

ДЕКОРИРОВАННАЯ ИЗИНГОВСКАЯ ЦЕПОЧКА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

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

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

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

Поступила в редакцию 21 июля 2020 г.,
после переработки 16 августа 2020 г.
Принята к публикации 20 августа 2020 г.

Проведено обобщение метода трансфер-матрицы Крамерса–Ваннье на произвольное число декорирования изинговской цепочки. Получено точное аналитическое выражение для наибольшего собственного значения трансфер-матрицы декорированной изинговской цепочки в присутствии внешнего магнитного поля. Найдены точки фрустраций и величины фрустрационных магнитных полей, зависящие от величин и знаков обменных взаимодействий. Получены точные выражения для нуль-температурных энтропий и нуль-температурных намагниченностей рассматриваемой модели. Построены магнитные фазовые диаграммы основного состояния системы для значений декорирования $d = 1$ и $d = 2$, в том числе и в отсутствие магнитного поля. Проведено сравнение с декорированной квадратной решеткой не только в отсутствие, но и при наличии магнитного поля.

DOI: 10.31857/S0044451020120135

1. ВВЕДЕНИЕ

Как известно, в модели Изинга, как и во множестве других моделей, на одномерной решетке не наблюдается фазовых переходов [1, 2], в отличие от двумерных [3–6] и трехмерных решеток, тем не менее одномерная модель Изинга до сих пор привлекает внимание исследователей своей простотой и преимуществом в получении точных аналитических решений в присутствии внешнего магнитного поля [7]. В данной работе с помощью весьма эффективного метода трансфер-матрицы Крамерса–Ваннье [8] было выведено одно из таких точных решений, которое до настоящего момента не было получено. Более того, метод трансфер-матрицы Крамерса–Ваннье был обобщен на произвольное число трансляций изинговской цепочки в сравнении с исходным методом трансфер-матрицы.

За последние годы наметилась тенденция в изучении так называемых декорированных решеток

(см., например, [9] с обширно цитируемой литературой). Это можно объяснить тем, что декорирование порождает ряд новых, еще не до конца изученных эффектов.

Термин декорированная решетка был введен в работе Сиози [10], после чего данная концепция начала стремительно развиваться другими авторами [11, 12]. Процедура построения декорированной цепочки выглядит следующим образом. Представим обычную решетку, в узлы которой помещены одинаковые спины, которые принимают значение либо $+1$, либо -1 . Далее определяются обменные взаимодействия между спинами. Спины, между которыми определено взаимодействие только между вторыми соседями или только между третьими соседями и т. д., называются нодалными, а все остальные относятся к ненодальным (декорированным) спином с обменным взаимодействием только между ближайшими соседями.

Стоит подчеркнуть, что подавляющее большинство реальных структур являются декорированными. Более того, некоторые кристаллические соединения можно также назвать декорированными, а именно, решетки ГЦК и ОЦК, в отличие от простой кубической, относятся к таким (ОЦК декорирова-

* E-mail: eguny@mail.ru

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

на по объему куба, а ГЦК декорирована по шести граням куба).

Основной задачей данной работы стало обобщение метода трансфер-матрицы Крамерса – Ваннье на произвольное число декорирования изинговской цепочки с последующим исследованием фрустрирующих, термодинамических, а также магнитных свойств рассматриваемой модели.

2. МЕТОД ТРАНСФЕР-МАТРИЦЫ КРАМЕРСА – ВАННЬЕ

Из целого ряда способов точного получения статистических сумм, пожалуй, наиболее предпочтительным является метод трансфер-матрицы, введенный Крамерсом и Ваннье.

В 1941 г. Крамерс и Ваннье в своей работе [8] показали, что расчет статистической суммы гигантского числа (2^N) магнитных конфигураций сводится к нахождению одного главного (наибольшего) собственного значения некоторой матрицы конечной размерности. В результате свободная энергия и все термодинамические и магнитные характеристики системы выражаются через это собственное значение простым дифференцированием по температуре и магнитному полю.

Рассмотрим одномерную модель Изинга, состоящую из N узлов, во внешнем магнитном поле. Гамильтониан этой задачи записывается в следующем виде:

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

где $s_i = \pm 1$, J – обменное взаимодействие между ближайшими соседями, H – внешнее магнитное поле.

Статистическая сумма рассматриваемой модели будет равна

$$Z_N = \sum_{\{s_i\}} \exp \left[\frac{J}{kT} \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} + \frac{H}{kT} \sum_{i=1}^N s_i \right]. \quad (2)$$

Отметим, что здесь и в дальнейших преобразованиях постоянная Больцмана k будет положена равной единице, а величины T и H будут измеряться в единицах $|J|$, как это принято в теории низкоразмерных систем.

Кроме того, на задачу накладываются так называемые периодические условия или еще их называют граничными условиями Борна – Кармана. Таким образом, узел s_{N+1} оказывается тождественен узлу s_1 . Другими словами, осуществляется замыкание цепочки спинов в кольцо.

Заметим, что экспонента в формуле (2) может быть представлена как произведение сомножителей, каждый из которых зависит только от одной пары соседних спинов:

$$Z_N = \sum_{\{s_i\}} \prod_{i=1}^N V(s_i, s_{i+1}), \quad (3)$$

где $V(s_i, s_{i+1})$ – трансфер-матрица Крамерса – Ваннье.

Используя матричный формализм, представим выражение для статистической суммы (3) как след произведения N одинаковых трансфер-матриц, таким образом, статистическая сумма может быть переписана в терминах собственных значений введенной трансфер-матрицы:

$$Z_N = \text{Sp } V^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N. \quad (4)$$

где

$$\lambda_{1,2} = e^{J/T} \left[\text{ch} \left(\frac{H}{T} \right) \pm \sqrt{\text{sh}^2 \left(\frac{H}{T} \right) + e^{-4J/T}} \right], \quad (5)$$

полученные корни секулярного уравнения $\text{Det}(V - \lambda I) = 0$. Из непосредственных расчетов следует, что корень λ_1 всегда положителен и больше корня λ_2 , т.е. он всегда максимален. Таким образом, λ_1 – это максимальное собственное значение трансфер-матрицы (которое всегда существует для матрицы с вещественными матричными элементами согласно теореме Фробениуса – Перрона [13], будучи также вещественным).

Перепишав статистическую сумму (4) в виде

$$Z_N = \lambda_1^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right], \quad (6)$$

и учитывая, что $\lambda_1 > \lambda_2$, в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$) получаем свободную энергию на один узел решетки ($F = f/N$) следующим образом:

$$F(H, T) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[-\frac{T}{N} \ln Z_N \right] = -T \ln \lambda_1, \quad (7)$$

или же

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

Такие параметры, как энтропия S , теплоемкость C и намагниченность M выражаются простым дифференцированием только через максимальное собственное значение λ_{max} по обычным формулам термодинамики:

$$S(H, T) = -\frac{\partial F}{\partial T} = \ln \lambda_{max} + \frac{T}{\lambda_{max}} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial T}, \quad (9)$$

$$C(H, T) = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} = \frac{2T}{\lambda_{max}} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial T} + T^2 \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{\lambda_{max}} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial T}, \quad (10)$$

$$M(H, T) = -\frac{\partial F}{\partial H} = \frac{\text{sh}(H/T)}{\sqrt{\text{sh}^2(H/T) + e^{-4J/T}}}. \quad (11)$$

Выражение для намагниченности (11) в точности такое же, которое получил Изинг при рассмотрении одномерной решетки [1].

Отметим, что намагниченность в отсутствие внешнего поля обращается в нуль, т. е. спонтанная намагниченность в одномерном случае отсутствует не только при антиферромагнитном, но и при ферромагнитном взаимодействии!

3. ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ДЕКОРИРОВАННОЙ ИЗИНГОВСКОЙ ЦЕПОЧКИ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Предметом нашего рассмотрения является декорированная изинговская цепочка в магнитном поле. Гамильтониан данной решетки представляется в следующем виде:

$$\mathcal{H}(s) = -J_d \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} - J \sum_{j=1, d+2, \dots}^N s_j s_{j+d+1} - H \sum_{i=1}^N s_i, \quad (12)$$

где J_d — обменное взаимодействие между ближайшими декорированными спинами и нодальными спинами, а также между декорированными спинами, J — обменное взаимодействие только между нодальными спинами, H — величина внешнего магнитного поля. Индекс d обозначает число так называемых декораций цепочки.

