# Термодинамика лестничного ферромагнетика со случайным поперечным обменом

© П.Н. Тимонин

Научно-исследовательский институт физики Ростовского государственного университета,
344090 Ростов-на-Дону, Россия

E-mail: timonin@aaanet.ru

(Поступила в Редакцию 6 ноября 2002 г.)

Рассмотрена модель лестничного ферромагнетика с изинговскими спинами, состоящего из двух ферромагнитных цепочек с взаимодействием ближайших соседей и случайным взаимодействием между ближайшими спинами разных цепочек. При определенном выборе параметров случайного взаимодействия описание вырожденния основного состояния и термодинамики при $T = 0$ оказывается довольно элементарным и сводится к использованию статистики одномерных кластеров. Полевые зависимости термодинамических параметров обнаруживают серию фазовых переходов, связанных с изменением спиновых конфигураций антиферромагнитных кластеров. Численное исследование термодинамики такой системы при конечных температурах подтверждает справедливость аналитических результатов, полученных при $T = 0$.

Синтез кристаллов с одномерными лестничными структурами вызвал интерес к исследованиям их физических свойств [1]. Особый интерес представляют исследования квазиодномерных структур с различными типами беспорядка, что связано как с возможностью описания реальных кристаллов, так и с большим числом новых физических процессов, вызываемых беспорядком. Пожалуй, наиболее изученными являются магнитные свойства квазиодномерных изинговских систем (см., например, обзор [2]). Хотя магнитные переходы при $T \neq 0$ в квазиодномерных системах с близкодействующим обменом отсутствуют, беспорядок приводит в них к ряду необычных свойств при $T = 0$, таких как вырождение основного состояния и переходы в магнитном поле [2–5]. Это в свою очередь приводит к особенностям температурных и полевых зависимостей физических величин при низких температурах.

Вырождение основного состояния является характерным свойством фаз спинового стекла и различных смешанных фаз, где сосуществуют разные типы магнитного порядка и стекольного беспорядка. С ним связана известная неэргодичность магнитных фаз в неупорядоченных магнетиках [6], поэтому исследование случайных (квази) одномерных систем с фрустрацией, обладающих этим свойством, привлекает постоянное внимание. Вместе с тем лишь немногие из таких простейших систем допускают точное аналитическое описание их термодинамики. В их числе модель одномерного изинговского спинового стекла со случайным бинарным обменом во внешнем поле [3–5] и с некоторыми специальными видами функции распределения обмена [7], а также лестничные стекольные модели с бинарным обменом [4,8]. В этих моделях удается непосредственно установить физическую причину вырождения основного состояния, которая состоит в вырождении по энергии спиновых состояний некоторых магнитных кластеров с определенной конфигурацией обменных взаимодействий [3,5,9]. Однако перечисление таких конфигураций представляет собой довольно нетривиальную задачу, так что дальнейший прогресс в исследовании упомянутых моделей, например, изучение неэргодической динамики при $T = 0$, пока отсутствует.

В связи с этим представляется целесообразным поиск и исследование других неупорядоченных квазиодномерных систем с вырожденным основным состоянием, описание которых было бы достаточно простым. В этом отношении лестничные модели дают большие возможности, а также определенную надежду на возможность экспериментальной проверки теоретических результатов. В настоящей работе рассмотрена модель лестничного ферромагнетика с изинговскими спинами, состоящего из двух ферромагнитных цепочек с взаимодействием ближайших соседей и имеющих случайное взаимодействие между ближайшими спинами разных цепочек. При определенном выборе параметров случайного взаимодействия описание вырождения основного состояния и термодинамики при $T = 0$ оказывается довольно элементарным и сводится к использованию статистики одномерных кластеров. Численное исследование термодинамики такой системы при конечных температурах подтверждает справедливость аналитических результатов, полученных при $T = 0$.

