Территория новых возможностей. Вестник Владивостокского
государственного университета экономики и сервиса. 2022. Т. 14, № 2. С. 148–156
The Territory of New Opportunities. The Herald of Vladivostok
State University of Economics and Service. 2022. Vol. 14, № 2. P. 148–156

Научная статья
УДК 504.064.2
DOI: https://doi.org/10.24866/VVSU/2073-3984/2022-2/148-156

Дополнительная характеристика магнетика – функция отношения внутренних полей

Сёмкин Сергей Викторович

Смагин Виктор Павлович

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса
Владивосток. Россия

Аннотация. *В теории систем взаимодействующих частиц часто используется модель Изинга. Эта модель может служить достаточно точным описанием реальных систем. Кроме того, принцип универсальности позволяет распространить многие результаты, полученные для простых решеточных моделей Изинга и на более сложные системы. Однако точных решений для модели Изинга практически нет. Единственным точным решением является решение Онзагера для квадратной решетки. Существуют, конечно, и приближенные методы решения, но они обладают принципиальными недостатками, а именно: приближенные методы дают завышенные оценки температуры Кюри и неправильно описывают особенности поведения системы вблизи точки фазового перехода. Однако, как показано в настоящей работе, существуют пути улучшения фактически любых приближенных методов. С помощью усреднения по обменным полям можно построить дополнительные характеристики магнитных систем, как вблизи точки фазового перехода, так и за ее пределами. В качестве такой дополнительной характеристики можно использовать функцию отношения. Эта функция определяется как отношение таких значений полей обменного взаимодействия, при которых кластерное среднее спина равно среднему по ансамблю. В работе рассмотрена функция отношения для кластеров из одного и двух магнитных атомов. Для модели Изинга на квадратной решетке с помощью решения Онзагера построено точное значение функции отношения. Для этой же решетки построены приближенные значения функции отношения и проведено сравнение их между собой и с точным значением. Использование функции отношения дает возможность строить новые приближенные решения для модели Изинга, делая те или иные предположения об этой функции. что является результатом отрицательного антропогенного воздействия на окружающую среду.*

Ключевые слова: *фазовые переходы, модель Изинга, критические индексы.*

Для цитирования: *Сёмкин С.В., Смагин В.П. Дополнительная характеристика магнетика – функция отношения внутренних полей // Территория новых возможностей. Вестник Владивостокского государственного университета экономики и сервиса. 2022. Т. 14, № 2. С. 148–156. DOI: https://doi.org/10.24866/VVSU/2073-3984/2022-2/148-156.*

Physical and mathematical sciences

Original article

An additional characteristic of a magnet is a function of the ratio of internal fields

Sergey V. Semkin

Viktor P. Smagin

Vladivostok State University of Economics and Service
Vladivostok. Russia

Abstract. *In the theory of systems of interacting particles, the Ising model is often used. This model can serve as a fairly accurate description of real systems. In addition, the universality principle makes it possible to extend many of the results obtained for simple lattice Ising models to more complex systems. However, there are practically no exact solutions for the Ising model. In fact, the only exact solution is the Onsager solution for a square lattice. There are, of course, approximate methods of solution, but they have fundamental drawbacks, namely: approximate methods give overestimated estimates of the Curie temperature and incorrectly describe the behavior of the system near the phase transition point. However, as shown in this paper, there are ways to improve virtually any approximate methods. Using averaging over exchange fields, one can construct additional characteristics of magnetic systems, both near the phase transition point and beyond it. As such an additional characteristic, you can use the relation function. This function is defined as the ratio of such values of the exchange interaction fields at which the cluster average of the spin is equal to the average over the ensemble. The paper considers the ratio function for clusters of one and two magnetic atoms. For the Ising model on a square lattice, the exact value of the ratio function is constructed using the Onsager solution. For the same lattice, approximate values of the ratio function are constructed and compared with each other and with the exact value. The use of the ratio function makes it possible to construct new approximate solutions for the Ising model, making certain assumptions about this function.*

