

.....

Физико-математические науки

.....

Территория новых возможностей. Вестник Владивостокского государственного университета. 2023. Т. 15, № 3. С. 137–146
The Territory of New Opportunities. The Herald of Vladivostok State University. 2023. Vol. 15, № 3. P. 137–146

Научная статья
УДК 531.19
DOI: <https://doi.org/10.24866/VVSU/2949-1258/2023-3/137-146>

Антиферромагнетик Изинга в приближениях Кюри – Вейсса и Бете

Сергей Викторович Сёмкин

Виктор Павлович Смагин

Владивостокский государственный университет
Владивосток, Россия

***Аннотация.** В статье рассмотрена антиферромагнитная модель Изинга во внешнем магнитном поле. Точного аналитического решения для этой модели в настоящее время не существует (за исключением одномерного случая). Поэтому авторы рассматривают два приближенных метода. Первый из рассмотренных методов известен уже достаточно давно. Это метод среднего поля, также известный как приближение Кюри – Вейсса. Ранее при изучении ферромагнетиков авторы построили форму приближения Бете, основанную на сопоставлении кластеров различного размера. В настоящей работе используется эта форма приближения Бете для составления самосогласованных уравнений для антиферромагнетика. Наш подход позволяет не только получить новую трактовку приближения Бете, но и объединить это приближение и приближение Кюри – Вейсса в рамках единой теории эффективных полей. И метод Кюри – Вейсса и метод Бете приводят к выводу о том, что при определенных значениях температуры и внешнего поля в системе происходит фазовый переход второго рода. Гомогенное состояние, в котором намагниченности всех атомов одинаковы, переходит в состояние, в котором выделяются две магнитные подрешетки с различными намагниченностями. Граница между гомогенной и антиферромагнитной фазами, которая называется линией критического поля, построена в обоих рассмотренных приближениях. Кроме того, авторы построили полную намагниченность системы как функцию температуры и внешнего поля.*

***Ключевые слова:** фазовые переходы, модель Изинга, антиферромагнетик.*

***Для цитирования:** Сёмкин С.В., Смагин В.П. Антиферромагнетик Изинга в приближениях Кюри – Вейсса и Бете // Территория новых возможностей. Вестник Владивостокского государственного университета. 2023. Т. 15, № 3. С. 137–146. DOI: <https://doi.org/10.24866/VVSU/2949-1258/2023-3/137-146>.*

.....

Physical and mathematical sciences

.....

Original article

Ising antiferromagnet in the Curie – Weiss and Bethe approximations

Sergey V. Semkin

Viktor P. Smagin

Vladivostok State University
Vladivostok, Russia

© Сёмкин С.В., 2023

© Смагин В.П., 2023

Abstract. *In this paper we consider the antiferromagnetic Ising model in an external magnetic field. At present there is no exact analytical solution to this model (except for the one-dimensional case). Therefore, in the research the authors consider two approximate methods. The first of the methods considered has been known for quite a long time. This is the mean field method, also known as the Curie – Weiss approximation. Earlier, while studying ferromagnets, we constructed the form of the Bethe approximation based on the comparison of varisized clusters. In this paper we use this form of the Bethe approximation to develop self-consistent equations for an antiferromagnet. Our approach allows us not only to obtain a new interpretation of the Bethe approximation, but also to combine it with the Curie – Weiss approximation within the framework of a unified theory of effective fields. The following main results are obtained in the research. Both the Curie – Weiss method and the Bethe method lead to the conclusion that at certain values of temperature and external field there occurs a second-order phase transition in the system. A homogeneous state of all atoms magnetizations being similar goes into a state of two magnetic sublattices standing out with different magnetizations. The boundary between the homogeneous and antiferromagnetic phases, called the line of critical field, has been constructed in both approximations considered. In addition, we plotted the full magnetization of the system as a function of temperature and external field. In addition, we plotted the total magnetization of the system as a function of temperature and external field.*

Keywords: *phase transitions, Ising model, phase transitions, Ising model, antiferromagnet.*

For citation: *Semkin S.V., Smagin V.P. Ising antiferromagnet in the Curie – Weiss and Bethe approximations // The Territory of New Opportunities. The Herald of Vladivostok State University. 2023. Vol. 15, № 3. P. 137–146. DOI: <https://doi.org/10.24866/VVSU/2949-1258/2023-3/137-146>.*

