

ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ДЕКОРИРОВАННОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА С НЕМАГНИТНЫМИ ПРИМЕСЯМИ

E.A. Манова

В настоящее время свободная энергия, а, следовательно, и все остальные термодинамические величины найдены лишь для одной испытывающей фазовый переход системы с конечным радиусом взаимодействия – двумерной решетки Изинга со взаимодействием ближайших соседей. Эта задача была решена Онсагером [1]. Поэтому большой интерес представляет исследование фазового перехода в других моделях, допускающих точное решение. В данной работе получено точное решение декорированной плоской модели Изинга с немагнитными примесями. Декорированной мы называем изображенную на рис. 1 решетку, составленную из двух подрешеток. В точках, обозначенных светлыми и темными кружками, находятся разные атомы – A и B соответственно, магнитный момент которых может быть направлен вверх или вниз ($\sigma = \pm 1$). Взаимодействуют лишь соседи, соединенные на рисунке сплошными линиями. Гамильтониан этой системы имеет обычный для модели Изинга вид¹⁾:

$$H = -J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (1)$$

где штрих означает, что суммирование проводится лишь по парам взаимодействующих соседей. Учитывая, что $\sigma = \pm 1$, избавляемся в статистической сумме обычным образом от σ в показателе (см., например, книгу Ландау и Лифшица [3]), и суммируем по конфигурациям спинов B-атомов:

$$\begin{aligned} Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp(J/T \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j) &= (\operatorname{ch} J/T)^{4N} \sum_{\{\sigma\}} \prod_{ij} (1 + \sigma_i \sigma_j \operatorname{th} J/T) = \\ &= (\operatorname{ch} J/T)^{4N} 2^{2N} \sum_{\{\sigma^A\}} \prod_{ij} (1 + \sigma_i^A \sigma_j^A \operatorname{th}^2 J/T). \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь σ^A – спины A-атомов, N – число элементарных ячеек, а

$$\frac{1}{2} 2^N \sum_{\{\sigma^A\}} \prod_{ij} (1 + x \sigma_i^A \sigma_j^A) = S(x) = \exp[Nf(x)], \quad (3)$$

¹⁾Подобная модель (без примесей) подробно исследована Сиози и Накано [2].

где в пределе очень больших N [1, 3]

$$f(x) = 1/8\pi^2 \int_0^{2\pi} [(1+x^2)^2 - 2x(1-x^2)(\cos\omega_1 + \cos\omega_2)] d\omega_1 d\omega_2. \quad (4)$$

Таким образом, отличие декорированной решетки Изинга от обычной тривиально, а именно, здесь

$$x = \tanh(\beta J/T). \quad (5)$$

Предположим теперь, что M из общего числа $2N$ B -атомов замещены немагнитными атомами, причем немагнитные примеси распределены хаотически и жестко закреплены. Физически это соответствует тому, что примесные атомы введены в образец при достаточно высокой температуре, и время релаксации их положения значительно превышает время релаксации спинов. Тогда статистическая сумма модели с примесями равна

$$Z^* = (\cosh(J/T))^{4N-M} 2^{3N+M} S^*(x), \quad (6)$$

где

$$S^*(x) = 2^{-N} \sum_{\{\sigma_i^A\}} \prod_{ij} (1 + \tilde{x} \sigma_i^A \sigma_j^A). \quad (7)$$

Здесь $\tilde{x} = x$ или $\tilde{x} = 0$ в зависимости от того, находится ли на соответствующей связи, соединяющей A -атомы, обычный B -атом или примесный немагнитный атом.

Легко видеть, что $S^*(x)$ можно выразить через M -ую производную $S(x)$:

$$S^*(x) = \frac{x^{2N-M}}{M!} \left. \frac{d^M S(z)}{dz^M} \right|_{z=1/x}. \quad (8)$$

Строго говоря, полученное дифференцированием значение $S^*(x)$ соответствует статистической сумме, усредненной по всевозможным распределениям примесей. Однако, в интересующем нас термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$) статвес нехаотических распределений обращается в нуль.

