

# ФРУСТРАЦИИ В РАЗБАВЛЕННОМ ИЗИНГОВСКОМ МАГНЕТИКЕ НА РЕШЕТКЕ БЕТЕ

*C. B. Сёмкин, B. П. Смагин, B. C. Тарасов\**

*Владивостокский государственный университет экономики и сервиса  
690014, Владивосток, Россия*

Поступила в редакцию 24 января 2022 г.,  
после переработки 24 января 2022 г.  
Принята к публикации 28 февраля 2022 г.

Рассмотрено нахождение энтропии изинговского ферромагнетика с немагнитными примесями, случайно расположеными по узлам или связям решетки. Рассмотрен изинговский магнетик на решетке Бете. На такой решетке не различаются ситуации случайного немагнитного разбавления по узлам и связям. Для вычисления энтропии используется намагниченность, найденная в псевдохаотическом приближении. В этом приближении получено значение энтропии как функции температуры, концентрации магнитных атомов и внешнего магнитного поля. Обнаружено, что при нулевом внешнем поле система фрустрирована в том смысле, что энтропия основного состояния не равна нулю. Найдена величина этой энтропии при концентрациях магнитных атомов как ниже, так и выше переколяционного порога.

DOI: 10.31857/S0044451022060074

EDN: DULWYZ

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Настоящая работа посвящена вычислению свободной энергии и энтропии разбавленного изинговского магнетика на решетке Бете. Решетка Бете представляет собой бесконечный граф без замкнутых путей, в котором каждый узел связан с координационным числом  $q$  другими узлами [1]. На такой решетке можно задать модель Изинга, поместив в каждый узел изинговский «спин», принимающий значения +1 и -1. С каждой парой соседних спинов  $\sigma_i$  и  $\sigma_j$  связано слагаемое в гамильтониана  $J_{ij}\sigma_i\sigma_j$ , моделирующее обменное взаимодействие,  $J_{ij}$  — заданные константы. В случае, когда все  $J_{ij}$  одинаковы и положительны, можно построить точное решение для произвольного  $q$  [1].

Если теперь заменить некоторые из спинов немагнитными атомами, располагая их в решетке случайно и без корреляции, получим модель разбавленного по узлам магнетика, если же немагнитные примеси располагаются на связях решетки, блокируя обменное взаимодействие на этой связи, получим модель разбавленного по связям магнетика [2, 3]. Для решетки Бете модели с разбавлением

по узлам и связям формально не различаются [4]. Можно получить точное решение для модели Изинга с разбавлением для  $q = 2$  (одномерная цепочка) [5], однако для произвольного  $q$  точного решения этой задачи нет.

В наших работах [4, 6, 7] предлагается подход к анализу свойств разбавленных магнетиков с немагнитными примесями, основанный на следующих соображениях. Вместо того, чтобы с самого начала полагать, что примеси распределены в решетке случайно, рассмотрим магнетик, в котором магнитные атомы и атомы примеси могут перемещаться и находятся в термодинамическом равновесии. Энергия такой системы определяется не только ориентацией магнитных моментов, но и расположением атомов примеси по узлам решетки. Таким образом, гамильтониан той или иной модели магнетика с подвижными примесями будет состоять из слагаемых, связанных с обменным взаимодействием магнитных атомов и слагаемых, связанных с межатомным взаимодействием в кристаллической решетке, причем равновесное распределение атомов примеси зависит от параметров, характеризующих оба этих взаимодействия. Тогда для каждого значения температуры, внешнего магнитного поля и концентрации (или) магнитных атомов  $b$  в системе можно подобрать значения параметров межатомного взаимодействия с таким расчетом, чтобы равновесное распределение

\* E-mail: vals.tarasov@gmail.com

атомов примеси было бы как можно ближе к случайному [4, 6, 7]. В качестве условия близости распределения атомов примеси к случайному можно, например, использовать равенство нулю корреляции в расположении атомов примеси для двух ближайших узлов, что и является основой псевдохаотического приближения, использованного в настоящей работе. В этом приближении мы вычисляем свободную энергию и энтропию разбавленного изинговского ферромагнетика на решетке Бете и делаем выводы относительно возможных фрустрированных состояний в этой системе.

