

С.В. Сёмкин<sup>1</sup>  
В.П. Смагин<sup>2</sup>

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса  
Владивосток. Россия

## Одномерная модель Изинга с подвижными примесями\*

Решена одномерная модель Изинга с подвижными немагнитными примесями. Для этой модели найдены корреляционные функции. Показано, что с помощью подбора параметров межатомного взаимодействия систему с подвижными примесями, находящимися в термодинамическом равновесии, можно приблизить к системе с замороженными примесями.

**Ключевые слова и словосочетания:** фазовые переходы, модель Поттса, решетка Бете.

S.V. Semkin  
V.P. Smagin

Vladivostok State University of Economics and Service  
Vladivostok. Russia

## The one-dimensional Ising model with mobile impurities

We solve the one-dimensional Ising model with movable magnetic impurities. For this model, we found the correlation functions. It is shown that using the selection parameters of interatomic interaction, mobile system with impurities that are in thermodynamic equilibrium, can be approximated to a system with frozen impurities.

**Keywords:** phase transitions, Potts model, Bethe lattice.

Частным случаем решетки Бете [1, 2] является одномерная цепочка подвижных магнитных и немагнитных атомов, для которой можно построить точное решение с помощью трансфер-матрицы [1]. Это решение обладает тем преимуществом, что оно позволяет сравнительно легко рассчитать корреляционную функцию.

Запишем статистическую сумму одномерной цепочки, состоящей из  $N$  узлов, в следующем виде:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left\{\sum_{i=1}^N (K\sigma_i\sigma_{i+1} + L\sigma_i^2\sigma_{i+1}^2 + r\sigma_i^2 + h_e\sigma_i)\right\}, \quad (1)$$

где  $r = \mu/kT$  и используется циклическое граничное условие  $\sigma_1 = \sigma_{N+1}$ .

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

<sup>2</sup> Виктор Павлович Смагин – д-р. физ.-мат. наук, зав. лаб. геофизических полей; e-mail: Li15@rambler.ru.

\* Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ по заданию № 2014/292 на выполнение государственных работ в сфере научной деятельности в рамках базовой части государственного задания.

Вычислив тем или иным способом (1) можно найти химический потенциал и спонтанную намагниченность из следующих соотношений:

$$pM = \frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z_N}{\partial h_e} \quad \text{и} \quad p = \frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z_N}{\partial r}. \quad (2)$$

Для вычисления  $Z_N$  воспользуемся следующим способом [1]. Рассмотрим трансфер-матрицу  $V$ :

$$V = \begin{pmatrix} 1 & e^{(r+h_e)/2} & e^{(r-h_e)/2} \\ (r+h_e)/2 & e^{K+L+r+h_e} & e^{-K+L+r} \\ (r-h_e)/2 & e^{-K+L+r} & e^{K+L+r-h_e} \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Если  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$  и  $\lambda_3$  – собственные числа матрицы (3), то статистическая сумма (1) равна  $Z_N = \lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N$ . Пусть  $\lambda_1$  есть максимальное из собственных чисел матрицы  $V$ . Тогда в термодинамическом пределе ( $N \rightarrow \infty$ ) формулы (2) перейдут в

$$pM = \frac{\partial \ln \lambda_1}{\partial h_e} \quad \text{и} \quad p = \frac{\partial \ln \lambda_1}{\partial r}. \quad (4)$$

Собственные числа (3) находятся из характеристического уравнения:

$$\lambda^3 + a\lambda^2 + b\lambda + c = 0, \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} a &= -(1 + 2e^{(1+\gamma)K+r} \operatorname{ch}(h_e)) \\ b &= 2(e^{2(\gamma K+r)} \operatorname{sh}(2K) + (e^{(1+\gamma)K} - 1)e^r \operatorname{ch}(h_e)) \\ c &= -4e^{\gamma K+2r} (e^{\gamma K} \operatorname{ch}(K) - 1) \operatorname{sh}(K). \end{aligned}$$