Введение

В теории магнетизма известно множество различных типов магнитного упорядочения [1]. Антиферромагнитное упорядочение является наиболее распространенным типом как в природных, так и в искусственных магнетиках [2]. Антиферромагнитные свойства проявляются в высокотемпературных сверхпроводниках и в системах, описываемых физикой магнитных мультислоев и сверхструктур [2]. В антиферромагнетиках обменное взаимодействие приводит к возникновению как бы двух подрешеток, в каждой из которых спины сонаправлены, а сами они ориентированы в противоположные стороны [3]. В результате при отсутствии внешнего магнитного поля макроскопический магнитный момент всегда равен нулю, однако возникновение подрешеток происходит только при температуре $T < T_N$, которая называется температурой Нееля [2, 4]. Однако даже для простейших моделей, таких как модель Изинга, не существует точных решений для антиферромагнетика во внешнем поле. Что же касается приближенных решений [6, 7], то они недостаточно полно учитывают геометрию решетки магнетика.

В настоящей работе авторы исследуют магнитные свойства антиферромагнетика в приближении, развитом в работах [5]. Это приближение для чистого ферромагнетика эквивалентно приближению Бете [5], а для ферромагнетика с немагнитным разбавлением – псевдохаотическому приближению на решетке Бете [5]. Поэтому для антиферромагнетика будем называть наше приближение приближением Бете. В работе построены кривые критического поля для различных координационных чисел и зависимости намагниченности антиферромагнетика от температуры при различных значениях внешнего магнитного поля. Данные результаты сравним с аналогичными, полученными в известном приближении Кюри – Вейсса [6, 7]. Как известно [3], приближение Бете для магнетика с ферромагнитным взаимодействием лучше описывает критические явления в магнетике, чем приближение Кюри – Вейсса. Поэтому предполагаем, что наше приближение [5] лучше подходит и для описания антиферромагнитных взаимодействий.

Основная часть

Линии критического поля и намагниченность изинговского антиферромагнетика в приближениях среднего поля и Бете

Рассмотрим модель Изинга (хотя изложенные ниже подходы можно использовать и для других моделей [5]). Разделим мысленно систему на две вложенные друг в друга подрешетки, направленные в противоположные стороны.

Обозначим M_1 и M_2 намагниченности первой и второй подрешеток антиферромагнетика соответственно. Эти величины всегда можно представить в виде

$$M_1 = th(\chi_1 + h) \text{ и } M_2 = th(\chi_2 + p). \quad (1)$$

Величины χ_1 и χ_2 можно понимать как эффективные внутренние поля (деленные на kT , k – постоянная Больцмана, T – температура); $h = H/kT$, H – внешнее поле. Предположим, что подрешетки взаимодействуют только друг с другом, т.е. величина χ_1 определяется только спинами соседних узлов второй подрешетки, а величина χ_2 – спинами узлов первой подрешетки. Наиболее простым приближением для этого случая является приближение Кюри – Вейсса (приближение среднего поля) [6, 7], в соответствии с которым $\chi_1 = -q|K|M_2$ и $\chi_2 = -q|K|M_1$, где $K = J/kT$. Уравнения для M_1 и M_2 в приближении среднего поля имеют вид

$$\begin{cases} M_1 = th(h - q|K|M_2), \\ M_2 = th(h - q|K|M_1). \end{cases} \quad (2)$$

У системы (2) всегда есть «однородное» решение с $M_1 = M_2$, а при некоторых значениях параметров есть, кроме того, и «антиферромагнитное» решение с $M_1 \neq M_2$. В работе [7] показано, что в тех случаях, когда антиферромагнитное решение существует, оно более выгодно энергетически, чем однородное. Граница области $H = H_c(|K|)$, в которой существует решение с $M_1 \neq M_2$, определяется, как видно из системы (2), условиями

$$\begin{cases} M_c = th(h_c - q|K|M_c), \\ 1 = q|K|/ch^2(h_c - q|K|M_c). \end{cases} \quad (3)$$

