ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
НАУКИ ИНСТИТУТ ФИЗИКИ МЕТАЛЛОВ ИМЕНИ М.Н. МИХЕЕВА
УРАЛЬСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

Логотип Университета
(по желанию)

На правах рукописи

Цуварев Егор Сергеевич

ОБОБЩЕННАЯ МОДЕЛЬ ИЗИНГА НА ПЛАНАРНЫХ РЕШЕТКАХ ПРИ УЧЕТЕ ДЕКОРИРОВАНИЯ И МАГНИТНОГО ПОЛЯ

Специальность 1.3.8 —
«Физика конденсированного состояния»

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук
Кассан-Оглы Феликс Александрович

Екатеринбург — 2025

Оглавление

Стр.

Введение

Изучение явлений порядок-беспорядок — фундаментальная задача равновесной статистической механики. Были приложены большие усилия, чтобы понять основные механизмы, ответственные за спонтанное упорядочение, а также природу фазовых переходов во многих типах систем. В частности, в течение последних лет большое внимание уделялось фрустрированным моделям [**liebmann1986**]. Термин «фрустрация» был введен [**toulouse1977**, **vannimenus1977**] для описания ситуации, когда спин (или количество спинов) в системе не может найти конфигурацию, полностью удовлетворяющей всем взаимодействиям с соседними спинами. Этот определение может быть применено к модели Изинга, моделям Поттса и векторным спинам. Как правило, фрустрация вызвана либо конкурирующими взаимодействиями или же решеточной структурой, как в треугольной, гранецентрированной кубической (ГЦК) и гексагонально-плотноупакованной (ГПУ) решетках с антиферромагнитным взаимодействием ближайших соседей. Фрустрационные эффекты чрезвычайно богаты, многие из которых в настоящее время еще не изучены.

Помимо того, что настоящие магнитные материалы часто не подходят из-за нескольких видов взаимодействий, фрустрированные спиновые системы имеют свой собственный интерес в статистической механике. Недавние исследования показывают, что многие известные статистические методы и теории столкнулись со многими трудностями при работе с фрустрированными системами. В некотором смысле фрустрированные системы - отличные кандидаты для тестирования приближений и улучшения теории. Поскольку механизмы многих явлений не поняты в реальных системах (неупорядоченные системы, системы с дальним взаимодействием, трехмерными системами и т.д.) стоит искать истоки этих явлений в точно решаемых системах. Эти точные результаты помогут качественно понять поведение реальных систем, которые в целом намного сложнее. Однако, далеко не каждая физическая задача может быть решена точно. Такая ситуация скорее является исключением из правил, поскольку точное решение задачи связано с большим количеством сложных математических препятствий, которые чаще всего преодолеть не представляется возможным. Зачастую задачи такого типа решаются применением тех или иных приближений, которые значительно упрощают рассматриваемую задачу. Однако за этим упрощением стоит потеря значимой для исследователя информации.

Модель Изинга является простейшей задачей теории ферромагнетизма, решение которой в одномерном и двумерном случае можно получить точно [**baxter1985**]. Решение одномерной модели Изинга получил сам Изинг еще в 1925 году [**ising1925**]. Решению модели на двумерных решетках послужило опубликование Крамерсом и Ванньe статьи [**kramers_wannier1**, **kramers_wannier2**], в которой вводится так называемая трансфер-матрица. С помощью трансфер-матрицы авторы сначала переполучили результат Изинга на одномерной цепочке, после чего получили точное выражение для температуры фазового перехода на квадратной решетке. Впоследствии, этим результатом воспользовался Онзагер в 1941 году для получения точного решения модели Изинга на квадратной решетке [**onsager1941**], которое, в свою очередь, привело к получению решений на других решетках (треугольная решетка — Ваннье [**wannier1950**], гексагональная решетка — Гутаппель [**houtapell1950**], кагоме — Кано и Найя [**kano_naya1953**]), а также бурному развитию физики критических явлений [**yang1952**, **brush1967**, **mussardo2010**]. Однако, решение Онзагера оказалось чрезвычайно сложным, поэтому исследователи вскоре изобрели несколько иных подходов к решению модели Изинга на двумерной решетке [**kaufrman1949**, **hurst1960**, **kasteleyn1963**]. Одним из таких, является комбинаторный метод [**kac1952**, **montroll1953**, **vdovichenko1965**], концепцию которого предложил Фейнман [**feynmann1978**].

Так или иначе, в обоих методах авторы рассматривали обычную (классическую) модель Изинга, то есть обменное взаимодействие между спинами в решетке вдоль одного направления остается одинаковым.

В настоящей работе предлагается рассмотреть обобщенную модель Изинга на одномерной цепочке с произвольным количеством различных обменных взаимодействий между спинами с учетом декорирования и магнитного поля, а также на квадратной решетке с двумя различными обменными взаимодействиями решетки как в горизонтальном, так и вертикальном направлениях.

Стоит заметить, что точного решения двумерной модели Изинга в магнитном поле даже на квадратной решетке до сих пор не найдено, поэтому в данной работе ограничимся рассмотрением обобщенной модели Изинга на квадратной решетке только в отсутствие магнитного поля.

Необходимо также отметить, что модель Изинга, как и любая другая математическая модель не привязана к какому-то конкретному материалу, соединению или эксперименту. К основным задачам таких моделей относятся выявление общих закономерностей в рассматриваемых процессах и явлениях, использование их в качестве прототипных для реальных трехмерных объектов и отклонение ложных догадок, сделанных на основе приближенных методов и экспериментальных результатов.

Цель данной работы заключается в рассмотрении обобщенной модели Изинга с произвольным количеством различных обменных взаимодействий как между ближайшими, так и между вторыми соседями с учетом декорирования и магнитного поля на одномерной цепочке, а также обобщенной модели Изинга с четырьмя различными обменными взаимодействиями между ближайшими соседями на квадратной решетке, с последующим изучением их термодинамических, магнитных и фрустрационных свойств.

Для достижения цели были поставлены следующие **задачи**:

1. Получить точное аналитическое решение обобщенной модели Изинга на одномерной цепочке при учете магнитного поля методом трансфер-матрицы Крамерса-Ванньe;
2. Исследовать термодинамические, магнитные и фрустрационные свойства обобщенной модели Изинга на одномерной цепочке, в том числе при учете декорирования;
3. Получить точное аналитическое решение обобщенной модели Изинга на квадратной решетке комбинаторным методом Вдовиченко–Фейнмана;
4. Исследовать термодинамические и фрустрационные свойства обобщенной модели Изинга на квадратной решетке.

Научная новизна:

1. Впервые получено точное решение модели Изинга в магнитном поле на декорированной решетке.
2. Комбинаторным методом Вдовиченко–Фейнмана были получены решения не только обобщенной модели Изинга на квадратной решетке, но и обычной модели Изинга на треугольной и гексагональной решетках.
3. Исследованы термодинамические, магнитные и фрустрационные свойства обобщенной модели Изинга на одномерной цепочке и на декорированной цепочке.

4. Изучены термодинамические и фрустрационные свойства обобщенной модели Изинга на квадратной решетке.
5. Получены точные выражения для нуль-температурных энтропий и намагниченностей рассматриваемых моделей.

Практическая значимость данной работы заключается в том, что полученные результаты могут быть использованы в качестве прототипных для изучения не только квазиодномерных, но и квазидвумерных фрустрированных спиновых систем, а также в возможности рассмотрения целого разнообразия так называемых декорированных решеток. Стоит подчеркнуть, что подавляющее большинство реальных решеток являются декорированными. Более того, некоторые кристаллические решетки можно назвать декорированными, а именно, решетки ГЦК и ОЦК, в сравнении с простой кубической решеткой (ОЦК декорирована по объему куба, а ГЦК декорирована по шести граням куба).

Методология и методы исследования. …

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Первое положение
2. Второе положение
3. Третье положение
4. Четвертое положение

Достоверность полученных результатов обеспечивается строгой обоснованностью принятых приближений и допущений, использованием широко разработанных и обоснованных в мировой литературе аналитических и численных методов, а также тем фактом, что результаты находятся в согласии с теоретическими и экспериментальными работами других авторов.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на международных конференциях, семинарах и симпозиумах:

1. VII Euro-Asian Symposium «Trends in MAGnetism», 8-13 сентября 2019 года, Екатеринбург.
2. XIII Международный семинар молодых ученых «Магнитные фазовые переходы»; 17 сентября 2019 года, Махачкала.
3. Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка–XXXVIII», 23-29 февраля 2020 года, «Гранатовая бухта», Верхняя Сысерть.

4. 54-я Школа ПИЯФ по Физике Конденсированного Состояния (Школа ФКС-2020), 16-21 марта 2020 года, Гатчина:НИЦ «Курчатовский институт», Санкт-Петербург.
5. VII Международная молодежная научная конференция Физика. Технологии. Инновации ФТИ-2020; 18-22 мая 2020 года, Екатеринбург.
6. VIII Международная молодежная научная конференция Физика. Технологии. Инновации ФТИ-2021; 17-21 мая 2021 года, Екатеринбург.

Личный вклад. Автор принимал активное участие ...

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 18 печатных изданиях, 12 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК, 5 — в периодических научных журналах, индексируемых Web of Science и Scopus, 4 — в тезисах докладов. Зарегистрированы 1 патент и 1 программа для ЭВМ.

При использовании пакета `biblatex` будут подсчитаны все работы, добавленные в файл `biblio/author.bib`. Для правильного подсчёта работ в различных системах цитирования требуется использовать поля:

- `authorvak` если публикация индексирована ВАК,
- `authorscopus` если публикация индексирована Scopus,
- `authorwos` если публикация индексирована Web of Science,
- `authorconf` для докладов конференций,
- `authorpatent` для патентов,
- `authorprogram` для зарегистрированных программ для ЭВМ,
- `authorother` для других публикаций.

Для подсчёта используются счётчики:

- `citeauthorvak` для работ, индексируемых ВАК,
- `citeauthorscopus` для работ, индексируемых Scopus,
- `citeauthorwos` для работ, индексируемых Web of Science,
- `citeauthorvakscopuswos` для работ, индексируемых одной из трёх баз,
- `citeauthorscopuswos` для работ, индексируемых Scopus или Web of Science,
- `citeauthorconf` для докладов на конференциях,
- `citeauthorother` для остальных работ,
- `citeauthorpatent` для патентов,
- `citeauthorprogram` для зарегистрированных программ для ЭВМ,
- `citeauthor` для суммарного количества работ.

Для добавления в список публикаций автора работ, которые не были процитированы в автореферате, требуется их перечислить с использованием команды `\nocite` в `Synopsis/content.tex`.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 6 глав, заключения и 0 приложен. Полный объём диссертации составляет 74 страницы, включая 0 рисунков и 0 таблиц. Список литературы содержит 0 наименований.

Глава 1. Обзор литературных источников

1.1 Метод трансфер-матрицы Крамерса-Ваннье

Как известно, главной задачей равновесной статистической физики является вычисление статистической суммы [**feynmann1978**]–[**cubo1967**]:

$$Z = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}(s)}, \tag{1.1}$$

где $\beta = 1/kT$, k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, $\mathcal{H}(s)$ — гамильтониан рассматриваемой задачи.

После нахождения статсуммы можно определить свободную энергию Гиббса $F = -kT \ln Z$ и рассчитать различные макропараметры системы, используя только формулы классической термодинамики [**feynmann1978**]–[**cubo1967**
Таким образом, при вычислении статсуммы Z задачу статистической механики можно считать решенной.

Однако не все так просто, как кажется на первый взгляд. К сожалению, в большинстве случаев задача по нахождению статистической суммы является очень тяжелой или вовсе непреодолимой, поэтому почти всегда требуется искать обходные пути решения, нежели проводить суммирование ряда (1.1) напрямую.

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

В 1941 году Крамерс и Ваннье в своей работе [**kramers_wannier1**, **kramers_wannier2**] показали, что статистическую сумму можно представить как наибольшее собственное значение некоторой матрицы конечной размерности.

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

$$\mathcal{H}(s) = -J \sum_{i=1}^{N} s_i s_{i+1} - H \sum_{i=1}^{N} s_i, \tag{1.2}$$

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

Подставляя (1.2) в (1.1), получим статсумму:

$$Z_N = \sum_{\{s_i\}} \exp\left[K \sum_{i=1}^{N} s_i s_{i+1} + h \sum_{i=1}^{N} s_i\right], \tag{1.3}$$

где $K = \beta J$, $h = \beta H$, $\beta = 1/kT$. 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.

Также, на задачу накладываются так называемые периодические условия или еще их называют граничными условиями Борна-Кармана [**mussardo2010**]. Таким образом, узел s_{N+1} оказывается тождественен узлу s_1. Другими словами, осуществляется замыкание цепочки спинов в кольцо.

Кроме того, статсумму (1.3) можно переписать в симметричном виде:

$$Z_N = \sum_{\{s_i\}} \exp\left[K \sum_{i=1}^{N} s_i s_{i+1} + \frac{h}{2} \sum_{i=1}^{N} (s_i + s_{i+1})\right]. \tag{1.4}$$

Можно заметить, что экспонента в формуле (1.4) может быть представлена как произведение сомножителей, каждый из которых зависит только от одной пары соседних спинов:

$$Z_N = \sum_{\{s_i\}} V(s_1,s_2) V(s_2,s_3) \cdot \ldots \cdot V(s_{N-1},s_N) V(s_N,s_1), \tag{1.5}$$

или

$$Z_N = \sum_{\{s_i\}} \prod_{i=1}^{N} V(s_i,s_{i+1}), \tag{1.6}$$

где $V(s_i,s_{i+1}) = \exp\left[K s_i s_{i+1} + \frac{h}{2}(s_i + s_{i+1})\right]$.

Последнее выражение может быть записано в виде матрицы размерности 2×2. Учитывая, что $s_i = \pm 1$ и $s_{i+1} = \pm 1$, определяем трансфер-матрицу:

$$V = \begin{pmatrix} V(+,+) & V(+,-) \\ V(-,+) & V(-,-) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(K+h) & \exp(-K+h) \\ \exp(-K-h) & \exp(K-h) \end{pmatrix}. \tag{1.7}$$

Теперь, используя матричный формализм, выражение для статистической суммы (1.6) может быть представлено как как след произведения N одинаковых трансфер-матриц:

$$Z_N = \operatorname{Sp} V^N. \tag{1.8}$$

Из выражения (1.7) видно, что матрица является симметричной, а это значит она может быть приведена к диагональному виду с помощью ортогонального преобразования U:

$$D = UVU^{-1}, \tag{1.9}$$

где D - диагональная матрица.