## 1. Термодинамика при $T = 0$

Спиновый гамильтониан рассматриваемой модели имеет вид

$$\mathscr{H} = -\sum_{i=1}^{N}\big[J(S_{1i}S_{1i+1} + S_{2i}S_{2i+1}) + J_r S_{1i}S_{2i} + H(S_{1i} + S_{2i})\big]. \qquad (1)$$

Здесь $S_{\alpha,i} = \pm 1$, $H > 0$ — магнитное поле, $J > 0$ — константа ферромагнитного обмена цепочек, $J_r$ — константа случайного обмена между ближайшими спинами

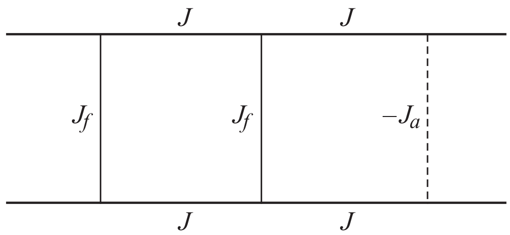


**Рис. 1.** Схематическое изображение лестничного ферромагнетика со случайным поперечным обменом.

разных цепочек, принимающая два значения $J_r = -J_a$, с вероятностью $p$; $J_r = J_f$, с вероятностью $1 - p$.

Таким образом, в каждой конкретной реализации $J_r$ система состоит из кластеров, содержащих антиферромагнитные $(-J_a)$ и ферромагнитные $(J_f)$ взаимодействия между цепочками. На рис. 1 представлено схематическое изображение лестничного ферромагнетика для некоторой реализации случайного поперечного обмена.

Далее будем полагать, что $J_f > 2J$. В этом случае в основном состоянии в ферромагнитных кластерах спины равны 1, так что остается определить направления спинов в антиферромагнитных кластерах. Рассмотрим изменение энергии антиферромагнитных кластеров при переходе от ферромагнитного состояния (все $S_{1,i}S_{2,i} = 1$) к конфигурации с противоположными спинами в $n$ идущих подряд ячейках (если такие ячейки идут не подряд, то энергия конфигурации будет выше)

$$\delta E_n = -2n(J_a - H) + 4J. \qquad (2)$$

При $H > J_a$ $\delta E_n > 0$ и наличие противоположно направленных спинов в ячейках будет невыгодным, так что (единственное) основное состояние будет ферромагнитным со средней энергией на одну ячейку

$$E_f = -2J + pJ_a - (1-p)J_f - 2H. \qquad (3)$$

При $H < J_a$ наименьшую энергию имеют конфигурации с наибольшим $n$, совпадающим с размером кластера (все $S_{1,i}S_{2,i} = -1$). Такое антиферромагнитное упорядочение будет выгоднее для достаточно больших антиферромагнитных кластеров с числом ячеек, большим или равным целому числу $n_0$, удовлетворяющему условию

$$2J/(J_a - H) < n_0 < 1 + 2J/(J_a - H), \qquad (4)$$

если $2J/(J_a - H)$ — не целое число. Если $2J/(J_a - H)$ — целое число, то $n_0 = 2J/(J_a - H)$, причем в этом случае кластеры из $n_0$ ячеек имеют равные энергии ферро- и антиферромагнитного упорядочения.

Энергия основного состояния при $H < J_a$ будет меньше $E_f$ на величину выигрышей от перехода антиферромагнитных кластеров с $n \geq n_0$ в антиферромагнитное состояние

$$E = E_f + \sum_{n=n_0}^{\infty} N_n \delta E_n. \qquad (5)$$

Здесь $N_n$ — среднее число антиферромагнитных кластеров из $n$ ячеек в расчете на одну ячейку [10]

$$N_n = p^n (1-p)^2. \qquad (6)$$

Поскольку антиферромагнитное упорядочение кластера может реализоваться двумя способами, а основное состояние оказывается вырожденным со средней энтропией

$$S = \sum_{n=n_0}^{\infty} N_n \ln 2 + \delta_{n_0, 2J/(J_a - H)} N_{n_0} \ln \frac{3}{2}. \qquad (7)$$

Последний член в (7) учитывает вырожденность по энергии ферро- и антиферромагнитного упорядочения $n_0$-кластеров, когда $2J/(J_a - H)$ — целое число.

