

ФРУСТРАЦИИ В РАЗБАВЛЕННОМ ИЗИНГОВСКОМ МАГНЕТИКЕ НА РЕШЕТКЕ БЕТЕ

С. В. Сёмкин, В. П. Смагин, В. С. 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 расположенными 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 перколяционного порога.

DOI: 10.31857/S0044451022060000

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 σ_i и σ_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 (доли) 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]:

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

Простой и часто встречающейся моделью магнитной системы является модель Изинга [1]. В этой модели магнитный атом представлен локализованной в месте расположения этого атома (в узле решетки) переменной σ , 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 Ω , 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),

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

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

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

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

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

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

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 ПСЕВДОХАОТИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

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

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

где μ определяется из уравнения

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

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 соседними узлами будет не разорванной.

В (11) и (12) введем обозначения

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

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

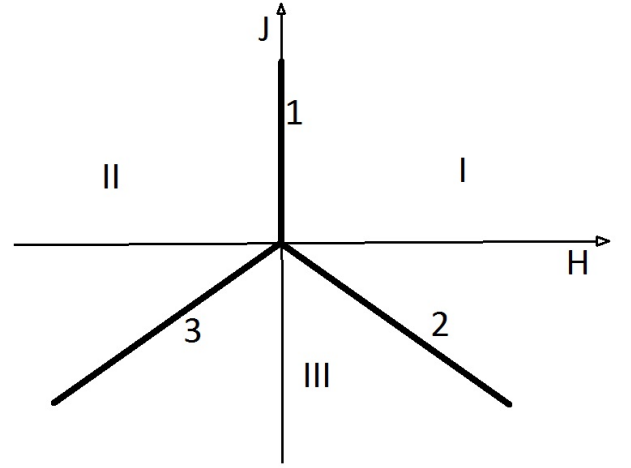


Рис. 1. Фазовый переход для кучи песка. Ее критическое состояние может достигаться как искусственно, так и в результате самоорганизации

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

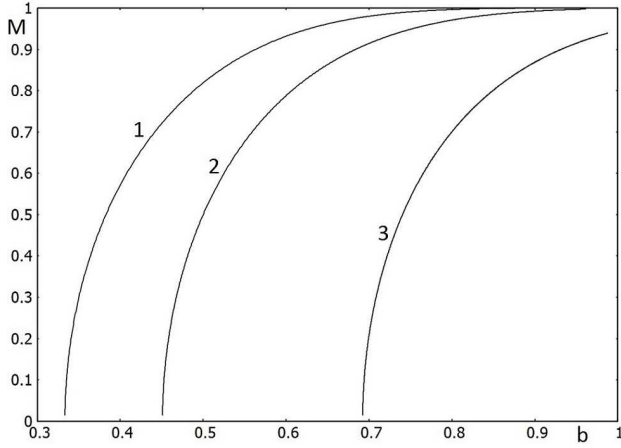


Рис. 2. Спонтанная намагниченность разбавленного изинговского ферромагнетика на решетке Бете ($q = 4$) как функция концентрации магнитных атомов (или связей). Кривая 1 — $\eta = 0$, кривая 2 — $\eta = 0.15$ и кривая 3 — $\eta = 0.35$ ($\eta = \exp(-2K)$)

диаграмму основного состояния ($T = 0$) разбавленного изинговского магнетика на решетке Бете с координационным числом q (рис. 1).