## 2. СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ И ЭНТРОПИЯ РАЗБАВЛЕННОГО ИЗИНГОВСКОГО МАГНЕТИКА

В соответствии с принципами статистической физики и термодинамики полная свободная энергия термодинамической системы [1, 8]

$$F = -kT \ln Z, \quad (1)$$

где  $k$  — постоянная Больцмана,  $T$  — абсолютная температура,  $Z$  — статистическая сумма системы. Зная свободную энергию как функцию температуры, можно выразить внутреннюю энергию  $U$  и энтропию  $S$  следующим образом [8]:

$$U = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{F}{T} \right), \quad S = -\frac{\partial F}{\partial T}. \quad (2)$$

Простой и часто встречающейся моделью магнитной системы является модель Изинга [1]. В этой модели магнитный атом представлен локализированной в месте расположения этого атома (в узле решетки) переменной  $\sigma$ , принимающей значения +1 и -1 (так называемый «изинговский спин»). Для модели Изинга на произвольной решетке

$$Z = \sum_{\Omega} \exp \left( -\frac{1}{kT} \mathcal{H}(\Omega, H) \right). \quad (3)$$

Гамильтониан системы  $\mathcal{H}(\Omega, H)$  зависит от внешнего поля  $H$  и конфигурации изинговских спинов  $\Omega$ , а суммирование в (3) проводится по всем таким конфигурациям. Для моделей с парным взаимодействием

$$\mathcal{H}(\Omega, H) = \sum_{(i,j)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i. \quad (4)$$

Первое суммирование в этом выражении проводится по всем упорядоченным парам спинов, а вто-

рое — по всем спинам решетки,  $J_{ij}$  — энергия обменного взаимодействия  $i$ -го и  $j$ -го спинов. Для гамильтониана такого вида полная намагниченность системы

$$\sum_i M_i = -\frac{\partial F}{\partial H}, \quad (5)$$

где  $M_i = \langle \sigma_i \rangle$  — термодинамическое среднее  $i$ -го спина, т. е. локальная намагниченность узла  $i$ . Вычислим свободную энергию системы с помощью рассуждения, аналогичного приведенному в [1]. При очень большом внешнем поле, т. е. при  $H \rightarrow \infty$ , наибольший вклад в сумму (3) вносит слагаемое, в котором все спины  $\sigma_i = +1$ . В этом пределе

$$F = - \sum_{(ij)} J_{ij} - HN. \quad (6)$$

Здесь  $N$  — число узлов решетки. Учитывая асимптотическое равенство (6) и полагая, что все  $M_i \rightarrow 1$  при  $H \rightarrow \infty$ , получим, интегрируя (5),

$$F(H_0, T) = - \sum_{(ij)} J_{ij} - H_0 N + \int_{H_0}^{\infty} \left( \sum_i M_i - N \right) dH. \quad (7)$$

Дифференцируя это выражение по  $T$  получим, согласно (2), энтропию системы

$$S(H_0, T) = - \sum_i \int_{H_0}^{\infty} \frac{\partial M_i(H, T)}{\partial T} dH. \quad (8)$$

Будем считать, что взаимодействуют только спины ближайших узлов, причем константы обменного взаимодействия  $J_{ij} = J$  для ближайших соседей и равны нулю во всех остальных случаях. Тогда

$$\sum_{(ij)} J_{ij} = J \bar{q} \frac{N}{2},$$

где  $\bar{q}$  — среднее по решетке координационное число. Для простой решетки с координационным числом  $q$  очевидно  $\bar{q} = q$  для чистого магнетика. В случае некоррелированного немагнитного разбавления по узлам или связям  $\bar{q} = qb$ , где  $b$  — концентрация магнитных атомов или связей [4].

Разделив теперь (7) и (8) на  $NkT$  и вводя удельные (на магнитный атом) свободную энергию  $f = F/N$ , энтропию  $s = S/N$  и намагниченность

$$M = \frac{\sum_i M_i}{N}$$

получим

$$\frac{f(h_0, K)}{kT} = -\frac{1}{2}\bar{q}K - h_0 + \int_{h_0}^{\infty} (M(h) - 1) dh, \quad (9)$$

$$\frac{s(h_0, K)}{kT} = - \int_{h_0}^{\infty} \frac{\partial M(h)}{\partial T} dh. \quad (10)$$

Здесь  $K = J/kT$  и  $h = H/kT$ .

