

ОБОБЩЕННАЯ МОДЕЛЬ ИЗИНГА В ОТСУТСТВИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ

Е. С. Цуварев^{a*}, *Ф. А. Кассан-Оглы*^{b**}, *А. И. Прошкин*^b

^a *Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина
620000, Екатеринбург, Россия*

^b *Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук
620108, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 11 марта 2020 г.,
после переработки 18 марта 2020 г.
Принята к публикации 18 марта 2020 г.

Исследована модель Изинга на одномерной моноатомной эквидистантной решетке с учетом разных обменных взаимодействий между атомными спинами на узлах ближайших соседей и разных взаимодействий между атомными спинами на узлах вторых соседей. Выведена обобщенная трансфер-матрица Крамерса – Ваннье с переносом на две трансляции решетки. Построены фазовые диаграммы, представляющие все возможные магнитные типы упорядочения в основном состоянии. Найдено множество тройных точек пересечения фаз и линий парного сосуществования фаз в строгом соответствии с правилом фаз Гиббса, а также обнаружено свойство, аналогичное известным явлениям переохлаждения или перегрева. Показано, что в тройных точках фазы не индивидуализированы, а существенно фрустрированы, что соответствует явлению критической опалесценции. Выведены точные аналитические выражения для свободной энергии Гиббса, а также для таких термодинамических характеристик системы, как внутренняя энергия, теплоемкость и энтропия, включая и нуль-температурную энтропию. Проанализированы разнообразные частные случаи и осуществлено сравнение со всеми известными результатами, в том числе и на двумерной решетке.

DOI: 10.31857/S0044451020090096

1. ВВЕДЕНИЕ

Первой и одной из самых значимых вех в теории магнетизма считается опубликование Изингом своей работы [1] в 1925 году, в которой было приведено точное аналитическое решение задачи о магнитных моментах атомов (спинов), расположенных в узлах одномерной решетки, связанных короткодействующим обменным взаимодействием и внешним магнитным полем. Фактически в этой работе получена первая теоретическая кривая намагниченности как для ферромагнетика, так и антиферромагнетика. И хотя главный желаемый результат — температурный фазовый переход из неупорядоченной (парамагнитной) фазы в упорядоченное магнитное состояние — не был получен, эта работа и модель, названная впо-

следствии моделью Изинга, привлекла пристальное и неиссякаемое внимание исследователей. В настоящее время модели Изинга, давно вышедшей за рамки магнетизма, посвящены тысячи и тысячи статей, обзоров, монографий, трудов конференций, и число их непрерывно нарастает [2–4].

Вторым знаменательным этапом в теории магнетизма было изобретение Крамерсом и Ваннье [5, 6] весьма эффективного метода так называемой трансфер-матрицы. Суть этого метода заключается в том, что расчет статистической суммы гигантского числа (2^N) магнитных конфигураций сводится к нахождению одного главного (максимального) собственного значения довольно простой матрицы. В результате свободная энергия Гиббса и все термодинамические и магнитные характеристики системы выражаются через это собственное значение простым дифференцированием по температуре и магнитному полю.

Именно это изобретение позволило впоследствии Онзагеру [7] получить выдающийся результат — фа-

* E-mail: eguny@mail.ru

** E-mail: felix.kassan-ogly@imp.uran.ru

зовый переход в модели Изинга на двумерной квадратной решетке, что заложило основы бурного развития исследований физики критических явлений. К тому же, решение Онзагера привело к появлению точных решений на других двумерных решетках: на треугольной (Ваннье [8]), на гексагональной (Гутапфель [9]) и на решетке кагоме (Кано и Найя [10]).

Однако, несмотря на сложность всех ранее рассмотренных обобщений, стоит отметить, что до сих пор трансфер-матрица Крамерса – Ваннье представлялась при переносе только на одну трансляцию решетки.

В данной работе была поставлена цель обобщить метод трансфер-матрицы Крамерса – Ваннье, который бы задавал перенос на две трансляции решетки, а также исследовать магнитные и термодинамические свойства этой модели.

2. ТРАНСФЕР-МАТРИЦА КРАМЕРСА – ВАННЬЕ

Первое, что сделали Крамерс и Ваннье, это заново получили результат Изинга своим методом.

Рассмотрим классическую модель Изинга во внешнем магнитном поле на одномерной цепочке, состоящей из N узлов, в которых расположены спины. Гамильтониан \mathcal{H} такой системы описывается выражением

$$\mathcal{H}(s) = -J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} - H \sum_{i=1}^N s_i, \quad (1)$$

где индекс i нумерует узлы решетки; J – параметр обменного взаимодействия между ближайшими соседними спинами; H – величина внешнего магнитного поля; s_i – спиновая переменная, принимающая в классическом варианте значения ± 1 .

Используя гамильтониан (1), получаем выражение для статистической суммы в виде

$$Z = \sum_{\{s_i = \pm 1\}} \exp \left(\frac{J}{T} \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} + \frac{H}{T} \sum_{i=1}^N s_i \right). \quad (2)$$

Экспонента в формуле (2) может быть представлена в виде произведения сомножителей, каждый из которых зависит только от одной пары соседних спинов:

$$V_{i,i+1} = \exp \left(\frac{J}{T} s_i s_{i+1} + \frac{H}{2T} (s_i + s_{i+1}) \right). \quad (3)$$

При наложении так называемых граничных условий Борна – Кармана вводится еще связь последнего спина с первым:

$$V_{N,1} = \exp \left(\frac{J}{T} s_N s_1 + \frac{H}{2T} (s_N + s_1) \right). \quad (4)$$

Другими словами, осуществляется замыкание цепочки в кольцо, и в результате получаем выражение для статистической суммы в виде

$$Z = \text{Sp}(V^N), \quad (5)$$

где выражение (3) представлено в виде матрицы V , фактически не зависящей от индексов:

$$V = \begin{pmatrix} e^{\frac{J+H}{T}} & e^{-\frac{J}{T}} \\ e^{-\frac{J}{T}} & e^{\frac{J-H}{T}} \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Матрица V называется трансфер-матрицей Крамерса – Ваннье, которая может быть определена для модели Изинга также и с учетом более сложных взаимодействий.

