

05,11

Построение приближенного решения для изинговского магнетика во внешнем магнитном поле

© С.В. Сёмкин, В.П. Смагин, Е.Г. Лаврушина

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса,
Владивосток, Россия

E-mail: Li15@rambler.ru

Поступила в Редакцию 3 апреля 2023 г.

В окончательной редакции 25 апреля 2023 г.

Принята к публикации 25 апреля 2023 г.

Предложен способ приближенного расчета намагниченности изинговского магнетика, находящегося во внешнем магнитном поле. Этот способ основан на использовании точного или приближенного выражения для спонтанной намагниченности изинговского магнетика на этой же решетке. В способе используется отношение эффективных полей для кластеров из одного и двух узлов решетки. С помощью предложенного способа для магнетика, находящегося во внешнем поле, рассчитана зависимость намагниченности от температуры и величины внешнего поля. Предложенный способ в работе применяется к решению в приближении среднего поля, к решению в приближении Бете и к точному решению на квадратной решетке; для всех этих решений вычислены критические индексы, характеризующие поведение магнетика во внешнем поле.

Ключевые слова: модель Изинга, фазовые переходы, влияние внешнего поля.

DOI: 10.21883/0000000000

1. Введение

Влияние магнитного поля на поведение магнетиков, в том числе и тех, которые описываются моделью Изинга, исследуется достаточно давно [1,2]. Наибольший интерес это влияние представляет для таких моделей магнетиков, для которых нет точного решения [3,4]. В связи с этим в настоящей работе мы предлагаем подход к построению способа приближенного учета влияния внешнего магнитного поля на поведение систем, описываемых моделью Изинга.

В нашей работе [5] вводится „функция отношения эффективных полей обменного взаимодействия“. Эту функцию мы определяем как отношение таких значений полей обменного взаимодействия, при которых кластерное среднее спина равно среднему по ансамблю. Кроме того, в работе [5] установлена связь между функцией отношения и спонтанной намагниченностью как функцией температуры. Связь позволяет вычислить функцию отношения, если есть приближенное или точное решение для модели Изинга. В работе [5] мы предположили, что при немагнитном разбавлении функция отношения как функция спонтанной намагниченности приближенно такая же, как и для чистого магнетика, и рассмотрели следствия этого предположения. В настоящей работе, которую можно считать продолжением [5], рассмотрено предположение о приближенной независимости функции отношения от внешнего магнитного поля для чистого изинговского магнетика. Отметим, что изложенный в настоящей работе подход можно применить в сочетании с подходом, изложенным в [5]. Можно показать [6,7], что для решетки Бете предположение

о независимости функции отношения от внешнего поля является точным. Поэтому целью настоящей работы является исследование того, к чему это допущение приводит в других случаях. А именно, мы используем выражение для температурной зависимости спонтанной намагниченности в приближении среднего поля [8] и точное решение для квадратной решетки [9]. Для этих случаев в рассмотренном приближении построена зависимость намагниченности от внешнего поля при температурах больше и меньше критической и найдены критические индексы, характеризующие поведение во внешнем поле.

2. Намагниченность и функция отношения в модели Изинга

Гамильтониан модели Изинга на некоторой решетке имеет вид

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i, \quad (1)$$

где σ_i и σ_j — изинговские „спины“, принимающие значения $+1$ и -1 , J — энергия обменного взаимодействия, H — внешнее поле; суммирование в первой сумме проводится по всем парам соседних спинов, во второй — по всем узлам. [9]

Если модель Изинга задана на простой решетке с координационным числом q , то, как показано в [5], средняя намагниченность на узел M может быть найдена

следующим образом:

$$M = \frac{\text{sh}(2w)}{\text{ch}(2w) + t}, \quad (2)$$

где

$$w = y(M, H) \cdot \text{arcth}(M) + KH(1 - y(M, H)).$$

Здесь $K = J/(k_B T)$, k_B — постоянная Больцмана, T — температура, $t = \exp(-2K)$, а $y(M, H)$ — некоторая функция намагниченности M и внешнего поля H . Эту функцию, определенную в работе [5], мы называем функцией отношения. Ее можно понимать как отношение некоторых „эффективных полей“ в кластерах из одного и двух спинов [5]. Если известно точное или приближенное значение спонтанной намагниченности как функции температуры и внешнего поля $M = M(t, H)$ или обратная зависимость $t = v(M, H)$, из (2) можно найти функцию отношения $y(M, H)$:

$$y(M, H) = \frac{\frac{1}{2} \ln\left(\frac{v(M, H)M + \sqrt{(v(M, H)M)^2 + 1 - M^2}}{1 - M}\right) - KH}{\text{arcth}(M) - KH}. \quad (3)$$

