

ФРУСТРАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

А. В. Зарубин^{a}, Ф. А. Кассан-Оглы^a, А. И. Прошкин^a, А. Е. Шестаков^b*

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

*^b Российский федеральный ядерный центр — ВНИИТФ им. академика Е. И. Забабахина
456770, Снежинск, Челябинская обл., Россия*

Поступила в редакцию 9 ноября 2018 г.,
после переработки 9 ноября 2018 г.
Принята к публикации 28 ноября 2018 г.

Исследованы фрустрационные свойства модели Изинга на одномерной моноатомной эквидистантной решетке во внешнем однородном магнитном поле с учетом обменных взаимодействий атомных спинов на узлах первых (ближайших) и вторых соседей. Методом трансфер-матрицы Крамерса – Ванье получены точные аналитические выражения для термодинамических и магнитных характеристик системы, а также фурье-образа парной спин-спиновой корреляционной функции и волнового вектора магнитного диффузного рассеяния с учетом обменного взаимодействия между спинами на узлах ближайших соседей во внешнем магнитном поле и с учетом также обменного взаимодействия между спинами на узлах вторых соседей, но без магнитного поля. Сформулированы критерии возникновения магнитных фрустраций при наличии конкуренции не только между энергиями обменных взаимодействий, но и между ними и энергией внешнего магнитного поля. Найдены точки фрустраций и величины фрустрационных магнитных полей, зависящие от величин и знаков обменных взаимодействий. Исследованы особенности данной модели в режиме фрустрации и его окрестностях. Представлен и проанализирован набор характерных признаков, присущих наблюдаемым величинам систем с магнитными фрустрациями. Показано, что учет конкурирующих обменных взаимодействий спинов на узлах первых и вторых соседей позволяет описать поведение волнового вектора магнитного диффузного рассеяния для соразмерных, несоизмерных и lock-in-структур.

DOI: 10.1134/S0044451019050158

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы системы с магнитными фрустрациями — стремительно развивающаяся отрасль исследований, которая охватывает все новые и новые объекты, такие как спиновая жидкость, спиновый лед и, конечно, реальные кристаллы с различными структурами, такими как ГЦК, ГПУ, NaCl, пирохлор, гранат, шпинель и другие [1–6]. Само явление магнитных фрустраций было обнаружено в середине семидесятых годов двадцатого века в магнетиках, проявляющих необычные свойства, это явление объяснялось сильным вырождением основного состояния системы и невозможностью магнитного упорядочения даже при нулевой температуре. Такие

магнетики Жераром Тулузом в 1977 г. были названы фрустрированными [7, 8].

Экспериментальный материал по фрустрированным магнитным системам в реальных кристаллах и некристаллических веществах весьма богат и изобилует новыми явлениями и необычными свойствами. Однако надлежащая интерпретация и теоретическое объяснение множества экспериментальных фактов и новых эффектов в настоящее время отсутствуют, а ряд свойств фрустрированных систем еще недостаточно понятен.

В представленной работе исследуются фрустрационные свойства одномерной модели Изинга на моноатомной эквидистантной решетке во внешнем магнитном поле с учетом обменных взаимодействий атомных спинов на узлах ближайших, а также и вторых соседей. Такая модель позволяет получить точное решение в термодинамическом пределе, что

* E-mail: Alexander.Zarubin@imp.uran.ru

дает возможность качественно рассмотреть искомые характеристики, в том числе и объяснить свойства магнетиков, обусловленные фрустрациями, которые недоступны в рамках теории возмущений [9].

Безусловно, модель Изинга давно и широко используется в теории магнетизма и имеет набор хорошо известных решений [10–12], но системного описания ее фрустрационных свойств не проводилось.

Таким образом, вычисление термодинамических и магнитных характеристик, а также фурье-образа парной спин-спиновой корреляционной функции одномерных (или квазиодномерных) магнетиков в модели Изинга позволяет найти необходимую информацию о фрустрации системы [13–15] и связать ее с экспериментальными наблюдаемыми, в том числе и спектральными характеристиками упругого магнитного рассеяния неполяризованных нейтронов, что дает возможность адекватно провести интерпретацию магнитной структуры вещества.

2. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ ИЗИНГОВСКОЙ ЦЕПОЧКИ

Одномерная классическая модель Изинга с учетом обменных взаимодействий между атомными спинами на узлах первых (ближайших) и вторых (следующим за ближайшими) соседей с зеемановским членом задается гамильтонианом вида

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{n=1}^{N-1} \sigma_n \sigma_{n+1} - J_2 \sum_{n=1}^{N-2} \sigma_n \sigma_{n+2} - \mu_0 g H \sum_{n=1}^N \sigma_n, \quad (1)$$

где J_1 — параметр обменного взаимодействия между спинами на ближайших узлах линейной решетки, J_2 — параметр обменного взаимодействия между спинами на следующих за ближайшими узлах решетки, H — величина напряженности внешнего однородного магнитного поля (направленного вдоль оси z), символом σ_n обозначается z -проекция оператора спина атома величины $\sigma = \pm 1$, находящегося на узле n , а N — количество самих узлов спиновой цепочки.

Статистическая сумма рассматриваемой модели равна

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{\{\sigma\}} \prod_n V_n, \quad (2)$$

где суммирование ведется по всем возможным конфигурациям системы, т. е.

$$\sum_{\{\sigma\}} \dots = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \sum_{\sigma_2 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_N = \pm 1} \dots,$$

функция V_n может быть представлена [9] в независимом от индекса узла виде

$$V = \exp(K_1 \sigma \sigma' + K_2 \sigma \sigma'' + B \sigma) \quad (3)$$

и выражена через безразмерные коэффициенты

$$K_{1,2} = \beta J_{1,2}, \quad B = \beta \mu_0 g H, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}.$$

Отметим, что в дальнейших преобразованиях такие величины, как магнетон Бора (μ_0), фактор Ланде (g) и постоянная Больцмана (k_B), будут положены равными единице, а величины T , H , J_2 будут измеряться в единицах $|J_1|$, как это принято в теории низкоразмерных систем.

При наложении циклических граничных условий Борна – Кармана

$$\sigma_{N+1} = \sigma_1$$

получаем для статистической суммы (2) выражение

$$Z = \text{Tr } \mathbf{V}^N, \quad (4)$$

где \mathbf{V} — трансфер-матрица Крамерса – Ваннье [16], элементы которой задаются правилом (3)

$$V_{\sigma\sigma'} = \langle \sigma | V | \sigma' \rangle. \quad (5)$$

Размерность такой квадратной трансфер-матрицы одномерной спиновой модели определяется выражением

$$d = c^b, \quad (6)$$

где c — число состояний на узле (в классической модели Изинга $c = 2$), а b — число обменных взаимодействий спинов цепочки в задаче.

Трансфер-матрица \mathbf{V} является эрмитовой, и с помощью унитарного преобразования \mathbf{P} ее можно преобразовать к диагональной форме:

$$\tilde{\mathbf{V}} = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{V} \mathbf{P} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_d), \quad (7)$$

где символом diag обозначена диагональная матрица, на главной диагонали которой расположены ее собственные значения. Размерность такой матрицы (7) равна величине d (6).

В этом случае статистическая сумма (4) переписывается следующим образом:

$$Z = \text{Tr } \tilde{\mathbf{V}}^N = \sum_{i=1}^d \lambda_i^N. \quad (8)$$

При этом величина (4) не меняется, поскольку след матрицы является ее инвариантом.

Отметим, что выбор диагоналирующей матрицы возможен множеством способов, но мы подбираем диагоналирующую матрицу таким образом, что на первом месте в матрице (7) стоит главное (единственное максимальное вещественное) собственное значение, которое всегда существует по теореме Фробениуса – Перрона [17].

Если на первое место в спектре трансфер-матрицы поставить ее главное собственное значение, то статистическую сумму (8) можно переписать как

$$Z = \lambda_1^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N + \dots + \left(\frac{\lambda_d}{\lambda_1} \right)^N \right]. \quad (9)$$

Тогда при переходе к термодинамическому пределу ($N \rightarrow \infty$) в выражении (9) все слагаемые, кроме первого, стремятся к нулю,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^N = 0, \quad i = 2, 3, \dots, d,$$

поэтому получаем выражение для статистической суммы:

$$Z = \lambda_1^N.$$

В результате все термодинамические и магнитные функции системы – свободная энергия системы, приходящаяся на один спин,

$$F = -\frac{T}{N} \ln Z = -T \ln \lambda_1,$$

энтропия

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = \ln \lambda_1 + \frac{T}{\lambda_1} \frac{\partial \lambda_1}{\partial T}, \quad (10)$$

теплоемкость

$$C = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} = 2 \frac{T}{\lambda_1} \frac{\partial \lambda_1}{\partial T} + \frac{T^2}{\lambda_1} \frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial T^2} - \frac{T^2}{\lambda_1^2} \left(\frac{\partial \lambda_1}{\partial T} \right)^2, \quad (11)$$

намагниченность

$$M = -\frac{\partial F}{\partial H} = \frac{T}{\lambda_1} \frac{\partial \lambda_1}{\partial H} \quad (12)$$

и магнитная восприимчивость

$$\chi = -\frac{\partial^2 F}{\partial H^2} = \frac{\partial M}{\partial H} = -\frac{T}{\lambda_1^2} \left(\frac{\partial \lambda_1}{\partial H} \right)^2 + \frac{T}{\lambda_1} \frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial H^2} \quad (13)$$

— определяются только через главное собственное значение трансфер-матрицы [9, 18, 19].

3. ФУРЬЕ-ОБРАЗ ПАРНОЙ СПИН-СПИНОВОЙ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ

Важнейшей характеристикой системы является фурье-образ парной спин-спиновой корреляционной функции (КФ), которая может служить прототипом для расчета интенсивности упругого магнитного рассеяния неполяризованных нейтронов,

$$K(q) = \frac{1}{N} \sum_{n,m} \sum_{\{\sigma\}} \langle \sigma_n \sigma_m \rangle e^{-iqa(m-n)}, \quad (14)$$

где q — волновой вектор рассеяния, a — постоянная решетки, а угловые скобки означают усреднение:

$$\langle \dots \rangle = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}} \dots / \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}.$$

Тогда функция (14) в матричной форме (с заменой $u = m - n$) имеет вид

$$K(q) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sum_{u=-N}^N \kappa_u e^{-iqau}, \quad (15)$$

$$\kappa_u = \langle \sigma_u \sigma_{N-u} \rangle = \frac{\text{Tr}(\tilde{\sigma} \tilde{\mathbf{V}}^u \tilde{\sigma} \tilde{\mathbf{V}}^{N-u})}{\text{Tr} \tilde{\mathbf{V}}^N}, \quad (16)$$

где

$$\tilde{\sigma} = \mathbf{P}^{-1} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{P}. \quad (17)$$

При этом для КФ должно выполняться условие сохранения числа рассеянных частиц —

$$\frac{a}{2\pi} \int_0^{2\pi/a} K(q) dq = \langle \sigma^2 \rangle = 1. \quad (18)$$

4. ФРУСТРАЦИИ НА ИЗИНГОВСКОЙ ЦЕПОЧКЕ С УЧЕТОМ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СПИНОВ НА УЗЛАХ БЛИЖАЙШИХ СОСЕДЕЙ

Для начала рассмотрим простейший случай, для чего будем учитывать обменное взаимодействие только между спинами на узлах ближайших соседей и без учета внешнего магнитного поля. В этом случае гамильтониан (1) имеет вид

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_n \sigma_n \sigma_{n+1},$$

тогда элементы трансфер-матрицы (5) определяются выражением

$$V_{\sigma\sigma'} = \langle \sigma | e^{K_1 \sigma \sigma'} | \sigma' \rangle = e^{K_1 \sigma \sigma'},$$

а размерность самой матрицы — $d = 2$, согласно правилу (6).

Далее, воспроизводя известный результат [9], запишем трансфер-матрицу

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} V_{++} & V_{+-} \\ V_{-+} & V_{--} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{K_1} & e^{-K_1} \\ e^{-K_1} & e^{K_1} \end{pmatrix}, \quad (19)$$

собственные значения которой равны

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= e^{K_1} + e^{-K_1} = 2 \operatorname{ch} K_1, \\ \lambda_2 &= e^{K_1} - e^{-K_1} = 2 \operatorname{sh} K_1, \end{aligned} \quad (20)$$

причем главное собственное значение определено первым (20).

Теперь можно записать и энтропию

$$\begin{aligned} S &= \ln(2 \operatorname{ch} K_1) - K_1 \operatorname{th} K_1 = \\ &= \ln \lambda_1 - \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \ln \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} \end{aligned} \quad (21)$$

и теплоемкость системы

$$C = \left(\frac{K_1}{\operatorname{ch} K_1} \right)^2 = \left(\frac{2}{\lambda_1} \ln \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} \right)^2 \quad (22)$$

как через переменные гамильтониана, так и через собственные значения трансфер-матрицы.

Таким образом, в диагонализированной форме трансфер-матрица (7) записывается как

$$\tilde{\mathbf{V}} = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{V} \mathbf{P} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix},$$

где сама диагоналирующая матрица выбрана в виде

$$\mathbf{P} = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P}^{-1} = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Также для записи функции (16) в матричной форме введем следующую проекционную матрицу:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (23)$$

тогда, согласно преобразованию (17), запишем

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

В рассматриваемом случае функция (16) имеет вид

$$\kappa_u = \frac{\Lambda^u + \Lambda^N \Lambda^{-u}}{1 + \Lambda^N}, \quad (24)$$

где приведенный корень —

$$\Lambda = \frac{\lambda_2}{\lambda_1} = \frac{e^{K_1} - e^{-K_1}}{e^{K_1} + e^{-K_1}} = \operatorname{th} K_1. \quad (25)$$

Поскольку в термодинамическом пределе

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \Lambda^N = 0,$$

функция (24) переписывается в форме

$$\kappa_u = \Lambda^u.$$

Отсюда выражение для КФ (15) в термодинамическом пределе имеет окончательный вид

$$K(q) = \frac{1 - \Lambda^2}{1 - 2\Lambda \cos(qa) + \Lambda^2}. \quad (26)$$

Полученную функцию (26) следует назвать функцией магнитного диффузного рассеяния, так как при конечной температуре она обладает ненулевыми значениями для любого волнового вектора, а не только в положениях брэгговских рефлексов.

Отметим, что функция (26) аналогична выражению для интенсивности диффузного рентгеновского рассеяния для экваторной линейной решетки, полученному в 1948 г. Андре Гинье [20, 21].

Следует обратить внимание на то, что для полученной КФ (26) выполняется условие (18).

Для описания интенсивности функции магнитного диффузного рассеяния определим положения максимумов и минимумов КФ (26), которые имеют значения

$$q_0 = \frac{\pi + 2\pi k}{a}, \quad q_1 = \frac{2\pi k}{a}, \quad k \in \mathbb{Z} \quad (27)$$

в зависимости от знака приведенного корня (25). В свою очередь, амплитуда КФ (26) в положениях экстремумов (27) задаются следующими функциями:

$$K(q_0) = \frac{1 - \Lambda}{1 + \Lambda} = e^{-2K_1}, \quad (28)$$

$$K(q_1) = \frac{1}{K(q_0)} = \frac{1 + \Lambda}{1 - \Lambda} = e^{2K_1}. \quad (29)$$

4.1. Магнитная фазовая диаграмма основного состояния системы

Дальнейшее исследование модели будет опираться на магнитную фазовую диаграмму, структура которой определяется поведением минимальной энергии конфигураций спиновой системы в основном состоянии в зависимости от параметров модели

$$E_0 = \min\{E\}. \quad (30)$$

Сама энергия конфигурации задается оператором полной энергии системы (1) и находится из функции

$$E = -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \varepsilon_i,$$

$$\varepsilon_i = H\sigma_{i+b} + \sum_{p=1}^b J_p \frac{\sigma_{i+b-p}\sigma_{i+b} + \sigma_{i+b}\sigma_{i+b+p}}{2},$$

где m — количество узлов в конфигурации, b — число обменных взаимодействий спинов цепочки в задаче, J_p — параметр обменного взаимодействия между спинами на соседних узлах линейной решетки p -уровня, H — величина напряженности внешнего магнитного поля.

Таким образом, в зависимости от знака параметра обменного взаимодействия спинов цепочки в данной модели при нулевой температуре реализуются два набора возможных спиновых конфигураций, обладающих минимальной энергией. Первый тип конфигураций при $J_1 < 0$ характеризуется антиферромагнитным упорядочением неелевского типа, что соответствует набору

$$C_{A2} = \left\{ \begin{array}{cccccc} +1 & -1 & +1 & -1 & +1 & -1 & \dots \\ -1 & +1 & -1 & +1 & -1 & +1 & \dots \end{array} \right\}, \quad (31)$$

состоящему из двух последовательностей (с чередованием проекций спина вдоль и против z -направления) с равными энергиями

$$E_{A2} = J_1.$$

Для такой конфигурации введем индексное обозначение $A2$.

Второй тип конфигураций при $J_1 > 0$ соответствует ферромагнитному упорядочению

$$C_{F2} = \left\{ \begin{array}{cccccc} +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & +1 & \dots \\ -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & \dots \end{array} \right\} \quad (32)$$

и состоит из двух последовательностей (вдоль и против z -направления) с равными энергиями

$$E_{F2} = -J_1.$$

Для обозначения такой конфигурации введем индекс $F2$.

Получаем, что энергию основного состояния системы (30) в рассматриваемом случае можно записать в виде

$$E_0 = \begin{cases} E_{A2}, & J_1 \leq 0, \\ E_{F2}, & J_1 \geq 0. \end{cases}$$

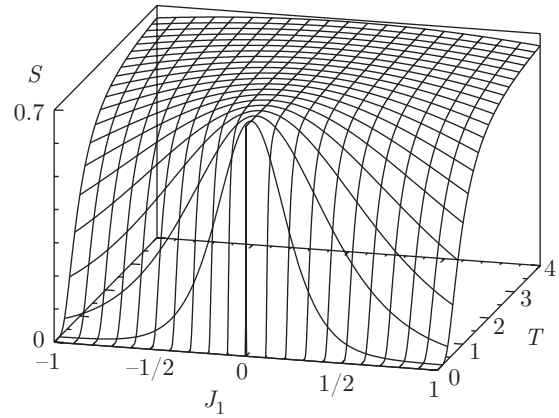


Рис. 1. Энтропия изинговской цепочки (21) с учетом обменного взаимодействия только между спинами на узлах ближайших соседей

Отсюда видно, что равенство энергий двух конфигураций при нулевой температуре соответствует условию

$$E_{A2} = E_{F2},$$

а в точке фазового пространства

$$J_1 = 0 \quad (33)$$

происходит качественное изменение магнитной структуры основного состояния, которое характеризуется тем, что помимо двух антиферромагнитных C_{A2} (31) и двух ферромагнитных C_{F2} (32) конфигураций имеют минимальную энергию и другие спиновые конфигурации, в том числе и бесконечное множество конфигураций, не обладающих никакой трансляционной инвариантностью.

4.2. Термодинамика системы в режиме фрустрации

В обнаруженной особой точке фазового пространства (33) при нулевой температуре энтропия системы (21) не равна нулю, а равна натуральному логарифму двух,

$$\lim_{T \rightarrow 0} S(J_1 = 0) = \ln 2 \approx 0.693,$$

как показано на рис. 1.

Здесь следует обратить внимание на то, что данный результат не противоречит третьему началу термодинамики, поскольку энтропия определяется через ее дифференциал

$$dS = \frac{\delta Q}{T},$$

с точностью до постоянной интегрирования $S_0 \geq 0$, и лишь в формулировке теоремы Нернста – Планка для равновесных систем с невырожденным основным состоянием данная постоянная выбирается нулевой, $S_0 = 0$ [22].

С другой стороны, если энтропия Гиббса основного состояния системы больше нуля,

$$S(T = 0) = \ln W > 0,$$

то это говорит о том, что статистический вес данного состояния больше единицы, $W > 1$, а сама система испытывает вырождение, поскольку ее статистический вес определяет кратность вырождения состояния [23].