Из формул (9) и (10) следует, что если известна средняя намагниченность  $M$  как функция температуры, внешнего магнитного поля и концентрации магнитных атомов или связей, можно найти свободную энергию и энтропию.

### 3. РЕШЕТКА БЕТЕ И ПСЕВДОХАОСТИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

В наших работах [4, 6, 7] показано, что приближенное значение намагниченности разбавленного изинговского магнетика на решетке с координационным числом  $q$  может быть найдено так:

$$M = \text{th}(Kq\mu + h), \quad (11)$$

где  $\mu$  определяется из уравнения

$$\begin{aligned} \text{th}(Kq\mu + h) &= (1 - b) \text{th}(K(q - 1)\mu + h) + \\ &+ b \frac{\text{sh}(2K(q - 1)\mu + 2h)}{\text{ch}(2K(q - 1)\mu + 2h) + e^{-2K}}. \end{aligned} \quad (12)$$

Оказывается [4], что приближение (11) для чистого магнетика ( $b = 1$ ) является точным решением для модели Изинга на решетке Бете, а при  $b < 1$  его можно рассматривать как «псевдохаотическое» приближение для модели Изинга с немагнитным разбавлением на решетке Бете [4]. Псевдохаотическое приближение получается из решения задачи с подвижными немагнитными примесями при наложении дополнительного условия равенства нулю корреляции в расположении примесей в соседних узлах решетки [6]. Ситуации разбавления по узлам и связям на решетке Бете не различаются, поэтому  $b$  можно понимать и как концентрацию магнитных атомов, и как вероятность того, что связь с соседними узлами будет не разорванной.

В (11) и (12) введем обозначения

$$z = Kq\mu + h, \quad w = K(q - 1)\mu + h, \quad \eta = e^{-2K},$$

$$\beta = \frac{q - 1}{q}, \quad x = h/q.$$

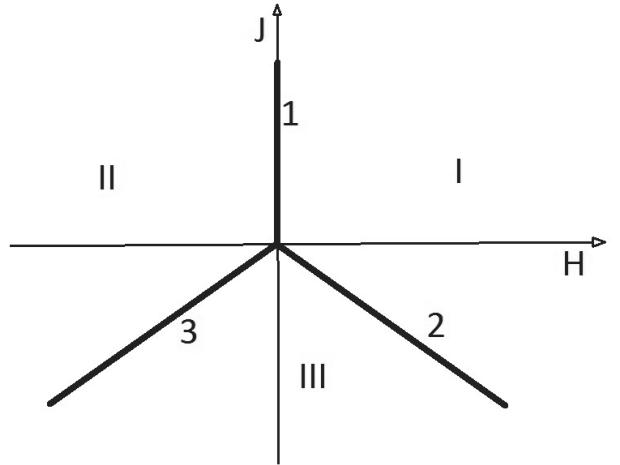


Рис. 1. Диаграмма состояний разбавленного изинговского магнетика на решетке Бете

Тогда (11) и (12) примет вид

$$\begin{aligned} M &= \text{th}(z), \\ M &= (1 - b) \text{th}(w) + b \frac{\text{sh}(2w)}{\text{ch}(2w) + \eta}, \\ w &= \beta z + x \end{aligned} \quad (13)$$

или  $M = \partial\psi/\partial w$ , где

$$\psi(w) = (1 - b) \ln(\text{ch}(w)) + \frac{b}{2} \ln(\text{ch}(2w) + \eta).$$

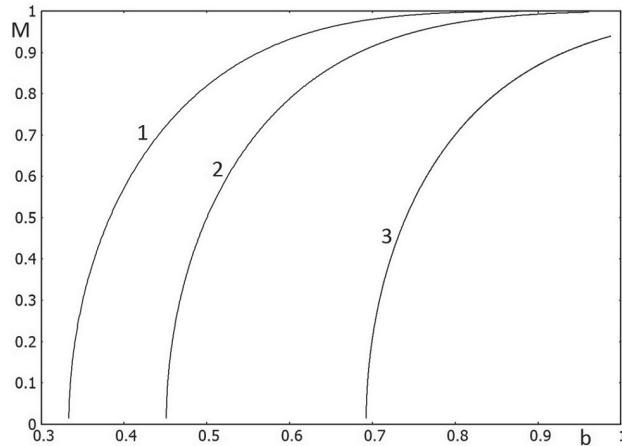
Уравнения (13) можно записать в виде одного уравнения относительно намагниченности  $M$

