

05,11

## Приближение Бете в модели Изинга с подвижными примесями

© С.В. Сёмкин, В.П. Смагин

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса,  
Владивосток, Россия

E-mail: Li15@rambler.ru

(Поступила в Редакцию 14 июля 2014 г.)

В окончательной редакции 25 ноября 2014 г.)

Рассмотрено применение приближения Бете для системы, состоящей из магнитных и немагнитных атомов, находящихся в термодинамическом равновесии. В этом приближении построены зависимости намагниченности и температуры Кюри от концентрации магнитных атомов для модели Изинга с подвижными немагнитными примесями и найдены предельные концентрации возникновения спонтанной намагниченности в основном состоянии. Установлено, что для одномерной цепочки рассмотренное приближение является точным решением.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ по заданию № 2014/292 на выполнение государственных работ в сфере научной деятельности в рамках базовой части государственного задания.

### 1. Введение

Несмотря на то что изучение разбавленных и неупорядоченных магнетиков проводится активно [1–4], внимание большинства авторов в основном сосредоточено на исследовании влияния „вмороженных“ примесей, случайно и без корреляции расположенных по узлам решетки. Однако, когда, например, в ходе химической реакции изменяется состав магнетика [1], это означает, что магнитные атомы (или атомы примеси) могут перемещаться и, если реакция идет достаточно медленно, система будет находиться в состоянии, близком к термодинамическому равновесию. Кроме того, при изменении температуры должно происходить перераспределение немагнитных примесей по узлам решетки, которое может приводить к изменению магнитных свойств системы.

В настоящей работе рассматривается приближение Бете применительно к разбавленному изинговскому магнетика с подвижными примесями. Для чистого магнетика приближение Бете можно получить как решение задачи Изинга на решетке (дереве) Бете [5] или как соотношение, связывающее намагниченность центрального атома и атома первой координационной сферы [6]. Однако на приближение Бете можно смотреть и как на один из самосогласованных методов, общая схема построения которых представлена в наших работах [7–9]. Эти методы основаны на усреднении по локальным обменным полям. Методика усреднения по локальным полям может быть использована и для анализа поведения сплава двух типов магнитных атомов [10], и для анализа систем, в которых обменный интеграл является непрерывной функцией расстояния между атомами [11,12]. В работе [13] один из вариантов этой методики уже применялся для анализа равновесных

состояний сплава магнитных и немагнитных атомов в отсутствие внешнего магнитного поля. В настоящей работе обсуждается другое приближение для той же модели, которое можно рассматривать как обобщение метода Бете. Кроме того показано, что для одномерной решетки это приближение является точным решением, как и обычное приближение Бете в случае чистого магнетика.

### 2. Модель Изинга с подвижными примесями и приближенные методы ее решения

Рассмотрим кристаллическую решетку с координационным числом  $q$ , в узлах которой могут находиться магнитные и немагнитные атомы (атомы типа 1 и 2 соответственно). С каждым магнитным атомом связан изинговский спин  $s_i = \pm 1$ , так что энергия обменного взаимодействия двух магнитных атомов со спинами  $s_i$  и  $s_j$  есть  $-Js_i s_j$ , если атомы расположены в соседних узлах решетки, и равна нулю в противном случае.

Аналогично тому как это принято при изучении бинарных сплавов [5], допустим, что в системе существуют межатомные силы с быстро спадающим на больших расстояниях потенциалом взаимодействия типа потенциала Леннарда–Джонса [5]. Поэтому будем считать, что радиус их действия ограничен первой координационной сферой, в дальнейшем будем называть эти силы „кулоновскими“. Обозначим потенциал этих сил  $-U_{\alpha\beta}$  ( $\alpha, \beta = 1, 2$ ). Если теперь сопоставить каждому узлу решетки переменную  $\sigma_i$ , равную  $s_i$ , когда в данном узле находится магнитный атом, и нулю, когда немагнитный, то энергию обменного взаимодействия  $E_{ex}$  и кулоновскую энергию  $E_k$  можно записать в виде сумм по всем