Таким образом, статсумма может быть переписана в терминах собственных значений введенной трансфер-матрицы:

$$Z_N = \mathrm{Sp}(UVU^{-1})^N = \mathrm{Sp}\, D^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N, \tag{1.10}$$

где

$$\lambda_{1,2} = e^K \operatorname{ch} h \pm \sqrt{e^{2K} \operatorname{ch}^2 h - 2 \operatorname{sh}(2K)}, \tag{1.11}$$

полученные корни секулярного уравнения $\mathrm{Det}(V - \lambda I) = 0$. Таким образом, λ_1 — это наибольшее собственное значение трансфер-матрицы Крамерса-Ваннье (которое всегда существует у матриц с вещественными матричными элементами согласно теореме Фробениуса – Перрона [**gantmacher1966**], будучи также вещественным), и в результате получаем статистическую сумму в виде

$$Z_N = \lambda_1^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^N\right], \tag{1.12}$$

в термодинамическом пределе ($N \to \infty$) можно получить свободную энергию на один узел решетки ($F = f/N$) следующим образом:

$$F(H,T) = \lim_{N\to\infty} \left[-\frac{T}{N} \ln Z_N\right] = -T \ln \lambda_1, \tag{1.13}$$

или же

$$F(H,T) = -T \ln \left[e^{\frac{J}{T}} \operatorname{ch}\left(\frac{H}{T}\right) + \sqrt{e^{\frac{2J}{T}} \operatorname{ch}^2\left(\frac{H}{T}\right) - 2 \operatorname{sh}\left(\frac{2J}{T}\right)}\right]. \tag{1.14}$$

Такие параметры, как энтропия S, теплоемкость C и намагниченность M могут быть выражены простым дифференцированием только через наибольшее собственное значение $\lambda_{\max}$ по обычным формулам термодинамики:

$$S(H,T) = -\frac{\partial F}{\partial T} = \ln \lambda_{\max} + \frac{T}{\lambda_{\max}} \frac{\partial \lambda_{\max}}{\partial T}, \tag{1.15}$$

$$C(H,T) = -T\frac{\partial^2 F}{\partial^2 T} = \frac{T}{\lambda_{\max}}\frac{\partial \lambda_{\max}}{\partial T} + T\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{T}{\lambda_{\max}}\frac{\partial \lambda_{\max}}{\partial T}\right). \tag{1.16}$$

Намагниченность находится следующим образом:

$$M(H,T) = -\frac{\partial F}{\partial H} = \frac{\operatorname{sh}\left(\frac{H}{T}\right)}{\sqrt{\operatorname{sh}^2\left(\frac{H}{T}\right) + e^{\frac{-4J}{T}}}}. \tag{1.17}$$

При $H = 0$ для энтропии и теплоемкости имеем:

$$S_{H=0} = \ln\left[2\operatorname{ch}\left(\frac{J}{T}\right)\right] - \frac{J}{T}\operatorname{th}\left(\frac{J}{T}\right), \tag{1.18}$$

$$C_{H=0} = \left(\frac{J}{T\operatorname{ch}\left(\frac{J}{T}\right)}\right)^2. \tag{1.19}$$

Получили выражения в точности такие же, к которым пришел Изинг, при рассмотрении одномерной решетки [**ising1925**].

Для намагниченности в нулевом поле получим $M(H = 0, T) = 0$, в таком случае модель Изинга уже не в состоянии описывать ферромагнетизм.

Исследуя модель Изинга при различных параметрах обменных взаимодействий J и магнитного поля H, мы в первую очередь интересуемся состояниями, в которых система упорядочена, то есть каким образом выстраиваются спины в цепочке (решетке). Для этого следует устремить температуру системы к нулю ($T \to 0$). Однако, может возникнуть ситуация, при которой система, рассматриваемая при некоторых параметрах обменных взаимодействий и магнитного поля, может находится сразу в бесконечном числе конфигураций без какой-либо трансляционной инвариантности. Здесь мы неизбежно сталкиваемся с явлением так называемых «фрустраций», которые будут подробно рассмотрены в следующем пункте.

1.2 Явление фрустраций в физике магнетизма

Термин «фрустрация» был введен Жераром Тулузом в 1977 году [**toulouse1977**, **vannimenus1977**] и поначалу использовался для описания только геометрических фрустраций. В общем же смысле, под фрустрациями понимают невозможность одновременной минимизации всех слагаемых гамильтониана.

Говоря другими словами, фрустрация представляет из себя явление, при котором система имеет в основном состоянии бесконечное количество конфигураций с одинаковой наинизшей энергией, при этом система сосуществует сразу во всех конфигурациях.

Первым кто обратил внимание на наличие особенностей теплоемкости в антиферромагнитной модели Изинга на треугольной решетке был Ваннье [**wannier1950**], который получил отсутствие фазового перехода в этой модели, температурную зависимость теплоемкости в виде плавного пика и наличие ненулевого значения нуль-температурной энтропии

$$S_{T\to 0} = \frac{2}{\pi}\int_0^{\pi/3} \ln(2\cos\omega)d\omega = 0.323066\ldots \tag{1.20}$$

Таким образом, в такой модели невозможно расположить все спины так, чтобы каждая пара соседей была антипараллельна (рисунок **??**а). Фактически, это было первое проявление фрустрации. Причем этот термин был введен только спустя 27 лет после работы Ваннье в статье Жерара Тулуза.

Фрустрации были обнаружены и на других решетках. В частности, при рассмотрении антиферромагнитной модели Изинга на решетке кагоме, точное решение которой было получено Кано и Найя [**kano_naya1953**]. В этом случае также невозможно расположить спины так, чтобы каждая пара ближайших соседей была антипараллельна (рисунок **??**б). Выражение для нуль-температурной энтропии имеет вид

$$\begin{multline} S_{T\to 0} = \\ = \frac{1}{24\pi^2}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} \ln\{21 - 4(\cos\omega_1 + \omega_2 + \cos(\omega_1+\omega_2))\}d\omega_1 d\omega_2 = 0.50183\ldots \end{multline} \tag{1.21}$$

Стоить заметить, что результаты не противоречат третьему началу термодинамики, поскольку энтропия определяется через дифференциал $dS = \delta Q/T$ с точностью до постоянной интегрирования $S_0 \geqslant 0$, и только в формулировке теоремы Нернста – Планка для равновесных систем с невырожденным основным состоянием данная постоянная выбирается нулевой, $S_0 = 0$.

Однако, существуют решетки, которые позволяют расположить спины между собой антипараллельно. Например, к таким относится квадратная решетка [**onsager1941**] (рисунок **??**).

Важно упомянуть, что исследование фрустрационных явлений началось задолго до исследования этого явления на спиновых системах. Так, в 1935 году Полинг [**pauling1935**] заметил, что атомы водорода в самом обычном водяном льду останутся неупорядоченными даже при абсолютном нуле. То есть даже при охлаждении до нулевой температуры ожидается, что водяной лед будет иметь ненулевую нуль-температурную энтропию, то есть внутреннюю хаотичность. Это связано с тем, что гексагональная кристаллическая структура обычного водяного льда содержит атомы кислорода с четырьмя соседними атомами водорода (рисунок **??**а). Во льду для каждого атома кислорода имеются два соседних атома водорода, находящихся рядом (образуя традиционную молекулу H_2O), а два других атома водорода находятся дальше (являясь атомами водорода двух соседних молекул воды). Полинг отметил, что количество конфигураций, соответствующих этому правилу льда «два-близко, два-далеко», растет экспоненциально с увеличением размера системы, и, следовательно, энтропия льда при нулевой температуре должна была быть значительной.

Вместе с тем, к материалам, подверженным фрустрированным взаимодействиям, относится так называемый спиновый лед [**diep2013**, **bramwell2001**, **kohli2011**, **harris1997**]. Спиновый лед — это материал, который состоит из правильных тетраэдров магнитных ионов с угловыми связями, каждый из которых имеет ненулевой магнитный
момент, часто называемый как «спин», который в своем низкоэнергетическом состоянии должен удовлетворять принципу «два-входа—два-выхода» на каждом тетраэдре, образующем кристаллическую структуру (рисунок **??**б). Первыми материалами, идентифицированными как спиновые льды, были пирохлоры $Dy_2Ti_2O_7$ (титанат диспрозия) и $Ho_2Ti_2O_7$ (титанат гольмия).

Сделаем важное отступление о том, что при отсутствии фрустрации при заданных параметрах обменных взаимодействий на двумерных решетках мы всегда получаем теплоемкость в виде острого Λ - образного пика, при этом имеет место фазовый переход в критической точке [**peierls1936**]. А во фрустрированном состоянии всегда имеется пологий куполообразный пик и отсутствие фазового перехода, поскольку основное состояние системы оказывается сильно вырожденным. На рисунке **??** приведены графики теплоемкостей модели Изинга на треугольной решетке во фрустрированном и нефрустрированном состояниях.

Здесь и далее, термодинамические и магнитные величины, такие как свободная энергия F, энтропия S, теплоемкость C, намагниченность M и другие, будут изображены на графиках через условные единицы, а именно постоянная Больцмана k будет положена равной единице, а величины T и H будут измеряться в единицах $|J|$, как это принято в теории низкоразмерных систем.

Материалы спинового льда характеризуются случайным беспорядком в ориентации момента магнитных ионов, даже когда материал находится при очень низких температурах. Это находится в соответствии со случаем водяного льда. Об этом может свидетельствовать широкий гладкий пик теплоемкости, при котором, как уже известно, не возникает фазового перехода и наличие ненулевого значения нуль-температурной энтропии (рисунок **??**).

Однако, среди многих типов магнитоупорядоченных веществ особое место принадлежит так называемым спиновым стеклам [**diep2013**, **docenko1993**]. Обоснованием этого термина служит тот факт, что ориентация элементарных магнитных моментов атомов спинового стекла в области температур ниже некоторой величины T_{freeze} не имеет никакой пространственной периодичности. В отличие от парамагнетиков, где элементарные магнитные моменты флуктуируют во времени, спиновые стекла характеризуются наличием «замороженных» магнитных моментов (рисунок **??**).

Типичные спиновые стекла представляют собой разбавленные магнитные сплавы Cu-Mn, Ag-Mn или Au-Fe, в которых магнитные моменты 3d-элементов взаимодействуют через дальнодействующее обменное взаимодействие.

Для спиновых стекол характерно, что магнитный момент, наведенный в спиновом стекле внешним магнитным полем, зависит не только от величины поля, но также от предыстории образца. Кроме этого, отличительной чертой поведения спинового стекла является наличие резкого излома на температурной зависимости магнитной восприимчивости, измеренной при малых магнитных полях, а также линейная зависимость теплоемкости от температуры, что говорит о том, что основное состояние спинного стекла сильно вырожденно.

Считается, что изучение спиновых стекол будет способствовать созданию более совершенных принципов компьютерной памяти. Зависимость магнитного состояния спинового стекла от его магнитной предыстории может использоваться для создания новых материалов магнитной памяти. Также, модель спинового стекла весьма полезна для понимания поведения определенных нейронных сетей, в особенности сетей Хопфилда (искусственная нейронная сеть, в которой каждый нейрон может принимать одно из двух состояний ± 1) [**aarts2001**, **kincel1987**].

На одномерной изинговской решетке также наблюдаются фрустрации [**zarubin2019**]. Модель Изинга со спином $s = 1$ на одномерной решетке с учетом антиферромагнитного взаимодействия только между ближайшими соседями во внешнем магнитном поле является простейшей моделью, в которой можно обнаружить фрустрации. Ее наибольшее собственное значения уже было найдено в прошлом пункте и оно имеет вид:

$$\lambda_{\max} = e^{\frac{J}{T}} \operatorname{ch}\left(\frac{H}{T}\right) + \sqrt{e^{\frac{2J}{T}} \operatorname{ch}^2\left(\frac{H}{T}\right) - 2\operatorname{sh}\left(\frac{2J}{T}\right)}. \tag{1.22}$$

При $H = 0, T = 0$ система находится в основном состоянии, представляющее собой антиферромагнитное упорядочение (_ˆ, где _ — спин направлен против магнитного поля, ˆ - совпадает с направлением поля). С увеличением поля спины начнут выстраиваться вдоль магнитного поля, тем самым возникает ферромагнитная структура (ˆˆ). Можно показать, что в некотором поле, называемом фрустрирующим H_{fr}, энергии этих двух состояний совпадают, и имеется бесконечное количество различных конфигураций с одинаковой энергией. На рисунке **??** показан этот механизм.

Рассчитаем энергию антиферромагнитной структуры. Данное состояние следует назвать структурой с удвоением периода трансляций решетки, так как оно представляет собой последовательность повторяющихся сегментов _ˆ. Для определения энергии воспользуемся гамильтонианом (1.2), при этом достаточно посчитать энергию только для одного сегмента _ˆ:

$$E_{\_\hat{}} = -Js_i s_{i+1} - Hs_i = \frac{1}{2}\left(\frac{J}{2} + \frac{J}{2} - H + \frac{J}{2} + \frac{J}{2} + H\right) = J. \tag{1.23}$$

Получилось, что энергия структуры, приходящаяся на один узел, находящейся в антиферромагнитном состоянии, представляется обменным взаимодействием между соседними узлами решетки.

Следуя тем же путем, можно определить энергию ферромагнитной структуры:

$$E_{\hat{}\hat{}} = -\frac{J}{2} - \frac{J}{2} - H = -J - H. \tag{1.24}$$

Приравнивая энергии (1.23) и (1.24) друг к другу, получаем величину фрустрирующего поля для случая взаимодействия только ближайших соседей:

$$H_{\mathrm{fr}} = -2J. \tag{1.25}$$

К примеру, при $J = -1$ (антиферромагнитное упорядочивание), имеется фрустрирующее поле $H_{\mathrm{fr}} = 2$.

С помощью формул (1.15) и (1.17) можно показать, что в точке фрустрации при $T \to 0$ энтропия равна натуральному логарифму золотого сечения $S = \ln\left[\left(1+\sqrt{5}\right)/2\right]$, а намагниченность — $M = 1/\sqrt{5}$.

Итак, рассматривая систему при стремлении температуры к нулю, ее намагниченность испытывает скачок во фрустрирующем поле, таким образом, совершается переход между двумя определенными конфигурациями (рисунок **??**).

В точке фрустрации, с соответствующей нуль-температурной энтропией (рисунок **??**а), не равной нулю, помимо сходящихся фаз (структур с определенными трансляциями) наблюдается также и бесконечное множество конфигураций, в том числе и без какой-либо трансляционной инвариантности с одинаковой энергией и все вместе они сосуществуют. Однако, если отойти от фрустрации на малую величину магнитного поля (или обменного взаимодействия), то реализуется переход системы в одну какую-то конкретную фазу. Тем самым, система становится упорядоченной, а энтропия стремится к нулю.