Отсюда получим

$$H_c(|K|) = \begin{cases} \frac{1}{|K|} \operatorname{ath} \sqrt{1 - \frac{1}{q|K|} + q} \sqrt{1 - \frac{1}{q|K|}}, & |K| > \frac{1}{q}, \\ 0, & |K| \leq \frac{1}{q}. \end{cases} \quad (4)$$

Кривую (4) можно представить в виде

$$\frac{H_c}{q} = f\left(\frac{1}{q|K|}\right), \text{ где } f(x) = x \ln(1 + \sqrt{1-x}) - \frac{x}{2} \ln x + \sqrt{1-x}. \quad (5)$$

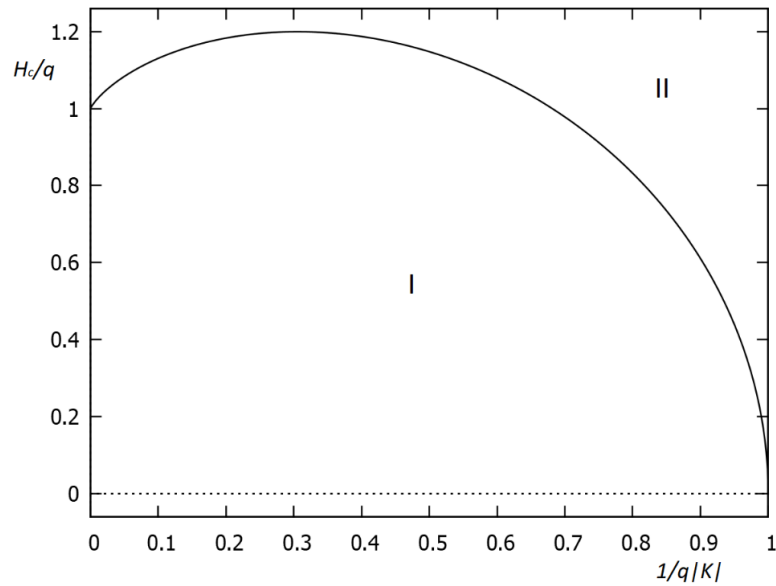


Рис. 1. Линия критического поля в приближении Кюри – Вейсса

Кривая $H = H_c(|K|)$ на рис. 1, называемая линией критического поля, отделяет область антиферромагнитной фазы (область I) от области парамагнитной фазы (область II). В области I намагниченности подрешеток M_1 и M_2 различны, а в области II – совпадают, причем и в той, и в другой области они являются решениями системы уравнений (2). В приближении среднего поля кривая критического поля (4-5) существует при всех значениях q и обращается в ноль при температуре Нееля $T_N = \frac{q|J|}{k}$, а при $T \rightarrow 0$ критическое поле H_c (в единицах $|J|$) стремится к координационному числу q . На рисунке 1 видно, что кривая критического поля немонотонна и имеет максимум при $T \approx 0,3T_N$, величина которого $H_{cm} \approx 1,2q$. Это означает, что если внешнее поле H постоянно и лежит в диапазоне от q до $1,2q$, то при увеличении температуры при некотором ее значении в системе возникает антиферромагнитная фаза, а при дальнейшем увеличении снова исчезает. Причем в приближении среднего поля такая ситуация возможна при любом значении q . На рисунке 2 представлена намагниченность изинговского антиферромагнетика в приближении Кюри – Вейсса.

