

ОБОБЩЕННАЯ МОДЕЛЬ ИЗИНГА 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 11 февраля 2021 г.,
после переработки 22 апреля 2021 г.
Принята к публикации 23 апреля 2021 г.

Представлены результаты по обобщению модели Изинга на произвольное число трансляций линейной цепочки, находящейся во внешнем магнитном поле, с учетом различных взаимодействий между спинами. Выведено точное аналитическое выражение для наибольшего собственного значения трансфер-матрицы Крамерса–Ваннье с трансляцией на два периода цепочки во внешнем магнитном поле при учете ближайших и вторых соседей. Установлены точные выражения для нуль-температурных энтропий и намагниченностей при различных величинах и знаках обменных взаимодействий и магнитного поля. Многие найденные нуль-температурные энтропии и нуль-температурные намагниченности представлены через так называемые математические сечения, издавна известные в удивительном мире математики чисел (золотое сечение φ , серебряное сечение δ , сверхзолотое сечение ψ , пластическое число ρ и новые (безымянные)). Получен результат, при котором значения фрустрирующих энтропий и намагниченностей могут быть выражены через предел отношения определенных числовых последовательностей без привлечения формализма трансфер-матрицы Крамерса–Ваннье.

DOI: 10.31857/S0044451021080095

1. ВВЕДЕНИЕ

Первой работой по обобщению модели Изинга на несколько трансляций решетки была статья Сиози и Найя [1] (см. также [2, 3]). В этих работах получено точное аналитическое решение обобщенной квадратной решетки с трансляцией на два периода в горизонтальном (J_2, J_4) и вертикальном (J_1, J_3) направлениях (рис. 1) в отсутствие магнитного поля, но исследований каких-либо термодинамических свойств не проводилось.

Главным преимуществом данной решетки является то, что из структуры такого типа обобщения можно получать различные виды других решеток с помощью предельных переходов. Например, если положить $J_2 = J_4$ и $J_1 = J_3$, то получим решение, которое вывел Онзагер [4] для обычной (необобщенной) квадратной решетки в отсутствие магнит-

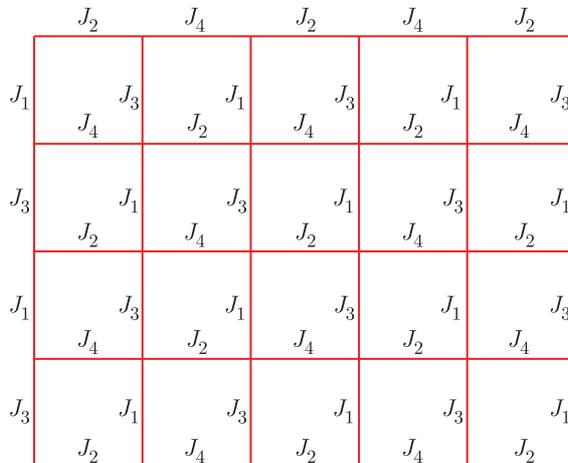


Рис. 1. Обобщение модели Изинга на квадратной решетке, предложенное Сиози, с обменными взаимодействиями J_1 и J_3 по вертикальному направлению и с обменными взаимодействиями J_2 и J_4 по горизонтальному направлению

ного поля. Чтобы осуществить переход к гексагональной решетке, необходимо устремить к нулю одно из четырех обменных взаимодействий, например,

* E-mail: eguny@mail.ru

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

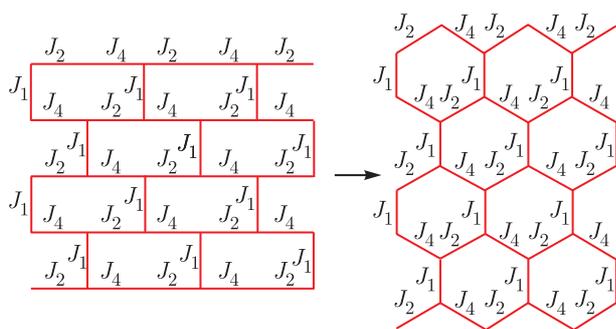


Рис. 2. При $J_3 = 0$ обобщенная квадратная решетка превращается в так называемую кирпичную кладку, которая топологически эквивалентна гексагональной решетке

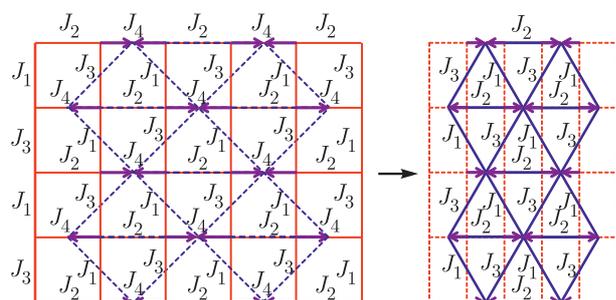


Рис. 3. Переход от обобщенной квадратной решетки к треугольной решетке при $J_2 \rightarrow \infty$

$J_3 \rightarrow 0$. Получаемая таким образом решетка типа «кирпичной кладки» (brick-wall lattice), показанная на рис. 2, топологически эквивалентна гексагональной решетке. В случае же перехода к треугольной решетке одно из четырех обменных взаимодействий обобщенной модели устремляется в бесконечность, например, $J_2 \rightarrow \infty$ (см. рис. 3).

Более универсальный вариант обобщения модели был предложен Утиямой в статье [5] на примере шахматной решетки, в которой все черные квадраты замещаются специальными вставками (рис. 4). Интересно, что в этом случае, помимо полученных решеток (квадратная необобщенная, треугольная, гексагональная) при $n = 0$, что означает всего один квадрат в качестве вставки со взаимодействиями J, J_1 и J_0 , можно получить также и решетку кагоме, положив $n = 1$ (в качестве вставки два квадрата со взаимодействиями J, J_0, J_1, J_2, J_3) и устремив J_1 к нулю (рис. 5).

Очевидно, что данные варианты обобщения, введенные на квадратной решетке Сиозии, Найя и Утиямой, могут быть применены и к другим планарным решеткам с известными точными решениями (тре-

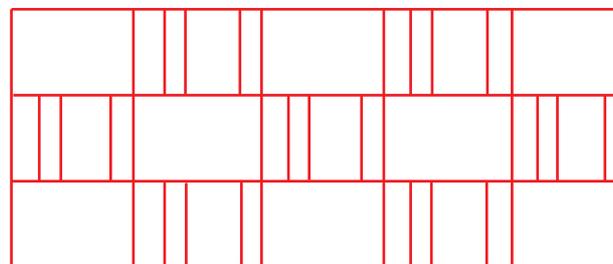
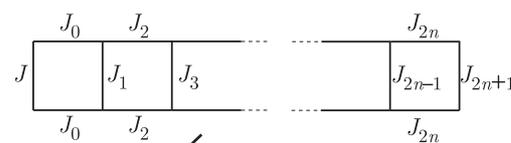


Рис. 4. Обобщение модели Изинга, предложенное Утиямой, на шахматной решетке

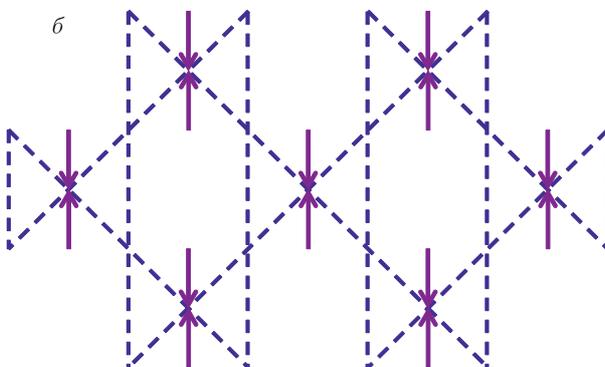
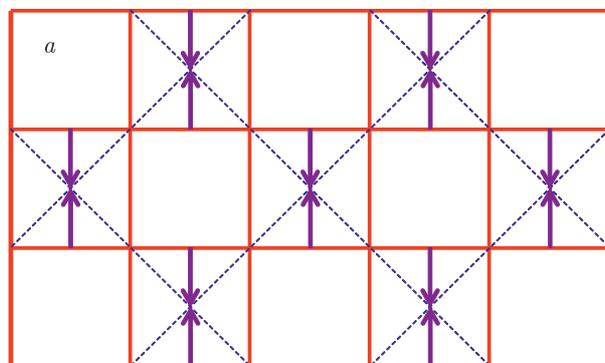


Рис. 5. Переход от решетки Утиямы к решетке кагоме: а) решетка Утиямы с одной вертикальной чертой при $J_1 \rightarrow 0$, б) решетка кагоме

угольная [6], гексагональная [7], кагоме [8]). В результате, всевозможными вариантами предельных переходов осуществляется получение множества самых разнообразных видов еще не изученных решеток.

В настоящей работе мы ставим цель обобщить модель Изинга на произвольное число трансляций линейной цепочки, поскольку именно на одномерной цепочке существует возможность получения точного аналитического решения в магнитном поле. Отметим, что некоторые предварительные обобщения модели Изинга на линейной цепочке сделаны в работах [9, 10].

2. ОБОБЩЕНИЕ МОДЕЛИ ИЗИНГА НА ПРОИЗВОЛЬНОЕ ЧИСЛО ТРАНСЛЯЦИЙ ЛИНЕЙНОЙ ЦЕПОЧКИ

Гамильтониан обобщенной модели Изинга с учетом взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями с произвольным числом трансляций линейной цепочки, находящейся в магнитном поле, может быть записан в следующей форме:

$$\mathcal{H}_n(s) = -J_1 \sum_{i=1, n+1, 2n+1, \dots}^{N-n+1} s_i s_{i+1} - J'_1 \sum_{i=1, n+1, 2n+1, \dots}^{N-n+1} s_i s_{i+2} - J_2 \sum_{i=2, n+2, 2n+2, \dots}^{N-n+2} s_{i+1} s_{i+2} - J'_2 \times \\ \times \sum_{i=2, n+2, 2n+2, \dots}^{N-n+2} s_{i+1} s_{i+3} - \dots - J_n \sum_{i=n, 2n, 3n, \dots}^N s_{i+n} s_{i+n+1} - J'_n \sum_{i=n, 2n, 3n, \dots}^N s_{i+n} s_{i+n+2} - H \sum_{i=1, 2, 3, \dots}^N s_i, \quad (1)$$

где J_1, J_2, \dots, J_n — параметры обменного взаимодействия между ближайшими соседями, J'_1, J'_2, \dots, J'_n — параметры обменного взаимодействия между вторыми соседями, H — внешнее магнитное поле, $s = \pm 1$ (см. рис. 6, на котором представлен частный случай модели для трансляций только на два периода решетки).