Keywords: *phase transitions, Ising model, critical exponents.*

For citation*: Semkin S.V., Smagin V.P. An additional characteristic of a magnet is a function of the ratio of internal fields // The Territory of New Opportunities. The Herald of Vladivostok State University of Economics and Service. 2022. Vol. 14, № 2. P. 148–156. DOI: https://doi.org/10.24866/VVSU/2073-3984/2022-2/148-156.*

Введение

Системы взаимодействующих частиц и происходящие в них процессы являются по сути главным предметом исследований в области статистической физики. Задачи, связанные с анализом поведения таких систем, возникают и в теории жидкостей, и в теории твердых тел, и в теории магнетизма [1]. Для решения этих задач сформулированы общие принципы и модели, причем модели и методы, построенные для одного типа систем, часто могут быть использованы и для других типов. Например, модель Изинга, которая первоначально была предложена в качестве простой модели ферромагнетизма, в настоящее время используется гораздо шире [2]. Это же относится и к теоретическим методам, например к методу усреднения по обменным полям [3], развитому для чистых и разбавленных ферромагнетиков, который может быть применен и к другим типам взаимодействующих частиц. Поэтому исследование возможностей, которые открывает этот метод в теории магнетизма, можно рассматривать в перспективе применения его к другим типам систем взаимодействующих частиц. В настоящей работе на основе метода усреднения по обменным полям вводится функция отношения. Эта функция определяется как отношение таких значений полей обменного взаимодействия, при которых кластерное среднее спина равно среднему по ансамблю. При этом вводится ограничение только кластерами из одного и двух магнитных атомов. В работе установлена связь между функцией отношения и спонтанной намагниченностью как функцией температуры. Эта связь, с одной стороны, позволяет определить точный вид функции отношения для квадратной решетки, для которой известно точное решение – решение Онзагера [4]. С другой стороны, связь между функцией отношения и спонтанной намагниченностью используется для вычисления значения функции отношения, соответствующей различным приближенным методам, а именно: методу среднего поля [1], методу биноминального усреднения [5] и методу Бете [4]. В работе проведено сравнение приближенных функций отношения как между собой, так и с точным значением.

Основная часть

Функция отношения внутренних полей и ее связь со спонтанной намагниченностью

Рассмотрим систему из N взаимодействующих частиц, каждая из которых характеризуется некоторым параметром σ, который в дальнейшем, имея в виду применение к модели Изинга, будем называть *спином*. Обозначим Ω множество всех спинов, а $H(\Omega)$ – гамильтониан системы. Два спина σ_i и σ_j будем называть взаимодействующими, если в гамильтониане есть слагаемое, неаддитивно зависящее от σ_i и σ_j. Рассмотрим в системе группу, содержащую n спинов. Такую группу в дальнейшем будем называть *кластером*. Множество входящих в кластер спинов обозначим c, множество не входящих в кластер спинов – r (каждый из них взаимодействует хотя бы с одним спином кластера), множество всех остальных спинов – s. Очевидно, что Ω является объединением непересекающихся множеств c, r и s. Пусть теперь $f(r)$ – некоторая функция спинов, принадлежащих r, а $\varphi(c)$ – некоторая функция кластерных спинов c. Тогда, как показано в работе [4], среднее по ансамблю значение произведения $f\varphi$ будет равно

$$\langle f\varphi \rangle = \sum_r f(r) \langle \varphi \rangle_r W(r), \tag{1}$$

где

$$\langle \varphi \rangle_r = \frac{1}{Z_c(r)} \sum_c \varphi(c) \exp\left(-\frac{1}{kT} H_c(c,r)\right), \tag{2}$$

$W(r)$ – функция распределения для наборов состояний спинов множества r; $H_c(c,r)$ – кластерный гамильтониан – слагаемые в гамильтониане $H(\Omega)$, связанные с взаимодействием спинов, принадлежащих c и r; k – постоянная Больцмана; T – температура; кластерная статистическая сумма $Z_c(r) = \sum_c \exp\left(-\frac{1}{kT} H_c(c,r)\right)$.