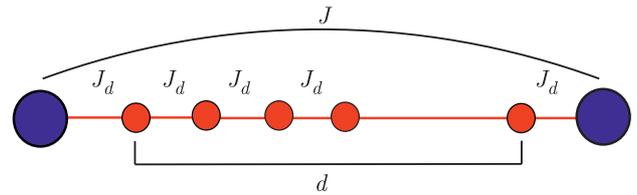


Рис. 1. Декорированная цепочка с обменным взаимодействием ближайших соседей J_d и обменным взаимодействием J

На рис. 1 проиллюстрирована решетка спинов, соответствующая декорированной цепочке, описываемой гамильтонианом (12). Красные кружки обозначают декорированные спины, синие кружки — нодальные спины. Каждый спин обладает двумя состояниями $s = \pm 1$.

В данной работе, в отличие от обычного метода Крамерса–Ваннье, рассмотренного выше, трансфер-матрица будет обобщена на произвольное число декорирования изинговской цепочки.

Если рассматривается единожды декорированная цепочка, т. е. $d = 1$, то статистическая сумма в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$) вычисляется из выражения $Z_N = \lambda_{max}^{N/2}$ [14]. Для дважды декорированной цепочки имеем статистическую сумму в виде $Z_N = \lambda_{max}^{N/3}$, для трижды декорированной цепочки — $Z_N = \lambda_{max}^{N/4}$ и т. д. В общем случае выражение для статистической суммы с произвольным числом декорирования цепочки примет вид

$$Z_N = \lambda_{max}^{N/(d+1)}. \quad (13)$$

Знаменатель в степени наибольшего собственного значения всегда на единицу больше величины декорирования цепочки d . Это продиктовано тем, что в отсутствие декорированных спинов ($d = 0$) в цепочке остаются только нодальные спины, таким образом, получаем обычную (недекорированную) модель Изинга, статистическая сумма которой вычисляется, как известно, с помощью $Z_N = \lambda_{max}^N$.

Любопытно, что если d стремится к бесконечности, то эта задача вновь сводится к обычной (недекорированной) модели Изинга, поскольку с увеличением числа «декораций» относительный вклад в энергию от нодальных спинов становится все более и более незначительным.

Следуя алгоритму трансфер-матрицы Крамерса–Ваннье [8] и применяя предложенное Сиози декорационно-итерационное преобразование (decoration-iteration transformation) [12], мы определили точное выражение для наибольшего собственного значения трансфер-матрицы декорированной цепочки, находящейся в магнитном поле,

$$\lambda_{max} = \frac{1}{2} \left[e^{J/T} (\lambda_1^{d+1} + \lambda_2^{d+1}) + e^{-J/T} (\lambda_1^{d+1} - \lambda_2^{d+1}) \varepsilon \right], \quad (14)$$

где

$$\lambda_1 = \exp(J_d/T) \left[\text{ch}(H/T) + \sqrt{\text{sh}^2(H/T) + \exp(-4J_d/T)} \right], \quad (15a)$$

$$\lambda_2 = \exp(J_d/T) \left[\text{ch}(H/T) - \sqrt{\text{sh}^2(H/T) + \exp(-4J_d/T)} \right], \quad (15b)$$

$$\varepsilon = \sqrt{1 + \text{sh}^2(H/T)(\exp(4J/T) - 1) / (\text{sh}^2(H/T) + \exp(-4J_d/T))}. \quad (15c)$$

Поскольку термодинамические и магнитные характеристики исследуемой декорированной цепочки могут быть выражены только через ее максимальное собственное значение λ_{max} , то, принимая во внимание кратность декорирования цепочки d , аналитические выражения для энтропии, теплоемкости, намагниченности и параметра порядка запишем в виде

$$S(H, T) = \frac{\ln \lambda_{max}}{d+1} + \frac{T}{(d+1)\lambda_{max}} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial T}, \quad (16)$$

$$C(H, T) = \frac{2T}{(d+1)\lambda_{max}} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial T} + \frac{T^2}{(d+1)} \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{\lambda_{max}} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial T}, \quad (17)$$

$$M(H, T) = \frac{T}{(d+1)\lambda_{max}} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial H}, \quad (18)$$

$$\eta(H, T) = 1 - \frac{\ln \lambda_{max}}{(d+1) \ln 2} - \frac{T}{(d+1)\lambda_{max} \ln 2} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial T}. \quad (19)$$

4. ФРУСТРАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ДЕКОРИРОВАННОЙ ИЗИНГОВСКОЙ ЦЕПОЧКИ

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 [15, 16].

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 [17].

В этом разделе исследуются фрустрационные свойства декорированной изинговской цепочки во внешнем магнитном поле с учетом обменных взаимодействий между декорированными узлами решетки и между декорированными и нодальными узлами J_d , а также между нодальными узлами со взаимодействием равным J .

Несмотря на столь сложную цепочку, нам удалось, тем не менее, получить точное решение в термодинамическом пределе, что дает возможность качественно рассмотреть искомые характеристики, в том числе и объяснить свойства магнетиков, обусловленные фрустрациями.

При антиферромагнитном обмене спинов декорированной цепочки как между декорированными спинами, так и между нодальными спинами, а именно, $J_d = -1$, $J = -1$ во внешнем магнитном поле $H = 2$ при нулевой температуре энтропия системы (рис. 2a) может быть записана в общем виде для любых значений декорирования d :

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = \frac{1}{d+1} \ln \left[\frac{1}{\sqrt{5}} (\varphi^{d+1} - (1-\varphi)^{d+1}) \right], \quad (20)$$

где $\varphi = (1 + \sqrt{5})/2$ — известное уже в течении тысячелетий золотое сечение.

Следовательно, система в данном режиме фрустрирована, а внешнее магнитное поле является фрустрирующим.

На рис. 2а видно, что при стремлении d к бесконечности нуль-температурная энтропия сходится к логарифму золотого сечения. Можно это показать, используя выражение (20)

$$\lim_{d \rightarrow \infty} \lim_{T \rightarrow 0} S = \lim_{d \rightarrow \infty} \frac{1}{d+1} \times \ln \left[\frac{1}{\sqrt{5}} (\varphi^{d+1} - (1-\varphi)^{d+1}) \right] = \ln \varphi. \quad (21)$$

Кроме того, наблюдается еще одно фрустрирующее поле при $H = 4$, $J_d = -1$, $J = -1$. Нуль-температурная энтропия при различных значениях декорирования (рис. 2б) может быть представлена в следующем виде:

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = \frac{1}{d+1} \ln \varphi. \quad (22)$$

Обратим внимание на то, что полученные результаты не противоречат третьему началу термодинамики, поскольку энтропия определяется через дифференциал $dS = \delta Q/T$ 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, $S_0 = 0$.

Отметим еще то, что при стремлении температуры к бесконечности энтропия равна натуральному логарифму двух:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} S = \ln 2, \quad (23)$$

поскольку число состояний на узле равно двум.

Однако при стремлении температуры к нулю либо к бесконечности удельная теплоемкость системы при любых параметрах обменного взаимодействия равна нулю (рис. 3а):

$$\lim_{T \rightarrow 0} C = 0, \quad \lim_{T \rightarrow \infty} C = 0. \quad (24)$$

Кроме того, в непосредственной близости к точке фрустрации теплоемкость расщепляется на два пика: острый и куполообразный пики. На рис. 3б изображена теплоемкость в точке фрустрации ($H = 2$) — наблюдается один куполообразный пик, тогда как вблизи фрустрации, а именно, в магнитном поле равном $H = 1.9$ и $H = 2.1$ у теплоемкости возникает дополнительный острый пик.

