный набор из k соседних узлов в заданных состояниях: $\sigma \equiv a_1, a_2, \dots, a_k$. Пусть (σ) — последовательность из некоторого числа повторяющихся блоков σ , ее длину обозначим $l_{(\sigma)}$. Вероятности $p(l_{(\sigma)})$

реализации данного значения $l(\sigma)$ подчиняются [19] геометрическому распределению

$$p(l(\sigma)) = (1 - q(\sigma))q(\sigma)^{l-1}, \quad (14)$$

где l — количество блоков в последовательности (σ) , а $q(\sigma)$ имеет смысл вероятности цикла из состояний σ :

$$q(\sigma) = P(a_1|a_2) \dots P(a_{k-1}|a_k)P(a_k|a_1). \quad (15)$$

Средняя длина периодической последовательности (σ) и ее дисперсия имеют вид

$$\bar{l}(\sigma) = \frac{1}{1 - q(\sigma)}, \quad D(l(\sigma)) = \frac{q(\sigma)}{(1 - q(\sigma))^2}. \quad (16)$$

Найдем, для примера, в фазе FR–FM при $h > 0$ среднюю длину спиновой последовательности, которая в данном случае имеет вид $(\sigma) = (1)$. Используя формулы (6) и (15), получим

$$q(1) = \frac{4|m|}{1 + 2|m|}, \quad \bar{l}(1) = \frac{1 + 2|m|}{1 - 2|m|}. \quad (17)$$

Средняя длина спиновой последовательности максимальна при $m = -1/2$ и достигает минимального значения $\bar{l}(1) = 1$ при половинном заполнении, $m = 0$. Для последовательности примесей $\bar{l}(0) = 1$, что соответствует ситуации изолированных примесей. Для зарядово-упорядоченной последовательности $(\sigma) = (01)$ получим

$$\bar{l}(01) = \frac{1 + 2|m|}{4|m|}. \quad (18)$$

Как видно, при половинном заполнении $\bar{l}(01)$ становится бесконечной.

В фазе FR–PM, при $h > 0$ и $m > 0$, состояния 0 и 1 меняются местами: в этом случае отдельные спины, направленные по полю, разделены последовательностями примесей со средней длиной

$$\bar{l}(0) = \frac{1 + 2|m|}{1 - 2|m|}.$$

Выражение (18) для $\bar{l}(01)$ сохраняется.

В фазе FR–AFM любая последовательность $(\sigma) = (a)$, где $a = 1, 0, -1$, имеет минимальную длину $\bar{l}(a) = 1$, а для антиферромагнитной последовательности $(\sigma) = (-11)$ средняя длина

$$\bar{l}(-11) = \frac{1}{1 - 2|m|} \quad (19)$$

становится бесконечной при отсутствии примесей. Однако, если объединить спиновые состояния в одно состояние s , используя проектор $P_s = P_1 + P_{-1}$, то картина изменится. Для спиновой последовательности $(\sigma) = (s)$ и для зарядово-упорядоченной последовательности $(\sigma) = (0s)$ получим

$$\bar{l}(s) = \frac{1 + 2|m|}{1 - 2|m|}, \quad \bar{l}(0s) = \frac{1 + 2|m|}{4|m|}. \quad (20)$$

С этой точки зрения FR–FM- и FR–AFM-фазы эквивалентны. Отметим, что эти свойства локальных распределений сохраняются и при нулевом поле [19].

3. Общее выражение для остаточной энтропии разбавленной цепочки Изинга в магнитном поле

Используя марковское свойство разбавленной цепочки Изинга [19], запишем вероятность состояния $a_1, a_2 \dots a_N$ замкнутой цепочки из N -узлов ($N \gg 1$):

$$P_O(a_1, a_2 \dots a_N) = P(a_1|a_2)P(a_2|a_3) \dots P(a_N|a_1) = \prod_{ab} P(a|b)^{N_{ab}} = p_0^N, \quad (21)$$

где

$$p_0 = \left(\frac{x_{0,0}}{P(0)}\right)^{x_{0,0}} \left(\frac{x_{1,1}}{P(1)}\right)^{x_{1,1}} \left(\frac{x_{-1,-1}}{P(-1)}\right)^{x_{-1,-1}} \times \sqrt{\left(\frac{x_{1,-1}^2}{4P(1)P(-1)}\right)^{x_{1,-1}} \left(\frac{x_{0,1}^2}{4P(0)P(1)}\right)^{x_{0,1}} \left(\frac{x_{0,-1}^2}{4P(0)P(-1)}\right)^{x_{0,-1}}}. \quad (22)$$