Формулу (1) можно интерпретировать следующим образом. Выражение (2) можно понимать как кластерное среднее функции $\varphi(c)$, вычисленное при условии, что конфигурация взаимодействующих с кластером спинов задана и неизменна. Выражение (1) в этом случае можно понимать как усреднение произведения $f(r)\langle\varphi_r\rangle$ по функции распределения $W(r)$.

Далее рассмотрим модель Изинга на некоторой решетке. Пусть в каждом узле решетки содержится изинговский спин, принимающий значения +1 и –1; взаимодействуют только спины, находящиеся в соседних узлах. Тогда гамильтониан модели Изинга можно представить как

$$H(\Omega) = -J\sum_{(i,j)}\sigma_i\sigma_j - H_{ex}\sum_i \sigma_i \; , \tag{3}$$

где J – энергия обменного взаимодействия; суммирование в первой сумме проводится по всем парам соседних спинов, во второй – по всем узлам [4].

Выделим на решетке кластер, состоящий только из одного спина σ_o. Множество c в этом случае состоит только из этого спина σ_o, а множество r – из четырех спинов его первой координационной сферы. Кластерный гамильтониан $H_c(c,r) = -J\sigma_o h - \sigma_o H_{ex}$, где h – сумма значений спинов, принадлежащих r, то есть сумма спинов, непосредственно взаимодействующих с σ_o (спинов первой координационной сферы). Назовем эту сумму полем взаимодействия – кластерное среднее [см. формулу (2)] некоторой функции $\varphi(c)$, которая в этом случае зависит только от σ_o:

$$\langle\varphi\rangle_r = \frac{\varphi(+1)\exp(Kh + h_{ex}) = \varphi(-1)\exp(-Kh - h_{ex})}{\exp(Kh + h_{ex}) + \exp(-Kh - h_{ex})} \; , \tag{4}$$

где $K = \dfrac{J}{kT}$ и $h_{ex} = \dfrac{H_{ex}}{kT}$.

Рассмотрим случай, когда функция $f(r)$ является функцией только поля взаимодействия h. Тогда, поскольку кластерное среднее [см. формулу (4)] зависит только от h, усреднение в выражении (1) является в сущности усреднением по функции распределения $W(h)$ этого поля взаимодействия:

$$\langle f\varphi\rangle = \sum_h f(h)\langle\varphi\rangle_r W(h) \, . \tag{5}$$

Среднее значение любого спина решетки одинаково и равно M – средней намагниченности в системе. При отсутствии внешнего поля из выражений (4) и (5) при $f(h) = 1$ и $\varphi = \sigma_o$ получим

$$M = \sum_h W(h) th(Kh) \, . \tag{6}$$

Легко показать (по аналогии с теоремой Лагранжа о среднем значении), что для любой функции распределения $W(h)$ существует такое значение $h = \tilde{h}$, для которого

$$M = th(K\tilde{h}) \, . \tag{7}$$

Возьмем кластер из двух соседних спинов σ_1 и σ_2 (димер). Средняя намагниченность, вычисленная по спинам этого кластера, будет равна

$$M = \sum_{h_1,h_2} W(h_1,h_2)\frac{sh\left(K(h_z+h_2)\right)}{ch\left(K(h_1+h_2)+ch\left(K(h_1-h_2)\right)\exp(-2K)\right.}, \tag{8}$$

где h_1 и h_2 – поля взаимодействия, связанные с σ_1 и σ_2; $W(h_1,h_2)$ – их совместная функция распределения. Можно показать, что из условия нормировки для $W(h_1,h_2)$ следует существование таких значений $h_1=\tilde{h}_1$ и $h_2=\tilde{h}_2$, что

$$M = \frac{sh\left(K(\tilde{h}_1+\tilde{h}_2)\right)}{ch\left(K(\tilde{h}_1+\tilde{h}_2)\right)+ch\left(K(\tilde{h}_1-\tilde{h}_2)\right)\exp(-2K)}. \tag{9}$$

Можно подобрать $\tilde{h}_1$ и $\tilde{h}_2$ так, что $\tilde{h}_2=\tilde{h}_1$. Тогда

$$M = \frac{sh(2K\tilde{h}_1)}{ch(2K\tilde{h}_1)+x}, \tag{10}$$

где $x=\exp(-2K)$.