Намагниченность системы при антиферромагнитном обменном параметре спинов цепочки для $J_d = -1$, $J = -1$ во фрустрирующем поле $H = 2$ и нулевой температуре имеет конечное значение при различных параметрах декорирования d (рис. 4а):

$$\lim_{T \rightarrow 0} M = \frac{(d+1 - 1/\sqrt{5}) \varphi^{d+1} + (d+1 + 1/\sqrt{5}) (1-\varphi)^{d+1}}{\sqrt{5}(d+1) (\varphi^{d+1} - (1-\varphi)^{d+1})}. \quad (25)$$

Во фрустрирующем поле $H = 4$ при антиферромагнитном обменном параметре спинов цепочки $J_d = -1$, $J = -1$ и различных параметрах декорирования имеем следующую нуль-температурную намагниченность (рис. 4б):

$$\lim_{T \rightarrow 0} M = \frac{1}{\sqrt{5}} \left(\frac{1 + d\sqrt{5}}{d+1} \right). \quad (26)$$

Обратим внимание на тот факт, что характер поведения намагниченности в случае антиферромагнитного взаимодействия между спинами при нечетных и четных значениях d различен. При нечетных значениях d намагниченность около фрустрирующего поля, равного двум, расщепляется на два промежуточных плато (рис. 4а), а при четных d происходит образование только одного промежуточного плато (рис. 4б).

Рассмотрим взаимодействие спинов следующего типа. Обменное взаимодействие между декориро-

ванными спинами (и между декорированными и nodальными спинами) J_d сделаем антиферромагнитным, а обменное взаимодействие между nodальными спинами J будет ферромагнитным. Соответствующие температурные зависимости энтропий в точках фрустраций для различных значений декорирования проиллюстрированы на рис. 5.

Энтропия системы при таком антиферро-ферромагнитном обмене (рис. 5а) ($J_d = -1$, $J = 1$) во внешнем магнитном поле $H = 2$ при стремлении температуры к нулю выражается следующим образом:

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = \frac{1}{d+1} \ln \left[\frac{1}{\sqrt{5}} (\varphi^{d+2} - (1-\varphi)^{d+2}) \right]. \quad (27)$$

Соответствующие им значения нуль-температурных намагниченностей во фрустрирующем поле $H = 2$ можно определить в виде

$$\lim_{T \rightarrow 0} M = \frac{(d + 2 - 1/\sqrt{5}) \varphi^{d+2} + (d + 2 + 1/\sqrt{5}) (1 - \varphi)^{d+2}}{\sqrt{5}(d + 1) (\varphi^{d+2} - (1 - \varphi)^{d+2})}. \quad (28)$$

Однако для фрустрирующего поля $H = 4$ установлено, что при любом значении декорирования цепочки значения нуль-температурных энтропий равны нулю, т. е. фрустрирующих состояний не наблюдается, в связи с этим система обладает определенной магнитной конфигурацией в основном состоянии. Данный факт отмечен на рис. 5б для антиферро-ферромагнитного взаимодействия между спинами, кроме того, на рис. 6а изображены намагниченности, описываемые выражениями (28) с фрустрирующим полем $H = 2$. При четных значениях параметра d у намагниченности наблюдается одно промежуточное плато.

В противоположном случае ферро-антиферромагнитного обмена ($J_d = 1, J = -1$), называемого еще квазиферромагнитным, имеем, что при любых d при сколь угодно малом магнитном поле намагниченность стремится к полному упорядочению вдоль приложенного поля (рис. 6б).

А в случае ферромагнитного обмена ($J_d = 1, J = 1$) при любых значениях параметра d наблюдается аналогичная ситуация, что и в случае квазиферромагнитного обмена.

Отдельно стоит отметить одну особенность поведения намагниченности рассматриваемой декорированной цепочки. Было замечено, что промежуточные плато намагниченности всегда представляются рациональными дробями. Например, для случая единожды декорированной цепочки с антиферромагнитным обменом ($J_d = -1, J = -1$) имеется промежуточное плато намагниченности со значением $1/2$ (рис. 4а), что говорит о том, что половина спинов развернулась вдоль внешнего магнитного поля, тогда как для трижды декорированной цепочки плато намагниченностей располагаются на уровнях $1/4$ и $3/4$ и символизируют то, что сначала во фрустрирующем поле, равном нулю, повернулась вдоль внешнего магнитного поля четверть всех спинов в цепочке, затем во фрустрирующем поле, равном двум, доля повернутых спинов составит три четверти и уже во фрустрирующем поле, равном четырем, вдоль магнитного поля развернутся все спины цепочки. Нетрудно определить, что при значении декорирования, равном d , получим плато намагниченности на уровнях $1/(d + 1)$ и $d/(d + 1)$. И, устремив d к бесконечности, замечаем, что промежуточные плато исчезают, а задача сводится к обычной (недекорированной) модели Изинга в маг-

нитном поле с единственным фрустрирующим полем равном двум.

Напоследок необходимо добавить, что при d , стремящемся к бесконечности, нуль-температурное значение намагниченности M равно $1/\sqrt{5}$, что соответствует тому, что задача снова сводится к недекорированной модели Изинга (см. рис. 7).

5. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ДЕКОРИРОВАННОЙ ИЗИНГОВСКОЙ ЦЕПОЧКИ

Для описания термодинамических и магнитных свойств декорированной изинговской цепочки изобразим трехмерные графики для теплоемкости и намагниченности как функции температуры и магнитного поля.

На рис. 8 проиллюстрирован трехмерный график теплоемкости как функции температуры и магнитного поля для трижды декорированной цепочки при антиферромагнитном взаимодействии ($J_d = -1, J = -1$). Значения магнитного поля в точках, где теплоемкость обращается в нуль (при температуре, стремящейся к нулю), соответствуют фрустрирующим полям. Нетрудно увидеть, что имеются три фрустрирующих поля, которые равны нулю, двум и четырем. В этих полях намагниченность испытывает скачок, в чем можно убедиться, глядя на рис. 9.

Рисунок 9 демонстрирует трехмерный график намагниченности, зависящей от величины магнитного поля и температуры для трижды декорированной цепочки при антиферромагнитном взаимодействии ($J_d = -1, J = -1$). Видно, что с увеличением температуры кривая намагниченности размывается и промежуточные плато исчезают.

Исследуемая декорированная изинговская цепочка зависит от четырех независимых параметров, J_d, J, H, d , поэтому не представляется возможным изобразить полную фазовую диаграмму, поскольку для этого потребуются четырехмерное пространство. Тем не менее, на рис. 10 представлены некоторые сечения этого четырехмерного пространства.

Построены магнитные фазовые диаграммы в координатах (H, J) для единожды и дважды декорированной цепочек, находящихся во внешнем магнитном поле (рис. 10). Замечено, что при $d = 1$ в основном состоянии присутствуют три магнитные фазовые конфигурации, а именно, антиферромагнитная фаза C_2 с удвоением периода трансляции цепочки:

$$C_2 = \left\{ \begin{array}{c} \dots \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \dots \\ \dots \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots \end{array} \right\}$$

с энергией $E_{C_2}^{d=1} = -J/2 + J_d$, ферромагнитная фаза C_1 с сохранением периода трансляции:

$$C_1 = \{ \dots \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \dots \}$$

с энергией $E_{C_1}^{d=1} = -J/2 - J_d - H$ и упорядочение C_4 с учетверением периода трансляции цепочки:

$$C_4 = \{ \dots \uparrow \uparrow \downarrow \uparrow \dots \}$$

с энергией $E_{C_4} = J/2 - H/2$ (см. рис. 10а). Все остальные фазы имеют более высокую энергию и оказываются невыгодными в основном состоянии.

В случае $d = 2$ в основном состоянии имеются четыре различные конфигурации: антиферромагнитная C_2 с энергией $E_{C_2}^{d=2} = J/3 + J_d$, ферромагнитная C_1 с энергией $E_{C_1}^{d=2} = -J/3 - J_d - H$, а также конфигурация C_3 с утроением периода трансляции:

$$C_3 = \left\{ \begin{array}{c} \dots \uparrow \uparrow \downarrow \dots \\ \dots \uparrow \downarrow \uparrow \dots \end{array} \right\}$$

с энергией $E_{C_3} = -J/3 + J_d/3 - H/3$ и фаза C_6 с ушестерением периода трансляции

$$C_6 = \left\{ \begin{array}{c} \dots \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow \uparrow \uparrow \dots \\ \dots \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \dots \end{array} \right\}$$

с энергией $E_{C_6} = J/3 - J_d/3 - 2H/3$ (см. рис. 10б).