И наоборот, если из каких-либо соображений известна функция $y(M, H)$, то из (2) можно найти соответствующую этой функции зависимость $M = M(t, H)$. Отметим, что при $H = 0$ из (2) по заданной функции отношения $y(M)$ мы получим не только решение $M = M(t)$, но и решения $M = -M(t)$ и $M = 0$, причем последнее является неустойчивым при $t < t_c = \exp(-2K_c)$.

Сделаем теперь предположение относительно функции отношения $y(M, H)$. А именно, допустим, что эта функция не зависит от внешнего поля H . Как показано в работах [5] и [6,7], это предположение выполняется точно для модели Изинга во внешнем поле на решетке Бете. В этом случае функция отношения равна просто константе $\frac{q-1}{q}$. Конечно, мы не ожидаем, что для других решеток $y(M, H)$ не зависит от H , как и для решетки Бете. Более того, для квадратной решетки, как будет показано ниже, это предположение не может выполняться точно. Однако, предполагая независимость $y(M, H)$ от H , можно получить приближенное решение для намагниченности во внешнем поле H , используя решение для спонтанной намагниченности при $H = 0$ для той же решетки. То есть, будем действовать следующим образом. Пусть имеется решение $M = M(t)$ при $H = 0$ (например, решение Онзагера для плоской квадратной решетки [9]). Представим это решение в виде $t = v(M)$ и используя (3), при $H = 0$ найдем функцию $y(M)$:

$$y(M) = \frac{\ln(\varphi(v(M), M)) - \ln(1 - M)}{2\text{arcth}(M)}, \quad (4)$$

где

$$\varphi(x, M) = xM + \sqrt{(xM)^2 + 1 - M^2}.$$

Теперь подставим в (2) вместо $y(M, H)$ найденную с помощью (4) функцию $y(M)$. Полученное выражение

и будем использовать для приближенного нахождения зависимости намагниченности от температуры и внешнего поля $M = M(t, H)$. Это выражение можно аналитически представить в форме обратной зависимости $H = H(t, M)$:

$$H = \frac{1}{K} \frac{\ln\left(\frac{\varphi(v, M)}{\varphi(t, M)}\right)}{\ln\left(\frac{\varphi(v, M)}{1 + M}\right)} \text{arcth}(M). \quad (5)$$

Найдем теперь магнитную восприимчивость при $H = 0$. Дифференцируя (2) по H при $H = 0$ и полагая, что y не зависит от H , получим

$$\chi(H, T) = \frac{2AK(1 - y)}{1 - 2A\left(\frac{\partial y}{\partial M} \text{arcth} M + \frac{y}{1 - M^2}\right)}. \quad (6)$$

где

$$A = \frac{\text{ch}(2w)}{\text{ch}(2w) + t} - M^2.$$

При температуре больше, чем температура Кюри из (6), следует

$$\chi = \frac{K(1 - t)}{t - t_c}, \quad (7)$$

где $t_c = \exp(-2K_c)$, $K_c = \frac{J}{k_B T_c}$, T_c — температура Кюри. Критический показатель γ определяется из асимптотического выражения $\chi(0, T) \propto (T - T_c)^{-\gamma}$, $T > T_c$ [9]. Из (7) видно, что $\gamma = 1$, то есть выполняется закон Кюри–Вейса [8].

Таким образом, предлагаемая процедура позволяет построить приближенное решение для модели Изинга во внешнем поле используя решение для той же решетки при отсутствии внешнего поля. В работе [5] этот же прием использовался для получения приближенного решения для изинговского магнетика с немагнитным разбавлением но без внешнего поля. Это означает, что обе ситуации можно объединить, то есть представленный в настоящей работе метод может быть использован для построения приближенного решения задачи о разбавленном магнетике во внешнем поле.