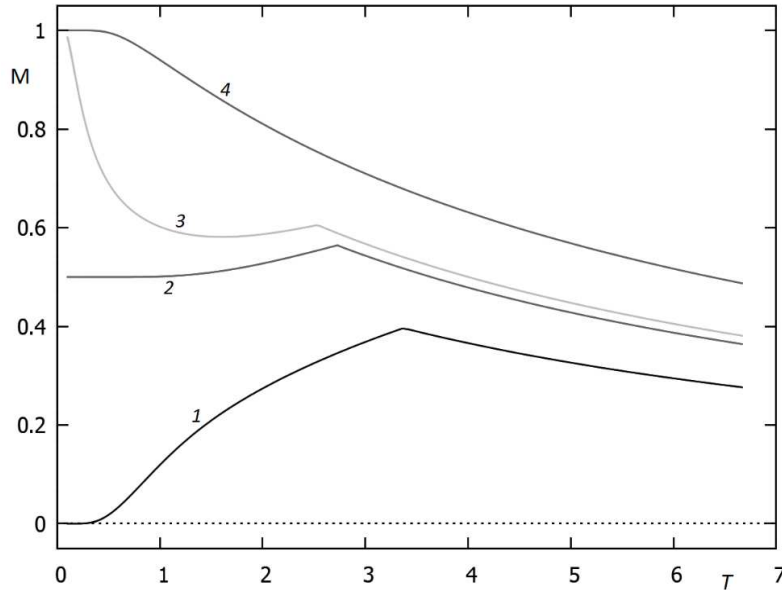


Рис. 2. Намагниченность изинговского антиферромагнетика ($q = 4$) в приближении Кюри – Вейсса в зависимости от температуры $T = 1/|K|$ при различных значениях внешнего магнитного поля H (в единицах $|J|$). Кривые 1-4 построены для $H = 3; 4; 4,2; 5,5$ соответственно

Рассмотрим кластер из двух соседних спинов, причем первый из них принадлежит первой подрешетке, а второй – второй подрешетке. Тогда намагниченности M_1 и M_2 можно представить в виде

$$M_{1,2} = \frac{\theta^{-K} sh(\psi_1 + \psi_2 + 2h) \pm sh(\psi_1 - \psi_2)}{\theta^{-K} ch(\psi_1 + \psi_2 + 2h) + ch(\psi_1 - \psi_2)}, \quad (6)$$

где величины ψ_1 и ψ_2 можно понимать как эффективные внутренние поля для этого кластера. Поля ψ_1 и ψ_2 можно приближенно выразить через намагниченности M_1 и M_2 , получив таким образом обобщение теории Кюри – Вейсса [5]. Существует, однако, и другой подход, развитый в работах [8], при котором поля ψ_1 и ψ_2 связываются непосредственно с эффективными полями χ_1 и χ_2 , входящими в выражение (1). В общем виде эта связь определяется при помощи задания функций отношения $\Psi_{1,2}/\chi_{1,2}$ [9, 10]. В наиболее простом случае связь между полями можно задать в виде

$$\frac{\Psi_1}{\chi_1} = \frac{\Psi_2}{\chi_2} = \frac{q-1}{q}. \quad (7)$$

Как показано в работе [5], аналогичное приближение для ферромагнетика соответствует приближению Бете. В настоящей работе мы используем прибли-

жение (7) для исследования поведения антиферромагнетика. Введем обозначения $w_{1,2} = \psi_{1,2} + h$. Тогда, используя выражения (1), (6) и (7), получим уравнения, из которых определяются намагниченности M_1 и M_2 подрешеток антиферромагнетика:

$$M_{1,2} = th\left(\frac{qw_{1,2} - h}{q-1}\right) = \frac{\theta^{zK} sh(w_1 + w_2) \pm sh(w_1 - w_2)}{\theta^{zK} ch(w_1 + w_2) + ch(w_1 - w_2)}. \quad (8)$$

Уравнения относительно w_1 и w_2 можно преобразовать к виду

$$\begin{cases} th(w_1) = th\left(\frac{h - w_2}{q-1}\right) / th(|K|), \\ th(w_2) = th\left(\frac{h - w_1}{q-1}\right) / th(|K|). \end{cases} \quad (9)$$

Решения системы уравнений (9) либо симметричны относительно диагонали $w_1 = w_2$, либо лежат на этой диагонали. Физически это означает, что система может находиться либо в гомогенном состоянии, когда намагниченности подрешеток равны (и они ничем не отличаются друг от друга), либо в состоянии, когда $M_1 \neq M_2$ (подрешетки отличаются только нумерацией). Как видно из системы уравнений (9), диагональное решение $w_0 = w_1 = w_2$ существует при любых значениях параметров h и $|K|$, а граница области, в которой это решение является единственным ($w_0 = w_c, h = h_c(|K|)$), определяется условием

$$\begin{cases} th(w_c) = th\left(\frac{h_c - w_c}{q-1}\right) / th(|K|), \\ \frac{(q-1)th(|K|)}{ch^2(w_c)} = \frac{1}{ch^2\left(\frac{h_c - w_c}{q-1}\right)}. \end{cases} \quad (10)$$

Из этой системы найдем следующее:

$$th(w_c) = \sqrt{\frac{th(|K|) - \alpha}{th(|K|)}}, \quad (11)$$

где $th(\alpha) = 1/(q-1)$.