Теплоемкость же в непосредственной близости к фрустрации имеет два пика — острый и широкий плавный (рисунок **??**б). Последний, к тому же, всегда находится правее (в стороне больших температур). Данный факт подтвержден экспериментально [**matsumura1997**] (около фрустрирующего поля происходит расщепление теплоемкости на два пика, см. рисунок **??**).

В заключение, стоит отметить любопытное предположение, выдвинутое нами в статье [A2] о качественном совпадении явления фрустрации с явлением критической опалесценции. Так как в местах схождения сразу нескольких фаз, фазы не индивидуализированы, а существенно фрустрированы так как, кроме сходящихся фаз, в точках фрустраций существует бесконечное множество конфигураций без каких-либо трансляционных инвариантностей, чему свидетельствует ненулевая нуль-температурная энтропия. А в работе Смолуховского [**smoluchowski1907**] установлено, что явление критической опалесценции обусловлено возникновением в тройной точке бесконечного множества термодинамических флуктуаций, поэтому фактически можно сказать, что в тройной точке возникает явление сильных фрустраций.

1.3 Комбинаторный метод Вдовиченко–Фейнмана

Идея комбинаторного решения модели Изинга на двумерной решетке принадлежит Фейнману. Суть метода заключается в подсчете всех суперпозиций замкнутых многоугольников (не имеющих общих сторон) на двумерной решетке. Впоследствие, предположение Фейнмана развивалось в статьях Каца и Уорда [**kac1952**], Монтролла [**montroll1953**] и Вдовиченко [**vdovichenko1965**]. Так или иначе, метод берет свое начало с высокотемпературного разложения статистической суммы двумерной решетки.

Рассмотрим квадратную решетку с M горизонтальными связями и с M вертикальными связями. В термодинамическом пределе $M \to \infty$ и M совпадает с количеством узлов в решетке N.

Далее, рассмотрим гамильтониан с разными обменными взаимодействиями: по горизонтальному направлению — J, а по вертикальному направлению — J'.

Тогда для статистической суммы модели при нулевом магнитном поле имеем

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left[K_1 \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j + K_2 \sum_{(i,k)} \sigma_i \sigma_k\right], \qquad (1.26)$$

где первая сумма идет по спинам в горизонтальном направлении, а вторая сумма по спинам в вертикальном направлении

$$K_1 = \frac{J}{T}; \qquad K_2 = \frac{J'}{T}.$$

Используя тождество

$$\exp\left[x\sigma_i\sigma_l\right] = \operatorname{ch} x(1 + \sigma_i\sigma_l \operatorname{th} x), \qquad (1.27)$$

статистическая сумма может быть переписана в виде

$$Z_N = (\operatorname{ch} K_1 \operatorname{ch} K_2)^M \sum_{\{\sigma\}} \prod_{(i,j)} (1 + v\sigma_i\sigma_j) \prod_{(i,k)} (1 + w\sigma_i\sigma_k), \qquad (1.28)$$

$$v = \operatorname{th} K_1; \qquad w = \operatorname{th} K_2.$$

Оба параметра v и w всегда меньше 1 для всех значений температуры T, кроме $T = 0$, при котором $v = w = 1$. В частности, они являются малыми параметрами в высокотемпературном разложении, поэтому следует искать разложение статсуммы вблизи $T = \infty$.

Если разложить произведение в формуле (1.28), получится 2^{2M} слагаемых, поскольку имеется $2M$ множителей (по одному на каждый сегмент) и в каждом из них есть два слагаемых. Можно ввести графическое представление этого разложения. Линия, проведенная между узлами решетки по горизонтали (i, j), соответствует множителю $v\sigma_i\sigma_j$, линия, проведенная между узлами решетки по вертикали (i, k), соответствует множителю $v\sigma_i\sigma_k$. Отсутствие линии между узлами решетки соответствует множителю 1. Повторяя данную операцию для 2^{2M} слагаемых, можно установить соответствие между членами в разложении и графическими конфигурациями. Общее выражении этих слагаемых таково

$$v^r w^s \sigma_1^{n_1} \sigma_2^{n_2} \sigma_3^{n_3} \ldots .$$

где r — общее число горизонтальных связей, s — общее число вертикальных связей, n_i — количество линий, где i — конечный узел.

Теперь необходимо посчитать сумму по всем спинам решетки, чтобы получить статсумму. Поскольку каждый спин σ_i принимает значения ± 1, получаем нулевую сумму, если все n_1, n_2, ..., n_N являются четными и этом случае результат равен $2^N v^r w^s$. Исходя из этих соображений, статистическая сумма может быть выражена как

$$Z_N = 2^N (\operatorname{ch} K_1 \operatorname{ch} K_2)^M \sum_P v^r w^s, \tag{1.29}$$

где сумма идет по всем конфигурациям линий на решетке с четным количеством линий на каждом узле решетки, то есть сумма взята по всем замкнутым многоугольникам P решетки. Таким образом, статсумма, не считая множителя, задается геометрической величиной

$$\Phi(v, w) = \sum_P v^r w^s. \tag{1.30}$$

Вычислить первые члены этой суммы нетрудно. Первый член равен 1 и соответствует случаю, когда на решетке нет многоугольников. Второй член соответствует наименьшему замкнутому многоугольнику на решетке, т.е. квадрату с единичной длиной, как показано на рисунке **??**. Количество таких квадратов равно N, так как они могут размещаться на любом из N узлов решетки. Каждый из них имеет вес $(vw)^2$, поэтому второй член суммы (1.30) равен $N(vw)^2$. Следующая замкнутая фигура представляет собой прямоугольник из 6 связей, их может быть два вида: v^4w^2 и v^2w^4, как показано на рисунке **??**. Количество таких прямоугольников также может быть N штук. Используя эти первые члены разложения функции $\Phi(v,w)$ запишем

$$\Phi(v,w) = 1 + N(vw)^2 + N(v^4w^2 + v^2w^4) + \dots . \tag{1.31}$$

Следовательно, для знания статсуммы нужно посчитать все члены в разложении $\Phi(v,w)$, однако вычисление следующих членов $\Phi(v,w)$ стремительно усложняется.

Изящное решение данной проблемы было предложено Вдовиченко [**vdovichenko1965**]. Метод решения подразделяется на три шага: (а) первый шаг состоит в выражении суммы по многоугольникам в виде суммы по замкнутым циклам без пересечений; (б) второй шаг заключается в преобразовании суммы по замкнутым циклам без пересечений в сумму по всем возможным замкнутым циклам; (в) на последнем шаге задача сводится к случайному блужданию по решетке.

Обсудим реализацию первого шага, то есть как организовать сумму по многоугольникам с точки зрения их соединенных частей. Заметим, что каждый многоугольник состоит из одной или нескольких связанных частей. Для несамопересекающихся многоугольников это утверждение очевидно: например, многоугольник на рисунке **??** состоит из двух несвязных частей. Но для самопересекающихся многоугольников утверждение может быть неоднозначным, и в зависимости от разложения могут быть разные связанные части. Чтобы прояснить этот вопрос, рассмотрим многоугольник на рисунке **??**. Его можно разложить тремя разными способами, как показано на рисунке **??**: его можно разложить на одну или две соединенные части без пересечения или в одну соединенную часть, но с пересечением. Легко показать, что это правило является общим, а именно всегда существует три возможных разложения для всех самопересечений многоугольников.

Сумма по многоугольникам, указанная в уравнении (1.30), может быть организована в сумму по соединенным частям многоугольников, но нужно действовать осторожно, чтобы правильно подсчитать различные члены разложения, в частности, чтобы не подсчитывать одну и ту же конфигурацию более одного раза. Эта проблема может быть решена путем взвешивания каждого многоугольника с коэффициентом $(-1)^n$, где n - общее количество самопересечений замкнутого многоугольника. Таким образом, все лишние члены в сумме исчезают. В примере на рисунке ?? первые два члена имеют вес $+1$, а последний член -1, так что в окончательном выражении сохраняется только один член.

Обратите внимание, что, приняв приведенный выше рецепт для выполнения суммирования по замкнутым многоугольникам, можно включить в сумму также многоугольники с повторяющимися связями. Простейший из них представлен на рисунке ??. Эти многоугольники явно отсутствуют в исходной формулировке высокотемпературного разложения, так как на некоторых узлах имеется нечетное количество связей. Однако, учитывая вес связи, легко увидеть, что эти члены в сумме сокращаются.

Однако, по-прежнему существует недостаток в процедуре взвешивания многоугольника, поскольку он зависит от глобального свойства многоугольника, такого как количество его пересечений. Было бы удобнее выразить вес $(-1)^n$ локальным способом. Это возможно благодаря известному геометрическому свойству: общий угол поворота касательной, проходящей вокруг замкнутого плоского контура, равен $2\pi(\xi + 1)$, где ξ - целое число (положительное или отрицательное), с четностью, совпадающей с номером ν самопересечения замкнутого многоугольника. Следовательно, мы можем присвоить каждой точке замкнутого многоугольника фазовый множитель $e^{i\alpha/2}$, где угол поворота α принимает значения $\alpha = 0, \pm\pi/2$ в соответствии с углом изменения направления на следующую связь, так что произведение всех этих множителей по петле дает $(-1)^{\nu+1}$. Для набора из k петель имеем $(-1)^{n+k}$, где $n = \sum \nu$.

Таким образом, мы можем автоматически учитывать количество самопересечений многоугольника, взвешивая каждый узел на $e^{i\alpha/2}$ и умножая член, соответствующий данному многоугольнику (заданному набором из k петель), на множитель $(-1)^k$, поскольку этот член будет компенсировать то же слагаемое, что и в предыдущем выражении $(-1)^{n+k}$.

Далее для простоты повествования рассмотрим только изотропный случай квадратной решетки, а именно, когда обменное взаимодействие в горизонтальном и вертикальном направлениях одинаково, так что в статистическую сумму входит только параметр $v = \operatorname{th} K$, где $K = J/T$. Тогда статсумма такой решетки будет даваться выражением

$$Z_N = 2^N \operatorname{ch}^{2N} K \; \Phi(v), \tag{1.32}$$

при

$$\Phi(v) = \sum_r g_r v^r,$$

где g_r — количество замкнутых необязательно связанных многоугольников, заданных четным числом r связей.

Обозначим через f_r сумму по отдельным замкнутым многоугольникам, состоящих из r звеньев. Каждый многоугольник взвешен в соответствии с указанным выше правилом. Сумма по всем парам многоугольников с общим числом звеньев r определяется выражением

$$\frac{1}{2!}\sum_{r_1+r_2=r} f_{r_1}f_{r_2},$$

где множитель 2! в знаменателе учитывает, что перестановка двух индексов приводит к одной и той же паре замкнутых многоугольникам. Аналогичный множитель $n!$ присутствует в знаменателе суммы для n многоугольников.

Следовательно, функцию Φ можно записать как

$$\Phi(v) = \sum_{n=0}(-1)^n\frac{1}{n!}\sum_{r_1,r_2,\cdots=1} v^{r_1+r_2+\cdots+r_n}f_{r_1}\dots f_{r_n}. \tag{1.33}$$

Поскольку в Φ есть члены, соответствующие множествам петель с любой возможной общей длиной $r = r_1+r_2+\dots$, в сумме индексы $r_1, r_2, \dots$ принимают независимо все значения от 1 до ∞, так что

$$\sum_{r_1,r_2,\dots} v^{r_1+r_2+\cdots+r_n}f_{r_1}\dots f_{r_n} = \left(\sum_{r=1}^{\infty} v^r f_r\right)^n.$$

Таким образом, Φ выражается как

$$\Phi(v) = \exp\left[-\sum_{r=1}^{\infty} v^r f_r\right]. \tag{1.34}$$

Этим выражением завершаются шаги (а) и (б) метода Вдовиченко. Остается только явно вычислить величину f_r.

Поскольку на квадратной решетке есть четыре различных направления, по которым можно передвигаться, то их удобно пронумеровать индексом $\mu = 1, 2, 3, 4$, как показано на рисунке **??**. Введем новую функцию $W_r(i, j, \mu)$, которая определяется как сумма по всем возможным путям длины r, начинающиеся из заданной точки с координатами (i_0, j_0) вдоль направления μ_0 и достигая в точке координаты (i, j) вдоль направления μ. Пути, входящие в определение $W_r(i, j, \mu)$, взвешиваются с учетом ранее введенных множителей $e^{i\alpha/2}$. Если теперь выбрать (i_0, j_0) в качестве начальной точки, $W_r(i_0, j_0, \mu_0)$ станет суммой по всем многоугольникам, выходящим и возвращающимся в ту же точку. В результате, имеем тождество

$$f_r = \frac{1}{2r} \sum_{i_0, j_0, \mu} W_r(i_0, j_0, \mu), \tag{1.35}$$

где член $1/(2r)$ учитывает тот факт, что в сумме в правой части каждый замкнутый многоугольник может быть пересечен в двух противоположных направлениях и может иметь любой из своих r узлов в качестве отправной точки. Благодаря своему определению, функция $W_r(i, j, \mu)$ удовлетворяет рекурсивным уравнениям

$$\begin{aligned}
W_{r+1}(i,j,1) &= W_r(i-1,j,1) + e^{-i\frac{\pi}{4}} W_r(i,j-1,2) + 0 + e^{i\frac{\pi}{4}} W_r(i,j+1,4),\\
W_{r+1}(i,j,2) &= e^{i\frac{\pi}{4}} W_r(i-1,j,1) + W_r(i,j-1,2) + e^{-i\frac{\pi}{4}} W_r(i+1,j,3) + 0,\\
W_{r+1}(i,j,3) &= 0 + e^{-i\frac{\pi}{4}} W_r(i,j-1,2) + W_r(i+1,j,3) + e^{-i\frac{\pi}{4}} W_r(i,j+1,4),\\
W_{r+1}(i,j,4) &= e^{-i\frac{\pi}{4}} W_r(i-1,j,1) + 0 + e^{i\frac{\pi}{4}} W_r(i+1,j,3) + W_r(i,j+1,4).
\end{aligned} \tag{1.36}$$

Рассмотрим, например, первое уравнение (1.36). В точку i, j, 1 можно попасть, сделав последний $(r+1)$-й шаг слева, снизу или сверху, но не справа. Коэффициенты, представленные в уравнении, основаны на фазовых факторах, относящихся к изменению направлений. Используя те же аргументы, можно вывести другие уравнения в (1.36). Вводя матрицу коэффициентов Λ, рекурсивные уравнения можно записать в виде

$$W_{r+1}(i,j,\mu) = \sum_{i',\, j',\, \mu'} \Lambda(ij\mu \mid i^{'} j^{'} \mu^{'}) W_r(i^{'}, j^{'}, \mu^{'}), \tag{1.37}$$

которые допускают наводящую на размышления интерпретацию: эти уравнения можно интерпретировать как марковский процесс, связанный со случайным блужданием по решетке, с вероятностью перехода между двумя ближайшими соседними узлами, выраженными относительным матричным элементом Λ. Поскольку существует четыре возможных направления для этого движения, при сохранении всех остальных параметров фиксированными, Λ представляет собой матрицу 4×4 с индексами $\mu^{'}$ и μ, графическая интерпретация которой показана на рисунке **??**.