Энергия основного состояния (2) определяется значениями x_α . Предполагая, что для основного состояния справедливо микроканоническое распределение, найдем статистический вес Γ основного состояния и остаточную энтропию s_0 :

$$\Gamma = P_O^{-1}, \quad s_0 = \frac{\ln \Gamma}{N} = -\ln p_0. \quad (23)$$

С учетом (22), получим

$$s_0 = -\sum_\alpha x_\alpha \ln x_\alpha + P_2 \ln 2 + \sum_a P(a) \ln P(a), \quad (24)$$

где введена общая концентрация пар из различных состояний $P_2 = x_{1,-1} + x_{0,1} + x_{0,-1}$.

Уравнение (24) позволяет найти концентрационную зависимость остаточной энтропии при известном составе $\{x_\alpha\}$ основного состояния. Чтобы решить эту задачу в рамках стандартного подхода, необходимо найти наибольшее собственное значение трансфер-матрицы, определить параметрическую зависимость энтропии от концентрации, используя в качестве параметра химический потенциал, и найти предел при нулевой температуре. Для разбавленной цепочки Изинга в магнитном поле это можно сделать только численно [18], в то время как формула (24) дает точный аналитический результат.

В табл. 1 приведены выражения для остаточной энтропии различных фаз основного состояния. FM- и AFM-решения имеют нулевую энтропию. Решения с 4 по 9 имеют ненулевую остаточную энтропию для всех концентраций примесей, за исключением значений $n = 0, 0.5$ и 1. Отметим, для FR–FM- и FR–PM-решений энтропия имеет одинаковую зависимость от $|m|$, демонстрируя своеобразную симметрию примесных и спиновых состояний в FM-фазах, и при заданной концентрации эта величина больше, чем энтропия FR–AFM-состояний.

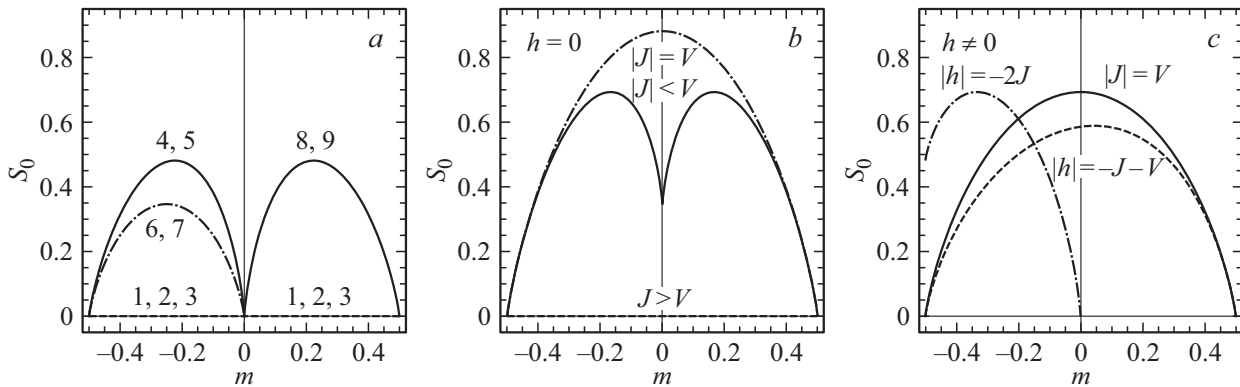


Рис. 2. Концентрационные зависимости остаточной энтропии разбавленной цепочки Изинга для (a) фазовых состояний, приведенных в табл. 1, (b, c) состояний на границах раздела фаз при $h = 0$ и при $h \neq 0$, приведенных в табл. 2.