Используя (2), выражаем производную через контурный интеграл:

$$S^*(x) = \frac{x^{2N-M}}{2\pi i} \oint \exp\{N[f(z) - \frac{M+1}{N} \ln(z - \frac{1}{x})]\} dz, \quad (9)$$

где контур окружает точку $1/x$. Заметим, что хотя функция $f(z)$ и не регулярна, $\exp\{Nf(z)\}$ аналитична во всей комплексной плоскости при любых конечных N . Таким образом, мы можем деформировать контур

интегрирования и использовать метод перевала. Асимптотическое значение $S^*(x)$ при $N \rightarrow \infty$ определяется значением подынтегрального выражения в седловой точке:

$$S^*(x) \sim x^{2N(1-c)} \exp\{N[f(z_0) - 2c \ln(z_0 - \frac{1}{x})]\}. \quad (10)$$

Здесь $c = M/2N$ – концентрация примесей, а положение седловой точки как функции x определяется из уравнения

$$f'(z_0) = \frac{2c}{z_0 - 1/x}. \quad (11)$$

Входящая в это уравнение производная $f'(z)$ выражается через полный эллиптический интеграл первого рода $K(\kappa)$:

$$f'(z) = \frac{2z}{1+z^2} - \frac{1}{2} \left(\frac{2}{\pi} K(\kappa) - 1 \right) \frac{d \ln \kappa}{dz}, \quad (12)$$

где

$$\kappa = \frac{4z(1-z^2)}{(1+z^2)^2}; \quad \frac{d \ln \kappa}{dz} = \frac{1}{z} - \frac{2z}{1-z^2} - \frac{4z}{1+z^2}. \quad (13)$$

Теперь из (6) и (10) находим свободную энергию рассматриваемой модели с немагнитными примесями:

$$-F/NT = 4(1-c) \ln \sinh I/T + (3-2c) \ln 2 + f(z_0) - 2c \ln(z_0 - 1/x). \quad (14)$$

Отсюда легко получить, дифференцируя по температуре, выражения для внутренней энергии и теплоемкости.

Фазовый переход наступает, когда седловая точка совпадает с особой точкой функции $f(z)$, особенности которой лежат на окружностях радиуса $\sqrt{2}$ с центром в точках $z = \pm 1$. Так как $0 < x < 1$, седловая точка может совпасть лишь с особой точкой $z_c = \sqrt{2} + 1$, где $f'(z_c) = 1/\sqrt{2}$. Используя (11), находим уравнение, определяющее температуру перехода:

$$x_c = \tanh^2 I/T_c = [1 + \sqrt{2}(1-2c)]^{-1}. \quad (16)$$

В предельных случаях

$$\frac{I}{T_c} = \begin{cases} \operatorname{arctanh}(\sqrt{1+\sqrt{2}}+1) + c/\sqrt{1+\sqrt{2}} \approx 0,764 + 0,664c, & c \ll 1 \\ \frac{1}{2} \ln \frac{2\sqrt{2}}{1-2c} & 0 < \frac{1}{2} - c \ll 1. \end{cases} \quad (17)$$

Когда $c > 1/2$, фазового перехода нет, так как при таких концентрациях примесей наша система распадается на невзаимодействующие между собой подсистемы конечных размеров.

Используя разложение $f''(z)$ вблизи $z_c = \sqrt{2} + 1$,

$$f''(z) = \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{z - z_c}{(1 + \sqrt{2})^2} \left[+ 3 + \sqrt{2} + \frac{2}{\pi} \ln \frac{2\sqrt{2}(\sqrt{2} + 1)}{|z - z_c|} \right], |z - z_c| \ll 1, \quad (18)$$

находим справедливое при $|r| T_c = |T - T_c| / T_c^2 \ll 1$ выражение для теплоемкости вблизи критической точки:

$$\frac{C}{N} = 4 \frac{l}{T_c^2} (1 - 2c) \left\{ \frac{\sqrt{2} + 1 - 4c}{\sqrt{2}} + \frac{(1 - 2c)[1 + \sqrt{2}(1 - 2c)]}{2c} \times \right. \\ \left. \times \left(1 - \frac{(1 + \sqrt{2})^2 \pi}{8c} \Lambda'(\alpha |r|) \right) \right\}. \quad (19)$$

Мы ввели здесь функцию $\Lambda(\xi)$, определяемую как решение уравнения

$$\eta \ln \eta = -\xi, \quad (20)$$

при малых ξ и η :

$$\eta = \Lambda(\xi). \quad (21)$$

Ее производные равны

$$\Lambda'(\xi) = \Lambda(\xi) / (\xi - \Lambda(\xi)), \quad \Lambda''(\xi) = \Lambda'^3(\xi) / \Lambda(\xi). \quad (22)$$

Графики всех этих функций показаны на рис. 2. Коэффициент $\alpha(c)$ в формуле (19) равен

$$\alpha(c) = \frac{1 + \sqrt{2})\pi(1 - 2c)}{8c x_c^2} \frac{l}{T_c} \exp \left\{ - \frac{(1 + \sqrt{2})^2 \pi}{8c} \times \right. \\ \left. \times \left(1 - 2c \frac{3 + \sqrt{2}}{(1 + \sqrt{2})^2 \pi} \right) \right\}. \quad (23)$$

Таким образом, в отличие от известного результата Онсагера [1], теплоемкость рассматриваемой модели с немагнитными примесями остается конечной в точке перехода при ненулевых концентрациях примесей и равна по порядку величины $1/c$. Когда $|r| \rightarrow 0$, расходится как Λ'' первая производная теплоемкости по температуре. При $c \ll 1$ в области $\ln |r| \ll 1/c$ теплоемкость ведет себя как $\ln |r|$.