упорядоченным парам соседних узлов

$$E_{\text{ex}} = - \sum_{(i,j)} J\sigma_i\sigma_j,$$

$$E_k = - \sum_{(i,j)} \left\{ U_{11}\sigma_i^2\sigma_j^2 + U_{22}(1-\sigma_i^2)(1-\sigma_j^2) + U_{12}[\sigma_i^2(1-\sigma_j^2) + \sigma_j^2(1-\sigma_i^2)] \right\}.$$

Последнее выражение с точностью до аддитивной константы можно записать в виде

$$E_k = - \sum_{(i,j)} U\sigma_i^2\sigma_j^2 - \sum_i f\sigma_i^2,$$

где  $U = U_{11} + U_{22} - 2U_{12}$ ,  $f = q(U_{12} - U_{22})$ . Величину  $U$  будем называть эффективным потенциалом кулоновского взаимодействия; при  $U > 0$  магнитные атомы притягиваются, при  $U < 0$  отталкиваются.

Учитывая, что число магнитных атомов в решетке есть  $\sum_i \sigma_i^2$ , запишем большую статистическую сумму системы следующим образом:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp \left\{ \left( \sum_{(i,j)} (J\sigma_i\sigma_j + U\sigma_i^2\sigma_j^2) + (f + \mu) \sum_i \sigma_i^2 + H_e \sum_i \sigma_i \right) / kT \right\}, \quad (1)$$

где  $\mu$  — химический потенциал,  $H_e$  — внешнее магнитное поле, а суммирование производится по всем возможным конфигурациям  $\{\sigma\}$ .

Введем величины  $p = \langle \sigma_i^2 \rangle$  и  $M = \langle \sigma_i \rangle / p$ . Ясно, что эти величины не зависят от  $i$ , поскольку все узлы решетки эквивалентны (в термодинамическом пределе), и имеют простой смысл:  $p$  — вероятность того, что в данном узле находится магнитный атом (концентрация),  $M$  — среднее значение его спина.

Для приближенного вычисления  $M$  и  $p$  используем следующий прием [7–9]. Определим локальное обменное  $h_i$  и кристаллическое  $\varphi_i$  поля  $i$ -го узла как  $h_i = \sum_j \sigma_j$  и  $\varphi_i = \sum_j \sigma_j^2$  (суммирование производится по всем соседним к  $i$ -му узлам). Величины  $h_i$  и  $\varphi_i$  будем рассматривать как значения случайных величин  $h$  и  $\varphi$  с совместной функцией распределения  $W_1(h, \varphi)$ . Тогда средние по ансамблю  $\langle \sigma_i \rangle$  и  $\langle \sigma_i^2 \rangle$  вычисляются как

$$pM = \left\langle \frac{\text{sh}(Kh + h_e)}{\text{ch}(Kh + h_e) + xe^{-L\varphi}} \right\rangle_{W_1(h,\varphi)}, \quad (2)$$

$$p = \left\langle \frac{\text{ch}(Kh + h_e)}{\text{ch}(Kh + h_e) + xe^{-L\varphi}} \right\rangle_{W_1(h,\varphi)}, \quad (3)$$

где  $K = J/kT$ ,  $L = U/kT$ ,  $h_e = H_e/kT$ ,  $x = \frac{1}{2} \exp(-(f + \mu)/kT)$  ( $k$  — постоянная Больцмана).

Рассмотрим теперь кластер, состоящий из двух соседних узлов, и введем обменные  $h_1$  и  $h_2$  и кристаллические  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  поля для каждого узла кластера. Найдем

средние значения величин  $(\sigma_1 + \sigma_2)/2$  и  $(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)/2$  по ансамблю с гамильтонианом

$$E_2(\sigma_1, \sigma_2) = -J\sigma_1\sigma_2 - Jh_1\sigma_1 - Jh_2\sigma_2 - U\sigma_1^2\sigma_2^2 - U\varphi_1\sigma_1^2 - U\varphi_2\sigma_2^2 - \mu(\sigma_1^2 + \sigma_2^2) - H_e(\sigma_1 + \sigma_2),$$