$$\begin{aligned} M &= (1 - b) \frac{(1 + M)^{\beta} - \xi(1 - M)^{\beta}}{(1 + M)^{\beta} + \xi(1 - M)^{\beta}} + \\ &+ b \frac{(1 + M)^{2\beta} - \xi^2(1 - M)^{2\beta}}{(1 + M)^{2\beta} + \xi^2(1 - M)^{2\beta} + 2\xi\eta(1 - M^2)^{\beta}}, \end{aligned} \quad (14)$$

где  $\xi = e^{-2x}$ .

При выводе уравнений (13) или (14) предполагается, что среднее значение спина (локальная намагниченность) одинаково для всех внутренних узлов решетки и равна  $M$  в термодинамическом пределе. Иными словами, в системе не образуется магнитных подрешеток. Это предполагает, что либо в системе ферромагнитное обменное взаимодействие, т. е.  $K > 0$ , либо  $K < 0$ , но внешнее поле  $H$  достаточно велико, для того чтобы препятствовать образованию подрешеток при любой температуре.

Для того чтобы конкретизировать область применимости уравнения (14), рассмотрим фазовую диаграмму основного состояния ( $T = 0$ ) разбавленного изинговского магнетика на решетке Бете с координационным числом  $q$  (рис. 1).



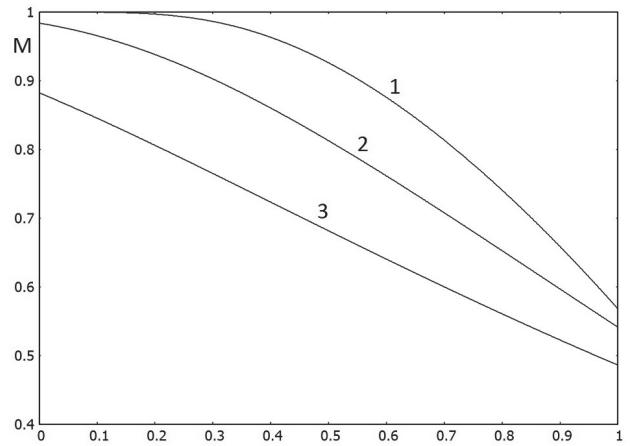
**Рис. 2.** Спонтанная намагниченность разбавленного изинговского ферромагнетика на решетке Бете ( $q = 4$ ) как функция концентрации магнитных атомов (или связей). Кривая 1 —  $\eta = 0$ , кривая 2 —  $\eta = 0.15$  и кривая 3 —  $\eta = 0.35$  ( $\eta = \exp(-2K)$ )

Переходя в (14) к пределу  $T \rightarrow 0$ , получим, что при условии  $H > 0$  и  $J > -H/q$  (область I на рис. 1)  $M \rightarrow 1$ , а при  $H < 0$  и  $J > H/q$  (область II на рис. 1)  $M \rightarrow 1$ . Таким образом, в областях I и II основное состояние системы ферромагнитное. Граница этих областей (линия 1 на рис. 1) — зона, в которой происходят ферромагнитные фазовые переходы. Как показывает анализ уравнений (13) [4], при  $T \rightarrow 1$  и  $b < b_c = 1/(q-1)$  на линии 1  $M = 0$ . При  $b > b_c$ , т. е. при концентрации магнитных атомов, превышающей порог протекания решетки Бете, в системе возникает спонтанная намагниченность  $M_0$ , которую можно найти из уравнения

$$M_0 = (1-b) \frac{(1+M_0)^\beta - (1-M_0)^\beta}{(1+M_0)^\beta + (1-M_0)^\beta} + \\ + b \frac{(1+M_0)^{2\beta} - (1-M_0)^{2\beta}}{(1+M_0)^{2\beta} + (1-M_0)^{2\beta}}. \quad (15)$$

График функции  $M_0(b)$  приведен на рис. 2 (кривая 1). При  $T > 0$  спонтанная намагниченность возникает при концентрации, превышающей значение  $b_K = b_c(1+\eta)/(1-\eta) = b_c \operatorname{cth}(K)$  [4] (рис. 2 кривые 2 и 3).