А выражая h , получим

$$H_c(|K|) = \begin{cases} \frac{q-1}{|K|} ath\sqrt{th(|K|)th(|K|) - \alpha} + \frac{1}{|K|} ath\sqrt{\frac{th(|K|) - \alpha}{th(|K|)}}, & |K| > \alpha, \\ 0, & |K| \leq \alpha. \end{cases} \quad (12)$$

На рисунке 3 представлены линии критических полей в приближении Бете.

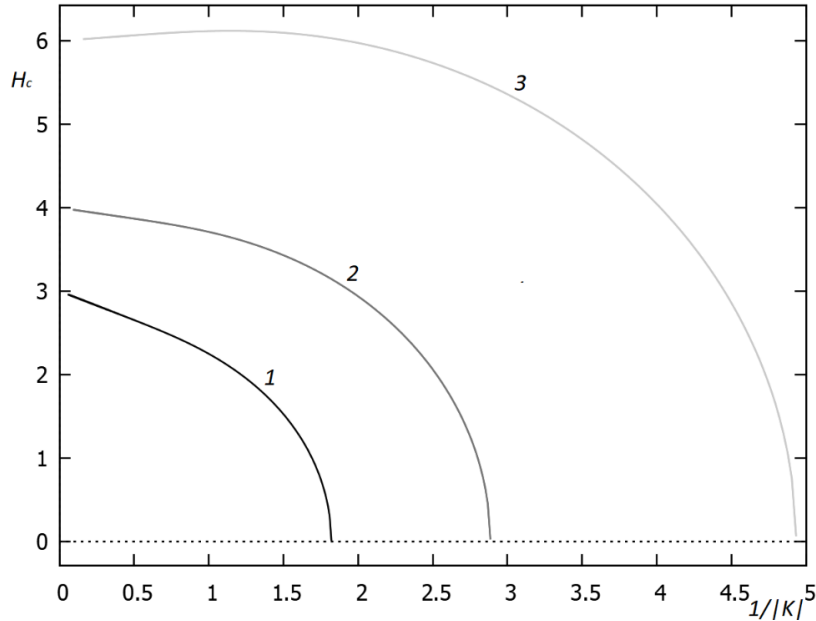


Рис. 3. Линии критических полей в приближении Бете. Кривые 1, 2, 3 соответствуют значениям q , равным 3, 4 и 6 соответственно

На рисунке 2 показаны линии критических полей (12). В отличие от приближений Кюри – Вейсса (см. рис. 1) вид кривой $H_c(|K|)$ качественно меняется в зависимости от координационного числа q . При q , равном 3 и 4, критическое поле монотонно падает от q до 0 с ростом T (кривые 1 и 2 на рис. 2). Но при $q \geq 6$ на кривых имеется немонотонный участок (кривая 3 на рис. 2).

Предположим (по аналогии с приближением среднего поля), что в области, в которой кроме диагонального решения w_0 существует и решение (9), не лежащее на диагонали (т.е. $w_1 \neq w_2$), именно данное решение и определяет намагниченности подрешеток $M_{1,2}$ (8), т.е. линию (12) следует считать линией фазовых переходов, отделяющей область с $M_1 = M_2$ от области с $M_1 \neq M_2$. Это предположение приводит к следующему алгоритму (аналогичному тому, который применяется и в приближении среднего поля) нахождения M_1 и M_2 при заданных H и $|K|$. Сначала находим решение уравнения $th(w_0) = th\left(\frac{h-w_0}{q-1}\right) / th(|K|)$ в интервале от 0 до $h = |K|H$. Если выполняется условие $h > h_c(|K|)$, то $M_1 = M_2 = th\left(\frac{qw_0 - h}{q-1}\right)$. Если же это условие не выполнено, находим w_1 , решив уравнение

$$th(|K|)th(w_1) = th \left(h - ath \frac{th \left(\frac{n - w_1}{q - 1} \right)}{th(|K|)} \right) / (q - 1) \tag{13}$$

на интервале от w_0 до $h + (q - q)|K|$ и $w_2 = ath \frac{th \left(\frac{h - w_1}{q - 1} \right)}{th(|K|)}$. Далее намагниченности

подрешеток M_1 и M_2 находим из уравнений (8); полная намагниченность системы $M = (M_1 + M_2) / 2$.