рассматривая  $h_1, h_2, \varphi_1$  и  $\varphi_2$  как постоянные. Затем введем совместную функцию распределения  $W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)$  и усредним результат по этой функции

$$pM = \left\langle \frac{\frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} (\sigma_1 + \sigma_2) \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)}{\sum_{\sigma_1, \sigma_2} \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)} \right\rangle_{W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)}, \quad (4)$$

$$p = \left\langle \frac{\frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} (\sigma_1^2 + \sigma_2^2) \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)}{\sum_{\sigma_1, \sigma_2} \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)} \right\rangle_{W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)}. \quad (5)$$

Теперь можно построить приближенные методы нахождения  $M$  и  $p$  двумя способами. Первый способ заключается в том, что неизвестная функция распределения  $W_1(h, \varphi)$  в (2) и (3) (или функция  $W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)$  в (4) и (5)) заменяется тем или иным приближенным выражением ее через искомые значения  $M$  и  $p$ , в результате чего (2) и (3) (или (4) и (5)) превращаются в уравнения относительно  $M$  и  $p$ . Например, если взять  $W_1(h, \varphi) = \delta(h - qpM)\delta(\varphi - qp)$ , т.е. заменить поля их средними значениями, получим метод среднего поля. Если же построить приближенное выражение для  $W_1(h, \varphi)$  с помощью биномиального распределения, получим способ, описанный в [13]. Подобные приближения можно, конечно, построить и для функции  $W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)$ .

Второй способ состоит в том, что обе функции распределения  $W_1(h, \varphi)$  и  $W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)$  выражаются через одни и те же параметры  $t$  и  $\rho$ , уравнения для определения которых получаются приравнованием правых частей (2) и (4), а также (3) и (5). Такой способ получения приближенных уравнений можно назвать „ренормгрупповым“ в том смысле, что вблизи критической точки переход от кластера с одним узлом к кластеру с двумя узлами можно рассматривать как ренормгрупповое преобразование фиксированного масштаба [14]. Применительно к изинговскому магнетизму без примесей одним из вариантов этого способа является известное приближение Бете [5]. Построим теперь приближение, аналогичное приближению Бете, но для модели Изинга с подвижными немагнитными примесями.

### 3. Приближение Бете

Используем, согласно изложенному выше, следующие приближения для функций распределения полей:

$$W_1(h, \varphi) = \delta(h - qpM)\delta(\varphi - qp),$$

$$W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2) = \delta(h_1 - (q-1)\rho m)x \times \delta(h_2 - (q-1)\rho m)\delta(\varphi_1 - (q-1)\rho)\delta(\varphi_2 - (q-1)\rho),$$

где  $m$  и  $\rho$  — некоторые неизвестные параметры. Тогда из (2) и (3) получим

$$pM = \frac{\text{sh}(Kq\rho m + h_e)}{\text{ch}(Kq\rho m + h_e) + xe^{-Lq\rho}}, \quad (6)$$

$$p = \frac{\text{ch}(Kq\rho m + h_e)}{\text{ch}(Kq\rho m + h_e) + xe^{-Lq\rho}}, \quad (7)$$

а из (4) и (5)

$$pM = \left[ \text{sh}(2K(q-1)\rho m + 2h_e) + 2xe^{-K-L-L(q-1)\rho} \text{sh}(K(q-1)\rho m + h_e) \right] / Z, \quad (8)$$

$$p = \left[ \text{ch}(2K(q-1)\rho m + 2h_e) + 2xe^{-K-L-L(q-1)\rho} \text{ch}(K(q-1)\rho m + h_e) + e^{-2K} \right] / Z, \quad (9)$$

где

$$Z = \text{ch}(2K(q-1)\rho m + 2h_e) + 4xe^{-K-L-L(q-1)\rho} \text{ch}(K(q-1)\rho m + h_e) + 2x^2e^{-K-L-2L(q-1)\rho} + e^{-2K}.$$