Именно такое состояние системы, в котором энтропия основного состояния не равна нулю,

$$\lim_{T \rightarrow 0} S > 0, \tag{34}$$

следует называть фрустрированным.

Таким образом, в данном случае статистический вес системы в основном состоянии в режиме фрустрации равен двум,

$$W = 2,$$

а вне этой особой точки (33) равен единице,

$$W = 1, \tag{35}$$

при этом нуль-температурная энтропия системы равна нулю,

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = 0, \tag{36}$$

что соответствует третьему началу термодинамики в формулировке Планка [22], а сама система становится невырожденной.

При бесконечно большой температуре (при любом значении обменного параметра) энтропия равна натуральному логарифму двух –

$$\lim_{T \rightarrow \infty} S = \ln 2, \tag{37}$$

где $W = 2$ – число состояний на узле в рассматриваемой модели. Поведение энтропии системы при конечных значениях параметра обменного взаимодействия спинов на узлах ближайших соседей цепочки представлено на рис. 2.

При стремлении к нулевой или бесконечно большой температуре и при любом значении параметра обменного взаимодействия спинов цепочки теплоемкость системы (22) равна нулю,

$$\lim_{T \rightarrow 0} C = 0, \quad \lim_{T \rightarrow \infty} C = 0, \tag{38}$$

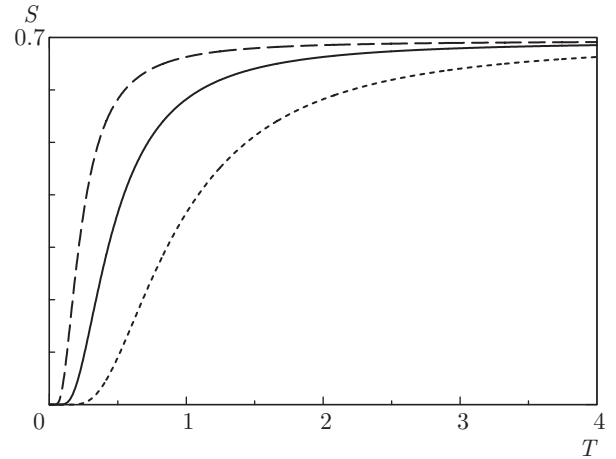


Рис. 2. Энтропия изинговской цепочки (21) с учетом обменного взаимодействия только между спинами на узлах ближайших соседей, где значения параметра $|J_1| = \{1/4; 1/2; 1\}$ соответствуют штриховой, сплошной и пунктирной линиям на графике

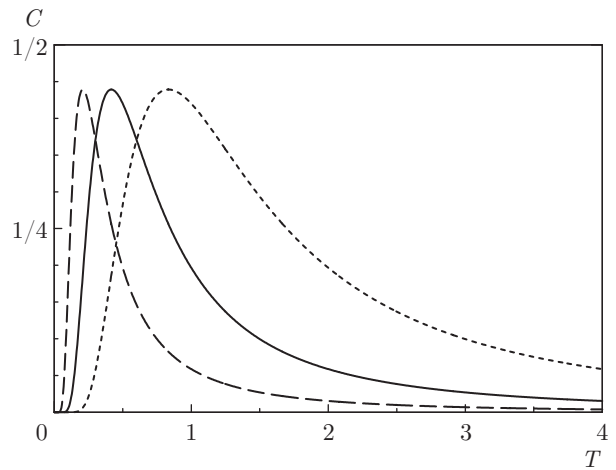


Рис. 3. Теплоемкость изинговской цепочки (22) (с обозначениями линий в соответствии с рис. 2)

но в промежуточных значениях по температуре теплоемкость имеет пик, как показано на рис. 3. Поведение максимума теплоемкости определяется решением уравнения

$$K_1 \operatorname{th} K_1 = 1$$

и продемонстрировано на рис. 4.

4.3. Поведение функции магнитного диффузного рассеяния

В случае антиферромагнитного параметра обмена спинов цепочки ($J_1 < 0$) знак приведенного кор-

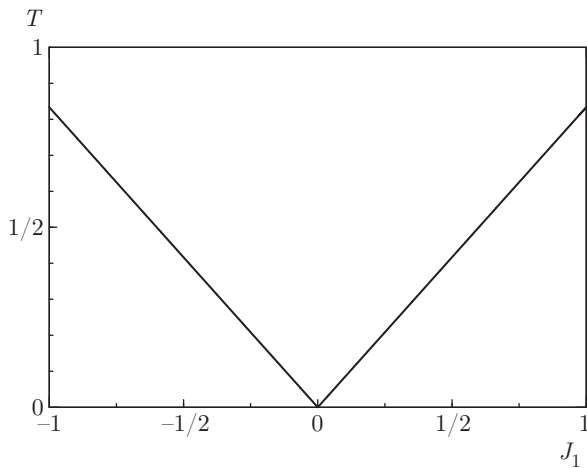


Рис. 4. Температурное поведение пиков теплоемкости изинговской цепочки (22) с учетом обменного взаимодействия только между спинами на узлах ближайших соседей от параметра спинового обмена

ня (25) всегда отрицателен, следовательно, получаем решения (27) для положений максимумов

$$q_0^A = q_0 \tag{39}$$

и минимумов

$$q_1^A = q_1$$

функции магнитного диффузного рассеяния КФ (26).

В свою очередь, поведение амплитуды максимумов КФ определяется выражением (28), т. е.

$$K(q_0^A) = K(q_0), \tag{40}$$

а амплитуды минимумов задаются функцией (29) как

$$K(q_1^A) = \frac{1}{K(q_0^A)} = K(q_1). \tag{41}$$

Температурная эволюция КФ представлена на рис. 5, а экстремумов функции — на рис. 6, 7.

С другой стороны, в случае ферромагнитного обмена спинов цепочки ($J_1 > 0$) знак приведенного корня (25) всегда положителен, и отсюда получаем обратное предыдущему случаю решение для положений максимумов

$$q_0^F = q_1 \tag{42}$$

и минимумов

$$q_1^F = q_0$$

функции (26).

Соответственно ведут себя и амплитуды максимумов,

$$K(q_0^F) = K(q_1),$$

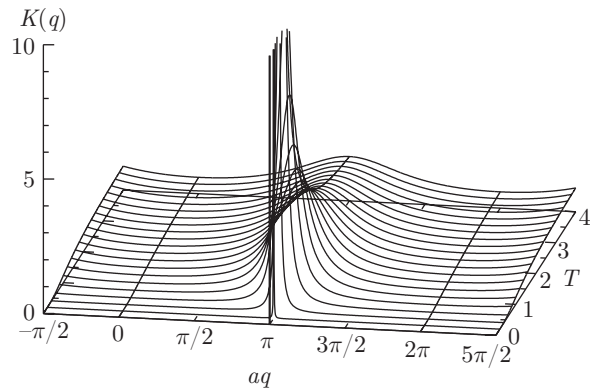


Рис. 5. КФ изинговской цепочки (26) с антиферромагнитным обменным взаимодействием только между спинами на узлах ближайших соседей ($J_1 = -1$) в зависимости от вектора рассеяния и температуры

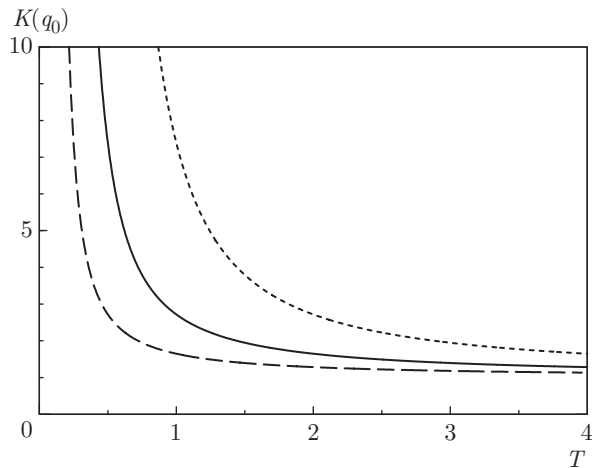


Рис. 6. Температурное поведение амплитуды максимумов КФ изинговской цепочки (40) (с обозначениями линий в соответствии с рис. 2)

и минимумов,

$$K(q_1^F) = \frac{1}{K(q_0^F)} = K(q_0).$$

Следует обратить внимание на то, что в случаях антиферромагнитного и ферромагнитного обменных взаимодействий спинов на узлах ближайших соседей соответствующие функции магнитного диффузного рассеяния изинговской цепочки (26) по форме одинаковы и различаются лишь сдвигом по величине q на половину периода π/a . Таким образом, при ферромагнитном обменном параметре пики КФ находятся в точках пространства рассеяния q_0^F (42), соответствующих положениям брэгговских рефлексов

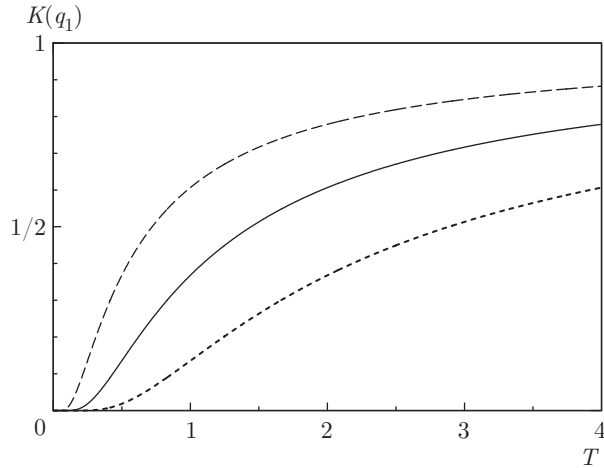


Рис. 7. Температурное поведение амплитуды минимумов КФ изинговской цепочки (41) (с обозначениями линий в соответствии с рис. 2)

$$q_B = \frac{2\pi k}{a}, \quad k \in \mathbb{Z}, \quad (43)$$

а при антиферромагнитном обмене рассеяние концентрируется ровно посередине между брэгговскими положениями в позициях q_0^A (39), т. е. со сдвигом на половину периода относительно первых. Аналогично располагаются и минимумы функции (26).

Выражения для амплитуды максимумов (28) и минимумов (29) КФ при различных знаках параметра обменного взаимодействия спинов цепочки связаны условиями

$$K(q_0^A) = \frac{1}{K(q_0^F)}, \quad K(q_1^A) = \frac{1}{K(q_1^F)}.$$

При бесконечно высоких температурах амплитуда КФ в положениях максимумов и минимумов одинакова, т. е. интенсивность КФ равномерно распределяется по обратному пространству при любом значении параметра обмена спинов цепочки

$$\lim_{T \rightarrow \infty} K(q_0^A) = \lim_{T \rightarrow \infty} K(q_1^A) = 1,$$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} K(q_0^F) = \lim_{T \rightarrow \infty} K(q_1^F) = 1,$$

а при понижении температуры концентрируется, соответственно, в отдельных точках обратного пространства q_0^A или q_0^F .

При стремлении температуры к нулю пики КФ приобретают форму дельта-функции в соответствующих точках пространства рассеяния,

$$\lim_{T \rightarrow 0} K(q_0^A) = \lim_{T \rightarrow 0} K(q_0^F) = \infty,$$

при этом имея нулевую интенсивность в положениях минимума,

$$\lim_{T \rightarrow 0} K(q_1^A) = \lim_{T \rightarrow 0} K(q_1^F) = 0.$$

В точке фрустрации (33) приведенный корень (25) всегда равен нулю,

$$\Lambda = 0,$$

что меняет поведение КФ (26), и амплитуда данной функции становится равной единице,

$$K(q, J_1 = 0) = 1, \quad (44)$$

при любой температуре. Поэтому интенсивность КФ (26) фрустрированной системы не имеет экстремумов и равномерно распределена в обратном пространстве при любой температуре, так же как и для нефрустрированной системы при бесконечно большой температуре.

Таким образом, при отсутствии обмена между спинами цепочки ($J_1 = 0$) реализуется парамагнитное состояние системы, характеризуемое тем, что все 2^N конфигураций системы имеют одинаковую вероятность и обладают одинаковой энергией, т. е. дают одинаковый вклад в рассеяние при любом значении волнового вектора. Поскольку энтропия в парамагнитном состоянии не равна нулю,

$$S(J_1 = 0) = \ln 2,$$

и одинакова (максимальна) при любой температуре, изинговский парамагнетик является абсолютно фрустрированной системой.

5. ФРУСТРАЦИИ НА ИЗИНГОВСКОЙ ЦЕПОЧКЕ С УЧЕТОМ ВНЕШНЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ ПРИ ОБМЕННОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ СПИНОВ НА УЗЛАХ БЛИЖАЙШИХ СОСЕДЕЙ

Аналогичным образом рассмотрим модель Изинга в случае, учитывающем зеemanовский вклад в общую энергию системы, тогда гамильтониан (1) будет иметь вид

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_n \sigma_n \sigma_{n+1} - H \sum_n \sigma_n,$$

а элементы трансфер-матрицы (5) будут определяться выражением

$$V_{\sigma\sigma'} = \langle \sigma | e^{K_1 \sigma \sigma' + B \sigma} | \sigma' \rangle = e^{K_1 \sigma \sigma' + B \sigma},$$

а ее размерность, согласно правилу (6), равна $d = 2$.

Явный вид трансфер-матрицы может быть получен аналогично предыдущему случаю (19) и представлен как

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} e^{K_1+B} & e^{-K_1+B} \\ e^{-K_1-B} & e^{K_1-B} \end{pmatrix}, \quad (45)$$

а ее собственные значения записаны в виде

$$\lambda_1 = e^{K_1} \left(\operatorname{ch} B + \sqrt{\operatorname{sh}^2 B + e^{-4K_1}} \right), \quad (46)$$

$$\lambda_2 = e^{K_1} \left(\operatorname{ch} B - \sqrt{\operatorname{sh}^2 B + e^{-4K_1}} \right).$$

Здесь первым выбран корень (46), который является главным собственным значением матрицы (45).

Отсюда энтропия (10) и теплоемкость (11) системы представимы через собственные значения трансфер-матрицы следующим образом:

$$S = \ln \lambda_1 - \left(\lambda_1 - \lambda_2 - 2\psi_2 - \frac{4}{\lambda_1 \psi_1^2} \right) \frac{\ln \psi_1}{\lambda_1 - \lambda_2} - 2 \frac{\psi_2}{\lambda_1 - \lambda_2} \ln \left(\frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} + \psi_2 \right), \quad (47)$$

$$C = 2 \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} \left(\frac{2}{\lambda_1 - \lambda_2} \frac{\ln \psi_1}{\psi_1} \right)^2 + 2 \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} \left(\frac{1}{\lambda_1} \frac{2}{\lambda_1 - \lambda_2} \frac{\ln \psi_1}{\psi_1} \right)^2 (\lambda_2^2 - 2\psi_1^2) + \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} \left[\frac{2}{\lambda_1 - \lambda_2} \frac{1}{\psi_1} \ln \left(\frac{\lambda_1 + \lambda_2 + 2\psi_2}{2\psi_1} \right) \right]^2 + 2 \frac{\psi_2 \ln \psi_1}{\lambda_1 - \lambda_2} \left(\frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \frac{4}{\psi_1} \right)^2 \ln \left(\frac{\lambda_1 + \lambda_2 + 2\psi_2}{2\psi_1} \right) + 2 \left(\frac{1}{\lambda_1} \frac{4}{\lambda_1 - \lambda_2} \frac{\psi_2}{\psi_1} \ln \psi_1 \right)^2, \quad (48)$$

где

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{\lambda_1 \lambda_2 + \sqrt{\lambda_1^2 \lambda_2^2 + 4}}{2}},$$

$$\psi_2 = \frac{\sqrt{\lambda_1^2 + \lambda_2^2 - 2\sqrt{\lambda_1^2 \lambda_2^2 + 4}}}{2}.$$

Намагниченность на один спин (12) имеет вид

$$M = \frac{\operatorname{sh} B}{\sqrt{\operatorname{sh}^2 B + e^{-4K_1}}}. \quad (49)$$

Напомним, что выражение (49) есть один из результатов работы Изинга [10].

Также намагниченность можно выразить и через собственные значения трансфер-матрицы,

$$M = \frac{\sqrt{\lambda_1^2 + \lambda_2^2 - 2\sqrt{\lambda_1^2 \lambda_2^2 + 4}}}{\lambda_1 - \lambda_2}, \quad (50)$$

как и магнитную восприимчивость (13),

$$\chi = \frac{1}{T} \left(\frac{2}{\lambda_1 - \lambda_2} \right)^3 \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 \lambda_2 + \sqrt{\lambda_1^2 \lambda_2^2 + 4}}. \quad (51)$$

Диагонализирующая матрица в данном случае выбрана в виде

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \frac{(\lambda_1 - \lambda_2)(1+M)}{2} & -\frac{(\lambda_1 - \lambda_2)(1-M)}{2} \\ \frac{2}{\lambda_1(1+M) + \lambda_2(1-M)} & \frac{2}{\lambda_1(1+M) + \lambda_2(1-M)} \end{pmatrix},$$

где M — намагниченность (50). Тогда матрица (17) имеет форму

$$\tilde{\sigma} = \begin{pmatrix} M & M - 1 \\ -M - 1 & -M \end{pmatrix}.$$

Отсюда получаем, что в рассматриваемом случае функция (16) записывается как

$$\kappa_u = \frac{M^2(1+\Lambda^N) + (1-M^2)(\Lambda^u + \Lambda^N \Lambda^{-u})}{1 + \Lambda^N}, \quad (52)$$

где приведенный корень равен

$$\Lambda = \frac{\lambda_2}{\lambda_1} = \frac{\operatorname{ch} B - \sqrt{\operatorname{sh}^2 B + e^{-4K_1}}}{\operatorname{ch} B + \sqrt{\operatorname{sh}^2 B + e^{-4K_1}}}. \quad (53)$$

В термодинамическом пределе функция (52) приобретает вид

$$\kappa_u = M^2 + (1 - M^2)\Lambda^u.$$

В результате проделанных преобразований выражение для КФ (15) состоит теперь из двух слагаемых:

$$K(q) = M^2 L(q) + D(q). \quad (54)$$

Первое слагаемое есть модулированная квадратом намагниченности функция Лауэ,

$$L(q) = \frac{1}{N} \frac{\sin^2(qa(N+1)/2)}{\sin^2(qa/2)}, \quad (55)$$

описывающая брэгговское рассеяние, определяемая только исходной кристаллической решеткой и не зависящая от параметра обменного взаимодействия

спинов цепочки и величины напряженности внешнего магнитного поля. Второе слагаемое — функция магнитного диффузного рассеяния во внешнем магнитном поле:

$$D(q) = (1 - M^2) \frac{1 - \Lambda^2}{1 - 2\Lambda \cos(qa) + \Lambda^2}. \quad (56)$$

Следует обратить внимание, что выражение для КФ (54) описывает особое явление, связанное с пропорциональным квадрату намагниченности перераспределением интенсивности рассеяния между магнитными диффузными (56) и ядерными брэгговскими (55) рефлексами. Отсюда получаем, что в области нулевой или малой намагниченности спектр рассеяния определяется лишь магнитными диффузными рефлексами. И наоборот, в пределе больших значений напряженности внешнего магнитного поля и низких температур при намагниченности насыщения магнитное диффузное рассеяние полностью исчезает, а остаются только немодулированные брэгговские рефлексы.

Отметим, что в данном случае условие (18) выполняется для полной КФ (54).