Следует отметить, что трансфер-матрица (6) не зависит от индексов и, другими словами, одинакова при переносе на одну трансляцию решетки.

След матрицы является одним из инвариантов ее ортогонального преобразования, и существует такое ортогональное преобразование D , которое приводит ее к диагональной форме

$$\tilde{V} = D^{-1} V D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где λ_1 и λ_2 — собственные значения матрицы V , которые можно вычислить из секулярного уравнения, не прибегая к нахождению явного выражения для диагонализующей матрицы D :

$$\lambda_{1,2} = e^{J/T} \left(\text{ch} \left(\frac{H}{T} \right) \pm \sqrt{\text{sh}^2 \left(\frac{H}{T} \right) + e^{-4J/T}} \right). \quad (8)$$

Таким образом, λ_1 — это максимальное собственное значение трансфер-матрицы (которое всегда существует для матрицы с вещественными матричными элементами согласно теореме Фробениуса – Перрона [11], будучи также вещественным), и в результате получаем статистическую сумму в виде

$$Z = \lambda_1^N + \lambda_2^N. \quad (9)$$

Свободная энергия Гиббса равна

$$\begin{aligned} f(T, H) &= -T \ln Z = -T \ln (\lambda_1^N + \lambda_2^N) = \\ &= -T \left(\ln \lambda_1^N + \ln \left(1 + \frac{\lambda_2^N}{\lambda_1^N} \right) \right). \end{aligned} \quad (10)$$

В термодинамическом пределе, т. е. при $N \rightarrow \infty$, второе слагаемое в (10) исчезает и свободная энергия Гиббса зависит лишь от максимального собственного значения трансфер-матрицы:

$$f(T, H) = -TN \ln \lambda_1, \quad (11)$$

а свободная энергия Гиббса, приходящаяся на один узел (один спин), имеет вид

$$F(T, H) = f(T, H)/N = -T \ln \lambda_1. \quad (12)$$

Как следствие, все термодинамические и магнитные величины рассматриваемой модели выражаются только через максимальное собственное значение трансфер-матрицы λ_1 по обычным формулам термодинамики, например, энтропия S имеет вид

$$S(T, H) = \ln \lambda_1 + \frac{T}{\lambda_1} \frac{\partial \lambda_1}{\partial T}. \quad (13)$$

В частности, интересующая нас намагниченность равна

$$M(T, H) = -\frac{\partial F}{\partial H} = \frac{T}{\lambda_1} \frac{\partial \lambda_1}{\partial H}. \quad (14)$$

Используя явное выражение (8) для λ_1 и формулу (14), получаем известный результат Изинга:

$$M(T, H) = \frac{\text{sh}(H/T)}{\sqrt{\text{sh}^2(H/T) + e^{-4J/T}}}. \quad (15)$$

В дальнейшем модель Изинга на одномерной цепочке подвергалась разнообразным обобщениям. Учитывались обменные взаимодействия между вторыми и третьими соседями, одноионная анизотропия и т. п. Кроме того, модель Изинга рассматривалась в квантовом варианте для целых и полуцелых произвольных значений спина. Необходимо отметить, что во всех этих обобщениях, сколь бы сложными бы они ни были, трансфер-матрица сохранялась при переносе на одну трансляцию решетки.

В настоящей работе рассматривается обобщение совершенно особого рода, а именно, такое, при

котором в гамильтониане учитываются такие обменные взаимодействия, при которых трансфер-матрица Крамерса – Ваннье не сохраняется при переносе на одну трансляцию решетки, а инвариантна только относительно переноса на две трансляции решетки.

3. ОБОБЩЕННАЯ ТРАНСФЕР-МАТРИЦА КРАМЕРСА – ВАННЬЕ

Рассмотрим гамильтониан с обменными взаимодействиями между ближайшими и вторыми соседями в отсутствие магнитного поля, при этом взаимодействия как первых, так и вторых соседей могут быть не одинаковыми (как по величине, так и по знаку), но альтернативно чередуются через один. Гамильтониан состоит из двух пар сумм, пробегающих отдельно по четным и нечетным узлам решетки. В данном исследовании каждая сумма состоит теперь из $N/2$ слагаемых:

$$\mathcal{H}(s) = -J_1 \sum_{i=1,3,5,\dots}^{N-1} s_i s_{i+1} - J'_1 \sum_{i=1,3,5,\dots}^{N-1} s_i s_{i+2} - J_2 \sum_{i=2,4,6,\dots}^N s_{i+1} s_{i+2} - J'_2 \sum_{i=2,4,6,\dots}^N s_{i+1} s_{i+3}, \quad (16)$$

где J_1, J_2 – параметры обменного взаимодействия между ближайшими соседями; J'_1, J'_2 – параметры обменного взаимодействия между вторыми соседями; $s_i = \pm 1$.

Рисунок 1 иллюстрирует одномерную решетку спинов, соответствующую предлагаемой обобщенной модели Изинга, описываемой гамильтонианом (16).

Следуя алгоритму вывода трансфер-матрицы Крамерса – Ваннье, представленному выше, получаем выражение для трансфер-матрицы рассматриваемой обобщенной модели (16):

$$W = \begin{pmatrix} e^{\frac{J_1+J'_1+J_2+J'_2}{T}} & e^{\frac{J_1+J'_1+J_2-J'_2}{T}} & e^{\frac{J_1-J'_1-J_2+J'_2}{T}} & e^{\frac{J_1-J'_1-J_2-J'_2}{T}} \\ e^{\frac{-J_1+J'_1-J_2-J'_2}{T}} & e^{\frac{-J_1+J'_1-J_2+J'_2}{T}} & e^{\frac{-J_1-J'_1+J_2-J'_2}{T}} & e^{\frac{-J_1-J'_1+J_2+J'_2}{T}} \\ e^{\frac{-J_1-J'_1+J_2+J'_2}{T}} & e^{\frac{-J_1-J'_1+J_2-J'_2}{T}} & e^{\frac{-J_1+J'_1-J_2+J'_2}{T}} & e^{\frac{-J_1+J'_1-J_2-J'_2}{T}} \\ e^{\frac{J_1-J'_1-J_2-J'_2}{T}} & e^{\frac{J_1-J'_1-J_2+J'_2}{T}} & e^{\frac{J_1+J'_1+J_2-J'_2}{T}} & e^{\frac{J_1+J'_1+J_2+J'_2}{T}} \end{pmatrix}, \quad (17)$$