Аналогичным методом можно найти функцию корреляции A -атомов рассматриваемой модели с примесями:

$$\langle \sigma_i^A \sigma_j^A \rangle = g_A(x, \vec{R}) = g_o(z_o, \vec{R}); \quad \vec{R} = \vec{R}_j - \vec{R}_i, \quad (24)$$

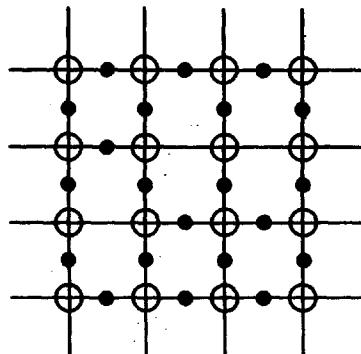


Рис. 1

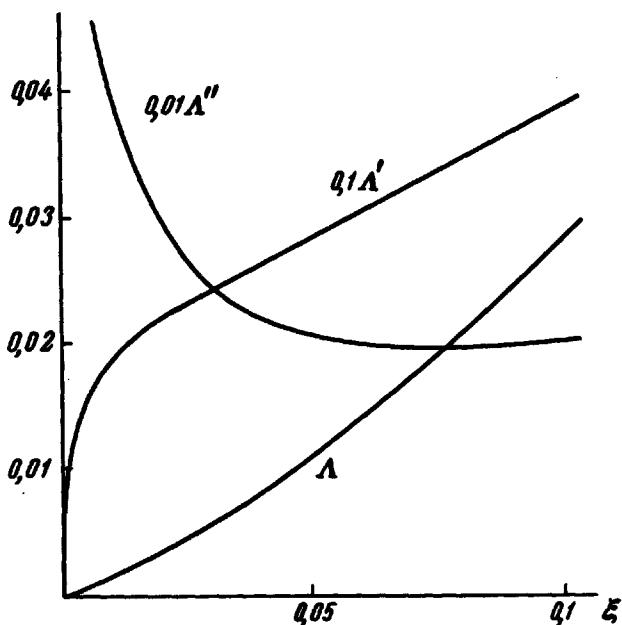


Рис. 2

где $g_o(z, \vec{R})$ – функция корреляции обычной квадратной решетки Изинга, а z_o определяется из уравнения (11). Используя известные результаты Кауфман и Онсагера [4], Янга [5], Фишера [6] для функции g_o , находим:

а) в точке Кюри корреляционная функция спадает обычным образом как $R^{-1/4}$;

б) радиус корреляции вблизи T_c растет как $[\beta(c) \Lambda(\alpha_r)]^{-1}$;
 в) спонтанная намагниченность ниже точки перехода ведет себя как $[\beta(c) \Lambda(\alpha_r)]^{1/8}$. С точностью до множителя порядка единицы.

$$\beta(c) = \exp \frac{(1 + \sqrt{2})^2 \pi}{8c} \left(1 - 2c \frac{3 + \sqrt{2}}{\pi (1 + \sqrt{2})^2} \right) \quad (25)$$

Отметим, что обусловленная A -спинами намагниченность решетки не достигает при $T = 0$ насыщения, так как благодаря немагнитным примесям часть A -атомов оказывается изолирована от остальной системы.

В заключение можно выразить надежду, что найденные здесь характер особеностей и (качественно) зависимость температуры перехода от концентрации примесей присущи не только рассмотренной модели, но и более широкому классу систем, хотя симметричный вид особенностей теплоемкости является специфическим свойством этой модели, связанным с симметрией Крамерса — Ванье исходной беспримесной модели.

Физический факультет
 Московского
 государственного университета
 им. М.В.Ломоносова

Поступило в редакцию
 30 апреля 1968 г.

Литература

- [1] L.Ohsager. Phys. Rev., 65, 117, 1944.
- [2] I.Syozi, H.Nakano. Prog. Theor. Phys., 13, 69, 1955.
- [3] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Статистическая физика, 1964.
- [4] B.Kaufman, L.Onsager. Phys. Rev., 76, 1244, 1949.
- [5] C.N.J ang. Phys. Rev., 85, 808, 1952.
- [6] M.Fisher. Physica, 25, 521, 1959.