ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ
И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА
Том 201, № 2
ноябрь, 2019

 С. В. Сёмкин*, В. П. Смагин*, Е. Г. Гусев*

МАГНИТНАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ РАЗБАВЛЕННОГО ИЗИНГОВСКОГО МАГНЕТИКА

Для модели Изинга с немагнитным разбавлением рассмотрен метод построения “псевдохаотического” распределения примесей, основанный на условии обращения в ноль корреляции положения подвижных атомов примеси в ближайших узлах. Для одномерной модели Изинга с немагнитным разбавлением найдено точное решение и показано, что метод псевдохаотического приближения дает для этой модели точное значение магнитной восприимчивости в нулевом внешнем поле. Сделано предположение, что псевдохаотическое распределение примесей является полностью некоррелированным в области нулевой намагниченности для любой решетки. Это предположение обосновано расчетом корреляционных функций для модели Изинга с немагнитным разбавлением на решетке Бете. Для этой модели найдена магнитная восприимчивость.

Ключевые слова: модель Изинга, разбавленный магнетик, решетка Бете, магнитная восприимчивость.

DOI: https://doi.org/10.4213/tmf9608

1. ВВЕДЕНИЕ

При описании разбавленных магнетиков в большинстве случаев хорошим приближением является допущение о случайном распределении немагнитных примесей по узлам решетки [1], [2]. Поэтому в теоретических работах, посвященных исследованию разбавленных магнетиков, случайное распределение примесей вводится, как правило, изначально.

В настоящей работе мы предлагаем несколько иной подход к анализу свойств разбавленных магнетиков. Вместо того чтобы с самого начала полагать, что примеси распределены в решетке случайно, мы рассматриваем магнетик, в котором магнитные атомы и атомы примеси могут перемещаться и находятся в термодинамическом равновесии. Энергия такой системы определяется не только ориентацией

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках проекта № 3.7009.2017/БЧ базовой части государственного задания вузам на выполнение работ в сфере научной деятельности.

*Владивостокский государственный университет экономики и сервиса, Владивосток, Россия. E-mail: archvitos@yahoo.com

магнитных моментов, но и расположением атомов примеси по узлам решетки. Другими словами, гамильтониан той или иной модели магнетика с подвижными примесями состоит из слагаемых, связанных с обменным взаимодействием магнитных атомов, и слагаемых, связанных с межатомным взаимодействием в кристаллической решетке, причем равновесное распределение атомов примеси зависит от параметров, характеризующих эти взаимодействия. Тогда для каждого значения температуры, внешнего магнитного поля и концентрации (доли) магнитных атомов в системе можно подобрать значения параметров межатомного взаимодействия с таким расчетом, чтобы равновесное распределение атомов примеси было как можно ближе к случайному. В работе [3] мы применили этот метод к модели Поттса с немагнитным разбавлением на решетке Бете.

В настоящей работе данный подход реализован следующим образом. Мы рассматриваем модель Изинга на решетке с координационным числом q. Предположим, что часть магнитных атомов замещена атомами примеси, которые могут перемещаться по узлам решетки и находятся в термодинамическом равновесии. Прежде всего выберем потенциал межатомного взаимодействия, при котором равновесное распределение немагнитных примесей будет, по нашему мнению, близко к случайному; это распределение мы называем псевдохаотическим. Чтобы продемонстрировать эффективность псевдохаотического приближения, мы рассматриваем одномерную модель Изинга со случайно распределенными неподвижными немагнитными примесями. Для этой модели получено точное решение, которое мы сравниваем с решением, найденным в псевдохаотическом приближении. На основании результатов этого сравнения мы высказываем предположение, что при нулевой намагниченности псевдохаотическое распределение эквивалентно полной некоррелированности положения атомов примеси. Рассматривая далее модель Изинга с немагнитным разбавлением на произвольной решетке Бете, мы находим выражение для магнитной восприимчивости при нулевой намагниченности, которое на основании нашего предположения считаем точным результатом для этой модели.

2. ПСЕВДОХАОТИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Сформулируем модель Изинга с подвижными немагнитными примесями на произвольной кристаллической решетке. Рассмотрим кристаллическую решетку с координационным числом q, в узлах которой могут находиться магнитные и немагнитные атомы (атомы первого и второго типа соответственно). С каждым магнитным атомом связан изинговский спин $s_i = \pm 1$, так что энергия обменного взаимодействия двух магнитных атомов со спинами s_i и s_j есть $-Js_is_j$, если атомы расположены в соседних узлах решетки, и равна нулю в противном случае.