В свете приведенной выше интерпретации рекурсивных уравнений вероятность перехода относительно пути полной длины r выражается матрицей Λ^r.

Обратите внимание, что диагональные элементы этой матрицы выражают вероятность вернуться в исходную точку после прохождения цикла длины r, т.е. они совпадают с $W_r(i_0, j_0, \mu_0)$. Следовательно, имеем

$$\operatorname{Sp}\Lambda^r = \sum_{i_0, j_0, \mu} W_r(i_0, j_0, \mu), \tag{1.38}$$

и, сравнивая с (1.35), приходим к

$$f_r = \frac{1}{2r}\operatorname{Sp}\Lambda^r = \frac{1}{2r}\sum_a \lambda_a^r, \tag{1.39}$$

где λ_a - собственные значения матрицы Λ. Используя это выражение в (1.34) и меняя местами индексы суммы, получаем

$$\Phi(v) = \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_i \sum_{r=1} \frac{1}{r} v^r \lambda_i^r\right] =$$
$$= \exp\left[\frac{1}{2}\sum_i \ln(1 - v\lambda_i)\right] = \prod_i \sqrt{1 - v\lambda_i}. \tag{1.40}$$

Последнее, что нужно сделать — это определить собственные значения Λ. Диагонализация этой матрицы по координатам k и l решетки может быть легко выполнена с помощью преобразования Фурье. Фактически, определяя

$$W_r(p, q, \mu) = \sum_{k,l=0} e^{-\frac{2\pi i}{L}(pk+ql)} W_r(k, l, \mu), \tag{1.41}$$

с $N = L^2$ и преобразованием Фурье имеем

$$\begin{aligned}
W_{r+1}(p,q,1) &= \varepsilon^{-p}\, W_r(p,q,1) + \varepsilon^{-q}\alpha^{-1}\, W_r(p,q,2) + \varepsilon^{q}\alpha\, W_r(p,q,4),\\
W_{r+1}(p,q,2) &= \varepsilon^{-p}\alpha\, W_r(p,q,1) + \varepsilon^{-q}\, W_r(p,q,2) + \varepsilon^{p}\alpha^{-1}\, W_r(p,q,3),\\
W_{r+1}(p,q,3) &= \varepsilon^{-q}\alpha\, W_r(p,q,2) + \varepsilon^{p}\, W_r(p,q,3) + \varepsilon^{q}\alpha^{-1}\, W_r(p,q,4),\\
W_{r+1}(p,q,4) &= \varepsilon^{-p}\alpha^{-1}\, W_r(p,q,1) + \varepsilon^{p}\alpha\, W_r(p,q,3) + \varepsilon^{q}\, W_r(p,q,4),
\end{aligned}$$

где $\varepsilon = e^{2\pi i/L}$ и $\alpha = e^{i\pi/4}$.

Поскольку $W_r(p, q, \mu)$ появляется с одинаковыми индексами p и q как в левой, так и в правой частях этих уравнений, преобразование Фурье матрицы Λ диагонально по этим индексам, и мы имеем

$$\Lambda(p, q, \mu \mid p, q, \mu') = \begin{pmatrix} \varepsilon^{-p} & \alpha^{-1}\varepsilon^{-q} & 0 & \alpha\varepsilon^{q} \\ \alpha\varepsilon^{-p} & \varepsilon^{-q} & \alpha^{-1}\varepsilon^{p} & 0 \\ 0 & \alpha\varepsilon^{-q} & \varepsilon^{p} & \alpha^{-1}\varepsilon^{q} \\ \alpha^{-1}\varepsilon^{-p} & 0 & \alpha\varepsilon^{p} & \varepsilon^{q} \end{pmatrix}. \tag{1.42}$$

Несложное вычисление показывает, что

$$\prod_i (1 - v\lambda_i) = \mathrm{Det}(I - \Lambda) =$$
$$= (1+v^2)^2 - 2v(1-v^2)\left(\cos\frac{2\pi p}{L} + \cos\frac{2\pi q}{L}\right), \quad (1.43)$$

где I — единичная матрица размером 4×4.

Возвращаясь к выражению (1.32), имеем

$$Z_N = 2^N (\operatorname{ch} K)^{2N} \prod_{p,q}^{L} \left[(1+v^2)^2 - 2v(1-v^2)\left(\cos\frac{2\pi p}{L} + \cos\frac{2\pi q}{L}\right)\right]^{1/2}. \quad (1.44)$$

Прологарифмировав обе части уравнения, получаем

$$\ln Z_N = N\ln 2 + 2N\ln(\operatorname{ch} K) + \frac{1}{2}\sum_{p,q=0}^{L} \ln\Big[(1+v^2)^2 -$$
$$- 2v(1-v^2)\left(\cos\frac{2\pi p}{L} + \cos\frac{2\pi q}{L}\right)\Big]. \quad (1.45)$$

Введем обозначения $\omega_1 = 2\pi p/L$ и $\omega_2 = 2\pi q/L$, также, при $L \to \infty$ сумма становится интегралом

$$\ln\frac{\lambda_s}{2} = 2\ln(\operatorname{ch} K) + \frac{1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} \ln\big[(1+v^2)^2 -$$
$$- 2v(1-v^2)(\cos\omega_1 + \cos\omega_2)\big]\, d\omega_1 d\omega_2. \quad (1.46)$$

Учитывая, что $v = \operatorname{th} K$, после всех упрощений окончательно получаем выражение для статистической суммы (приходящейся на один узел) изотропной ($K_1 = K_2 = K$) квадратной решетки

$$\ln\frac{\lambda_s}{2} = \frac{1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} \ln\big[\operatorname{ch}^2 2K - \operatorname{sh} 2K(\cos\omega_1 + \cos\omega_2)\big]\, d\omega_1 d\omega_2, \quad (1.47)$$

где $K = J/T$.

Можно показать, что матрица коэффициентов Λ для неизотропной решетки ($K_1 \neq K_2$) статсуммы (1.28) записывается в следующем виде

$$\Lambda(p,q,\mu \mid p,q,\mu') = \begin{pmatrix} v\varepsilon^{-p} & w\alpha^{-1}\varepsilon^{-q} & 0 & w\alpha\varepsilon^{q} \\ v\alpha\varepsilon^{-p} & w\varepsilon^{-q} & v\alpha^{-1}\varepsilon^{p} & 0 \\ 0 & w\alpha\varepsilon^{-q} & v\varepsilon^{p} & w\alpha^{-1}\varepsilon^{q} \\ v\alpha^{-1}\varepsilon^{-p} & 0 & v\alpha\varepsilon^{p} & w\varepsilon^{q} \end{pmatrix}. \quad (1.48)$$

Вычисляя определитель этой матрицы, получаем

$$\prod_i (1-\lambda_i) = \mathrm{Det}(I-\Lambda) = (1+v^2)(1+w^2)-$$
$$-2w(1-v^2)\cos\frac{2\pi p}{L} - 2v(1-w^2)\cos\frac{2\pi q}{L}. \quad (1.49)$$

Тогда статсумма (1.28) может быть записана в форме

$$Z_N = 2^N(\mathrm{ch}\,K_1\,\mathrm{ch}\,K_2)^N \prod_{p,q}^{L}\Big[(1+v^2)(1+w^2)-$$
$$-2w(1-v^2)\cos\frac{2\pi p}{L} - 2v(1-w^2)\cos\frac{2\pi q}{L}\Big]^{1/2}. \quad (1.50)$$

При $v = \mathrm{th}\,K_1$ и $w = \mathrm{th}\,K_2$ приходим к окончательному выражению для статистической суммы (приходящейся на один узел) обычной квадратной решетки

$$\ln\frac{\lambda_s}{2} = \frac{1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} \ln\big[\,\mathrm{ch}\,2K_1\,\mathrm{ch}\,2K_2 - \mathrm{sh}\,2K_1\cos\omega_1 - \mathrm{sh}\,2K_2\cos\omega_2\big]\,d\omega_1 d\omega_2, \quad (1.51)$$

$(K_1 = J/T,\ K_2 = J'/T)$.

1.4 Температура фазового перехода

Точка перехода по своей сути является температурой, при которой реализуется переход системы из ферромагнитного (или антиферромагнитного) состояния в парамагнитную конфигурацию. При этом теплоемкость системы, как мы видели, испытывает кардинальное изменение, такое что в точке фазового перехода теплоемкость устремляется в бесконечность. Такой переход называется фазовым переходом второго рода.

Для нахождения точки перехода у определенной двумерной решетки достаточно лишь рассмотреть подынтегральное выражение точного решения. Подынтегральное выражение, являясь натуральным логарифмом, имеет одну особую точку в нуле, в которой интеграл расходится. Поэтому, чтобы найти температуру перехода T_c, приравнивают подлогарифмическое выражение нулю, после чего выражают температуру T_c:

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} \ln \xi(J, T_c, \omega_1, \omega_2) d\omega_1 d\omega_2 \quad \to \quad \xi(J, T_c, \omega_1, \omega_2) = 0 \quad \to \quad T_c.$$

К примеру, рассмотрим обычную квадратную решетку. Подлогарифмическое выражение приравниваем нулю

$$\mathrm{ch}\left(\frac{2J_1}{T_c}\right)\mathrm{ch}\left(\frac{2J_2}{T_c}\right) - \mathrm{sh}\left(\frac{2J_1}{T_c}\right)\cos\omega_1 - \mathrm{sh}\left(\frac{2J_2}{T_c}\right)\cos\omega_2 = 0. \tag{1.52}$$

На данном этапе надо определиться при каких углах ω_1 и ω_2 следует искать критическую температуру T_c. Обычно (ω_1, ω_2) принимают равными $(0, 0)$, $(0, \pi)$, $(\pi, 0)$ или (π, π) соответственно. Другие углы, отличные от приведенных, дают аналогичные результаты из-за свойства трансляционной инвариантности (рисунок **??**). Кроме того, обменные взаимодействия J_1 и J_2 могут быть различными, а именно возможны четыре варианта: антиферромагнитное-антиферромагнитное, антиферромагнитное-ферромагнитное, ферромагнитное-антиферромагнитное, ферромагнитное-ферромагнитное.

Расхождения подлогарифмического выражения и, как следствие, получение температуры перехода (рисунок **??**, для конкретики мы выбрали $|J_1| = |J_2| = 1$) можно добиться, рассматривая выражение (**??**), например, в следующих случаях:

1. $\omega_1 = 0, \omega_2 = 0, J_1 > 0, J_2 > 0$.
2. $\omega_1 = 0, \omega_2 = \pi, J_1 > 0, J_2 < 0$.
3. $\omega_1 = \pi, \omega_2 = 0, J_1 < 0, J_2 > 0$.
4. $\omega_1 = \pi, \omega_2 = \pi, J_1 < 0, J_2 < 0$.

В том или ином случае, температура перехода на обычной квадратной решетке выражается в виде

$$T_c^{square} = \frac{2J}{\ln[1+\sqrt{2}]}; \qquad T_c^{square} = J \cdot 2.2692\ldots. \tag{1.53}$$

1.5 Понятие декорированной решетки

В современной физике конденсированного состояния активно исследуются модели магнитных материалов, в которых кроме обменных взаимодействий учитываются разные усложняющие факторы, не учитываемые моделями первого приближения. Данные факторы позволяют оказывать значительное влияние на характер критического поведения магнетиков и приводить к существованию большого разнообразия магнитных упорядоченных состояний и фазовых переходов между ними. За последнее время значительно возрос интерес к исследованию декорированных структур.

Термин «декорированная решетка» был введен в работе Сиози [**siozi1951**], после чего данная концепция начала стремительно развиваться другими авторами [**siozi_domb1972**, **fisher1958**]. Изучение данной области уже довольно богато литературой (см., например, [**jaЕғДЦur2016**]–[**mutalamov2020**]). Это можно объяснить тем, что декорирование порождает ряд новых, еще не до конца изученных эффектов по сравнению с исходными недекорированными решетками. В частности, декорирование порождает многообразие различных фрустрационных эффектов, может приводить как к подавлению фазовых переходов, присущих недекорированным решеткам, так и к возникновению новых фазовых переходов. Вместе с тем, появляются новые типы частичного упорядочения, а также различные формы расщепления теплоемкости. Богатство критического поведения декорированных решеток обусловлено возможностью многократного декорирования.

Суть построения декорированной решетки заключается во введении дополнительных спинов в промежутки между узлами исходной решетки [**siozi_domb1972**]. Данную процедуру можно реализовывать и в обратном порядке, превращая декорированные решетки в обычные. Основные спины еще называют нодальными, а дополнительные спины — декорационными (рисунок **??**). Практически большинство реальных структур является декорированными.

Стоит отметить, что точного аналитического решения модели Изинга на декорированной решетке в магнитном поле до настоящего момента получено не было [**kassan-ogly2019**]–[**kassan-ogly2020**]. И только в настоящей работе мы приводим впервые полученное точное решение модели Изинга на декорированной решетке при наличии магнитного поля [A3].

Напоследок, следует обратить внимание, что, наряду с дуальным преобразованием (преобразование обычной решетки в решетку к ней дуальную, которое идет посредством помещения в центр ячейки исходной решетки узла, после чего эти узлы соединяются, образуя дуальную решетку) и преобразованием «звездатреугольник», декорационное преобразование является важной процедурой при переходе от одной решетки к решетке совершенно иной топологии (рисунок **??**).

1.6 Постановка задачи исследования

Цель настоящей магистерской диссертации заключается в рассмотрении обобщенной модели Изинга с произвольным количеством различных обменных взаимодействий как между ближайшими, так и между вторыми соседями с учетом декорирования и магнитного поля на одномерной цепочке, а также обобщенной модели Изинга с четырьмя различными обменными взаимодействиями между ближайшими соседями на квадратной решетке, с последующим изучением их термодинамических, магнитных и фрустрационных свойств.

Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

1. Получить точное аналитическое решение обобщенной модели Изинга на одномерной цепочке при учете магнитного поля методом трансфер-матрицы Крамерса-Ваннье.
2. Исследовать термодинамические, магнитные и фрустрационные свойства обобщенной модели Изинга на одномерной цепочке, в том числе при учете декорирования.
3. Получить точное аналитическое решение обобщенной модели Изинга на квадратной решетке комбинаторным методом Вдовиченко–Фейнмана.
4. Исследовать термодинамические и фрустрационные свойства обобщенной модели Изинга на квадратной решетке.