Следуя общему алгоритму вывода трансфер-матрицы Крамерса–Ваннье [11–13], можно получить трансфер-матрицы для одномерной цепочки с двумя, тремя, четырьмя и т. д. трансляциями в виде одной матрицы, например, для двух трансляций:

$$W_2 = \begin{pmatrix} e^{K_1+L_1+K_2+L_2+2h} & e^{K_1+L_1+K_2-L_2+2h} & e^{K_1-L_1-K_2+L_2+2h} & e^{K_1-L_1-K_2-L_2+2h} \\ e^{-K_1+L_1-K_2-L_2} & e^{-K_1+L_1-K_2+L_2} & e^{-K_1-L_1+K_2-L_2} & e^{-K_1-L_1+K_2+L_2} \\ e^{-K_1-L_1+K_2+L_2} & e^{-K_1-L_1+K_2-L_2} & e^{-K_1+L_1-K_2+L_2} & e^{-K_1+L_1-K_2-L_2} \\ e^{K_1-L_1-K_2-L_2-2h} & e^{K_1-L_1-K_2+L_2-2h} & e^{K_1+L_1+K_2-L_2-2h} & e^{K_1+L_1+K_2+L_2-2h} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где $K_1 = J_1/T$, $K_2 = J_2/T$, $L_1 = J'_1/T$, $L_2 = J'_2/T$, $H = h/T$.

С другой стороны, перемножив две матрицы V_1 и V_2 каждая из которых соответствует одной трансляции, получаем в точности исходную матрицу W_2 . Таким образом, показана эквивалентность W_2 и $V_1 \cdot V_2$.

Продолжая построение трансфер-матриц Крамерса–Ваннье для трех, четырех и т. д. трансляций в общем алгоритме вывода, будем получать все более и более громоздкие выражения, аналогичным образом превращаемые в гораздо более изящном виде в произведении простых матриц:

$$W_n = V_1 \cdot V_2 \cdot \dots \cdot V_n = \prod_{i=1}^n V_i = \prod_{i=1}^n \begin{pmatrix} e^{K_i+L_i+h} & e^{K_i-L_i+h} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-K_i+L_i+h} & e^{-K_i-L_i+h} \\ e^{-K_i-L_i-h} & e^{-K_i+L_i-h} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{K_i-L_i-h} & e^{K_i+L_i-h} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где V_1, V_2, \dots, V_n — трансфер-матрицы Крамерса–Ваннье, $K_i = J_i/T$, $L_i = J'_i/T$, $h = H/T$.

В результате трансфер-матрица Крамерса–Ваннье W_n представляется как произведение трансфер-матриц V_i , относящихся к одной определенной

трансляции линейной цепочки.

Поскольку в гамильтониане (1) каждая сумма пробегает только по n узлам, а не по всем узлам решетки N , статсумма в термодинамическом пределе теперь примет вид

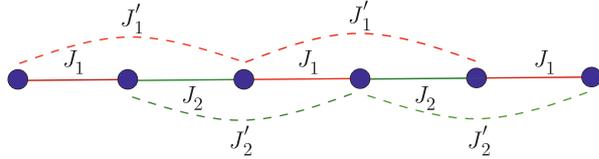


Рис. 6. Обобщенная модель Изинга с различными обменными взаимодействиями между ближайшими (J_1, J_2) и вторыми (J'_1, J'_2) соседями с трансляцией на два периода цепочки

$$Z_N = \lambda_{max}^{N/n}. \tag{4}$$

Свободная энергия, энтропия, теплоемкость, намагниченность и внутренняя энергия выражаются только через наибольшее собственное значение трансфер-матрицы Крамера – Ваннье λ_{max}

$$F(H, T) = -\frac{T \ln \lambda_{max}}{n}, \tag{5}$$

$$S(H, T) = \frac{\ln \lambda_{max}}{n} + \frac{T}{n\lambda_{max}} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial T}, \tag{6}$$

$$C(H, T) = \frac{T}{n\lambda_{max}} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial T} + \frac{T}{n} \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{T}{\lambda_{max}} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial T} \right), \tag{7}$$

$$M(H, T) = \frac{T}{n\lambda_{max}} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial H}. \tag{8}$$

$$E(H, T) = \frac{T^2}{n} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial T}. \tag{9}$$

Получение точного аналитического решения для наибольшего собственного значения трансфер-матрицы Крамера – Ваннье с гамильтонианом (1) весьма проблематично. Тем не менее, с конструированием несложной компьютерной программы выражения для максимальных собственных значений матрицы Крамера – Ваннье с учетом конкретных взаимодействий (между третьими, четвертыми и следующими соседями) могут быть представлены численно, и расчеты термодинамических и магнитных величин проводятся также по формулам (5)–(9). В настоящей статье ввиду громоздкости общего решения мы его не приводим, а ограничимся рассмотрением обобщенной модели Изинга с учетом ближайших и вторых соседей в присутствии магнитного поля.

Тогда гамильтониан обобщенной модели Изинга с трансляцией трансфер-матрицы только на два узла линейной цепочки в магнитном поле представится в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_2(s) = & -J_1 \sum_{i=1,3,5,\dots}^{N-1} s_i s_{i+1} - J'_1 \sum_{i=1,3,5,\dots}^{N-1} s_i s_{i+2} - \\ & - J_2 \sum_{i=2,4,6,\dots}^N s_{i+1} s_{i+2} - J'_2 \sum_{i=2,4,6,\dots}^N s_{i+1} s_{i+3} - \\ & - H \sum_{i=1,2,3,\dots}^N s_i, \tag{10} \end{aligned}$$

где J_1, J_2 – параметры обменного взаимодействия между ближайшими соседями, J'_1, J'_2 – параметры обменного взаимодействия между вторыми соседями, H – внешнее магнитное поле, $s = \pm 1$.

На рис. 6 проиллюстрирована цепочка, соответствующая обобщенной модели Изинга, описываемой гамильтонианом (10).

Определяем секулярное уравнение трансфер-матрицы W_2 в форме

$$\det(W_2 - \lambda E) = 0, \tag{11}$$

перепишав его в виде

$$\lambda^4 + a\lambda^3 + b\lambda^2 + c\lambda + d = 0, \tag{12}$$

решаем его и находим наибольшее собственное значение, которое принимает вид

$$\begin{aligned} \lambda_{max} = & \frac{\sqrt{a^2 - 4b + 4y} - a}{4} + \\ & + \sqrt{\left(\frac{\sqrt{a^2 - 4b + 4y} - a}{4} \right)^2 - \frac{y}{2} - \frac{2c - ya}{2\sqrt{a^2 - 4b + 4y}}}, \tag{13} \end{aligned}$$

где

$$Q = \frac{p^3}{27} + \frac{q^2}{4}, \quad p = -\frac{b^2}{3} + ac - 4d,$$

$$q = -\frac{2b^3}{27} + \frac{bac}{3} + \frac{8bd}{3} - a^2d - c^2,$$

$$y = \sqrt[3]{\sqrt{Q} - \frac{q}{2}} + \sqrt[3]{-\sqrt{Q} - \frac{q}{2}} + \frac{b}{3},$$

$$\begin{aligned} a = & -2 \exp\left(\frac{J'_1 + J'_2}{T}\right) \left(\operatorname{ch}\left(\frac{2H}{T}\right) \exp\left(\frac{J_1 + J_2}{T}\right) + \right. \\ & \left. + \exp\left(\frac{-J_1 - J_2}{T}\right) \right), \end{aligned}$$

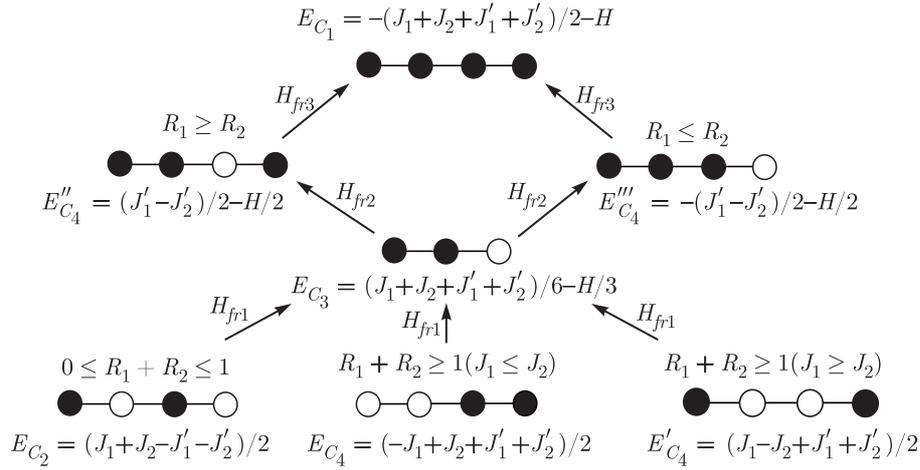


Рис. 7. Схема переходов в варианте конкурирующих взаимодействий при $J_1 < 0, J'_1 < 0, J_2 < 0, J'_2 < 0$. Темные кружки — спин направлен вверх, светлые — вниз

$$\begin{aligned}
 b &= 4 \exp\left(\frac{2J'_1 + 2J'_2}{T}\right) \operatorname{ch}\left(\frac{2H}{T}\right) - \\
 &- 4 \operatorname{ch}\left(\frac{2J'_1 - 2J'_2}{T}\right) \operatorname{ch}\left(\frac{2H}{T}\right) + 2 \exp\left(\frac{-2J_1}{T}\right) \times \\
 &\times \operatorname{sh}\left(\frac{2J'_1 + 2J'_2 - 2J_2}{T}\right) + 2 \exp\left(\frac{2J_1}{T}\right) \times \\
 &\times \operatorname{sh}\left(\frac{2J'_1 + 2J'_2 + 2J_2}{T}\right), \\
 c &= -8 \exp\left(\frac{J'_1 + J'_2}{T}\right) \left(\exp\left(\frac{J_1 + J_2}{T}\right) + \right. \\
 &\left. + \exp\left(\frac{-J_1 - J_2}{T}\right) \operatorname{ch}\left(\frac{2H}{T}\right)\right) \operatorname{sh}\left(\frac{2J'_1}{T}\right) \operatorname{sh}\left(\frac{2J'_2}{T}\right), \\
 d &= 16 \operatorname{sh}^2\left(\frac{2J'_1}{T}\right) \operatorname{sh}^2\left(\frac{2J'_2}{T}\right).
 \end{aligned}$$

Поскольку вновь рассматривается перенос только на два периода трансляции цепочки, для нахождения термодинамических и магнитных величин системы можно воспользоваться формулами, представленными в статье [9].

3. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ, МАГНИТНЫЕ И ФРУСТРИРУЮЩИЕ СВОЙСТВА ОБОБЩЕННОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

Детальный анализ большого количества всевозможных вариантов величин и знаков обменных взаимодействий показал, что при учете как ближайших, так и вторых соседей в магнитном поле, система обладает семью магнитными конфигурациями в основном состоянии: антиферромагнитная структура

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

с внутренней энергией $E_{C_2} = (J_1 + J_2)/2 - (J'_1 + J'_2)/2$, ферромагнитное упорядочение

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

с внутренней энергией $E_{C_1} = -(J_1 + J_2)/2 - (J'_1 + J'_2)/2 - H$, четыре фазы C_4, C'_4, C''_4 и C'''_4 с учетверением периода трансляции решетки

$$C_4 = \left\{ \begin{array}{l} \dots \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \dots \\ \dots \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \dots \end{array} \right\}, \quad C'_4 = \left\{ \begin{array}{l} \dots \uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \dots \\ \dots \downarrow \uparrow \uparrow \downarrow \dots \end{array} \right\},$$

$$C''_4 = \{ \dots \uparrow \uparrow \downarrow \uparrow \dots \}, \quad C'''_4 = \{ \dots \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow \dots \}$$

с внутренними энергиями соответственно $E_{C_4} = -(J_1 - J_2)/2 + (J'_1 + J'_2)/2, E_{C'_4} = (J_1 - J_2)/2 + (J'_1 + J'_2)/2, E_{C''_4} = (J'_1 - J'_2)/2 - H/2, E_{C'''_4} = -(J'_1 - J'_2)/2 - H/2$ и конфигурация C_3 с утроением периода трансляции

$$C_3 = \{ \dots \uparrow \uparrow \downarrow \dots \}$$

с внутренней энергией $E_{C_3} = (J_1 + J_2 + J'_1 + J'_2)/6 - H/3$.

Рассматриваемая обобщенная модель Изинга в магнитном поле обладает восемью вариантами конкурирующих взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями. Обсудим каждый из них отдельно. Но для начала введем коэффициенты взаимодействий: $R_1 = |J'_1/J_1|$ и $R_2 = |J'_2/J_2|$. Коэффициент R_1 отвечает за отношение взаимодействий на нечетных узлах решетки, а R_2 на четных узлах.

1. Антиферромагнитные взаимодействия между ближайшими и вторыми соседями ($J_1 < 0, J'_1 < 0, J_2 < 0, J'_2 < 0$)

Сравнивая энергии конфигураций (рис. 7), установленных выше, определим фрустрационные поля, в которых происходят переходы между соответствующими упорядочениями:

$$H_{fr1} = \begin{cases} -J_1 + 2J'_1 - J_2 + 2J'_2, & 0 \leq R_1 + R_2 \leq 1, \\ 2J_1 - J'_1 - J_2 - J'_2, & R_1 + R_2 \geq 1 \text{ и } J_1 \leq J_2, \\ -J_1 - J'_1 + 2J_2 - J'_2, & R_1 + R_2 \geq 1 \text{ и } J_1 \geq J_2; \end{cases}$$

$$H_{fr2} = \begin{cases} -J_1 + 2J'_1 - J_2 - 4J'_2, & R_1 \geq R_2, \\ -J_1 - 4J'_1 - J_2 + 2J'_2, & R_1 \leq R_2; \end{cases}$$

$$H_{fr3} = \begin{cases} -J_1 - 2J'_1 - J_2, & R_1 \geq R_2, \\ -J_1 - J_2 - 2J'_2, & R_1 \leq R_2. \end{cases}$$

Первое фрустрирующее поле при $R_1 + R_2 < 1$. Данное фрустрирующее поле получается при рассмотрении перехода между антиферромагнитной конфигурацией C_2 и конфигурацией C_3 с утроением периода трансляций решетки [14]. Значение нуль-температурной энтропии находится как натуральный логарифм единственного вещественного корня уравнения $x^3 - x - 1 = 0$, известного как пластическое число

$$S_{T \rightarrow 0} = \ln \rho = 0.2812 \dots, \quad (14)$$

где $\rho = \sqrt[3]{(9 + \sqrt{69})/18} + \sqrt[3]{(9 - \sqrt{69})/18}$ — пластическое число.

$$\xi = \left\{ \sqrt[3]{(\sqrt{849} + 9)/1152} - \sqrt[3]{(\sqrt{849} - 9)/1152} \right\}^{1/2} + \left\{ 1 / \left(4 \sqrt[3]{(\sqrt{849} + 9)/1152} - \sqrt[3]{(\sqrt{849} - 9)/1152} \right) - \sqrt[3]{(\sqrt{849} + 9)/1152} + \sqrt[3]{(\sqrt{849} - 9)/1152} \right\}^{1/2}.$$

Это математическое сечение пока безымянное.

Первое фрустрирующее поле при $R_1 + R_2 = 1$. При таком условии система вырождается в обычную (необобщенную) модель Изинга с взаимодействиями между ближайшими и вторыми соседями [14]. Фрустрирующее поле равно нулю, а энтропия равна логарифму золотого сечения

$$S_{T \rightarrow 0} = \ln \varphi = 0.4812 \dots, \quad (19)$$

где $\varphi = (1 + \sqrt{5})/2$ — золотое сечение.

Значение нуль-температурной намагниченности, в свою очередь, может быть выражено через пластическое число

$$M_{T \rightarrow 0} = \frac{1}{3\rho^3 - \rho} = 0.1770 \dots \quad (15)$$

Первое фрустрирующее поле при $R_1 + R_2 > 1$ и $J_1 < J_2$ или при $R_1 + R_2 > 1$ и $J_1 > J_2$. В этом фрустрирующем поле возникает переход между фазами учетверения периода трансляций решетки и между фазой утроения периода трансляций, а именно, между фазами C_4 и C'_3 либо между фазами C'_4 и C_3 , в зависимости от величин J_1 и J_2 . Значение энтропии при стремлении температуры к нулю равно натуральному логарифму квадратного корня из пластического числа

$$S_{T \rightarrow 0} = \ln \sqrt{\rho} = 0.1406 \dots \quad (16)$$

Соответствующая намагниченность равна выражению (15).

Первое фрустрирующее поле при $R_1 + R_2 > 1$ и $J_1 = J_2$. В случае, когда $J_1 = J_2$, энергии конфигураций с учетверением периода трансляций C_4 и C'_4 станут равны, тем самым, фрустрирующие поля также совпадут [12]. Нуль-температурная энтропия находится как натуральный логарифм наибольшего вещественного корня уравнения $x^4 - x - 1 = 0$

$$S_{T \rightarrow 0} = \ln \xi = 0.1995 \dots, \quad (17)$$

а нуль-температурная намагниченность

$$M_{T \rightarrow 0} = \frac{1}{\xi + 4\xi^3 - \xi^4} = 0.1593 \dots, \quad (18)$$

где

Второе фрустрирующее поле при $R_1 > R_2$ или $R_1 < R_2$. Если $R_1 > R_2$, то система претерпевает переход в конфигурацию учетверения C''_4 из фазы утроения периода трансляций C_3 , а если $R_1 < R_2$, тогда система перейдет в конфигурацию C'''_4 из фазы C_3 . Тем не менее, значения нуль-температурных энтропий для этих двух переходов будут одинаковы (16), как и намагниченности

$$M_{T \rightarrow 0} = \frac{\rho^2}{3\rho^2 - 1} = 0.4115\dots, \quad (20)$$

где

$$\rho = \sqrt[3]{(9 + \sqrt{69})/18} + \sqrt[3]{(9 - \sqrt{69})/18}$$

— пластическое число.

Второе фрустрирующее поле при $R_1 = R_2$. При равенстве коэффициентов взаимодействий R_1 и R_2 получаем обычную (необобщенную) модель Изинга с взаимодействиями между первыми и вторыми соседями в магнитном поле. Происходит переход из конфигурации с утроением периода трансляций C_3 сразу в ферромагнитную конфигурацию C_1 [14]. Нуль-температурная энтропия в данном фрустрирующем поле выражается как натуральный логарифм единственного вещественного корня уравнения $x^3 - x^2 - 1 = 0$, известного как сверхзолотое сечение

$$S_{T \rightarrow 0} = \ln \psi = 0.3822\dots, \quad (21)$$

а нуль-температурная намагниченность равна

$$M_{T \rightarrow 0} = \frac{\psi^3}{\psi^2 + 3} = 0.6115\dots, \quad (22)$$

где

$$\psi = \left(1 + \sqrt[3]{(29 + 3\sqrt{93})/2} + \sqrt[3]{(29 - 3\sqrt{93})/2}\right)/3$$

— сверхзолотое сечение.

Третье фрустрирующее поле при $R_1 < R_2$ или $R_1 > R_2$. В данном фрустрирующем поле происходит переход из конфигураций с учетверением периода трансляций C_4'' (или C_4''') в ферромагнитное состояние C_1 . Значение нуль-температурной энтропии равно натуральному логарифму квадратного корня из золотого сечения

$$S_{T \rightarrow 0} = \ln \sqrt{\varphi} = 0.2406\dots, \quad (23)$$

а нуль-температурная намагниченность

$$M_{T \rightarrow 0} = \frac{\varphi}{2\varphi - 1} = 0.7236\dots, \quad (24)$$

где $\varphi = (1 + \sqrt{5})/2$ — золотое сечение.