Концентрационные зависимости остаточной энтропии для решений с 1 по 9 показаны на рис. 2, a. Полученные зависимости согласуются с поведением энтропии при низких температурах, которое было получено путем численного решения системы нелинейных алгебраических уравнений в рамках большого канонического ансамбля [18]. Представленный здесь метод позволяет исследовать поведение остаточной энтропии аналитически. Для FR–FM- и FR–PM-фаз энтропия имеет максимумы

$$s_{0,\max} = -\frac{1}{2} \ln \frac{\sqrt{5} - 1}{\sqrt{5} + 1} \approx 0.481$$

при $m = \pm \frac{1}{2\sqrt{5}} \approx \pm 0.224$,

а для FR–AFM-фазы максимум

$$s_{0,\max} = \frac{1}{2} \ln 2 \approx 0.347 \text{ достигается при } m = -\frac{1}{4}.$$

4. Остаточная энтропия состояний на границе между фазами

Яркой особенностью декорированных изинговских 1D-моделей, связанной с наличием фрустрированных фаз в основном состоянии этих систем, являются псевдопереходы [2–12]. При псевдопереходе происходит скачкообразное изменение состояния одномерной системы при конечной температуре, за счет чего некоторые термодинамические функции демонстрируют очень резкие особенности, хотя и остаются непрерывными. Энтропия и намагниченность в магнитном поле характеризуются ступенчатой зависимостью от температуры, а теплоемкость, восприимчивость и корреляционная длина имеют ярко выраженные максимумы. В отличие от обычных фазовых переходов, состояние системы при температурах выше точки псевдоперехода характеризуется фрустрированной фазой, которая оказывается более выгодной за счет энтропийного вклада в свободную энергию. Температура псевдоперехода является функцией параметров системы, включая магнитное поле. Это

предполагает возможность управления псевдопереходом и связанным с ним тепловым эффектом с помощью магнитного поля.

Для предсказания псевдоперехода критически важно знать точные значения остаточной энтропии для всех значений параметров системы и, в частности, на границах между фазами основного состояния на фазовой диаграмме. Согласно критерию Рохаса [10,11], псевдопереход реализуется вблизи границы с фрустрированной фазой, если энтропия на самой границе равна энтропии фрустрированной фазы. Такая ситуация встречается довольно редко, и поэтому само по себе наличие в системе фрустрированной фазы не означает существование псевдоперехода.

Энергии соседних фаз на фазовой диаграмме становятся равны на границе между фазами, поэтому состояние на границе должно быть смесью соседних фаз, если только такое смешивание не приводит к увеличению энергии системы. Определим коэффициенты c_n как варьируемые параметры в линейных комбинациях $x_\alpha = \sum_n c_n x_\alpha^{(n)}$, где x_α — неизвестные концентрации для состояния на границе, а $x_\alpha^{(n)}$ — найденные концентрации для соседних фаз. Коэффициенты c_n будем искать из принципа максимума энтропии. Используя формулу (24) для s_0 , получим нелинейную задачу оптимизации

$$\begin{cases} s_0(c_n) \rightarrow \max, \\ \sum_n c_n = 1, \\ c_n \geq 0. \end{cases} \quad (25)$$

Результаты для границы между фазами основного состояния при $h = 0$ перечислены в табл. 2. Отметим, что для получения состояний при $m < 0$, $0 < J \leq V$ необходимо учитывать решения 10 и 11 из табл. 1. Сравним эти результаты с точным решением в случае нулевого поля [19]. Определим трансфер-матрицу для гамильтониана $\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H} - \mu \sum_j P_{0,j}$, μ — химический по-

Таблица 2. Состав $\{x_\alpha\}$ и остаточная энтропия s_0 на границах между фазами основного состояния. Номера фаз, входящих в линейную комбинацию приведены в первом столбце, необходимое условие существования решения — во втором столбце