При  $h_e > 0$  (в этом случае намагниченность  $M$  всегда положительна) систему уравнений (6)–(9) можно представить в следующем виде. Введем обозначения

$$w = K(q-1)\rho m + h_e,$$

$$y = xe^{-K-L-L(q-1)\rho}, \quad \gamma = \frac{L}{K} = \frac{U}{J}.$$

Тогда из (6)–(9) получим

$$M = \text{th}\left(\frac{qw - h_e}{q-1}\right), \quad (10)$$

$$p = \frac{2y \text{ch}(w) + \text{ch}(2w) + e^{-2K}}{2y^2e^{(1+\gamma)K} + 4y \text{ch}(w) + \text{ch}(2w) + e^{-2K}}, \quad (11)$$

$$\mu = -kT \ln\left(2y^q e^{q(1+\gamma)K} \left(\frac{p}{1-p}\right)^{q-1} (1-M^2)^{\frac{q-1}{2}}\right), \quad (12)$$

где

$$y = \frac{1}{2} (1 - e^{-2K}) \frac{\text{sh}\left(\frac{qw-h_e}{q-1}\right)}{\text{sh}\left(\frac{w-h_e}{q-1}\right)} - \text{ch}(w). \quad (13)$$

Фактически эти уравнения представляют собой параметрические зависимости  $M(p, K, h_e)$  и  $\mu(p, K, h_e)$ , поскольку, как в этом легко убедиться, при  $h_e > 0$  всегда существует такой интервал значений параметра  $w$ , для которого  $p$ , вычисленное по формуле (11), пробегает весь интервал от 0 до 1. Действительно, при  $w \rightarrow h_e + 0$  из (11) и (13) следует, что  $y \rightarrow +\infty$ , а  $p \rightarrow 0$ . А рассматривая асимптотическое поведение  $y(w)$  (13) при

$w \rightarrow +\infty$ , можно сделать вывод, что существует такое значение  $w$ , при котором  $y = 0$  и в соответствии с (11)  $p = 1$ .

Рассмотрим теперь случай  $h_e = 0$ . Оказывается, что решение с  $M \neq 0$  у системы уравнений (6)–(9) существует только при  $K > K_c(p)$ , где  $K_c(p)$  определяется следующим образом. Приравняв между собой частные от деления правых частей (6), (7) и (8), (9), получим

$$\frac{\text{sh}(2w) + 2y \text{sh}(w)}{\text{ch}(2w) + 2y \text{ch}(w) + e^{-2K}} = \text{th}\left(\frac{qw}{q-1}\right), \quad (14)$$

где значение  $y$  выражается из (11) через  $p$  и  $w$ .

Положительный корень уравнения (14) (соответствующий ненулевой намагниченности) исчезает при условии равенства производных по  $w$  правой и левой частей (14) при  $w = 0$ . Это условие приводит к выражению

$$p = \frac{(q-1) \text{th} K_c}{e^{\gamma K_c} ((q-1) \text{th} K_c - 1)^2 \text{ch} K_c + 2(q-1) \text{th} K_c - 1}, \quad (15)$$

определяющему  $K_c(p)$ . Другим способом этот результат можно получить, перейдя к пределу  $w \rightarrow 0$  в выражениях (11) и (13) при  $h_e = 0$ .

Таким образом, при  $h_e = 0$  и  $K > K_c(1) = \frac{1}{2} \ln \frac{q}{q-2}$  для значений  $p$  из интервала  $[p_c, 1]$ , где

$$p_c = \frac{(q-1) \text{th} K}{e^{\gamma K} ((q-1) \text{th} K - 1)^2 \text{ch} K + 2(q-1) \text{th} K - 1},$$

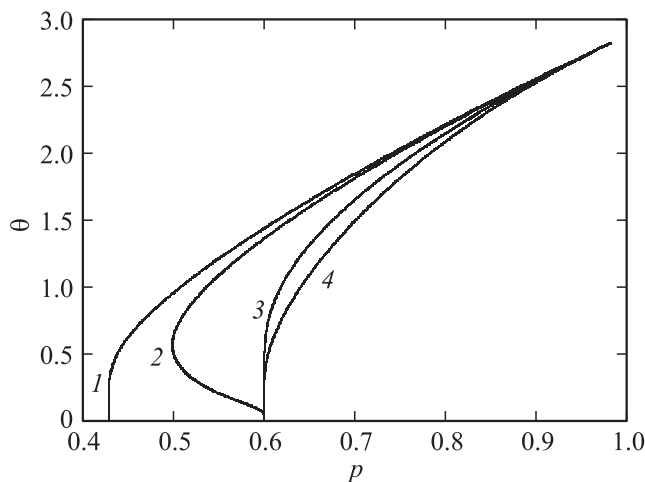
решение (6)–(9) находится по формулам (10)–(13) с  $h_e = 0$ . Для значений  $p$  из интервала  $[0, p_c]$  или для всех значений  $p$  при  $K < K_c(1)$  намагниченность  $M = 0$ , а химический потенциал