Дифференцируя (4) по  $r$  и по  $h_e$  и используя (5), можно записать выражения для нахождения  $M$  и  $r$  через  $\lambda_1$  и производные коэффициентов  $a$ ,  $b$  и  $c$ :

$$pM = -\frac{\lambda_1 \frac{\partial a}{\partial h_e} + \frac{\partial b}{\partial h_e}}{3\lambda_1^2 + 2a\lambda_1 + b}, \quad p = -\frac{\lambda_1^2 \frac{\partial a}{\partial r} + \lambda_1 \frac{\partial b}{\partial r} + \frac{\partial c}{\partial r}}{(3\lambda_1^2 + 2a\lambda_1 + b)\lambda_1}. \quad (6)$$

Решая (5) численно или по формулам Кардано и находя  $\lambda_1$ , можно, используя (6), найти зависимость намагниченности  $M$  от  $p$  и  $h_e$ .

Определим для модели Изинга с подвижными примесями корреляционные функции. Ковариацию величин  $\sigma_i^2$  и  $\sigma_j^2$  (средние значения которых равны концентрации магнитных атомов  $p$ ), рассматриваемую как функция от расстояния между этими узлами, будем называть «позиционной» корреляционной функцией:

$$g_{ij}^p = \langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle - p^2.$$

Эта функция показывает коррелированность в расположении магнитных атомов (или атомов примеси); впрочем, даже если все  $g_{ij}^p$  равны нулю, это еще не означает, что примеси распределены в решетке полностью хаотично. Ковариацию самих величин  $\sigma_i$  и  $\sigma_j$

$$g_{ij}^{mp} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - p^2 M^2$$

будем называть «магнитно-позиционной» корреляционной функцией, поскольку она характеризует связь между расположением и магнитными моментами атомов

одновременно. Для того чтобы описать корреляцию только между величинами магнитных моментов, определим «магнитную» корреляционную функцию:

$$g_{ij}^m = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle / \langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle - M^2 = (g_{ij}^{mp} + p^2 M^2) / (g_{ij}^p + p^2) - M^2.$$

Значения этой функции есть разницы условных средних от произведений  $\sigma_i \sigma_j$  и произведений условных средних  $\sigma_i$  и  $\sigma_j$  при условии, что обе эти величины не равны нулю.

Рассмотрим вычисление этих корреляционных функций для линейной цепочки. Для одномерной цепочки, состоящей из  $N$  узлов

$$\langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{\sigma\}} V(\sigma_1, \sigma_2) \dots V(\sigma_{i-1}, \sigma_i) \sigma_i^2 V(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \dots V(\sigma_{j-1}, \sigma_j) \sigma_j^2 V(\sigma_j, \sigma_{j+1}) \dots V(\sigma_N, \sigma_1) \quad (7),$$

где

$$V(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \exp\{K\sigma_i \sigma_{i+1} + L\sigma_i^2 \sigma_{i+1}^2 + r(\sigma_i^2 + \sigma_{i+1}^2)/2 + h_e(\sigma_i + \sigma_{i+1})/2\}$$

элемент трансфер-матрицы.

Введем матрицу  $\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$  и запишем (7) в следующем виде:

$$\langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle = \frac{1}{Z_N} \text{Tr} \mathbf{V}^{i-1} \mathbf{S} \mathbf{V}^{j-i} \mathbf{V}^{N-j+1}. \quad (8)$$

Для вычисления следа в (8) рассмотрим ортогональную матрицу  $\mathbf{P}$ , приводящую симметричную трансфер-матрицу  $\mathbf{V}$  к диагональному виду:

$$\mathbf{P}^{-1} \mathbf{V} \mathbf{P} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}.$$