Решение	Условие	$x_{0,0}$	$x_{1,1}$	$x_{-1,-1}$	$x_{1,-1}$	$x_{0,1}$	$x_{0,-1}$
1, 2	$h = 0$ $J > V$	n	$\frac{1}{2} n_s$	$\frac{1}{2} n_s$	0	0	0
$s_0 = 0$ □							
4, 5, 10, 11 6, 7 8, 9	$h = 0$ $0 < J < V$ $-V < J < 0$ $ J < V$	0 0 $2m$	$-m$ 0 0	$-m$ 0 0	0 $-2m$ 0	n n n_s	n n n_s
$s_0 = -2 m \ln(2 m) - (\frac{1}{2} - m) \ln(\frac{1}{2} - m) + (\frac{1}{2} + m) \ln(\frac{1}{2} + m) + (\frac{1}{2} - m) \ln 2$ □							
1, 2, 4, 5, 10, 11 1, 2, 8, 9 3, 6, 7 3, 8, 9	$h = 0$ $J = V$ $J = V$ $J = -V$ $J = -V$	$x^* + m$ $x^* + m$ $x^* + m$ $x^* + m$	$\frac{x^* - m}{2}$ $\frac{x^* - m}{2}$ 0 0	$\frac{x^* - m}{2}$ $\frac{x^* - m}{2}$ 0 0	0 0 $x^* - m$ $x^* - m$	$\frac{1}{2} - x^*$ $\frac{1}{2} - x^*$ $\frac{1}{2} - x^*$ $\frac{1}{2} - x^*$	$\frac{1}{2} - x^*$ $\frac{1}{2} - x^*$ $\frac{1}{2} - x^*$ $\frac{1}{2} - x^*$
$s_0 = (\frac{1}{2} + m) \ln \frac{1+2m}{2x^*+2m} + (\frac{1}{2} - m) \ln \frac{1-2m}{2x^*-2m}$ □							
1, 4 2, 5 1, 8 2, 9	$J = V$ $h > 0$ $h < 0$ $h > 0$ $h < 0$	n^2 n^2 n^2 n^2	n_s^2 0 n_s^2 0	0 n_s^2 0 n_s^2	0 0 0 0	$2nn_s$ 0 $2nn_s$ 0	0 $2nn_s$ 0 $2nn_s$
$s_0 = -(\frac{1}{2} - m) \ln(\frac{1}{2} - m) - (\frac{1}{2} + m) \ln(\frac{1}{2} + m)$							
3, 6 3, 7 3, 8 3, 9	$J = -V - h $ $h > 0$ $h < 0$ $h > 0$ $h < 0$	x_0 x_0 x_0 x_0	0 0 0 0	0 0 0 0	x_1 x_1 x_1 x_1	x_2 0 x_2 0	0 x_2 0 x_2
$s_0 = -(\frac{1}{2} + m) \ln(1 - \mu\alpha) + \frac{1}{2} (\frac{1}{2} - m) \ln \frac{1+\alpha}{1-\alpha}$							
4, 6 5, 7	$J = - h /2$ $h > 0$ $h < 0$	0 0	$-2m - x^{**}$ 0	0 $-2m - x^{**}$	x^{**} x^{**}	$2n$ 0	0 $2n$
$s_0 = -(\frac{1}{2} + m) \ln(1 + 2m) + \frac{1}{2} \ln(1 - 2m - x^{**}) + m \ln x^{**}$							

тенциал, при $h = 0$ выражением

$$\mathcal{F} = \begin{pmatrix} e^K & e^{\xi/2} & e^{-K} \\ e^{\xi/2} & e^{-W+\xi} & e^{\xi/2} \\ e^{-K} & e^{\xi/2} & e^K \end{pmatrix}, \quad (26)$$

где $K = \beta J$, $W = \beta V$, $\xi = \beta \mu$, $\beta = 1/\theta$ и $\theta = k_B T$. Преобразование

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & \eta_2 & \eta_3 \\ 0 & A\eta_2 & B\eta_3 \\ -1 & \eta_2 & \eta_3 \end{pmatrix}, \quad (27)$$

где $AB = -2$ и $\eta_{2,3}$ — нормирующие множители, диагонализует \mathcal{F} :

$$\tilde{\mathcal{F}} = U^+ T U = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}, \quad (28)$$

$$\lambda_1 = 2 \operatorname{sh} K, \quad (29)$$

$$\lambda_{2,3} = \operatorname{ch} K + \frac{e^{-W+\xi}}{2} \mp \left[2e^{\xi} + \left(\operatorname{ch} K - \frac{e^{-W+\xi}}{2} \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (30)$$

Максимальное собственное значение λ_3 позволяет записать большой потенциал Ω и концентрацию примесей n , как функцию химического потенциал

$$\Omega = N\omega = -N\theta \ln \lambda_3, \quad n = \frac{1}{\lambda_3} \frac{\partial \lambda_3}{\partial \xi}. \quad (31)$$

Последнее выражение приводит к квадратному уравнению для активности e^ξ , имеющему корни

$$(e^\xi)_\pm = \frac{8e^{2W}}{1-4m^2} (g \pm m)^2, \quad (32)$$

где

$$g = \left[m^2 + \left(\frac{1}{4} - m^2 \right) e^{-W} \operatorname{ch} K \right]^{1/2}. \quad (33)$$