Аналогично тому, как это принято при изучении бинарных сплавов [4], допустим, что в системе действуют межатомные силы с быстро спадающим на больших расстояниях потенциалом взаимодействия типа потенциала Леннарда–Джонса [4]. Поэтому будем считать, что радиус действия этих сил ограничен первой координационной сферой; в дальнейшем для краткости мы называем силы “кулоновскими”, хотя, строго говоря, они имеют другую природу. Обозначим потенциал этих сил как $-U_{\alpha\beta}$, $\alpha, \beta = 1, 2$. Если теперь сопоставить каждому узлу решетки переменную σ_i, равную s_i, когда в данном узле находится магнитный атом, и равную нулю, когда атом немагнитный, то энергию обменного взаимодействия $E_{\rm ex}$ и кулоновскую энергию $E_{\text{к}}$ можно записать в виде сумм по всем упорядоченным парам соседних узлов:

$$E_{\text{ex}} = -\sum_{(i,j)} J\sigma_i\sigma_j,$$

$$E_{\text{к}} = -\sum_{(i,j)} \{U_{11}\sigma_i^2\sigma_j^2 + U_{22}(1-\sigma_i^2)(1-\sigma_j^2) + U_{12}[\sigma_i^2(1-\sigma_j^2) + \sigma_j^2(1-\sigma_i^2)]\}.$$

Последнее выражение с точностью до аддитивной константы можно переписать как

$$E_{\text{к}} = -\sum_{(i,j)} U\sigma_i^2\sigma_j^2 - \sum_i f\sigma_i^2,$$

где $U = U_{11} + U_{22} - 2U_{12}$, $f = q(U_{12} - U_{22})$. Величину U мы называем эффективным потенциалом кулоновского взаимодействия; магнитные атомы притягиваются при $U > 0$ и отталкиваются при $U < 0$.

Учитывая, что число магнитных атомов в решетке равно $\sum_i \sigma_i^2$, запишем большую статистическую сумму системы следующим образом:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left\{\frac{1}{kT}\left(\sum_{(i,j)}(J\sigma_i\sigma_j + U\sigma_i^2\sigma_j^2) + (f+\mu)\sum_i \sigma_i^2 + H_{\text{e}}\sum_i \sigma_i\right)\right\}, \qquad (1)$$

где μ – химический потенциал, H_{e} – внешнее магнитное поле, k – постоянная Больцмана, а суммирование производится по всем возможным конфигурациям $\{\sigma\}$.

Введем величины $b = \langle\sigma_i^2\rangle$ и $M = \langle\sigma_i\rangle/b$, где угловые скобки означают усреднение по ансамблю. Ясно, что эти величины не зависят от i, поскольку все узлы решетки эквивалентны (в термодинамическом пределе), и имеют простой смысл: b – вероятность того, что в данном узле находится магнитный атом (концентрация), M – среднее значение его спина. Для такой модели можно определить несколько типов корреляционных функций, характеризующих взаимосвязь магнитных моментов и взаимосвязь расположения атомов примеси. Введем позиционную (характеризующую расположение атомов примеси) корреляционную функцию

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

Если примеси распределены по узлам решетки полностью случайно и независимо, то $\langle\sigma_i^2\sigma_j^2\rangle = \langle\sigma_i^2\rangle\langle\sigma_j^2\rangle = b^2$ и $g_{ij}^b = 0$ для любых i и j. Если же $g_{ij}^b = 0$ при любых i и j, распределение примесей будем называть некоррелированным. Строго говоря, некоррелированность примесей не означает (хотя и не исключает этого), что их распределение полностью случайно, поскольку для полностью случайного распределения необходимо равенство нулю не только парных ковариаций, но и тройных, четверных и т. д.

Для модели Изинга с подвижными примесями позиционная корреляционная функция зависит, кроме температуры T и внешнего поля H_{e}, от эффективного потенциала кулоновского взаимодействия U. Будем теперь рассматривать U не как постоянную, а для каждых значений T и H_{e} подбирать значение U так, чтобы было выполнено равенство $g_{12}^b = 0$, т. е. расположение примесей в двух соседних узлах решетки было некоррелированным. Распределение примесей, удовлетворяющее этому условию, назовем псевдохаотическим распределением, а расчеты, проведенные для такого распределения, – псевдохаотическим приближением. Как будет показано ниже, в некоторых случаях условие $g_{12}^b = 0$ приводит к обращению в ноль позиционной корреляционной функции на любом расстоянии.