В области III на рис. 1 основное состояние системы не является ферромагнитным, что, как уже было сказано, делает невозможным применение уравнений (13) или (14) в этой области. На границе об-



**Рис. 3.** Намагниченность разбавленного изинговского антиферромагнетика на решетке Бете ( $q = 4$ ) во внешнем поле  $H = -qJ$  как функция концентрации магнитных атомов (или связей). Кривая 1 —  $\eta = \infty$ , кривая 2 —  $\eta = 10/3$  и кривая 3 —  $\eta = 2$  ( $\eta = \exp(-2K)$ )

ластей I и III (линия 2 на рис. 1) при  $T \rightarrow 0$  намагниченность  $M$  стремится к значению

$$\widetilde{M}_0 = \frac{1-y^q}{1+y^q},$$

где  $y$  определяется из уравнения

$$(2-b)y^q + y - b = 0. \quad (16)$$

График функции  $\widetilde{M}_0(b)$  приведен на рис. 3 (кривая 1). При  $q = 2$  и  $b = 1$ , т. е. для одномерной изинговской цепочки без немагнитного разбавления, из (16) получается результат, совпадающий с полученным в работе [9]. При  $T > 0$  намагниченность на линии 2 диаграммы рис. 1 монотонно падает с ростом концентрации  $b$ , так и температуры  $T$  (кривые 2 и 3 на рис. 3), т. е. в этой области не происходит ни концентрационных, ни температурных фазовых переходов.

#### 4. РЕЗУЛЬТАТ РАСЧЕТА

Проведем теперь, основываясь на выражениях (9) и (10), расчет свободной энергии и энтропии разбавленного изинговского магнетика на решетке Бете в псевдохаотическом приближении. Переидем в (9) к переменной  $x$ :

$$\frac{f(x_0, K)}{qkT} = -\frac{1}{2}bK - x_0 + \int_{x_0}^{\infty} (M(x) - 1) dx \quad (17)$$

и, используя  $dx = dw - \beta dz = dw - \beta(\operatorname{arcth}(M))'dM$ , получим

$$\frac{f(x_0, K)}{qkT} = -\frac{1}{2}bK - x_0 + \int_{w_0}^{\infty} (M(w) - 1) dw - \beta \int_{M_0}^1 (M - 1)(\operatorname{arcth}(M))' dM$$

или (отбрасывая после интегрирования индекс «0»)

$$\frac{f(w, K)}{qkT} = -\frac{1}{2}Kb - x + w - \psi(w) - \beta \ln(1 + M) - \left(1 - \frac{b}{2} - \beta\right) \ln 2.$$

Используя равенство  $w - x = \beta \operatorname{arcth}(M)$ , окончательно запишем

$$\frac{f(w, K)}{qkT} = -\frac{1}{2}Kb - \psi(2) - \frac{\beta}{2} \ln(1 - M^2) - \left(1 - \frac{b}{2} - \beta\right) \ln 2. \quad (18)$$

При  $b = 1$  (18) приводится к виду

$$\frac{f(w, K)}{kT} = -\frac{qK}{2} + \frac{1}{2}(q - 2) \ln(2 \operatorname{ch}(2w) + 2\eta) - \frac{1}{2}(q - 1) \ln(1 + 2\eta \operatorname{ch}(2w) + \eta^2),$$

что совпадает (после перехода к соответствующим переменным) с результатом, полученным в [1] для чистого магнетика на решетке Бете. Поскольку при  $T \rightarrow 0$  удельная свободная энергия  $f$  совпадает с удельной энергией основного состояния  $u_0$ , из (18) получим

$$u_0 = \frac{1}{2}bqJ - \lim_{T \rightarrow 0} \left( qkT\psi(w) + \frac{\beta}{2}qkT \ln(1 - M^2) \right). \quad (19)$$