Для идеальной системы с $K = 0$ и $W = 0$ можно непосредственно получить

$$e^\xi = (1 + 2m) / \left(\frac{1}{2} - m \right),$$

что определяет выбор корня

$$e^\xi = (e^\xi)_+ = 2e^W \frac{g+m}{g-m} \operatorname{ch} K. \quad (34)$$

Это позволяет исключить в выражениях для собственных значений химический потенциал

$$\lambda_{2,3} = \frac{2g \mp 1}{g-m} \operatorname{ch} K, \quad (35)$$

и выразить матричные элементы U :

$$\eta_2 = \sqrt{\frac{1}{2} + m}, \quad \eta_3 = \sqrt{\frac{1}{2} - m},$$

$$A\eta_2 = -\sqrt{1-2m}, \quad B\eta_3 = \sqrt{1+2m}.$$

С помощью найденных величин можно найти концентрационные зависимости всех термодинамических параметров модели в нулевом поле [19], включая парные функции распределения

$$\langle P_{a,k} P_{b,k+1} \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\operatorname{Tr}(P_a \mathcal{T}^N P_b \mathcal{T}^{N-1})}{\operatorname{Tr}(\mathcal{T}^N)}, \quad (36)$$

где $P_{a,k}$ — оператор проекции на узле k на одно из базисных состояний $a = \pm 1, 0$, соответствующее $S_z = \pm 1, 0$.

В данном случае необходимы парные функции распределения для ближайших соседей, поскольку $\langle P_{a,k} P_{b,k+1} \rangle = P(ab)$. Эти функции имеют следующий вид:

$$\langle P_{0,k} P_{0,k+1} \rangle = \frac{(1+2m)(g+m)}{2g+1}, \quad (37)$$

$$\langle P_{\pm 1,k} P_{\pm 1,k+1} \rangle = \frac{(1-2m)(g-m)e^K}{4(2g+1) \operatorname{ch} K}, \quad (38)$$

$$\langle P_{\pm 1,k} P_{\pm 1,k+1} \rangle = \frac{(1-2m)(g-m)e^{-K}}{4(2g+1) \operatorname{ch} K}, \quad (39)$$

$$\langle P_{0,k} P_{\pm 1,k+1} \rangle = \langle P_{\pm 1,k} P_{0,k+1} \rangle = \frac{1-4m^2}{4(2g+1)}. \quad (40)$$

В пределе при $T \rightarrow 0$ для входящей в эти формулы величины g из (33) получим:

$$g \xrightarrow{T \rightarrow 0} \begin{cases} e^{(J-V)2/\theta}, & J > V; \\ |m|, & |J| < V; \\ \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{4} + m^2 \right)}, & |J| = V. \end{cases} \quad (41)$$

С учетом этих выражений, в пределе при $T \rightarrow 0$ получим все величины x_α , приведенные в табл. 2 для случая $h = 0$. Это подтверждает правильность формулы (24) для остаточной энтропии и метода (25) для нахождения энтропии состояний на фазовой границе.

Решения на границах между фазами основного состояния перечислены в табл. 2. Введены следующие обозначения:

$$x_0 = \left(\frac{1}{2} + m \right) (1 - \mu\alpha), \quad x_1 = \left(\frac{1}{2} - m \right) (1 - \alpha),$$

$$x_2 = (1 - 2m)\alpha,$$

$$x^* = \sqrt{\frac{1}{2} + 2m^2} - \frac{1}{2},$$

$$x^{**} = \frac{1}{5} \left(\frac{1}{2} - 9m - \sqrt{\frac{1}{4} - 9m + m^2} \right).$$

Здесь параметр α определяется из уравнения

$$(1 - \mu\alpha) \sqrt{1 - \alpha^2} = 2\mu\alpha^2, \quad \mu = \frac{1 - 2m}{1 + 2m}. \quad (42)$$

Если $m > 0$, то $0 \leq \alpha \leq 1$, а если $m < 0$, то $0 \leq \alpha \leq 1/\mu$.