Экстремумы функции магнитного диффузного рассеяния КФ (56) определяются положениями волновых векторов

$$q_0 = \frac{\pi + 2\pi k}{a}, \quad q_1 = \frac{2\pi k}{a}, \quad k \in \mathbb{Z}, \quad (57)$$

с соответствующими амплитудами

$$D(q_0) = (1 - M^2) \frac{1 - \Lambda}{1 + \Lambda}, \quad (58)$$

$$D(q_1) = (1 - M^2) \frac{1 + \Lambda}{1 - \Lambda}. \quad (59)$$

Функции интенсивности функции магнитного диффузного рассеяния КФ (56) в точках экстремума связаны между собой следующим образом:

$$\frac{D(q_0)}{1 - M^2} = \frac{1 - M^2}{D(q_1)}.$$

5.1. Магнитная фазовая диаграмма основного состояния системы

В данном случае при нулевой температуре в модели реализуются два набора возможных спиновых конфигураций, обладающих минимальной энергией. Первый тип конфигураций при $H \leq -2J_1$ характеризуется антиферромагнитным упорядочением неелевского типа и соответствует набору C_{A_2} (31), состоящему из двух чередующихся спиновых последовательностей с равными энергиями

$$E_{A_2} = J_1.$$

Индексное обозначение конфигурации соответствует введенному ранее.

Второй тип конфигураций при $H \geq -2J_1$ характеризуется ферромагнитным упорядочением и соответствует набору

$$C_{F_1} = \left\{ +1 \ +1 \ +1 \ +1 \ +1 \ +1 \ \dots \right\}, \quad (60)$$

состоящему из единственной последовательности (спинов в которой ориентируются вдоль направления внешнего магнитного поля) с энергией

$$E_{F_1} = -(J_1 + H).$$

Для этой конфигурации введем индексное обозначение F1.

Отметим, что конфигурационная спиновая последовательность

$$\left\{ -1 \ -1 \ -1 \ -1 \ -1 \ -1 \ \dots \right\},$$

присутствующая в предыдущем случае (32), здесь уже отсутствует, поскольку ее энергия

$$E = -(J_1 - H)$$

не минимальна при нулевой температуре.

Таким образом, энергия основного состояния системы (30) в данном случае имеет следующий вид:

$$E_0 = \begin{cases} E_{A_2}, & H \leq -2J_1, \\ E_{F_1}, & H \geq -2J_1. \end{cases} \quad (61)$$

Магнитная фазовая диаграмма основного состояния показана на рис. 8.

Согласно функции (61), общая фазовая граница двух представленных спиновых конфигураций (случай, когда $E_{A_2} = E_{F_1}$) при антиферромагнитном параметре обмена спинов цепочки ($J_1 < 0$) соответствует соотношению параметров модели

$$H/|J_1| = 2, \quad (62)$$

при котором происходит перестройка упорядочения основного состояния, и количество конфигураций системы с минимальной энергией больше, чем сумма количеств конфигураций C_{A_2} и C_{F_1} . Это связано с тем, что в момент перемагничивания системы во внешнем магнитном поле (62) в основном состоянии присутствует также бесконечное множество спиновых конфигураций, в том числе и с нарушением трансляционной инвариантности.

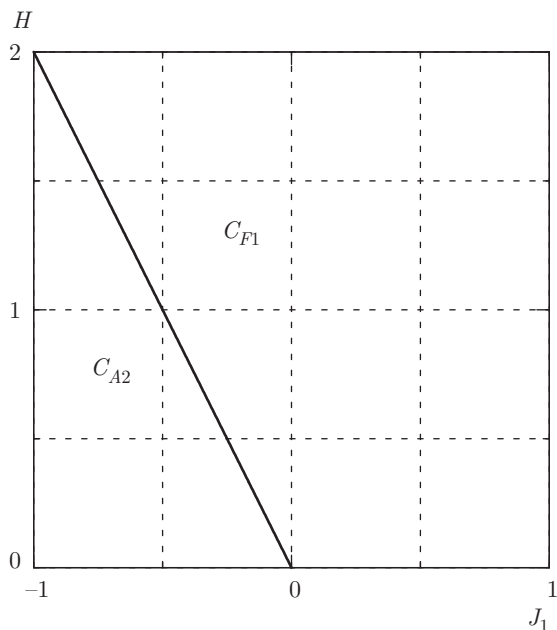


Рис. 8. Магнитная фазовая диаграмма основного состояния изинговской цепочки во внешнем магнитном поле при учете обменного взаимодействия между спинами на узлах ближайших соседей цепочки

5.2. Термодинамика системы в режиме фрустрации

При антиферромагнитном обмене спинов цепочки ($J_1 < 0$) во внешнем магнитном поле (62) и при нулевой температуре энтропия системы имеет ненулевое значение,

$$\lim_{T \rightarrow 0} S \left(\frac{H}{|J_1|} = 2 \right) = \ln \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \approx 0.481, \quad (63)$$

равное натуральному логарифму золотого сечения. Следовательно, согласно условию (34), система в данном режиме фрустрирована, а внешнее магнитное поле (62) является фрустрирующим.

Таким образом, в данном случае именно внешний фактор, а именно, внешнее магнитное поле становится инструментом, формирующим фрустрационный режим в системе.

Поведение энтропии в зависимости от параметров модели представлено на рис. 9.

Получаем, что статистический вес системы в основном состоянии в режиме фрустрации (62) равен золотому сечению,

$$W = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}, \quad (64)$$

а вне этого режима — единице (35), и нуль-температурная энтропия равна нулю (36), как показано на

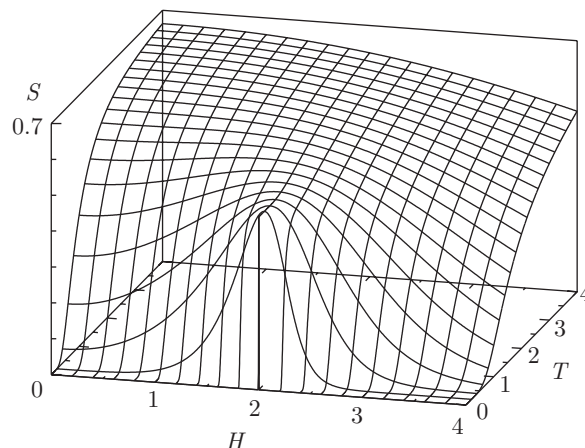


Рис. 9. Энтропия изинговской цепочки (47) с антиферромагнитным обменным взаимодействием между спинами на узлах ближайших соседей ($J_1 = -1$) во внешнем магнитном поле

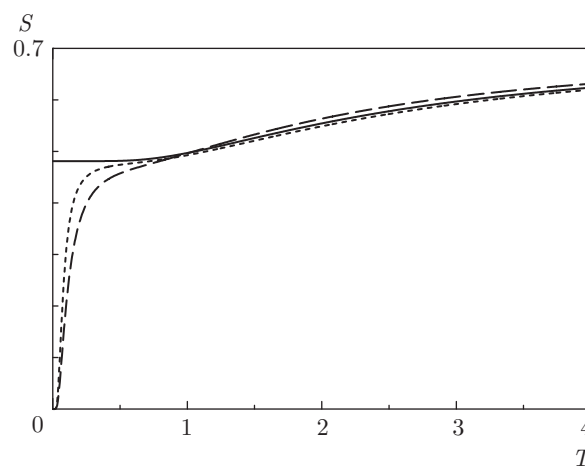


Рис. 10. Энтропия изинговской цепочки (47) с антиферромагнитным обменным взаимодействием между спинами на узлах ближайших соседей ($J_1 = -1$) вблизи фрустрирующего внешнего магнитного поля, где значения параметра $H/|J_1| = \{1.8; 2; 2.1\}$ соответствуют штриховой, сплошной и пунктирной линиям на графике

рис. 10. При бесконечно большой температуре и при любых значениях обменного взаимодействия спинов на узлах ближайших соседей и величины напряженности внешнего магнитного поля энтропия есть натуральный логарифм двойки (37).

Намагниченность системы (50) при антиферромагнитном обменном параметре спинов цепочки ($J_1 < 0$) во фрустрирующем внешнем магнитном поле (62) и нулевой температуре имеет конечное значение, меньшее намагниченности насыщения:

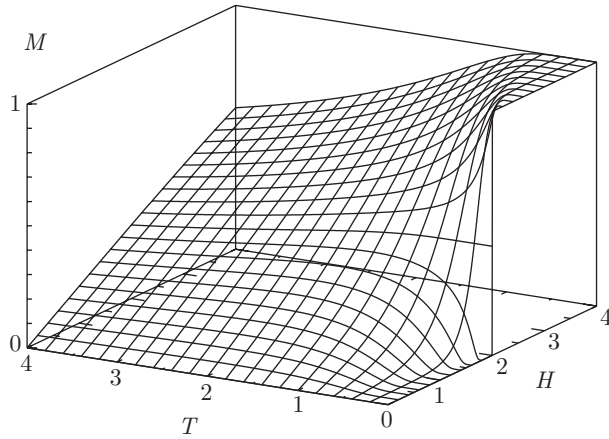


Рис. 11. Намагниченность изинговской цепочки (50) с антиферромагнитным обменным взаимодействием между спинами на узлах ближайших соседей ($J_1 = -1$) во внешнем магнитном поле

$$\lim_{T \rightarrow 0} M(H/|J_1| = 2) = \frac{1}{\sqrt{5}} \approx 0.447.$$

Во внешних магнитных полях, меньших фрустрирующего (62), нуль-температурная намагниченность отсутствует, а в больших магнитных полях демонстрирует насыщение,

$$\lim_{T \rightarrow 0} M(H/|J_1| < 2) = 0, \quad \lim_{T \rightarrow 0} M(H/|J_1| > 2) = 1,$$

как показано на рис. 11. Отсюда следует, что температурная зависимость намагниченности проявляет разные типы поведения во внешних магнитных полях, меньших, равных и больших фрустрирующего магнитного поля (62) (см. рис. 12).

В случае ферромагнитного обмена спинов цепочки ($J_1 > 0$) при конечном внешнем магнитном поле ($H > 0$) намагниченность основного состояния всегда максимальна и равна единице,

$$\lim_{T \rightarrow 0} M(J_1 > 0) = 1.$$

При бесконечно большой температуре и при любом значении обменного взаимодействия спинов на узлах ближайших соседей и величины внешнего магнитного поля намагниченность отсутствует:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} M = 0.$$

Отметим, что выражения для энтропии и намагниченности системы в режиме фрустрации при нулевой температуре для произвольного спина в одномерной модели Изинга с учетом обменного взаимодействия только между спинами на узлах ближайших соседей во внешнем магнитном поле были получены в наших работах [24, 25].

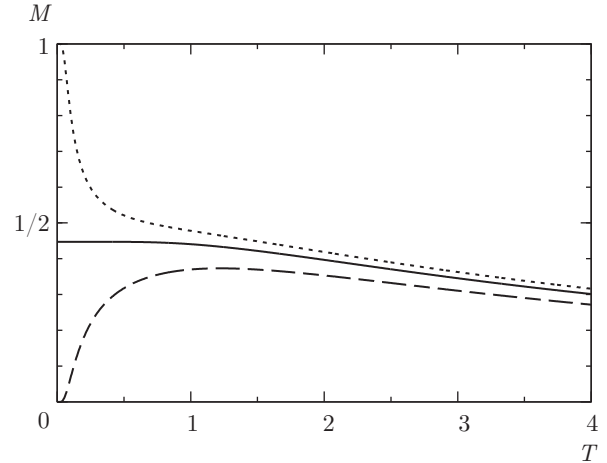


Рис. 12. Намагниченность изинговской цепочки (50) с антиферромагнитным обменным взаимодействием между спинами на узлах ближайших соседей ($J_1 = -1$) вблизи фрустрирующего внешнего магнитного поля (с обозначениями линий в соответствии с рис. 10)

Магнитная восприимчивость (13) при антиферромагнитном обменном параметре спинов цепочки ($J_1 < 0$) и во фрустрирующем внешнем магнитном поле (62) при нулевой температуре стремится к бесконечности:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \chi(H/|J_1| = 2) = \infty,$$

а вне этого поля при нулевой температуре, так же как и в любом другом внешнем магнитном поле при бесконечно большой температуре, восприимчивость равна нулю:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \chi = 0, \quad \lim_{T \rightarrow \infty} \chi = 0,$$

что можно увидеть на рис. 13.

При нулевой и бесконечно большой температурах, а также при любом значении параметра обменного взаимодействия спинов на узлах ближайших соседей и величины напряженности внешнего магнитного поля теплоемкость системы равна нулю (38). В промежуточных значениях температуры функция теплоемкости имеет максимум, а вблизи фрустрирующего внешнего магнитного поля данный пик расщепляется на острый и куполообразный максимумы, как показано на рис. 14. Отметим, что формирующийся при малых температурах острый пик теплоемкости при приближении к фрустрационному магнитному полю исчезает точно в точке фрустраций, а при удалении от нее пропадает уже куполообразный максимум. Таким образом, в точке фрустрации теплоемкость имеет один размытый ку-

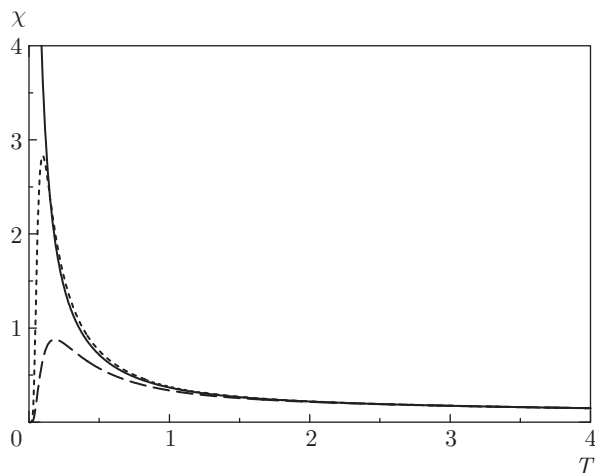


Рис. 13. Магнитная восприимчивость изинговской цепочки (51) с антиферромагнитным обменным взаимодействием между спинами на узлах ближайших соседей ($J_1 = -1$) вблизи фрустрирующего внешнего магнитного поля (с обозначениями линий в соответствии с рис. 10)

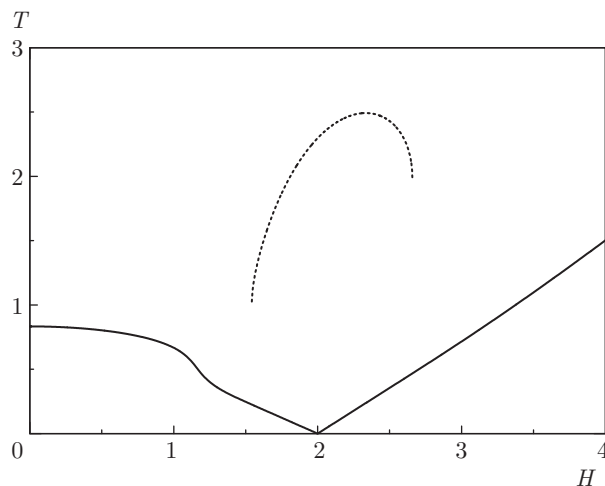


Рис. 15. Положение пиков теплоемкости изинговской цепочки (48) с антиферромагнитным обменным взаимодействием между спинами на узлах ближайших соседей ($J_1 = -1$) во внешнем магнитном поле

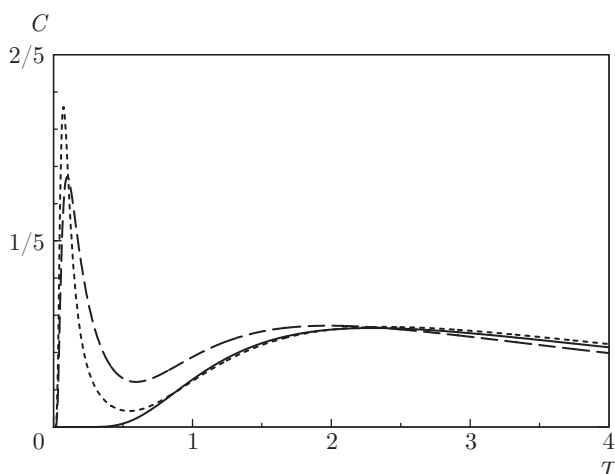


Рис. 14. Теплоемкость изинговской цепочки (48) с антиферромагнитным обменным взаимодействием между спинами на узлах ближайших соседей ($J_1 = -1$) вблизи фрустрирующего внешнего магнитного поля (с обозначениями линий в соответствии с рис. 10)

полообразный пик. Ход максимумов теплоемкости приведен на рис. 15.

Описанные здесь поведения магнитного вклада теплоемкости и магнитной восприимчивости во внешнем магнитном поле наблюдаются в реальных кристаллах, например, в антиферромагнетиках на основе редкоземельных металлов [6, 26–31] или соединений актиноидов [32].

5.3. Поведение функции магнитного диффузного рассеяния

В случае антиферромагнитного параметра обмена спинов цепочки ($J_1 < 0$) знак приведенного корня (53) всегда отрицателен и поэтому, согласно решениям (57), получаем соответствующие значения волнового вектора для положений максимумов,

$$q_0^A = q_0, \tag{65}$$

и минимумов

$$q_1^A = q_1$$

функции магнитного диффузного рассеяния КФ (56).

Также легко видеть, что амплитуда максимумов функции магнитного диффузного рассеяния КФ определяется выражением (58), где

$$D(q_0^A) = D(q_0), \tag{66}$$

а амплитуда минимумов задается функцией (59) как

$$D(q_1^A) = D(q_1). \tag{67}$$

Так, при любом значении обменного параметра спинов цепочки, величины напряженности внешнего магнитного поля и при бесконечно большой температуре магнитное диффузное рассеяние однородно, т. е. амплитуды максимумов и минимумов функции магнитного диффузного рассеяния КФ (56) совпадают и равны единице,

$$\lim_{T \rightarrow \infty} D(q_0^A) = \lim_{T \rightarrow \infty} D(q_1^A) = 1.$$

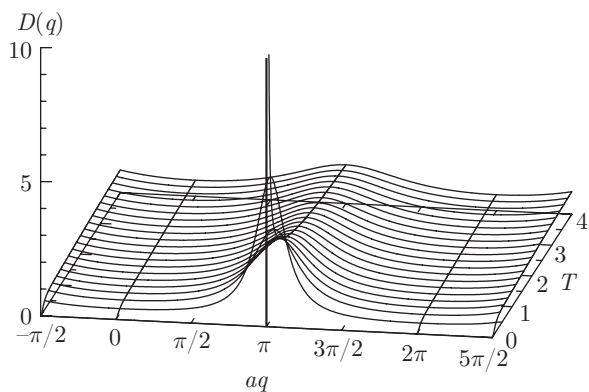


Рис. 16. Функция магнитного диффузного рассеяния КФ изинговской цепочки (56) с антиферромагнитным обменным взаимодействием между спинами на узлах ближайших соседей ($J_1 = -1$) во внешнем магнитном поле ($H/|J_1| = 1.8$) вблизи режима фрустрации

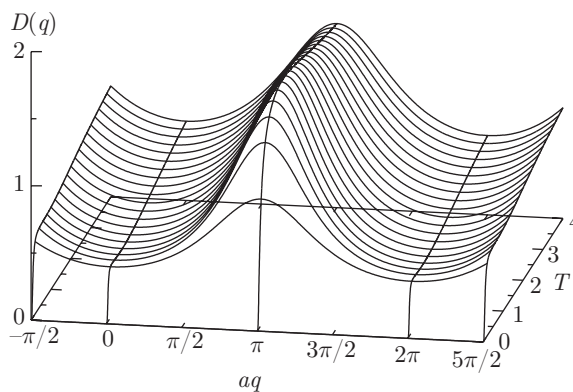


Рис. 18. Функция магнитного диффузного рассеяния КФ изинговской цепочки (56) с антиферромагнитным обменным взаимодействием между спинами на узлах ближайших соседей ($J_1 = -1$) во внешнем магнитном поле ($H/|J_1| = 2.1$) вблизи режима фрустрации

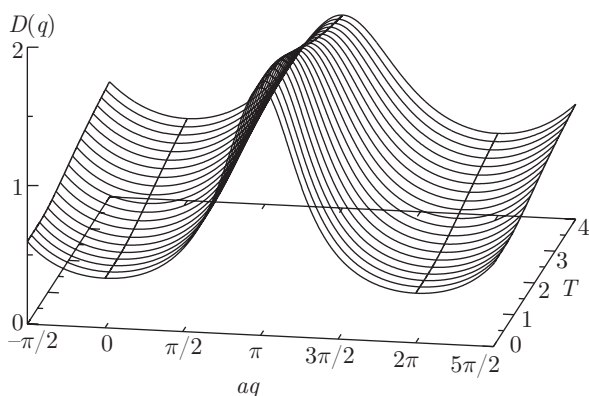


Рис. 17. Функция магнитного диффузного рассеяния КФ изинговской цепочки (56) с антиферромагнитным обменным взаимодействием между спинами на узлах ближайших соседей ($J_1 = -1$) во внешнем магнитном поле ($H/|J_1| = 2$) в режиме фрустрации

При понижении температуры рассеяние концентрируется в положениях q_0^A (65), т. е. точно посередине между брэгговскими пиками (43).

