

# ОБОБЩЕННАЯ МОДЕЛЬ ИЗИНГА В ОТСУТСТВИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ

*Е. С. Цуварев<sup>a\*</sup>, Ф. А. Кассан-Оглы<sup>b\*\*</sup>, А. И. Прошкин<sup>b</sup>*

*<sup>a</sup> Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина  
620000, Екатеринбург, Россия*

*<sup>b</sup> 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  $\pm 1$ .

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  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  — собственные значения матрицы  $V$ , которые можно вычислить из секулярного уравнения, не прибегая к нахождению явного выражения для диагоналирующей 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,  $\lambda_1$  — 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:

$$f(T, H) = -TN \ln \lambda_1, \tag{11}$$

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

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

Как следствие, все термодинамические и магнитные величины рассматриваемой модели выражаются только через максимальное собственное значение трансфер-матрицы  $\lambda_1$  по обычным формулам термодинамики, например, энтропия  $S$  имеет вид

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

В частности, интересующая нас намагниченность равна

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

Используя явное выражение (8) для  $\lambda_1$  и формулу (14), получаем известный результат Изинга:

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

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, пробегающим отдельно по четным и нечетным узлам решетки. В данном исследовании каждая сумма состоит теперь из  $N/2$  слагаемых:

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

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):

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

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

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

или

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

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

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

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

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

$$\times \operatorname{sh}\left(\frac{2J'_1}{T}\right) \operatorname{sh}\left(\frac{2J'_2}{T}\right),$$

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

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  $\xi = \exp((2J'_1 + 2J'_2)/T)$ .

В рассматриваемом методе трансфер-матрицы Крамерса–Ваннье все термодинамические и магнитные величины исследуемой модели выражаются только через ее максимальное собственное значение  $\lambda_{max}$ . 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  $\eta$ , 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 Крамерса–Ваннье  $\lambda_{max}$  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  $J_1, J'_1, J_2, J'_2$ .

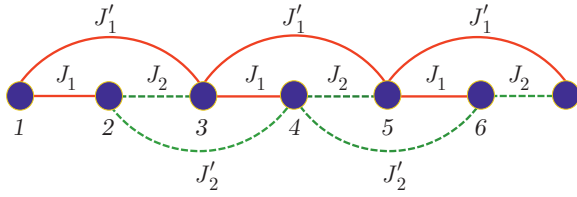


Рис. 1. Одномерная цепочка с учетом различных обменных взаимодействий между ближайшими ( $J_1, J_2$ ) и вторыми соседями ( $J'_1, J'_2$ )

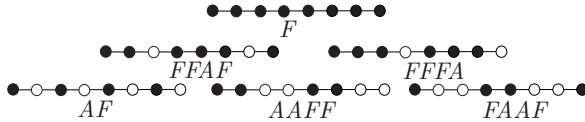


Рис. 2. Возможные типы магнитных структур, реализуемые в основном состоянии обобщенной модели Изинга в отсутствие магнитного поля. Темные кружки соответствуют спину, направленному вверх ( $F$ ), светлые — вниз ( $A$ )

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

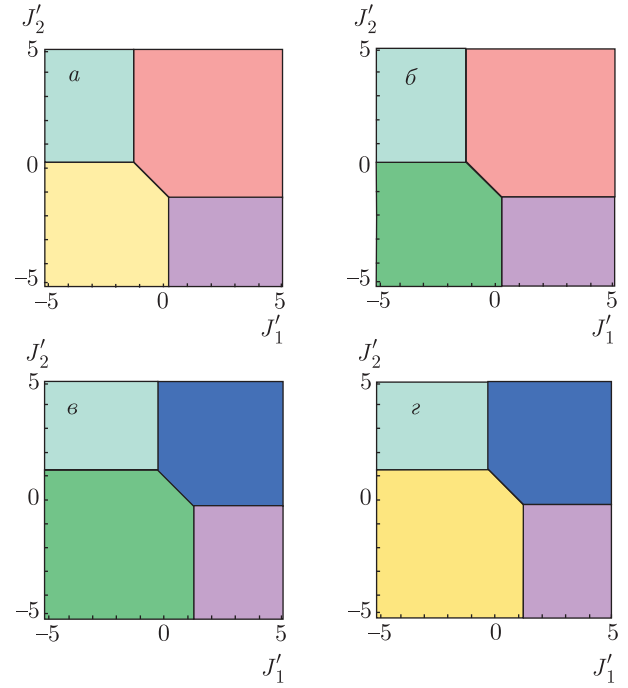


Рис. 3. (В цвете онлайн) Фазовые диаграммы основных состояний системы обобщенной модели Изинга в отсутствие магнитного поля в координатах  $(J'_1, J'_2)$  при различных обменных взаимодействиях  $J_1, J_2$ :  $a - J_1 = -1.5, J_2 = -1$ ,  $б - J_1 = -1, J_2 = -1.5$ ,  $в - J_1 = 1.5, J_2 = -1$ ,  $г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