Также, на приведенных диаграммах можно увидеть, что фазы на рисунках сходятся в точке при $J_d = -1, J = 0, H = 2$. В этой точке схождения фаз нуль-температурная энтропия равняется логарифму золотого сечения, т. е. при таких параметрах задача сводится к обычной (недекорированной) модели Изинга в магнитном поле.

Кроме того, две фазы могут пересекаться на линиях схождения фаз. Такие линии схождения двух фаз, представленные на рис. 10, соответствуют определенному обмену — антиферромагнитному или антиферро-ферромагнитному, которые рассматривались в прошлом разделе. Например, линия схождения фаз $C_1 - C_4$ (так же, как и $C_1 - C_6$) соответствует антиферромагнитному обмену с нуль-температурными энтропиями (22) и нуль-температурными намагниченностями (26).

6. СЛУЧАЙ НУЛЕВОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ

Как отмечалось ранее, декорированная изинговская цепочка при различных обменных параметрах

может обладать тремя фрустрирующими полями: $H = 0, H = 2, H = 4$. Поля равные двум и четырем мы рассмотрели, исследуем случай нулевого фрустрационного поля.

Полагая в выражениях (14) и (15) $H = 0$, получим, что наибольшее собственное значение трансфер-матрицы для декорированной изинговской цепочки в отсутствие магнитного поля имеет вид

$$\lambda_{max} = 2^{d+1} \left[\text{ch}^{d+1} \left(\frac{J_d}{T} \right) \text{ch} \left(\frac{J}{T} \right) + \text{sh}^{d+1} \left(\frac{J_d}{T} \right) \text{sh} \left(\frac{J}{T} \right) \right]. \quad (29)$$

Как известно, одномерная обычная (недекорированная) модель Изинга в отсутствие магнитного поля не содержит нуль-температурных энтропий, не равных нулю. Однако, как можно заметить, в нашей задаче их возникает целое множество даже в нулевом магнитном поле.

Для антиферромагнитного случая как между декорированными спинами, так и между нодальными спинами ($J_d = -1, J = -1$) имеем следующий ряд нуль-температурных энтропий:

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = \begin{cases} \frac{\ln 3}{2}, \frac{\ln 5}{4}, \frac{\ln 7}{6}, \dots, \frac{\ln(d+2)}{d+1}, & d - \text{нечетное,} \\ 0, & d - \text{четное.} \end{cases}$$

Для антиферро-ферромагнитного случая ($J_d = -1, J = 1$) получился ряд в виде

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = \begin{cases} 0, & d - \text{нечетное,} \\ \frac{\ln 4}{3}, \frac{\ln 6}{5}, \frac{\ln 8}{7}, \dots, \frac{\ln(d+2)}{d+1}, & d - \text{четное.} \end{cases}$$

В случае ферро-антиферромагнитного взаимодействия ($J_d = 1, J = -1$) получаем следующий ряд:

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = \frac{\ln 3}{2}, \frac{\ln 4}{3}, \frac{\ln 5}{4}, \dots, \frac{\ln(d+2)}{d+1}$$

при любом d .

Для ферромагнитного случая как между декорированными спинами, так и между нодальными спинами ($J_d = 1, J = 1$) нуль-температурные энтропии равны нулю, т. е. фрустрированных состояний не наблюдается.

В отсутствие взаимодействия между ближайшими соседями ($J_d = 0$) с сохранением антиферромагнитного (или ферромагнитного) обменного взаимодействия между нодальными спинами J получен ряд значений для различных d :

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = \frac{\ln 2}{2}, \frac{2 \ln 2}{3}, \frac{3 \ln 2}{4}, \dots, \frac{d \ln 2}{d+1}.$$

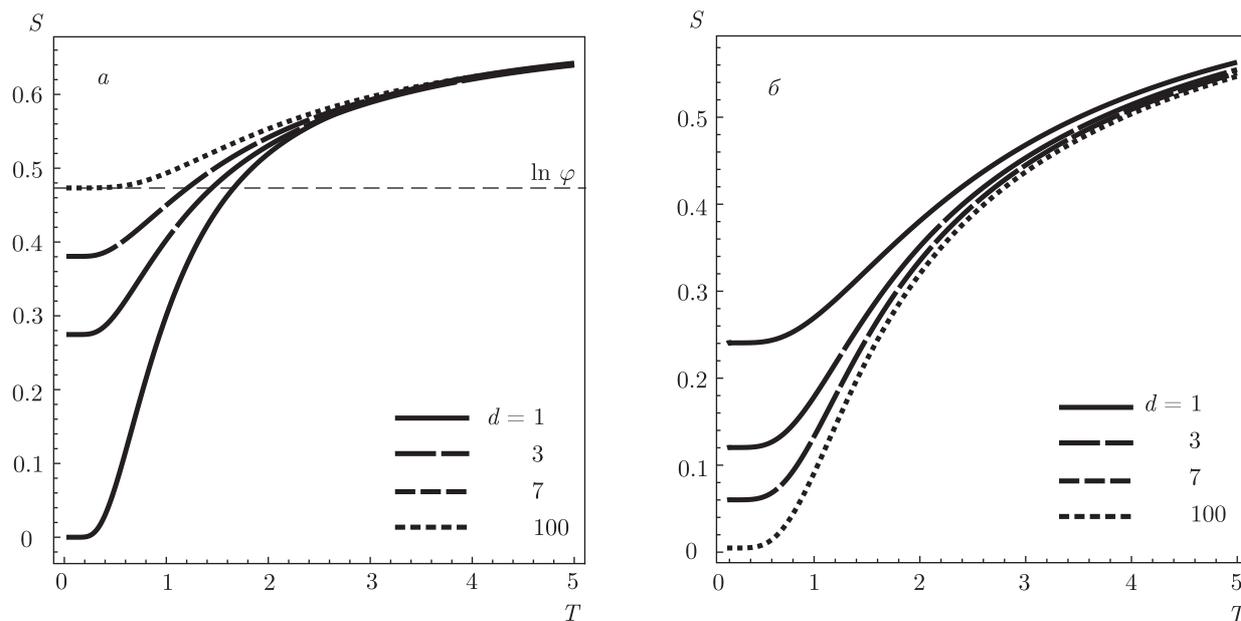


Рис. 2. Температурные зависимости энтропий в точках фрустраций антиферромагнитной модели Изинга ($J_d = -1$, $J = -1$) для различных значений декорирования цепочки: *a* — в магнитном поле $H = 2$; *б* — в магнитном поле $H = 4$