Здесь следует отметить, что картина рассеяния существенно зависит от величины внешнего магнитного поля. Так, в магнитном поле, меньшем, равном и большем поля фрустрации системы (62), поведение функции рассеяния различно, как показано на рис. 16, 17, 18, а поведение интенсивности функции магнитного диффузного рассеяния КФ показано на рис. 19, 20.

При нулевой температуре во внешних магнитных полях, меньших фрустрирующего, когда реализуется конфигурация с антиферромагнитным упорядочением неелевского типа (31), функция магнитного диффузного рассеяния КФ имеет вид дельта-функции, т. е.

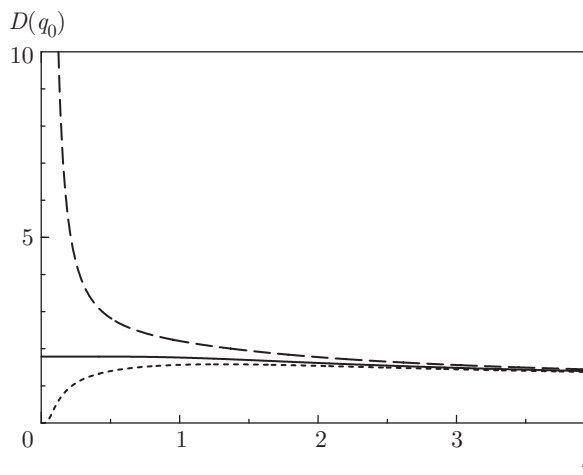


Рис. 19. Температурное поведение амплитуды максимумов функции магнитного диффузного рассеяния КФ изинговской цепочки (66) с антиферромагнитным обменным взаимодействием между спинами на узлах ближайших соседей ($J_1 = -1$) вблизи фрустрирующего внешнего магнитного поля (с обозначениями линий в соответствии с рис. 10)

$$\lim_{T \rightarrow 0} D(q_0^A, H/|J_1| < 2) = \infty,$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} D(q_1^A, H/|J_1| < 2) = 0.$$

В магнитных полях, больших фрустрирующих, когда основное состояние характеризуется единственной ферромагнитной конфигурацией (60), интенсивность магнитного диффузного рассеяния при нулевой температуре отсутствует:

$$\lim_{T \rightarrow 0} D(q_0^A, H/|J_1| > 2) = \lim_{T \rightarrow 0} D(q_1^A, H/|J_1| > 2) = 0,$$

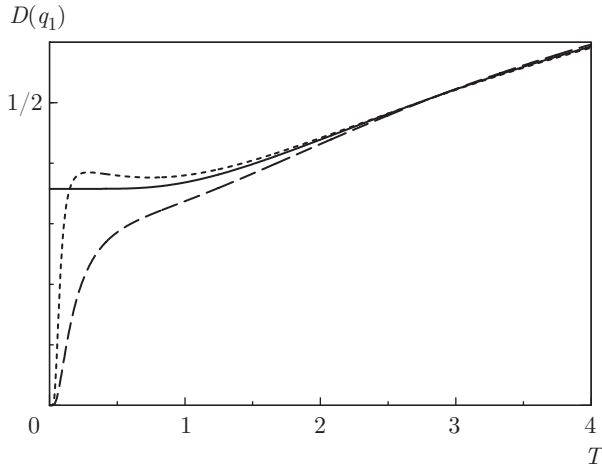


Рис. 20. Температурное поведение амплитуды минимумов функции магнитного диффузного рассеяния КФ изинговской цепочки (67) с антиферромагнитным обменным взаимодействием между спинами на узлах ближайших соседей ($J_1 = -1$) вблизи фрустрирующего внешнего магнитного поля (с обозначениями линий в соответствии с рис. 10)

а в промежуточных температурах функция имеет максимум, как показано на рис. 18, 19.

Во фрустрирующем внешнем магнитном поле (62) при нулевой температуре амплитуды максимумов (66) и минимумов (67) функции (56) имеют соответствующие конечные значения:

$$\lim_{T \rightarrow 0} D \left(q_0^A, \frac{H}{|J_1|} = 2 \right) = \frac{4}{\sqrt{5}} \approx 1.789,$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} D \left(q_1^A, \frac{H}{|J_1|} = 2 \right) = \frac{4}{5\sqrt{5}} \approx 0.358.$$

Таким образом, в рассматриваемом фрустрационном режиме происходит перестройка основного состояния, когда статистический вес конфигураций больше единицы ($W > 1$), и помимо антиферромагнитных (31) и ферромагнитных (60) конфигураций имеют минимальную энергию и другие конфигурации, в том числе и не обладающие трансляционной инвариантностью.

В конце следует сказать, что изинговский парамагнетик при отсутствии обменного взаимодействия спинов на узлах ближайших соседей ($J_1 = 0$) во внешнем магнитном поле ($H > 0$) в основном состоянии ($T = 0$) характеризуется лишь одной конфигурацией C_{F1} (60), в которой спины цепочки сорентированы вдоль направления внешнего магнитного поля, поэтому энтропия и намагниченность системы соответственно равны

$$\lim_{T \rightarrow 0} S(J_1 = 0, H > 0) = 0,$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} M(J_1 = 0, H > 0) = 1.$$

В рассматриваемой области значений параметров модели искомым фрустрированным состоянием нет.

Сами термодинамические функции системы имеют чрезвычайно простой вид. Так, энтропия (47), теплоемкость (48), намагниченность (50) и магнитная восприимчивость (51) системы соответственно переписываются к виду

$$S(J_1 = 0) = \ln(2 \operatorname{ch} B) - B \operatorname{th} B,$$

$$C(J_1 = 0) = \left(\frac{B}{\operatorname{ch} B} \right)^2,$$

$$M(J_1 = 0) = \operatorname{th} B, \quad \chi(J_1 = 0) = \frac{1}{T \operatorname{ch}^2 B}.$$

Отметим, что в рассматриваемом случае выражения для энтропии и теплоемкости системы соответственно совпадают с функциями (21) и (22) при замене $K_1 \Rightarrow B$.

Функция магнитного диффузного рассеяния КФ (56) здесь может быть представлена как

$$D(q, J_1 = 0) = 1 - M^2 = \frac{1}{\operatorname{ch}^2 B}, \quad (68)$$

поскольку приведенный корень (53) равен нулю. Таким образом, функция (68) не имеет пиков (как в случае функции (56)) и не константа во всем диапазоне своих значений (как в случае функции (44)), а описывает диффузный фон, пропорциональный величине $1 - M^2$.

6. ФРУСТРАЦИИ НА ИЗИНГОВСКОЙ ЦЕПОЧКЕ С УЧЕТОМ ОБМЕННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ СПИНОВ НА УЗЛАХ ПЕРВЫХ И ВТОРЫХ СОСЕДЕЙ

Теперь найдем характеристики модели Изинга при учете обменных взаимодействий между спинами на узлах первых и вторых соседей. В этом случае гамильтониан (1) записывается в виде

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_n \sigma_n \sigma_{n+1} - J_2 \sum_n \sigma_n \sigma_{n+2}.$$

Здесь следует отметить, что первое успешное точное решение одномерной модели Изинга с обменными взаимодействиями спинов на узлах первых и вторых соседей принадлежит Джону Стефенсону [33]. Его решение опиралось на формальный прием Добсона [34], который не позволяет получить решение модели во внешнем магнитном поле с учетом обменных взаимодействий спинов на узлах первых и вторых соседей. В своем решении мы не будем использовать алгоритм Стефенсона.

В данном случае элементы трансфер-матрицы (5) задаются выражением

$$V_{\sigma\sigma',\sigma''\sigma'''} = \langle \sigma\sigma' | e^{K_1\sigma\sigma' + K_2\sigma''\sigma'''} | \sigma''\sigma''' \rangle = e^{K_1\sigma\sigma' + K_2\sigma''\sigma'''} \delta_{\sigma'\sigma''}, \quad (69)$$

где $\delta_{\sigma'\sigma''}$ — символ Кронекера. Размерность трансфер-матрицы равна $d = 4$ (6), а сама матрица определяется как

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} e^{K_1+K_2} & e^{K_1-K_2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-K_1+K_2} & e^{-K_1-K_2} \\ e^{-K_1-K_2} & e^{-K_1+K_2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{K_1-K_2} & e^{K_1+K_2} \end{pmatrix}. \quad (71)$$

Отметим, что впервые данная матрица была получена Такехико Огучи [35].

Найденная трансфер-матрица (71) имеет следующий набор собственных значений:

$$\lambda_{1,2} = e^{K_2} \left(\operatorname{ch} K_1 \pm \sqrt{\operatorname{sh}^2 K_1 + e^{-4K_2}} \right), \quad (72)$$

$$\lambda_{3,4} = e^{K_2} \left(\operatorname{sh} K_1 \pm \sqrt{\operatorname{ch}^2 K_1 - e^{-4K_2}} \right).$$

Как отмечалось ранее, первый корень (72) — главное собственное значение трансфер-матрицы (71).

Теперь можно записать термодинамические функции системы, выраженные через собственные значения трансфер-матрицы. Таким образом, энтропия системы (10) имеет вид

$$S = \ln \lambda_1 - \frac{\lambda_3 + \lambda_4}{\lambda_1 - \lambda_2} \ln \psi_0 - 2 \left(\lambda_1 - \psi_0 - \frac{2}{\lambda_1 \psi_1^2} \right) \frac{\ln \psi_1}{\lambda_1 - \lambda_2}, \quad (73)$$

а теплоемкость (11) —

$$C = 2 \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} \left(\frac{2}{\lambda_1 - \lambda_2} \frac{\ln \psi_1}{\psi_1} \right)^2 + 2 \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} \left(\frac{2}{\lambda_1 - \lambda_2} \frac{1}{\lambda_1} \frac{\ln \psi_1}{\psi_1} \right)^2 (\lambda_2^2 - 2\psi_1^2) + \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} \left(\frac{2}{\lambda_1 - \lambda_2} \frac{1}{\psi_1} \ln \frac{\psi_0}{\psi_1} \right)^2 + \frac{\lambda_3 + \lambda_4}{\lambda_1 - \lambda_2} \left(\frac{2}{\lambda_1 - \lambda_2} \frac{2}{\psi_1} \right)^2 \ln \psi_1 \ln \frac{\psi_0}{\psi_1} + 2 \left(\frac{2}{\lambda_1 - \lambda_2} \frac{\lambda_3 + \lambda_4}{\lambda_1} \frac{\ln \psi_1}{\psi_1} \right)^2, \quad (74)$$

$\mathbf{V} =$

$$= \begin{pmatrix} V_{++,++} & V_{++,+-} & V_{++, -+} & V_{++, --} \\ V_{+-,++} & V_{+-,+-} & V_{+-, -+} & V_{+-, --} \\ V_{-+,++} & V_{-+,+-} & V_{-+, -+} & V_{-+, --} \\ V_{--,++} & V_{--,+-} & V_{--, -+} & V_{--, --} \end{pmatrix}, \quad (70)$$

поэтому, подставив сюда значения функции (69), выйдем явный вид трансфер-матрицы:

где

$$\psi_0 = \frac{\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + \lambda_4}{2},$$

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{\lambda_1 \lambda_2 + \sqrt{\lambda_1^2 \lambda_2^2 + 4}}{2}}.$$

При следующем выборе диагонализующей матрицы —

$$\mathbf{P} = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} p_1 & p_2 & -p_6 & -p_6 \\ p_5 & p_5 & p_3 & p_4 \\ p_5 & p_5 & -p_3 & -p_4 \\ p_1 & p_2 & p_6 & p_6 \end{pmatrix},$$

$$p_1 = \frac{\lambda_1 - \lambda_2 + \lambda_3 + \lambda_4}{2}, \quad p_2 = -\frac{\lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4}{2},$$

$$p_3 = \frac{\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda_3 + \lambda_4}{2}, \quad p_4 = \frac{\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 - \lambda_4}{2},$$

$$p_5 = \frac{2}{\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + \lambda_4}, \quad p_6 = \frac{2}{\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4}$$

— диагонализированная трансфер-матрица (7) имеет вид

$$\tilde{\mathbf{V}} = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{V} \mathbf{P} = \operatorname{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4).$$

Проекционная матрица в данном случае определяется через прямое произведение (произведение Кронекера) единичной матрицы и матрицы (23) как

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \operatorname{diag}(1, 1, -1, -1).$$

Отметим, что умножение на единичную матрицу справа дает для КФ тот же результат.

В свою очередь, матрица (17) может быть записана в виде

$$\tilde{\sigma} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & s_1 & s_2 \\ 0 & 0 & s_3 & s_4 \\ s_5 & s_6 & 0 & 0 \\ s_7 & s_8 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

где

$$\begin{aligned} s_1 &= [(\lambda_1 - \lambda_3)^2 - (\lambda_2 + \lambda_4)^2]f_1 + f_2, \\ s_2 &= [(\lambda_1 - \lambda_4)^2 - (\lambda_2 + \lambda_3)^2]f_1 + f_2, \\ s_3 &= [(\lambda_1 + \lambda_4)^2 - (\lambda_2 - \lambda_3)^2]f_1 - f_2, \\ s_4 &= [(\lambda_1 + \lambda_3)^2 - (\lambda_2 - \lambda_4)^2]f_1 - f_2, \\ f_1 &= \frac{\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + \lambda_4}{2^3} \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2}, \\ f_2 &= -\frac{2}{\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4} \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2}. \end{aligned}$$

Оставшиеся коэффициенты матрицы можно получить из соотношений

$$s_1 s_5 = s_4 s_8 = \Upsilon_3, \quad s_2 s_7 = s_3 s_6 = \Upsilon_4,$$

где

$$\Upsilon_3 + \Upsilon_4 = 1, \quad \Upsilon_3 - \Upsilon_4 = \frac{(\lambda_1 + \lambda_2)(\lambda_3 + \lambda_4)}{(\lambda_1 - \lambda_2)(\lambda_3 - \lambda_4)}.$$

Теперь распишем функцию (16)

$$\begin{aligned} \kappa_u &= \frac{\Upsilon_3 \Lambda_3^u + \Upsilon_4 \Lambda_4^u}{1 + \Lambda_2^N + \Lambda_3^N + \Lambda_4^N} + \\ &+ \Upsilon_3 \frac{\Lambda_3^N \Lambda_3^{-u} + \Lambda_2^N \Lambda_4^u \Lambda_2^{-u} + \Lambda_4^N \Lambda_2^u \Lambda_4^{-u}}{1 + \Lambda_2^N + \Lambda_3^N + \Lambda_4^N} + \\ &+ \Upsilon_4 \frac{\Lambda_4^N \Lambda_4^{-u} + \Lambda_2^N \Lambda_3^u \Lambda_2^{-u} + \Lambda_3^N \Lambda_2^u \Lambda_3^{-u}}{1 + \Lambda_2^N + \Lambda_3^N + \Lambda_4^N}, \end{aligned} \quad (75)$$

где

$$\Lambda_i = \frac{\lambda_i}{\lambda_1}, \quad i = 2, 3, 4, \quad \Lambda_2 = -\Lambda_3 \Lambda_4.$$

В термодинамическом пределе функция (75) приобретает следующий вид:

$$\kappa_u = \Upsilon_3 \Lambda_3^u + \Upsilon_4 \Lambda_4^u, \quad (76)$$

$$\Upsilon_3 - \Upsilon_4 = \frac{(1 - \Lambda_3 \Lambda_4)(\Lambda_3 + \Lambda_4)}{(1 + \Lambda_3 \Lambda_4)(\Lambda_3 - \Lambda_4)}.$$

Теперь, подставив функцию (76) в выражение для КФ (15), получим

$$K(q) = \sum_{i=3}^4 \Upsilon_i \frac{1 - \Lambda_i^2}{1 - 2\Lambda_i \cos(qa) + \Lambda_i^2}. \quad (77)$$

Далее, приведя к общему знаменателю сумму в формуле (77), выпишем окончательный вид КФ

$$\begin{aligned} K(q) &= \\ &= \frac{(1 - \Lambda_3^2)(1 - \Lambda_4^2) \frac{1 - \Lambda_3 \Lambda_4}{1 + \Lambda_3 \Lambda_4}}{(1 - 2\Lambda_3 \cos(qa) + \Lambda_3^2)(1 - 2\Lambda_4 \cos(qa) + \Lambda_4^2)}. \end{aligned} \quad (78)$$

Отметим, что в числителе функции (78) коэффициент при $\cos(qa)$ равен нулю.

Полученное выражение для КФ (78) описывает магнитное диффузное рассеяние на спиновой цепочке. Условие (18) для КФ (78) здесь также выполняется.

Положения экстремумов КФ (78) задаются уже тремя значениями векторов в пространстве рассеяния. Первый волновой вектор равен

$$q_0 = \frac{1}{a} \text{Re}(\arccos X) \pm \frac{2\pi k}{a}, \quad k \in \mathbb{Z}, \quad (79)$$

$$\begin{aligned} X &= \frac{1}{4} \left(\Lambda_3 + \frac{1}{\Lambda_3} + \Lambda_4 + \frac{1}{\Lambda_4} \right) = \\ &= -\frac{1}{2} \frac{\text{sh} K_1}{\text{sh}(2K_2)} e^{2K_2} \sqrt{\text{sh}^2 K_1 + e^{-4K_2}}, \end{aligned} \quad (80)$$

а второй и третий векторы определяются как

$$q_1 = \frac{\pi + 2\pi k}{a}, \quad q_2 = \frac{2\pi k}{a}, \quad k \in \mathbb{Z}. \quad (81)$$

Амплитуда экстремумов КФ (78) в положениях волновых векторов (79) задается функцией

$$K(q_0) = -4 \frac{\Lambda_3(1 - \Lambda_3^2)\Lambda_4(1 - \Lambda_4^2)}{(\Lambda_3 - \Lambda_4)^2(1 - \Lambda_3^2\Lambda_4^2)}, \quad (82)$$

а в положениях (81) соответственно

$$K(q_1) = \frac{2}{1 + \Lambda_3} + \frac{2}{1 + \Lambda_4} - \frac{2}{1 + \Lambda_3 \Lambda_4} - 1, \quad (83)$$

$$K(q_2) = \frac{2}{1 - \Lambda_3} + \frac{2}{1 - \Lambda_4} - \frac{2}{1 + \Lambda_3 \Lambda_4} - 1. \quad (84)$$

Отметим, что свойства четности гиперболических функций определяют нам симметрию собственных значений трансфер-матрицы относительно изменения знака параметра обмена между спинами на узлах ближайших соседей:

$$\lambda_1(-J_1) = \lambda_1(J_1), \quad \lambda_3(-J_1) = -\lambda_4(J_1).$$

Отсюда легко выписать свойства симметрии функций интенсивности КФ из выражений (82):

$$K(q_0, -J_1) = K(q_0, J_1),$$

а также из (83) и (84):

$$K(q_1, -J_1) = K(q_2, J_1).$$

6.1. Магнитная фазовая диаграмма основного состояния системы

В данном случае при нулевой температуре реализуются три набора возможных спиновых конфигурации, обладающих минимальной энергией. Первый тип конфигураций (при $J_1 < 0$ и $J_2 \geq J_1/2$) характеризуется антиферромагнитным упорядочением неелевского типа C_{A2} (31) с энергией

$$E_{A2} = J_1 - J_2.$$

Индексное обозначение конфигурации соответствует введенному ранее.