Вычисляя входящий в (19) предел, можно показать, что в областях I и II (рис. 1) и на их границе 1

$$u_0 = -\frac{1}{2}bqJ - |H|,$$

т. е. энергия основного состояния совпадает с минимально возможной энергией на один атом  $u_{min}$ . В работе [10] используется количественная мера фruстрации, равная

$$p_f = \frac{u_0 - u_{min}}{u_{max} - u_{min}}, \quad (20)$$

где  $u_{max} = -u_{min}$ . Таким образом, во всех внутренних точках областей I и II и линии 1 на фазовой диаграмме (рис. 1) мера (20) равна нулю. Однако, как будет показано ниже, энтропия на линии 1 не равна нулю при  $T \rightarrow 0$ , если  $b \neq 1$ . На линиях 2 и 3 диаграммы и (19) получим

$$u_0 = qJ \left(1 - \frac{b}{2}\right),$$

$$u_{min} = qJ \left(1 + \frac{b}{2}\right),$$

что в соответствии с (20) приводит к

$$p_f = \frac{b}{b+2}. \quad (21)$$

Таким образом, в соответствии с критерием (21) на границах 2 и 3 диаграммы рис. 1 система оказывается фрустрированной, причем максимальное значение, равное  $1/3$  (21), принимает для чистого магнетика  $b = 1$ .

Энтропию разбавленного магнетика можно теперь получить, дифференцируя свободную энергию (19) по температуре или непосредственно по формуле (8):

$$s(H_0, T) = - \int_{H_0}^{\infty} \frac{\partial M(H, T)}{\partial T} \partial H.$$

Переходя к переменным  $x$  и  $K$  и учитывая, что

$$\frac{\partial x}{\partial T} = -\frac{x}{T}, \quad \frac{\partial K}{\partial T} = -\frac{K}{T},$$

получим

$$\frac{s(x_0, K)}{qk} = \int_{x_0}^{\infty} \left( X \frac{\partial M}{\partial x} + K \frac{\partial M}{\partial K} \right) dx = (I_1 + I_2)|_{x_0}^{\infty}, \quad (22)$$

$$I_1 = \int X \frac{\partial M}{\partial x} dx, \quad I_2 = \int K \frac{\partial M}{\partial K} dx;$$

$$I_1 = \int W \frac{\partial M}{\partial x} \partial x - \beta \int \operatorname{arcth}(M) \frac{\partial M}{\partial x} \partial x$$

или

$$I_1 = (1 - b)w \operatorname{th}(w) + \frac{bw \operatorname{sh}(2w)}{\operatorname{ch}(2w) + \eta} - \psi(w) - \frac{\beta}{2}((1 + M) \ln(1 + M) + (1 - M) \ln(1 - M)).$$

Для вычисления  $I_2$  перейдем в этом интеграле к переменной  $w$ . Тогда

$$I_2 = K \int \frac{\partial M}{\partial K} dw = -\frac{bK\eta}{\operatorname{ch}(2w) + \eta}.$$

Таким образом, удельная энтропия разбавленного магнетика вычисляется так:

$$\frac{s(x, K)}{qk} = \left(1 - \frac{b}{2} - \beta\right) \ln(2) - I, \quad (23)$$

где

$$I = (1 - b)w \operatorname{th}(w) + \frac{b(w \operatorname{sh}(2w) - K\eta)}{\operatorname{ch}(2w) + \eta} - \psi(w) - \frac{\beta}{2}((1 + M) \ln(1 + M) + (1 - M) \ln(1 - M)).$$

Из (23) следует, что во всех внутренних точках областей I и II на фазовой диаграмме (рис. 1) энтропия при  $T = 0$  обращается в нуль.