Среднюю намагниченность в основном состоянии при $H < J_a$ можно найти, вычитая из ферромагнитной намагниченности (единицы) долю спинов в кластерах с антиферромагнитным упорядочением

$$M = 1 - \sum_{n=n_0}^{\infty} nN_n + \delta_{n_0, 2J/(J_a - H)} \frac{n_0 N_{n_0}}{3}. \qquad (8)$$

Отметим, что в отличие от энтропии и энергии, получаемых усреднением по возможным конфигурациям связей, средняя намагниченность определяется как среднее по основным состояниям с последующим усреднением по связям. Последнее слагаемое в (8) учитывает вырожденность ферро- и антиферромагнитных состояний $n_0$-кластеров, если $2J/(J_a - H)$ — целое число. Действительно, из $3^{N \cdot N_{n_0}}$ состояний, отличающихся конфигурацией $n_0$-кластеров, имеется $2^k \binom{NN_{n_0}}{k}$ состояний с антиферромагнитной конфигурацией спинов в $k$ кластерах, так что среднее число спинов на узел в $n_0$-кластерах с антиферромагнитным упорядочением

$$\sum_{k=1}^{NN_{n_0}} \frac{n_0 k}{N} 2^k \binom{NN_{n_0}}{k} 3^{-N \cdot N_{n_0}} = \frac{2}{3} n_0 N_{n_0},$$

откуда и следует (8).

Подставляя (2), (6) в (5), (7), (8), получим явные выражения для средней энергии, энтропии и намагниченности при $T = 0$

$$E = -2J[1 - 2p^{n_0}(1-p)] + J_a[p - 2L(n_0, p)] - 2H[1 - 2L(n_0, p)] - (1-p)J_f, \qquad (9)$$

$$S = p^{n_0}(1-p)\left[\ln 2 + \delta_{n_0, 2J/(J_a - H)}(1-p) \ln \frac{3}{2}\right], \qquad (10)$$

$$M = 1 - L(n_0, p) + \delta_{n_0, 2J/(J_a - H)} \frac{n_0 P^{n_0}(1-p)^2}{3}. \qquad (11)$$