Второй тип (при $J_2 \leq 0$, $J_2 \leq J_1/2$ и $J_2 \leq -J_1/2$) определяется также антиферромагнитным упорядочением, но с учетверением периода,

$$C_{A4} = \left\{ \begin{array}{cccccc} +1 & +1 & -1 & -1 & +1 & +1 & \dots \\ +1 & -1 & -1 & +1 & +1 & -1 & \dots \\ -1 & +1 & +1 & -1 & -1 & +1 & \dots \\ -1 & -1 & +1 & +1 & -1 & -1 & \dots \end{array} \right\}, \quad (85)$$

и состоит из четырех вариантов спиновых последовательностей с равными энергиями (обозначение конфигурации — A4), с энергией

$$E_{A4} = J_2.$$

Третий тип (при $J_1 > 0$ и $J_2 \geq -J_1/2$) определяется ферромагнитным упорядочением C_{F2} (32) с энергией

$$E_{F2} = -(J_1 + J_2).$$

Таким образом, энергия основного состояния системы (30) в данном случае записывается в виде

$$E_0 = \begin{cases} E_{A2}, & J_1 < 0 \wedge J_2 \geq J_1/2, \\ E_{A4}, & J_2 \leq 0 \wedge J_2 \leq J_1/2 \wedge J_2 \leq -J_1/2, \\ E_{F2}, & J_1 > 0 \wedge J_2 \geq -J_1/2. \end{cases}$$

Отсюда следует, что при следующих соотношениях обменных параметров спинов цепочки в модели —

$$J_1 = \begin{cases} 2J_2, & J_1 < 0 \wedge J_2 \leq 0, \\ -2J_2, & J_1 > 0 \wedge J_2 \leq 0, \\ 0, & J_2 \geq 0 \end{cases}$$

— происходит перестройка спиновой конфигурации основного состояния, как показано на магнитной фазовой диаграмме модели на рис. 21.

При антиферромагнитном обменном параметре между спинами на узлах вторых соседей ($J_2 < 0$) в точках фазовой диаграммы

$$J_1 = \pm 2J_2 \quad (86)$$

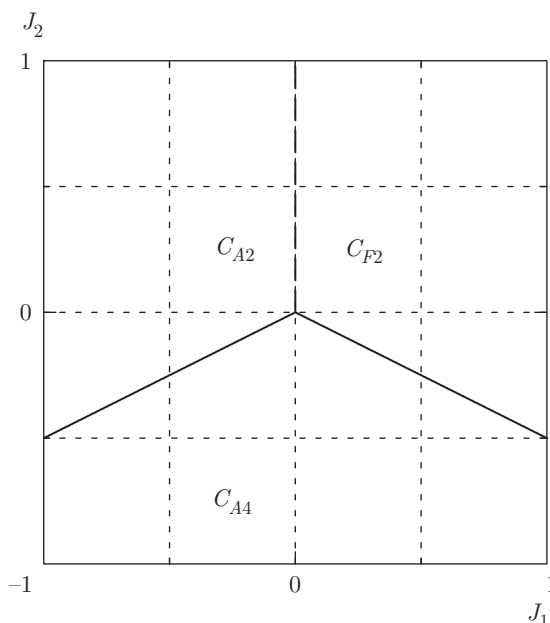


Рис. 21. Магнитная фазовая диаграмма основного состояния изинговской цепочки с учетом обменного взаимодействия между спинами на узлах первых и вторых соседей цепочки

количество конфигураций системы с минимальной энергией больше, чем сумма количеств конфигураций C_{A4} и C_{A2} , а также C_{A4} и C_{F2} . Как уже отмечалось ранее, такое состояние системы при нулевой температуре связано с перестройкой магнитной структуры и возникновением бесконечного множества спиновых конфигураций, в том числе и с нарушением трансляционной инвариантности.

Видно, что магнитная фазовая диаграмма основного состояния модели (см. рис. 21) содержит четыре варианта отношений параметров обменных взаимодействий между спинами на узлах первых и вторых соседей изинговской цепочки:

$$(J_1 > 0, J_2 > 0), \quad (J_1 < 0, J_2 > 0), \quad (87)$$

$$(J_1 > 0, J_2 < 0), \quad (J_1 < 0, J_2 < 0). \quad (88)$$

Только два последних случая (88) описывают систему с конкурирующими обменными взаимодействиями. Именно в этих двух квадрантах магнитной фазовой диаграммы (рис. 21) с антиферро-антиферромагнитным (AA: $J_1 < 0$ и $J_2 < 0$) и ферро-антиферромагнитным (FA: $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$) вариантами параметров обменных взаимодействий между спинами на узлах первых и вторых соседей существуют фрустрации.

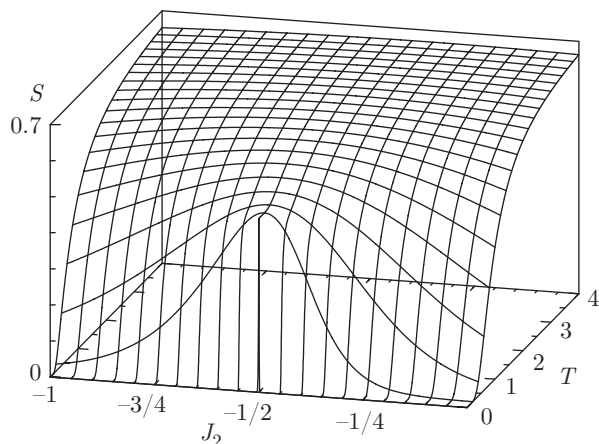


Рис. 22. Энтропия изинговской цепочки (73) с конкурирующими обменными взаимодействиями между спинами на узлах первых и вторых соседей ($|J_1| = 1, J_2/|J_1| < 0$)

6.2. Термодинамика системы в режиме фрустрации

В системе с конкурирующими обменными взаимодействиями спинов на узлах первых и вторых соседей (88) и при соотношении обменных параметров спинов цепочки (86), когда

$$J_2/|J_1| = -1/2, \tag{89}$$

нуль-температурная энтропия (10) не равна нулю:

$$\lim_{T \rightarrow 0} S \left(\frac{J_2}{|J_1|} = -\frac{1}{2} \right) = \ln \frac{1 + \sqrt{5}}{2}, \tag{90}$$

а равна натуральному логарифму золотого сечения. Следовательно, система в данном состоянии фрустрирована.

Поведение энтропии в зависимости от параметров модели показано на рис. 22.

Данная ситуация аналогична предыдущему случаю (63), когда в режиме фрустрации при нулевой температуре статистический вес системы равен золотому сечению (64). Вне режима фрустрации статистический вес равен единице, а нуль-температурная энтропия — нулю (36). Также при любых соотношениях обменных параметров спинов цепочки и бесконечно большой температуре энтропия равна натуральному логарифму двух (37). На рис. 23 показана эволюция энтропии системы в окрестности существования режима фрустрации.

Следует обратить внимание на то, что в данном случае именно пространственное расположение атомных спинов и знаки параметров обменов между спинами на узлах первых и вторых соседей, приводящие к конкуренции обменных взаимодействий,

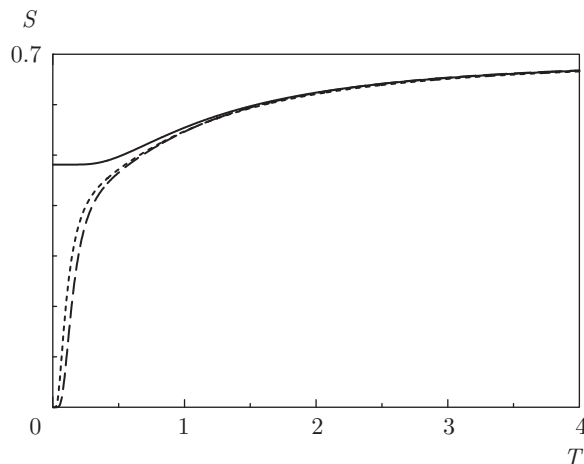


Рис. 23. Энтропия изинговской цепочки (73) в случае конкурирующих обменных взаимодействий между спинами на узлах первых и вторых соседей вблизи точки фрустрации системы, где значения параметров $|J_1| = 1, J_2/|J_1| = \{-2/5; -1/2; -3/5\}$ соответствуют штриховой, сплошной и пунктирной линиям на графике

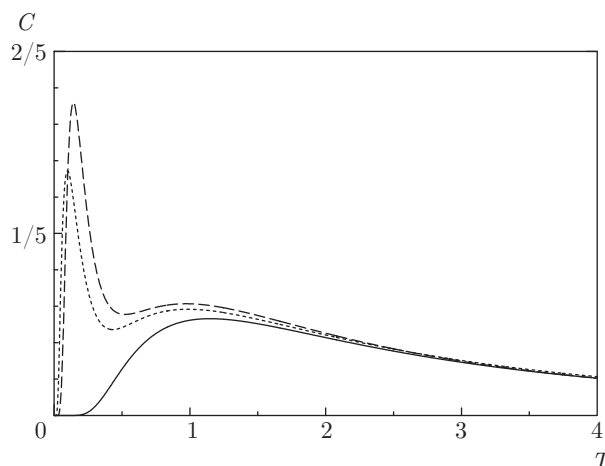


Рис. 24. Теплоемкость изинговской цепочки (74) в случае конкурирующих обменных взаимодействий между спинами на узлах первых и вторых соседей вблизи точки фрустрации системы (с обозначениями линий в соответствии с рис. 23)

формируют режим так называемых геометрических фрустраций.

Отметим, что выражения для энтропии системы в режиме фрустрации при нулевой температуре для произвольного спина в одномерной модели Изинга с учетом обменных взаимодействий спинов на узлах первых и вторых соседей получены в наших работах [25, 36].

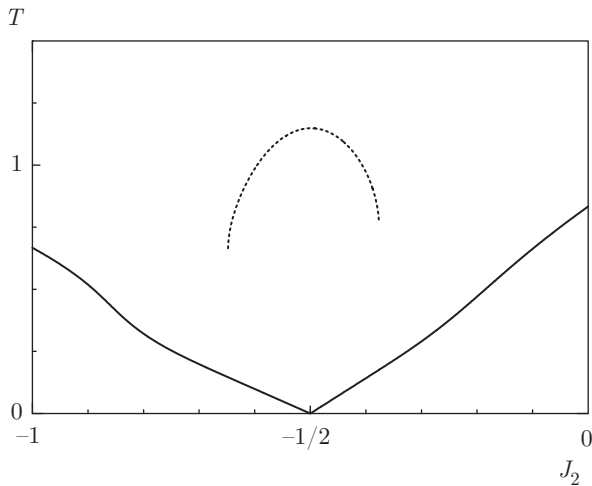


Рис. 25. Положение пиков теплоемкости изинговской цепочки (74) в случае конкурирующих обменных взаимодействий между спинами на узлах первых и вторых соседей ($|J_1| = 1, J_2/|J_1| < 0$) вблизи точки фрустрации системы

При нулевой и бесконечно большой температурах и при любых соотношениях параметров обмена спинов цепочки теплоемкость системы равна нулю (38). В промежуточных же значениях по температуре теплоемкость имеет пик, а вблизи фрустрированного положения данный пик расщепляется на острый и куполообразный максимумы, как показано на рис. 24. При приближении к точке фрустрации (89) максимумы теплоемкости расходятся, и в самой точке фрустрации острый пик исчезает, а при удалении от данной точки пропадает уже куполообразный максимум. Поведение пиков теплоемкости продемонстрировано на рис. 25.

Следует заметить, что в режиме конкуренции обменных взаимодействий спинов в системе (88) поведение энтропии (73) и теплоемкости (74) симметрично относительно замены $J_1 \Rightarrow -J_1$, как показано на рис. 23 и 24.

Описанное выше расщепление пика на температурной эволюции магнитного вклада в теплоемкость наблюдается в реальных антиферромагнетиках на основе редкоземельных металлов [6, 30, 37–39], а также соединений актиноидов [32].

6.3. Поведение функции магнитного диффузного рассеяния

При конкурирующих обменных взаимодействиях спинов на узлах первых и вторых соседей (88) функция магнитного диффузного рассеяния КФ (78) обладает более сложной структурой по срав-

нению с предыдущими случаями и имеет максимумы интенсивности для антиферро-антиферромагнитного и ферро-антиферромагнитного вариантов параметров обмена в положениях вектора рассеяния (79), т. е.

$$q_0^{AA} = q_0, \quad q_0^{FA} = q_0, \quad (91)$$

а положения минимумов данной функции определяются уже соответствующими условиями для волнового вектора (81):

$$q_1^{AA} = q_1, \quad q_2^{AA} = q_2 \quad (92)$$

и

$$q_1^{FA} = q_2, \quad q_2^{FA} = q_1. \quad (93)$$

Следовательно, амплитуда максимумов КФ (78) в положениях (91) задается выражением (82), т. е.

$$K(q_0^{AA}) = K(q_0), \quad K(q_0^{FA}) = K(q_0), \quad (94)$$

а амплитуды минимумов в положениях (92) уже определяются выражениями (83) и (84):

$$K(q_1^{AA}) = K(q_1), \quad K(q_2^{AA}) = K(q_2), \quad (95)$$

$$K(q_1^{FA}) = K(q_2), \quad K(q_2^{FA}) = K(q_1). \quad (96)$$

Следует отметить, что в случаях антиферро-антиферромагнитного и ферро-антиферромагнитного вариантов параметров обменных взаимодействий спинов на узлах первых и вторых соседей функции магнитного диффузного рассеяния изинговской цепочки (78) по форме одинаковы, но различаются лишь тем, что соответствующие положения максимумов и минимумов сдвинуты на половину периода, т. е. на величину (π/a) .

Таким образом, при слабом обменном взаимодействии спинов цепочки на узлах вторых соседей,

$$-1/4 \leq J_2/|J_1| < 0,$$

поведение магнитного диффузного рассеяния КФ (78) (см. рис. 26) качественно не отличается от ранее рассмотренного антиферромагнитного случая (см. рис. 5).

При соотношении обменных параметров спинов цепочки

$$J_2/|J_1| < -1/4$$

температурная эволюция функции магнитного диффузного рассеяния КФ (78) демонстрирует существование максимумов в несоразмерных положениях (91), как показано на рис. 27. В данном случае возникновение несоразмерных структур обусловлено конкуренцией обменных взаимодействий между

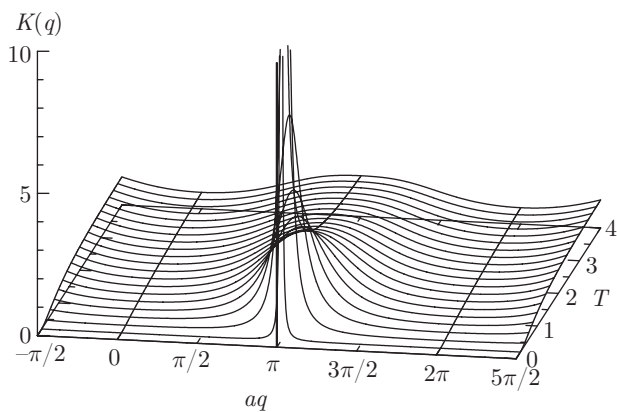


Рис. 26. КФ изинговской цепочки (78) с антиферро-антиферромагнитным вариантом параметров обменных взаимодействий спинов цепочки ($J_1 = -1, J_2/|J_1| = -1/5$)

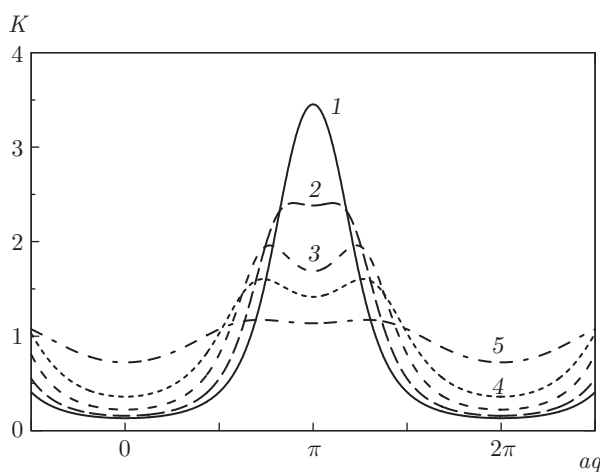


Рис. 27. КФ изинговской цепочки (78) с антиферро-антиферромагнитным вариантом параметров обменных взаимодействий спинов цепочки ($J_1 = -1, J_2/|J_1| = -2/5$) при различных температурах ($T = 1/3, 1/2, 1, 2, 8$), указанных в соответствии с нумерацией линий на графике

спинами на узлах первых и вторых соседей в рассматриваемой одномерной спиновой системе.

Поведение волнового вектора несоразмерных пиков (91) определяется двумя ветвями, где первая ветвь задается выражением (91), а вторая —

$$q_0^{AA} = 2\pi/a - q_0, \quad q_0^{FA} = 2\pi/a - q_0. \quad (97)$$

Эволюция ветвей рассматриваемого вектора рассеяния показана на рис. 28.

Здесь следует обратить внимание на то, что функция (79), определяющая температурную эволюцию волнового вектора для любых величин и знаков параметров обменных взаимодействий спинов цепочки, имеет важное значение и позволяет анализировать как соразмерные, так и несоразмерные структуры.

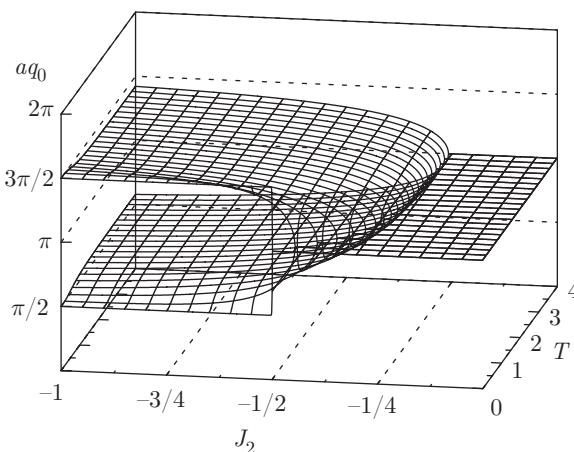


Рис. 28. Температурное поведение максимумов КФ изинговской цепочки (91) в зависимости от обменных параметров с антиферро-антиферромагнитным вариантом параметров обменных взаимодействий спинов цепочки ($J_1 = -1, J_2/|J_1| < 0$)

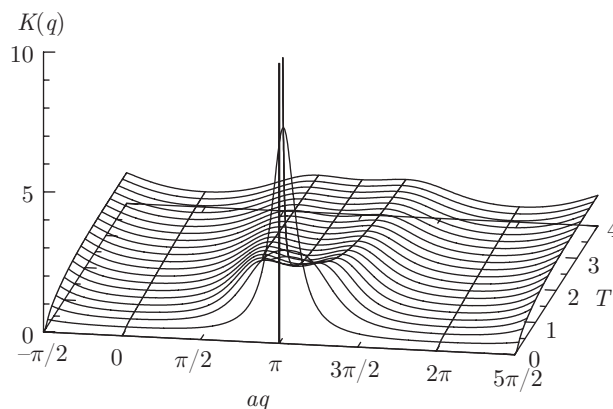


Рис. 29. КФ изинговской цепочки (78) с антиферро-антиферромагнитным вариантом параметров обменных взаимодействий спинов цепочки ($J_1 = -1, J_2/|J_1| = -2/5$)

Волновой вектор на интервале значений соотношений обменных параметров спинов

$$-1/2 < J_2/|J_1| < -1/4 \quad (98)$$

при понижении температуры демонстрирует точку смыкания несоразмерных пиков в положении, ниже которого волновой вектор не зависит от температуры, как показано на рис. 28 или 29. Такой эффект носит название запираания волнового вектора, или lock-in-перехода.