Глава 2. Обобщенная модель Изинга на одномерной цепочке при учете магнитного поля

Начнем исследование модели Изинга с одномерного случая, поскольку он не представляет существенных вычислительных трудностей и в данном рассмотрении имеется возможность получения точных аналитических решений модели Изинга в присутствии магнитного поля.

2.1 Обобщение модели Изинга на произвольное число трансляций линейной цепочки

Гамильтониан обобщенной модели Изинга с произвольным числом обменных взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями [**kassan-ogly2001**, **dobson1969**] линейной цепочки, находящейся в магнитном поле, может быть записан в следующей форме

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_n(s) = -J_1 \sum_{i=1,n+1,2n+1,\ldots}^{N-n+1} s_i s_{i+1} - J_1^{'} \sum_{i=1,n+1,2n+1,\ldots}^{N-n+1} s_i s_{i+2} - \\ - J_2 \sum_{i=2,n+2,2n+2,\ldots}^{N-n+2} s_{i+1} s_{i+2} - J_2^{'} \sum_{i=2,n+2,2n+2,\ldots}^{N-n+2} s_{i+1} s_{i+3} - \cdots - \\ - J_n \sum_{i=n,2n,3n,\ldots}^{N} s_{i+n} s_{i+n+1} - J_n^{'} \sum_{i=n,2n,3n,\ldots}^{N} s_{i+n} s_{i+n+2} - H \sum_{i=1,2,3,\ldots}^{N} s_i, \quad (2.1)\end{aligned}$$

где $J_1, J_2, \ldots, J_n$ — параметры обменного взаимодействия между ближайшими соседями, $J_1^{'}, J_2^{'}, \ldots, J_n^{'}$ — параметры обменного взаимодействия между вторыми соседями, H — внешнее магнитное поле, $s = \pm 1$ (см. рисунок 2.7, на котором представлен частный случай модели только с двумя различными обменами между ближайшими и вторыми соседями).

Следуя общему алгоритму вывода трансфер-матрицы Крамерса-Ванье [**kramers_wannier1**], можно получить трансфер-матрицы для одномерной цепочки с двумя, тремя, четырьмя и т.д. трансляциями в виде одной матрицы, например, для двух трансляций:

$$W_2 =$$

$$= \begin{pmatrix} e^{K_1+L_1+K_2+L_2+2h} & e^{K_1+L_1+K_2-L_2+2h} & e^{K_1-L_1-K_2+L_2+2h} & e^{K_1-L_1-K_2-L_2+2h} \\ e^{-K_1+L_1-K_2-L_2} & e^{-K_1+L_1-K_2+L_2} & e^{-K_1-L_1+K_2-L_2} & e^{-K_1-L_1+K_2+L_2} \\ e^{-K_1-L_1+K_2+L_2} & e^{-K_1-L_1+K_2-L_2} & e^{-K_1+L_1-K_2+L_2} & e^{-K_1+L_1-K_2-L_2} \\ e^{K_1-L_1-K_2-L_2-2h} & e^{K_1-L_1-K_2+L_2-2h} & e^{K_1+L_1+K_2-L_2-2h} & e^{K_1+L_1+K_2+L_2-2h} \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

где $K_1 = J_1/T$, $K_2 = J_2/T$, $L_1 = J_1^{'}/T$, $L_2 = J_2^{'}/T$, и $H = h/T$.

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 произведения простых матриц

$$W_n = V_1 \cdot V_2 \cdot ... \cdot V_n = \prod_{i=1}^{n} V_i =$$

$$= \prod_{i=1}^{n} \begin{pmatrix} e^{K_i+L_i+h} & e^{K_i-L_i+h} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-K_i+L_i+h} & e^{-K_i-L_i+h} \\ e^{-K_i-L_i-h} & e^{-K_i+L_i-h} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{K_i-L_i-h} & e^{K_i+L_i-h} \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

где V_1, V_2, $\ldots$, 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 [A1, A2, A3].

Поскольку в гамильтониане (2.1) каждая сумма пробегает только по n узлам, а не по всем узлам решетки N, то статсумма в термодинамическом пределе теперь примет вид:

$$Z_N = \lambda_{\max}^{N/n}. \quad (2.4)$$

Свободная энергия, энтропия, теплоемкость, намагниченность и внутренняя энергия выражаются только через наибольшее собственное значение трансфер-матрицы Крамерса – Ваннье $\lambda_{\max}$

$$F(H,T) = -\frac{T\ln\lambda_{\max}}{n}, \tag{2.5}$$

$$S(H,T) = \frac{\ln\lambda_{\max}}{n} + \frac{T}{n\lambda_{\max}}\frac{\partial\lambda_{\max}}{\partial T}, \tag{2.6}$$

$$C(H,T) = \frac{T}{n\lambda_{\max}}\frac{\partial\lambda_{\max}}{\partial T} + \frac{T}{n}\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{T}{\lambda_{\max}}\frac{\partial\lambda_{\max}}{\partial T}\right), \tag{2.7}$$

$$M(H,T) = \frac{T}{n\lambda_{\max}}\frac{\partial\lambda_{\max}}{\partial H}, \tag{2.8}$$

$$E(H,T) = \frac{T^2}{n}\frac{\partial\lambda_{\max}}{\partial T}. \tag{2.9}$$

Получение точного аналитического решения для наибольшего собственного значения трансфер-матрицы Крамерса-Ваннье с гамильтонианом (2.1) весьма проблематично. Тем не менее, с конструированием несложной компьютерной программы выражения для максимальных собственных значений матрицы Крамерса – 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 (2.5)-(2.9). 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:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_2(s) = -J_1\sum_{i=1,3,5,\ldots}^{N-1} s_i s_{i+1} - J_1^{'}\sum_{i=1,3,5,\ldots}^{N-1} s_i s_{i+2} - \\ - J_2\sum_{i=2,4,6,\ldots}^{N} s_{i+1}s_{i+2} - J_2^{'}\sum_{i=2,4,6,\ldots}^{N} s_{i+1}s_{i+3} - H\sum_{i=1,2,3,\ldots}^{N} s_i, \end{aligned}\tag{2.10}$$

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 рисунке **??** проиллюстрирована цепочка, соответствующая обобщенной модели Изинга, описываемой гамильтонианом (2.10).

Определяем секулярное уравнение трансфер-матрицы W_2 в форме

$$\det(W_2 - \lambda E) = 0, \tag{2.11}$$

переписав его в виде

$$\lambda^4 + a\lambda^3 + b\lambda^2 + c\lambda + d = 0, \tag{2.12}$$

решаем его [**korn1970**] и находим наибольшее собственное значение, которое принимает вид

$$\lambda_{\max} = \frac{\sqrt{a^2 - 4b + 4y} - a}{4} + \\ + \sqrt{\left(\frac{\sqrt{a^2 - 4b + 4y} - a}{4}\right)^2 - \frac{y}{2} - \frac{2c - ya}{2\sqrt{a^2 - 4b + 4y}}}, \tag{2.13}$$

где

$$\begin{aligned}
Q &= \frac{p^3}{27} + \frac{q^2}{4}; \quad p = -\frac{b^2}{3} + ac - 4d, \\
q &= -\frac{2b^3}{27} + \frac{bac}{3} + \frac{8bd}{3} - a^2 d - c^2; \quad y = \sqrt[3]{\sqrt{Q} - \frac{q}{2}} + \sqrt[3]{-\sqrt{Q} - \frac{q}{2}} + \frac{b}{3}, \\
a &= -2\exp\left(\frac{J_1' + J_2'}{T}\right)\left(\operatorname{ch}\left(\frac{2H}{T}\right)\exp\left(\frac{J_1 + J_2}{T}\right) + \exp\left(\frac{-J_1 - J_2}{T}\right)\right), \\
b &= 4\exp\left(\frac{2J_1' + 2J_2'}{T}\right)\operatorname{ch}\left(\frac{2H}{T}\right) - 4\operatorname{ch}\left(\frac{2J_1' - 2J_2'}{T}\right)\operatorname{ch}\left(\frac{2H}{T}\right) + \\
&+ 2\exp\left(\frac{-2J_1}{T}\right)\operatorname{sh}\left(\frac{2J_1' + 2J_2' - 2J_2}{T}\right) + \\
&+ 2\exp\left(\frac{2J_1}{T}\right)\operatorname{sh}\left(\frac{2J_1' + 2J_2' + 2J_2}{T}\right), \\
c &= -8\exp\left(\frac{J_1' + J_2'}{T}\right)\left(\exp\left(\frac{J_1 + J_2}{T}\right) + \right. \\
&\left. + \exp\left(\frac{-J_1 - J_2}{T}\right)\operatorname{ch}\left(\frac{2H}{T}\right)\right)\operatorname{sh}\left(\frac{2J_1'}{T}\right)\operatorname{sh}\left(\frac{2J_2'}{T}\right), \\
d &= 16\operatorname{sh}^2\left(\frac{2J_1'}{T}\right)\operatorname{sh}^2\left(\frac{2J_2'}{T}\right).
\end{aligned}$$

Поскольку рассматривается перенос только на два периода трансляции цепочки ($n = 2$), то для нахождения термодинамических и магнитных величин системы необходимо воспользоваться формулами

$$F(H,T) = -\frac{T \ln \lambda_{\max}}{2}, \tag{2.14}$$

$$S(H,T) = \frac{\ln \lambda_{\max}}{2} + \frac{T}{2\lambda_{\max}} \frac{\partial \lambda_{\max}}{\partial T}, \tag{2.15}$$

$$C(H,T) = \frac{T}{2\lambda_{\max}} \frac{\partial \lambda_{\max}}{\partial T} + \frac{T}{2} \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{T}{\lambda_{\max}} \frac{\partial \lambda_{\max}}{\partial T} \right), \tag{2.16}$$

$$M(H,T) = \frac{T}{2\lambda_{\max}} \frac{\partial \lambda_{\max}}{\partial H}, \tag{2.17}$$

$$E(H,T) = \frac{T^2}{2} \frac{\partial \lambda_{\max}}{\partial T}. \tag{2.18}$$

2.2 Термодинамические, магнитные и фрустрационные свойства обобщенной модели Изинга

Детальный анализ большого количества всевозможных вариантов величин и знаков обменных взаимодействий показал, что при учете только двух различных обменов как между ближайшими, так и вторыми соседями в магнитном поле, система обладает семью магнитными конфигурациями в основном состоянии (в отличие от шести конфигураций в основном состоянии в случае отсутствия магнитного поля, см. статью [A2]): антиферромагнитная структура

$$C_2 = \left\{ \begin{matrix} \ldots \downarrow\ \uparrow\ \downarrow\ \uparrow \ldots \\ \ldots \uparrow\ \downarrow\ \uparrow\ \downarrow \ldots \end{matrix} \right\}$$

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

$$C_1 = \left\{ \ldots \uparrow\ \uparrow\ \uparrow\ \uparrow \ldots \right\}$$

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

$$C_4 = \left\{ \begin{matrix} \ldots \downarrow\ \downarrow\ \uparrow\ \uparrow \ldots \\ \ldots \uparrow\ \uparrow\ \downarrow\ \downarrow \ldots \end{matrix} \right\} \qquad C_4' = \left\{ \begin{matrix} \ldots \uparrow\ \downarrow\ \downarrow\ \uparrow \ldots \\ \ldots \downarrow\ \uparrow\ \uparrow\ \downarrow \ldots \end{matrix} \right\}$$

$$C_4'' = \left\{ \ldots \uparrow\ \uparrow\ \downarrow\ \uparrow \ldots \right\} \qquad C_4''' = \left\{ \ldots \uparrow\ \uparrow\ \uparrow\ \downarrow \ldots \right\}$$

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

$$C_3 = \Big\{ \ldots \uparrow\ \uparrow\ \downarrow \ldots \Big\}$$

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. **??**), установленных выше, определим фрустрационные поля, в которых происходят переходы между соответствующими упорядочениями

$$H_{\text{fr}_1} = \begin{cases} -J_1 + 2J_1^{'} - J_2 + 2J_2^{'}, & \text{при } 0 \leqslant R_1 + R_2 \leqslant 1; \\ 2J_1 - J_1^{'} - J_2 - J_2^{'}, & \text{при } R_1 + R_2 \geqslant 1 \text{ и } J_1 \leqslant J_2; \\ -J_1 - J_1^{'} + 2J_2 - J_2^{'}, & \text{при } R_1 + R_2 \geqslant 1 \text{ и } J_1 \geqslant J_2. \end{cases}$$

$$H_{\text{fr}_2} = \begin{cases} -J_1 + 2J_1^{'} - J_2 - 4J_2^{'}, & \text{при } R_1 \geqslant R_2; \\ -J_1 - 4J_1^{'} - J_2 + 2J_2^{'}, & \text{при } R_1 \leqslant R_2. \end{cases}$$

$$H_{\text{fr}_3} = \begin{cases} -J_1 - 2J_1^{'} - J_2, & \text{при } R_1 \geqslant R_2; \\ -J_1 - J_2 - 2J_2^{'}, & \text{при } R_1 \leqslant R_2. \end{cases}$$

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 [**zarubin2019**]. Значение нуль-температурной энтропии находится как натуральный логарифм единственного вещественного корня уравнения $x^3 - x - 1 = 0$, известного как пластическое число

$$S_{T\to 0} = \ln \rho = 0.2812\ldots, \tag{2.19}$$

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

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

$$M_{T\to 0} = \frac{1}{3\rho^3 - \rho} = 0.1770\ldots \tag{2.20}$$

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

$$S_{T\to 0} = \ln\sqrt{\rho} = 0.1406\ldots \tag{2.21}$$

Соответствующая намагниченность равна выражению (2.20).

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 [**zarubin2019**]. Нуль-температурная энтропия находится как натуральный логарифм наибольшего вещественного корня уравнения $x^4 - x - 1 = 0$

$$S_{T\to 0} = \ln\xi = 0.1995\ldots, \tag{2.22}$$

а нуль-температурная намагниченность

$$M_{T\to 0} = \frac{1}{\xi + 4\xi^3 - \xi^4} = 0.1593\ldots, \tag{2.23}$$

при

$$\xi = \sqrt{\alpha - \beta} + \sqrt{\frac{1}{4\sqrt{\alpha - \beta}} - \alpha + \beta},$$

где $\alpha = \sqrt[3]{(\sqrt{849} + 9)/1152}$, $\beta = \sqrt[3]{(\sqrt{849} - 9)/1152}$. Полученное математическое сечение пока безымянное.