При заданном *K* выражения (7) и (10) можно рассматривать как систему, связывающую три переменные: *M*, $\tilde{h}$ и $\tilde{h}_1$. Если найти или предположить связь между значением $\tilde{h}$, входящим в формулу (7), и значением $\tilde{h}_1$, входящим в формулу (10), то из выражений (7) и (10) можно будет найти спонтанную намагниченность *M* как функцию теплового параметра *K*.

Таким образом, связь между $\tilde{h}$ и $\tilde{h}_1$ определяет зависимость $M=M(K)$, что позволяет описать точные (когда они существуют) и приближенные решения для изинговского магнетика в терминах этой связи. Иными словами, полагаем, что все особенности зависимости $M=M(K)$, такие как значение температуры Кюри, критическое поведение вблизи этой температуры и т.д., должны содержаться между $\tilde{h}$ и $\tilde{h}_1$.

Из равенств (7) и (10) следует, что связь между $\tilde{h}$ и $\tilde{h}_1$ можно представить в виде

$$\tilde{h}_1 = y(M)\tilde{h}, \tag{11}$$

где $y(M)$ – некоторая функция спонтанной намагниченности *M*, которую в дальнейшем будем называть функцией отношения. (Конечно, выражение (11) – не единственная форма представления связи между $\tilde{h}_1$ и $\tilde{h}_1$, но в рамках настоящей работы ограничимся именно этим представлением.) Температура Кюри $T_c=\dfrac{1}{K_c}$ может быть найдена из условия

$$\frac{\partial M}{\partial \tilde{h}} = \frac{\partial M}{\partial \tilde{h}_1}, \tag{12}$$

которое выполняется при $M\to 0$ и $K=K_c$.

Используя выражения (12) и (7), (10) и (11), получим

$$\frac{K_c - \frac{1}{2} In1}{2y(0) - 1}, \qquad (13)$$

то есть значение функции $y(M)$, заданной формулой (11), при M = 0 определяет температуру Кюри.

Рассмотрим формулы (7) и (10) как способ выражения поля $\tilde{h}$ и $\tilde{h}_1$ и как функции M и K:

$$\frac{\tilde{h} = \frac{1}{2K} In(1+M)}{1-M}, \frac{\tilde{h}_1 = \frac{1}{2K} In(xM + \sqrt{(xM)^2 + \left((1-M)^2\right)}}{1-M}. \qquad (14)$$

Используя эти выражения, из формулы (11) получим

$$y(M) = \frac{In\left(xM + \sqrt{(xM)^2 + \left((1-M)^2\right)}\right) - In(1-M)}{In(1+M) - In(1-M)}. \qquad (15)$$

Напомним, что $x = \exp(-2K)$, поэтому выражение (15) прямо связывает температурную зависимость спонтанной намагниченности $M = M(x)$ (или обратную зависимость $x = x(M)$ и функцию $y(M)$. Из равенства (15) можно выразить $x(M)$:

$$x(M) = \frac{sh(\psi(M))}{M} + \frac{1}{2} Me - \psi(M). \qquad (16)$$

Таким образом, если известно точное или приближенное значение спонтанной намагниченности как функции температуры $M = M(x)$, то, находя обратную функцию $x = x(M)$ из выражения (15), можно найти соответствующую этому точному или приближенному значению зависимость $y(M)$, и, наоборот, если из каких-либо соображений известна функция $y(M)$, то из выражения (16) можно найти соответствующую этой функции зависимость $M(x)$. Далее более детально исследуем связь между $M(x)$ и $y(M)$.