Собственные значения матрицы W вычисляются из секулярного уравнения (где E — это единичная квадратная матрица размером 4×4):

$$\det(W - \lambda E) = 0. \tag{18}$$

или

$$\lambda^4 + a\lambda^3 + b\lambda^2 + c\lambda + d = 0, \tag{19}$$

$$a = -4 \exp\left(\frac{J'_1 + J'_2}{T}\right) \operatorname{ch}\left(\frac{J_1 + J_2}{T}\right),$$

$$b = 4 \exp\left(\frac{2J'_1 + 2J'_2}{T}\right) - 4 \operatorname{ch}\left(\frac{2J'_1 - 2J'_2}{T}\right) + 2 \exp\left(\frac{-2J_1}{T}\right) \operatorname{sh}\left(\frac{2J'_1 + 2J'_2 - 2J_2}{T}\right) +$$

$$+ 2 \exp\left(\frac{2J_1}{T}\right) \operatorname{sh}\left(\frac{2J'_1 + 2J'_2 + 2J_2}{T}\right),$$

$$c = -16 \exp\left(\frac{J'_1 + J'_2}{T}\right) \operatorname{ch}\left(\frac{J_1 + J_2}{T}\right) \times \operatorname{sh}\left(\frac{2J'_1}{T}\right) \operatorname{sh}\left(\frac{2J'_2}{T}\right),$$

$$d = 16 \operatorname{sh}^2\left(\frac{2J'_1}{T}\right) \operatorname{sh}^2\left(\frac{2J'_2}{T}\right).$$

Решая уравнение четвертой степени [12], определяем наибольшее собственное значение в виде

$$\lambda_{max} = \exp\left(\frac{J'_1 + J'_2}{T}\right) \operatorname{ch}\left(\frac{J_1 + J_2}{T}\right) + \exp\left(\frac{-J'_1 - J'_2}{T}\right) \operatorname{ch}\left(\frac{J_1 - J_2}{T}\right) + \sqrt{2 \operatorname{ch}\left(\frac{2J'_1 - 2J'_2}{T}\right) + 2 \operatorname{ch}\left(\frac{J_1 + J_2}{T}\right) \operatorname{ch}\left(\frac{J_1 - J_2}{T}\right) + \xi \operatorname{sh}^2\left(\frac{J_1 + J_2}{T}\right) + \frac{1}{\xi} \operatorname{sh}^2\left(\frac{J_1 - J_2}{T}\right)}, \tag{20}$$

где $\xi = \exp\left(\frac{2J'_1 + 2J'_2}{T}\right)$.

В рассматриваемом методе трансфер-матрицы Крамера–Ваннье все термодинамические и магнитные величины исследуемой модели выражаются только через ее максимальное собственное значение λ_{max} . Для этих целей, в том числе и для изучения фрустрационных свойств модели, в данной работе нам потребуются явные выражения, зависящие от температуры и четырех обменных параметров, для энтропии S , теплоемкости C , внутренней энергии E и термодинамического параметра порядка η , впервые введенного в статье [13]. Прежде всего, принимая во внимание то, что в гамильтониане (16) каждая сумма пробегает только по половине узлов, а не по всем узлам решетки, статистическая сумма в термодинамическом пределе принимает вид

$$Z_N = \lambda_{max}^{N/2}. \tag{21}$$

А свободная энергия, приходящаяся на один узел, равна

$$F(T) = -\frac{T \ln \lambda_{max}}{2}. \tag{22}$$

Энтропия имеет уже другой вид

$$S(T) = \frac{\ln \lambda_{max}}{2} + \frac{T}{2\lambda_{max}} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial T}. \tag{23}$$

Соответственно, теплоемкость и внутренняя энергия выражаются через максимальное собствен-

ное значение трансфер-матрицы Крамера–Ваннье λ_{max} как

$$C(T) = \frac{T}{\lambda_{max}} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial T} + \frac{T^2}{2} \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{\lambda_{max}} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial T}, \tag{24}$$

$$E(T) = \frac{T^2}{2} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial T}. \tag{25}$$

Термодинамический параметр порядка по физическому смыслу представляет собой степень упорядоченности системы и определяется следующим выражением:

$$\eta(T) = 1 - \frac{S(T)}{\ln 2}. \tag{26}$$

4. ОБОБЩЕННАЯ МОДЕЛЬ ИЗИНГА В ОТСУТСТВИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ

Начнем исследование общих свойств обобщенной модели Изинга на одномерной решетке с построения фазовых диаграмм, представляющих все возможные магнитные типы упорядочения в основном состоянии. Для этой цели воспользуемся выражениями (19)–(21) для максимального собственного значения трансфер-матрицы и выражением (25) для определения внутренней энергии при $T \rightarrow 0$ как функции всех четырех обменных параметров модели J_1, J'_1, J_2, J'_2 .