Тогда (8) запишется в виде:

$$\langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle = \frac{1}{Z_N} \text{Tr} \begin{pmatrix} \lambda_1^{i-1} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^{i-1} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^{i-1} \end{pmatrix} \tilde{\mathbf{S}} \begin{pmatrix} \lambda_1^{j-i} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^{j-i} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^{j-i} \end{pmatrix} \tilde{\mathbf{S}} \begin{pmatrix} \lambda_1^{N-j+1} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^{N-j+1} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^{N-j+1} \end{pmatrix}$$

где  $\tilde{\mathbf{S}}$ . Учитывая, что  $Z_N = \lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N$ , и переходя к пределу  $N \rightarrow \infty$ , получим

$$\langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle = \frac{1}{\lambda_1^{j-1}} \text{Tr} \begin{pmatrix} \lambda_1^{i-1} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^{i-1} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^{i-1} \end{pmatrix} \tilde{\mathbf{S}} \begin{pmatrix} \lambda_1^{j-i} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^{j-i} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^{j-i} \end{pmatrix} \tilde{\mathbf{S}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Выражая (9) через элементы матрицы  $\tilde{\mathbf{S}}$ , получим:

$$\langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle = \tilde{s}_{11}^2 + \tilde{s}_{12} \tilde{s}_{21} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{j-i} + \tilde{s}_{13} \tilde{s}_{31} \left(\frac{\lambda_3}{\lambda_1}\right)^{j-i}. \quad (10)$$

Вычисляя аналогичным образом  $\langle \sigma_i^2 \rangle$ , можно показать, что оно равно  $\tilde{s}_{11}$ . Поэтому позиционная корреляционная функция является суммой двух убывающих геометрических прогрессий:

$$g_{ij}^p = \langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle - p^2 = ax_1^{j-i} + bx_2^{j-i}, \quad (11)$$

где  $a = \tilde{s}_{12}\tilde{s}_{21}$ ,  $b = \tilde{s}_{13}\tilde{s}_{31}$ ,  $x_1 = \lambda_2/\lambda_1$ ,  $x_2 = \lambda_3/\lambda_1$ . Для расчета магнитно-позиционной корреляционной функции нужно использовать вместо матрицы  $\mathbf{S}$  матрицу  $\mathbf{S}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$ , что приводит для  $g_{ij}^{mp}$  к уравнению, аналогичному (11):

$$g_{ij}^{mp} = a_1x_1^{j-i} + b_1x_2^{j-i}. \quad (12)$$

Оказывается, что при  $h_e = 0$  (в этом случае намагниченность  $M$  также обращается в ноль – в одномерной цепочке нет возникновения спонтанной намагниченности при ненулевой температуре) один из коэффициентов  $a$  или  $b$  в формуле (11) обращается в ноль (какой именно, зависит от нумерации корней  $\lambda_2$  и  $\lambda_3$  характеристического уравнения), то есть позиционная корреляционная функция в этом случае имеет вид убывающей геометрической прогрессии. Что касается магнитно-позиционной корреляционной функции (12), то она также становится при  $h_e = 0$  геометрической прогрессией, но если в (11) знаменатель прогрессии  $x_1$ , то в (12) –  $x_2$  и наоборот. Если же  $h_e \neq 0$ , то все четыре коэффициента  $a$ ,  $b$ ,  $a_1$  и  $b_1$  в выражениях (11) и (12) не равны нулю