Здесь

$$L(n_0, p) = \sum_{n=n_0}^{\infty} nN_n = p^{n_0}[p + n_0(1-p)].$$

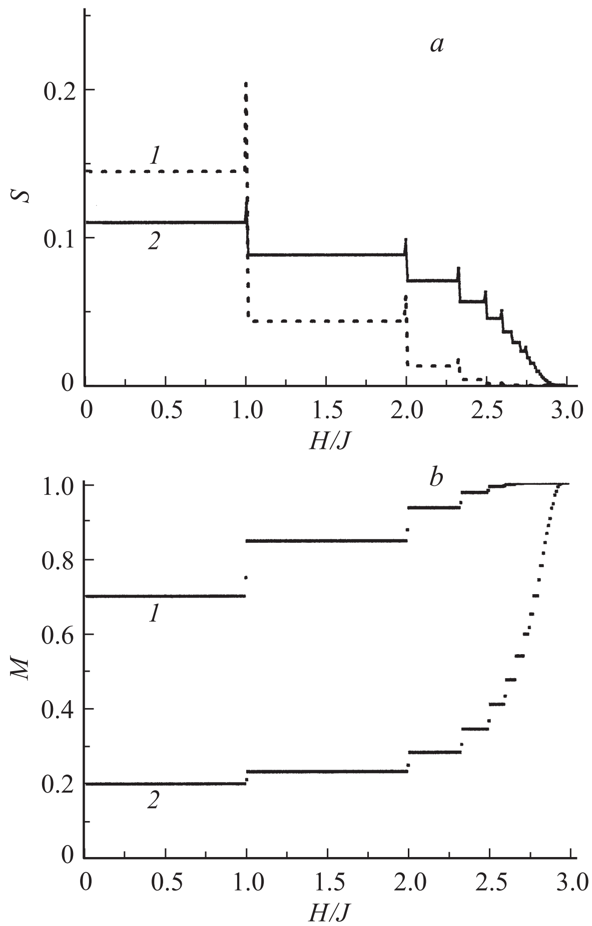


**Рис. 2.** Полевые зависимости термодинамических параметров при $T = 0$ и $J_a = 3J$, $a$ — энтропии, $b$ — намагниченности; $1$ — $p = 0.3$, $2$ — $0.8$.

Полевые зависимости энтропии и намагниченности, представленные на рис. 2 для $J_a = 3J$, $p = 0.3$ и $0.8$, имеют ступенчатый вид со скачками при целых $2J/(J_a - H)$, характерный для (квази) одномерных изинговских магнетиков с дискретным беспорядком [2–4]. Физическая причина такого поведения вполне очевидна, с ростом поля происходит изменение спиновых конфигураций (от антиферромагнитной к ферромагнитной) все более крупных кластеров с антиферромагнитными связями. При $H < J_a$, в точках $H_k = J_a - 2J/k$, $k = 1, 2, \dots,$ имеет место серия переходов между фазами, в которых сосуществует ферромагнитное и стекольное упорядочение спинов. Энергия (9) непрерывна в точках переходов. Доля стекольного беспорядка и вырождение основного состояния (энтропия) уменьшаются с ростом поля и, наконец, система становится ферромагнитной при $H > J_a$. Таким образом, мы имеем типичную систему с фрустацией, вызванной беспорядком, однако, в отличие от ранее рассмотренных моделей [2–5,7–9] описание свойств лестничного ферромагнетика со случайным поперечным обменом при $T - 0$ в случае, когда $J_f > 2J$, вполне элементарно.

Отметим, что полученные выражения для энергии и намагниченности удовлетворяют стандартному термодинамическому соотношению

$$2M = -\frac{\partial E}{\partial H},$$

если $2J/(J_a - H)$ не является целым числом. Если же $2J/(J_a - H)$ — целое число, то это соотношение не выполняется, так как из (9) следует, что в точках переходов энергия испытывает излом и ее производной по $H$ не существует. Причина этого заключается в неравномерном по $H$ стремлении $\partial E_N/\partial H$ к своему пределу при $N \to \infty$ вблизи таких $H$, что не позволяет дифференцировать предельное значение $E$ по $H$. В этом случае правильный результат для намагниченности, совпадающий с (11), может быть получен, если дифференцирование по $H$ выполняется до предельного перехода $N \to \infty$

$$2M = -\lim_{N\to\infty} \partial E_N/\partial H.$$

## 2. Термодинамика при конечных температурах

Исследование термодинамики рассматриваемой модели при конечных температурах может быть выполнено с использованием стандартных методов, применяемых для изучения случайных квазиодномерных систем с близкодействием [11]. Введем частичную статсумму

$$Z_N(S_1, S_2) = \mathrm{Tr}_{N-1}[\exp(-\beta\mathscr{H})].$$

Здесь $\beta = 1/T$, а $\mathrm{Tr}_{N-1}$ означает суммирование по конфигурациям всех спинов за исключением спинов последней ячейки $(S_1, S_2)$. Величины $Z_N(S_1, S_2)$ удовлетворяют следующим рекуррентным соотношениям:

$$Z_{N+1}(\mathbf{S}) = \mathrm{Tr}_{\mathbf{S}'} R(\mathbf{S}, \mathbf{S}') Z_N(\mathbf{S}'), \qquad (12)$$