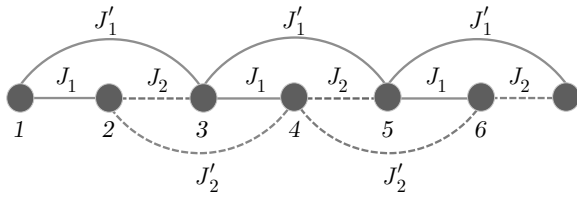


Рис. 1. Одномерная цепочка с учетом различных обменных взаимодействий между ближайшими (J_1, J_2) и вторыми соседями (J'_1, J'_2)

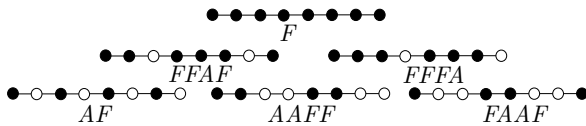


Рис. 2. Возможные типы магнитных структур, реализуемые в основном состоянии обобщенной модели Изинга в отсутствие магнитного поля. Темные кружки соответствуют спину, направленному вверх (F), светлые — вниз (A)

Детальный анализ большого множества всевозможных вариантов числовых величин и знаков четырех параметров обменного взаимодействия J_1, J'_1, J_2, J'_2 приводит к выводу, что в основном состоянии реализоваться могут только шесть типов упорядочения (магнитных структур) (рис. 2). Ферромагнитная структура, соответствующая сохранению периода трансляций решетки, внутренняя энергия которой в основном состоянии равна

$$E_F = -(J_1 + J_2 + J'_1 + J'_2)/2.$$

Структура с удвоением периода трансляций решетки с внутренней энергией

$$E_{AF} = (J_1 + J_2 - J'_1 - J'_2)/2.$$

А также четыре структуры $AAFF, FAAF, FFAF$ и $FFFA$ с учетверением периода трансляций решетки, внутренние энергии которых равны соответственно

$$E_{AAFF} = (J'_1 + J'_2 - J_1 + J_2)/2,$$

$$E_{FAAF} = (J'_1 + J'_2 + J_1 - J_2)/2,$$

$$E_{FFAF} = (J'_1 - J'_2)/2, \quad E_{FFFA} = -(J'_1 - J'_2)/2.$$

Внутренние энергии всех остальных типов упорядочения при любых величинах и знаках параметров модели J_1, J'_1, J_2, J'_2 оказываются выше внутренней энергии любой из найденных структур: $E_F, E_{AF}, E_{AAFF}, E_{FAAF}, E_{FFAF}$ или E_{FFFA} . Например, магнитная структура с утроением периода трансляций решетки с внутренней энергией в основном состоянии, равной

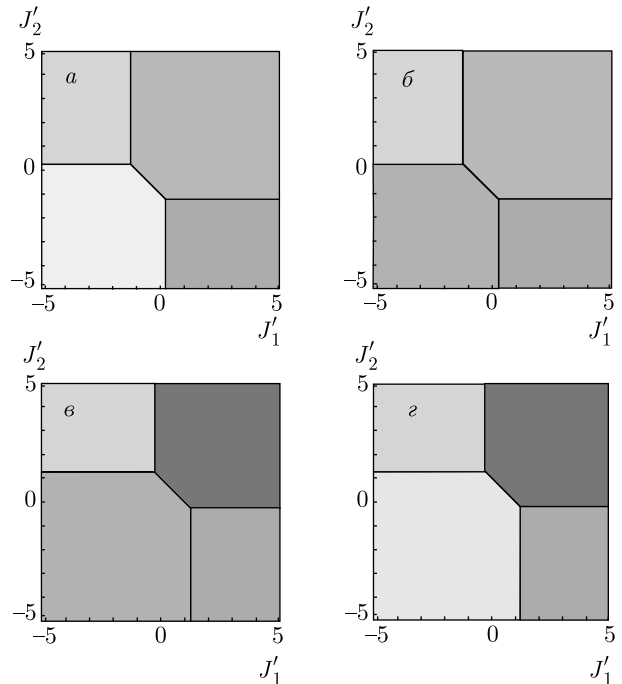


Рис. 3. (В цвете онлайн) Фазовые диаграммы основных состояний системы обобщенной модели Изинга в отсутствие магнитного поля в координатах (J'_1, J'_2) при различных обменных взаимодействиях J_1, J_2 : а — $J_1 = -1.5, J_2 = -1$, б — $J_1 = -1, J_2 = -1.5$, в — $J_1 = 1.5, J_2 = -1$, г — $J_1 = -1, J_2 = 1.5$. Каждая закрашенная область соответствует конкретной фазе

$$E_{FFFA} = (J_1 + J_2 + J'_1 + J'_2)/6.$$

Поскольку рассматриваемая обобщенная модель Изинга зависит от четырех независимых параметров J_1, J'_1, J_2, J'_2 , одновременное изображение полной фазовой диаграммы невозможно из-за того, что для этого требуется четырехмерное пространство. Поэтому на рис. 3 представлены некоторые частные фазовые диаграммы, соответствующие избранному сечению этого четырехмерного пространства. Тем не менее, численное исследование этой задачи оказалось возможным, и как видно на рис. 3, на фазовых диаграммах присутствуют точки схождения фаз, а также линии пересечения фаз.

Установлено, что фазовые диаграммы находятся в строгом соответствии с правилом фаз Гиббса, которое гласит, что число фаз (A), находящихся в одной точке, не может быть больше числа компонентов (K), увеличенного на количество внешних независимых параметров (N), влияющих на равновесие. Правило фаз записывается через количество степеней свободы (F) равновесной термодинамической системы, которые необходимы для однозначного описания системы:

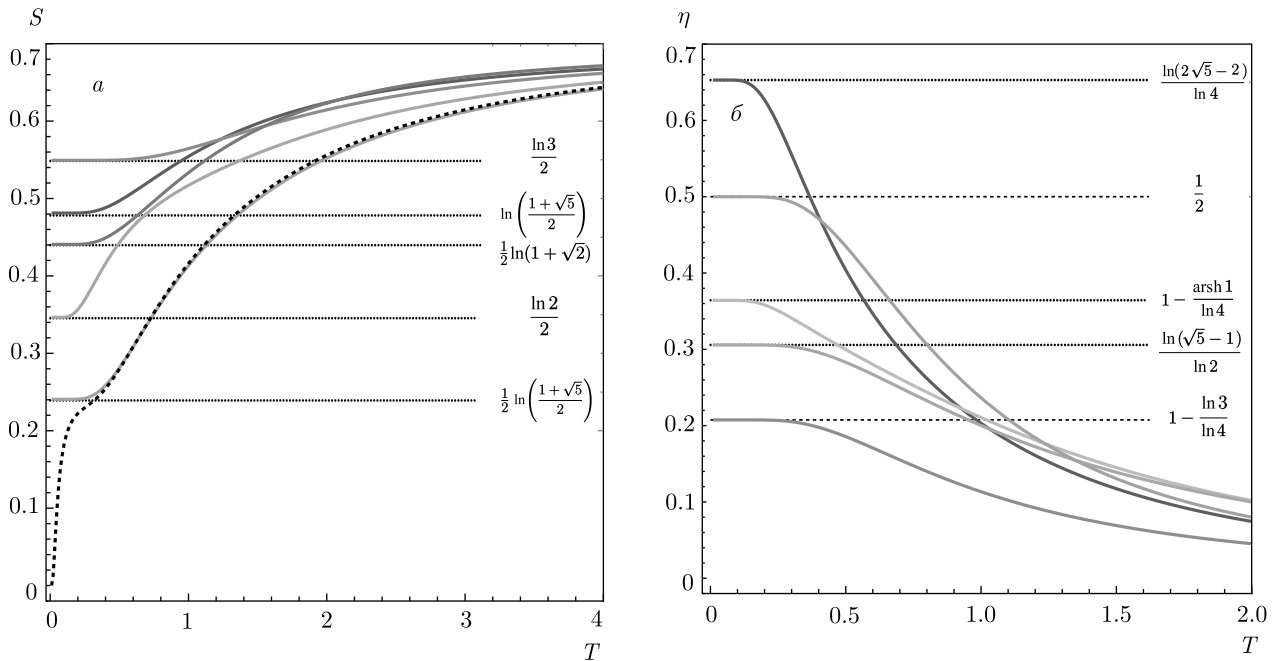


Рис. 4. а) Температурные зависимости энтропий обобщенной модели Изинга в отсутствие магнитного поля, пунктирной линией показано поведение энтропии вблизи точки фрустрации; б) термодинамический параметр порядка в различных точках фрустраций

$$F = K - A + N. \tag{27}$$

Рассматривая фазовые диаграммы (рис. 3), можно убедиться, что выражение (27) действительно выполняется. По диаграммам видно, как каждая фаза в рассматриваемых сечениях представлена частью плоскости, к тому же можно показать, что при некоторых значениях обменных взаимодействий две из представленных частей совпадают.

Ферромагнитная фаза F обозначена синим цветом, фаза удвоения периода трансляции (антиферромагнитная) AF — красная, фазы учетверения периода трансляции решетки $AAFF$, $FAAF$, $FFAF$ и $FFFA$ — соответственно зеленая, желтая, голубая и фиолетовая.

Представленные на рис. 3 диаграммы, хотя и являются частными, однако, они совместно с правилом фаз дают полное представление об обобщенной модели в отсутствие магнитного поля. Для обобщенной модели Изинга максимальное количество фаз, сходящихся в одной точке, равно шести.

Тщательно проанализировав всевозможные варианты схождения фаз, можно заключить, что нуль-температурная энтропия в некоторых из них принимает ненулевое значение, однако, в остальных равняется нулю. Данный факт свидетельствует о наличии фрустраций [14, 15]. Если в какой-то точке

фазы являются не индивидуализированными, тогда можно указать бесконечно много других различных конфигураций с такой же энергией, в том числе и без определенной трансляционной инвариантности, и чем больше количество сходящихся фаз наблюдается в такой точке, тем выше значение нуль-температурной энтропии, отличной от нуля, но когда нуль-температурная энтропия равна нулю, то фрустрации не наблюдаются и можно утверждать, что в данной точке сосуществуют только сходящиеся фазы, т. е. фазы индивидуализированы.

Температурные зависимости, изображенные на рис. 4, демонстрируют наличие ненулевых нуль-температурных энтропий в обобщенной модели Изинга в отсутствие магнитного поля, а также полученные точные аналитические выражения для каждой из них. При увеличении температуры до бесконечности все температурные зависимости стремятся к $\ln 2$, что соответствует тому, что при $T \rightarrow \infty$ все 2^N конфигурации приобретают одинаковый статистический вес, равный $1/2^N$. На примере одной зависимости показано, что если изменить величину (либо знак) любого параметра обменного взаимодействия, нуль-температурная энтропия станет равна нулю, тем самым явление фрустраций исчезает.