Решения в табл. 2 разделены на группы, имеющих одинаковые концентрационные зависимости энтропии. Найденные концентрационные зависимости энтропии при $h = 0$ совпадают с полученными ранее [19] из точного решения для разбавленной цепочки Изинга в нулевом поле в пределе при $T \rightarrow 0$, что снова является проверкой правильности формулы (24). Энтропия состояний при $h = 0$ и $|J| < V$ имеет два максимума:

$$s_{0,\max} = \ln 2 \approx 0.693 \text{ при } m = \pm 1/6 \text{ и локальный минимум,}$$

$$s_{0,\max} = \frac{1}{2} \ln 2 \approx 0.347 \text{ при } m = 0.$$

При $h = 0$ и $J = V$ энтропия имеет максимум

$$s_{0,\max} = \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 0.881 \text{ при } m = 0.$$

На границе между FM и фрустрированными фазами, $J = V$, $h \neq 0$, энтропия симметрична относительно $m = 0$ и имеет максимум

$$s_{0,\max} = \ln 2 \approx 0.693 \text{ при } m = 0.$$

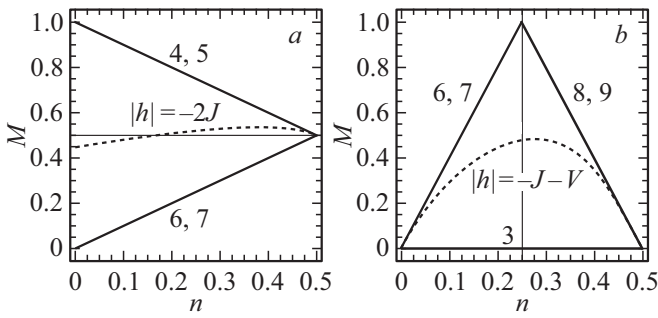


Рис. 3. Концентрационные зависимости намагниченности. Числа рядом со сплошными линиями соответствуют состояниям в табл. 1, уравнения рядом со штриховыми кривыми соответствуют границам между фазами основного состояния.

Энтропия состояний на границе между AFM и фрустрированными фазами, $|h| = -J - V$ при $J < -V < 0$, не симметрична относительно $m = 0$ и достигает максимума $s_{0,\max} \approx 0.589$ при $m = 0.043$. На границе, соответствующей полю спин-флипа, $m < 0$, $J = -|h|/2$, $h \neq 0$, энтропия имеет максимум

$$s_{0,\max} = \ln 2 \text{ при } m = -\frac{1}{3}.$$

Вид концентрационных зависимостей остаточной энтропии из табл. 2 показан на рис. 2, *b* и *c*.

Во всех рассмотренных случаях энтропия состояний на границе между фазами основного состояния выше, чем энтропия соседних фаз. Используя критерий Рохаса [10,11], можно сделать вывод, что в одномерной разбавленной модели Изинга псевдопереход не реализуются.

5. Намагниченность состояний на межфазных границах

Намагниченность состояний на межфазных границах можно найти по формуле (4), используя решения в табл. 2. Намагниченность на границе между фазами FM и FR-FM, $J = V$, $h \neq 0$, совпадает с намагниченностью для этих фаз: $M = n_s = 1/2 - m$. На границе, соответствующей полю спин-флипа, $|h| = -2J$, намагниченность имеет следующий вид:

$$M = \frac{1}{5} \left(2 + 4m + \sqrt{\frac{1}{4} - 9m + m^2} \right). \quad (43)$$

На границе, соответствующей полю фрустрации, $|h| = -V - J$, получим

$$M = \alpha \left(\frac{1}{2} - m \right), \quad (44)$$

где α определяется уравнением (42).

На рис. 3 показаны концентрационные зависимости намагниченности для состояний фаз и состояний на границах между фазами при $h \neq 0$. На границах намагниченность демонстрирует нелинейную зависимость от m и имеет промежуточное значение по сравнению с намагниченностью соседних фаз. Намагниченность (43) показана на рис. 3, *a*. Ее значение для чистой спиновой цепочки равно $M_0 = \frac{1}{\sqrt{3}} \approx 0.447$ и достигает максимума $M_{\max} = 4 - 2\sqrt{3} \approx 0.536$ при $m = 9/2 - 8/\sqrt{3} \approx -0.119$. При $m = 0$ фазы FR-FM и FR-FM преобразуются в фазу FR-PM, так что все три зависимости сливаются в одну, $M = n_s$. Намагниченность (44) на границе между AFM и фрустрированными фазами показана на рис. 3, *b*. Отметим, что эта кривая не симметрична относительно линии $m = 0$ и имеет максимум $M_{\max} \approx 0.242$ при $m \approx 0.055$.