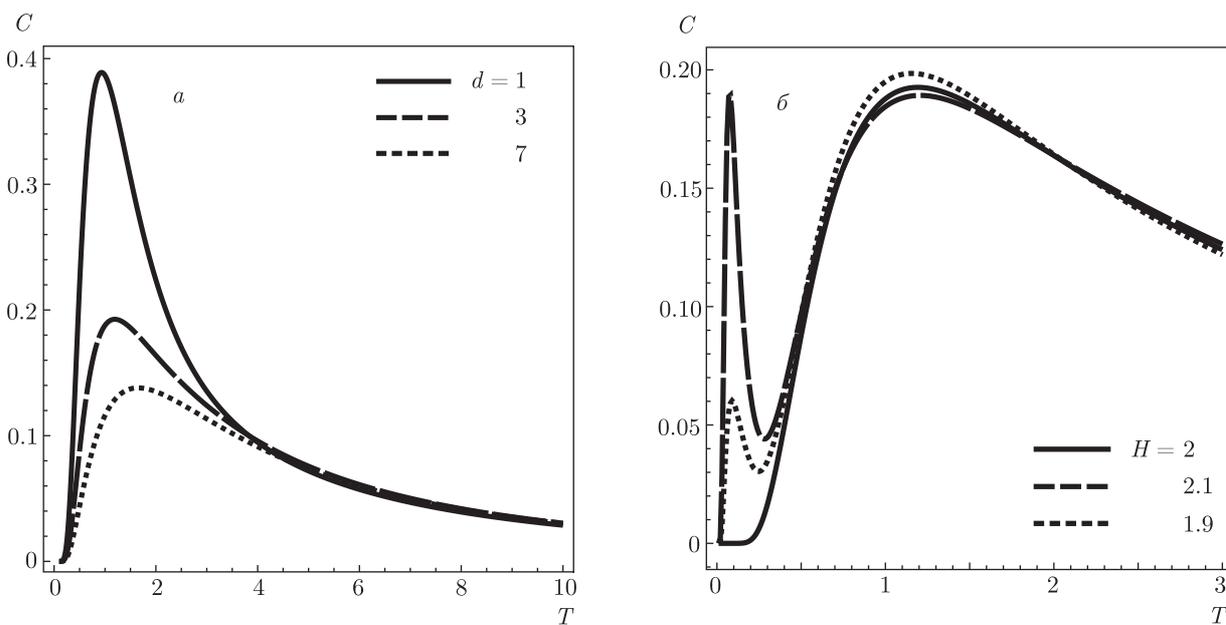


Рис. 3. Температурные зависимости теплоемкостей при различных значениях декорирования d : *a* — теплоемкость всегда равна нулю при стремлении температуры к нулю или к бесконечности ($H = 2$ для всех кривых), *б* — расщепление теплоемкости на два пика вблизи фрустрации

Для случая нулевого магнитного поля также были построены фазовые диаграммы (рис. 11) для значений декорирования $d = 1$ и $d = 2$. Как и в случае магнитного поля, фазовые диаграммы, построенные при $H = 0$, обладают тремя конфигурациями при $d = 1$ и четырьмя конфигурациями при $d = 2$ в ос-

новном состоянии. Из них C_2 — антиферромагнитная фаза, C_1 — ферромагнитная фаза, C_3 и C_6 — конфигурации соответственно утроения и ушестерения периодов трансляций цепочки, а C_4 — фаза учетверения периода трансляции.

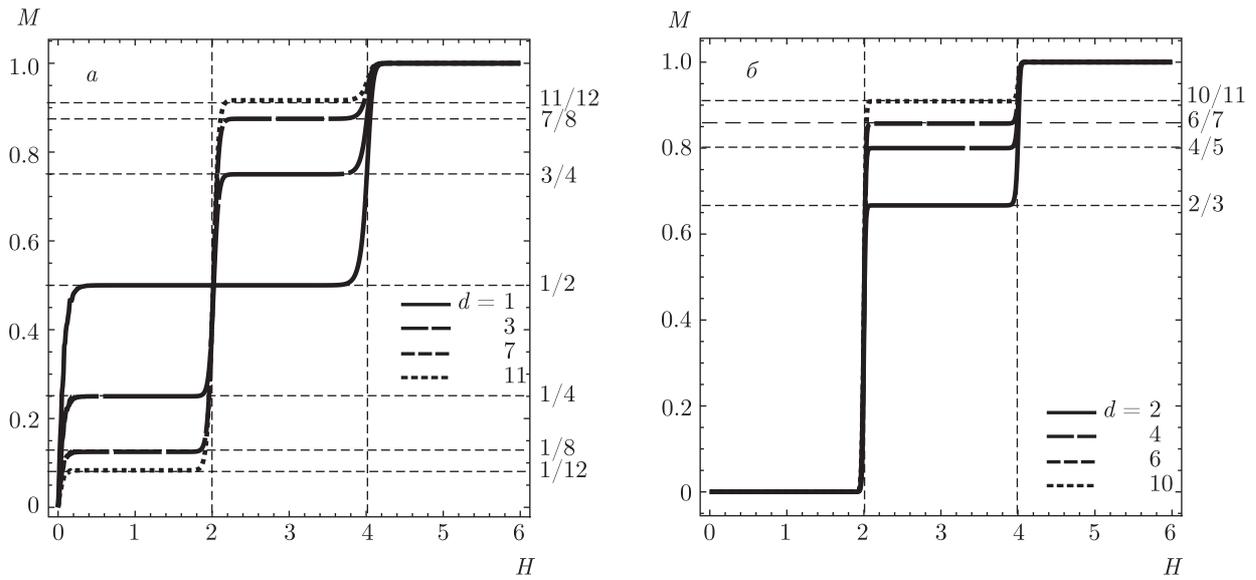


Рис. 4. Намагниченность антиферромагнитной модели Изинга ($J_d = -1, J = -1$) для различных значений декорирования цепочки: *a* — нечетные значения d при температуре $T = 0.06$, *б* — четные значения d при температуре $T = 0.02$

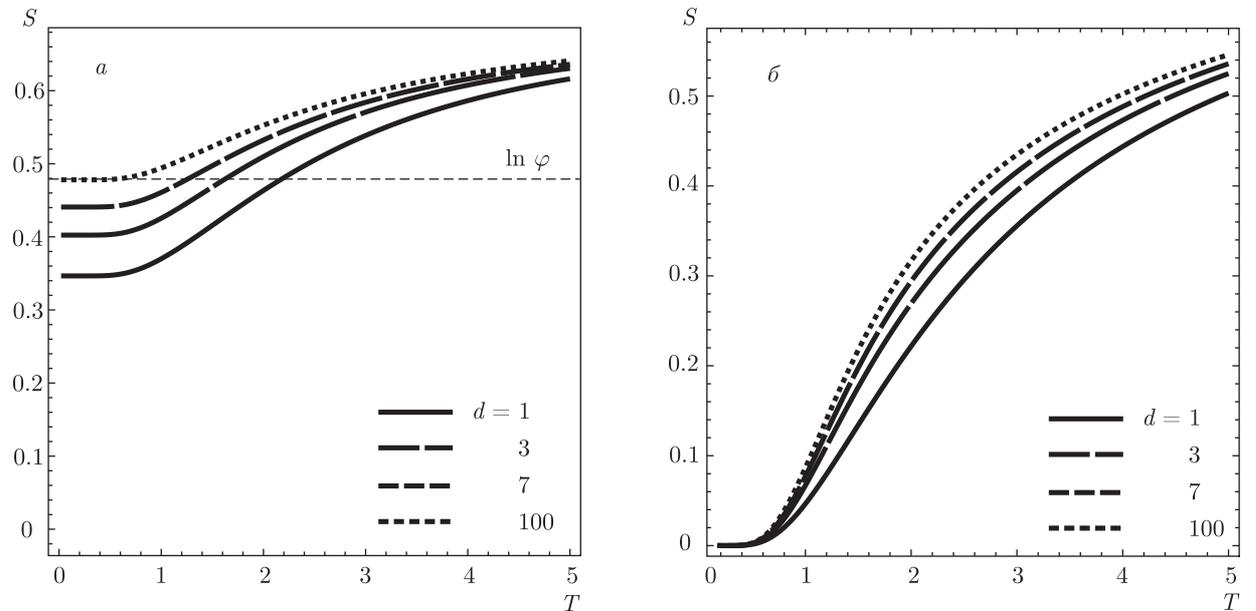


Рис. 5. Температурные зависимости энтропий в точках фрустраций антиферро-ферромагнитной модели Изинга ($J_d = -1, J = 1$) для различных значений декорирования цепочки: *a* — в магнитном поле $H = 2$, *б* — в магнитном поле $H = 4$

**7. СРАВНЕНИЕ С РЕЗУЛЬТАТАМИ НА
ДЕКОРИРОВАННОЙ КВАДРАТНОЙ
РЕШЕТКЕ**

В работах [18, 19] авторами было получено наибольшее собственное значение для декорированной квадратной решетки, представленной на рис. 12, в отсутствие магнитного поля:

$$\ln \frac{\lambda}{2} = \frac{1}{2\pi^2 Z} \int_0^\pi \int_0^\pi \ln(C_x C_y - D_y S_x \cos \phi - D_x S_y \cos \theta) d\phi d\theta, \quad (30)$$

где d_x и d_y — кратности декорирования по направлениям x и y , $Z = (1 + d_x + d_y)$ — число спинов в элементарной ячейке,

