Территория новых возможностей. Вестник Владивостокского
государственного университета. 2023. Т. 15, № 2. С. 81–87
The Territory of New Opportunities. The Herald of Vladivostok
State University. 2023. Vol. 15, № 2. P. 81–87

Научная статья
УДК 531.19
DOI: https://doi.org/10.24866/VVSU/2949-1258/2023-2/081-087

Свободная энергия одномерной модели Изинга разбавленного магнетика

Сергей Викторович Сёмкин

Виктор Павлович Смагин

Владивостокский государственный университет
Владивосток. Россия

Аннотация. *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. Точное решение основано на представлении статистической суммы разбавленной цепочки в виде произведения статистических сумм изолированных отрезков цепочки различной длины. Для вычисления статистических сумм этих отрезков использован метод несимметричной трансфер-матрицы, с помощью которого найдено точное значение свободной энергии цепочки с примесями как функция концентрации примеси, температуры и внешнего магнитного поля. Затем полученное точное решение сравнивалось с решением, полученным в псевдохаотическом приближении. Оказывается, что в нулевом внешнем поле точное решение полностью совпадает с решением, полученным в псевдохаотическом приближении. При наличии внешнего поля разница между точным и приближенным значением свободной энергии зависит от концентрации примесей и от температуры. Эта разница и была исследована в настоящей работе.*

***Ключевые слова*:** *фазовые переходы, модель Изинга, разбавленный магнетик.*

Для цитирования: *Семкин С.В., Смагин В.П. Свободная энергия одномерной модели Изинга разбавленного магнетика // Территория новых возможностей. Вестник Владивостокского государственного университета. 2023. Т. 15, № 2. С. 81–87. DOI: https://doi.org/10.24866/VVSU/2949-1258/2023-2/081-087.*

Original article

The free energy of the one-dimensional Ising model of a dilute magnet

Sergey V. Semkin
Viktor P. Smagin

Vladivostok State University
Vladivostok. Russia

Abstract. *The Ising model with non-magnetic dilution is used for the theoretical description of many objects and phenomena in condensed matter physics and nuclear physics. The effect of non-magnetic dilution on the critical behavior of magnets, including those described by the Ising model, is of con¬siderable scientific interest. For the Ising model with non-magnetic dilution, it is not possible to con¬struct the exact solution for any crystal lattice. The properties of this model are investigated either numerically or in one approximation or another. In this paper, the exact solution is obtained for a one-dimensional Ising model with stationary, randomly arranged non-magnetic impurities. This exact solution is based on the representation of the statistical sum of the diluted chain as a product of the statistical sums of isolated segments of the chain of different lengths. To calculate the statistical sums of these segments, the method of an asymmetric transfer matrix is used. By this method, the exact value of free energy of the impurity chain is found as a function of impurity concentration, tempera¬ture and external magnetic field. Then, we compare the exact solution obtained by us with the solu¬tion obtained in the pseudo-chaotic approximation. It turns out that in the zero external field, the exact solution completely coincides with the solution obtained in the pseudo-chaotic approximation. In the presence of an external field, the difference between the exact and approximate value of the free energy depends on the concentration of impurities and temperature. This difference was investigated in this paper.*

Keywords**:** *phase transitions, Ising model, dilute magnet.*

For citation*: Semkin S.V., Smagin V.P. The free energy of the one-dimensional Ising model of a dilute magnet // The Territory of New Opportunities. The Herald of Vladivostok State University. 2023. Vol. 15, № 2. P. 81–87. DOI: https://doi.org/10.24866/VVSU/2949-1258/2023-2/081-087.*

Введение

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 удается построить точного решения для плоских или объемных решеток. Рассмотрим полученное нами точное решение для одномерной модели Изинга с неподвижными, хаотично расположенными немагнитными примесями. Точное решение основано на представлении статистической суммы разбавленной цепочки в виде произведения статистических сумм изолированных отрезков цепочки различной длины. Для вычисления статистических сумм этих отрезков использован метод несимметричной трансфер-матрицы [3] в отличие от метода, представленного в работе [4].

В одномерной модели Изинга не наблюдается фазовый переход при конечной температуре [3], а при любом разбавлении одномерная цепочка Изинга со взаимодействием только между ближайшими соседями распадается на несвязанные между собой отрезки магнитных атомов конечной длины, т.е. в разбавленной одномерной модели Изинга нет ни магнитного, ни концентрационного переходов. Однако при низких концентрациях магнитных атомов или связей (меньших, чем порог протекания [1]) разбавленная модель Изинга на любой решетке так же является совокупностью конечных фрагментов этой решетки, т.е. метод усреднения по ансамблю конечных фрагментов обладает определенной универсальностью в области концентраций, ниже порога протекания для любой решетки.