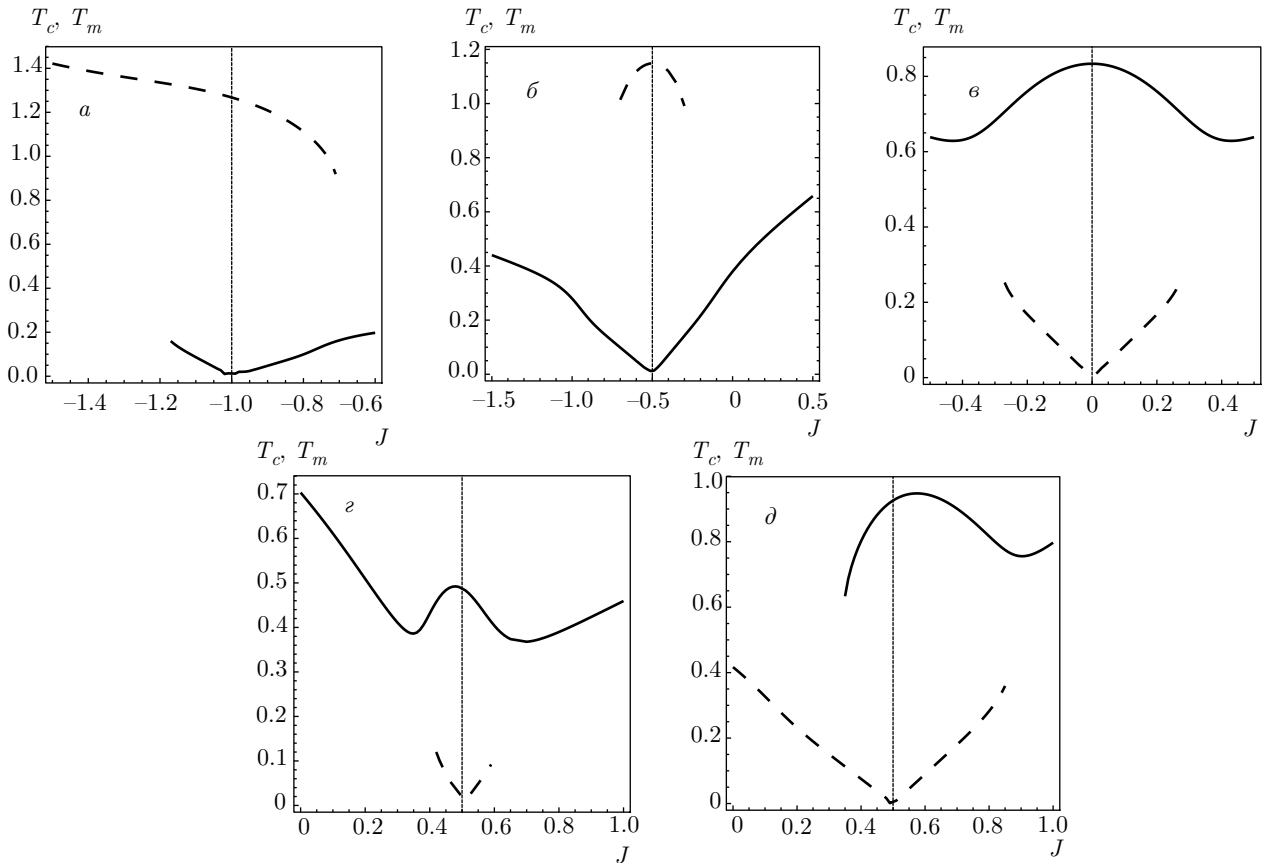


Рис. 5. Положения пиков теплоемкостей в непосредственной близости к точке фрустрации

Определить степень упорядоченности системы можно, используя термодинамический параметр порядка, приведенный на рис. 4. При $T \rightarrow 0$ термодинамический параметр порядка выходит на некоторые постоянные значения, для которых также получены точные аналитические выражения. Каждое такое выражение связано с нуль-температурной энтропией по формуле (26).

5. ТЕРМОДИНАМИКА ОБОБЩЕННОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

Точки и линии фрустраций различаются только значениями нуль-температурных энтропий (или термодинамическим параметром порядка). Вблизи этих точек и линий фрустраций поведение системы обладает существенными особенностями. Во-первых, при сколь угодно малом отклонении от них нуль-температурная энтропия становится равной нулю, а нуль-температурный параметр порядка становится равным единице, что соответствует полному упорядочению. Во-вторых, теплоемкость рас-

щепляется на два пика с разным характером поведения около фрустраций. Если в точке фрустрации существует только один куполообразный пик, то в непосредственной близости от фрустрации возникает дополнительный узкий пик (рис. 6). При дальнейшем отклонении от точки или линии фрустрации дополнительный пик растет, а исходный уменьшается и исчезает.

Чтобы пронаблюдать за характером изменения теплоемкостей вблизи точек (линий) фрустраций, построены графики (рис. 5), демонстрирующие положения пиков теплоемкостей в непосредственной близости к точкам (линиям) фрустраций.

Установлено, что пики теплоемкостей двух фаз «выходят» за границу фрустрации, однако при некотором значении J один из пиков исчезает и в дальнейшем остается одна из фаз упорядочения в основном состоянии.

Другими словами, в нашем случае, как и в термодинамике, наблюдается явление, когда одна фаза существует в области другой фазы и, наоборот, вторая фаза существует в области первой фазы. Таким

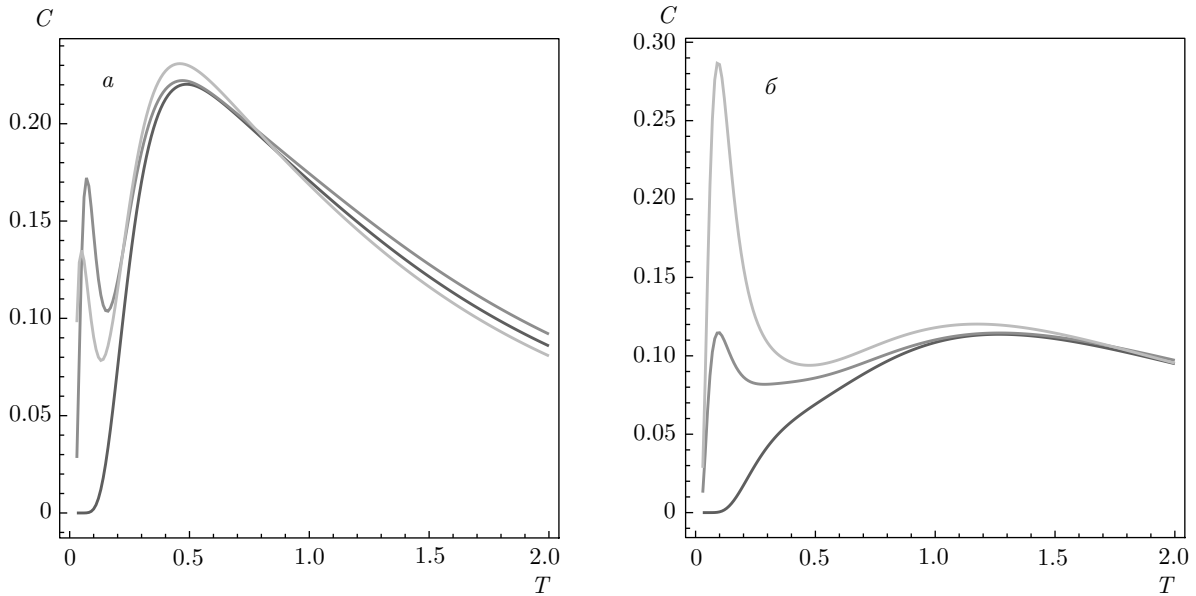


Рис. 6. (В цвете онлайн) Температурные зависимости теплоемкостей в точке фрустрации, а также в непосредственной близости фрустрации: *a* — синяя кривая (в точке фрустрации) при $J_1 = 0.5, J_2 = -0.5, J'_1 = 0.5, J'_2 = -0.5$, красная кривая при $J_1 = 0.6 \dots$, бирюзовая кривая при $J_1 = 0.4 \dots$; *б* — синяя кривая (в точке фрустрации) при $J_1 = -0.5, J_2 = -1, J'_1 = 0.25, J'_2 = -0.75$, красная кривая при $\dots J'_2 = -0.85$, бирюзовая кривая при $\dots J'_2 = -0.65$

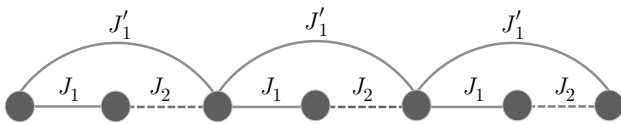


Рис. 7. Однократно декорированная решетка

образом, рассмотренное явление аналогично явлениям перегрева и переохлаждения.