3. ОДНОМЕРНАЯ ЦЕПОЧКА С РАЗБАВЛЕНИЕМ: ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ

Рассмотрим одномерный изинговский магнетик (цепочку), в котором некоторые магнитные атомы заменены на немагнитные примеси, так что вероятность обнаружить в любом узле цепочки магнитный атом равна b, а вероятность обнаружить там примесь равна $1-b$. При таком разбавлении цепочка разбивается на состоящие из магнитных атомов отрезки разной длины, которые разделены немагнитными примесями. Среднее значение изинговского спина в расчете на один магнитный атом может быть вычислено так:

$$M = \sum_{n=1}^{\infty} m_n p_n, \tag{2}$$

где m_n – средняя намагниченность атома, принадлежащего отрезку длины n, а p_n – вероятность того, что произвольно взятый магнитный атом принадлежит такому отрезку. Очевидно, что $p_n = nb^{n-1}(1-b)^2$. Намагниченность m_n вычислим следующим образом. Пусть Z_n – статистическая сумма для отрезка из n изинговских спинов $s_1, \ldots, s_n$,

$$Z_n = \sum_{\sigma_1,\ldots,\sigma_n} \exp\left(K \sum_{i=1}^{n-1} s_i s_{i+1} + h \sum_{i=1}^{n} s_i \right),$$

где $K = J/kT$, $h = H_{\mathrm{e}}/kT$. Выделим в Z_n суммирование по последнему спину s_n данного отрезка:

$$Z_n = F_n(+1) + F_n(-1),$$

где

$$F_n(s_n) = \sum_{s_1,\ldots,s_{n-1}} \exp\left(K \sum_{i=1}^{n-1} s_i s_{i+1} + h \sum_{i=1}^{n} s_i \right).$$

Тогда

$$m_n = \frac{1}{n}\frac{\partial}{\partial h} \ln Z_n = \frac{1}{n}\frac{F_{n,h}(+1) + F_{n,h}(-1)}{F_n(+1) + F_n(-1)}, \tag{3}$$

где $F_{n,h}(s)$ – производная функции $F_n(s)$ по h. Для функций $F_n(\pm 1)$ и их производных можно составить рекуррентные соотношения:

$$F_{n+1}(s) = \sum_{s'=\pm 1} F_n(s') e^{Kss'+hs} = F_n(+1)e^{Ks+hs} + F_n(-1)e^{-Ks+hs},$$

$$F_{n+1,h}(s) = \big(F_{n,h}(+1) + sF_n(+1)\big)e^{Ks+hs} + \big(F_{n,h}(-1) + sF_n(-1)\big)e^{-Ks+hs},$$

$$F_1(+1) = F_{1,h}(+1) = e^{h}, \qquad F_1(-1) = e^{-h}, \qquad F_{1,h}(-1) = -e^{-h}.$$

Вводя обозначения

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

получаем выражение

$$m_n = \frac{1}{n}\frac{y_n + z_n}{1 + x_n}$$

и рекуррентные соотношения

$$x_{n+1} = \frac{e^{-2K} + x_n}{1 + x_n e^{-2K}}\, e^{-2h}, \qquad y_{n+1} = \frac{y_n + z_n e^{-2K}}{1 + x_n e^{-2K}} + 1,$$

$$z_{n+1} = \frac{z_n + y_n e^{-2K}}{1 + x_n e^{-2K}}\, e^{-2h} - x_{n+1},$$

$$x_1 = e^{-2h}, \qquad y_1 = 1, \qquad z_1 = -e^{-2h}.$$

Намагниченность M, заданную формулой (2), можно представить в виде степенного ряда по концентрации b магнитных атомов,

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

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

$$\left.\frac{\partial M}{\partial b}\right|_{b=0} = 2(m_2 - m_1) = 2\left(\frac{\operatorname{sh}(2h)}{\operatorname{ch}(2h) + e^{-2K}} - \operatorname{th} h\right). \tag{4}$$

Из соотношения (2) получаем магнитную восприимчивость $\chi = \partial M/\partial h$:

$$\chi = \sum_{n=1}^{\infty}\chi_n p_n, \qquad \chi_n = \frac{1}{n}\frac{F_{n,hh}(+1) + F_{n,hh}(-1)}{F_n(+1) + F_n(-1)} - nm_n^2. \tag{5}$$

Здесь $F_{n,hh}(s)$ – вторые производные функции $F_n(s)$ по h, для которых тоже можно составить рекуррентные соотношения. Когда внешнее поле $h = 0$, из этих рекуррентных соотношений следует, что $F_n(-1) = F_n(+1)$, $F_{n,h}(-1) = -F_{n,h}(+1)$ и $F_{n,hh}(-1) = F_{n,hh}(+1)$ для любого n. Вводя обозначения $t_n = F_{n,hh}(+1)/F_n(+1)$ и $w_n = F_{n,h}(+1)/F_n(+1)$, выводим выражение для χ_n и рекуррентные соотношения для t_n и w_n:

$$\chi_n = \frac{t_n}{n}, \qquad t_{n+1} = 1 + t_n + 2w_n \operatorname{th} K, \qquad w_{n+1} = 1 + w_n \operatorname{th} K, \qquad t_1 = w_1 = 1.$$