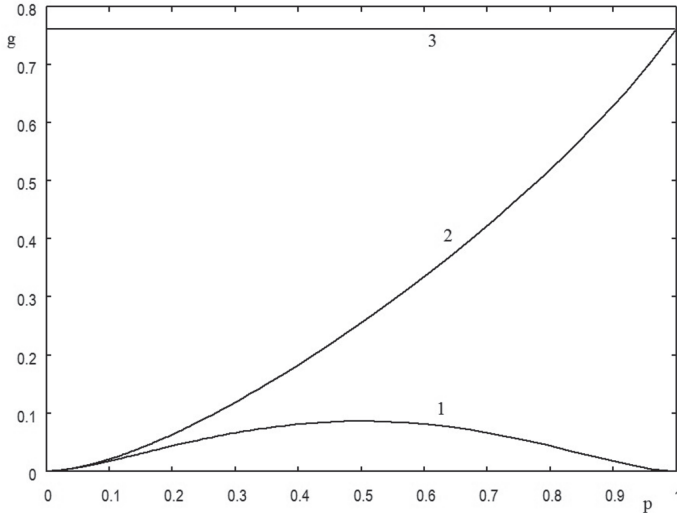


Рис. 1. Концентрационная зависимость корреляционных функций ближайших соседей в одномерной цепочке при  $K = 1$ ,  $h_e = 0$ ,  $\gamma = 1$ . По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов  $p$ , по вертикальной – значение корреляционной функции.

Кривая 1 –  $g_{12}^p(p)$ , кривая 2 –  $g_{12}^{mp}(p)$ , кривая 3 –  $g_{12}^m(p)$

На рисунках 1 и 2 показаны графики позиционной  $g_{12}^p$  (1), магнитно-позиционной  $g_{12}^{mp}$  (2) и магнитной  $g_{12}^m$  (3) корреляционных функций в зависимости от концентрации магнитных атомов  $p$ ; на рис. 1 – при  $h_e = 0$ , а на рис. 2 – при  $h_e = 0,3$ .

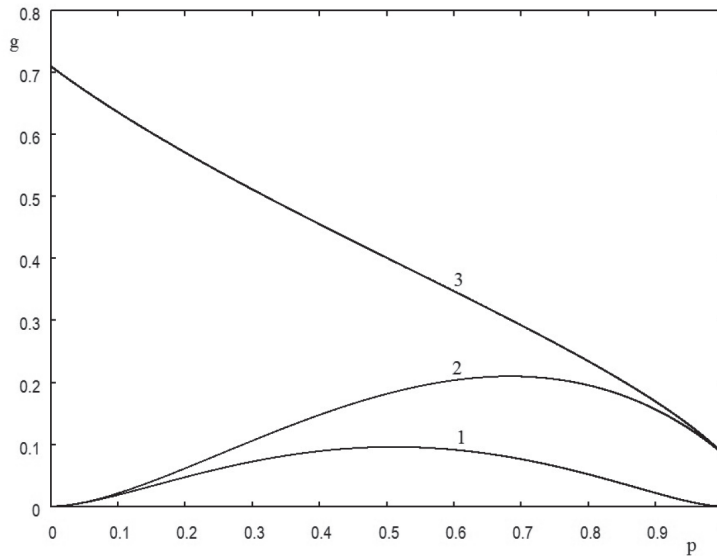


Рис. 2. Концентрационная зависимость корреляционных функций ближайших соседей в одномерной цепочке при  $K = 1$ ,  $h_e = 0,3$ ,  $\gamma = 1$ . По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов  $p$ , по вертикальной – значение корреляционной функции. Кривая 1 –  $g_{12}^p(p) = 0$ , кривая 2 –  $g_{12}^{mp}(p)$ , кривая 3 –  $g_{12}^m(p)$

Позиционная корреляционная функция  $g_{ij}^p$  зависит, в частности, от значения величины  $U$  – эффективного потенциала кулоновского взаимодействия.