Температурная эволюция точки lock-in-перехода (см. рис. 28) при конкурирующих обменных взаимодействиях спинов цепочки (88) имеет выражение

$$J_2 = -\frac{T}{4} \ln \frac{\Phi}{4}, \quad (99)$$

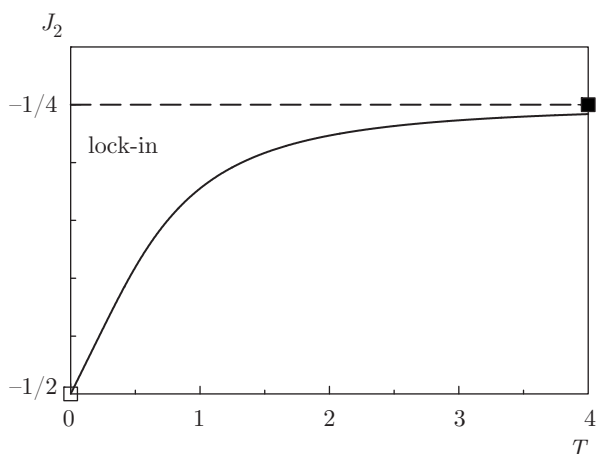


Рис. 30. Температурная эволюция хода lock-in-перехода (99) в случае конкурирующих обменных взаимодействий между спинами на узлах первых и вторых соседей (88). Предельные значения эволюции (100) отмечены на графике пустой ($T = 0$) и сплошной ($T = \infty$) квадратными метками

$$\Phi = 3 + \text{ch}(2K_1) + \text{sign}(K_1) \sqrt{2} \text{sh} K_1 \sqrt{3 + 5 \text{ch}(2K_1)}$$

и продемонстрирована на рис. 30.

Предельные положения такой температурной эволюции lock-in-перехода (99) соответственно равны

$$\lim_{T \rightarrow 0} J_2(T) = -\frac{1}{4}, \quad \lim_{T \rightarrow \infty} J_2(T) = -\frac{1}{2} \quad (100)$$

и на рис. 30 отмечены квадратами.

Таким образом, lock-in-переход происходит при значении обменных параметров спинов цепочки, определяемых правилом (99), и величине волнового вектора

$$q_0^{AA} = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{2} + k \right), \quad q_0^{FA} = \frac{2\pi}{a} k, \quad k \in \mathbb{Z}.$$

Заметим, что при соотношении параметров обменных взаимодействий спинов (98) и температурах, меньших температур lock-in-перехода, функция (79) выходит из области определения, т. е. ее аргумент (80) становится больше единицы,

$$|X| > 1, \quad (101)$$

а сама функция (79) становится комплексной величиной. Именно поэтому в определении переменной (79) стоит функция взятия вещественной части. В рассматриваемом интервале переменных максимум КФ находится в положении q_1 (81), и амплитуда этого максимума описывается уже функцией $K(q_1^{AA})$ (83).

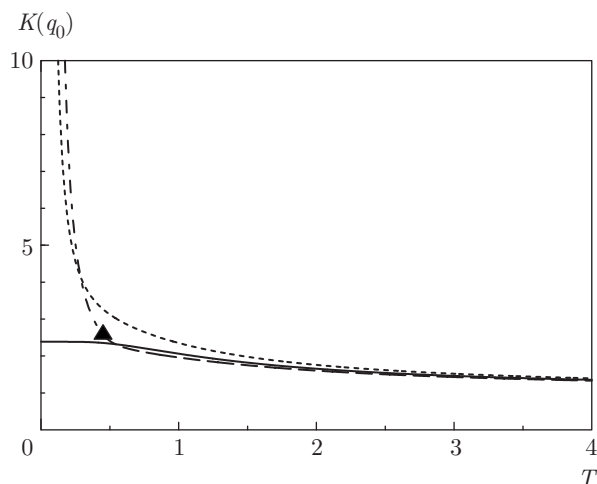


Рис. 31. Температурное поведение амплитуды максимумов КФ изинговской цепочки (94) с антиферро-антиферромагнитным вариантом параметров обменных взаимодействий спинов цепочки вблизи точки фрустрации системы (с обозначениями линий в соответствии с рис. 23). Треугольной меткой указано положение lock-in-перехода, а штрихпунктирная линия демонстрирует ход амплитуды максимума КФ ниже lock-in-перехода

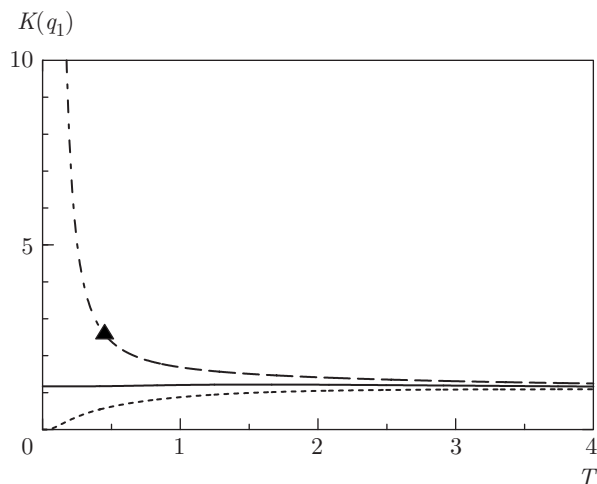


Рис. 32. Температурное поведение амплитуды минимумов КФ изинговской цепочки (95) с антиферро-антиферромагнитным вариантом параметров обменных взаимодействий спинов цепочки вблизи точки фрустрации системы (с обозначениями линий в соответствии с рис. 23). Треугольной меткой указано положение lock-in-перехода, а штрихпунктирная линия демонстрирует ход амплитуды максимума КФ ниже lock-in-перехода

Указанная особенность в описании максимума КФ показана на рис. 31 и 32, где первая линия разделена на два участка треугольной меткой, которая указывает на положение lock-in-перехода (см. рис. 30), что соответствует условию равенства единице параметра (80) —

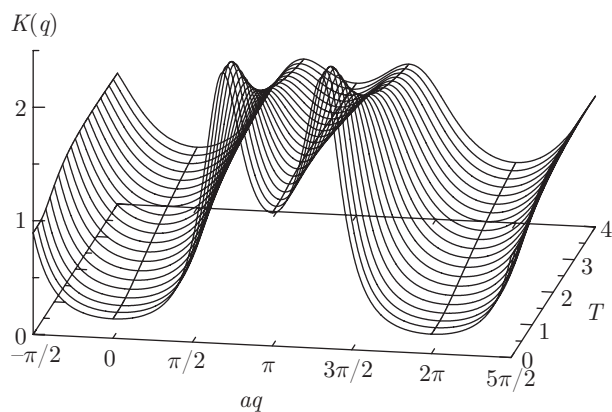


Рис. 33. КФ изинговской цепочки (78) с антиферро-антиферромагнитным вариантом параметров обменных взаимодействий спинов цепочки ($J_1 = -1, J_2/|J_1| = -1/2$) в режиме фрустраций

$$|X| = 1.$$

Первый участок линии, находящийся в интервале температур, больших температуры lock-in-перехода, и отмеченный штриховой линией, соответствует параметрам модели, при которых условие (101) не соблюдается. Второй участок, показанный штрихпунктирной линией, соответствует соблюдению этого условия (101).

Также следует отметить, что на рис. 31 и 32 штрихпунктирные линии совпадают, поскольку они демонстрируют одно и то же поведение амплитуды максимумов КФ при температурах, меньших температуры lock-in-перехода.

При соотношении обменных параметров спинов цепочки, равном

$$J_2/|J_1| = -1/2, \tag{102}$$

система находится в состоянии фрустрации, при этом lock-in-переход не происходит. Интенсивность КФ (78) в режиме фрустрации показана на рис. 33.

В случае соотношения параметров обменных взаимодействий спинов

$$J_2/|J_1| < -1/2$$

КФ ведет себя уже четвертым образом (см. рис. 34).

Таким образом, поведение функции магнитного диффузного рассеяния КФ (78) в режиме фрустрации (102) и вне его имеет принципиально различный характер (см. рис. 29, 33 и 34). Данное различие видно из температурной эволюции положений максимумов КФ (рис. 35), а также амплитуды максимумов и минимумов (рис. 31, 32, 36) в точке фрустрации и ее окрестностях.

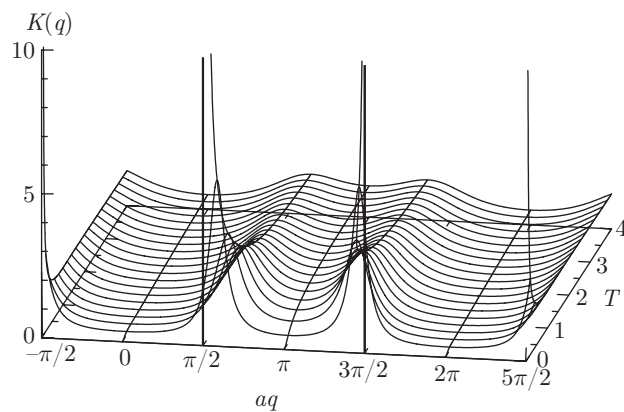


Рис. 34. КФ изинговской цепочки (78) с антиферро-антиферромагнитным вариантом параметров обменных взаимодействий спинов цепочки ($J_1 = -1, J_2/|J_1| = -3/5$)

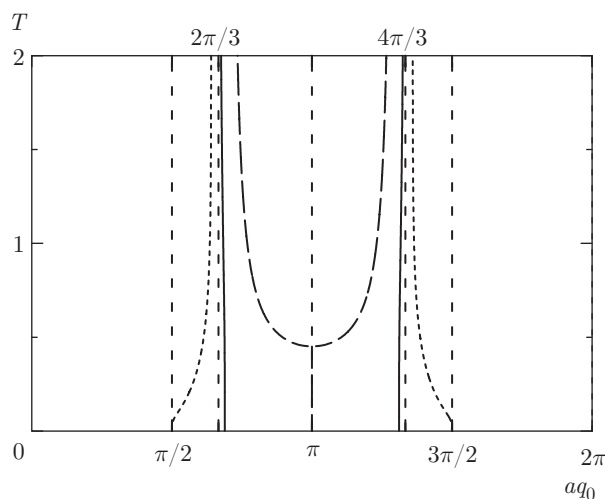


Рис. 35. Температурное поведение положений максимумов КФ изинговской цепочки (91) с антиферро-антиферромагнитным вариантом параметров обменных взаимодействий спинов цепочки вблизи точки фрустрации системы (с обозначениями линий в соответствии с рис. 23)

Далее рассмотрим эволюцию интенсивности функции магнитного диффузного рассеяния КФ в режиме фрустрации и его окрестностях.

В данном контексте интересно остановиться на поведении ветвей вектора магнитного диффузного рассеяния в предельных положениях, т. е. при нулевой и бесконечно большой температурах. Так, при антиферро-антиферромагнитном варианте параметров обменных взаимодействий между спинами на узлах первых и вторых соседей ($J_1 < 0, J_2 < 0$) первая ветвь вектора (91) имеет соответствующие для каждой температуры значения

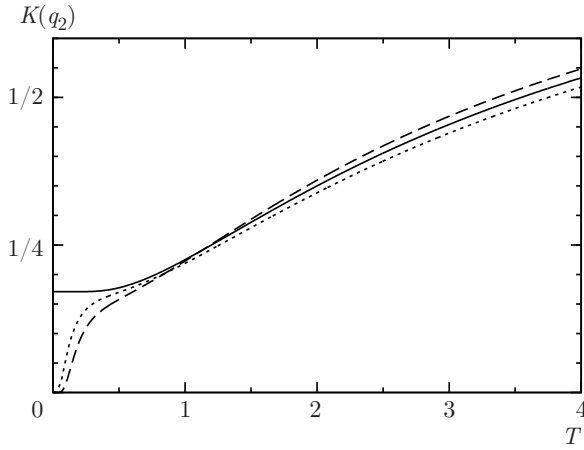


Рис. 36. Температурное поведение амплитуд минимумов КФ изинговской цепочки (95) с антиферро-антиферромагнитным вариантом параметров обменных взаимодействий спинов цепочки вблизи точки фрустрации системы (с обозначениями линий в соответствии с рис. 23)

$$\lim_{T \rightarrow 0} q_0^{AA} = \begin{cases} \frac{1}{4} + k, & \frac{J_2}{|J_1|} < -\frac{1}{2}, \\ \frac{2\pi}{a} \left\{ \frac{1}{2} - \frac{1}{2\pi} \arccos \frac{\sqrt{5}}{4}, \right. & \frac{J_2}{|J_1|} = -\frac{1}{2}, \\ \left. \frac{1}{2} + k, \right. & -\frac{1}{2} < \frac{J_2}{|J_1|} < 0 \end{cases} \quad (103)$$

и

$$\lim_{T \rightarrow \infty} q_0^{AA} = \begin{cases} 1 - \frac{1}{2\pi} \arccos \frac{J_1}{4J_2}, & \frac{J_2}{|J_1|} < -\frac{1}{4}, \\ \frac{2\pi}{a} \left\{ \frac{1}{3} + k, \right. & \frac{J_2}{|J_1|} = -\frac{1}{2}, \\ \left. \frac{1}{2} + k, \right. & -\frac{1}{4} \leq \frac{J_2}{|J_1|} < 0, \end{cases} \quad (104)$$

а вторая (97) —

$$\lim_{T \rightarrow 0} q_0^{AA} = \begin{cases} \frac{3}{4} + k, & \frac{J_2}{|J_1|} < -\frac{1}{2}, \\ \frac{2\pi}{a} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi} \arccos \frac{\sqrt{5}}{4}, \right. & \frac{J_2}{|J_1|} = -\frac{1}{2}, \\ \left. \frac{1}{2} + k, \right. & -\frac{1}{2} < \frac{J_2}{|J_1|} < 0 \end{cases} \quad (105)$$

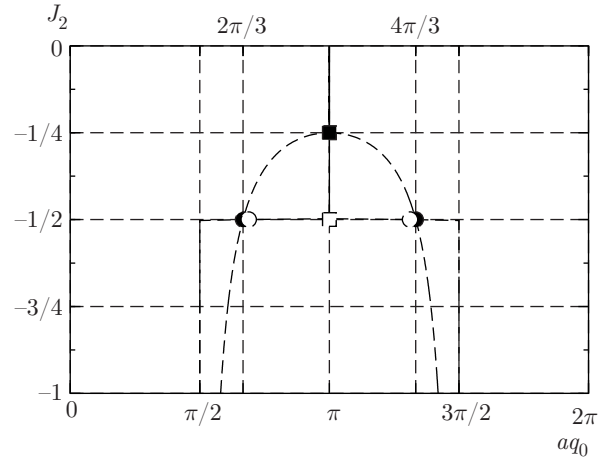


Рис. 37. Поведение положений максимумов КФ изинговской цепочки (91) с антиферро-антиферромагнитным вариантом параметров обменных взаимодействий спинов цепочки при нулевой (103) (сплошная линия) и бесконечно большой (104) (пунктирная линия) температурах. Значения волнового вектора рассеяния в положениях точек фрустрации системы указаны на графике светлыми (\$T = 0\$) (109) и темными (\$T \to \infty\$) (107) точками, а волновые векторы, соответствующие начальной и конечной точкам lock-in-перехода (100), обозначены квадратами (ср. с рис. 30)

и

$$\lim_{T \rightarrow \infty} q_0^{AA} = \begin{cases} \frac{1}{2\pi} \arccos \frac{J_1}{4J_2}, & \frac{J_2}{|J_1|} < -\frac{1}{4}, \\ \frac{2\pi}{a} \left\{ \frac{2}{3} + k, \right. & \frac{J_2}{|J_1|} = -\frac{1}{2}, \\ \left. \frac{1}{2} + k, \right. & -\frac{1}{4} \leq \frac{J_2}{|J_1|} < 0, \end{cases} \quad (106)$$

как показано на рис. 37.

Из представленных выражений (104) и (106) следует, что в режиме фрустрации (102) поведение волнового вектора магнитного диффузного рассеяния определяется предельными значениями при бесконечно большой температуре,

$$\lim_{T \rightarrow \infty} q_0^{AA} \left(\frac{J_2}{|J_1|} = -\frac{1}{2} \right) = \frac{2\pi}{a} (Q_\infty^{AA} + k), \quad k \in \mathbb{Z}, \quad (107)$$

где величина

$$Q_\infty^{AA} = \frac{1}{2} \mp \frac{1}{6} \quad (108)$$

задает положения пиков в позициях 1/3 и 2/3 периода для соответствующих ветвей.

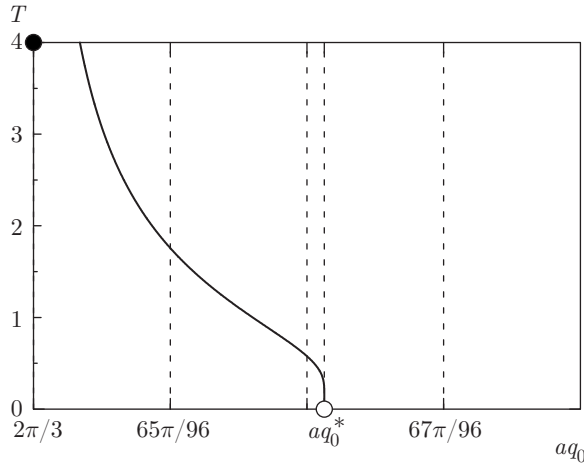


Рис. 38. Температурное поведение положений максимумов КФ изинговской цепочки (91) с антиферро-антиферромагнитным вариантом параметров обменных взаимодействий спинов цепочки в точке фрустрации системы ($J_1 = -1$, $J_2/|J_1| = -1/2$), где q_0^* определено в виде (109). Кружками указаны предельные положения волнового вектора рассеяния в режиме фрустрации при нулевой температуре (светлый символ) и бесконечно большой температуре (темный символ)

При нулевой температуре волновой вектор не достигает указанных выше значений (107) и равен

$$q_0^* = \lim_{T \rightarrow 0} q_0^{AA} \left(\frac{J_2}{|J_1|} = -\frac{1}{2} \right) = \frac{2\pi}{a} (Q_\infty^{AA} \pm \bar{Q} + k), \quad k \in \mathbb{Z}, \quad (109)$$

где отклонение от величины (108) равно

$$\bar{Q} = \frac{1}{6\pi} \left(\pi - 3 \arccos \frac{\sqrt{5}}{4} \right) \approx 0.011. \quad (110)$$

Такое поведение положений максимумов функции магнитного диффузного рассеяния КФ продемонстрировано на рис. 37 и отмечено кружками, а более подробно показано на рис. 38.

В случае ферро-антиферромагнитного варианта обменных взаимодействий спинов на узлах первых и вторых соседей ($J_1 > 0$, $J_2 < 0$) положение вектора магнитного диффузного рассеяния отличается от рассмотренного выше случая на величину в половину периода (π/a). Таким образом, в режиме фрустрации первая ветвь вектора рассеяния (91) при бесконечно большой температуре имеет выражение

$$\lim_{T \rightarrow \infty} q_0^{FA} \left(\frac{J_2}{|J_1|} = -\frac{1}{2} \right) = \frac{2\pi}{a} (Q_\infty^{FA} + k), \quad k \in \mathbb{Z},$$

$$Q_\infty^{FA} = \mp \frac{1}{6},$$

а при нулевой температуре —

$$\lim_{T \rightarrow 0} q_0^{FA} \left(\frac{J_2}{|J_1|} = -\frac{1}{2} \right) = \frac{2\pi}{a} (Q_\infty^{FA} \pm \bar{Q} + k), \quad k \in \mathbb{Z},$$

где волновой вектор не достигает значения Q_∞^{FA} периода на величину \bar{Q} (110).