Из рекуррентного соотношения для w_n и начального условия $w_1 = 1$ следует, что

$$w_n = \sum_{i=0}^{n-1}(\operatorname{th} K)^i = \frac{1 - (\operatorname{th} K)^n}{1 - \operatorname{th} K}.$$

Используя этот результат в рекуррентном соотношении для t_n, получаем

$$t_n = n\frac{1 + \operatorname{th} K}{1 - \operatorname{th} K} - \frac{2\operatorname{th} K}{(1 - \operatorname{th} K)^2}\big(1 - (\operatorname{th} K)^n\big).$$

Подставляя теперь $\chi_n = t_n/n$ в (5) и вычисляя суммы степенных рядов, окончательно имеем

$$\chi = \frac{1 + b\operatorname{th} K}{1 - b\operatorname{th} K}. \tag{6}$$

4. ОДНОМЕРНАЯ ЦЕПОЧКА С РАЗБАВЛЕНИЕМ: ПСЕВДОХАОТИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Рассмотрим теперь одномерную модель Изинга с немагнитными примесями в псевдохаотическом приближении. Запишем статистическую сумму (1) для одномерной цепочки, состоящей из N узлов, в следующем виде:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left\{ \sum_{i=1}^{N} (K\sigma_i\sigma_{i+1} + L\sigma_i^2\sigma_{i+1}^2 + r\sigma_i^2 + h\sigma_i) \right\}, \tag{7}$$

где $r = \mu/kT$, $L = U/kT$ и используется циклическое граничное условие $\sigma_1 = \sigma_{N+1}$. Вычислив тем или иным способом статистическую сумму (7), можно найти химический потенциал, спонтанную намагниченность и среднее значение $\langle\sigma_i^2\sigma_{i+1}^2\rangle$ из следующих соотношений:

$$bM = \frac{1}{N}\frac{\partial \ln Z_N}{\partial h}, \qquad b = \frac{1}{N}\frac{\partial \ln Z_N}{\partial r}, \qquad \langle\sigma_i^2\sigma_{i+1}^2\rangle = \frac{1}{N}\frac{\partial \ln Z_N}{\partial L}. \tag{8}$$

Переходя к пределу $N \to \infty$, получаем систему, из которой определяется намагниченность и химический потенциал как функции параметров K, L, b и h. Исключая теперь параметр кулоновского взаимодействия L с помощью условия некоррелированности расположения магнитных атомов в соседних узлах,

$$\langle\sigma_i^2\sigma_{i+1}^2\rangle - b^2 = 0,$$

что и составляет суть псевдохаотического приближения, имеем [5]

$$M_{\text{a}} = \operatorname{th}(2x-h), \qquad b = \frac{\operatorname{th}(2x-h) - \operatorname{th} x}{\frac{\operatorname{sh}(2x)}{\operatorname{ch}(2x)+e^{-2K}} - \operatorname{th} x}; \tag{9}$$

здесь x меняется от $x_1 = h$ до $x_2 = (h+2K)/2 + (1/2)\ln(\operatorname{sh} h + \sqrt{\operatorname{sh}^2 h + e^{-4K}}\,)$.

При $h = 0$ намагниченность M_{a} обращается в ноль при любом значении концентрации b, как и точное значение намагниченности (2). При $b = 0$ и при $b = 1$ (т. е. для парамагнетика и для цепочки без разбавления) намагниченность M_{a}, вычисленная в псевдохаотическом приближении (9), совпадает с точным значением намагниченности (2). Производные намагниченности M_{a} по концентрации магнитных атомов b, вычисленные из (9) при $b = 0$ и при $b = 1$, также совпадают с соответствующими производными точного решения. Кроме того, нетрудно показать, что восприимчивость $\chi = \partial M_{\text{a}}/\partial h$, вычисленная из (9) при $h = 0$, в точности совпадает с восприимчивостью (6), найденной выше для точного решения. Однако полного совпадения точного значения намагниченности и приближенного значения намагниченности, вычисленного в псевдохаотическом приближении (9), при всех значениях K, h и b все же нет. Но, как показали наши расчеты, относительная разность $(M_{\text{a}} - M)/M$ не превосходит по абсолютному значению $10^{-5} \div 10^{-4}$.