При  $H = 0$  ( $x = 0$ ) параметр  $w$  равен нулю, если

$$b < b_K = b_c \frac{(1 + \eta)}{(1 - \eta)}.$$

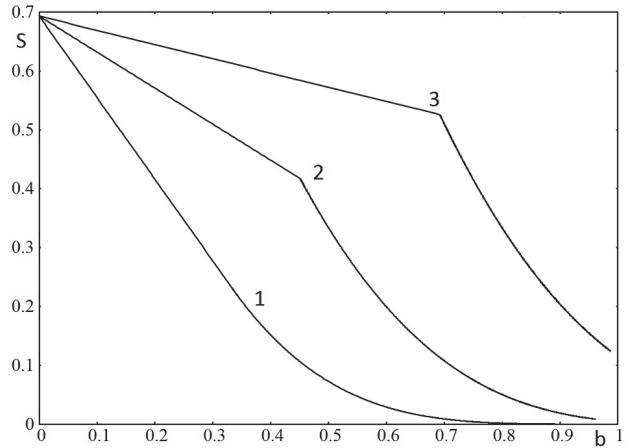
В этом случае энтропия

$$\begin{aligned} \frac{s(0, K)}{k} = & \left(1 - \frac{qb}{2}\right) \ln(2) + \\ & + \frac{qb}{2} \left(\ln(1 + \eta) - \frac{\eta \ln(\eta)}{1 + \eta}\right). \end{aligned}$$

Если же  $b > b_K$ , то энтропия как функция концентрации магнитных атомов может быть вычислена из выражений (13) и (23) следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{s(0, K)}{k} = & \left(1 - \frac{qb(w)}{2}\right) \ln(2) - qI(w), \\ b(w) = & \frac{\operatorname{sh}(b_c w)}{\operatorname{sh}(w)} \frac{\operatorname{ch}(2w) + \eta}{(1 - \eta) \operatorname{ch}((1 + b_c)w)}, \\ M(w) = & \operatorname{th}((1 + b_c)w). \end{aligned}$$

На рис. 4 показаны графики удельной энтропии (в единицах  $k$ ) в зависимости от концентрации магнитных атомов (связей) при различных температурах. Кривая 1 — энтропия основного состояния ( $T = 0$ ). Кривые 2 и 3 — энтропии при значениях температурного параметра  $\eta = \exp(-2J/kT)$  равного соответственно 0.15 и 0.35. При  $b = 0$ , когда система представляет собой парамагнетик в нулевом внешнем поле, энтропия при любой температуре равна  $\ln(2)$ , а при  $b > 0$  монотонно падает с ростом  $b$ . При  $T > 0$  энтропия как функция концентрации  $b$



**Рис. 4.** Энтропия разбавленного изинговского ферромагнетика на решетке Бете ( $q = 4$ ) в нулевом внешнем поле как функция концентрации магнитных атомов (или связей). Кривая 1 —  $\eta = 0$ , кривая 2 —  $\eta = 0.15$  и кривая 3 —  $\eta = 0.35$  ( $\eta = \exp(-2K)$ )

имеет, как видно на рис. 4, разрыв первой производной при  $b = b_K$  (кривые 2 и 3 на рис. 4). При  $T = 0$  такого разрыва нет (кривая 1 на рис. 4).

В соответствии с критерием (20) на линии 1 диаграммы состояния (рис. 1) система не является фрустрированной. Однако авторы работы [11] полагают, что фрустрированным можно считать состояние, в котором энтропия при  $T = 0$  не равна нулю. Если следовать этому критерию, то система на линии 1 (рис. 1) будет фрустрированной при  $b < 1$ .

Рассмотрим энтропию на линиях 2 и 3 диаграммы рис. 1. На линии 2 выполняется условие  $K + x = 0$ . Учитывая это условие, найдем предел (23) при  $T \rightarrow 0$ , который после некоторых преобразований, можно представить в виде

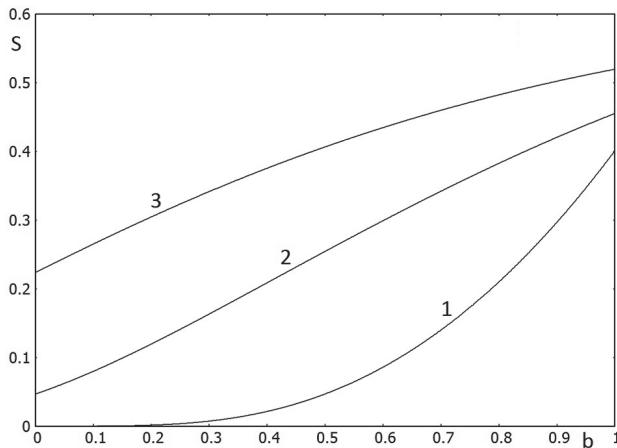
$$\widetilde{S}_0 = \frac{bq}{2} \ln \frac{b}{y} + \left(1 - \frac{2-b}{2}q\right) \ln \frac{2-y}{2-b}, \quad (24)$$

где  $y$  определяется из уравнения (16). График  $\widetilde{S}_0(b)$  приведен на рис. 5 (кривая 1).