Однако, если положить $|R_1 - R_2| = 1$, первое и второе фрустрирующие поля совпадут ($H_{fr1} = H_{fr2}$), при этом произойдет переход из конфигураций с нулевой намагниченностью (C_2, C_4 или C_4') непосредственно в фазу с учетверением периода трансляций решетки (C_4'' или C_4'''), энтропия в этом случае находится как натуральный логарифм квадратного корня наибольшего решения уравнения $x^3 - x^2 - 2x + 1 = 0$

$$S_{T \rightarrow 0} = \ln \sqrt{\nu} = 0.2944\dots, \quad (25)$$

$$M_{T \rightarrow 0} = \frac{1}{3\nu^2 - 2\nu - 2} = 0.2417\dots, \quad (26)$$

где

$$\nu = \left(1 + \sqrt[3]{98/(3\sqrt{3}i - 1)} + \sqrt[3]{(21\sqrt{3}i - 7)/2}\right)/3.$$

Это математическое сечение пока безымянное.

Перечисленные фрустрационные значения энтропий и намагниченностей отражены на рис. 8.

2. Антиферро-антиферромагнитное взаимодействие между ближайшими соседями, антиферро-ферромагнитное взаимодействие между вторыми соседями ($J_1 < 0, J_1' < 0, J_2 < 0, J_2' > 0$)

$$\begin{aligned} H_{fr1} &= -J_1 + 2J_1' - J_2, \\ H_{fr2} &= -J_1 - 2J_1' - J_2. \end{aligned}$$

3. Антиферро-антиферромагнитное взаимодействие между ближайшими соседями, ферро-антиферромагнитное взаимодействие между вторыми соседями ($J_1 < 0, J_1' > 0, J_2 < 0, J_2' < 0$)

$$\begin{aligned} H_{fr1} &= -J_1 - J_2 + 2J_2', \\ H_{fr2} &= -J_1 - J_2 - 2J_2'. \end{aligned}$$

Варианты конкурирующих взаимодействий 2 и 3 схожи. Достаточно привести только одну схему переходов, например, $J_1 < 0, J_1' > 0, J_2 < 0, J_2' < 0$ (рис. 9). Отличительной чертой этих двух вариантов является только разница в промежуточном состоянии (C_4'' или C_4''') между антиферромагнитной (C_2) и ферромагнитной (C_1) конфигурациями.

Первое фрустрирующее поле. В данном фрустрирующем поле происходит переход из антиферромагнитного упорядочения C_2 в конфигурацию с учетверением периода трансляции C_4'' . Энтропия равна натуральному логарифму корня из золотого сечения (23) с соответствующим значением намагниченности

$$M_{T \rightarrow 0} = \frac{1}{2\varphi^2 - \varphi} = 0.2763\dots \quad (27)$$

Второе фрустрирующее поле. Энтропия соответствует выражению (23), а намагниченность

$$M_{T \rightarrow 0} = \frac{1}{2\varphi - 1} = 0.4472\dots, \quad (28)$$

где $\varphi = (1 + \sqrt{5})/2$ — золотое сечение.

При $R_1 = R_2 = 0$ приходим к случаю необобщенной модели Изинга с взаимодействием ближайших соседей в магнитном поле [13, 14] с хорошо известными значениями для нуль-температурных энтропий (19) и намагниченностей (28).

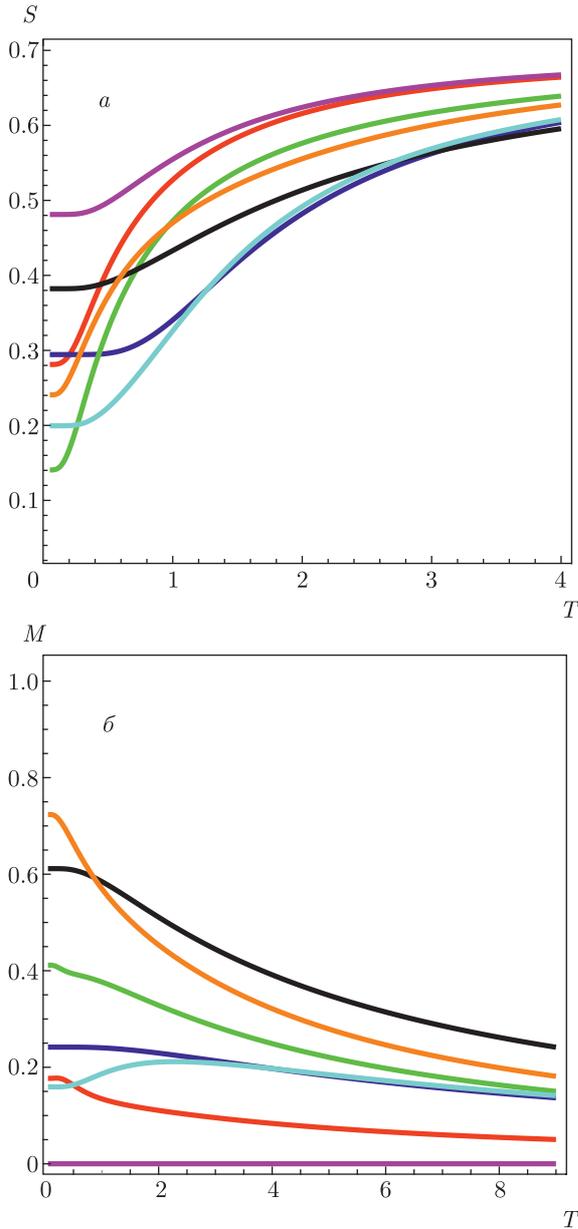


Рис. 8. Температурные зависимости энтропий (а) и намагниченностей (б). Зеленые кривые — $J_1 = -1, J'_1 = -0.5, J_2 = -1, J'_2 = -0.2, H = 1.8$, красные — $J_1 = -1, J'_1 = -0.5, J_2 = -1, J'_2 = -0.2, H = 0.6$, синие — $J_1 = -1, J'_1 = -2, J_2 = -1, J'_2 = -1, H = 2$, черные — $J_1 = -1, J'_1 = -0.5, J_2 = -1, J'_2 = -0.5, H = 3$, фиолетовые — $J_1 = -1, J'_1 = -0.5, J_2 = -1, J'_2 = -0.5, H = 0$, оранжевые — $J_1 = -0.2, J'_1 = -0.4, J_2 = -1, J'_2 = -0.2, H = 2$, бирюзовые — $J_1 = -1, J'_1 = -1.5, J_2 = -1, J'_2 = -1.6, H = 2.1$

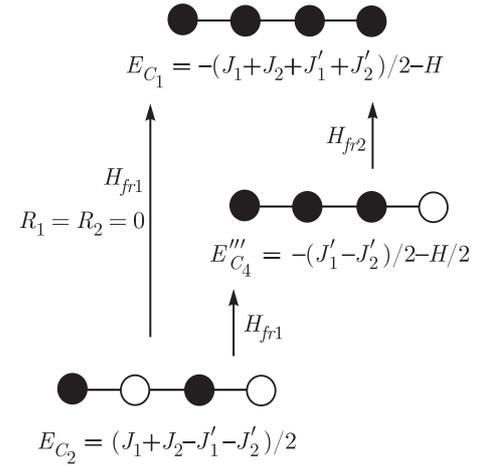


Рис. 9. Вариант конкурирующих взаимодействий при $J_1 < 0, J'_1 > 0, J_2 < 0, J'_2 < 0$. Темные кружки — спин направлен вверх, светлые — вниз

4. Антиферро-ферромагнитное взаимодействие между ближайшими соседями, ферро-антиферромагнитное взаимодействие между вторыми соседями ($J_1 < 0, J'_1 > 0, J_2 > 0, J'_2 < 0$)

$$H_{fr1} = \begin{cases} -J_1 - J'_1 - J'_2, & 0 \leq R_1 + R_2 \leq 1, \\ -J_1 - 2J'_1 + J_2, & R_1 + R_2 \geq 1; \end{cases}$$

$$H_{fr2} = -J_1 - J_2 - 2J'_2.$$

При $R_1 \geq (|J_1| + |J_2|)/2, (|J_1| \geq 1, |J_2| \geq 1)$ и любом R_2 : основное состояние C_4''' .

5. Антиферро-ферромагнитное взаимодействие между ближайшими и вторыми соседями ($J_1 < 0, J'_1 < 0, J_2 > 0, J'_2 > 0$)

$$H_{fr1} = \begin{cases} -J_1 - J'_1 - J'_2, & 0 \leq R_1 + R_2 \leq 1, \\ -J_1 - 2J'_1 + J_2, & R_1 + R_2 \geq 1; \end{cases}$$

$$H_{fr2} = -J_1 - 2J'_1 - J_2.$$

При $R_2 \geq (|J_1| + |J_2|)/2, (|J_1| \geq 1, |J_2| \geq 1)$ и любом R_1 : основное состояние C_4''' .

6. Ферро-антиферромагнитное взаимодействие между ближайшими и вторыми соседями ($J_1 > 0, J'_1 > 0, J_2 < 0, J'_2 < 0$)

$$H_{fr1} = \begin{cases} -J'_1 - J_2 - J'_2, & 0 \leq R_1 + R_2 \leq 1, \\ J_1 - 2J'_1 - J_2, & R_1 + R_2 \geq 1; \end{cases}$$

$$H_{fr2} = -J_1 - J_2 - 2J'_2.$$

При $R_1 \geq (|J_1| + |J_2|)/2, (|J_1| \geq 1, |J_2| \geq 1)$ и любом R_2 : основное состояние C_4''' .