Амплитуда максимумов КФ (94) при конкурирующих обменных взаимодействиях спинов цепочки (88) в точке фрустрации (102) и при нулевой температуре имеет конечное значение

$$\lim_{T \rightarrow 0} K \left(q_0^{AA}, \frac{J_2}{|J_1|} = -\frac{1}{2} \right) = \lim_{T \rightarrow 0} K \left(q_0^{FA}, \frac{J_2}{|J_1|} = -\frac{1}{2} \right) = \frac{16}{3\sqrt{5}} \approx 2.385,$$

а амплитуды минимумов (95) и (96) — соответственно

$$\lim_{T \rightarrow 0} K \left(q_1^{AA}, \frac{J_2}{|J_1|} = -\frac{1}{2} \right) = \lim_{T \rightarrow 0} K \left(q_1^{FA}, \frac{J_2}{|J_1|} = -\frac{1}{2} \right) = \frac{3\sqrt{5} + 5}{10} = \frac{3\sqrt{5} - 5}{10} + 1 \approx 1.171$$

и

$$\lim_{T \rightarrow 0} K \left(q_2^{AA}, \frac{J_2}{|J_1|} = -\frac{1}{2} \right) = \lim_{T \rightarrow 0} K \left(q_2^{FA}, \frac{J_2}{|J_1|} = -\frac{1}{2} \right) = \frac{3\sqrt{5} - 5}{10} = \frac{3\sqrt{5} + 5}{10} - 1 \approx 0.171.$$

Следует сказать, что при бесконечно большой температуре функция магнитного диффузного рассеяния КФ (78) размыта, а интенсивность максимумов

$$\lim_{T \rightarrow \infty} K(q_0^{AA}) = 1, \quad \lim_{T \rightarrow \infty} K(q_0^{FA}) = 1$$

и минимумов функции

$$\lim_{T \rightarrow \infty} K(q_1^{AA}) = \lim_{T \rightarrow \infty} K(q_2^{AA}) = 1,$$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} K(q_1^{FA}) = \lim_{T \rightarrow \infty} K(q_2^{FA}) = 1$$

неразличимы между собой и равны единице.

При уменьшении температуры у функции магнитного диффузного рассеяния КФ (78) формируются пики в положениях (91), интенсивность которых вне режима фрустраций при нулевой температуре достигает бесконечности,

$$\lim_{T \rightarrow 0} K(q_0^{AA}) = \infty, \quad \lim_{T \rightarrow 0} K(q_0^{FA}) = \infty,$$

а амплитуды минимумов (92) и (93) уменьшаются до нуля:

$$\lim_{T \rightarrow 0} K(q_1^{AA}) = \lim_{T \rightarrow 0} K(q_2^{AA}) = 0,$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} K(q_1^{FA}) = \lim_{T \rightarrow 0} K(q_2^{FA}) = 0.$$

Такое поведение хода интенсивности КФ показано на рис. 31, 32, 36.

Далее следует обратить внимание на то, что описанное выше характерное поведение максимумов КФ в несоразмерных положениях можно встретить на нейтронограммах реальных антиферромагнетиков на основе соединений редкоземельных металлов, в которых обнаруживается lock-in-переход. Например, в магнетиках на основе лантана [40, 41], празеодима [42], европия [43, 44] или тербия [45] нейтронографические спектры демонстрируют существование двух ветвей волнового вектора рассеяния в несоразмерных положениях на интервале

$$\frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{3} + k \right) < q_0 < \frac{2\pi}{a} \left(\frac{2}{3} + k \right), \quad k \in \mathbb{Z}$$

с объединением пиков при lock-in-переходе в положении

$$q_0 = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{2} + k \right), \quad k \in \mathbb{Z}.$$

Такая температурная эволюция нейтронографических рефлексов аналогична характеру поведения волнового вектора (91) в случае антиферро-антиферромагнитного варианта обменных параметров, как показано на рис. 35 и 27.

Для монопниктида плутония PuSb [46] и антиферромагнетиков типа LiNiPO₄ [47] несоразмерные пики формируются в интервале

$$-\frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{6} + k \right) < q_0 < \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{6} + k \right), \quad k \in \mathbb{Z}$$

с их объединением при lock-in-переходе в положении

$$q_0 = \frac{2\pi}{a} k, \quad k \in \mathbb{Z},$$

как в случае ферро-антиферромагнитного варианта обменных взаимодействий, между спинами на узлах первых и вторых соседей (91).

Также в реальных антиферромагнетиках на основе редкоземельных элементов можно видеть на нейтронограммах формирование несоразмерных пиков вне режима lock-in-перехода. Например, в антимониде церия (CeSb) обнаружены пики в интервале значений [48]

$$\frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{4} + k \right) \leq q_0 < \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{3} + k \right), \quad k \in \mathbb{Z},$$

а в работах [49, 50] — уже в интервале

$$\frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{6} + k \right) < q_0 \leq \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{4} + k \right), \quad k \in \mathbb{Z},$$

что соответствует случаям антиферро-антиферромагнитного и ферро-антиферромагнитного вариантов параметров обменных взаимодействий между спинами на узлах первых и вторых соседей.

В конце этого раздела следует сказать, что изменение волнового вектора (79) в несоразмерных положениях происходит непрерывно с изменением температуры, как продемонстрировано на рис. 28. Это отличается от результатов теории среднего поля и расчетов методом Монте-Карло в модели Изинга [49–52], а также в модели ANNNI или модели Френкель – Конторовой [53–58], в которых эволюция волнового вектора рассеяния связана с существованием бесконечного каскада фазовых переходов, описываемых фрактальными структурами, и названных «дьявольской лестницей». Экспериментально явление таких каскадных переходов не было обнаружено. Подробное обсуждение этой темы — предмет отдельного рассмотрения.

7. ФРУСТРАЦИИ НА ИЗИНГОВСКОЙ ЦЕПОЧКЕ С УЧЕТОМ ВНЕШНЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ ПРИ ОБМЕННОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ СПИНОВ НА УЗЛАХ ПЕРВЫХ И ВТОРЫХ СОСЕДЕЙ

При воздействии на спиновую цепочку внешнего магнитного поля и учете обменных взаимодействий спинов на узлах первых и вторых соседей гамильтониан модели Изинга имеет вид (1), а элементы трансфер-матрицы Крамерса – Ваннье (5) определяются следующим образом —

$$V_{\sigma\sigma',\sigma''\sigma'''} = \langle \sigma\sigma' | e^{K_1\sigma\sigma' + K_2\sigma'\sigma'' + B\sigma} | \sigma''\sigma''' \rangle = e^{K_1\sigma\sigma' + K_2\sigma''\sigma''' + B\sigma} \delta_{\sigma'\sigma''},$$

где размерность самой матрицы равна $d = 4$, согласно правилу (6).

В общем виде трансфер-матрица задается в форме (70), а в явном виде может быть получена умножением слева матрицы (71) на диагональную полевую матрицу

$$\mathbf{V} = \text{diag}(e^B, e^B, e^{-B}, e^{-B}).$$

Характеристическое уравнение такой трансфер-матрицы является полиномом четвертой степени, а собственные значения ее выражаются в радикалах и имеют в этом случае довольно сложный вид.

7.1. Магнитная фазовая диаграмма основного состояния системы

При различных параметрах данной модели в основном состоянии реализуются четыре набора возможных спиновых конфигураций, обладающих минимальной энергией. Первый тип характеризуется антиферромагнитным упорядочением неелевского типа, что в интервале полей $H \leq -2(J_1 - 2J_2)$ и $H \leq -2J_1$ соответствует набору C_{A2} (31) с энергией

$$E_{A2} = J_1 - J_2,$$

второй также характеризуется антиферромагнитным упорядочением, но с утроением периода (обозначение конфигурации — А3),

$$C_{A3} = \left\{ \begin{array}{cccccc} +1 & +1 & -1 & +1 & +1 & -1 & \dots \\ +1 & -1 & +1 & +1 & -1 & +1 & \dots \\ -1 & +1 & +1 & -1 & +1 & +1 & \dots \end{array} \right\},$$

в интервале полей $H \geq -2(J_1 - 2J_2)$, $H \geq J_1 - 2J_2$ и $H \leq -2(J_1 + J_2)$ и состоит из трех вариантов спиновых последовательностей с равными энергиями:

$$E_{A3} = \frac{J_1 + J_2 - H}{3},$$

третий опять характеризуется антиферромагнитным упорядочением с учетверением периода C_{A4} (85) и в интервале полей $H \leq J_1 - 2J_2$ и $H \leq -(J_1 + 2J_2)$ обладает энергией

$$E_{A4} = J_2,$$

и последний четвертый характеризуется ферромагнитным упорядочением C_{F1} (60) и в интервале полей $H \geq -2J_1$, $H \geq -2(J_1 + J_2)$ и $H \geq -(J_1 + 2J_2)$ имеет энергию

$$E_{F1} = -(J_1 + J_2 + H).$$

В данном случае видно, что учет внешнего магнитного поля усложняет магнитную фазовую диаграмму, а энергия основного состояния (30) имеет следующий вид:

$$E_0 = \begin{cases} E_{A2}, & H \leq -2(J_1 - 2J_2) \wedge H \leq -2J_1, \\ E_{A3}, & H \geq -2(J_1 - 2J_2) \wedge H \geq J_1 - 2J_2 \\ & \wedge H \leq -2(J_1 + J_2), \\ E_{A4}, & H \leq J_1 - 2J_2 \wedge H \leq -(J_1 + 2J_2), \\ E_{F1}, & H \geq -2J_1 \wedge H \geq -2(J_1 + J_2) \\ & \wedge H \geq -(J_1 + 2J_2). \end{cases}$$

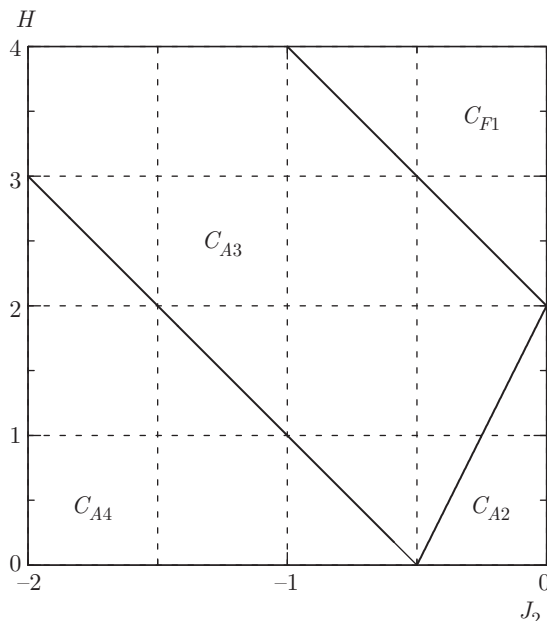


Рис. 39. Магнитная фазовая диаграмма основного состояния изинговской цепочки с учетом внешнего магнитного поля в области конкурирующих обменных взаимодействий: при антиферро-антиферромагнитном варианте параметров обменных взаимодействий спинов цепочки ($J_1 = -1$, $J_2/|J_1| \leq 0$)

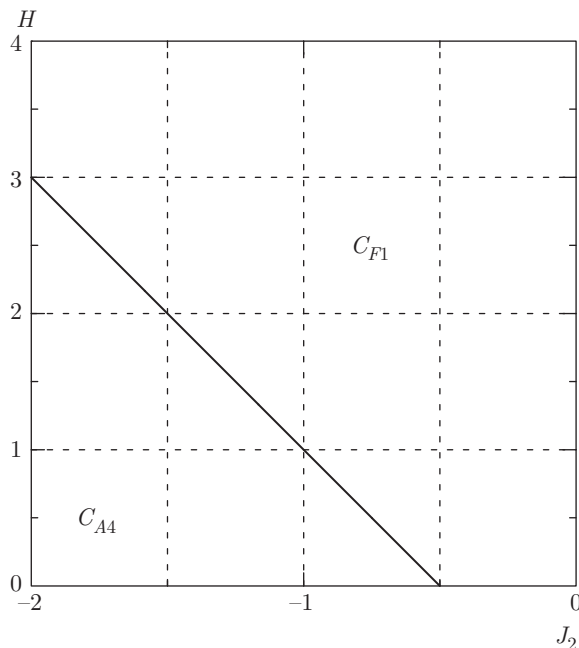


Рис. 40. Магнитная фазовая диаграмма основного состояния изинговской цепочки с учетом внешнего магнитного поля в области конкурирующих обменных взаимодействий: при ферро-антиферромагнитном варианте параметров обменных взаимодействий спинов цепочки ($J_1 = +1$, $J_2/|J_1| \leq 0$)

Видно, что на магнитной фазовой диаграмме основного состояния модели (как и в предыдущем случае) существует четыре варианта отношений параметров обменных взаимодействий между спинами на узлах первых и вторых соседей — (87) и (88) — и лишь только два последних (88) описывают систему с конкурирующими обменными взаимодействиями спинов цепочки. Это случаи антиферро-антиферромагнитного (АА: $J_1 < 0$ и $J_2 < 0$) и ферро-антиферромагнитного (ФА: $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$) вариантов параметров обмена спинов цепочки. Именно в этих областях магнитной фазовой диаграммы системы (см. рис. 39, 40) имеются фрустрации.

В случае антиферро-антиферромагнитного варианта параметров обменных взаимодействий между спинами на узлах первых и вторых соседей ($J_1 < 0$ и $J_2 \leq 0$) существуют два фрустрирующих магнитных поля. Оба эти поля появляются в точке

$$J_2/|J_1| = 0, \quad H/|J_1| = 2, \quad (111)$$

что соответствует описанному выше случаю — (62). После этого верхнее и нижнее магнитные поля расходятся, причем с уменьшением параметра $J_2/|J_1|$ верхнее магнитное поле растет по линейному закону,

$$H_{AA0} = -2(J_1 + J_2), \quad (112)$$

а нижнее магнитное поле —

$$H_{AA1} = -2(J_1 - 2J_2), \quad 0 < J_2/J_1 \leq 1/2 \quad (113)$$

— сначала падает до нуля при

$$J_2/|J_1| = -1/2, \quad H/|J_1| = 0, \quad (114)$$

после чего растет —

$$H_{AA2} = J_1 - 2J_2, \quad J_2/J_1 \geq 1/2, \quad (115)$$

как показано на рис. 39.

В случае ферро-антиферромагнитного варианта параметров обменных взаимодействий между спинами на узлах первых и вторых соседей ($J_1 > 0$ и $J_2 \leq 0$) существует всего одно фрустрирующее внешнее магнитное поле, которое возникает при

$$J_2/|J_1| = -1/2, \quad H/|J_1| = 0 \quad (116)$$

и далее с уменьшением параметра $J_2/|J_1|$ растет по закону

$$H_{FA} = -(J_1 + 2J_2), \quad J_2/J_1 \leq -1/2, \quad (117)$$

как можно видеть на рис. 40.

Именно в этих внешних магнитных полях

$$H = \begin{cases} H_{AA0}, & J_1 < 0 \wedge J_2 \leq 0, \\ H_{AA1}, & J_1 < 0 \wedge J_2 \leq 0 \wedge J_2/J_1 \leq 1/2, \\ H_{AA2}, & J_1 < 0 \wedge J_2 \leq 0 \wedge J_2/J_1 \geq 1/2, \\ H_{FA}, & J_1 > 0 \wedge J_2 \leq 0 \wedge J_2/J_1 \leq -1/2 \end{cases}$$

происходит перестройка основного состояния и система испытывает фрустрации.

7.2. Нуль-температурные энтропия и намагниченность системы во фрустрирующих внешних магнитных полях

При антиферро-антиферромагнитном варианте параметров обменных взаимодействий спинов на узлах первых и вторых соседей ($J_1 < 0$ и $J_2 \leq 0$) в модели Изинга во внешнем магнитном поле в основном состоянии в полях, меньших нижнего фрустрирующего магнитного поля,

$$0 \leq H < H_{AA1}, \quad 0 \leq H < H_{AA2},$$

нуль-температурные энтропия и намагниченность равны нулю:

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = 0, \quad \lim_{T \rightarrow 0} M = 0.$$

Во внешнем магнитном поле, равном первому нижнему фрустрирующему полю H_{AA1} (113), энтропия и намагниченность при нулевой температуре соответственно равны

$$\lim_{T \rightarrow 0} S(H_{AA1}) \approx 0.281, \quad \lim_{T \rightarrow 0} M(H_{AA1}) \approx 0.177,$$

а в магнитном поле, равном уже второму нижнему фрустрирующему полю H_{AA2} (115), имеем

$$\lim_{T \rightarrow 0} S(H_{AA2}) \approx 0.199, \quad \lim_{T \rightarrow 0} M(H_{AA2}) \approx 0.159.$$

В Приложении представлены полные точные аналитические выражения для указанных энтропии и намагниченности системы: (120) и (121), а также (122) и (123).

В интервалах между нижним и верхним фрустрирующими магнитными полями,

$$H_{AA1} < H < H_{AA0}, \quad H_{AA2} < H < H_{AA0},$$

нуль-температурные энтропия и намагниченность соответственно равны

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = 0, \quad \lim_{T \rightarrow 0} M = \frac{1}{3}.$$

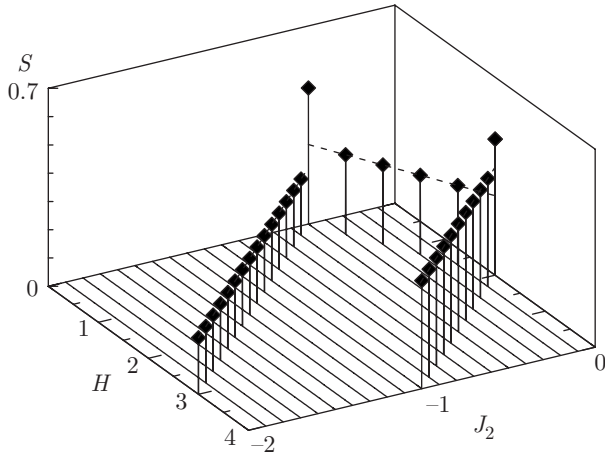


Рис. 41. Нуль-температурная энтропия изинговской цепочки во внешнем магнитном поле с антиферро-антиферромагнитным вариантом параметров обменных взаимодействий спинов цепочки ($J_1 = -1, J_2/|J_1| < 0$). Штриховыми линиями и метками отмечены значения энтропии во фрустрирующих магнитных полях

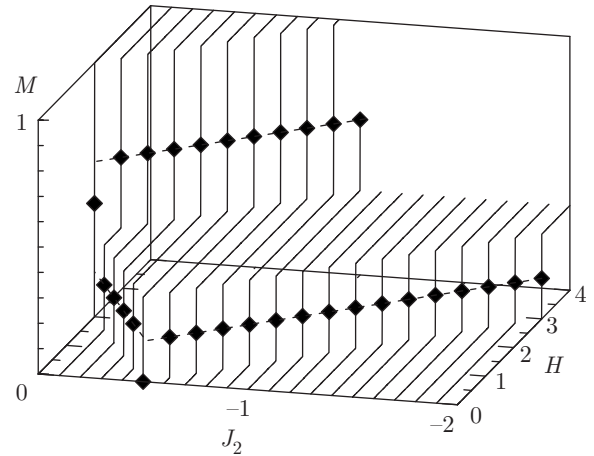


Рис. 42. Нуль-температурная намагниченность изинговской цепочки во внешнем магнитном поле с антиферро-антиферромагнитным вариантом параметров обменных взаимодействий спинов цепочки ($J_1 = -1, J_2/|J_1| < 0$). Штриховыми линиями и метками отмечены значения намагниченности во фрустрирующих магнитных полях

Во внешнем магнитном поле, равном верхнему фрустрирующему полю H_{AA0} (112), энтропия и намагниченность соответственно равны

$$\lim_{T \rightarrow 0} S(H_{AA0}) \approx 0.382, \quad \lim_{T \rightarrow 0} M(H_{AA0}) \approx 0.611.$$

В Приложении указаны точные значения для них, см. выражения (118) и (119).