где $R(\mathbf{S}, \mathbf{S}')$ — матрица переноса. В дальнейшем будем рассматривать случай $H = 0$, так что

$$R(\mathbf{S}, \mathbf{S}') = \exp[\beta J(\mathbf{S}, \mathbf{S}') + \beta J_r S_1 S_2].$$

В этом случае частичную статсумму можно представить в виде

$$Z_N(\mathbf{S}) = \frac{Z_N}{4}(1 + \sigma_N S_1 S_2),$$

где $Z_N$ — обычная статсумма,

$$Z_N = \mathrm{Tr}_N[\exp(-\beta\mathscr{H})].$$

а $\sigma_N$ — среднее значение произведения спинов в одной ячейке,

$$\sigma_N = \mathrm{Tr}_N(S_1 S_2 e^{-\beta\mathscr{H}})/Z_N \equiv \langle S_1 S_2 \rangle_N.$$

Из (12) следует

$$Z_{N+1} = 4\,\mathrm{ch}^2(\beta J)\,\mathrm{ch}(\beta J_r)[1 + \mathrm{th}^2(\beta J)\,\mathrm{th}\,(\beta J_r)\sigma_N] Z_N, \qquad (13)$$

$$\sigma_{N+1} = \frac{\mathrm{th}\,(\beta J_r) + \mathrm{th}^2(\beta J)\sigma_N}{1 + \mathrm{th}\,(\beta J_r)\,\mathrm{th}^2(\beta J)\sigma_N}. \qquad (14)$$

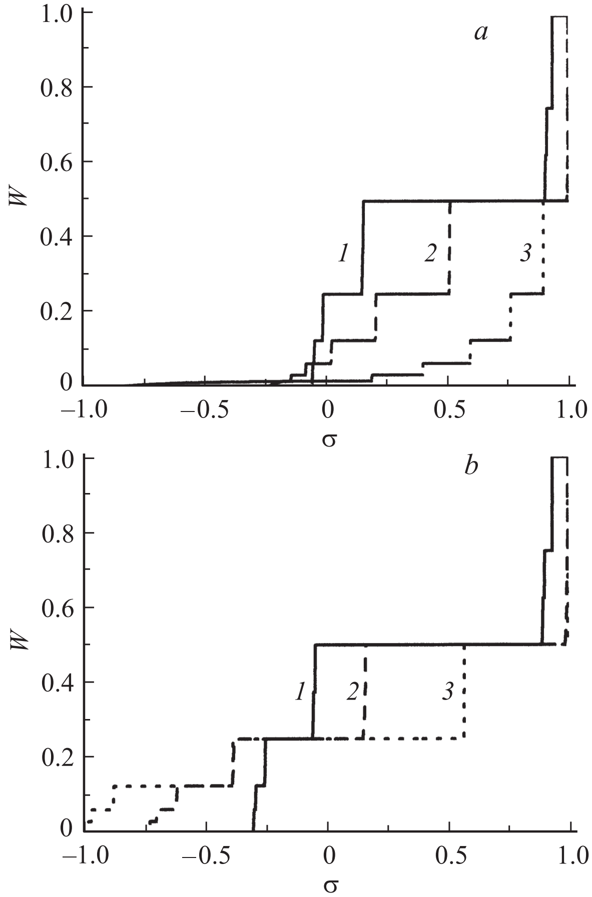


**Рис. 3.** Проинтегрированная функция распределения $w(\sigma)$ при $p = 0.5$, $J_f = 3J$; $a$ — $J_a = 0.1$, $b$ — $0.5J$; $T = 2J$ ($1$), $T = J$ ($2$), $T = 0.5J$ ($3$).