5. КОРРЕЛЯЦИИ В ЦЕПОЧКЕ С ПОДВИЖНЫМИ НЕМАГНИТНЫМИ ПРИМЕСЯМИ

Чтобы детальнее изучить отличие псевдохаотического приближения от точного решения, рассмотрим корреляцию положений магнитных атомов не только в соседних, но и в любых двух узлах одномерной цепочки. Эту корреляцию можно вычислить из статистической суммы (7) как для произвольного значения L, так и, в частности, для L, соответствующего псевдохаотическому распределению. Найдем корреляции в цепочке изинговских спинов с подвижными немагнитными примесями для произвольного значения L. Для этого воспользуемся следующим способом [4]. Рассмотрим трансферматрицу $\mathbf{V}$,

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} 1 & e^{(r+h)/2} & e^{(r-h)/2} \\ e^{(r+h)/2} & e^{K+L+r+h} & e^{-K+L+r} \\ e^{(r-h)/2} & e^{-K+L+r} & e^{K+L+r-h} \end{pmatrix}. \tag{10}$$

Если λ_1, λ_2 и λ_3 – собственные числа матрицы (10), то статистическая сумма (7) равна $Z_N = \lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N$. Пусть λ_1 – максимальное из собственных чисел матрицы $\mathbf{V}$. Тогда в термодинамическом пределе $N \to \infty$

$$bM_{\mathrm{m}} = \frac{\partial \ln \lambda_1}{\partial h}, \qquad b = \frac{\partial \ln \lambda_1}{\partial r}. \tag{11}$$

Собственные числа матрицы (10) находятся из характеристического уравнения

$$\lambda^3 + A\lambda^2 + B\lambda + C = 0, \tag{12}$$

где

$$\begin{aligned} &A = -\big(1 + 2e^{(1+\gamma)K+r} \operatorname{ch} h\big), \\ &B = 2\big(e^{2(\gamma K+r)} \operatorname{sh}(2K) + (e^{(1+\gamma)K} - 1)e^r \operatorname{ch} h\big), \\ &C = -4e^{\gamma K+2r}\big(e^{\gamma K} \operatorname{ch} K - 1\big) \operatorname{sh} K, \qquad \gamma = \frac{L}{K} = \frac{U}{J}. \end{aligned}$$

Решая уравнение (12) численно или по формулам Кардано и находя λ_1, можно, используя соотношение (11), определить зависимость намагниченности M_{m} от b и h при любом значении γ, в частности при таком, которое соответствует псевдохаотическому распределению примесей; в этом случае $M_{\mathrm{m}} = M_{\mathrm{a}}$.

Определим для модели Изинга с подвижными примесями корреляционные функции. Ковариацию $g_{ij}^b = \langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle - b^2$ величин σ_i^2 и σ_j^2 (их средние значения равны концентрации магнитных атомов b), которая рассматривается как функция от расстояния между этими узлами, назовем, как было сказано выше, позиционной корреляционной функцией. Ковариацию $g_{ij}^{\mathrm{m}b} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - b^2 M^2$ самих величин σ_i и σ_j назовем "магнитно-позиционной" корреляционной функцией, поскольку она характеризует связь между положениями и магнитными моментами атомов. Рассмотрим вычисление этих корреляционных функций для линейной цепочки:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{\sigma\}} & V(\sigma_1, \sigma_2) \ldots V(\sigma_{i-1}, \sigma_i) \times \\ & \times \sigma_i^2 V(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \ldots V(\sigma_{j-1}, \sigma_j) \sigma_j^2 V(\sigma_j, \sigma_{j+1}) \ldots V(\sigma_N, \sigma_1), \end{aligned} \tag{13}$$

где

$$V(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \exp\left\{K\sigma_i\sigma_{i+1} + L\sigma_i^2\sigma_{i+1}^2 + r\frac{\sigma_i^2 + \sigma_{i+1}^2}{2} + h\frac{\sigma_i + \sigma_{i+1}}{2}\right\}$$

есть элемент трансферматрицы.