Функция отношения для квадратной решетки: точная и в различных приближениях

Для плоской квадратной решетки $(q = 4)$ известно точное решение для спонтанной намагниченности $M(K)$ (решение Онзагера [4]):

$$M^{\theta} = 1 - \frac{1}{sh^2(2K)}, \qquad (17)$$

из которого получим

$$x(M) = \frac{\sqrt{2 - M^{\theta}} - 1}{\sqrt{1 - M^{\theta}}}. \qquad (18)$$

Подставляя выражение (18) в формулу (15), можно получить точное значение функции отношения для квадратной решетки (кривая 1 на рис. 1).

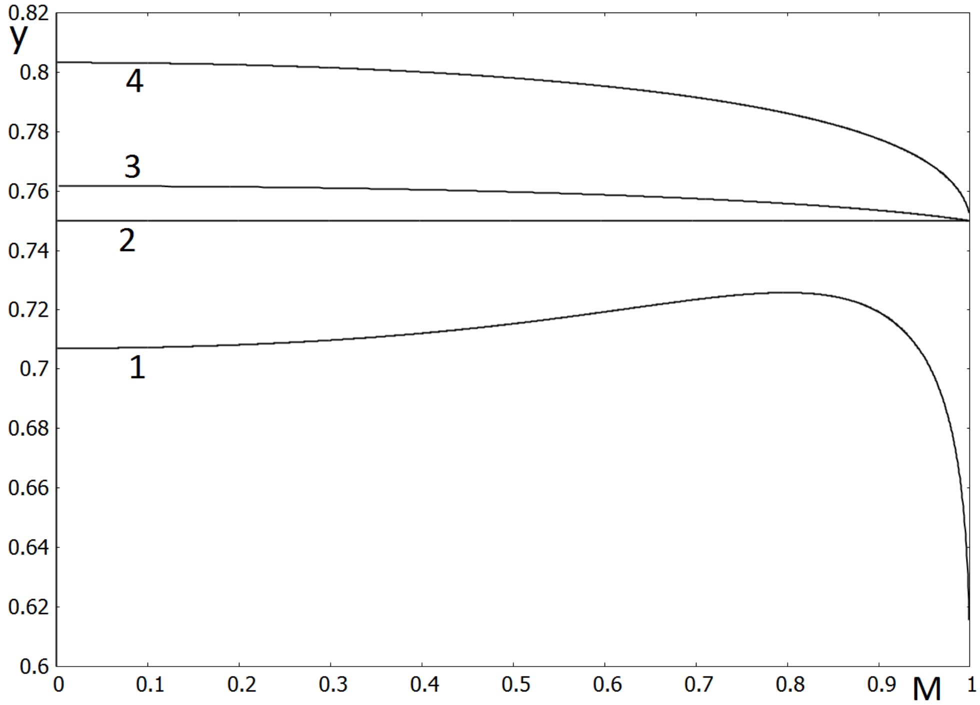

Рис. 1. Функция отношения для точного и приближенных решений на квадратной решетке: кривая 1 – точное значение; кривая 2 – приближение Бете; кривая 3 – биноминальное приближение; кривая 4 – среднее поле

Для квадратной решетки можно рассмотреть и приближенные решения, например решение в приближении Бете [1]. Отметим, что приближение Бете можно рассматривать и как точное решение на решетке Бете с соответствующим координационным числом [4]. Легко показать, что в приближении Бете при $q = 4$

$$x(M) = \frac{1}{2M}\left(\left(\frac{1+M}{1-m}\right)^{\frac{3}{4}} - \left(\frac{1-M}{1+M}\right)^{\frac{3}{4}}\right) - \frac{1}{2}\left(\left(\frac{1+M}{1-M}\right)^{\frac{3}{4}} + \left(\frac{1-M}{1+M}\right)^{\frac{3}{4}}\right). \tag{19}$$

Кривая 2 на рис. 1 соответствует функции отношения в приближении Бете. Видно, что в данном случае функция отношения не зависит от M и равна 0,75. Это соответствует нашему результату [3], согласно которому приближение Бете можно определить равенством $y(M) = \frac{q-1}{q}$.