Первое фрустрирующее поле при $R_1 + R_2 = 1$. При таком условии система вырождается в обычную (не обобщенную) модель Изинга с взаимодействиями между ближайшими и вторыми соседями [**zarubin2019**]. Фрустрирующее поле равно нулю, а энтропия равна натуральному логарифму золотого сечения

$$S_{T\to 0} = \ln\varphi = 0.4812\ldots \tag{2.24}$$

Стоит отметить, что теория магнетизма, построенная в обычной модели Изинга с учетом взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями, была применена несколькими учеными для объяснения поведения соединений $CoCl_2 \cdot 2H_20$ и $CoBr_2 \cdot 2H_20$ в магнитном поле [**oguchi1965**]–[**kobayashi1964**].

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 (2.21), как и намагниченности

$$M_{T\to 0} = \frac{\rho^2}{3\rho^2 - 1} = 0.4115\ldots, \tag{2.25}$$

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 (не обобщенную) 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 [**zarubin2019**]. 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

$$S_{T\to 0} = \ln \psi = 0.3822\ldots, \tag{2.26}$$

а нуль-температурная намагниченность равна

$$M_{T\to 0} = \frac{\psi^3}{\psi^2 + 3} = 0.6115\ldots, \tag{2.27}$$

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

$$S_{T\to 0} = \ln \sqrt{\varphi} = 0.2406\ldots \tag{2.28}$$

а нуль-температурная намагниченность

$$M_{T\to 0} = \frac{\varphi}{2\varphi - 1} = 0.7236\ldots \tag{2.29}$$

Однако, если положить $|R_1 - R_2| = 1$, первое и второе фрустрирующие поля совпадут ($H_{\mathrm{fr}_1} = H_{\mathrm{fr}_2}$), 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 $x^3 - x^2 - 2x + 1 = 0$

$$S_{T\to 0} = \ln\sqrt{\nu} = 0.2944\ldots, \tag{2.30}$$

$$M_{T\to 0} = \frac{1}{3\nu^2 - 2\nu - 2} = 0.2417\ldots, \tag{2.31}$$

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 рисунке **??**.

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

$$H_{\mathrm{fr}_1} = -J_1 + 2J_1^{'} - J_2;$$
$$H_{\mathrm{fr}_2} = -J_1 - 2J_1^{'} - J_2.$$

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

$$H_{\mathrm{fr}_1} = -J_1 - J_2 + 2J_2^{'};$$
$$H_{\mathrm{fr}_2} = -J_1 - J_2 - 2J_2^{'}.$$

Варианты этих двух конкурирующих взаимодействий схожи. Достаточно привести только одну схему переходов, например, $J_1 < 0$, $J_1^{'} > 0$, $J_2 < 0$, $J_2^{'} < 0$ (рис. **??**). 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 (2.28) с соответствующим значением намагниченности

$$M_{T\to 0} = \frac{1}{2\varphi^2 - \varphi} = 0.2763\ldots \tag{2.32}$$

Второе фрустрирующее поле. Энтропия соответствует выражению (2.28), а намагниченность

$$M_{T\to 0} = \frac{1}{2\varphi - 1} = 0.4472\ldots \tag{2.33}$$

При $R_1 = R_2 = 0$ приходим к случаю не обобщенной модели Изинга с взаимодействием ближайших соседей в магнитном поле [**zarubin2019**] с хорошо известными значениями для нуль-температурных энтропий (2.24) и намагниченностей (2.33).

4. *Антиферро-ферромагнитное взаимодействие между ближайшими соседями, ферро-антиферромагнитное взаимодействие между вторыми соседями ($J_1 < 0, J_1^{'} > 0, J_2 > 0, J_2^{'} < 0$)*

$$H_{\text{fr}_1} = \begin{cases} -J_1 - J_1^{'} - J_2^{'}, & \text{при } 0 \leqslant R_1 + R_2 \leqslant 1; \\ -J_1 - 2J_1^{'} + J_2, & \text{при } R_1 + R_2 \geqslant 1. \end{cases}$$
$$H_{\text{fr}_2} = -J_1 - J_2 - 2J_2^{'}.$$

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

5. *Антиферро-ферромагнитное взаимодействие между ближайшими и вторыми соседями ($J_1 < 0, J_1^{'} < 0, J_2 > 0, J_2^{'} > 0$)*

$$H_{\text{fr}_1} = \begin{cases} -J_1 - J_1^{'} - J_2^{'}, & \text{при } 0 \leqslant R_1 + R_2 \leqslant 1; \\ -J_1 - 2J_1^{'} + J_2, & \text{при } R_1 + R_2 \geqslant 1. \end{cases}$$
$$H_{\text{fr}_2} = -J_1 - 2J_1^{'} - J_2.$$

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

6. *Ферро-антиферромагнитное взаимодействие между ближайшими и вторыми соседями ($J_1 > 0, J_1^{'} > 0, J_2 < 0, J_2^{'} < 0$)*

$$H_{\mathrm{fr}_1} = \begin{cases} -J_1' - J_2 - J_2', & \text{при } 0 \leqslant R_1 + R_2 \leqslant 1; \\ J_1 - 2J_1' - J_2, & \text{при } R_1 + R_2 \geqslant 1. \end{cases}$$

$$H_{\mathrm{fr}_2} = -J_1 - J_2 - 2J_2'.$$

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

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

$$H_{\mathrm{fr}_1} = \begin{cases} -J_1' - J_2 - J_2', & \text{при } 0 \leqslant R_1 + R_2 \leqslant 1; \\ J_1 - J_2 - 2J_2', & \text{при } R_1 + R_2 \geqslant 1. \end{cases}$$

$$H_{\mathrm{fr}_2} = -J_1 - 2J_1' - J_2.$$

При $R_2 \geqslant (|J_1| + |J_2|)/2, (|J_1| \geqslant 1, |J_2| \geqslant 1)$ 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 $(|J_1| \geqslant 1, |J_2| \geqslant 1)$, то фаза с учетверением периода трансляций (C_4'' или C_4''') становится начальным состоянием системы. На рисунке **??** приведена схема переходов при $J_1 < 0, J_1' > 0, J_2 > 0, J_2' < 0$.

Первое фрустрирующее поле при $0 \leqslant R_1 + R_2 \leqslant 1$. Энтропия находится из выражения (2.28), а намагниченность из выражения (2.33).

Первое фрустрирующее поле при $R_1 + R_2 \geqslant 1$. 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

$$S_{T\to 0} = \ln \sqrt[4]{2} = 0.1733\ldots, \tag{2.34}$$

нуль-температурная намагниченность равна

$$M_{T\to 0} = \frac{1}{4}. \tag{2.35}$$

Второе фрустрирующее поле. Энтропия равна выражению (2.28), намагниченность выражению (2.29).

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

$$S_{T\to 0} = \ln\sqrt{2}, \tag{2.36}$$

а соответствующая намагниченность будет равна

$$M_{T\to 0} = \frac{1}{2}. \tag{2.37}$$

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 [**zarubin2019**]. 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. **??**).

$$H_{\mathrm{fr}_1} = \begin{cases} J_1 - J_2 - 2J_2', & \text{при } R_1 - R_2 \geqslant 1; \\ -J_1' - J_2 - J_2', & \text{при } -1 \leqslant R_1 - R_2 \leqslant 1; \\ J_1 - 2J_1' - J_2, & \text{при } R_1 - R_2 \leqslant -1. \end{cases}$$

$$H_{\mathrm{fr}_2} = \begin{cases} -J_1 - 2J_1' - J_2, & \text{при } R_1 - R_2 \geqslant 1; \\ -J_1 - J_2 - 2J_2', & \text{при } R_1 - R_2 \leqslant -1. \end{cases}$$

Первое фрустрирующее поле при $R_1 - R_2 \geqslant 1$ (или $R_1 - R_2 \leqslant -1$). Происходит переход из фазы учетверения периода трансляции C_4 (или C_4') в другую фазу учетверения C_4'' (или C_4''') с энтропией (2.28) и намагниченностью

$$M_{T\to 0} = \frac{1}{4\varphi - 2} = 0.2236\ldots. \tag{2.38}$$

Первое фрустрирующее поле при $-1 \leqslant R_1 - R_2 \leqslant 1$. В этом случае наблюдается переход из фазы учетверения периода трансляции C_4 в ферромагнитную конфигурацию C_1 [**zarubin2019**] с энтропией, равной натуральному логарифму наибольшего вещественного корня уравнения $x^4 - x^3 - 1 = 0$

$$S_{T\to 0} = \ln \mu = 0.3223\ldots, \tag{2.39}$$

$$M_{T\to 0} = \frac{\mu^4}{\mu^3 + 4\mu + 1} = 0.3967\ldots, \tag{2.40}$$

при

$$\mu = \frac{1}{4} + \sqrt{\frac{1}{16}\left(\frac{1}{2\zeta} + 3\right) - \zeta^2} + \zeta,$$

где $\zeta = \sqrt{1 - 16\left(\sqrt[3]{(\sqrt{849}+9)/1152} - \sqrt[3]{(\sqrt{849}-9)/1152}\right)}/4$. Данное 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 из наибольшего решения уравнения $x^3 - 2x^2 - x + 1 = 0$

$$S_{T\to 0} = \ln \sqrt{\varkappa} = 0.4048\ldots, \tag{2.41}$$

$$M_{T\to 0} = \frac{\varkappa^2}{2\varkappa^2 + 2\varkappa - 3} = 0.43556\ldots, \tag{2.42}$$

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 (2.28), а соответствующая намагниченность будет равна выражению (2.29).

Рисунок **??** демонстрирует обнаруженные фрустрационные значения энтропий и намагниченностей в данном варианте конкурирующих взаимодействий.

2.3 Частные случаи обобщенной модели Изинга на одномерной цепочке в присутствии магнитного поля

Главным преимуществом обобщенной модели Изинга с несколькими трансляциями в различных направлениях является возможность получения известных видов решеток 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 на плоскости. Рассмотрим данную идею на одномерной цепочке.

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

2.3.1 Единожды декорированная цепочка

Полагая нулю одно из взаимодействий между вторыми соседями (например, $J_2^{'} = 0$), обобщенная цепочка примет вид, представленный на рисунке **??**. При $J_1 = J_2$ получим простейший случай декорированной цепочки, а именно, единожды декорированную цепочку [**stephenson1970**] с двумя фрустрирующими полями.

$$H_{\mathrm{fr}_1} = \begin{cases} -J_1 - J_2, & \text{при } J_1^{'} = 0; \\ -J_1 + 2J_1^{'} - J_2, & \text{при } 0 \geqslant J_1^{'} \geqslant J_2. \end{cases}$$
$$H_{\mathrm{fr}_2} = -J_1 - 2J_1^{'} - J_2.$$

Первое фрустрирующее поле при $J_1^{'} = 0$. Энтропия (2.24) с намагниченностью (2.29).

Первое фрустрирующее поле при $0 \geqslant J_1^{'} \geqslant J_2$. Энтропия равна натуральному логарифму корня из двух (2.36) с намагниченностью (2.35).

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 $H_{\mathrm{fr}} = 0$ и с нуль-температурной энтропией равной натуральному логарифму корня из трех

$$S_{T\to 0} = \ln\sqrt{3}. \tag{2.43}$$

Второе фрустрирующее поле. Энтропия (2.28) с намагниченностью (2.29).

2.3.2 Набор двух независимых подрешеток

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

$$H_{\mathrm{fr}_1}=\begin{cases}-2J_1', & \text{при } J_1'\leqslant J_2';\\ -2J_2', & \text{при } J_1'\geqslant J_2';\end{cases}$$

$$H_{\mathrm{fr}_2}=\begin{cases}-2J_2', & \text{при } J_1'\leqslant J_2';\\ -2J_1', & \text{при } J_1'\geqslant J_2';\end{cases}$$

Первое фрустрирующее поле при $J_1'\leqslant J_2'$ *или при* $J_1'\geqslant J_2'$. Энтропия (2.28) с намагниченностью (2.38).

Первое фрустрирующее поле при $J_1'=J_2'$. Любопытно, что при равенстве взаимодействий можно прийти к результатам, полученным для обычной (не обобщенной) решетки с ближайшими соседями с энтропией (2.24) и намагниченностью (2.29).

Второе фрустрирующее поле. Энтропия (2.28) с намагниченностью (2.29).

2.3.3 Цепочка лестничного типа

Рассмотрим лестничную цепочку (рис. **??**).

$$H_{\mathrm{fr}_1}=\begin{cases}-J_2-2J_2', & \text{при } R_2\leqslant J_1';\\ -2J_1'-J_2, & \text{при } R_2\geqslant J_1'.\end{cases}$$

$$H_{\mathrm{fr}_2}=\begin{cases}-J_2-2J_1', & \text{при } R_2\leqslant J_1';\\ -2J_2'-J_2, & \text{при } R_2\geqslant J_1'.\end{cases}$$

Первое фрустрирующее поле при $R_2\leqslant J_1'$ *или при* $R_2\geqslant J_1'$. Энтропия (2.34) с намагниченностью (2.35).

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

$$S_{T\to 0} = \ln\sqrt{\delta} = 0.4407\ldots, \tag{2.44}$$

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

Второе фрустрирующее поле. Энтропия (2.28) с намагниченностью (2.29).

2.3.4 Решетка димеров

Решетка димеров примечательна тем, что ненулевое значение энтропии можно получить при любой величине и знаке взаимодействия в отсутствие магнитного поля. Это значит, что при любом J_1 в системе возникают фрустрации — то есть бесконечное количество конфигураций с одинаковой энергией. В отсутствие магнитного поля имеем $S_{T\to 0} = \ln(2)/2$, в магнитном поле (при $H = 1$, $J_1 = -1$ или $J_2 = -1$) нуль-температурная энтропия равна $S_{T\to 0} = \ln(3)/2$.

2.4 Общее правило исследования фрустрированных систем

При исследовании фрустрационных свойств, рассматриваемых в данной 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 (2.28); нуль-температурная намагниченность, равная золотому сечению, деленному на два золотого сечения минус единица (2.29), 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. **??**). 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.

Глава 3. Декорированная изинговская цепочка в магнитном поле

При рассмотрении частных случаев обобщенной модели Изинга, мы исследовали единожды декорированную решетку **??**. Рассмотрим данный случай подробнее, а именно, получим точное решение произвольно декорированной цепочки в магнитном поле и исследуем термодинамические, магнитные и фрустрационные свойства декорированной модели Изинга.

3.1 Точное решение декорированной изинговской цепочки в магнитном поле

Запишем гамильтониан произвольно декорированной решетки в следующем виде

$$\mathcal{H}(s) = -J_d \sum_{i=1}^{N} s_i s_{i+1} - J \sum_{j=1,d+2,\ldots}^{N} s_j s_{j+d+1} - H \sum_{i=1}^{N} s_i, \tag{3.1}$$

где J_d — обменное взаимодействие между ближайшими декорационными спинами и нодальными спинами, а также между декорационными спинами, J — обменное взаимодействие только между нодальными спинами, H — внешнее магнитное поле, d обозначает число так называемых «декораций» цепочки.