Введем матрицу $\mathbf{S} = \mathrm{diag}(0, 1, 1)$ и запишем равенство (13) в следующем виде:

$$\langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle = \frac{1}{Z_N} \operatorname{Tr}\bigl\{\mathbf{V}^{i-1}\mathbf{S}\mathbf{V}^{j-i}\mathbf{V}^{N-j+1}\bigr\}. \tag{14}$$

Для вычисления следа в правой части равенства (14) рассмотрим ортогональную матрицу $\mathbf{P}$, приводящую симметричную трансферматрицу $\mathbf{V}$ к диагональному виду: $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{V}\mathbf{P} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$. Тогда (14) запишется в виде

$$\langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle = \frac{1}{Z_N} \operatorname{Tr}\Bigl\{ \mathrm{diag}(\lambda_1^{i-1}, \lambda_2^{i-1}, \lambda_3^{i-1}) \cdot \widetilde{\mathbf{S}} \times \\ \times \mathrm{diag}(\lambda_1^{j-1}, \lambda_2^{j-1}, \lambda_3^{j-1}) \cdot \widetilde{\mathbf{S}} \cdot \mathrm{diag}(\lambda_1^{N-j+1}, \lambda_2^{N-j+1}, \lambda_3^{N-j+1})\Bigr\}, \tag{15}$$

где $\widetilde{\mathbf{S}} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{S}\mathbf{P}$. Учитывая, что $Z_N = \lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N$, и переходя к пределу $N \to \infty$, имеем

$$\langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle = \frac{1}{\lambda_1^{j-1}} \operatorname{Tr}\Bigl\{\mathrm{diag}(\lambda_1^{i-1}, \lambda_2^{i-1}, \lambda_3^{i-1}) \cdot \widetilde{\mathbf{S}} \cdot \mathrm{diag}(\lambda_1^{j-1}, \lambda_2^{j-1}, \lambda_3^{j-1}) \cdot \widetilde{\mathbf{S}} \cdot \mathrm{diag}(1, 0, 0)\Bigr\}.$$

Выражая корреляционную функцию (13) через элементы матрицы $\widetilde{\mathbf{S}}$, получаем

$$\langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle = \tilde{s}_{11}^2 + \tilde{s}_{12}\tilde{s}_{21}\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{j-i} + \tilde{s}_{13}\tilde{s}_{31}\left(\frac{\lambda_3}{\lambda_1}\right)^{j-i}. \tag{16}$$

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

$$g_{ij}^b = \langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle - b^2 = \alpha x_1^{j-i} + \beta x_2^{j-i}, \tag{17}$$

где $\alpha = \tilde{s}_{12}\tilde{s}_{21}$, $\beta = \tilde{s}_{13}\tilde{s}_{31}$, $x_1 = \lambda_2/\lambda_1$, $x_2 = \lambda_3/\lambda_1$. Для расчета магнитно-позиционной корреляционной функции нужно использовать вместо матрицы $\mathbf{S}$ матрицу $\mathbf{S}_1 = \mathrm{diag}(0, 1, -1)$, что приводит для $g_{ij}^{\mathrm{m}b}$ к уравнению, аналогичному (17):

$$g_{ij}^{\mathrm{m}b} = \alpha_1 x_1^{j-i} + \beta_1 x_2^{j-i}. \tag{18}$$

Оказывается, что при $h = 0$ (в этом случае намагниченность M_{m} также обращается в ноль – в одномерной цепочке при ненулевой температуре не возникает спонтанная намагниченность) один из коэффициентов α или β в формуле (17) обращается в ноль (какой именно, зависит от нумерации корней λ_2 и λ_3 характеристического уравнения), т. е. позиционная корреляционная функция в этом случае имеет вид убывающей геометрической прогрессии. Что касается магнитно-позиционной корреляционной функции (18), то она также приобретает при $h = 0$ вид геометрической прогрессии. Однако если в (17) знаменатель прогрессии равен x_1, то в (18) он равен x_2, и наоборот. Если же $h \neq 0$, то все четыре коэффициента α, β, α_1 и β_1 в выражениях (17) и (18) не равны нулю.

Рассмотрим теперь псевдохаотическое приближение: подберем величину L с таким расчетом, чтобы при заданных значениях внешнего поля h, температурного параметра K и концентрации b магнитных атомов корреляционная функция g_{12}^b

равнялась нулю. Согласно изложенному выше при $h = 0$ такой выбор L приводит к обращению в ноль всех значений позиционной корреляционной функции g_{ij}^b, т. е. распределение примесей в этом случае является некоррелированным на любых расстояниях. Если же $h \neq 0$, то обращение в ноль только функции g_{12}^b уже не приводит к обращению в ноль всех g_{ij}^b, но все же можно считать, что расположение примесей более хаотично, чем при $g_{12}^b \neq 0$.