$$\mu = -kT \left( q \ln(A) + (q-1) \ln \frac{p}{1-p} \right), \quad (16)$$

где

$$A = \frac{1}{2p} \times \left( (1-2p) + \sqrt{(1-2p)^2 + 2p(1-p)(1+e^{-2K})e^{(1+\gamma)K}} \right).$$

Расчет показывает, что химический потенциал  $\mu$ , вычисленный по формулам (12) и (16), является монотонно возрастающей функцией концентрации  $p$  при всех значениях температуры только в случае  $\gamma > -1$ . Если же  $\gamma \neq -1$ , то существует такое значение  $K_k$ , при котором для всех  $K > K_k$  есть участок концентраций, на котором  $\frac{\partial \mu}{\partial p} < 0$ . Это означает, что при  $\gamma > -1$  (т.е. в том случае, когда эффективный потенциал кулоновского взаимодействия  $U$  либо положителен, либо отрицателен, но не превосходит по абсолютной величине энергию обменного взаимодействия  $J$ ) кроме магнитного фазового перехода в системе существует переход типа



**Рис. 1.** Концентрационная зависимость температуры Кюри для  $q = 4$ . По оси абсцисс отложена концентрация магнитных атомов  $p$ , по оси ординат — температурный параметр  $\theta = kT/J$ .  $\gamma = -1$  (1),  $-1.2$  (2),  $-3$  (3) и  $-\infty$  (4).

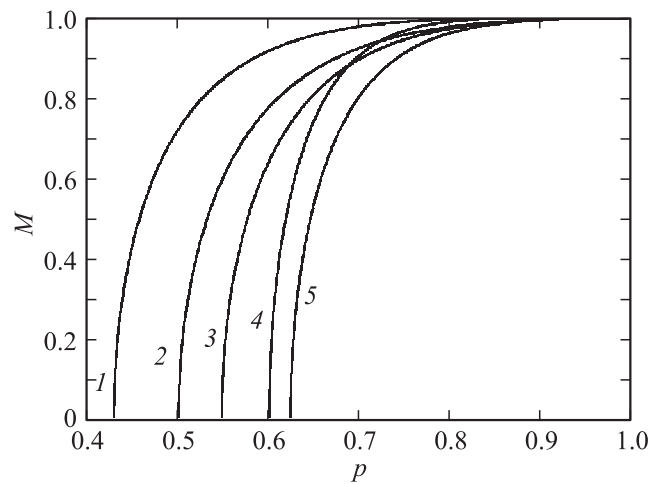
„жидкость–газ“, приводящий к образованию фаз с различной концентрацией магнитных атомов. Для исследования фазовой диаграммы системы в этом случае нужно дополнить уравнения (6)–(9) известным построением Максвелла [6], согласно которому химический потенциал с областью  $\frac{\partial \mu}{\partial p} < 0$  заменяется на некотором участке постоянной, определяемой по правилу „равных площадей“. Однако в настоящей работе мы не будем проводить это исследование и ограничимся анализом случая  $\gamma \leq -1$ .

Исследуем вначале зависимость критической температуры  $K_c^{-1}$  от концентрации магнитных атомов  $p$ . Эта зависимость определяется уравнением (15). При  $p = 1$  из (15) получим  $K_c(1) = \frac{1}{2} \ln \frac{q}{q-2}$ , что соответствует температуре Кюри для чистого изинговского магнетика в приближении Бете [5]. При  $\gamma = -1$  функция  $K_c^{-1}(p)$  монотонно убывает при уменьшении  $p$  и обращается в нуль при  $p_{c1} = \frac{2(q-1)}{q^2-2}$  (кривая 1 на рис. 1). Если  $-3 < \gamma < -1$  функции  $K_c^{-1}(p)$  являются неоднозначными и обращаются в нуль при  $p_{c2} = \frac{q-1}{2q-3}$  (кривая 2 на рис. 1). При  $\gamma \leq -3$  функции  $K_c^{-1}(p)$  вновь становятся монотонно убывающими при уменьшении  $p$ , обращаясь в нуль при  $p_{c2}$  (кривая 3 на рис. 1); при  $\gamma \rightarrow -\infty$  функции  $K_c^{-1}(p)$  приближаются к предельной кривой, показанной на рис. 1 (кривая 4).