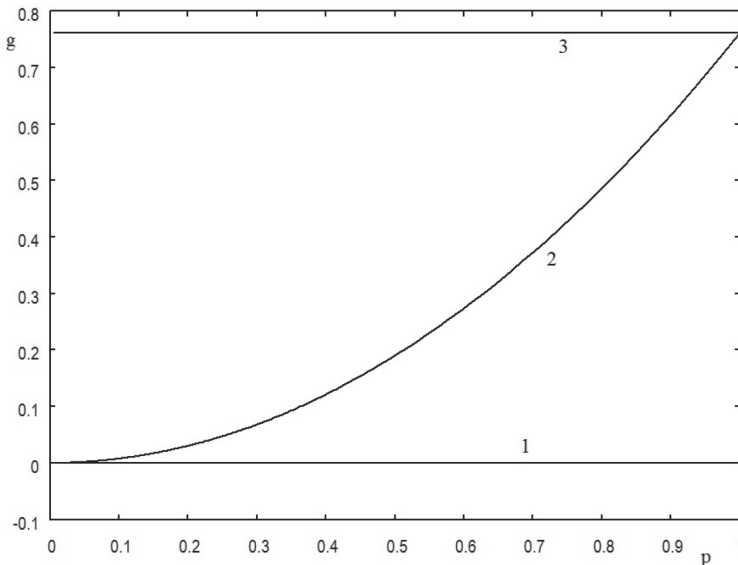


Рис. 3. Концентрационная зависимость корреляционных функций ближайших соседей в одномерной цепочке при  $K = 1$ ,  $h_e = 0$ ,  $\gamma = \gamma_0$ . По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов , по вертикальной – значение корреляционной функции. Кривая 1 –  $g_{12}^p(p) = 0$ , кривая 2 –  $g_{12}^{mp}(p)$ , кривая 3 –  $g_{12}^m(p)$

Подберем теперь величину  $U$  с таким расчетом, чтобы при заданных значениях внешнего поля  $h_e$ , температурного параметра  $K$  и концентрации магнитных атомов  $p$  корреляционная функция  $g_{12}^p$  равнялась бы нулю. Согласно изложенному выше при  $h_e = 0$  такой выбор  $U$  приводит к обращению в ноль всех значений позиционной корреляционной функции  $g_{ij}^p$ , то есть распределение примесей в этом случае является не коррелированным на любых расстояниях.

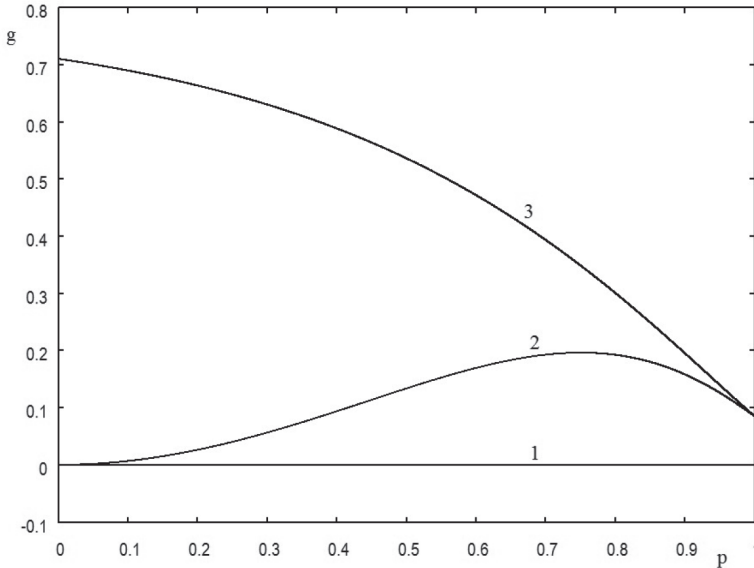


Рис. 4. Концентрационная зависимость корреляционных функций ближайших соседей в одномерной цепочке при  $K = 1$ ,  $h_e = 0,3$ ,  $\gamma = \gamma_0$ . По горизонтальной оси — концентрация магнитных атомов  $p$ , по вертикальной — значение корреляционной функции. Кривая 1 —  $g_{12}^p(p)$ , кривая 2 —  $g_{12}^{mp}(p)$ , кривая 3 —  $g_{12}^m(p)$

Строго говоря, это не означает (хотя и не исключает этого), что распределение примесей полностью случайно, поскольку для полностью случайного распределения необходимо равенство нулю не только парных ковариаций, но и тройных, четверных и т.д. Однако равенство нулю парной корреляционной функции позволяет рассматривать распределение примесей как «приближенно случайное». Если же  $h_e \neq 0$ , то обращение в ноль только  $g_{12}^p$  уже не приводит к обращению в ноль всех значений  $g_{ij}^p$ , но все же можно считать, что расположение примесей более хаотично, чем при  $g_{12}^p \neq 0$ . В дальнейшем будем называть распределение примесей с  $g_{12}^p = 0$  «псевдохаотичным».