Таким образом, для одномерной цепочки с немагнитным разбавлением мы имеем следующий результат. При $M_{\mathrm{m}} = 0$ расположение немагнитных примесей в псевдохаотическом приближении становится некоррелированным на любых межатомных расстояниях и одновременно магнитная восприимчивость при $h = 0$, вычисленная в псевдохаотическом приближении, совпадает с точным значением. Предположим теперь, что аналогичная ситуация имеет место не только для одномерной цепочки с разбавлением, но и для произвольной кристаллической решетки, т. е. предположим, что для модели Изинга с немагнитным разбавлением на любой кристаллической решетке в области значений параметров K, b, h, при которых $M = 0$, расположение примесей в псевдохаотическом приближении некоррелировано на любых расстояниях. Кроме того, предположим, что вычисленная в этом приближении магнитная восприимчивость на границе области $M = 0$ совпадает с точным значением магнитной восприимчивости для модели Изинга с неподвижными вмороженными примесями. Как показано ниже, есть основания полагать, что это предположение справедливо для модели Изинга с немагнитным разбавлением на произвольной решетке Бете.

6. РЕШЕТКА БЕТЕ С РАЗБАВЛЕНИЕМ

Решетка Бете строится следующим образом [4]. Центральный узел соединяется с q другими узлами, каждый из которых в свою очередь соединяется с $q-1$ новыми узлами. Проделав эту процедуру n раз, мы получаем так называемое дерево Кэли. Решеткой Бете является внутренняя (далекая от граничных точек) часть этого графа при $n \to \infty$. Прежде всего рассмотрим решение для модели Изинга на решетке Бете с подвижными примесями, находящимися в термодинамическом равновесии с матрицей. Статистическую сумму (1) на решетке Бете можно вычислить методом, основанным на составлении рекуррентных уравнений [4]. Применение этого метода дает следующий результат [5]:

$$M_{\mathrm{m}} = \operatorname{th}\frac{qx-h}{q-1}, \qquad b = \frac{2y\operatorname{ch}x + \operatorname{ch}(2x) + e^{-2K}}{2y^2 e^{(1+\gamma)K} + 4y\operatorname{ch}x + \operatorname{ch}(2x) + e^{-2K}},$$
$$\mu = -kT\ln\left(2y^q e^{q(1+\gamma)K}\left(\frac{p}{1-p}\right)^{q-1}(1-M_{\mathrm{m}}^2)^{(q-1)/2}\right), \tag{19}$$

где

$$y = \frac{1}{2}(1-e^{-2K})\frac{\operatorname{sh}\frac{qx-h}{q-1}}{\operatorname{sh}\frac{x-h}{q-1}} - \operatorname{ch}x. \tag{20}$$

Эти соотношения представляют собой параметрические зависимости $M_{\mathrm{m}} = M_{\mathrm{m}}(x,h)$, $b = b(x,h,K)$ и $\mu = \mu(x,h,K)$, а параметр x меняется в пределах от h до такого значения x^*, при котором y обращается в ноль. Подробный анализ этих выражений при различных значениях γ был проведен в работе [5], где было показано, что ненулевое решение для M_{m} при $h = 0$ (т. е. спонтанная намагниченность) существует только при $b > b_{\mathrm{c}}(K)$, где пороговая концентрация $b_{\mathrm{c}}(K)$ зависит в том числе от параметра γ [5].

Позиционную корреляцию двух соседних узлов можно рассчитать по формуле

$$g_{12}^{b} = \frac{\operatorname{ch}(2x) + e^{-2K}}{2y^2 e^{(1+\gamma)K} + 4y \operatorname{ch} x + \operatorname{ch}(2x) + e^{-2K}} - b^2. \tag{21}$$

Аналогично

$$g_{12}^{\mathrm{m}b} = \frac{\operatorname{ch}(2x) - e^{-2K}}{2y^2 e^{(1+\gamma)K} + 4y \operatorname{ch} x + \operatorname{ch}(2x) + e^{-2K}} - M_{\mathrm{m}}^2 b^2. \tag{22}$$

Кроме того, в работе [5] были найдены функции g_{13}^{b} и $g_{13}^{\mathrm{m}b}$.

Предположим, что в случае произвольного q, как и для одномерной цепочки, позиционная и магнитно-позиционная корреляционные функции являются суммами двух убывающих геометрических прогрессий:

$$g_{ij}^{b} = \langle \sigma_i^2 \sigma_j^2 \rangle - b^2 = \alpha x_1^{j-i} + \beta x_2^{j-i}, \qquad g_{ij}^{\mathrm{m}b} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - M_{\mathrm{m}}^2 b^2 = \alpha_1 x_1^{j-i} + \beta_1 x_2^{j-i}. \tag{23}$$

Коэффициенты α, β, α_1, β_1 и знаменатели прогрессий x_1 и x_2 найдем, приравнивая функции (23) к корреляционным функциям g_{12} и g_{13}. Расчет показывает [5], что при $h = 0$ и $0 < b < b_{\mathrm{c}}(K)$ (в этой области спонтанная намагниченность $M_{\mathrm{m}} = 0$) коэффициенты α и β_1 (или β и α_1) обращаются в ноль, т. е. позиционная и магнитно-позиционная корреляционные функции имеют вид убывающих геометрических прогрессий, но с разными знаменателями. При этом в области существования спонтанной намагниченности (при $h = 0$, $b_{\mathrm{c}}(K) < b < 1$ и $K > K_{\mathrm{c}}(1)$) не равны нулю в общем случае все четыре коэффициента α, β, α_1, β_1.