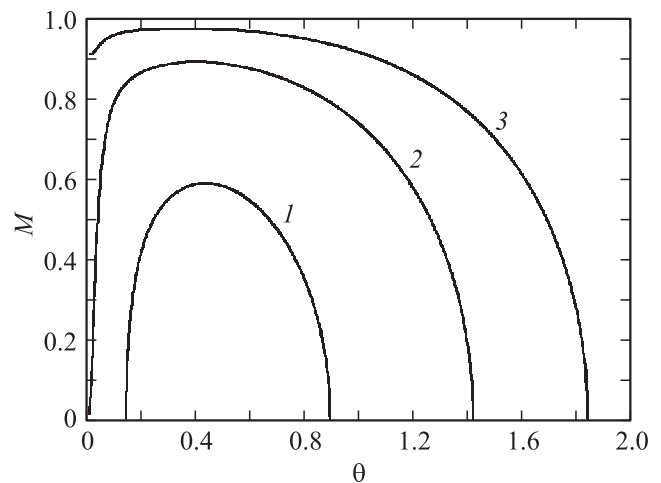
Из уравнений (10)–(13) можно найти спонтанную намагниченность  $M$  как функцию концентрации  $p$  при постоянной температуре  $\theta = K^{-1}$ . В частности, при  $\theta \rightarrow 0$  функцию  $M_0(p)$  можно интерпретировать как вероятность того, что случайно выбранный магнитный атом принадлежит бесконечному кластеру таких атомов [2]. Если в формулах (10)–(13) перейти к пределу  $K \rightarrow 0$ , получим, что при  $\gamma = -1$   $M(p) \rightarrow M_{01}(p)$ , а при  $\gamma < -1$   $M(p) \rightarrow M_{02}(p)$ . Эти кривые показаны на рис. 2

(кривая 1 и 4 соответственно). Они обращаются в нуль при  $p$ , равном  $p_{c1}$  и  $p_{c2}$  соответственно. При любой температуре  $\theta$  спонтанная намагниченность является монотонно возрастающей функцией концентрации  $p$ ; при ненулевых температурах эта функция зависит от  $\theta$  и  $\gamma$  (рис. 2, кривые 2, 3 и 5).

Как следует из рис. 1, зависимость намагниченности  $M$  от температуры  $\theta = K^{-1}$  не всегда будет монотонной. Действительно, расчет показывает, что при  $\gamma = -1$  и  $\gamma \leq -3$  намагниченность монотонно убывает с ростом температуры при любом значении концентрации  $p$ . Если



**Рис. 2.** Концентрационная зависимость спонтанной намагниченности для  $q = 4$ . По оси абсцисс отложена концентрация магнитных атомов  $p$ , по оси ординат — спонтанная намагниченность  $M$ . Кривые 1 и 4 показывают предельные зависимости  $M(p)$  при  $\theta = 0$ :  $\gamma = -1$  (1) и  $\gamma < -1$  (4). Кривые 2, 3 и 5 построены при  $\theta = \frac{1}{3K_c(1)}$  для значений  $\gamma$ , равных  $-1$ ,  $-1.5$  и  $-3.5$  соответственно.



**Рис. 3.** Температурная зависимость спонтанной намагниченности при  $\gamma = -1.1$  и  $q = 4$ . По оси абсцисс отложен температурный параметр  $\theta = kT/J$ , по оси ординат — спонтанная намагниченность  $M$ .  $p = 0.5$  (1),  $0.6$  (2) и  $0.7$  (3).