На рисунке **??** изображена решетка спинов, соответствующая декорированной цепочке с гамильтонианом (3.1). Красными кружками обозначены декорационные спины, синими кружками — основные (нодальные) спины. Каждый спин обладает двумя состояниями $s = \pm 1$.

Как мы видели, статистическая сумма в термодинамическом пределе ($N \to \infty$) для единожды декорированной цепочки, то есть при $d = 1$, вычисляется из выражения $Z_N = \lambda_{\max}^{N/2}$. Статсумма для дважды декорированной цепочки имеет вид $Z_N = \lambda_{\max}^{N/3}$, для трижды декорированной цепочки — $Z_N = \lambda_{\max}^{N/4}$ и т.д. Поэтому легко убедиться в том, что в общем случае выражение для статсуммы с произвольным числом декорирования цепочки примет вид

$$Z_N = \lambda_{\max}^{N/(d+1)}. \tag{3.2}$$

В формуле (3.2) замечаем, что знаменатель у степени наибольшего собственного значения всегда на единицу больше величины декорирования цепочки d. Это означает, что в отсутствие декорационных спинов ($d = 0$) цепочка содержит только нодальные спины, таким образом, получаем случай обычной (недекорированной) модели Изинга, статсумма которой вычисляется как $Z_N = \lambda_{\max}^N$.

Если d устремить к бесконечности, то рассматриваемая задача снова сводится к обычной (недекорированной) модели Изинга, так как при увеличении числа «декораций» относительный вклад в энергию от основных спинов становится все более незначительным.

Согласно алгоритму получения обобщенной трансфер-матрицы Крамерса–Ваннье и применив предложенное Сиози декорационное преобразование (*decoration-iteration transformation*) [**siozi_domb1972**], определяем точное выражение для наибольшего собственного значения трансфер-матрицы декорированной цепочки при наличии магнитного поля

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

где

$$\begin{aligned}
\lambda_1 &= \exp\left(J_d/T\right)[\mathrm{ch}(H/T) + \sqrt{\mathrm{sh}^2(H/T) + \exp\left(-4J_d/T\right)}],\\
\lambda_2 &= \exp\left(J_d/T\right)[\mathrm{ch}(H/T) - \sqrt{\mathrm{sh}^2(H/T) + \exp\left(-4J_d/T\right)}],\\
\varepsilon &= \sqrt{1 + \mathrm{sh}^2(H/T)(\exp(4J/T) - 1)/\big(\mathrm{sh}^2(H/T) + \exp\left(-4J_d/T\right)\big)}.
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Термодинамические и магнитные параметры исследуемой декорированной решетки могут быть выражены исключительно через наибольшее собственное значение $\lambda_{\max}$. Тогда, принимая во внимание степень декорирования цепочки d, аналитические выражения для энтропии, теплоемкости, намагниченности и параметра порядка, впервые введенного в статье [**kassan-ogly2012**], запишутся следующим образом:

$$S(H,T) = \frac{\ln \lambda_{\max}}{d+1} + \frac{T}{(d+1)\lambda_{\max}} \frac{\partial \lambda_{max}}{\partial T}; \tag{3.4}$$

$$C(H,T) = \frac{T}{(d+1)\lambda_{\max}} \frac{\partial \lambda_{\max}}{\partial T} + \frac{T}{d+1} \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{T}{\lambda_{\max}} \frac{\partial \lambda_{\max}}{\partial T} \right); \tag{3.5}$$

$$M(H,T) = \frac{T}{(d+1)\lambda_{\max}} \frac{\partial \lambda_{\max}}{\partial H}; \tag{3.6}$$

$$\eta(H,T) = 1 - \frac{\ln \lambda_{\max}}{(d+1)\ln 2} - \frac{T}{(d+1)\lambda_{\max} \ln 2} \frac{\partial \lambda_{\max}}{\partial T}. \tag{3.7}$$

3.1.1 Термодинамические, магнитные и фрустрационные свойства декорированной изинговской цепочки

При исследовании модели Изинга на декорированной цепочке в случае антиферромагнитного обмена как между декорационными спинами, так и между основными спинами, в частности, $J_d = -1, J = -1$ в магнитном поле $H = 2$ при $T \to 0$, установлено, что энтропию системы (рисунок **??**а) можно записать в общем виде для любых значений декорирования d

$$\lim_{T \to 0} S = \frac{1}{d+1} \ln \left[\frac{1}{\sqrt{5}} \left(\varphi^{d+1} - (1-\varphi)^{d+1} \right) \right], \tag{3.8}$$

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

Таким образом, система в данном режиме фрустрирована, а магнитное поле является фрустрирующим.

Рисунок **??**а демонстрирует, что при стремлении d к бесконечности фрустрирующая энтропия сходится к логарифму золотого сечения. Используя выражение (3.8), можно показать, что

$$\lim_{d \to \infty} \lim_{T \to 0} S = \lim_{d \to \infty} \frac{1}{d+1} \ln \left[\frac{1}{\sqrt{5}} \left(\varphi^{d+1} - (1-\varphi)^{d+1} \right) \right] = \ln \varphi. \tag{3.9}$$

При $H = 4, J_d = -1, J = -1$ наблюдается еще одно фрустрирующее поле. Фрустрирующая энтропия при разных значениях декорирования (рисунок **??**б) представлена в следующем виде

$$\lim_{T \to 0} S = \frac{1}{d+1} \ln \varphi. \tag{3.10}$$

Стоит отметить, что при стремлении температуры к бесконечности энтропия равна натуральному логарифму двух

$$\lim_{T\to\infty} S = \ln 2, \tag{3.11}$$

поскольку число состояний на узле равно двум.

Тем не менее, при стремлении температуры к нулю либо к бесконечности теплоемкость при различных параметрах обменных взаимодействий равна нулю (рисунок **??**а)

$$\lim_{T\to 0} C = 0, \qquad \lim_{T\to\infty} C = 0. \tag{3.12}$$

Установлено, что в непосредственной близости к точке фрустрации теплоемкость расщепляется на два пика: острый и куполообразный пики. На рисунке **??**б изображена теплоемкость в точке фрустрации ($H = 2$) — наблюдается единственный куполообразный пик, в то время как в вблизи фрустрации, в частности, в магнитном поле равном $H = 1.9$ и $H = 2.1$ у теплоемкости появляется дополнительный острый пик. Такое поведение теплоемкости присуще всем фрустрированным системам.

Намагниченность системы в случае антиферромагнитного обмена спинов решетки при $J_d = -1, J = -1$ во фрустрационном поле $H = 2$ и при $T \to 0$ имеет следующие значения при различных кратностях декорирования d (рисунок **??**а)

$$\lim_{T\to 0} M = \frac{\left(d+1-\frac{1}{\sqrt{5}}\right)\varphi^{d+1} + \left(d+1+\frac{1}{\sqrt{5}}\right)(1-\varphi)^{d+1}}{\sqrt{5}(d+1)(\varphi^{d+1}-(1-\varphi)^{d+1})}. \tag{3.13}$$

Во фрустрационном поле $H = 4$ в случае антиферромагнитного обмена спинов решетки $J_d = -1, J = -1$ и разных параметрах декорирования получаем следующую фрустрирующую намагниченность (рисунок **??**б)

$$\lim_{T\to 0} M = \frac{1}{\sqrt{5}}\left(\frac{1+d\sqrt{5}}{d+1}\right). \tag{3.14}$$

Заметим, что характер поведения намагниченности при антиферромагнитном обменном взаимодействии между спинами при нечетных и четных значениях d различен. При нечетных значениях d намагниченность вблизи фрустрирующего поля, равного двум, разделяется на два промежуточных плато (рисунок **??**а), а при четных d происходит образование исключительно только одного промежуточного плато (рисунок **??**б).

Рассмотрим взаимодействие спинов иного типа, в частности, обмен между декорационными спинами (и между декорационными и основными спинами) J_d определим антиферромагнитным, а обмен между основными (нодальными) спинами J установим ферромагнитным. Графики температурных зависимостей энтропий в точках фрустраций для разных степеней декорирования продемонстрированы на рисунке **??**.

При антиферро-ферромагнитном обмене (рисунок **??**а) ($J_d = -1,\ J = 1$) во внешнем магнитном поле $H = 2$ при $T \to 0$ фрустрационная энтропия системы выражается следующим образом

$$\lim_{T\to 0} S = \frac{1}{d+1} \ln\left[\frac{1}{\sqrt{5}}\left(\varphi^{d+2} - (1-\varphi)^{d+2}\right)\right]. \tag{3.15}$$

Соответствующие значения фрустрационных намагниченностей во фрустрационном поле $H = 2$ записываются в виде

$$\lim_{T\to 0} M = \frac{\left(d+2-\frac{1}{\sqrt{5}}\right)\varphi^{d+2} + \left(d+2+\frac{1}{\sqrt{5}}\right)(1-\varphi)^{d+2}}{\sqrt{5}(d+1)(\varphi^{d+2} - (1-\varphi)^{d+2})}. \tag{3.16}$$

Вместе с тем, во фрустрационном поле $H = 4$ замечено, что при различных степенях декорирования решетки, значения фрустрирующих энтропий равны нулю, то есть в этом случае фрустраций не наблюдается, по этой причине, система имеет определенную магнитную конфигурацию в основном состоянии. Этот факт отмечен на рисунке **??**б в случае антиферро-ферромагнитного обмена, помимо этого, на рисунке **??**а проиллюстрированы намагниченности, описываемые выражениями (3.16) с фрустрационным полем $H = 2$. При четных степенях декорирования d у намагниченности наблюдается только одно промежуточное плато.

В случае ферро-антиферромагнитного обмена ($J_d = 1,\ J{=}{-1}$), также называемым еще квазиферромагнитным, получаем, что при различных d при сколь угодно малом магнитном поле намагниченность стремится к абсолютному упорядочению вдоль приложенного поля (рисунок **??**б).

При ферромагнитном обменном взаимодействии между спинами цепочки ($J_d = 1,\ J = 1$) при разных значениях параметра d наблюдается подобная ситуация, что и в случае квазиферромагнитного обменного взаимодействия.

Также стоит отметить некоторую особенность поведения намагниченности рассматриваемой декорированной решетки. Установлено, что промежуточные плато намагниченности всегда представляются рациональными дробями. В частности, в случае единожды декорированной цепочки с антиферромагнитным обменом ($J_d = -1$, $J = -1$) имеется промежуточное плато намагниченности со значением 1/2 (рисунок **??**а), что свидетельствует, что половина спинов развернулось вдоль магнитного поля, в то время как в случае трижды декорированной цепочки плато намагниченностей располагаются на уровнях 1/4 и 3/4, и говорят о том, что сначала во фрустрационном поле, равном нулю, повернулась вдоль магнитного поля четверть всех спинов в цепочке, после чего во фрустрационном поле, равном двум, доля повернутых спинов составит три четверти и уже во фрустрационном поле, равном четырем, вдоль магнитного поля развернутся все спины решетки. Несложно определить, что при кратности декорирования, равном d, будем иметь плато намагниченности на уровнях $1/(d+1)$ и $d/(d+1)$. А при $d \to \infty$, замечаем, что промежуточные плато исчезают, а задача сводится к обычной (недекорированной) модели Изинга в магнитном поле с единственным фрустрационным полем равном двум.

Приступим к описанию термодинамических и магнитных свойств декорированной изинговской цепочки. Для этого построим трехмерные графики теплоемкости и намагниченности как функций температуры и магнитного поля.

Трехмерный график теплоемкости как функции температуры и магнитного поля для трижды декорированной цепочки в случае антиферромагнитного обмена ($J_d = -1$, $J = -1$) изображен на рисунке **??**. Значения магнитного поля, в точках где теплоемкость обращается в нуль (при $T \to 0$), соответствуют фрустрационным полям. Замечено, что имеется три фрустрационных поля, равные нулю (см. статью [A3]), двум и четырем. В данных фрустрационных полях намагниченность претерпевает скачок, в чем можно убедиться, глядя на рисунок **??**.

На рисунке **??** проиллюстрирован трехмерный график намагниченности как функции температуры и магнитного поля трижды декорированной цепочки в случае антиферромагнитного обмена ($J_d = -1$, $J = -1$). Заметно, что при увеличении температуры кривая намагниченности размывается и промежуточные плато пропадают.

Можно заметить качественное совпадение между теоретически рассчитанной намагниченностью, изображенной на рисунке **??** и полученной экспериментально и проиллюстрированной на рисунке **??**. В обоих случаях имеется ряд скачков намагниченности с низкотемпературными промежуточными плато. При увеличении температуры плато намагниченности также размываются [**rossat1982**].

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 потребуется четырехмерное пространство. Тем не менее, на рисунке **??** 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. **??**). Замечено, что при $d = 1$ в основном состоянии присутствуют три магнитные фазовые конфигурации, а именно, антиферромагнитная фаза C_2 с удвоением периода трансляции цепочки

$$C_2 = \begin{Bmatrix} \ldots\downarrow \ \uparrow \ \downarrow \ \uparrow\ldots \\ \ldots\uparrow \ \downarrow \ \uparrow \ \downarrow\ldots \end{Bmatrix}$$

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

$$C_1 = \Big\{\ldots\uparrow \ \uparrow \ \uparrow \ \uparrow\ldots\Big\}$$

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

$$C_4 = \Big\{\ldots\uparrow \ \uparrow \ \downarrow \ \uparrow\ldots\Big\}$$

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

В случае $d = 2$ в основном состоянии имеется четыре различных 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

$$C_3 = \begin{Bmatrix} \ldots\uparrow \ \uparrow \ \downarrow\ldots \\ \ldots\uparrow \ \downarrow \ \uparrow\ldots \end{Bmatrix}$$

с энергией $E_з = -J/3 + J_d/3 - H/3$ и фаза C_6 с ушестерением периода трансляции

$$C_6 = \begin{Bmatrix} \ldots\uparrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \uparrow\ldots \\ \ldots\downarrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow\ldots \end{Bmatrix}$$

с энергией $E_6 = J/3 - J_d/3 - 2H/3$ (рисунок **??**б).

Также, из приведенных диаграмм 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, то есть, 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 рисунке **??**, 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 (2.26) и нуль-температурными намагниченностями (2.30).