На рисунке 4 представлена намагниченность изинговского антиферромагнетика в приближении Бете.

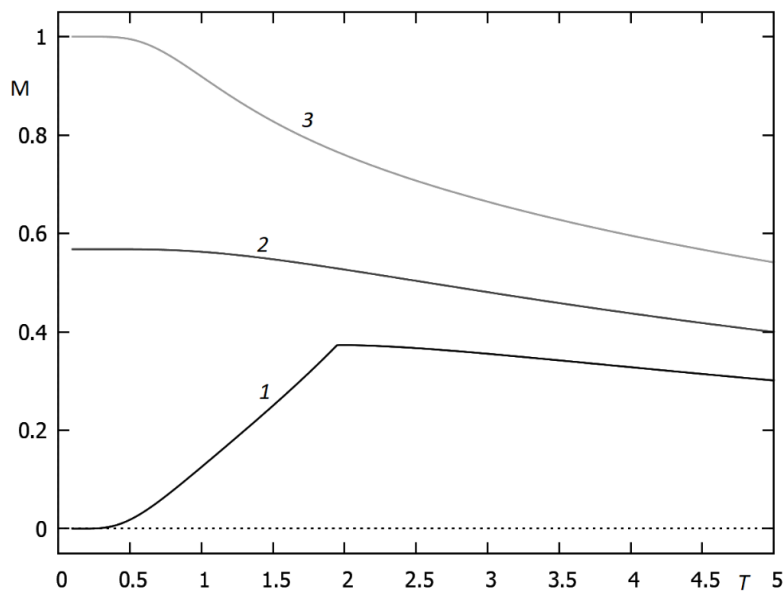


Рис. 4. Намагниченность изинговского антиферромагнетика ($q = 4$) в приближении Бете в зависимости от температуры $T = 1/|K|$ при различных значениях внешнего магнитного поля H (в единицах $|J|$). Кривые 1-3 построены для $H = 3; 4; 5,5$ соответственно

Заключение

Таким образом, в работе получены следующие результаты:

1. Для антиферромагнитной модели Изинга исследована зависимость критического поля H_c от $|K|$ как в приближении Кюри – Вейсса, так и в приближении

Бете. Кривая $H_c(|K|)$ отделяет гомогенную область (область II на рис. 1 и 3) от области существования антиферромагнитных подрешеток (область I).

2. При $|K| \rightarrow \infty$ ($T \rightarrow 0$) критическое поле H_c равно $q|J|$ в обоих приближениях. Поле H_c обращается в ноль при $|K| \rightarrow K_N$, где $K_N = q$ в приближении среднего поля и $K_N = \frac{1}{2} \ln \frac{q}{q-2}$ в приближении Бете. ($K_N = 1/T_N$, T_N – температура Нееля.)

3. В приближении Кюри – Вейсса кривая $H_c(|K|)$ всегда имеет немонотонный участок (см. рис. 1), в то время как в приближении Бете (см. рис. 3) такой участок возникает только при $q \geq 6$.

4. В рассмотренных приближениях (Кюри – Вейсса и Бете) построены зависимости средней намагниченности M от температуры $T = 1/|K|$ при различных значениях внешнего поля H . Если значение внешнего поля H лежит в интервале от 0 до $q|J|$, то намагниченность при росте температуры возрастает от нуля до максимального значения, соответствующего пересечению с кривой $H_c(|K|)$, а затем монотонно падает (кривые 1 на рис. 2 и 4). При значении H , в точности равном $q|J|$, намагниченность при $T \rightarrow 0$ стремится к некоторому предельному значению M_f , равному 0,5 в приближении Кюри – Вейсса и зависящему от q в приближении Бете. (То, что M_f в любом случае не равно 0 или 1, свидетельствует о вырожденности основного состояния.) При значениях $H \in (q|J|, H_{cm})$, где H_{cm} – максимальное значение $H_c(|K|)$, изолиния $M(H, T), H = const$ пересекает линию $H_c(|K|)$ в общем случае дважды. Это приводит к немонотонному убыванию $M(T)$ (кривая 3 на рис. 2). Если же $H > H_{cm}$, намагниченность $M(T)$ монотонно падает от единицы.