же  $-3 < \gamma < -1$ , температурная зависимость намагниченности более сложна (рис. 3). В этом случае существует такой интервал концентраций магнитных атомов, в котором спонтанная намагниченность в системе возникает только при некотором ненулевом значении температуры  $\theta_1$ , увеличивается с ростом температуры, проходя через максимум, и вновь обращается в нуль при температуре  $\theta_2$  (кривая 1 на рис. 3). Температура  $\theta_1$  обращается в нуль при  $p = p_{c2}$  (кривая 2 на рис. 3), а при  $p > p_{c2}$  спонтанная намагниченность в системе существует и при  $\theta = 0$  (кривая 3 на рис. 3), хотя зависимость  $M(\theta)$  все равно остается немонотонной.

#### 4. Одномерная модель Изинга с подвижными примесями

Известно [4], что приближение Бете для изинговского магнетика без примесей можно рассматривать как точное решение задачи Изинга на решетке Бете. Частным случаем решетки Бете является одномерная цепочка магнитных атомов, для которой можно построить точное решение с помощью трансфер-матрицы [5]. Можно предположить, что и для изинговского магнетика с подвижными примесями рассмотренное в предыдущем разделе приближение Бете также является точным решением задачи на решетке Бете. Для проверки этого предположения вычислим статистическую сумму (1) для одномерной цепочки, используя трансфер-матрицу, и сравним полученный результат с решением (10)–(13) при  $q = 2$ .

Запишем статистическую сумму одномерной цепочки, состоящей из  $N$  узлов, в следующем виде:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}} \exp \left\{ \sum_{i=1}^N (K\sigma_i\sigma_{i+1} + L\sigma_i^2\sigma_{i+1}^2 + r\sigma_i^2 + h_e\sigma_i) \right\}, \quad (17)$$

где  $r = \mu/kT$  и используется циклическое граничное условие  $\sigma_1 = \sigma_{N+1}$ . Вычислив тем или иным способом (17), можно найти химический потенциал и спонтанную намагниченность из соотношений

$$pM = \frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z_N}{\partial h_e}, \quad p = \frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z_N}{\partial r}. \quad (18)$$

Для вычисления  $Z_N$  воспользуемся следующим способом [5]. Рассмотрим трансфер-матрицу  $V$

$$V = \begin{pmatrix} 1 & e^{(r+h_e)/2} & e^{(r-h_e)/2} \\ e^{(r+h_e)/2} & e^{K+L+r+h_e} & e^{-K+L+r} \\ e^{(r-h_e)/2} & e^{-K+L+r} & e^{K+L+r-h_e} \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Если  $\lambda_1, \lambda_2$  и  $\lambda_3$  — собственные числа матрицы (19), то статистическая сумма (17) равна  $Z_N = \lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N$ . Пусть  $\lambda_1$  есть максимальное из собственных чисел матрицы  $V$ . Тогда в термодинамическом пределе ( $N \rightarrow \infty$ )

формулы (18) перейдут в

$$pM = \frac{\partial \ln \lambda_1}{\partial h_e}, \quad p = \frac{\partial \ln \lambda_1}{\partial r}. \quad (20)$$

Собственные числа (19) находятся из характеристического уравнения

$$\lambda^3 + a\lambda^2 + b\lambda + c = 0, \quad (21)$$

где

$$\begin{aligned} a &= -(1 + 2e^{(1+\gamma)K+r} \operatorname{ch}(h_e)), \\ b &= 2(e^{2\gamma K+r} \operatorname{sh}(2K) + (e^{(1+\gamma)K} - 1)e^r \operatorname{ch}(h_e)), \\ c &= -4e^{\gamma K+2r} (e^{\gamma K} \operatorname{ch}(K) - 1) \operatorname{sh}(K). \end{aligned}$$

Дифференцируя (21) по  $r$  и  $h_e$  и используя (20), можно записать выражения для нахождения  $M$  и  $r$  через  $\lambda_1$  и производные коэффициентов  $a, b$  и  $c$

$$pM = -\frac{\lambda_1 \frac{\partial a}{\partial h_e} + \frac{\partial b}{\partial h_e}}{3\lambda_1^2 + 2a\lambda_1 + b}, \quad p = -\frac{\lambda_1^2 \frac{\partial a}{\partial r} + \lambda_1 \frac{\partial b}{\partial r} + \frac{\partial c}{\partial r}}{(3\lambda_1^2 + 2a\lambda_1 + b)\lambda_1}. \quad (22)$$

Решая (21) численно или по формулам Кардано [15] и находя  $\lambda_1$ , можно, используя (22), получить зависимость намагниченности  $M$  от  $p$  и  $h_e$ . Расчет показывает, что вычисленная таким путем намагниченность в точности совпадает с рассчитанной по формулам (10)–(13) при  $q = 2$ .