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

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 избранным сечениям 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:

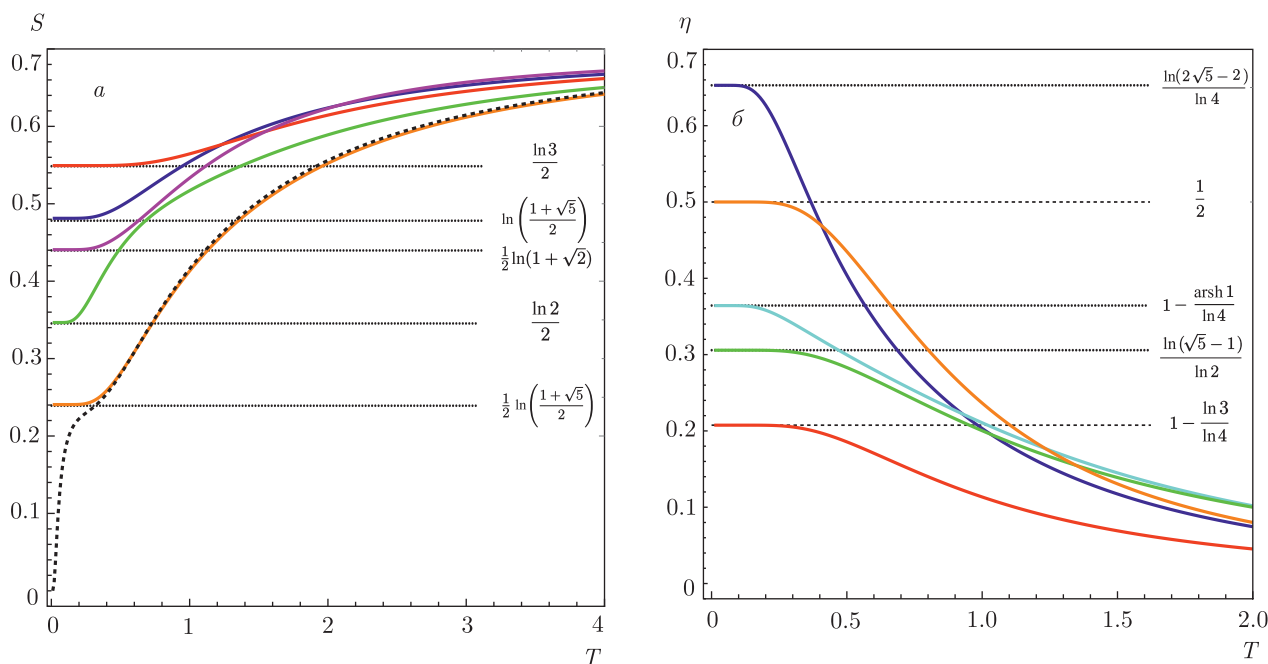


Рис. 4. а) Температурные зависимости энтропий обобщенной модели Изинга в отсутствие магнитного поля, пунктирной линией показано поведение энтропии вблизи точки фрустрации; б) термодинамический параметр порядка в различных точках фрустраций

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

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.