3. Применение функции отношения к теории среднего поля, приближению Бете и решению Онзагера

Рассмотрим применение описанного выше способа построения решения для модели Изинга во внешнем поле на некоторых примерах. Для начала применим способ к модели среднего поля [9]. Разумеется, в методе среднего поля можно прямо учесть влияние внешнего поля на намагниченность [8]. Тем не менее, мы используем метод функции отношения в модели среднего поля для того, чтобы показать, что даже в такой упрощенной модели применение функции отношения дает вполне

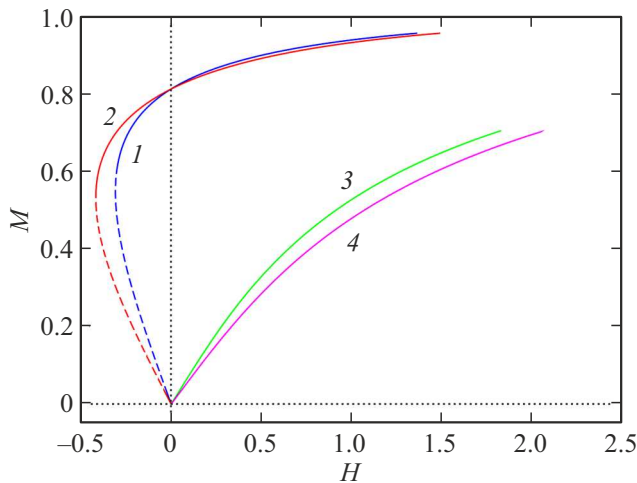


Рис. 1. Намагниченность изинговского магнетика как функция внешнего поля (в единицах $|J|$) в приближении среднего поля. Кривые 1 и 3 построены по функции отношения, вычисленной для нулевого внешнего поля, кривые 2 и 4 построены непосредственно по методу среднего поля.

разумный результат, не слишком отличный от прямого учета внешнего поля.

В приближении среднего поля [9] спонтанная намагниченность для решетки с $q = 4$ определяется выражением $M = \text{th}(4KM)$, откуда

$$v(M) = \left(\frac{1 - M}{1 + M} \right)^{1/4M}. \tag{8}$$

Критическое значение параметра $t = t_c = \exp(-1/2) \approx 0.6065$. Подставляя (8) в (5), найдем связь между намагниченностью M и внешним полем H (в единицах J). Зависимости $M(H)$, вычисленные таким способом, приведены на рис. 1 (кривые 1 и 3). Кривая 1 построена при значении температурного параметра $t = 0.5 < t_c$, а кривая 3 — при $t = 0.7 < t_c$. Для сравнения на рис. 1 приведены зависимости $M(H)$, найденные в приближении среднего поля „прямым учетом“ внешнего поля, то есть из соотношения $M = \text{th}(4KM + KH)$ при тех же значениях параметра t (кривые 2 и 4 соответственно). Видно, что поведение кривых 1 и 2 (а также 3 и 4) качественно одинаково, а количественное различие между ними невелико. Отметим, что на кривых 1 и 2 есть участки неоднозначности при $H < 0$. Наличие этих участков связано с тем, что и в методе среднего поля [5], и при нахождении намагниченности через функцию отношения (уравнение (2)) всегда есть решение $M = 0$, которое при $t < t_c$ является неустойчивым. Значит, на кривых 1 и 2 на рис. 1 в области неоднозначности следует отбросить нижние ветви (части кривых 1 и 2, отмеченные пунктиром).

В приближении Бете [5] спонтанная намагниченность на решетке с координационным числом q равна

$$M = \frac{1 - hp^q}{1 + hp^q}, \tag{9}$$

где p — корень уравнения

$$p = \frac{t + hp^{q-1}}{1 + thp^{q-1}},$$

а $h = \exp(-2KH)$.

Нетрудно показать, что при $q = 4$ и $H = 0$

$$v(M) = \frac{\sqrt[4]{1 - M^2}}{\sqrt{1 + M} + \sqrt{1 - M}}. \tag{10}$$

Подставляя это выражение в (4), получим, что функция отношения в этом приближении равна $3/4$, то есть, не зависит от M . Используя (9) и (3), при произвольном H можно показать, что в приближении Бете функция отношения (3) всегда равна $3/4$. То есть наше основное приближение о независимости функции отношения от H , в данном случае является точным. Разумеется, это означает, что подстановка (10) в (5) приводит к тому же самому результату, что и непосредственное вычисление $M(H)$ с помощью (9).