7. Ферро-антиферромагнитное взаимодействие между ближайшими соседями, антиферро-ферро-

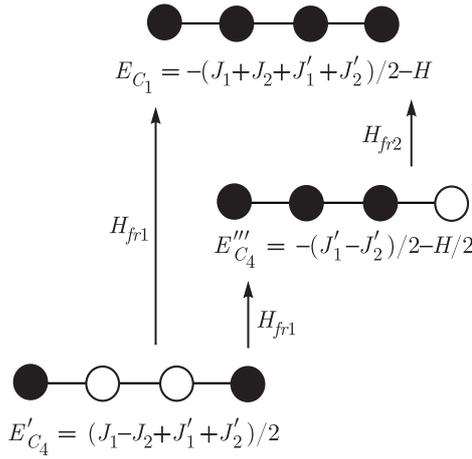


Рис. 10. Возможные варианты переходов между конфигурациями в магнитном поле при $J_1 < 0$, $J'_1 > 0$, $J_2 > 0$, $J'_2 < 0$. Темные кружки — спин направлен вверх, светлые — вниз

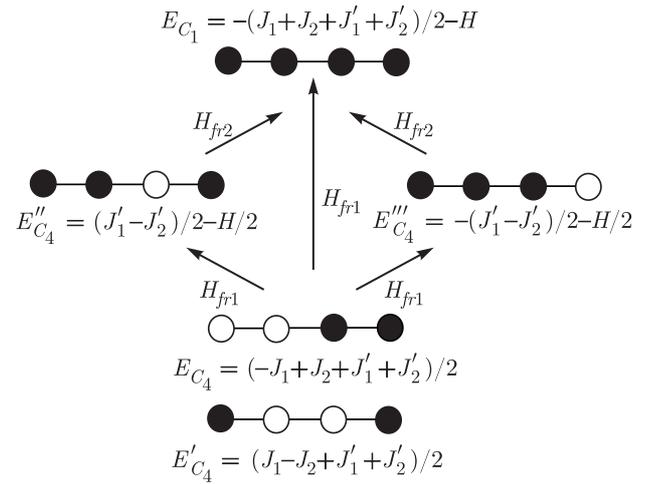


Рис. 11. Конкурирующие взаимодействия $J_1 > 0$, $J'_1 < 0$, $J_2 > 0$, $J'_2 < 0$ при условии $J_1 = J_2$. Темные кружки — спин направлен вверх, светлые — вниз

магнитное взаимодействие между вторыми соседями ($J_1 > 0$, $J'_1 < 0$, $J_2 < 0$, $J'_2 > 0$)

$$H_{fr1} = \begin{cases} -J'_1 - J_2 - J'_2, & 0 \leq R_1 + R_2 \leq 1, \\ J_1 - J_2 - 2J'_2, & R_1 + R_2 \geq 1; \end{cases}$$

$$H_{fr2} = -J_1 - 2J'_1 - J_2.$$

При $R_2 \geq (|J_1| + |J_2|)/2$, ($|J_1| \geq 1$, $|J_2| \geq 1$) и любом R_1 : основное состояние C'_4 .

Характерной чертой четырех рассматриваемых вариантов является то, что один из коэффициентов взаимодействия может быть сколь угодно большим по модулю. Главное, чтобы знак этого взаимодействия сохранялся. Кроме того, если второй коэффициент достигает величины $(|J_1| + |J_2|)/2$ при ($|J_1| \geq 1$, $|J_2| \geq 1$), то фаза с учетверением периода трансляций (C''_4 или C'''_4) становится начальным состоянием системы. На рис. 10 приведена схема переходов при $J_1 < 0$, $J'_1 > 0$, $J_2 > 0$, $J'_2 < 0$.

Первое фрустрирующее поле при $0 \leq R_1 + R_2 \leq 1$. Энтропия находится из выражения (23), а намагниченность из выражения (28).

Первое фрустрирующее поле при $R_1 + R_2 \geq 1$. Данное фрустрирующее поле описывает переход между фазами с учетверением периода трансляций, конкретнее, переход осуществляется из фазы C''_4 в фазу C'_4 . Нуль-температурная энтропия равна натуральному логарифму корня четвертой степени из двух

$$S_{T \rightarrow 0} = \ln \sqrt[4]{2} = 0.1733 \dots, \quad (29)$$

нуль-температурная намагниченность равна

$$M_{T \rightarrow 0} = \frac{1}{4}. \quad (30)$$

Второе фрустрирующее поле. Энтропия равна выражению (23), намагниченность выражению (24).

При $R_1 + R_2 = 1$ получается переход из фазы с учетверением периода трансляций C''_4 в ферромагнитную фазу C_1 , при этом энтропия равна натуральному логарифму квадратного корня из двух

$$S_{fr} = \ln \sqrt{2}, \quad (31)$$

а соответствующая намагниченность будет равна

$$M_{T \rightarrow 0} = \frac{1}{2}. \quad (32)$$

Такое значение намагниченности символизирует то, что вдоль поля направлена половина всех спинов в цепочке.

8. Ферромагнитное взаимодействие между ближайшими соседями, антиферромагнитное взаимодействие между вторыми соседями ($J_1 > 0$, $J'_1 < 0$, $J_2 > 0$, $J'_2 < 0$)

Данный вариант является обобщением конкурирующих взаимодействий между ближайшими соседями в обычной модели Изинга [16]. Положим, что $J_1 = J_2$, таким образом, энергии конфигураций с учетверениями периода трансляций с нулевой намагниченностью совпадут. При увеличении магнитного поля будут происходить переходы в состояния с намагниченностью $1/2$, более того, при некоторых значениях обменных взаимодействий возможен переход сразу в ферромагнитную конфигурацию (рис. 11).

$$H_{fr1} = \begin{cases} J_1 - J_2 - 2J'_2, & R_1 - R_2 \geq 1, \\ -J'_1 - J_2 - J'_2, & -1 \leq R_1 - R_2 \leq 1, \\ J_1 - 2J'_1 - J_2, & R_1 - R_2 \leq -1; \end{cases}$$

$$H_{fr2} = \begin{cases} -J_1 - 2J'_1 - J_2, & R_1 - R_2 \geq 1, \\ -J_1 - J_2 - 2J'_2, & R_1 - R_2 \leq -1. \end{cases}$$

Первое фрустрирующее поле при $R_1 - R_2 \geq 1$ (или $R_1 - R_2 \leq -1$). Происходит переход из фазы учетверения периода трансляции C_4 (или C'_4) в другую фазу учетверения C''_4 (или C'''_4) с энтропией (23) и намагнитченностью

$$M_{T \rightarrow 0} = \frac{1}{4\varphi - 2} = 0.2236 \dots, \quad (33) \quad \text{где}$$

$$\mu = 1/4 + \left\{ 1 - 16 \left(\sqrt[3]{(\sqrt{849} + 9)/1152} - \sqrt[3]{(\sqrt{849} - 9)/1152} \right) \right\}^{1/2} / 4 +$$

$$+ \left\{ \left(3 + 2 / \left(1 - 16 \left(\sqrt[3]{(\sqrt{849} + 9)/1152} - \sqrt[3]{(\sqrt{849} - 9)/1152} \right) \right)^{1/2} \right) / 16 - \right.$$

$$\left. - \left(1 - 16 \left(\sqrt[3]{(\sqrt{849} + 9)/1152} - \sqrt[3]{(\sqrt{849} - 9)/1152} \right) / 16 \right) \right\}^{1/2}.$$

Это математическое сечение пока безымянное.

Первое фрустрирующее поле при $R_1 - R_2 = 1$ или $R_1 - R_2 = -1$. Происходит переход из фаз с учетверением периода трансляции C_4 или C'_4 в ферромагнитное упорядочение C_1 . Энтропия принимает значение натурального логарифма квадратного корня наибольшего решения уравнения $x^3 - 2x^2 - x + 1 = 0$:

$$S_{T \rightarrow 0} = \ln \sqrt{\varkappa} = 0.4048 \dots, \quad (36)$$

$$M_{T \rightarrow 0} = \frac{\varkappa^2}{2\varkappa^2 + 2\varkappa - 3} = 0.43556 \dots, \quad (37)$$

где

$$\varkappa = \left(2 + \sqrt[3]{98/(3\sqrt{3}i + 1)} + \sqrt[3]{(21\sqrt{3}i + 7)/2} \right) / 3.$$

Это математическое сечение пока безымянное.

Второе фрустрирующее поле. Энтропия определяется из выражения (23), а соответствующая намагнитченность будет равна выражению (24).

Рисунок 12 демонстрирует обнаруженные фрустрационные значения энтропий и намагнитченностей в данном варианте конкурирующих взаимодействий.

где $\varphi = (1 + \sqrt{5}) / 2$ — золотое сечение.

Первое фрустрирующее поле при $-1 \leq R_1 - R_2 \leq 1$. В этом случае наблюдается переход из фазы учетверения периода трансляции C_4 в ферромагнитную конфигурацию C_1 [14] с энтропией, равной натуральному логарифму наибольшего вещественного корня уравнения $x^4 - x^3 - 1 = 0$

$$S_{T \rightarrow 0} = \ln \mu = 0.3223 \dots, \quad (34)$$

$$M_{T \rightarrow 0} = \frac{\mu^4}{\mu^3 + 4\mu + 1} = 0.3967 \dots, \quad (35)$$

3.1. Частные случаи обобщенной модели Изинга в присутствии магнитного поля

Ранее мы говорили, что главным преимуществом обобщенной квадратной решетки с трансляциями в горизонтальном и вертикальном направлениях является возможность получения известных видов решеток (таких как гексагональная, треугольная и квадратная решетки) через предельные переходы. Таким образом, обобщением на произвольное число трансляций можно получить такую решетку, которая будет включать, помимо известных нам решеток, совершенно новые типы структур в двумерном пространстве. Очевидно, что все те же манипуляции справедливы и в одномерии.

Ниже приведены некоторые частные случаи обобщенной модели Изинга с учетом различных обменных взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями, находящихся в магнитном поле.