Основная часть

Рассмотрим одномерный изинговский магнетик (цепочку) со взаимодействием только между ближайшими соседями. Допустим, что некоторые связи случайным образом разорваны, например, с помощью неподвижных немагнитных примесей, так что вероятность обнаружить магнитную связь между атомами в соседних узлах равна b, а вероятность того, что связь окажется разорванной, равна $1 - b$. При таком разбавлении цепочка разбивается на отрезки магнитных атомов разной длины, разделенные немагнитными связями. Статистическая сумма такой цепочки длины N имеет вид

$$Z_N = Z_1^{N_1} \cdot Z_2^{N_2} \times \ldots \times Z_K^{N_K} , \qquad (1)$$

где N_n – количество отрезков длиной n; Z_n – статистическая сумма отрезков,

$$N = \sum nN_n .$$

Свободная энергия при температуре T в расчете на один магнитный атом

$$f = -kT \frac{InZ_N}{N} ,$$

где k – постоянная Больцмана.

Зная свободную энергию магнетика как функцию температуры и внешнего поля H, можно выразить намагниченность m, внутреннюю энергию u и энтропию s (в расчете на один магнитный атом) [2]:

$$m = -\frac{\partial f}{\partial H} ,$$

$$u = -T^2 \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{f}{T}\right), \qquad (2)$$

$$s = -\frac{\partial f}{\partial T} .$$

Из выражения (1) получим

$$-\frac{f}{kT} = \sum_n \frac{nN_n}{N} \frac{InZ_n}{n} .$$

При $N \to \infty$ отношение $\frac{nN_n}{N}$ стремится к ρ_n – вероятности того, что произвольно взятый магнитный атом принадлежит отрезку длиной n спинов. Таким образом, при $N \to \infty$

$$-\frac{f}{kT} = \sum{}_n p_n \frac{InZ_n}{n} . \qquad (3)$$

Очевидно, что $p_n = nb^{n-1}(1-b)^2$, а статистическую сумму для отрезка из n изинговских спинов $\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_n$ вычислим следующим образом:

$$Z_n = \sum_{\sigma_1,\ldots,\sigma_n} \exp(k\sum_{i=1}^{n-1}\sigma_i\sigma_{i+1} + h\sum_{i=1}^{n}\sigma_i) = \Phi_n(+1) + \Phi_n(-1) ,$$

где $\quad \Phi_n(\sigma_n) = \sum\limits_{\sigma_1,\dots,\sigma_{n-1}} \exp(K\sum\limits_{i=1}^{n-1}\sigma_i\sigma_{i+1} + h\sum\limits_{i=1}^{n}\sigma_i).$

Здесь $K = J/kT$ (J – обменный интеграл; T – температура; k – постоянная Больцмана), $h = H/kT$ ($H_{вх}$ – 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.

Для функции $\Phi_n(\sigma)$ можно составить рекуррентные соотношения

$$\Phi_n(+1) = \Phi_{n-1}(+1)e^{K+h} + \Phi_{n-1}(-1)e^{-K+h},$$

$$\Phi_n(-1) = \Phi_{n-1}(+1)e^{-K-h} + \Phi_{n-1}(-1)e^{K-h}, \tag{4}$$

которые удобно представить в матричной форме:

$$\begin{pmatrix}\Phi_n(+1)\\ \Phi_n(-1)\end{pmatrix} = V\begin{pmatrix}\Phi_{n-1}(+1)\\ \Phi_{n-1}(-1)\end{pmatrix},$$

где $$\begin{pmatrix}\Phi_n(+1)\\ \Phi_n(-1)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}e^{h}\\ e^{-h}\end{pmatrix} \text{ и } V = \begin{pmatrix}e^{K+h} & e^{-K+h}\\ e^{-K-h} & e^{K-h}\end{pmatrix},$$

т.е. V – несимметричная трансфер-матрица [3].

Таким образом,

$$\begin{pmatrix}\Phi_n(+1)\\ \Phi_n(-1)\end{pmatrix} = V^{n-1}\begin{pmatrix}e^{h}\\ e^{-h}\end{pmatrix}. \tag{5}$$

Собственные числа λ_1 и λ_2 матрицы V находятся из соответствующего характеристического уравнения:

$$\lambda_{1,2} = e^{K}chh \pm \sqrt{e^{2K}sh^2h + e^{-2K}}\ . \tag{6}$$

Вычислив собственные векторы матрицы V, соответствующие собственным числам λ_1 и λ_2, и построив из них диагонализирующую матрицу R, представим V в виде

$$V = R\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0\\ 0 & \lambda_2\end{pmatrix}R^{-1},$$