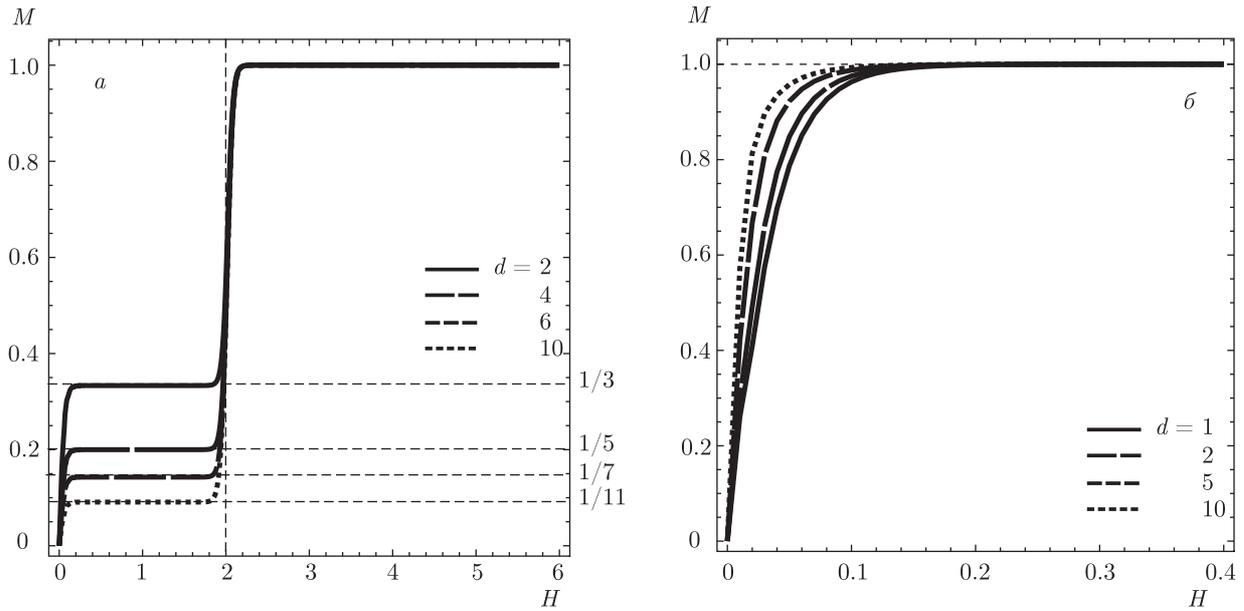


Рис. 6. Намагниченность антиферро-ферромагнитной модели Изинга ($J_d = -1, J = 1$) при температуре $T = 0.06$ для четных значений декорирования цепочки (а), ферро-антиферромагнитной модели Изинга ($J_d = 1, J = -1$) при температуре $T = 0.06$ для различных значений декорирования цепочки (б)

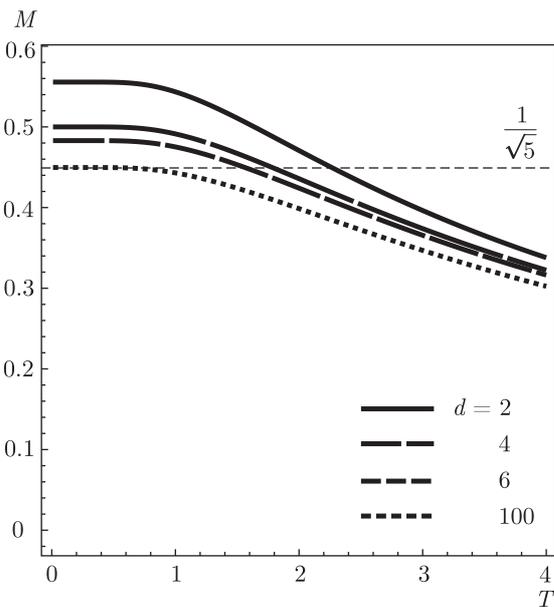


Рис. 7. Температурные зависимости намагниченности при $d = 2, 4, 6, 100$ ($J_d = -1, J = 1$) при $H = 2$. Видно, что при стремлении d к бесконечности, значение нуль-температурной намагниченности становится равно $1/\sqrt{5}$

$$D_x = \text{ch}^{2d_x+2} \left(\frac{J_{d_x}}{T} \right) - \text{sh}^{2d_x+2} \left(\frac{J_{d_x}}{T} \right), \quad (31a)$$

$$D_y = \text{ch}^{2d_y+2} \left(\frac{J_{d_y}}{T} \right) - \text{sh}^{2d_y+2} \left(\frac{J_{d_y}}{T} \right), \quad (31b)$$

$$C_x = \frac{1}{2} e^{2J_x/T} \left(\text{ch}^{d_x+1} \left(\frac{J_{d_x}}{T} \right) + \text{sh}^{d_x+1} \left(\frac{J_{d_x}}{T} \right) \right)^2 + \frac{1}{2} e^{-2J_x/T} \left(\text{ch}^{d_x+1} \left(\frac{J_{d_x}}{T} \right) - \text{sh}^{d_x+1} \left(\frac{J_{d_x}}{T} \right) \right)^2, \quad (31c)$$

$$C_y = \frac{1}{2} e^{2J_y/T} \left(\text{ch}^{d_y+1} \left(\frac{J_{d_y}}{T} \right) + \text{sh}^{d_y+1} \left(\frac{J_{d_y}}{T} \right) \right)^2 + \frac{1}{2} e^{-2J_y/T} \left(\text{ch}^{d_y+1} \left(\frac{J_{d_y}}{T} \right) - \text{sh}^{d_y+1} \left(\frac{J_{d_y}}{T} \right) \right)^2, \quad (31d)$$

$$S_x = \frac{1}{2} e^{2J_x/T} \left(\text{ch}^{d_x+1} \left(\frac{J_{d_x}}{T} \right) + \text{sh}^{d_x+1} \left(\frac{J_{d_x}}{T} \right) \right)^2 - \frac{1}{2} e^{-2J_x/T} \left(\text{ch}^{d_x+1} \left(\frac{J_{d_x}}{T} \right) - \text{sh}^{d_x+1} \left(\frac{J_{d_x}}{T} \right) \right)^2, \quad (31e)$$

$$S_y = \frac{1}{2} e^{2J_y/T} \left(\text{ch}^{d_y+1} \left(\frac{J_{d_y}}{T} \right) + \text{sh}^{d_y+1} \left(\frac{J_{d_y}}{T} \right) \right)^2 - \frac{1}{2} e^{-2J_y/T} \left(\text{ch}^{d_y+1} \left(\frac{J_{d_y}}{T} \right) - \text{sh}^{d_y+1} \left(\frac{J_{d_y}}{T} \right) \right)^2. \quad (31f)$$

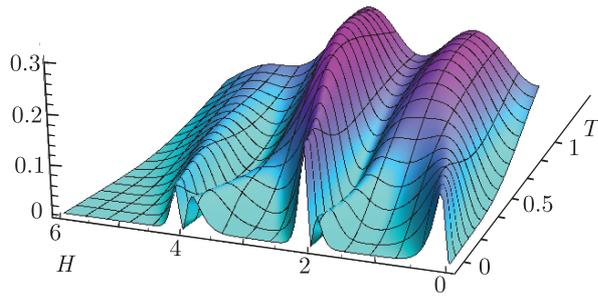


Рис. 8. Теплоемкость трижды декорированной ($d = 3$) антиферромагнитной модели Изинга ($J_d = -1, J = -1$) как функция температуры и магнитного поля

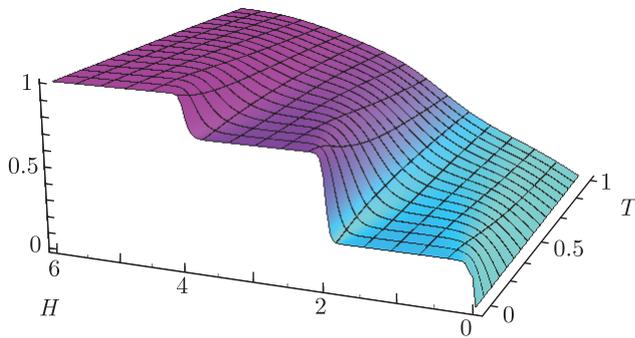


Рис. 9. Намагниченность трижды декорированной ($d = 3$) антиферромагнитной модели Изинга ($J_d = -1, J = -1$) как функция температуры и магнитного поля