Из (14) в свою очередь следует при $N \to \infty$ уравнение для функции распределения величины $\sigma$ [11]

$$\rho(\sigma) = \int_{-1}^{1} d\sigma' \langle \delta[\sigma - f(\sigma', J_r)] \rangle_{J_r} \rho(\sigma'), \qquad (15)$$

где $f(\sigma', J_r)$ — функция в правой части (14)

$$f(\sigma, J_r) = \frac{\operatorname{th}(\beta J_r) + \operatorname{th}^2(\beta J)\sigma}{1 + \operatorname{th}(\beta J_r)\operatorname{th}^2(\beta J)\sigma}, \qquad (16)$$

а угловые скобки обозначают усреднение по случайному обмену.

Определив из (15) $\rho(\sigma)$, можно найти из (13) средний термодинамический потенциал

$$\begin{aligned} F &\equiv -\lim_{N\to\infty} \frac{T}{N} \langle \ln Z_N \rangle \\ &= -T \ln[4\operatorname{ch}^2(\beta J)] - T\langle \ln[\operatorname{ch}(\beta J_r)] \rangle_{J_r} \\ &\quad - T \int_{-1}^{1} d\sigma \rho(\sigma) \langle \ln[1 + \operatorname{th}^2(\beta J)\operatorname{th}(\beta J_r)\sigma] \rangle_{J_r}. \qquad (17) \end{aligned}$$

Уравнение (15) можно решить только численно. При этом удобно его несколько преобразовать. Продолжив $\rho(\sigma)$ нулем на область $\sigma^2 > 1$, внеся интегрирование под знак усреднения и интегрируя, получим

$$\rho(\sigma) = \left\langle \frac{\partial g(\sigma, J_r)}{\partial \sigma} \rho[g(\sigma, J_r)] \right\rangle_{J_r}, \qquad (18)$$

где $g(\sigma, J_r)$ — функция, обратная $f(\sigma, J_r)$ (16),

$$g(\sigma, J_r) = \operatorname{th}^{-2}(\beta J) \frac{\sigma - \operatorname{th}(\beta J_r)}{1 - \sigma \operatorname{th}(\beta J_r)}.$$

Интегрируя (18) по $\sigma$, получим

$$w(\sigma) = \langle w[g(\sigma, J_r)] \rangle_{J_r}, \qquad (19)$$

где

$$w(\sigma) = \int_{-1}^{\sigma} d\sigma' \rho(\sigma').$$

Проинтегрированная функция распределения $w(\sigma)$ удовлетворяет более простому уравнению (19) и имеет более слабые особенности (скачки) в отличие от $\rho(\sigma)$,