1. Единожды декорированная цепочка

Полагая нулю одно из взаимодействий между вторыми соседями (например, $J'_2 = 0$), представим обобщенную цепочку в виде, показанном на рис. 13. При $J_1 = J_2$ получим простейший случай декорированной цепочки, а именно, единожды декорированную цепочку [10] с двумя фрустрирующими полями:

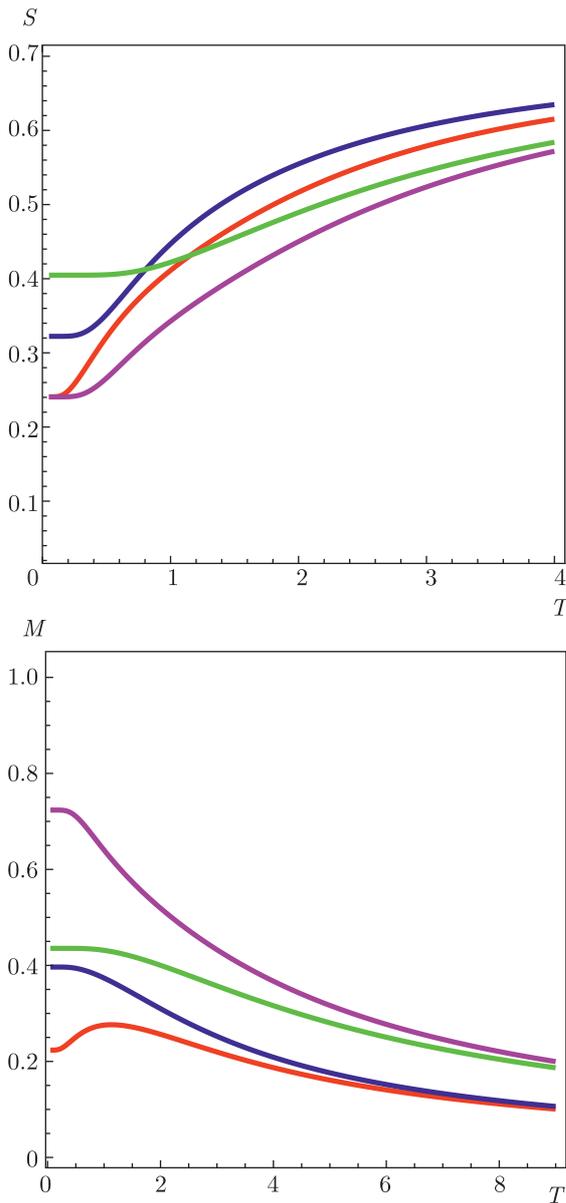


Рис. 12. Температурные зависимости энтропий (а) и намагниченностей (б). Зеленые кривые — $J_1 = 1, J'_1 = -2, J_2 = 1, J'_2 = -1, H = 2$, красные — $J_1 = 1, J'_1 = -2, J_2 = -0.5, J'_2 = -0.5, H = 1$, синие — $J_1 = 1, J'_1 = -1, J_2 = 1, J'_2 = -1, H = 1$, фиолетовые — $J_1 = 1, J'_1 = -2, J_2 = 1, J'_2 = -0.5, H = 2$

$$H_{fr1} = \begin{cases} -J_1 - J_2, & J'_1 = 0, \\ -J_1 + 2J'_1 - J_2, & 0 \geq J'_1 \geq J_2; \end{cases}$$

$$H_{fr2} = -J_1 - 2J'_1 - J_2.$$

Первое фрустрирующее поле при $J'_1 = 0$. Энтропия (19) с намагниченностью (24).

Первое фрустрирующее поле при $0 \geq J'_1 \geq J_2$. Энтропия равна натуральному логарифму корня из

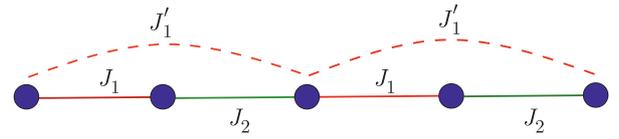


Рис. 13. Цепочка без взаимодействия J'_2 . В случае $J_1 = J_2$ реализуется случай единожды декорированной цепочки

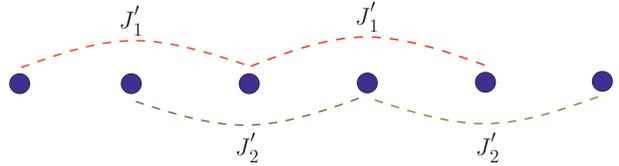


Рис. 14. Узлы в данной цепочке связаны взаимодействиями только между вторыми соседями, образуя две независимые друг от друга цепочки

двух (31) с намагниченностью (30).

Первое фрустрирующее поле при $J'_1 = J_2$ и $J'_2 = 0$ ($J'_2 = J_2$ и $J'_1 = 0$ аналогично). Приравнивая взаимодействие между ближайшими соседями к взаимодействию между вторыми соседями, получаем ситуацию при $H_{fr} = 0$ и с нуль-температурной энтропией равной натуральному логарифму корня из трех:

$$S_{fr} = \ln \sqrt{3}. \tag{38}$$

Второе фрустрирующее поле. Энтропия (23) с намагниченностью (24).

2. Набор двух независимых подрешеток

Довольно любопытный случай получается, если убрать из рассмотрения взаимодействия между ближайшими соседями. Тогда цепочка примет вид, показанный на рис. 14.

$$H_{fr1} = \begin{cases} -2J'_1, & J'_1 \leq J'_2, \\ -2J'_2, & J'_1 \geq J'_2; \end{cases}$$

$$H_{fr2} = \begin{cases} -2J'_2, & J'_1 \leq J'_2, \\ -2J'_1, & J'_1 \geq J'_2. \end{cases}$$

Первое фрустрирующее поле при $J'_1 \leq J'_2$ или при $J'_1 \geq J'_2$. Энтропия (23) с намагниченностью (33).

Первое фрустрирующее поле при $J'_1 = J'_2$. Любопытно, что при равенстве взаимодействий мож-

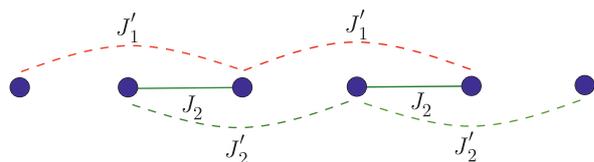


Рис. 15. Цепочка лестничного типа

но прийти к результатам, полученным для обычной (необобщенной) решетки с ближайшими соседями с энтропией (19) и намагниченностью (24).

Второе фрустрирующее поле. Энтропия (23) с намагниченностью (24).

3. Цепочка лестничного типа

И, наконец, рассмотрим лестничную цепочку (рис. 15).

$$H_{fr1} = \begin{cases} -J_2 - 2J'_2, & R_2 \leq J'_1, \\ -2J'_1 - J_2, & R_2 \geq J'_1; \end{cases}$$

$$H_{fr2} = \begin{cases} -J_2 - 2J'_1, & R_2 \leq J'_1, \\ -2J'_2 - J_2, & R_2 \geq J'_1. \end{cases}$$

Первое фрустрирующее поле при $R_2 \leq J'_1$ или при $R_2 \geq J'_1$. Энтропия (29) с намагниченностью (30).

Первое фрустрирующее поле при $J_1 = 0$ и $R_2 = J'_1$ ($J_2 = 0$ и $R_1 = J'_2$ аналогично). Энтропия равна логарифму квадратного корня наибольшего решения уравнения $x^2 - x - 1 = 0$, известного как серебряное сечение

$$S_{T \rightarrow 0} = \ln \sqrt{\delta} = 0.4407 \dots, \tag{39}$$

где $\delta = 1 + \sqrt{5}$ — серебряное сечение, а намагниченность равна $1/2$.

Второе фрустрирующее поле. Энтропия (23) с намагниченностью (24).

При исследовании фрустрационных свойств рассматриваемой в статье модели обнаружилась любопытная особенность, а именно, при некоторых наборах обменных взаимодействий и некоторых (иногда совпадающих) фрустрационных полях нуль-температурные энтропии и намагниченности могут совпадать. В частности, это имеет место при $J_1 = 1.0, J'_1 = -2.0, J_2 = 1.0, J'_2 = -0.5, H = 2$, а также при $J_1 = -0.2, J'_1 = -0.4, J_2 = -1.0, J'_2 = -0.2, H = 2$.

В этом случае совпадают три наблюдаемых: нуль-температурная энтропия, равная логарифму квадратного корня из золотого сечения (23);

нуль-температурная намагниченность, равная золотому сечению, деленному на два золотого сечения минус единица (24), а также фрустрационное поле, равное двум.

Таким образом, создается впечатление, что поведение системы (по крайней мере, в основном состоянии) одинаково при обменных взаимодействиях, разных как по величине, так и по знаку. Ложность этого впечатления доказывается при дополнительном исследовании других наблюдаемых, а именно теплоемкости и особенно внутренней энергии, существенно разной даже в основном состоянии (см. рис. 16). Отсюда следует важный вывод о том, что получение истинного поведения системы может быть достигнуто только при комплексном исследовании, а исследование ограниченного числа наблюдаемых приводит к ошибочным результатам.

4. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ СЕЧЕНИЯ И ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ В МОДЕЛИ ИЗИНГА

Как уже отмечено, некоторые значения нуль-температурных энтропий и нуль-температурных намагниченностей выражаются через сечения, хорошо известные в математике чисел, а именно, через золотое сечение φ , серебряное сечение δ , сверхзолотое сечение ψ , пластическое число ρ и другие. Чтобы объяснить такое удивительное появление весьма большого количества математических констант при рассмотрении модели Изинга, стоит обратиться к важной теореме Фробениуса – Перрона. Эта теорема утверждает, что квадратная матрица со строго положительными вещественными элементами имеет одно наибольшее собственное значение, которое обязательно является вещественным и строго положительным. Кроме того, известно, что это наибольшее собственное значение является так называемым числом Перрона. Это означает, что искомое собственное значение уравнения является вещественным и больше единицы, при этом все сопряженные корни уравнения меньше искомого собственного значения по абсолютной величине.