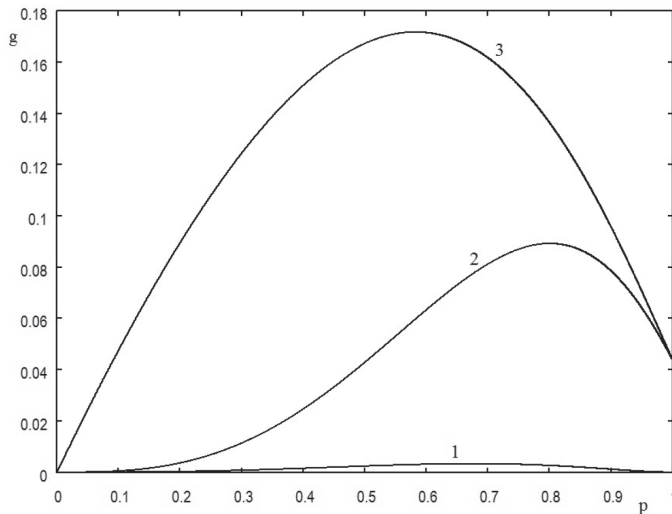


Рис. 5. Концентрационная зависимость корреляционных функций для соседей, следующих за ближайшими в одномерной цепочке при  $K = 1$ ,  $h_e = 0,3$ ,  $\gamma = \gamma_0$ . По горизонтальной оси – концентрация магнитных атомов  $p$ , по вертикальной – значение корреляционной функции. Кривая 1 –  $g_{13}^p(p)$ , кривая 2 –  $g_{13}^{mp}(p)$ , кривая 3 –  $g_{13}^m(p)$

На рисунках 3 и 4 показаны графики позиционной  $g_{12}^p(1)$ , магнитно-позиционной  $g_{12}^{mp}(2)$  и магнитной  $g_{12}^m(3)$  корреляционных функций в зависимости от концентрации магнитных атомов  $p$ , причем для каждого значения величина  $\gamma = U/J$  подбирается так, чтобы  $g_{12}^p = 0$ . На рис. 3  $h_e = 0$ , а на рисунке 4  $h_e = 0,3$ . На рисунке 5 показаны графики функций  $g_{13}^p$ ,  $g_{13}^{mp}$  и  $g_{13}^m$  (кривые 1, 2 и 3 соответственно) при  $h_e = 0,3$  и для такого  $\gamma$ , при котором  $g_{12}^p = 0$ . Видно, что хотя  $g_{13}^p$  отлично от нуля, но ее величина значительно меньше других корреляционных функций.

1. Бэкстер, Р. Точно решаемые модели в статистической механике / Р. Бэкстер. – М.: Мир, 1985. – 486 с.
2. Сёмкин, С.В. Модель Поттса на решетке Бете с немагнитными примесями / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2015. – Т. 148, Вып. 4 (10). – С. 729–733.

© Сёмкин, С.В., 2016

© Смагин, В.П., 2016

**Для цитирования:** Сёмкин, С.В. Одномерная модель Изинга с подвижными примесями / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Территория новых возможностей. Вестник Владивостокского государственного университета экономики и сервиса. – 2016. – № 2. – С. 114–120.

**For citation:** Semkin, S.V. The one-dimensional Ising model with mobile impurities / S.V. Semkin, V.P. Smagin // The Territory Of New Opportunities. The Herald of Vladivostok State University of Economics and Service. – 2016. – № 2. – P. 114–120.

Дата поступления: 20.02.2016.