6. Заключение

В работе представлен расчет и анализ фазовых диаграмм основного состояния разбавленной цепочки Изинга в магнитном поле при фиксированной концентрации примесей; найдены и проанализированы корреляционные функции и свойства локальных распределений для фрустрированных фаз, а также получено общее выражение для энтропии фрустрированных состояний, основанное на марковском свойстве системы, и представлен метод вычисления энтропии состояний на границах фаз. Эти методы допускают обобщение на другие одномерные модели с взаимодействиями типа Изинга. Показано, что в магнитном поле основное состояние системы остается фрустрированным, если значения обменного интеграла удовлетворяют неравенству $-|h| - V < J < V$. При увеличении магнитного поля в AFM-фазе до значений больших, чем поле фрустрации $|h| = -J - V$, в системе возникает зарядовое упорядочение. Максимум этого эффекта наблюдается при половинном заполнении спиновой цепочки примесями. Найдены явные концентрационные зависимости намагниченности для состояний на границах фаз, которые проявляют нелинейное поведение, в то время как для соседних фаз намагниченность линейна по концентрации примесей. Полученные выражения для остаточной энтропии воспроизводят известные аналитические результаты в нулевом магнитном поле, что является проверкой правильности предложенных методов. Показано, что остаточная энтропия состояний на границах фаз всегда выше энтропии соседних фаз, что доказывает отсутствие псевдопереходов в разбавленной цепочке Изинга. Для появления псевдоперехода необходима такая модификация системы, при которой фрустрированная фаза не образует смешанных состояний с низкоэнтропийной фазой на границе раздела фаз.

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, проект FEUZ-2023-0017.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] E.C. Цуварев, Ф.А. Кассан-Оглы. ЖЭТФ **160**, 2, 232 (2021).
- [2] O. Rojas, J. Strečka, S.M. de Souza. Solid State Commun. **246**, 68 (2016).
- [3] I.M. Carvalho, J. Torrico, S.M. de Souza, M. Rojas, O. Rojas. JMMM **465**, 323 (2018).
- [4] I.M. Carvalho, J. Torrico, S.M. de Souza, O. Rojas, O. Derzhko. Ann. Phys. **402**, 45 (2019).
- [5] O. Rojas, S.M. de Souza, J. Torrico, L.M. Verissimo, M.S.S. Pereira, M.L. Lyra. Phys. Rev. E **103**, 4, 042123 (2021).
- [6] L. Gálisová, J. Strečka. Phys. Rev. E **91**, 2, 022134 (2015).
- [7] S.M. de Souza, O. Rojas. Solid State Commun. **269**, 131 (2018).
- [8] J. Strečka, R.C. Alécio, M.L. Lyra, O. Rojas. JMMM **409**, 124 (2016).
- [9] O. Rojas, J. Strečka, M.L. Lyra, S.M. de Souza. Phys. Rev. E **99**, 4, 042117 (2019).
- [10] O. Rojas. Acta Phys. Pol. A **137**, 5, 933 (2020).
- [11] O. Rojas. Braz J. Phys. **50**, 6, 675 (2020).
- [12] Y. Panov, O. Rojas. Phys. Rev. E **103**, 6, 062107 (2021).
- [13] F. Rys, A. Hintermann. Helv. Phys. Acta **42**, 4, 608 (1969).
- [14] M.P. Kawatra, L.J. Kijewski. Phys. Rev. **183**, 1, 291 (1969).
- [15] F. Matsubara, K. Yoshimura, S. Katsura. Can. J. Phys. **51**, 10, 1053 (1973).
- [16] Y. Termonia, J. Deltour. J. Phys. C **7**, 24, 4441 (1974).
- [17] Б.Я. Балагуров, В.Г. Вакс, З.О. Зайцев. ФТТ **16**, 8, 2302 (1974). [B.Y. Balagurov, V.G. Vaks, R.O. Zaitsev. Sov. Phys. Solid State **16**, 8, 1498 (1975).]
- [18] A.V. Shadrin, Yu.D. Panov. JMMM **546**, 168804 (2022).
- [19] Yu.D. Panov. JMMM **514**, 167224 (2020).

Редактор Т.Н. Василевская