Поскольку аргумент натурального логарифма в выражениях для нуль-температурной энтропии является статистическим весом системы Ω , эта величина может принимать значение только в промежутке $1 \leq \Omega \leq 2$. Откуда следует, что $S = \ln \Omega = \ln 1 = 0$ (при $T \rightarrow 0$), что в результате соответствует ситу-

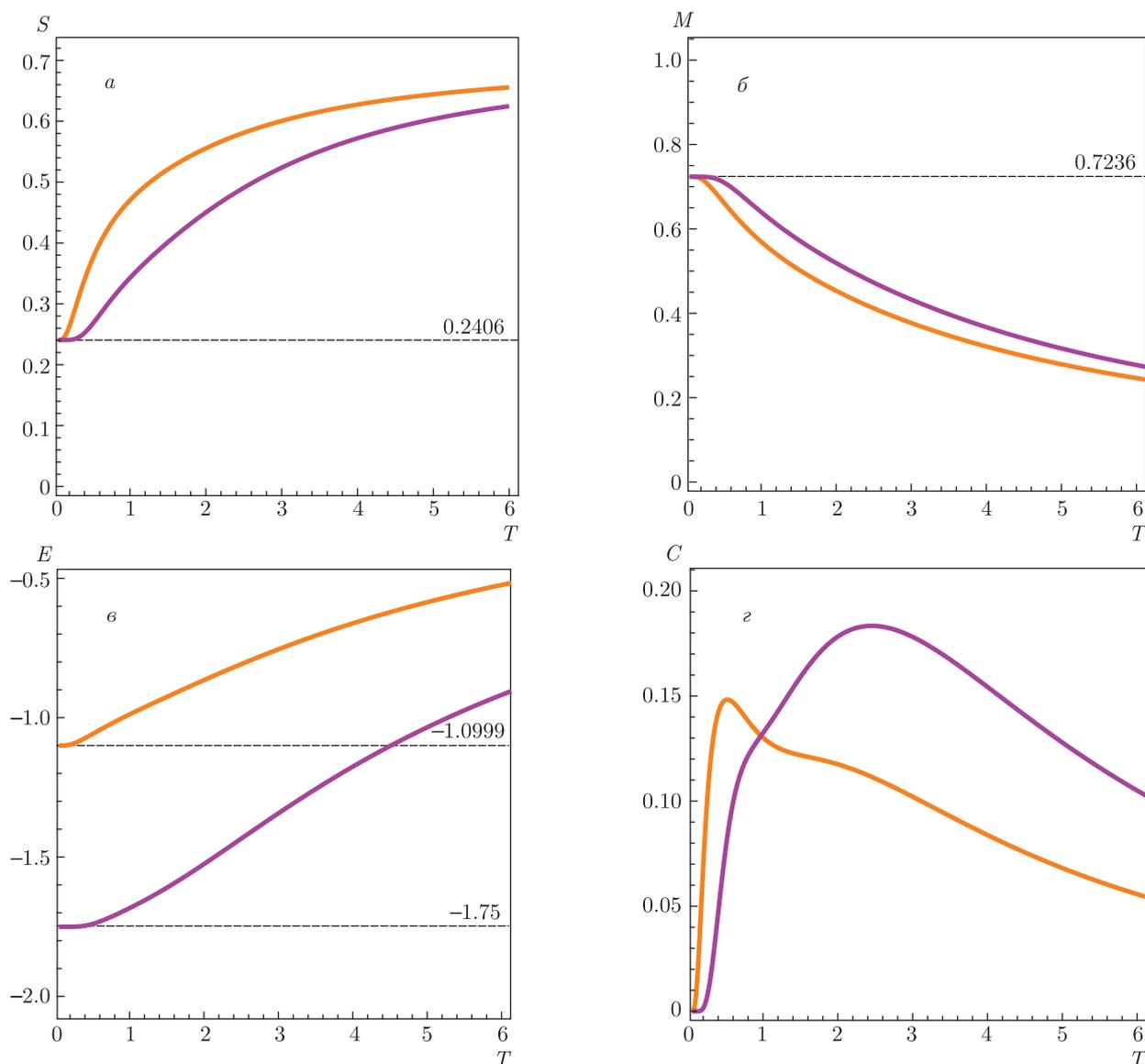


Рис. 16. Температурные зависимости энтропий (а), намагниченностей (б), внутренних энергий (в) и теплоемкостей (г). Фиолетовые кривые — $J_1 = 1.0, J'_1 = -2.0, J_2 = 1.0, J'_2 = -0.5, H = 2$, оранжевые — $J_1 = -0.2, J'_1 = -0.4, J_2 = -1.0, J'_2 = -0.2, H = 2$

ациям, при которых система обладает лишь одной конфигурацией (фрустрации отсутствуют). Поэтому все остальные найденные значения статистического веса (при $T \rightarrow 0$), выраженные через $\varphi, \rho, \psi, \sqrt{2}$ и другие математические сечения, в том числе и новые (безымянные), приходящегося на один узел цепочки, помимо того что они являются числами Перрона [17–19], соответствуют определенным фрустрирующим состояниям системы, т. е. в основном состоянии наблюдается бесконечно много конфигураций,

в том числе и без какой-либо трансляционной инвариантности. Следует отметить, что в модели Изинга энтропия достигает своего максимального значения $\ln 2$ в двух случаях: 1) При стремлении температуры к бесконечности, при которой статистические веса всех 2^N конфигураций при любых значениях обменных интегралов совпадают. 2) В парамагнетике, в котором все обменные интегралы равны нулю, статистические веса всех 2^N конфигураций совпадают при любой температуре, так что энтропия равна

$\ln 2$ при всех температурах, и фактически парамагнетик является абсолютно фрустрированным системой, что впервые отмечено в работе [14].

Можно показать, что фрустрирующее значение нуль-температурной энтропии определяется как предел некоторой последовательности в следующем виде:

$$S_{fr} = \lim_{N \rightarrow \infty} \ln \left[\frac{\tilde{Z}_{N+1}}{\tilde{Z}_N} \right], \quad (40)$$

где \tilde{Z}_{N+1} — число допустимых конфигураций в основном состоянии для $(N+1)$ узлов, \tilde{Z}_N — число допустимых конфигураций в основном состоянии для N узлов.

Фрустрационную нуль-температурную намагниченность также можно найти как предел последовательности

$$M_{fr} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{M_{\Sigma}}{\tilde{Z}_N}, \quad (41)$$

где M_{Σ} — общая (суммарная) намагниченность всех допустимых конфигураций в основном состоянии.

После подсчета возможных конфигураций \tilde{Z}_N для конкретного числа узлов N для случая только ближайших соседей во внешнем магнитном поле была определена последовательность

$$\tilde{Z}_N^{\varphi} = 2, 1, 3, 4, 7, 11, 18, 29, 47, 76, \dots$$

Полученная последовательность чисел известна как последовательность Люка, которая задается рекуррентным соотношением $a_n = a_{n-1} + a_{n-2}$ с начальными значениями $a_0 = 2$ и $a_1 = 1$.

Как известно [20–22], отношение $\tilde{Z}_{N+1}^{\varphi} / \tilde{Z}_N^{\varphi}$ стремится к золотому сечению φ , а следовательно, $\ln(\tilde{Z}_{N+1}^{\varphi} / \tilde{Z}_N^{\varphi})$ стремится к натуральному логарифму золотого сечения $\ln \varphi$.

В свою очередь, можно показать, что общая намагниченность для всех допустимых конфигураций в основном состоянии M_{Σ} для случая только ближайших соседей во внешнем магнитном поле представлена последовательностью чисел Фибоначчи с таким же рекуррентным соотношением, как и у чисел Люка, $a_n = a_{n-1} + a_{n-2}$, но с начальными условиями $a_0 = 0$ и $a_1 = 1$

$$M_{\Sigma}^{\varphi} = 0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, \dots$$

Взяв отношение последовательности Фибоначчи к последовательности Люка $M_{\Sigma}^{\varphi} / \tilde{Z}_N^{\varphi}$ в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$), получим значение фрустрационной намагниченности равное $1/(2\varphi - 1)$.

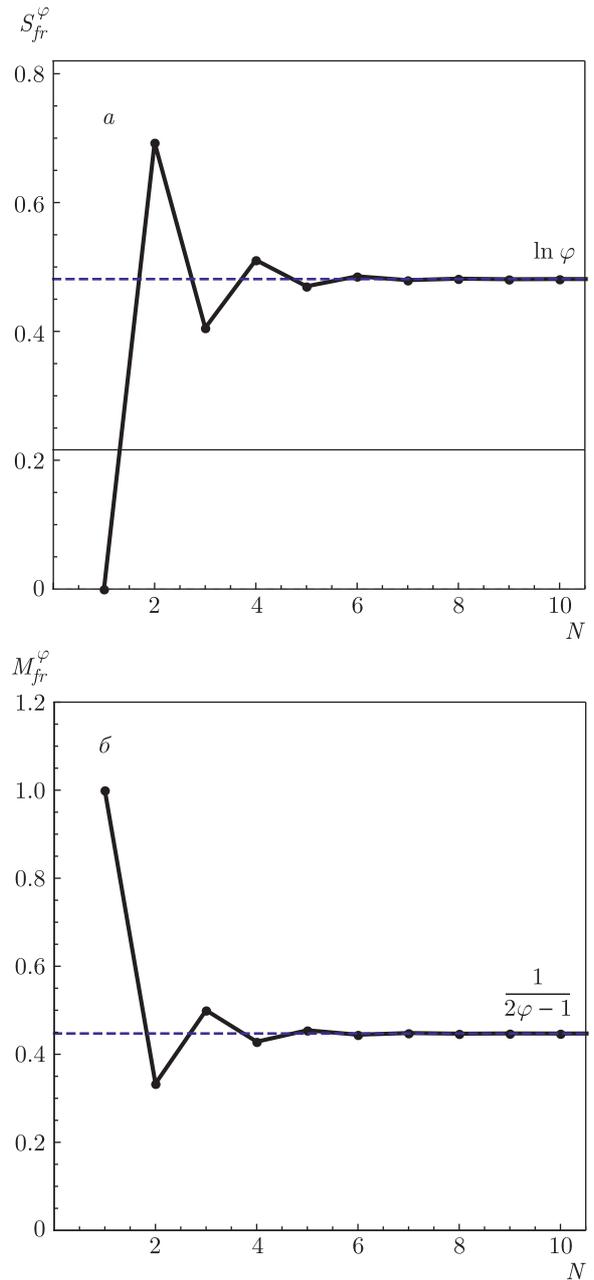


Рис. 17. Наглядное представление сходимости последовательности $\ln(\tilde{Z}_{N+1}^{\varphi} / \tilde{Z}_N^{\varphi})$ к нуль-температурному значению энтропии равной $\ln \varphi$ (a) и последовательности $M_{\Sigma}^{\varphi} / \tilde{Z}_N^{\varphi}$ к нуль-температурному значению намагниченности равной $1/(2\varphi - 1)$ (б)

В правильности полученных выше результатов можно убедиться, глядя на рис. 17. Видно, что последовательности

$$\ln(\tilde{Z}_{N+1}^{\varphi} / \tilde{Z}_N^{\varphi}) \quad \text{и} \quad M_{\Sigma}^{\varphi} / \tilde{Z}_N^{\varphi}$$

быстро сходятся соответственно к нуль-температурной энтропии равной $\ln \varphi$ и нуль-температурной намагниченности равной $1/(2\varphi - 1)$.