Более простым и грубым, чем приближение Бете, является приближение среднего поля [1]. В этом приближении при $q = 4$

$$x(M) = \left(\frac{1-M}{1+M}\right)^{\frac{1}{4M}}. \tag{20}$$

Соответствующая функция отношения показана на рис. 1 (кривая 4).

Кривая 3 на рис. 1 соответствует приближению, основанному на биноминальной функции распределения по полям взаимодействия [5]. В этом приближении

$$M^2 = \frac{(th4K + 2th2k) - 2}{2th2K - th4K}. \tag{21}$$

Из рис. 1 видно, что функция отношения, соответствующая точному решению (кривая 1), имеет некоторые особенности, которых нет у кривых, соответствующих рассмотренным приближенным методам, а именно: кривая 1 в отличие от остальных не монотонна, имеет положительную вторую производную в нуле и при $M \to 1$ $y(M)$ стремится к 0,62, в то время как остальные кривые при $M \to 1$ стремятся к 0,75.

Заключение

На основе метода усреднения по обменным полям [3] определена функция отношения, связывающая поля одноатомного и двухатомного кластеров. Найдены аналитические выражения, связывающие функцию отношения со спонтанной намагниченностью как в прямой, так и в обратной форме [см. формулы (15) и (16)]. Для модели Изинга на квадратной решетке с помощью решения Онзагера построено точное значение функции отношения (кривая 1 на рис. 1). Для этой же решетки построены приближенные значения функции отношения (кривые 2–4 на рис. 1) и проведено сравнение их между собой и с точным значением.

Таким образом, появляется возможность строить новые приближенные решения для модели Изинга, делая те или иные предположения о функции отношения.

Список источников

1. Квасников И.А. Термодинамика и статистическая физика: в 2 т. Т. 2. Теория равновесных систем. Москва: Едиториал УРСС, 2002. 432 с.
2. Strecka J. Jascur M. A brief account of the Ising and Ising-like models: mean-field, effective-field and exact results // Acta physica slovaca. 2015. Vol. 65, № 4. P. 235–367.
3. Сёмкин С.В., Смагин В.П. Приближенные методы в теории чистых и разбавленных магнетиков. Владивосток: Изд-во ВГУЭС, 2019. 220 с.
4. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике. Москва: Мир, 1985 = Baxter R.J. Exactly solved models in statistical mechanics. New-York: Academic Press, 1982.
5. Белоконь В.И., Сёмкин С.В. Метод случайного поля в модели Изинга разбавленного ферромагнетика // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1992. Т. 102, вып. 4 (10). С. 1254–1258.

References

1. Kvasnikov I.A. Thermodynamics and statistical physics: in 2 volumes. Vol. 2. Theory of equilibrium systems. Moscow: Editorial URSS, 2002, 432 p.
2. Strecka J., Jascur M. A brief account of the Ising and Ising-like models: mean-field, effective-field and exact results. *Acta physica slovaca.* 2015; 65 (4): 235–367.
3. Semkin S.V., Smagin V.P. Approximate methods in the theory of pure and dilute magnets. Vladivostok: Publishing House of VSUES; 2019. 220 p.

4. Baxter R.J. Exactly solved models in statistical mechanics. New-York: Academic Press; 1982.
5. Belokon V.I., Semkin S.V. Random field method in the Ising model of a dilute ferromagnet. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 1992; 102(4 (10)): 1254–1258.

Информация об авторах:

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

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

DOI: https://doi.org/10.24866/VVSU/2073-3984/2022-2/148-156

Дата поступления:	Одобрена после рецензирования:	Принята к публикации:
17.03.2022	04.05.2022	11.05.2022