Положим, что $J_{d_y} = 0, J_y = 0, d_y = 0$, а $d_x = d$, тогда интеграл (30) сведется к виду

$$\ln \frac{\lambda}{2} = \frac{1}{2\pi(1+d)} \int_0^\pi \ln(C - S \cos \phi) d\phi, \quad (32)$$

$$C = \frac{1}{2} e^{2J/T} \left(\operatorname{ch}^{d+1} \left(\frac{J_d}{T} \right) + \operatorname{sh}^{d+1} \left(\frac{J_d}{T} \right) \right)^2 + \frac{1}{2} e^{-2J/T} \left(\operatorname{ch}^{d+1} \left(\frac{J_d}{T} \right) - \operatorname{sh}^{d+1} \left(\frac{J_d}{T} \right) \right)^2, \quad (33a)$$

$$S = \frac{1}{2} e^{2J/T} \left(\operatorname{ch}^{d+1} \left(\frac{J_d}{T} \right) + \operatorname{sh}^{d+1} \left(\frac{J_d}{T} \right) \right)^2 - \frac{1}{2} e^{-2J/T} \left(\operatorname{ch}^{d+1} \left(\frac{J_d}{T} \right) - \operatorname{sh}^{d+1} \left(\frac{J_d}{T} \right) \right)^2. \quad (33b)$$

Воспользовавшись специальным тождеством (см. Приложение) и возводя результат в степень

$1 + d$, приходим к выводу, что полученное выражение в точности совпадет с наибольшим собственным значением, выведенным для декорированной цепочки в отсутствие магнитного поля (29).

Таким образом, можно сказать, что выражения (32) и (33a)–(33b) являются интегральным представлением полученного нами точного решения для декорированной изинговской цепочки в отсутствие магнитного поля (29).

Помимо этого, наблюдается соответствие линейной декорированной цепочки с квадратной декорированной решеткой в магнитном поле [20]. Следует отметить, что расчеты намагниченности в нашем случае одномерной цепочки следовали из точного аналитического решения (14), (15), на квадратной решетке это было возможно выполнить лишь трудоемкими численными расчетами, конкретно, методом Монте-Карло в алгоритме Ванга–Ландау [21, 22]. В качестве примера на рис. 13 продемонстрированы намагниченности антиферромагнитной модели Изинга двухкратно-, четырехкратно- и шестикратно-декорированной квадратной решетки. Видно, что на квадратной декорированной решетке возникают два фрустрирующих поля при $H = 2$ и $H = 8$, в отличие от линейной декорированной цепочки при $H = 2$ и $H = 4$. Кроме того, можно заметить, что возникающие промежуточные плато намагниченностей как в одномерной (плато расположены на уровнях $1/(d + 1)$ и $d/(1 + d)$), так и двумерной (плато расположены на уровне $(d_x + d_y)/(1 + d_x + d_y)$) решетках при стремлении параметра d к бесконечности исчезают, происходит скачок намагниченности из антиферромагнитного состояния сразу в ферромагнитное состояние во фрустрирующем поле равном двум, таким образом, задача сводится в этом пределе к обычной (недекорированной) модели. Объясняется это совершенно просто. При увеличении количества декорированных спинов ($d \rightarrow \infty$) влияние нодальных спинов становится все меньше и меньше, одинаково как в одномерной цепочке, так и в квадратной решетке, что непосредственно подтверждают рис. 4, 6 и 13.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Важнейшим достижением данной работы является обобщение метода трансфер-матрицы Крамерса–Ваннье на произвольное число декорирования изинговской цепочки при наличии внешнего магнитного поля. Получено точное аналитическое выражение для наибольшего соб-

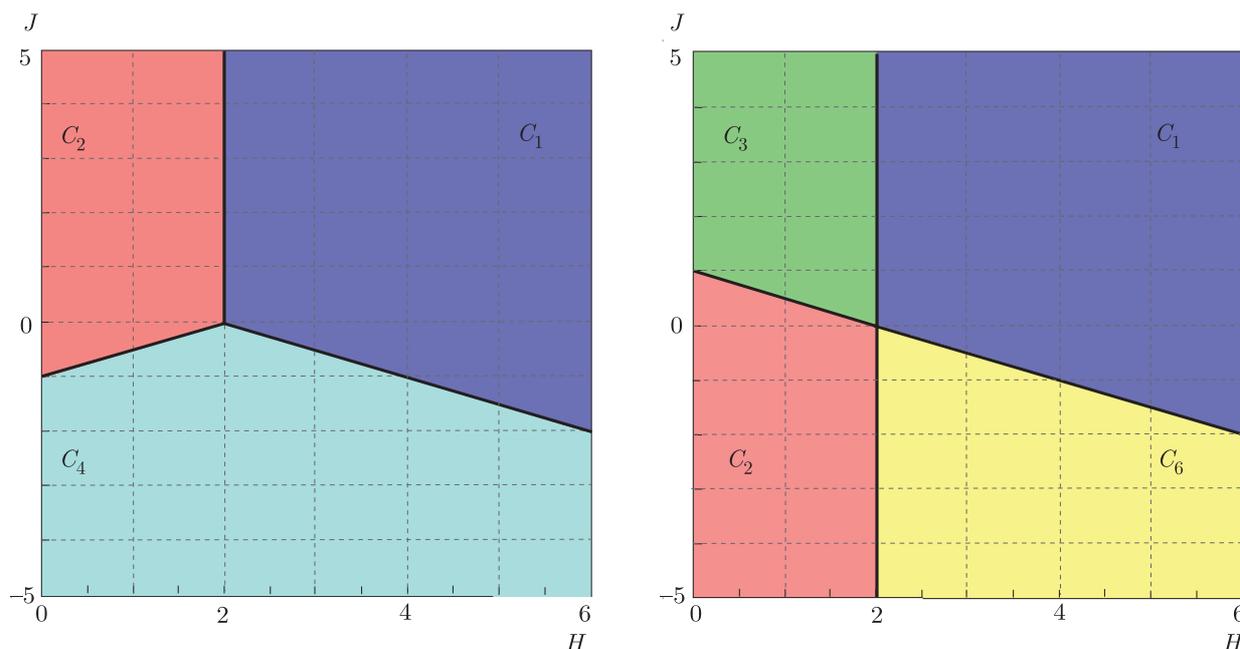


Рис. 10. Фазовые диаграммы основного состояния системы декорированной изинговской цепочки в магнитном поле с учетом обменного взаимодействия между ближайшими соседями $J_d = -1$: *a* — при $d = 1$, *b* — при $d = 2$