При  $b = 1$  и  $q = 2$

$$\widetilde{S}_0 = \ln \frac{\sqrt{5} + 1}{2},$$

что совпадает с расчетом, проведенным в работе [9], авторы которой используют метод трансфер-матрицы для одномерной цепочки спинов. На этом же рисунке приведены графики концентрационной зависимости энтропии при ненулевых значениях температуры (кривые 2 и 3, рис. 5).



**Рис. 5.** Энтропия разбавленного изинговского антиферромагнетика на решетке Бете ( $q = 4$ ) во внешнем поле  $H = -qJ$  как функция концентрации магнитных атомов (или связей). Кривая 1 —  $\eta = \infty$ , кривая 2 —  $\eta = 10/3$  и кривая 3 —  $\eta = 2$  ( $\eta = \exp(-2K)$ )

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, учет немагнитного разбавления в псевдохаотическом приближении [4] позволяет рассчитать не только концентрационную зависимость намагниченности (рис. 2 и 3), но и энтропию (рис. 4 и 5) и свободную энергию разбавленного магнетика на произвольной решетке Бете. Анализ концентрационной зависимости энтропии показывает, что при  $J > 0$  и  $H = 0$  (линия 1 на диаграмме рис. 1) и нулевой температуре энтропия не равна нулю, убывает с ростом  $b$  и не имеет разрыва первой производной по  $b$  (кривая 1 на рис. 4) во всем интервале концентраций. Но при ненулевой температуре имеется разрыв первой производной при  $b = b_K$ , т. е. при значении  $b$ , соответствующем возникновению спонтанной намагниченности.

Наш расчет показывает (рис. 4) что даже при  $T = 0$  (кривая 1) энтропия линии 1 не обращается в нуль, что по мнению некоторых авторов [9, 11] может считаться критерием фрустрированности системы. Впрочем следует отметить, что отличие энтропии основного состояния от нуля в нулевом внешнем поле имеет в данном случае «парамагнитную» природу — при немагнитном разбавлении в системе

возникают изолированные «островки» спинов, которые могут менять свою спонтанную намагниченность без изменения энергии. Согласно критерию фрустрированности (20) [10], который на линии 1 равен нулю при любом  $b$ , состояние системы в этой области нельзя считать фрустрированным.

Если  $J < 0$  (антиферромагнитное обменное взаимодействие), но внешнее поле  $H = -qJ$  (линия 2 на диаграмме рис. 1), система оказывается фрустрированной и в смысле неравенства нулю остаточной энтропии (рис. 5, кривая 1) и в смысле критерия (20). В этой области нет ни концентрационных, ни температурных фазовых переходов.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва (1985).
2. Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский, УФН **173**, 175 (2003).
3. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Азнаурова, ФТТ **50**, 703 (2008).
4. С. В. Сёмкин, В. П. Смагин, *Приближенные методы в теории чистых и разбавленных магнетиков*, ВГУЭС, Владивосток (2019).
5. С. В. Сёмкин, В. П. Смагин, Е. Г. Гусев, ТМФ **201**, 280 (2019).
6. С. В. Сёмкин, В. П. Смагин, ФТТ **57**, 926 (2015).
7. С. В. Сёмкин, В. П. Смагин, ЖЭТФ **148**, 729 (2015).
8. И. А. Квасников, *Термодинамика и статистическая физика: Теория равновесных систем*, Едиториал УРСС, Москва (2002).
9. Е. С. Цуварев, Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин, ЖЭТФ **158**, 504 (2020).
10. Y. Shevchenko, A. Makarov, and K. Nefedev, Phys. Lett. A **381**, 428 (2017).
11. А. В. Зарубин, Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин и др., ЖЭТФ **155**, 914 (2019).