ОЦЕНКА ТОЧНОСТИ РАЗЛИЧНЫХ ПРИБЛИЖЕННЫХ МЕТОДОВ В МОДЕЛИ ИЗИНГА РАЗБАВЛЕННОГО МАГНЕТИКА

К.ф.-м.н., С.В. Сёмкин, ВГУЭС, г. Владивосток,
Д.ф.-м.н., В.П. Смагин, ВГУЭС, г. Владивосток

Известно, что магнитные свойства сплавов, состоящих из магнитных и немагнитных атомов, отличаются от свойств чистых магнетиков [1]. Теоретическое описание этого различия можно построить с помощью модели Изинга разбавленного магнетика [1]. Однако, точное решение для этой модели не удается получить даже для простых решеток. Здесь обычно используются либо численные расчеты [2], либо те или иные приближенные методы. К их числу относятся метод среднего поля [1], метод усреднения по обменным полям [3] и предложенный нами [4] метод псевдохаотического распределения. В настоящей работе, для того, чтобы оценить точность этих методов, мы рассмотрим применение их к одномерной модели Изинга с немагнитным разбавлением - системе, для которой возможно построить точное решение.

Построение большего числа приближенных методов можно описать в рамках следующего общего подхода. Рассмотрим изинговский магнетик с разбавлением по связям на решетке с координационным числом q. Пусть $h_{¿}=\sum\sigma_i$ сумма по соседям, связанным со спином σ_0 неразорванными связями, а $h'_{¿}=\sum\sigma_i$ сумма по всем q соседям σ_0, в том числе и по тем, связи с которыми разорваны. Очевидно, что для чистого, не разбавленного магнетика $h_{¿}=h'_{¿}$ для любого атома. Пусть $W_1(h_{¿})$ функция распределения по полям $h_{¿}$, а $W_2(h_{¿},h'_{¿})$ совместная функция распределения полей $h_{¿}$ и $h'_{¿}$. ($W_1(h_{¿})=\int W_2(h_{¿},h'_{¿})d\,h'_{¿}$) Тогда

$$m=\langle th(K h_{¿}+h)\rangle_{W_1(h_{¿})} \tag{1}$$

и

$$qV=\langle h'_{¿}\,th(K\,h_{¿}+h)\rangle_{W_2(h_{¿},h'_{¿})} \tag{2}$$

где m – средняя намагниченность, $V=\langle\sigma\,\sigma_0\rangle$ по всем парам соседних спинов, $h=H_{ex}/kT$ (H_{ex} – внешнее поле, T – температура, k – постоянная Больцмана). Если теперь использовать ту или иную оценку для функций $W_1(h_{¿})$ и $W_2(h_{¿},h'_{¿})$, можно построить различные приближенные методы для определения намагниченности в модели Изинга разбавленного магнетика. Например, полагая $W_1(h_{¿})=\delta(h_{¿}-qbm)$, $W_2(h_{¿},h'_{¿})=W_1(h_{¿})\delta(h'_{¿}-qm)$, где b - вероятность того, что связь между соседними узлами окажется не разорванной, получим из (1) и (2) метод среднего поля: $m=th(Kqbm+h)$. Более точное приближение получим используя для $W_1(h_¿)$ биноминальное распределение:

$$W_1(h_¿)=\sum_{n=0}^{q} C_q^n b^n (1-b)^{q-n} \sum_{i=0}^{n} C_n^i \left(\frac{1+m}{2}\right)^i \left(\frac{1-m}{2}\right)^{n-i} \delta(h_¿-(2i-n)) \quad .$$

При использовании такого распределения, из (1) следует метод усреднения по локальным полям или метод среднего спина, рассмотренный в работе [3]. Если в методе среднего спина учесть корреляцию V , получим

$$W_1(h)=\sum_{n=0}^{q} F_{q,n}(m,V)G_{q,n}(b,h)$$

$$W_2(h,h')=\sum_{n=0}^{q} F_{q,n}(m,V)\delta(h'-(2n-q))G_{q,n}(b,h)$$

где

$$G_{q,n}(b,h)=\sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{q-n} C_n^i C_{q-n}^j b^{i+j}(1-b)^{q-(i+j)}\delta(h-(i-j))$$

и

$$F_{q,n}(m,V)=C_q^n\left[\frac{1+m}{2}\left(\frac{1+\mu_1}{2}\right)^n\left(\frac{1-\mu_1}{2}\right)^{q-n}+\frac{1-m}{2}\left(\frac{1+\mu_2}{2}\right)^n\left(\frac{1-\mu_2}{2}\right)^{q-n}\right]$$

$$\mu_1=\frac{m+V}{1+m} \quad , \qquad \mu_2=\frac{m-V}{1-m}$$

Уравнение для намагниченности по методу среднего спина получается из (1) если положить $V=m^2$; уравнение (2) в этом случае нужно отбросить.