Перейдем теперь к псевдохаотическому приближению, т. е. выберем параметр γ так, чтобы функция g_{12}^{b} обращалась в ноль. Это значение γ (зависящее от b, K и h) обозначим как γ_0. Параметр γ_0 задается следующим соотношением:

$$e^{(1+\gamma_0)K} = \frac{1}{2y^2}\left(\frac{\operatorname{ch}(2x) + e^{-2K}}{b^2} - \left(4y \operatorname{ch} x + \operatorname{ch}(2x) + e^{-2K}\right)\right), \tag{24}$$

при этом

$$b = \frac{\operatorname{ch}(2x) + e^{-2K}}{2y \operatorname{ch} x + \operatorname{ch}(2x) + e^{-2K}}. \tag{25}$$

Отсюда следует, что спонтанная намагниченность в системе может существовать только при $b > b_{\mathrm{c}}(K) = 1/((q-1)\operatorname{th} K)$, т. е. температура Кюри обращается в ноль при $b = b_{\mathrm{c}} = 1/(q-1)$.

Намагниченность имеет следующий вид:

$$M_{\mathrm{a}} = \operatorname{th} \frac{qx - h}{q-1}, \qquad b = \frac{\operatorname{th} \frac{qx-h}{q-1} - \operatorname{th} x}{\frac{\operatorname{sh}(2x)}{\operatorname{ch}(2x) + e^{-2K}} - \operatorname{th} x}, \tag{26}$$

а x меняется от $x_1 = h$ до такого значения x_2, при котором $b = 1$. Если $M_{\mathrm{a}} = 0$, т. е. $h = 0$ и $K < K_{\mathrm{c}}(b)$, то условие $g_{12}^{b} = 0$ автоматически приводит к тому, что все функции g_{ij}^b равны нулю. Этот результат свидетельствует в пользу выдвинутого выше предположения. Значение параметра γ_0 в этом случае не зависит от b и равно

$$\tilde{\gamma}_0 = \frac{1}{K} \ln \frac{2}{1 + e^{-2K}} - 1. \tag{27}$$

Учитывая, что $g_{11}^{\mathrm{m}b} = b$ и что магнитно-позиционная функция является в этом случае убывающей геометрической прогрессией, получаем $g_{ij}^{\mathrm{m}b} = b(b \operatorname{th} K)^{|j-i|}$. Дифференцируя величину M_a, заданную в (26), по h, найдем магнитную восприимчивость при $M_\mathrm{a} = 0$, т. е. при $h = 0$ и $K < K_\mathrm{c}(b)$:

$$\chi = b_\mathrm{c} \frac{1 + b \operatorname{th} K}{b_\mathrm{c} - b \operatorname{th} K}, \quad \text{где} \quad b_\mathrm{c} = \frac{1}{q-1}.$$

Согласно сделанному выше предположению мы получили точное значение магнитной восприимчивости для модели Изинга с вмороженными примесями на решетке Бете в области $M = 0$.

Конфликт интересов. Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] Е. З. Мейлихов, Р. М. Фарзетдинова, “Теория эффективного поля для разупорядоченных магнитных сплавов”, *ФТТ*, **56**:4 (2014), 679–686.

[2] Е. З. Мейлихов, Р. М. Фарзетдинова, “Обобщенная теория среднего поля для решеточных магнитных систем и ферромагнетизм полупроводников с магнитными примесями”, *ФТТ*, **47**:6 (2005), 1085–1091.

[3] С. В. Сёмкин, В. П. Смагин, “Модель Поттса на решетке Бете с немагнитными примесями”, *ЖЭТФ*, **148**:4 (2015), 729–733.

[4] Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, М., 1985.

[5] С. В. Сёмкин, В. П. Смагин, “Разбавленный изинговский магнетик на решетке Бете”, *Изв. вузов. Физика*, **58**:12 (2015), 159–167.

Поступила в редакцию 1.08.2018,
после доработки 11.04.2019,
принята к публикации 16.04.2019