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-

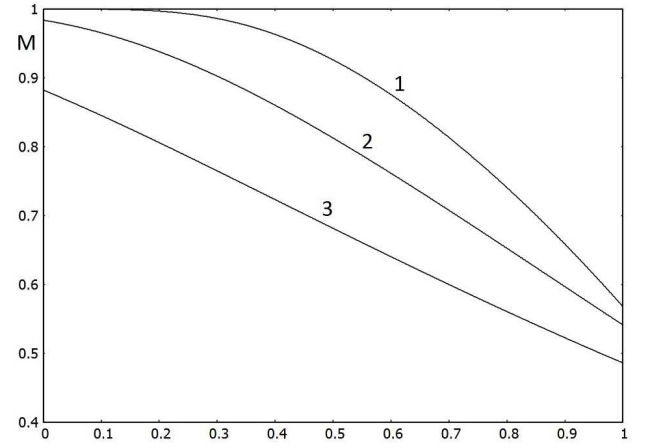


Рис. 3. Намагниченность разбавленного изинговского антиферромагнетика на решетке Бете ($q = 4$) во внешнем поле $H = -qJ$ как функция концентрации магнитных атомов (или связей). Кривая 1 — $\eta = \infty$, кривая 2 — $\eta = 10/3$ и кривая 3 — $\eta = 2$ ($\eta = \exp(-2K)$)

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. Перейдем 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

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

или (отбрасывая после интегрирования индекс «0»)

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

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

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

При $b = 1$ (18) приводится к виду

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

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

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

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 фрустрации, 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

$$\begin{aligned} u_0 = & qJ \left(1 - \frac{b}{2}\right), \\ u_{min} = & qJ \left(1 + \frac{b}{2}\right), \end{aligned}$$

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 называется 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):

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

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

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

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

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

или

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

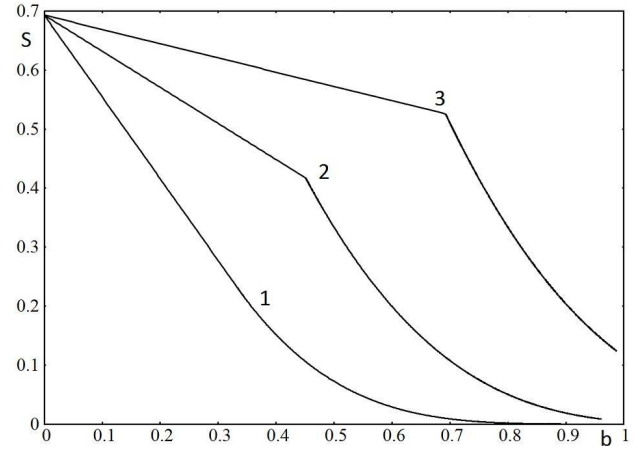


Рис. 4. Энтропия разбавленного изинговского ферромагнетика на решетке Бете ($q = 4$) в нулевом внешнем поле как функция концентрации магнитных атомов (или связей). Кривая 1 — $\eta = 0$, кривая 2 — $\eta = 0.15$ и кривая 3 — $\eta = 0.35$ ($\eta = \exp(-2K)$)

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

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

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

При $b = 1$ и $q = 2$

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

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

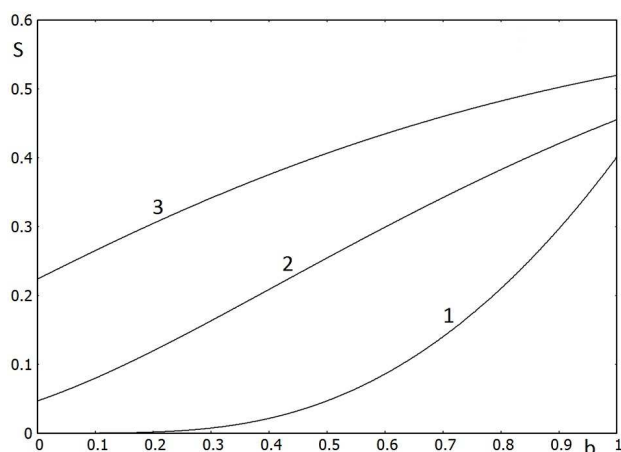


Рис. 5. Энтропия разбавленного изинговского антиферромагнетика на решетке Бете ($q = 4$) во внешнем поле $H = -qJ$ как функция концентрации магнитных атомов (или связей). Кривая 1 — $\eta = \infty$, кривая 2 — $\eta = 10/3$ и кривая 3 — $\eta = 2$ ($\eta = \exp(-2K)$)

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).