Другой подход к построению приближенных методов заключается в использовании модели Изинга не с вмороженными, а с подвижными немагнитными примесями, находящимися в термодинамическом равновесии. В этом случае в гамильтониан войдет дополнительный параметр, связанный с энергией взаимодействия магнитных атомов и атомов примеси. Для подвижных примесей можно рассчитать корреляцию (ковариацию) в расположении примесей для соседних узлов решетки. Подбирая теперь параметр взаимодействия так, чтобы эта корреляция обращалась в ноль, получим распределение примесей, которое мы назвали «псевдохаотическим» [мы]. Применительно к решетке Бете, этот метод приводит к следующему результату [4]:

$$M = th\frac{qx-h}{q-1}$$

где x - корень уравнения

$$th\frac{qx-h}{q-1} = (1-b)\,th(x) + b\frac{sh(2x)}{ch(2x)+e^{-2K}} \quad .$$

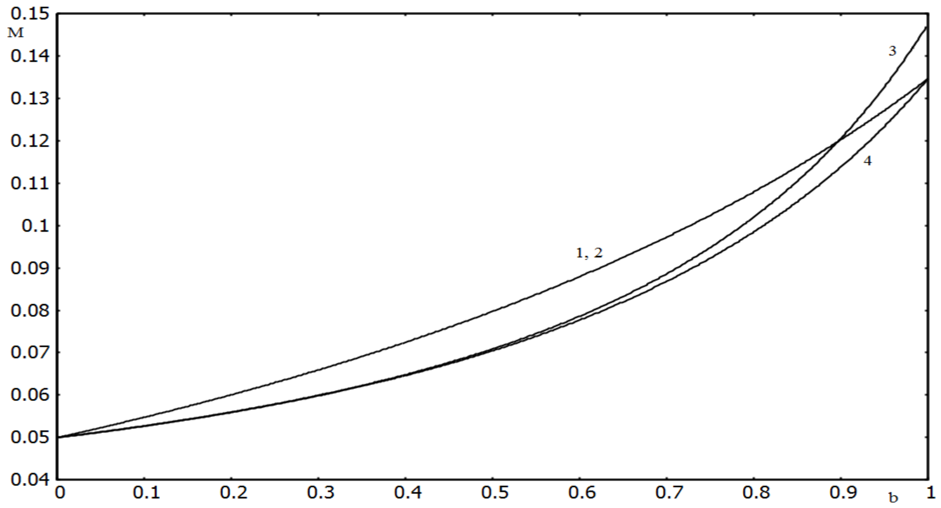

Рис. 1

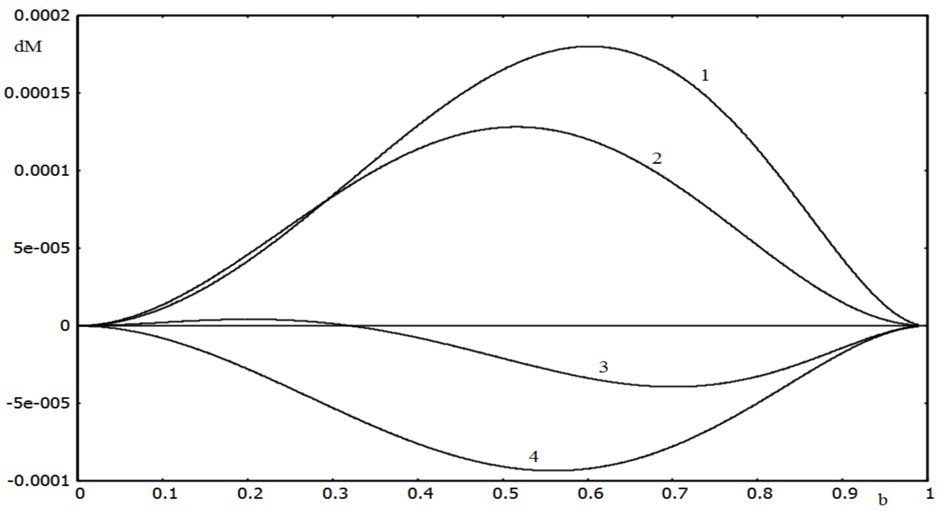

Рис. 2

На рис. 1 показаны зависимости намагниченности в расчете на один магнитный атом как функция концентрации магнитных атомов b при значениях $K=0.5$ и $h=0.05$. Кривые 1 и 2 – точное решение и решение, полученное в псевдохаотическом приближении. (Эти две кривые в точности не совпадают, но различие между ними не видно в масштабе рис. 1.) Кривая 3 – намагниченность, полученная методом «среднего спина» без учета корреляции, а кривая 4 – с учетом корреляции V . На рис. 1 не приведена зависимость $M(b)$ соответствующая приближению среднего поля, так как эта зависимость очень сильно отличается от точного решения (и других приближений) в области больших значений b. Однако, при малых b метод среднего поля дает, как ни странно, более близкое к точному значение M, чем варианты метода среднего спина. При b близких к нулю, все приближения совпадают с точным решением, что впрочем, и следовало ожидать, т. к. система в этом случае приближается к парамагнитной. При $b=1$, т. е. при отсутствии немагнитного разбавления, метод среднего спина с учетом корреляции и псевдохаотическое приближение дают точное решение. (Такое совпадение будет иметь место не только для одномерной цепочки, но и для решетки Бете с произвольным координационным числом q.)

Разница между псевдохаотическим приближением и точным решением показана на рис.2. На этом рисунке приведены графики разницы $M_{nx}(b)-M(b)$ при $K=0.5$ и $h=0.3, 0.5, 0.7 u 1.0$ (кривые 1 – 4 соответственно). Расчет показывает, что эта разница не превосходит по абсолютной величине $10^{-3}-10^{-4}$.

Литература

1. Займан Дж., Модели беспорядка: Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем, М. Мир 1982, 591 с.
2. А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, М.К. Рамазанов, ФТТ 47(6), 1125(2005)
3. В.И. Белоконь, С.В. Семкин, ЖЭТФ 102, 1254 (1992).
4. С.В. Сёмкин, В.П. Смагин, Модель Поттса на решетке Бете с немагнитными примесями, ЖЭТФ, 2015, т.148, вып.4(10), с. 729-733