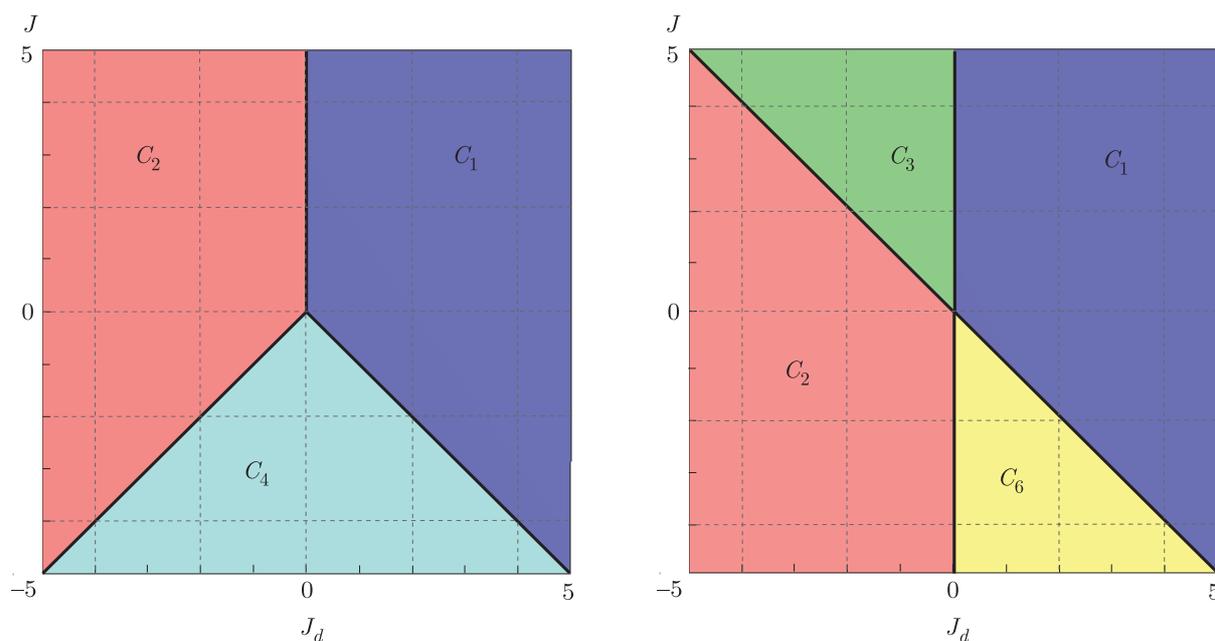


Рис. 11. Фазовые диаграммы основного состояния системы декорированной изинговской цепочки в отсутствие магнитного поля: *a* — при $d = 1$, *b* — при $d = 2$

ственного значения трансфер-матрицы Крамерса – Ванье для декорированной цепочки, находящейся во внешнем магнитном поле. Выведен ряд точных выражений для нуль-температурных энтропий и

нуль-температурных намагниченностей. Выявлено, что в непосредственной близости к фрустрации теплоемкость расщепляется на два пика. Так же, в зависимости от декорирования изинговской це-

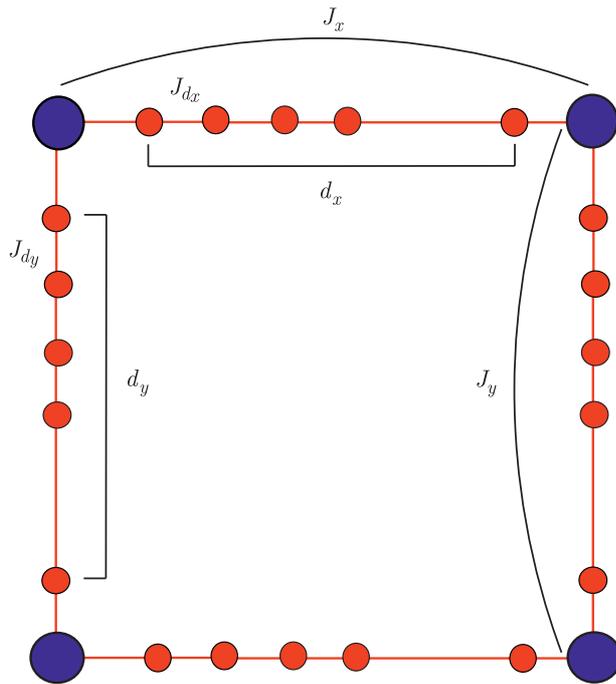


Рис. 12. Декорированная квадратная решетка с обменными взаимодействиями ближайших соседей J_{d_x} и J_{d_y} соответственно по горизонтальному и вертикальному направлению, а также с обменными взаимодействиями J_x по направлению x и с обменными взаимодействиями J_y по направлению y

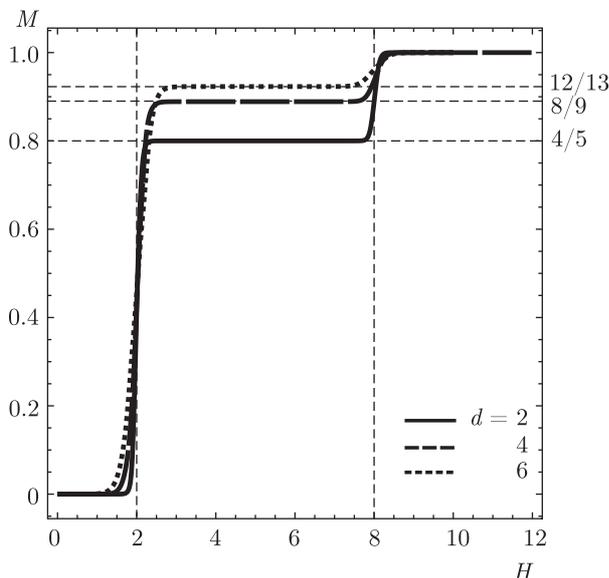


Рис. 13. Намагниченность антиферромагнитной модели Изинга двукратно-, четырехкратно- и шестикратно-декорированной квадратной решетки ($J_{d_x} = -1$, $J_{d_y} = -1$, $J_x = -1$, $J_y = -1$) при $T = 0.005$

почки намагниченность может обладать двумя промежуточными плато на уровнях $1/(d + 1)$ и $d/(d + 1)$. Помимо этого, авторами были построены и проанализированы фазовые диаграммы основного состояния только для простейших случаев декорирования цепочки. Фазовые диаграммы для более высоких порядков декорирования требуют отдельного тщательного рассмотрения. Вдобавок, обнаружено соответствие случая декорированной цепочки со случаем декорированной квадратной решетки не только в отсутствие, но и при наличии магнитного поля.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема «Квант», № АААА-А18-118020190095-4) и «Сплавы», № АААА-А19-119070890020-3 и при частичной поддержке Уральского отделения Российской академии наук (проект № 18-2-2-11).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Для взятия интеграла в выражении (32) используем следующую формулу [23]:

$$\int_0^\pi \ln(a + b \cos \phi) d\phi = \pi \ln \frac{a + \sqrt{a^2 - b^2}}{2}. \quad (34)$$

ЛИТЕРАТУРА

1. E. Ising, Z. Physik **21**, 253 (1925).
2. R. Peierls, Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, **32**, 477 (1936).
3. L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
4. G. H. Wannier, Phys. Rev. **79**, 357 (1950).
5. R. M. F. Houtappel, Prog. Theor. Phys. **16**, 425 (1950).
6. K. Kanô and S. Naya, Prog. Theor. Phys. **10**, 158 (1953).
7. E. S. Tsvarev, F. A. Kassan-Ogly, and A. I. Proshkin, J. Phys.: Conf. Ser. **1389** 012008 (2019).
8. H. A. Kramers and G. H. Wannier, Phys. Rev. **60**, 252 (1941).
9. M. Jaščur, V. Štubňa, K. Szalowski, and T. Balcerzak, J. Magn. Magn. Mater. **417**, 92 (2016).
10. I. Syozi, Prog. Theor. Phys. **35**, 306 (1951).

11. M. E. Fisher, *Phys. Rev.* **113**, 969 (1958).
12. I. Syozi, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 1, ed. by C. Domb and M. S. Green, Academic, New York (1972).
13. Ф. Р. Гантмахер, *Теория матриц*, Наука, Москва (1966).
14. Е. С. Цуварев, Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин, *ЖЭТФ* **158**, 504 (2020).
15. G. Toulouse, *Comm. Phys.* **2**, 115 (1977).
16. J. Vannimenus and G. Toulouse, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **10**, L537 (1977).
17. А. В. Зарубин, Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин, А. Е. Шестаков, *ЖЭТФ* **155**, 914 (2019).
18. F. A. Kassan-Ogly and A. I. Proshkin, *Physics of Metals and Metallography* Vol. **120** No. 13, 1359 (2019).
19. A. I. Proshkin and F. A. Kassan-Ogly, *Physics of Metals and Metallography*, Vol. **120**, No. 13, 1366 (2019).
20. Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин, А. К. Муртазаев, В. А. Мутайламов, *ФТТ* **5**, 683 (2020).
21. F. Wang and D. P. Landau, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2050 (2001).
22. F. Wang and D. P. Landau, *Phys. Rev. E* **64**, 056101 (2001).
23. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Наука, Москва (1971).