Рассмотрим теперь решение Онзагера для модели Изинга на квадратной решетке в отсутствии внешнего поля [5]:

$$M^8 = 1 - \frac{1}{\text{sh}^4(2K)}. \tag{11}$$

Отсюда

$$v(M) = \sqrt[4]{1 - M^2} \frac{\sqrt[4]{(1 + M^2)(1 + M^4)}}{1 + \sqrt{1 + \sqrt{1 - M^8}}}. \tag{12}$$

Из (11) или (12) легко найти критическое значение температурного параметра $t_c = \sqrt{2} - 1 \approx 0.4142$. Подставляя (12) в (5), найдем связь между намагниченностью M и внешним полем H при различных значениях t .

На рис. 2 приведены графики $M(H)$ при $t = 0.35 < t_c$ (кривая 1) и при $t = 0.45 < t_c$ (кривая 2). (Как было сказано выше, нижнюю часть кривой 1 (отмеченную пунктиром) при $H < 0$ следует исключить.) Из (5) (и (12)) можно также получить зависимости $M(t)$ при постоянном H (рис. 3). Все эти зависимости монотонно убывают и при $H \rightarrow 0$ приближаются к решению Онзагера.

При температуре T , равной температуре Кюри T_c , зависимость намагниченности от внешнего поля H характеризуется критическим показателем δ , который определяется из асимптотического выражения $M(H, T_c) \propto H^{1/\delta}$ [9].

Для определения δ в уравнение (5) следует подставить функцию $v(M)$, соответствующую точному или приближенному решению в нулевом поле, и разложить полученное выражение в ряд по степеням M при $t = t_c$. При подстановке $v(M)$, соответствующих приближению среднего поля и приближению Бете (выражения (8) и (10) соответственно) получим классическое значение показателя δ , равное 3. При использовании выражения (12), соответствующего точному решению для

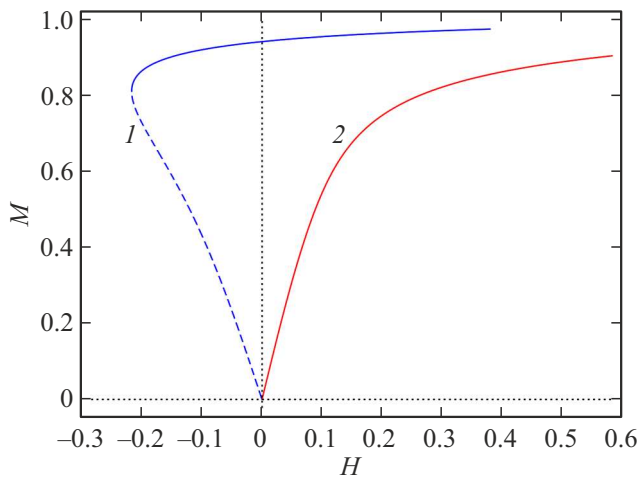


Рис. 2. Намагниченность изинговского магнетика как функция внешнего поля (в единицах $|J|$), построенная по функции отношения для точного решения на квадратной решетке в нулевом внешнем поле. Кривые 1 и 2 построены для температур ниже и выше критической соответственно.

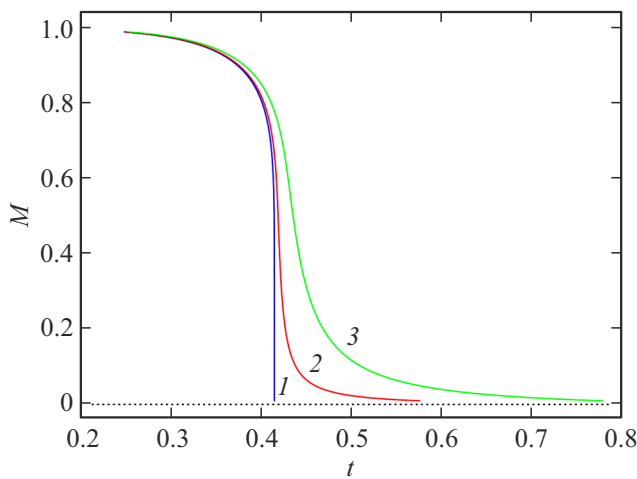


Рис. 3. Намагниченность изинговского магнетика как функция температурного параметра, построенная по функции отношения для точного решения на квадратной решетке в нулевом внешнем поле. Кривые 1, 2 и 3 построены для полей 0, 0.01 J и 0.05 J соответственно.