Также следует отметить, что в точке ($J_2/|J_1| = -1/2, H/|J_1| = 0$) (114) нуль-температурная энтропия соответствует выражению (90), а нуль-температурная намагниченность равна нулю, т. е.

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = \ln \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \approx 0.481, \quad \lim_{T \rightarrow 0} M = 0.$$

В точке ($J_2/|J_1| = 0, H/|J_1| = 2$) (111) нуль-температурная энтропия соответствует значению (63), а нуль-температурная намагниченность больше нуля:

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = \ln \frac{1 + \sqrt{5}}{2}, \quad \lim_{T \rightarrow 0} M = \frac{1}{\sqrt{5}} \approx 0.447.$$

В свою очередь, во внешних магнитных полях, больших верхнего поля фрустрации ($H > H_{AA0}$), нуль-температурная энтропия равна нулю, а нуль-температурная намагниченность — единице:

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = 0, \quad \lim_{T \rightarrow 0} M = 1.$$

Поведение энтропии и намагниченности системы при нулевой температуре показано на рис. 41 и 42.

В случае ферро-антиферромагнитного варианта параметров обменного взаимодействия между спинами на узлах первых и вторых соседей ($J_1 > 0$ и $J_2 \leq 0$) в модели Изинга во внешнем магнитном поле в основном состоянии в интервале полей от нуля до фрустрирующего поля ($0 \leq H < H_{FA}$) нуль-температурные энтропия и намагниченность равны нулю —

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = 0, \quad \lim_{T \rightarrow 0} M = 0$$

— а во внешнем магнитном поле, равном фрустрирующему H_{FA} (117), при нулевой температуре энтропия и намагниченность конечны и равны соответственно

$$\lim_{T \rightarrow 0} S(H_{FA}) \approx 0.322, \quad \lim_{T \rightarrow 0} M(H_{FA}) \approx 0.397.$$

В Приложении указаны точные выражения для этих величин, см. выражения (124) и (125).

В точке ($J_2/|J_1| = -1/2, H/|J_1| = 0$) (116) нуль-температурная энтропия соответствует выражению (90), а намагниченность равна нулю,

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = \ln \frac{1 + \sqrt{5}}{2}, \quad \lim_{T \rightarrow 0} M = 0.$$

Во внешних магнитных полях, больших фрустрирующего ($H > H_{FA}$),

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = 0, \quad \lim_{T \rightarrow 0} M = 1.$$

Таким образом, полевая зависимость нуль-температурной энтропии имеет ненулевые значения

только в положениях фрустрирующих магнитных полей, а полевая эволюция нуль-температурной намагниченности в диапазоне значений от нуля до единицы ступенчата, где количество ступенек определяется числом фрустрирующих полей.

Подробный анализ термодинамических и магнитных характеристик системы, в том числе сложного поведения теплоемкости и функции магнитного диффузного рассеяния вблизи точки фрустрации системы, а также формирования несоразмерных пиков требует отдельного исследования.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе методом трансфер-матрицы Крамера – Ванье получены точные аналитические выражения для энтропии, теплоемкости, намагниченности и магнитной восприимчивости одномерной модели Изинга с учетом обменных взаимодействий между спинами на узлах ближайших и вторых за ближайшими соседней во внешнем магнитном поле. Также определено точное решение для КФ в исследуемой модели с учетом обменного взаимодействия спинов на узлах ближайших соседней во внешнем магнитном поле, а также и с учетом обменных взаимодействий спинов на узлах первых и вторых соседней без внешнего магнитного поля.

Построена магнитная фазовая диаграмма модели, а также проведен анализ конфигурационных особенностей основного состояния и фрустрационных свойств системы. Сформулированы критерии и определены соотношения параметров модели, при которых возникают магнитные фрустрации в рассматриваемых одномерных спиновых системах. Выяснено, что фрустрации обусловлены конкуренцией как между энергиями обменных взаимодействий спинов (так называемые геометрические фрустрации), так и между ними и энергией внешнего магнитного поля. Таким образом, показано, что в режиме фрустрации система испытывает перестройку магнитной структуры основного состояния, которое начинает в себя включать сопоставимое с размером системы множество спиновых конфигураций, в том числе и с отсутствием трансляционной инвариантности.

Проанализировано характерное поведение энтропии, теплоемкости, намагниченности, магнитной восприимчивости и функции магнитного диффузного рассеяния КФ системы в режиме фрустрации и вблизи него, показано кардинальное отличие в поведении магнитной системы во фрустрационной области и вне нее.

Определено, что важнейшим признаком существования магнитных фрустраций в системе является отличное от нуля значение нуль-температурной энтропии в этом режиме, и данное свойство не противоречит третьему началу термодинамики. Также следует отметить тот факт, что нуль-температурная энтропия может иметь одну и ту же величину для целых интервалов значений параметров модели. В качестве особого примера продемонстрировано, что изинговский парамагнетик является абсолютно фрустрированной системой, так как его энтропия также отлична от нуля и не зависит от температуры.

Одной из общих особенностей фрустрированных систем является обнаруженный эффект расщепления пика на температурной эволюции магнитного вклада теплоемкости в непосредственной окрестности режима фрустрации. Температурное поведение намагниченности во внешнем магнитном поле фрустрации и сколь угодно малом отклонении от него демонстрирует кардинально различные типы поведения при приближении к абсолютному нулю температуры. Таким образом, в случае единственного фрустрационного магнитного поля нуль-температурная намагниченность равна нулю во внешних магнитных полях, меньших фрустрационного, а в магнитных полях больших — равна единице, при этом в магнитном поле, равном фрустрационному, нуль-температурная намагниченность имеет промежуточное значение. Магнитная восприимчивость во внешнем магнитном поле фрустрации имеет острый пик, который при нулевой температуре стремится к бесконечности, а сама функция превращается в дельта-функцию.

При исследовании фрустрационных свойств системы наиболее показательное поведение функции магнитного диффузного рассеяния КФ в режиме фрустрации и его окрестности при стремлении температуры к абсолютному нулю. В этом случае в точке фрустрации функция магнитного диффузного рассеяния плавно распределена по обратному пространству и имеет конечное значение, а при сколь угодно малом отклонении от положения фрустрации она принимает форму дельта-функции либо теряет интенсивность до нуля (во внешнем магнитном поле, большем фрустрирующего). Важно отметить, что указанные особенности поведения магнитного диффузного рассеяния являются основным экспериментально наблюдаемым показателем существования фрустрированных состояний в магнетике.

В качестве еще одного нетривиального результата работы можно выделить то, что внешнее маг-

нитное поле порождает перекачку магнитного диффузного рассеяния КФ (54), ширина пиков которого сильно зависит от температуры, строго в положения ядерных брэгговских рефлексов, определяемых исходной кристаллической решеткой.

Также в случае конкуренции обменных взаимодействий между спинами на узлах первых и вторых соседей в работе получено точное аналитическое выражение температурной зависимости волнового вектора магнитного диффузного рассеяния (79) для всего интервала значений параметров обменных взаимодействий, что позволяет описывать поведение как соразмерных, так и несоизмерных структур, в том числе и lock-in-переход. Кроме того, при интерпретации экспериментальных нейтронограмм эта функция дает возможность определять величины и знаки обменных взаимодействий спинов из поведения волнового вектора.

Как показывает сравнение температурной эволюции волнового вектора в экспериментах по магнитному упругому рассеянию нейтронов на реальных кристаллах с проведенными расчетами в одномерной модели, полученные в работе результаты позволяют целенаправленно проводить экспериментальные исследования реальных магнитных объектов с фрустрациями при использовании КФ в качестве прототипной.

Таким образом, предложенная схема анализа позволяет рассмотреть широкий круг явлений в одномерных (или квазиодномерных) магнитных системах с фрустрациями и описать их связь со спектральными особенностями упругого магнитного рассеяния неполяризованных нейтронов. Разработанный в работе математический аппарат дает возможность решать подобные задачи в более сложных моделях статистической физики, в частности, в многокомпонентных спиновых моделях с дискретной симметрией и произвольным значением спина.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания Федерального агентства научных организаций России (тема «Квант», № 01201463332) и при частичной финансовой поддержке Уральского отделения Российской академии наук (проект № 18-2-2-11).

ПРИЛОЖЕНИЕ

В качестве приложения приведем точные аналитические выражения для энтропии и намагнитненно-

сти при нулевой температуре в случае конкурирующих обменных взаимодействий между спинами на узлах первых и вторых соседей (88) для изинговской спиновой цепочки во внешнем магнитном поле.

Таким образом, в случае антиферро-антиферромагнитного варианта параметров обменных взаимодействий спинов на узлах первых и вторых соседей ($J_1 < 0, J_2 < 0$) во фрустрирующем магнитном поле H_{AA0} (112) нуль-температурные энтропия и намагнитченность соответственно равны

$$\lim_{T \rightarrow 0} S(H_{AA0}) = \ln \left[\frac{1}{3} \left(1 + \vartheta_0 + \frac{1}{\vartheta_0} \right) \right] \approx 0.382, \quad (118)$$

$$\vartheta_0 = \sqrt[3]{\frac{\sqrt{(3^3 + 2^2)3^3} + 3^3 + 2}{2}},$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} M(H_{AA0}) = \frac{1}{3} \left(1 + \nu_0 + \frac{2^2}{3^3 + 2^2} \frac{1}{\nu_0} \right) \approx 0.611, \quad (119)$$

$$\nu_0 = \left(\frac{2}{3^3 + 2^2} \right)^{2/3} \sqrt[3]{\sqrt{(3^3 + 2^2)3^3} + (3^3 + 2^2)}.$$

Во фрустрирующем магнитном поле H_{AA1} (113) —

$$\lim_{T \rightarrow 0} S(H_{AA1}) = \ln \left[\frac{1}{3} \left(\vartheta_1 + \frac{3}{\vartheta_1} \right) \right] \approx 0.281, \quad (120)$$

$$\vartheta_1 = \sqrt[3]{\frac{\sqrt{(3^3 - 2^2)3^3} + 3^3}{2}},$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} M(H_{AA1}) = \frac{1}{3} \left(1 + \nu_1 - \frac{2^2}{3^3 - 2^2} \frac{1}{\nu_1} \right) \approx 0.177, \quad (121)$$

$$\nu_1 = \left(\frac{2}{3^3 - 2^2} \right)^{2/3} \sqrt[3]{\sqrt{(3^3 - 2^2)3^3} - (3^3 - 2^2)},$$

а также во фрустрирующем магнитном поле H_{AA2} (115) —

$$\lim_{T \rightarrow 0} S(H_{AA2}) = \ln \left[\zeta_2 + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\zeta_2} - (2\zeta_2)^2} \right] \approx 0.199, \quad (122)$$

$$\zeta_2 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\vartheta_2}{3} - \frac{4}{\vartheta_2}},$$

$$\vartheta_2 = \sqrt[3]{\frac{\sqrt{(3^3 + 2^8)3^3} + 3^3}{2}},$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} M(H_{AA2}) = -\eta_2 + \sqrt{\frac{3^2}{3^3 + 2^8} - \eta_2^2 + \frac{2}{3^3 + 2^8} \frac{1}{\eta_2}} \approx 0.159, \quad (123)$$

$$\eta_2 = \sqrt{\frac{3}{3^3 + 2^8} + \frac{1}{2^2} \frac{\nu_2}{3} - \frac{2^8}{(3^3 + 2^8)^2} \frac{1}{\nu_2}},$$

$$\nu_2 = 2^{2/3} \frac{2^3}{3^3 + 2^8} \sqrt[3]{\sqrt{(3^3 + 2^8)3^3 + 3^3}}.$$

В случае ферро-антиферромагнитного варианта параметров обменных взаимодействий спинов на узлах первых и вторых соседей ($J_1 > 0$, $J_2 < 0$) во фрустрирующем магнитном поле H_{FA} (117) нуль-температурные энтропия и намагниченность системы равны

$$\lim_{T \rightarrow 0} S(H_{FA}) = \ln \left[\zeta_3 + \frac{1}{4} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{2^3} \frac{1}{\zeta_3} - (2\zeta_3)^2 + \frac{3}{4}} \right] \approx 0.322, \quad (124)$$

$$\zeta_3 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\vartheta_3}{3} - \frac{4}{\vartheta_3} + \frac{1}{4}},$$

$$\vartheta_3 = \sqrt[3]{\frac{\sqrt{(3^3 + 2^8)3^3 - 3^3}}{2}},$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} M(H_{FA}) = \eta_3 + \sqrt{\frac{3^2}{3^3 + 2^8} - \eta_3^2 + \frac{2}{3^3 + 2^8} \frac{1}{\eta_3}} \approx 0.397, \quad (125)$$

$$\eta_3 = \sqrt{\frac{3}{3^3 + 2^8} + \frac{1}{2^2} \frac{\nu_3}{3} - \frac{2^8}{(3^3 + 2^8)^2} \frac{1}{\nu_3}},$$

$$\nu_3 = 2^{2/3} \frac{2^3}{3^3 + 2^8} \sqrt[3]{\sqrt{(3^3 + 2^8)3^3 + 3^3}}.$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Ф. А. Кассан-Оглы, Б. Н. Филиппов, Изв. РАН, сер. физ. **74**, 1513 (2010).
2. B. Normand, *Contemp. Phys.* **50**, 533 (2009).
3. L. Balents, *Nature* **464**, 199 (2010).
4. *Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory*, ed. by C. Lacroix, P. Mendels, and F. Mila, Springer, Berlin, Heidelberg (2011).
5. J.-F. Sadoc and R. Mosseri, *Geometrical Frustration*, Cambridge Univ. Press, New York (1999).
6. *Frustrated Spin Systems*, ed. by H. T. Diep, 2nd edition, World Scientific, New Jersey (2013).
7. G. Toulouse, *Commun. Phys.* **2**, 115 (1977).
8. J. Vannimenus and G. Toulouse, *J. Phys. C: Sol. St. Phys.* **10**, L537 (1977).
9. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва (1985).
10. E. Ising, *Z. Phys.* **31**, 253 (1925).
11. S. G. Brush, *Rev. Mod. Phys.* **39**, 883 (1967).
12. M. Niss, *Arch. Hist. Exact Sci.* **59**, 267 (2005).
13. F. A. Kassan-Ogly, *Phase Transitions* **74**, 353 (2001).
14. Ф. А. Кассан-Оглы, Е. В. Кормильцев, В. Е. Найш, И. В. Сагарадзе, *ФТТ* **31**, 43 (1989).
15. A. V. Zarubin, F. A. Kassan-Ogly, and A. I. Proshkin, *Mater. Sci. Forum* **845**, 122 (2016).
16. H. A. Kramers and G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **60**, 252 (1941).
17. R. A. Horn and C. R. Johnson, *Matrix Analysis*, 2nd edition, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2013).
18. G. Mussardo, *Statistical Field Theory: An Introduction to Exactly Solved Models in Statistical Physics*, Oxford Univ. Press, Oxford, New York (2010).
19. W. Nolting and A. Ramakanth, *Quantum Theory of Magnetism*, Springer, Berlin, Heidelberg (2009).
20. A. Guinier and R. Griffoul, *Acta Crystallogr.* **1**, 188 (1948).
21. А. Гинье, *Рентгенография кристаллов. Теория и практика*, Физматгиз, Москва (1961).
22. А. Зоммерфельд, *Термодинамика и статистическая физика*, Изд-во иностр. лит., Москва (1955).
23. W. Nolting, *Theoretical Physics 8: Statistical Physics*, Springer, Cham (2018).
24. A. V. Zarubin, F. A. Kassan-Ogly, M. V. Medvedev, and A. I. Proshkin, *Sol. St. Phenom.* **233–234**, 212 (2015).
25. A. Proshkin, F. Kassan-Ogly, A. Zarubin, T. Ponomareva, and I. Mensikh, *EPJ Web Conf.* **185**, 03004 (2018).
26. J. G. Sereni, in *Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths. 15*, Elsevier (1991), Ch. 98, p. 1–59.
27. T. Matsumura, H. Shida, and T. Suzuki, *Physica B* **230–232**, 738 (1997).

28. H. Tsujii, C. R. Rotundu, Y. Takano, B. Andraka, Y. Aoki, H. Sugawara, and H. Sato, *J. Magn. Magn. Mater.* **272–276**, 173 (2004).
29. Y. Sato, H. Morodomi, Y. Inagaki, T. Kawae, and H. S. Suzuki, *J. Phys.: Conf. Ser.* **568**, 042027 (2014).
30. M. A. Avila, S. L. Bud'ko, and P. C. Canfield, *J. Magn. Magn. Mater.* **270**, 51 (2004).
31. Y. Kobayashi, T. Onimaru, M. A. Avila, K. Sasai, M. Soda, K. Hirota, and T. Takabatake, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 124701 (2008).
32. P. Santini, R. Lémanski, and P. Erdős, *Adv. Phys.* **48**, 537 (1999).
33. J. Stephenson, *Can. J. Phys.* **48**, 1724 (1970).
34. J. F. Dobson, *J. Math. Phys.* **10**, 40 (1969).
35. T. Oguchi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **20**, 2236 (1965).
36. A. I. Proshkin and F. A. Kassan-Ogly, *Mater. Sci. Forum* **845**, 93 (2016).
37. H. Wada, H. Imai, and M. Shiga, *J. Alloys Comp.* **218**, 73 (1995).
38. V. Goruganti, K. D. D. Rathnayaka, J. H. Ross, Y. Öner, C. S. Lue, and Y. K. Kuo, *J. Appl. Phys.* **103**, 073919 (2008).
39. O. Pavlosiuk, D. Kaczorowski, X. Fabreges, A. Gukasov, and P. Wiśniewski, *Sci. Rep.* **6**, 18797 (2016).
40. S. Wakimoto, S. Lee, P. M. Gehring, R. J. Birgeneau, and G. Shirane, *J. Phys. Soc. Jpn.* **73**, 3413 (2004).
41. S. Wakimoto, H. Kimura, M. Fujita, K. Yamada, Y. Noda, G. Shirane, G. Gu, H. Kim, and R. J. Birgeneau, *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 074714 (2006).
42. R. Kajimoto, H. Yoshizawa, Y. Tomioka, and Y. Tokura, *Phys. Rev. B* **63**, 212407 (2001).
43. T. Chattopadhyay, P. J. Brown, P. Thalmeier, and H. G. von Schnering, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 372 (1986).
44. T. Chattopadhyay, P. J. Brown, and H. G. von Schnering, *EuroPhys. Lett.* **6**, 89 (1988).
45. F. Pfuner, S. N. Gvasaliya, O. Zaharko, L. Keller, J. Mesot, V. Pomjakushin, J.-H. Chu, I. R. Fisher, and L. Degiorgi, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 036001 (2012).
46. P. Burllet, S. Quezel, J. Rossat-Mignod, J. C. Spirlet, J. Rebizant, W. Müller, and O. Vogt, *Phys. Rev. B* **30**, 6660 (1984).
47. D. Vaknin, J. L. Zarestky, J.-P. Rivera, and H. Schmid, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 207201 (2004).
48. J. von Boehm and P. Bak, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 122 (1979).
49. P. Bak and J. von Boehm, *Phys. Rev. B* **21**, 5297 (1980).
50. P. Bak, *Rep. Progr. Phys.* **45**, 587 (1982).
51. W. Selke and M. E. Fisher, *Phys. Rev. B* **20**, 257 (1979).
52. E. B. Rasmussen and S. J. Knak Jensen, *Phys. Rev. B* **24**, 2744 (1981).
53. M. E. Fisher and W. Selke, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 1502 (1980).
54. W. Selke and P. M. Duxbury, *Z. Phys. B* **57**, 49 (1984).
55. W. Selke, *Phys. Rep.* **170**, 213 (1988).
56. W. Selke, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, ed. by C. Domb and J. L. Lebowitz, Acad. Press, London (1992), Ch. 1, p. 1.
57. S. Aubry, *J. Phys. C: Sol. St. Phys.* **16**, 2497 (1983).
58. S. Aubry, K. Fesser, and A. R. Bishop, *Ferroelectrics* **66**, 151 (1986).