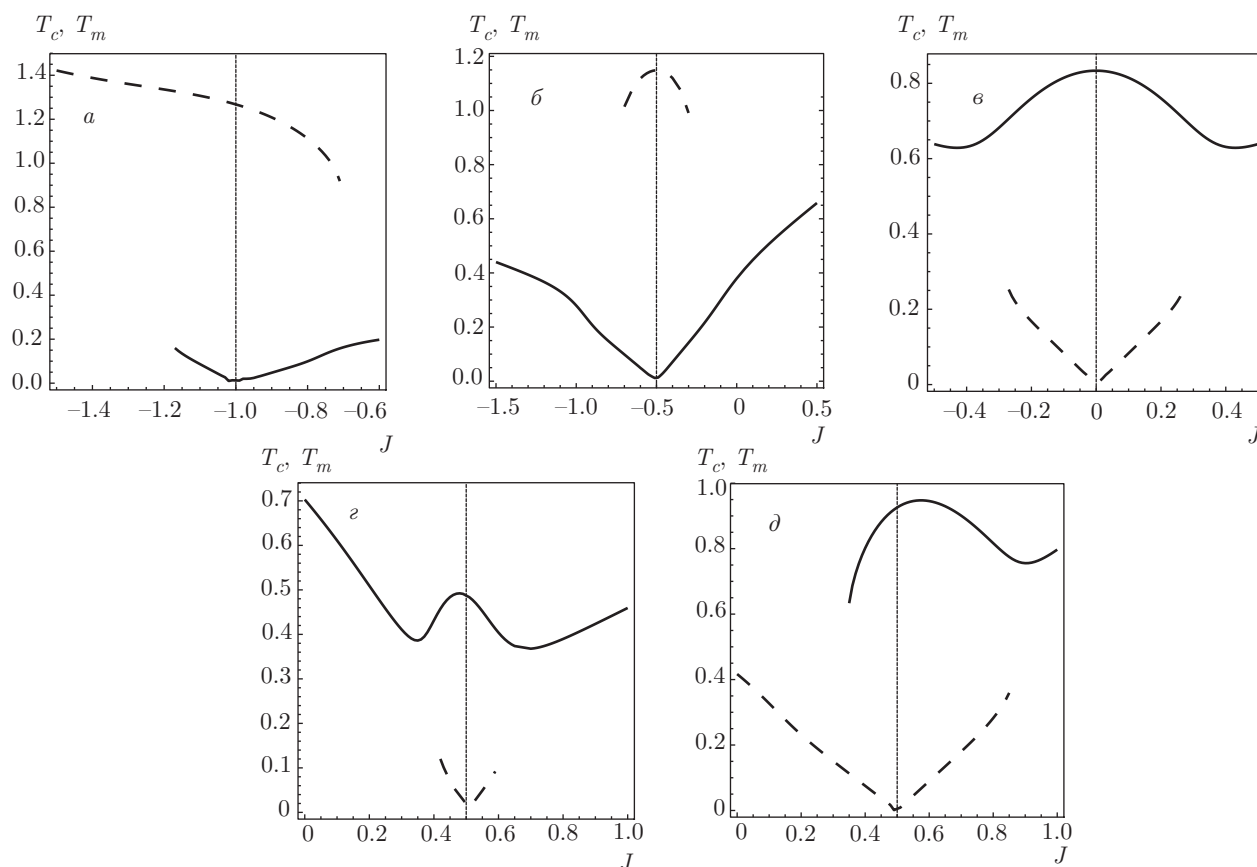


Рис. 5. Положения пиков теплоемкостей в непосредственной близости к точке фрустрации

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

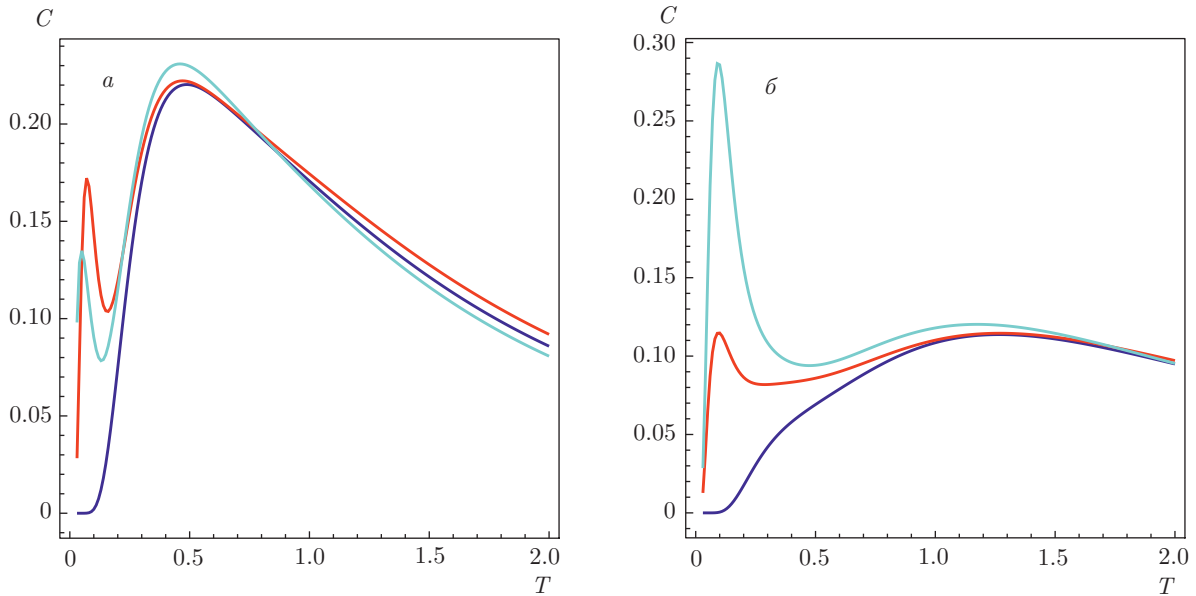
Точки и линии фрустраций различаются только значениями нуль-температурных энтропий (или термодинамическим параметром порядка). Вблизи этих точек и линий фрустраций поведение системы обладает существенными особенностями. Во-первых, при сколь угодно малом отклонении от них нуль-температурная энтропия становится 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.