#### 5. Заключение

Таким образом, на основании полученных результатов можно отметить следующее.

Приближенные самосогласованные методы, такие как приближение Бете, применимые к изинговским магнетикам без примесей или с замороженными примесями [6–8], могут использоваться также и в случае более сложной модели — модели Изинга с подвижными примесями. Приближение Бете, примененное к этой модели, дает следующие результаты.

1. Состояния системы определяются главным образом параметром  $\gamma$  — отношением эффективного потенциала кулоновского взаимодействия  $U$  и константы обменного взаимодействия  $J$ . При  $\gamma > -1$  в системе возможно разделение на две макроскопические фазы с различной равновесной концентрацией магнитных атомов, а при  $\gamma \leq -1$  система остается гомогенной при всех значениях параметров.

2. Если значение параметра  $\gamma \leq -1$ , т. е. когда энергия кулоновского отталкивания магнитных атомов не меньше, чем энергия обменного взаимодействия, существует предельное значение их концентрации (аналогичное перколяционному порогу), ниже которого отсутствует намагниченность в основном состоянии. Это предельное значение равно  $p_{c1} = \frac{2(q-1)}{q^2-2}$  при  $\gamma = -1$  и  $p_{c2} = \frac{q-1}{2q-3}$  при  $\gamma < -1$ .

3. При  $-3 < \gamma < -1$  существует область концентраций, в которой намагниченность в основном состоянии отсутствует, но при повышении температуры появляется, исчезая вновь при дальнейшем увеличении температуры (рис. 1 и 3).

4. Проведенный нами расчет показывает, что приближение Бете для одномерной цепочки с подвижными примесями является точным решением задачи, как и в случае чистого изинговского магнетика. Это дает основание предположить, что и для произвольного координационного числа  $q$  приближение Бете в модели с подвижными примесями можно рассматривать как точное решение задачи на дереве Бете.

## Список литературы

- [1] R.H. Kodama. *J. Magn. Magn. Mater.* **200**, 359 (1999).
- [2] Ю.А. Изюмов, М.В. Медведев. Теория магнитоупорядоченных кристаллов с примесями. Наука, М. (1970). 271 с.
- [3] Дж. Займан. Модели беспорядка. Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем. Мир, М. (1982). 591 с.
- [4] Б.Н. Шалаев. *ФТТ* **52**, 83 (2010).
- [5] Р. Бэкстер. Точно решаемые модели в статистической механике. Мир, М. (1985). 486 с.
- [6] И.А. Квасников. Термодинамика и статистическая физика. Т. 2. Теория равновесных систем. Едиториал УРСС, М. (2002). 432 с.
- [7] С.В. Сёмкин, В.П. Смагин. *ФТТ* **55**, 892 (2013).
- [8] С.В. Сёмкин, В.П. Смагин. *ФТТ* **56**, 1064 (2014).
- [9] С.В. Сёмкин, В.П. Смагин. *Изв. вузов. Физика* **56**, 9 (2013).
- [10] Е.З. Мейлихов, Р.М. Фарзетдинова. *ФТТ* **56**, 679 (2014).
- [11] Е.З. Мейлихов, Р.М. Фарзетдинова. *ФТТ* **47**, 1085 (2005).
- [12] В.И. Белоконь, К.В. Нефедев. *ЖЭТФ* **120**, 156 (2001).
- [13] В.И. Белоконь, С.В. Семкин. *ЖЭТФ* **102**, 1254 (1992).
- [14] Л.А. Серков. *ТМФ* **92**, 1, 92 (1992).
- [15] Г. Корн, Т. Корн. Справочник по математике (для научных работников и инженеров). Наука, М. (1973). 832 с.