Список источников

1. Вонсовский С.В. Магнетизм. Магнитные свойства диа-, пара-, ферро-, антиферро- и ферромагнетиков. Москва, 1971. 1032 с.
2. Симметрия и физические свойства антиферромагнетиков / Е.А. Туров, А.В. Колчанов, В.В. Меньшенин [и др.]. Москва: Физматлит, 2001. 559 с.
3. Фазовые переходы и критические явления / пер. с англ. А.И. Мицека и Т.С. Шубиной; под ред. акад. С.В. Вонсовского. Москва: Мир, 1973. 419 с.
4. Елесин В.Ф., Кашурников В.А. Физика фазовых переходов: учебное пособие. Москва: МИФИ, 1997. 180 с.
5. Семкин С.В., Смагин В.П. Приближенные методы в теории чистых и разбавленных магнетиков: монография. Владивосток: Изд-во ВГУЭС, 2019. 220 с.
6. Кривнов В.Я., Провоторов Б.Н., Сарычев М.Е. О фазовых переходах в антиферромагнитной модели Изинга // Теоретическая и математическая физика. 1972. Т. 13, № 2. С. 276–285.

7. Garret C.G.B. The Critical Field Curve in an Antiferromagnetic Crystal // *J. Chem. Phys.* 1951. № 19. P. 1154–1161.
8. Семкин С.В., Смагин В.П. Дополнительная характеристика магнетика – функция отношения внутренних полей // *Территория новых возможностей. Вестник ВГУЭС.* 2022. Т. 14, № 2. С. 148–156.
9. Семкин С.В., Смагин В.П. Свободная энергия одномерной модели Изинга разбавленного магнетика // *Территория новых возможностей. Вестник ВВГУ.* 2023, Т. 15, № 2. С. 81–87.
10. Семкин С.В., Смагин В.П., Лаврушина Е.Г. Построение приближенного решения для изинговского магнетика во внешнем магнитном поле // *Физика твердого тела.* 2023. Т. 65, вып. 6. С. 1042–1046.

References

1. Vonsovsky S.V. Magnetism. Magnetic properties of dia-, para-, ferro-, antiferro- and ferromagnets. Moscow; 1971. 1032 p.
2. Symmetry and physical properties of antiferromagnets / E.A. Turov, A.V. Kolchanov, V.V. Menshenin [et al.]. Moscow: Fizmatlit; 2001. 559 p.
3. Phase transitions and critical phenomena / per. With English A.I. Miceca and T.S. Shubina; under the ed. Acad. S.V. Vonsovsky. Moscow: Mir; 1973. 419 p.
4. Elesin V.F., Kashurnikov V.A. Physics of phase transitions: a textbook. Moscow: МЕРФИ; 1997. 180 p.
5. Semkin S.V., Smagin V.P. Approximate methods in the theory of pure and diluted magnets: monograph. Vladivostok: VSUES Publishing House; 2019. 220 p.
6. Krivnov V.Ya., Provotorov B.N., Sarychev M.E. On phase transitions in the Ising antiferromagnetic model. *Theoretical and mathematical physics.* 1972; 13 (2): 276–285.
7. Garret C.G.B. The Critical Field Curve in an Antiferromagnetic Crystal. *J. Chem. Phys.* 1951; (19): 1154–1161.
8. Semkin S.V., Smagin V.P. An additional characteristic of the magnetic is the function of the ratio of internal fields. *Territory of new possibilities. VGUES Bulletin.* 2022; 14 (2): 148–156.
9. Semkin S.V., Smagin V.P. Free energy of the one-dimensional Ising model of diluted magnetic. *Territory of new possibilities. VVGU Bulletin.* 2023; 15 (2): 81–87.
10. Semkin S.V., Smagin V.P., Lavrushina E.G. Construction of an approximate solution for the Ising magnetic in an external magnetic field. *Solid state physics.* 2023; 65 (6): 1042–1046.

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/2949-1258/2023-3/137-146>

Дата поступления:
04.04.2023

Одобрена после рецензирования:
15.05.2023

Принята к публикации:
10.06.2023