Более того, как уже отмечалось выше, в местах схождения сразу нескольких фаз фазы не индивидуализированы, а существенно фрустрированы, поскольку помимо сходящихся фаз в этих точках существует бесконечное множество конфигураций без каких-либо трансляционных инвариантностей, о чем свидетельствует ненулевая нуль-температурная энтропия (отличный от единицы параметр порядка). Это явление вполне аналогично явлению критической опалесценции. Смолуховский [16] был первый, кто прозорливо предугадал, что явление критической опалесценции обусловлено возникновением в тройной точке бесконечного множества термодинамических флуктуаций. Следует отметить, что фактически в тройной точке возникает явление сильных фрустраций.

6. ЧАСТНЫЕ СЛУЧАИ ОБОБЩЕННОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

Перебором большого количества различных значений и знаков обменных взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями можно получить различные частные случаи обобщенной модели Изинга.

Начнем с наиболее очевидного частного случая. При выполнении равенств $J_1 = J_2, J'_1 = J'_2$ получаем обычную (не обобщенную) модель Изинга с учетом взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями.

Введение обобщенной модели Изинга позволяет получать различные виды декорированных решеток. Такую декорированную цепочку получаем, приравняв нулю одно из взаимодействий между вторыми соседями $J'_1 = 0$ (или, что эквивалентно, $J'_2 = 0$) (рис. 7). При дополнительном равенстве $J_1 = J_2$ решетка является просто декорированной и соответствует модели, которая была решена в работе [17].

Помимо этого, можно продемонстрировать сходство рассматриваемой решетки обобщенной модели с двумерной гексагональной решеткой в некоторых приближениях. Гексагональная решетка представлена на рис. 8.

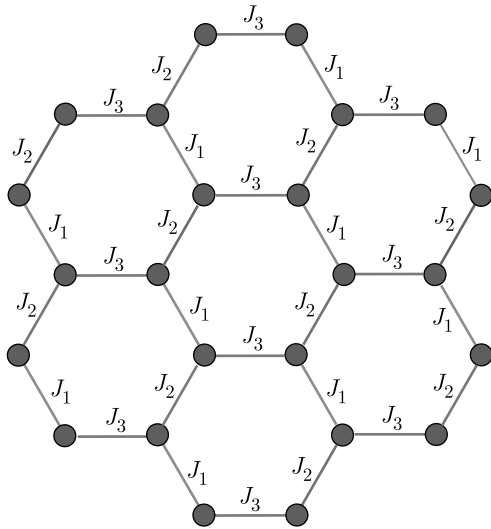


Рис. 8. Гексагональная решетка

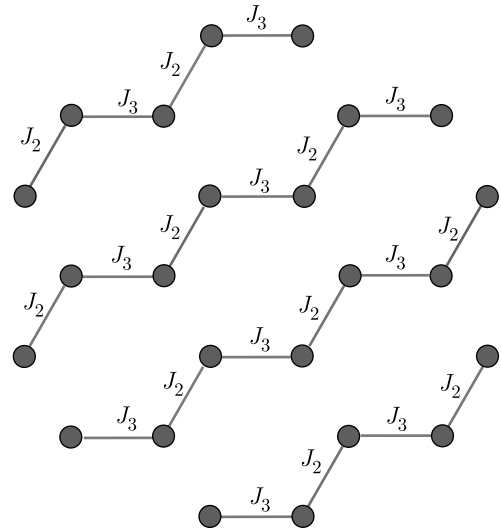


Рис. 9. Гексагональная решетка с $J_1 = 0$

В 1950 г. Гутапфель получил точное аналитическое решение для наибольшего собственного значения гексагональной решетки в виде

$$\lambda_{hex} = 2 \exp \left[\frac{1}{16\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln \left[\frac{1}{2} \left(\operatorname{ch} \left(\frac{2J_1}{T} \right) \times \right. \right. \right. \\ \times \operatorname{ch} \left(\frac{2J_2}{T} \right) \operatorname{ch} \left(\frac{2J_3}{T} \right) + 1 - \operatorname{sh} \left(\frac{2J_2}{T} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2J_3}{T} \right) \times \\ \times \cos(\alpha) - \operatorname{sh} \left(\frac{2J_3}{T} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2J_1}{T} \right) \cos(\beta) - \\ \left. \left. \left. - \operatorname{sh} \left(\frac{2J_1}{T} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2J_2}{T} \right) \cos(\alpha + \beta) \right) \right] d\alpha d\beta \right]. \quad (28)$$

Если положить нулю взаимодействие J_1 между узлами гексагональной решетки, получим набор невзаимодействующих подрешеток — цепочек (рис. 9). Выражение для максимального собственного значения при этом преобразуется к виду

$$\lambda_{hex} = 2 \exp \left[\frac{1}{8\pi} \int_0^{2\pi} \ln \left[\frac{1}{2} \left(\operatorname{ch} \left(\frac{2J_2}{T} \right) \operatorname{ch} \left(\frac{2J_3}{T} \right) + \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + 1 - \operatorname{sh} \left(\frac{2J_2}{T} \right) \operatorname{sh} \left(\frac{2J_3}{T} \right) \cos(\alpha) \right) \right] d\alpha \right]. \quad (29)$$

Также, полагая взаимодействия между вторыми соседями J'_1 и J'_2 равными нулю в обобщенной модели Изинга, приходим к решетке, представленной на рис. 10.