а матрицы R и R^{-1} представим в тригонометрической форме:

$$R = \begin{pmatrix}\cos\varphi_1 & -\sin\varphi_2\\ \sin\varphi_1 & \cos\varphi_2\end{pmatrix},\ R^{-1} = \frac{1}{\Delta}\begin{pmatrix}\cos\varphi_1 & \sin\varphi_2\\ -\sin\varphi_1 & \cos\varphi_2\end{pmatrix},$$

где φ_1 и φ_2 принадлежат интервалу от 0 до $\pi/2$ и находятся из условий

$$tg\varphi_1 = \lambda_1 e^{K-h} - e^{2K},\ ctg\varphi_2 = e^{2K} - \lambda_2 e^{K-h},\ \Delta = \cos(\varphi_1 - \varphi_2)\ .$$

Отсюда найдем статистическую сумму Z_n для отрезка из n спинов:

$$Z_n = \lambda_1^{n-1}(A + B\delta^{n-1}),\ \delta^{n-1} = \frac{\lambda_2}{\lambda_1},$$

$$A = \frac{1}{\Delta}(e^h \cos\varphi_2 + e^{-h}\sin\varphi_2)(\cos\varphi_1 + \sin\varphi_1),$$

$$B = \frac{1}{\Delta}(e^h \sin\varphi_1 - e^{-h}\cos\varphi_1)(-\cos\varphi_2 + \sin\varphi_2).$$

Свободная энергия всей системы (в расчете на один атом) равна

$$f = -kT(bIn\lambda_1 + (1-b)^2 \quad \sum_{n=0}^{\infty} b^n In(A + B\delta^n)). \qquad (7)$$

При $h = 0$ все эти расчеты значительно упрощаются. Трансфер-матрица V становится симметричной, а ее собственные векторы – ортогональными. Собственные числа $-\lambda_1 = 2chK$, $\lambda_2 = 2shK$, $\varphi_1 = \varphi_2 = \pi/4$. Свободная энергия (7) становится равной

$$f_0 = -kT(bIn(chK) + In2. \qquad (8)$$

Отметим, что результат (8) можно получить непосредственно, используя высокотемпературное представление статистической суммы декорированной решетки Бете (в частности, линейной цепочки) в дуализме Крамерса – Ванье [3]. Используем представление статистической суммы изинговского магнетика в виде

$$Z_N = (chK)^{Nb} \sum (\Pi(1 + \sigma_i \sigma_j thK)),$$

где суммирование проводится по всем N спинам решетки, а произведение – по N_b связям. Тогда, учитывая, что в любой решетке Бете отсутствуют замкнутые пути, получим

$$\frac{InZ_N}{N} = \frac{N_b}{N} In(chK) + In2,$$

что при $\frac{N_b}{N} = b$ эквивалентно выражению (8).

В работе [4] найдена удельная свободная энергия разбавленного изинговского магнетика на решетке Бете в псевдохаотическом приближении. Это приближение заключается в наложении условия нулевой корреляции в расположении примесей в соседних узлах или связях [4]. Свободная энергия магнитной цепочки с разбавлением (которая является частным случаем решетки Бете) есть

$$f_{pc} = -kT\left(bK + 2\psi(w) + \frac{1}{2}In(1 - M^2) + (1-b)In2\right), \qquad (9)$$

где $\psi(w) = (1-b)In(ch(w)) + \frac{b}{2}In(ch(2w) + \ell^{-2k})$, а $w = (arcth(m) + h)/2$.

Удельная намагниченность M является решением кубического уравнения

$$C_3M^3 + C_2M_2 + C_1M + C_0 = 0, \qquad (10)$$

в котором:

$$C_3 = y^2 + t^2(1-y^2),$$
$$C_2 = (1-2b)(1-t^2)(1-y^2)y - y,$$
$$C_1 = (1-b)(1-t)(1-y^2)(bt+t-b+1) - y^2,$$
$$C_0 = (1-y^2)(bt-t-b)y - y,$$

где $t = e^{-2K}$, $y = thh$.

Легко показать, что при $b = 1$ единственным решением уравнения (10) в интервале (0; 1) является известное решение для цепочки без примесей [3]:

$$M = \frac{e^K shh}{\sqrt{e^{2K} sh^2 h + e^{-2K}}}.$$

Легко показать, что при $h = 0$ свободная энергия в псевдохаотическом приближении (9) совпадает с точным значением (8), что подтверждает высказанное в работе [5] предположение о том, что при нулевой намагниченности псевдохаотическое распределение примесей является истинно хаотическим. Если же $h \neq 0$, свободная энергия в псевдохаотическом приближении (9) отличается от точного значения (7). На рис. 1 показана относительная разница $(f - f_{pc})/f$ как функция b при H = 0,5 и различных значениях температурного параметра K. Кривые 1, 2 и 3 построены при K, равном 1,7; 0,7 и 0,5 соответственно.