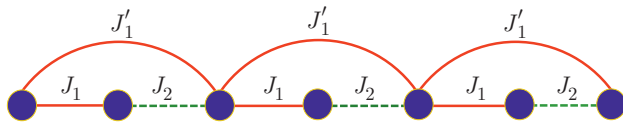
Чтобы пронаблюдать за характером изменения теплоемкостей вблизи точек (линий) фрустраций, построены графики (рис. 5), демонстрирующие положения пиков теплоемкостей в непосредственной близости к точкам (линиям) фрустраций.

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.



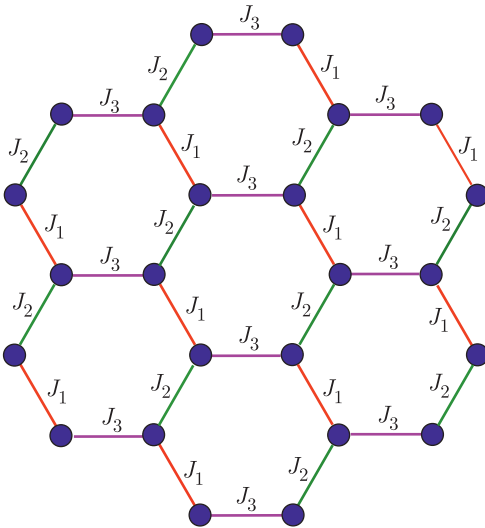


Рис. 8. Гексагональная решетка

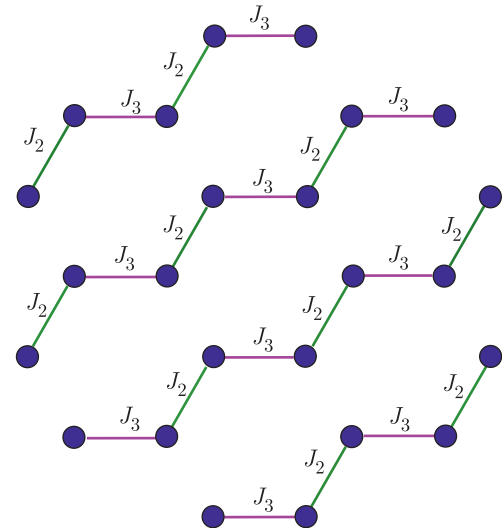


Рис. 9. Гексагональная решетка с  $J_1 = 0$

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

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

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

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

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

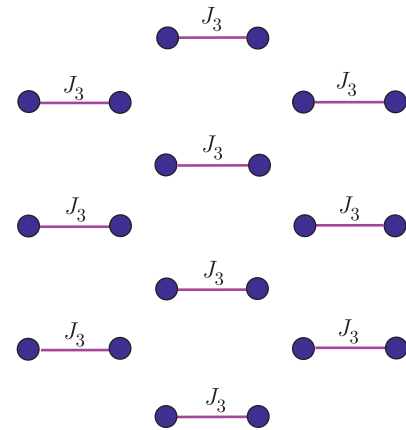


Рис. 11. Гексагональная решетка при  $J_1 = 0$  и  $J_2 = 0$

Наибольшее собственное значение обобщенной модели Изинга сводится к следующему виду:

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

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.

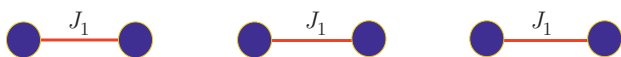


Рис. 12. Решетка обобщенной модели с отличным от нуля значением только между ближайшими соседями  $J_1$

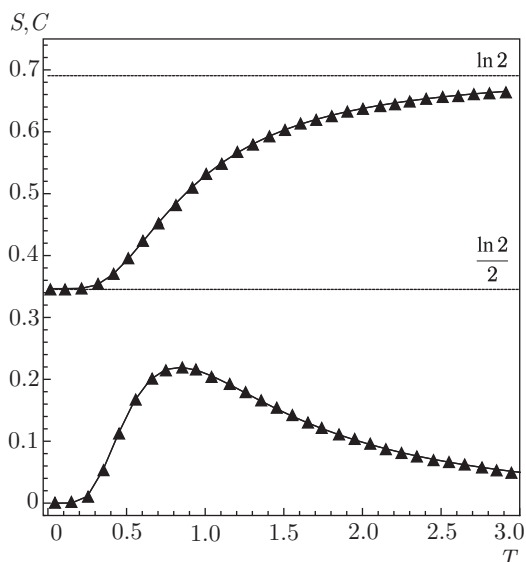


Рис. 13. Сравнение температурного поведения энтропий и теплоемкостей для гексагональной решетки и решетки обобщенной модели Изинга

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).