При учете взаимодействия не только между ближайшими, но и между вторыми соседями в магнитном поле при антиферромагнитных взаимодействиях и тех и других возникают два фрустрирующих поля. Значение нуль-температурной намагниченности в первом фрустрирующем поле выражается отношением некоторых последовательностей чисел, первая из которых определяется по правилу $a_n = a_{n-3} + a_{n-4}$ с начальными значениями $a_0 = 1$ и $a_1 = a_2 = a_3 = 1$:

$$M_{\Sigma}^{\xi} = 0, 0, 0, 1, 0, 0, 1, 1, 0, 1, 2, 1, 1, 3, \dots$$

Вторая последовательность определяется по тому же правилу $a_n = a_{n-3} + a_{n-4}$, но с начальными значениями $a_0 = 4, a_1 = a_2 = 0, a_3 = 3$

$$\tilde{Z}_N^{\xi} = 4, 0, 0, 3, 4, 0, 3, 7, 4, 3, 10, 11, 7, 13, \dots$$

Взяв отношение первой последовательности ко второй при $N \rightarrow \infty$, получим значение нуль-температурной намагниченности $1/(\xi + 4\xi^3 - \xi^4)$ с соответствующей энтропией равной $\ln \xi$.

Значение намагниченности во втором фрустрирующем поле представлено отношением последовательности коров Нараяны [23, 24] с рекуррентным уравнением $a_n = a_{n-1} + a_{n-3}$ и начальными значениями $a_0 = a_1 = a_2 = 1$:

$$M_{\Sigma}^{\psi} = 1, 1, 1, 2, 3, 4, 6, 9, 13, 19, 28, \dots$$

к последовательности с тем же рекуррентным уравнением, что и последовательность Нараяны, но с начальными значениями $a_0 = 3, a_1 = a_2 = 1$:

$$\tilde{Z}_N^{\psi} = 3, 1, 1, 4, 5, 6, 10, 15, 21, \dots$$

Отметим, что приведенная последовательность \tilde{Z}_N^{ψ} до сих пор не изучена. Отношение данных последовательностей при $N \rightarrow \infty$ дает значение нуль-температурной намагниченности $\psi^3/(\psi^2 + 3)$, а соответствующая энтропия равна натуральному логарифму сверхзолотого сечения $\ln \psi$. Сходимости последовательностей проиллюстрированы на рис. 18.

При ферромагнитных взаимодействиях ближайших соседей и антиферромагнитных взаимодействиях вторых соседей намагниченность равна отношению последовательности, задаваемой рекуррентным уравнением $a_n = a_{n-1} + a_{n-4}$ с начальными значениями $a_0 = 0, a_1 = a_2 = a_3 = 1$:

$$M_{\Sigma}^{\mu} = 0, 1, 1, 1, 1, 2, 3, 4, 5, 7, 10, 14, 19, 26, \dots,$$

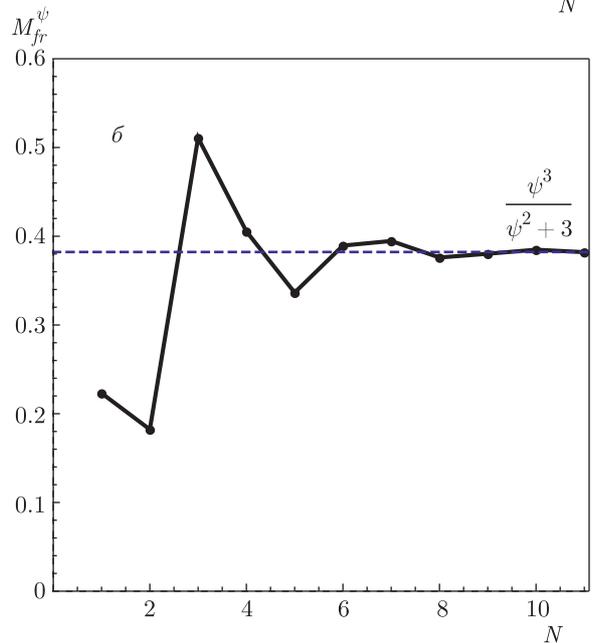
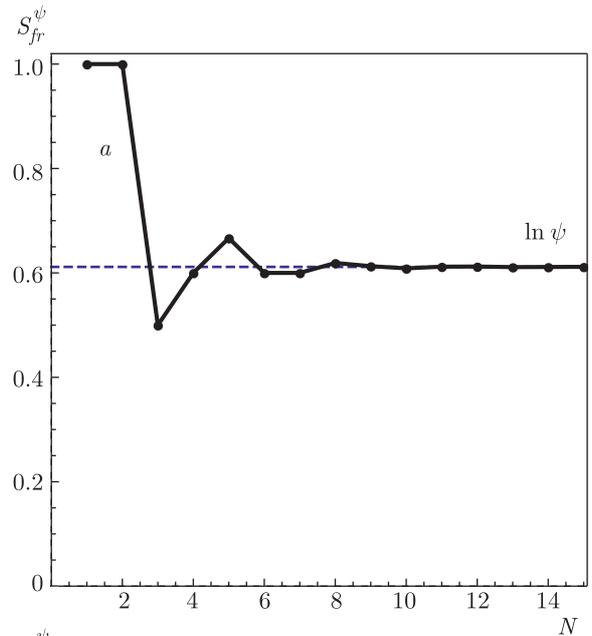


Рис. 18. Наглядное представление сходимости последовательности $\ln(\tilde{Z}_{N+1}^{\psi}/\tilde{Z}_N^{\psi})$ к нуль-температурному значению энтропии равной $\ln \psi$ (а) и последовательности $M_{\Sigma}^{\psi}/\tilde{Z}_N^{\psi}$ к нуль-температурному значению намагниченности равной $\psi^3/(\psi^2 + 3)$ (б)

к последовательности с тем же рекуррентным уравнением $a_n = a_{n-1} + a_{n-4}$, но с начальными значениями $a_0 = 4, a_1 = a_2 = a_3 = 1$:

$$\tilde{Z}_N^{\mu} = 4, 1, 1, 1, 5, 6, 7, 8, 13, \dots$$

Обратим внимание на то, что последовательность \tilde{Z}_N^{μ} также до настоящего момента не была исследо-

вана. При $N \rightarrow \infty$ отношение последовательностей дает значение нуль-температурной намагниченности $\mu^4/(\mu^3 + 4\mu + 1)$ с энтропией равной $\ln \mu$.

Другие значения нуль-температурных энтропий и нуль-температурных намагниченностей, представленные в данной работе, могут быть записаны через пределы последовательностей (также известных из математики целочисленных последовательностей [20, 21, 25–27]) только с помощью формул (40) и (41) без привлечения формализма трансфер-матрицы Крамерса – Ваннье. Однако многие из встречаемых последовательностей являются неизученными.

Таким образом, установлено, что фрустрационные свойства модели Изинга тесным образом связаны с достижениями в математике чисел, известными уже на протяжении столетий.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данном исследовании проведено обобщение модели Изинга на произвольное число трансляций линейной цепочки в присутствии магнитного поля. Методом трансфер-матрицы Крамерса – Ваннье получено точное аналитическое решение обобщенной модели Изинга при учете различных взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями, находящимися в магнитном поле. Найдены фрустрирующие поля не только при наличии ближайших, но и вторых соседей. Исследованы некоторые частные случаи обобщенной модели Изинга при учете ближайших и вторых соседей во внешнем магнитном поле. Следует особо отметить, что статистический вес (при $T \rightarrow 0$), приходящийся на один узел цепочки, является числом Перрона. Значения нуль-температурных энтропий и намагниченностей выражены исключительно через известные и новые (безымянные) математические сечения.

Установлено, что значения нуль-температурных энтропий, так же как и нуль-температурных намагниченностей, могут быть выражены соответственно через предел натурального логарифма отношения определенных последовательностей (40) и предел отношения последовательностей (41). И, что немаловажно, для этого не требуется знание трансфер-матрицы Крамерса – Ваннье! Достаточно лишь сосчитать число допустимых конфигураций и намагниченностей в основном состоянии для конкретного числа узлов цепочки в термодинамическом пределе.

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).

ЛИТЕРАТУРА

1. I. Syozi and S. Naya, Prog. Theor. Phys. **23**, 374 (1960).
2. I. Syozi and S. Naya, Prog. Theor. Phys. **24**, 829 (1960).
3. I. Syozi, Phase Transitions and Critical Phenomena, Vol. 1, ed. by C. Domb and M. S. Green, Academic, New York (1972).
4. L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
5. T. Utiyama, Prog. Theor. Phys. **6**, 907 (1951).
6. G. H. Wannier, Phys. Rev. **79**, 357 (1950).
7. R. M. F. Houtappel, Prog. Theor. Phys. **16**, 425 (1950).
8. K. Kanô and S. Naya, Prog. Theor. Phys. **10**, 158 (1953).
9. Е. С. Цуварев, Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин, ЖЭТФ **3**, 504 (2020).
10. Е. С. Цуварев, Ф. А. Кассан-Оглы, ЖЭТФ **6**, 1125 (2020).
11. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва (1985).
12. H. A. Kramers and G. H. Wannier, Phys. Rev. **60**, 252 (1941).
13. H. A. Kramers and G. H. Wannier, Phys. Rev. **60**, 263 (1941).
14. А. В. Зарубин, Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин, А. Е. Шестаков, ЖЭТФ **155**, 914 (2019).
15. F. A. Kassan-Ogly, Phase Transitions **74**, 353 (2001).
16. E. Ising, Zeitschrift für Physik **21**, 253 (1925).
17. Q. Wu, Mathem. Comput. **79**, 2387 (2010).
18. D. Lind, J. Number Theory **40**, 211 (1992).
19. D. W. Boyd, Mathem. Comput. **45**, 243 (1985).

20. N. J. A. Sloane, *A Handbook of Integer Sequences*, Academic Press (1973).
21. N. J. A. Sloane and S. Plouffe, *The Encyclopedia of Integer Sequences* 1st Edition, Academic Press (1995).
22. V. E. Jr. Hoggatt, Boston: Houghton Mifflin (1969).
23. J. Allouche and T. Johnson, Journées d'Informatique Musicale, île de Tatihou, France (1996).
24. X. Lin, *Symmetry* **13**, 12 (2021).
25. M. Bicknell, *Fibonacci Quarterly* **13**, 345 (1975).
26. R. P. M. Vieira, F. R. V. Alves, and P. M. M. C. Catarino, *International Journal of Trends in Mathematics Education Research*, **3** (1), 8 (2020).
27. W. Adams and D. Shanks, *Mathem. Comput.* **39**, 255 (1982).