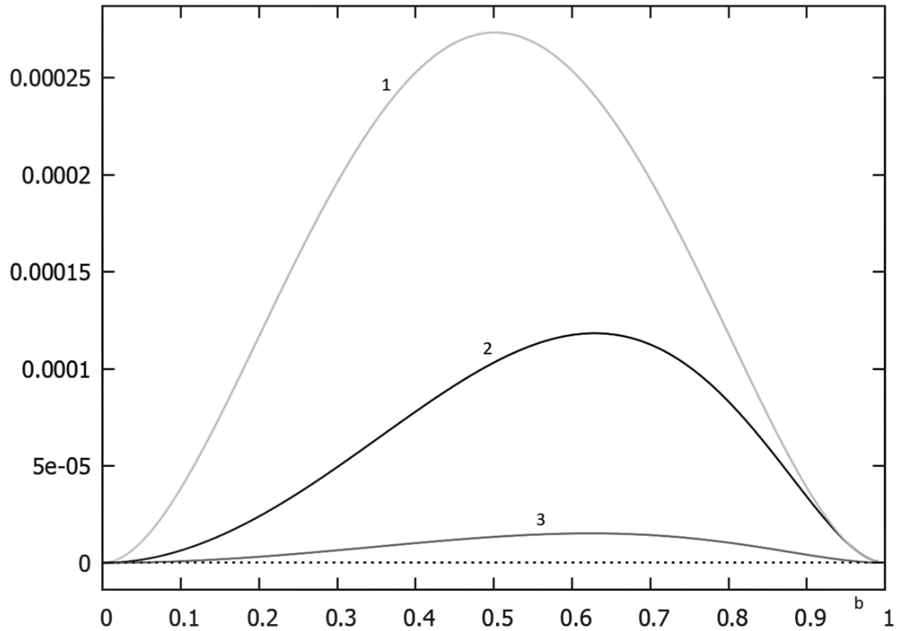

Рис. 1. Относительная разница $(f - f_{pc})/f$ как функция b при H = 0,5

Заключение

Таким образом, получено точное значение свободной энергии разбавленной изинговской цепочки как функции внешнего магнитного поля, концентрации магнитных атомов и температуры.

В целом расчеты показывают, что расхождение между точным значением свободной энергии изинговской цепочки с немагнитным разбавлением и значением, полученным в псевдохаотическом приближении, не значительно. Различие возрастает при уменьшении температуры и максимально при b~0,5 (см. рис. 1).

Список источников

1. Займан Дж. Модели беспорядка: Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем. Москва: Мир, 1982. 591 с.
2. Квасников И.А. Термодинамика и статистическая физика Т. 2. Теория равновесных систем. Москва: Едиториал УРСС, 2002. 432 с.
3. Бэкстер С.Р. Точно решаемые модели в статистической механике. Москва: Мир, 1985. 486 с.
4. Сёмкин С.В., Смагин В.П., Тарасов В.С. Фрустрации в разбавленном изинговском магнетике на решетке Бете // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2022. Т. 161, вып. 6. С. 840–846.
5. Сёмкин С.В., Смагин В.П., Гусев Е.Г. Магнитная восприимчивость разбавленного изинговского магнетика // Теоретическая и математическая физика. 2019. Т. 201, № 2. С. 280–290.

References

1. Zayman J. Models of disorder: Theoretical physics of uniformly disordered systems. Moscow: Mir; 1982. 591 p.
2. Kvasnikov I.A. Thermodynamics and statistical physics T. 2. Theory of equilibrium systems. Moscow: Yeditorial URSS; 2002. 432 p.
3. Baxter SR Precisely solvable models in statistical mechanics. Moscow: Mir; 1985. 486 p.
4. Syomkin S.V., Smagin V.P., Tarasov V.S. Frustration in diluted Ising magnetics on a Beth lattice. *Journal of Experimental and Theoretical Physics.* 2022; 161 (6): 840–846.
5. Syomkin S.V., Smagin V.P., Gusev E.G. Magnetic susceptibility of diluted Isingian magnetic. *Theoretical and mathematical physics.* 2019; 201 (2): 280–290.

Информация об авторах:

Сёмкин Сергей Викторович, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры информационных технологий и систем ВВГУ, г. Владивосток. E-mail: Li15@rambler.ru

Смагин Виктор Павлович, д-р физ.-мат. наук, зав. лабораторией фундаментальной и прикладной физики ВВГУ, г. Владивосток. E-mail: Li15@rambler.ru

DOI: https://doi.org/10.24866/VVSU/2949-1258/2023-2/081-087

Дата поступления:	Одобрена после рецензирования:	Принята к публикации:
04.04.2023	15.05.2023	10.06.2023