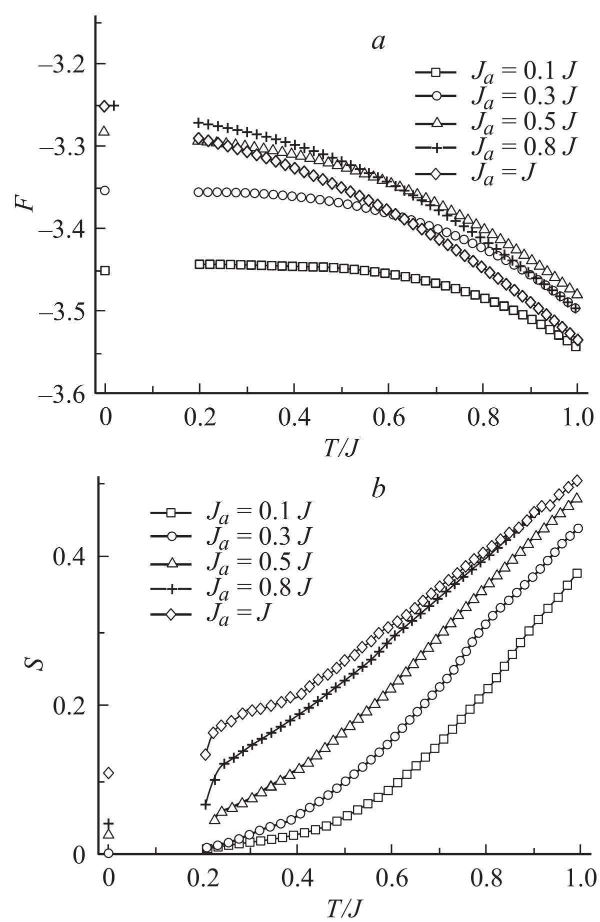


**Рис. 4.** Температурные зависимости термодинамических параметров при $p = 0.5$, $J_f = 3J$ и различных значениях $J_a$; $a$ — термодинамический потенциал, $b$ — энтропия.

в которой могут присутствовать дельта-функции. Потому численное решение (19) существенно проще. Оно может быть выполнено методом итераций. При выборе начальной функции $w_0(\sigma) = 0.5(1 + \sigma)$ сходимость к решению достигается через $5-10$ итераций. Вид $w(\sigma)$ при $p = 0.5$, $J_f = 3J$ и некоторых значениях температуры и $J_a$ приведен на рис. 3.

Вычисленные с помощью (17) температурные зависимости термодинамического потенциала $F$ при $p = 0.5$, $J_f = 3J$ и различных $J_a$ представлены на рис. 4, $a$, а на рис. 4, $b$ изображена энтропия, полученная численным дифференцированием $F(T)$. К сожалению, вычисления при $T < 0.2J$ требуют весьма длительного времени для достижения приемлемой точности. Однако, и результаты при $T > 0.2J$ на рис. 4, $a$ показывают, что при низких температурах значения $F(T)$ стремятся к соответствующим средним значениям $E(T = 0)$ (9), представленным на рисунке. Поведение энтропии также согласуется с результатами при $T = 0$ (10) (рис. 4, $b$). Таким образом, простые аналитические результаты, полученные при $T = 0$, действительно адекватно описывают термодинамику рассматриваемой модели.

Представляется, что модель с такой простой, но нетривиальной термодинамикой при $T = 0$, обладающая всеми свойствами фрустрированных неупорядоченных систем, может служить тестовой моделью для проверки различных приближенных подходов к описанию более сложных низкоразмерных неупорядоченных магнетиков. Очевидно, что и динамика этой модели при $T = 0$ будет нетривиальной, обладая всеми присущими неэргодическим системам эффектами. Можно надеяться, что описание таких динамических эффектов также будет достаточно простым в рамках этой модели, если не аналитическим, то, возможно, не требующим длительных численных расчетов. Отметим также и возможность физической ее реализации, при которой случайный обмен может быть создан введением примесей между ферромагнитными цепочками.

## Список литературы


[1] E. Dagotto. Rep. Prog. Phys. **62**, *8*, 1525 (1999).
[2] R. Liebmann. Statistical Mechanics of Periodic Frustrated Ising Systems. Lect. Notes Phys. Vol. 251. Springer, Berlin (1986).
[3] A. Vilenkin. Phys. Rev. B **18**, *3*, 1474 (1978).
[4] B. Derrida, J. Vannimenus, Y. Pomeau. J. Phys. **C11**, *16*, 4749 (1978).
[5] E. Farhi, S. Guttmann. Phys. Rev. B **48**, *13*, 9508 (1993).
[6] K. Binder, A.P. Young. Rev. Mod. Phys. **58**, *4*, 801 (1986).
[7] J.M. Luck, Th. M. Nieuwenhuizen. J. Phys. **A22**, *7*, 2151 (1989).
[8] D.C. Mattis, P. Paul. Phys. Rev. Lett. **83**, *18*, 3733 (1999).
[9] F. Igloi. J. Phys. **A27**, *10*, 2995 (1994).
[10] D. Stauffer, A. Aharony. Introduction to Percolation Theory. Taylor & Francis, London (1992).
[11] D. Andelman. Phys. Rev. B **34**, *9*, 6214 (1986).