квадратной решетки, получим $\delta = 9$. В предыдущем пункте было показано, что в нашем подходе выполняется закон Кюри–Вейса (7), то есть $\gamma = 1$. В нулевом внешнем поле зависимость спонтанной намагниченности от температуры характеризуется критическим показателем β , который определяется асимптотическим выражением $M(0, T) \approx (T_C - T)^\beta$. В приближении среднего поля и в приближении Бете $\beta = 1/2$, а в точном решении (12) $\beta = 1/8$ [5]. Видно, что во всех рассмотренных случаях показатели β , γ и δ связаны соотношением $\gamma = \beta(\delta - 1)$, которое следует из гипотезы подобия [9]. Другие соотношения для критических показателей, сле-

дующие из гипотезы подобия также выполняются для тех показателей, которые возможно непосредственно вычислить.

4. Заключение

В настоящей работе использована универсальная функция отношения для модели Изинга $y(M, H, t)$, связывающая эффективные поля одноатомного и двухатомного кластеров. В общем случае эта функция зависит от спонтанной намагниченности M , температурного параметра $t = \exp(-2K)$ и внешнего поля H . В нулевом внешнем поле связь между M и t , полученная из точного или приближенного решения $t = v(M)$, определяет функцию отношения $y(M)$.

Предположив, что для магнетика, находящегося во внешнем поле, функция отношения имеет тот же вид, что и для магнетика без внешнего поля, мы получили следующие основные результаты.

1. Следствием принятого предположения является вид температурной зависимости магнитной восприимчивости в нулевом внешнем поле $\chi = \frac{K(1-t)}{t-t_c}$, где $t = \exp(-2K)$, $K_c = \frac{J}{k_B T_c}$, T_c — температура Кюри, то есть выполняется закон Кюри–Вейса.

2. Для функции $v(M)$, вычисленной по методу среднего поля (8), построены зависимости намагниченности от внешнего поля (рис. 1). Оказалось, что эти зависимости достаточно близки к зависимостям, построенным при прямом учете внешнего поля в теории среднего поля (рис. 1).

3. В рамках принятого предположения найдены критические индексы γ и δ . Для приближения среднего поля индексы имеют классические значения $\gamma = 1$ и $\delta = 3$, а для функции $v(M)$, соответствующей точному решению (12), $\gamma = 1$ и $\delta = 9$. Эти результаты соответствуют гипотезе подобия [9], хотя наш результат для квадратной решетки не совпадает с известным [10].

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] А.З. Паташинский, В.Л. Покровский. Флуктуационная теория фазовых переходов. Наука, М. (1982).
- [2] Ш. Ма. Современная теория критических явлений. Мир, М. (1980). [S. Ma. Modern Theory of Critical Phenomena. Addison-Wesley (1976).]
- [3] K. Katsumata, H. Aruga Katori, S. Kimura, Y. Narumi, M. Hagiwara, K. Kindo. Phys. Rev. B **82**, 10, 104402 (2010).
- [4] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, К.Ш. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Бадиев. ФТТ **62**, 229 (2020).
- [5] С.В. Семкин, В.П. Смагин. ФТТ **64**, 12, 1949 (2022). [S.V. Semkin, V.P. Smagin. Phys. Solid State **64**, 12, 1919 (2022).]

- [6] С.В. Сёмкин, В.П. Смагин. ФТТ **56**, 6, 1064 (2014).
[S.V. Semkin, V.P. Smagin. Phys. Solid State **56**, 6, 1105 (2014).]
- [7] С.В. Семкин, В.П. Смагин. ЖЭТФ **148**, 4, 729 (2015).
[S.V. Semkin, V.P. Smagin. JETP **121**, 4, 636 (2015).]
- [8] И.А. Квасников. Термодинамика и статистическая физика. Теория равновесных систем. Едиториал УРСС, М. (2002). Т. 2. 432 с.
- [9] Р. Бэкстер. Точно решаемые модели в статистической механике. Мир, М. (1985). [R.J. Baxter. Exactly solved models in statistical mechanics. Academic Press, N. Y. (1982).]
- [10] D.V. Abraham. Phys. Lett. A **43**, 2, 163 (1973).

Редактор Е.В. Толстякова