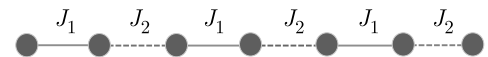


Рис. 10. Решетка обобщенной модели в отсутствие взаимодействия между вторыми соседями и с различными величинами ближайших взаимодействий

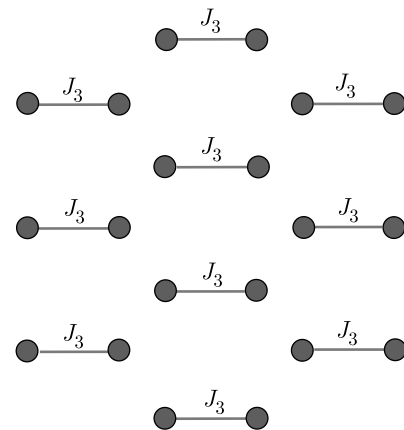


Рис. 11. Гексагональная решетка при $J_1 = 0$ и $J_2 = 0$

Наибольшее собственное значение обобщенной модели Изинга сводится к следующему виду:

$$\lambda_{max} = 4 \operatorname{ch} \left(\frac{J_1}{T} \right) \operatorname{ch} \left(\frac{J_2}{T} \right). \quad (30)$$

Видно, что решетки, проиллюстрированные на рис. 9 и 10 являются одинаковыми топологически. Графики температурных зависимостей энтропий и теплоемкостей подтверждают это (рис. 13). Температурные зависимости энтропии и теплоемкости в случае гексагональной решетки полностью совпадают с зависимостями обобщенной модели Изинга.

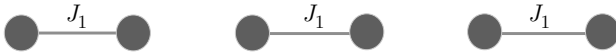


Рис. 12. Решетка обобщенной модели с отличным от нуля значением только между ближайшими соседями J_1

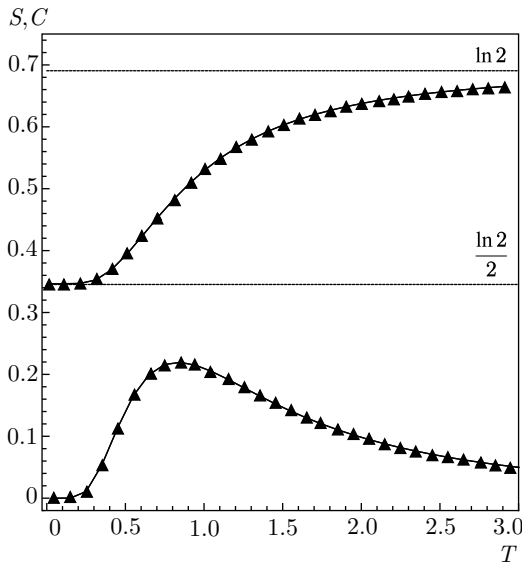


Рис. 13. Сравнение температурного поведения энтропий и теплоемкостей для гексагональной решетки и решетки обобщенной модели Изинга

Теперь положим равным нулю взаимодействие J_2 на гексагональной решетке. Получаемая решетка показана на рис. 11, и она фактически соответствует решетке димеров, так же как и решетка на рис. 12, в отсутствие взаимодействия J_2 .

Графики зависимостей энтропий и теплоемкостей при таких значениях взаимодействий для двумерной и одномерной решеток также полностью совпадают (рис. 13).

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Главным достижением данной работы является обобщение трансфер-матрицы Крамерса – Ваннье с переносом на две трансляции линейной цепочки. Получено точное аналитическое решение для наибольшего собственного значения обобщенной трансфер-матрицы Крамерса – Ваннье для двух трансляций с учетом различных обменных взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями в отсутствие магнитного поля. Построены фазовые

диаграммы основного состояния и определено, что все они строго соответствуют правилу фаз Гиббса. Определены точки и линии фрустраций, получены точные аналитические выражения для нуль-температурных энтропий и для температурного параметра порядка при $T \rightarrow 0$. Установлены критерии существования фрустраций в рассмотренной системе. Исследованы некоторые частные случаи обобщенной модели, в том числе и на гексагональной решетке.

Авторами получено точное выражение для наибольшего собственного значения трансфер-матрицы Крамерса – Ваннье обобщенной модели Изинга в магнитном поле. Решение, а также анализ всех частных случаев, включая решетку лестничного типа ($J_2 = 0$), предмет отдельного рассмотрения.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки России (тема Квант, № АААА-А18-118020190095-4) при частичной поддержке Уральского отделения РАН (проект № 18-2-2-11).

ЛИТЕРАТУРА

1. E. Ising, *Zeit für Physik* **21**, 253 (1925).
2. S. G. Brush, *Rev. Mod. Phys.* **39**, 883 (1967).
3. G. Mussardo, *Statistical Field Theory: An Introduction to Exactly Solved Models in Statistical Physics*, (*Oxford Graduate Texts*), Oxford University Press Inc., New York (2010).
4. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва (1985).
5. H. A. Kramers and G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **60**, 252 (1941).
6. H. A. Kramers and G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **60**, 263 (1941).
7. L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
8. G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **79**, 357 (1950).
9. R. M. F. Houtappel, *Prog. Theor. Phys.* **16**, 425 (1950).
10. K. Kanô and S. Naya, *Prog. Theor. Phys.* **10**, 158 (1953).
11. Ф. Р. Гантмахер, *Теория матриц*, Наука, Москва (1966).

12. Г. Корн, Т. Корн, *Справочник по математике для научных работников и инженеров* **48**, Наука, Москва (1968).
13. F. A. Kassan-Ogly et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **324**, 3418 (2012).
14. G. Toulouse, *Comm. Phys.* **2**, 115 (1977).
15. J. Vannimenus and G. Toulouse, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **10**, L537 (1977).
16. M. Smoluchowski, *Acad des Sci. de Cracovie Annales der Physik* **25**, 205 (1907).
17. J. Stephenson, *Can. J. Phys.* **48**, 10 (1970).