Вместе с тем, наблюдалось соответствие линейной декорированной цепочки с квадратной декорированной решеткой в магнитном поле [**kassan-ogly2020**]. Необходимо подчеркнуть, что расчеты намагниченности в настоящем случае одномерной цепочки следовали из точного аналитического решения (2.13)-(2.19), на квадратной решетке это было возможно выполнить лишь трудоемкими численными расчетами, а именно, методом Монте-Карло в алгоритме Ванга – Ландау [**wang1**, **wang2**]. В качестве примера на рисунке **??** приведены намагниченности антиферромагнитной модели Изинга двухкратно-, четырехкратно- и шестикратно-декорированной квадратной решетки. Заметно, что на квадратной декорированной решетке появляются два фрустрационных поля при $H = 2$ и $H = 8$, в отличие от линейной декорированной цепочки при $H = 2$ и $H = 4$. Помимо этого, можно обнаружить, что возникшие промежуточные плато намагниченностей как в одномерной (плато расположены на уровнях $1/(d+1)$ и $d/(1+d)$), так и двумерной решетках (плато расположены на уровне $(d_x + d_y)/(1 + d_x + d_y)$) при $d \to \infty$ пропадают, а именно происходит скачок намагниченности из антиферромагнитного состояния прямо в ферромагнитное состояние во фрустрационном поле равном двум, следовательно, задача сводится к обычной (недекорированной) модели Изинга. Объясняется это тем, что с увеличением количества декорационных спинов ($d \to \infty$) влияние нодальных спинов становится все меньше, в равной степени как на одномерной цепочке, так и на квадратной решетке, что напрямую подтверждается рисунками **??**, **??** и **??**.

Глава 4. Обобщенная модель Изинга на квадратной решетке

Первой работой по обобщению модели Изинга на несколько трансляций решетки была статья Утиямы [**utiyama1951**] на примере шахматной решетки, в которой все черные квадраты замещаются специальными вставками (рисунок **??**). В случае, когда $n = 0$, что означает всего один квадрат в качестве вставки со взаимодействиями J, J_1 и J_0, можно получить квадратную необобщенную, треугольную и гексагональную решетки. Положив $n = 1$, получим решетку кагоме (в качестве вставки два квадрата со взаимодействиями J, J_0, J_1, J_2, J_3) и устремив J_1 к нулю (рисунок **??**). Таким образом, обобщение модели Изинга при больших n дает колоссальное количество новых еще неисследованных решеток.

Следующими работами по обобщению модели Изинга стали статьи Сиози и Найя [**syozi1960**] (см. также [**siozi_domb1972**]). В этих работах авторы приводят точное аналитическое решение обобщенной модели Изинга на квадратной решетке с двумя трансляциями в горизонтальном (J_2, J_4) и вертикальном (J_1, J_3) направлениях (рисунок **??**). Синими прямыми указаны связи между соседними спинами по горизонтальному направлению с обменным взаимодействием J_1, синими пунктирными линиями по горизонтальному направлению — J_3, красными прямыми линиями по вертикальному направлению — J_2, красными пунктирными линиями по вертикальному направлению — J_4. Обратим внимание, что помимо точного решения исследований каких-либо термодинамических и фрустрационных свойств не проводилось.

Главным преимуществом обобщенной решетки является то, что из структуры такого типа обобщения можно получать различные виды других решеток с помощью предельных переходов. Например, при $J_1 = J_3$ и $J_2 = J_4$ решетка сводится к обычной квадратной решетке, решение которой рассмотрено в Главе 1. Так же может быть осуществлен переход к гексагональной решетке. Для этого необходимо устремить к нулю одно из четырех обменных взаимодействий, например, $J_4 \to 0$. Получаемая таким образом решетка типа «кирпичная кладка» (brick-wall lattice), показанная на рисунке **??**, топологически эквивалентна гексагональной решетке. В случае же перехода к треугольной
решетке, одно из четырех обменных взаимодействий обобщенной модели устремляется в бесконечность, например, $J_1 \to \infty$, (см. рисунок **??**).

Очевидно, что данные варианты обобщения, введенные на квадратной решетке Утиямой, Сиози и Найя, могут быть применены и к другим планарным решеткам с известными точными решениями (треугольная [**wannier1950**], гексагональная [**houtapell1950**], кагоме [**kano_naya1953**]). В результате, всевозможными вариантами предельных переходов осуществляется получение множества самых разнообразных видов еще неизученных решеток.

В настоящей магистерской диссертации рассматривается модель Изинга на обобщенной квадратной решетке (рисунок **??**), с последующим изучением ее термодинамических и фрустрационных свойств.

4.1 Точное решение обобщенной модели Изинга на квадратной решетке

Получим точное аналитическое решение обобщенной модели Изинга на квадратной решетке комбинаторным методом Вдовиченко–Фейнмана.

Статсумму приведенной решетки можно представить следующим образом

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left[K_1 \sum_{\substack{i=1,3,\ldots\\ j=2,4,\ldots}} \sigma_i\sigma_j + K_2 \sum_{\substack{i=2,4,\ldots\\ k=3,5,\ldots}} \sigma_i\sigma_k + \right.$$
$$\left. + K_3 \sum_{\substack{i=2,4,\ldots\\ j=3,5,\ldots}} \sigma_i\sigma_j + K_4 \sum_{\substack{i=1,3,\ldots\\ k=2,4,\ldots}} \sigma_i\sigma_k \right], \quad (4.1)$$

где первая и третья суммы идут по половинам спинов в горизонтальном направлении, а вторая и четвертая суммы идут по половинам спинов в вертикальном направлении, так что

$$K_1 = \frac{J_1}{T}; \qquad K_2 = \frac{J_2}{T}; \qquad K_3 = \frac{J_3}{T}; \qquad K_4 = \frac{J_4}{T}.$$

Перепишем статсумму в виде

$$Z_N = (\operatorname{ch} K_1 \operatorname{ch} K_2 \operatorname{ch} K_3 \operatorname{ch} K_4)^N S,$$
$$S = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\substack{i=1,3,\ldots\\ j=2,4,\ldots}} (1 + v\sigma_i\sigma_j) \prod_{\substack{i=2,4,\ldots\\ k=3,5,\ldots}} (1 + u\sigma_i\sigma_k) \times$$
$$\times \prod_{\substack{i=2,4,\ldots\\ j=3,5,\ldots}} (1 + w\sigma_i\sigma_j) \prod_{\substack{i=1,3,\ldots\\ k=2,4,\ldots}} (1 + t\sigma_i\sigma_k). \quad (4.2)$$

Здесь $v = \operatorname{th} K_1$, $u = \operatorname{th} K_2$, $w = \operatorname{th} K_3$, $t = \operatorname{th} K_4$, а $N = L^2$ — число спинов в решетке. Величина S является полиномом от v, u, w и t, в котором коэффициент g_{nmlk} при $v^n u^m w^l t^k$ равен количеству способов построения замкнутых многоугольников, при которых общее количество горизонтальных связей равно $n + l$, а общее количество вертикальных связей равно $m + k$.

В статье Вдовиченко [**vdovichenko1965**] показано, что для модели Изинга на обычной квадратной решетки величина g_{nm} может быть представлена в виде суммы по замкнутым циклам, причем каждый цикл берется с множителем $(-1)^s$, где s — количество самопересечений замкнутого многоугольника. Наш случай ни сколько не отличается от обычного, за исключением того, что на обобщенной квадратной решетке встречаются два вида узлов (рисунок **??**) (см. статьи [**vaks1966**, **chikyu1987**]). У узла, помеченного крестом (рисунок **??**а), связь между соседним верхним узлом с обменным взаимодействием J_2, между соседним нижним узлом — J_4, между соседним левым узлом — J_3, между соседним левым узлом — J_1. У узла, обозначенного кружком (рисунок **??**б), наоборот: связь между соседним верхним узлом с обменным взаимодействием J_4, между соседним нижним узлом — J_2, между соседним левым узлом — J_1, между соседним левым узлом — J_3.

В связи с этим, в отличие от обычной квадратной решетки, имеем 8 различных направлений на обобщенной квадратной решетке (рисунок **??**): 4 направления из узла , обозначенного кружком (вверх, вниз, влево, вправо) и 4 направления из узла, обозначенного крестом (вверх, вниз, влево, вправо).

Так же как и в случае обычной квадратной решетки, введем матрицу коэффициентов Λ, рекурсивные уравнения можно записать в виде

$$W_{r+1}(i, j, \mu) = \sum_{i', j', \mu'} \Lambda(ij\mu \mid i'j'\mu') W_r(i', j', \mu'), \tag{4.3}$$

Поскольку существует восемь возможных направлений для движения по решетке, Λ представляет собой матрицу 8×8 с индексами μ' и μ, графическая интерпретация которой показана на рисунке **??**.

Однако, стоит заметить, что оказывается матрица Λ имеет более простой вид, отличный от представленного на рисунке **??**. Так как у нас не существует направлений движения, при котором из узла, обозначенного кружком, мы бы попадали в такой же узел и, также, у нас не существует направлений движения, при котором из узла, обозначенного крестом, мы бы попадали в похожий узел, поэтому все эти матричные элементы будут равны нулю.

Принимая это во внимание, запишем окончательный вид матрицы коэффициентов Λ для обобщенной квадратной решетки в следующем виде

$$\Lambda(p,q,\mu \mid p,q,\mu^{'}) =$$
$$= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & v\varepsilon^{-p} & u\alpha^{-1}\varepsilon^{-q} & 0 & t\alpha\varepsilon^{q} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & v\alpha\varepsilon^{-p} & u\varepsilon^{-q} & w\alpha^{-1}\varepsilon^{p} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u\alpha\varepsilon^{-q} & w\varepsilon^{p} & t\alpha^{-1}\varepsilon^{q} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & v\alpha^{-1}\varepsilon^{-p} & 0 & w\alpha\varepsilon^{p} & t\varepsilon^{q} \\ w\varepsilon^{-p} & t\alpha^{-1}\varepsilon^{-q} & 0 & u\alpha\varepsilon^{q} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ w\alpha\varepsilon^{-p} & t\varepsilon^{-q} & v\alpha^{-1}\varepsilon^{p} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t\alpha\varepsilon^{-q} & v\varepsilon^{p} & u\alpha^{-1}\varepsilon^{q} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ w\alpha^{-1}\varepsilon^{-p} & 0 & v\alpha\varepsilon^{p} & u\varepsilon^{q} & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

где $\varepsilon = e^{2\pi i/L}$ и $\alpha = e^{i\pi/4}$.

Следуя алгоритму комбинаторного метода и производя несложные вычисления, имеем точное аналитическое решение обобщенной модели Изинга на квадратной решетке

$$\ln\frac{\lambda_g}{2} = \frac{1}{16\pi^2}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi}\ln\left[\frac{1}{2}\Big(\operatorname{ch}2K_1\operatorname{ch}2K_2\operatorname{ch}2K_3\operatorname{ch}2K_4+\right.$$
$$+\operatorname{sh}2K_1\operatorname{sh}2K_2\operatorname{sh}2K_3\operatorname{sh}2K_4+1-\operatorname{sh}2K_1\operatorname{sh}2K_3\cos(\omega_1+\omega_2)-$$
$$-\operatorname{sh}2K_2\operatorname{sh}2K_4\cos(\omega_1-\omega_2)-(\operatorname{sh}2K_1\operatorname{sh}2K_4+\operatorname{sh}2K_2\operatorname{sh}2K_3)\cos\omega_1-$$
$$\left.-(\operatorname{sh}2K_1\operatorname{sh}2K_2+\operatorname{sh}2K_3\operatorname{sh}2K_4)\cos\omega_2\Big)\right]d\omega_1 d\omega_2, \quad (4.5)$$

($K_1 = J_1/T,\ K_2 = J_2/T,\ K_3 = J_3/T,\ K_4 = J_4/T$).

После чего, термодинамические параметры системы, такие как свободная энергия, энтропия и теплоемкость, находятся без труда уже по известным формулам термодинамики (1.13), (1.15), (1.16) соответственно.

4.2 Термодинамические и фрустрационные особенности обобщенной модели Изинга на квадратной решетке

Рассмотрим случай, при котором три взаимодействия в решетке являются ферромагнитными, а четвертое — антиферромагнитное (например, $J_1 = 1$,

$J_2 = 1,\ J_3 = 1,\ J_4 = -1$). Аналогичные результаты можно получить при трех антиферромагнитных взаимодействиях и одном ферромагнитном (например, $J_1 = -1,\ J_2 = -1,\ J_3 = -1,\ J_4 = 1$).

При таком выборе обменных взаимодействий энтропия оказывается не равной нулю, а равна некоторому значению — состояние фрустрировано. Значение нуль-температурной энтропии было найдено и оно выражается в виде частного двух математических констант

$$S_{T\to 0} = \frac{G}{\pi} = 0.29156\ldots, \tag{4.6}$$

где G — постоянная Каталана, важнейшая константа в теории чисел и в комбинаторике.

Температурная зависимость энтропии при $J_1 = 1,\ J_2 = 1,\ J_3 = 1,\ J_4 = -1$ приведена на рисунке **??** пунктирной линией.

Начнем увеличивать (по модулю) значение антиферромагнитного взаимодействия J_4, оставляя другие взаимодействия без изменений. Температурные зависимости энтропий для некоторых значений обменных взаимодействий проиллюстрированы на рисунке **??**. При этом видно, что все приведенные температурные зависимости энтропий имеют одно общее значение при $T \to 0$. Можно заметить, что при увеличении значения антиферромагнитного взаимодействия J_4 график энтропии становится все более и более пологим.

Установлено, что нуль-температурное значение для энтропий выражается в виде

$$S_{T\to 0} = \frac{3}{4\pi}\,\mathrm{Cl}_2\left(\frac{2\pi}{3}\right) = 0.16153\ldots, \tag{4.7}$$

где $\mathrm{Cl}_2(\varphi)$ — функция Клаузена. Функция Клаузена — трансцендентная специальная функция одной переменной, которая связана с мнимой частью дилогарифма $\mathrm{Li}_2(z)$

$$\mathrm{Cl}_2(\varphi) = \mathrm{Im}(\mathrm{Li}_2(e^{i\varphi})) = \mathrm{Im}(\mathrm{Li}_2(i)).$$

Кроме того, функция Клаузена может быть записана через различные интегральные представления, которые можно найти в математическом справочниках и статьях (например, [**abramowitz_stegun1972**, **wood1968**]).

Интересно то, что постоянную Каталана так же можно выразить через функцию Клаузена [**wood1968**]

$$G = \mathrm{Cl}_2\left(\frac{\pi}{2}\right),$$

поэтому фрустрационное значение энтропии в выражении (4.6) может быть переписано в виде

$$\frac{G}{\pi} = \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Cl}_2\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0.29156\ldots \tag{4.8}$$

Поведение теплоемкости при $J_1 = 1$, $J_2 = 1$, $J_3 = 1$, $J_4 = -1$ показано на рисунке **??** пунктирной линией. Для остальных температурных зависимостей теплоемкостей их поведение можно объяснить следующим образом. При увеличении значения J_4 (по модулю) пик теплоемкости, смещаясь вправо, увеличивается при $J_1 = 1$, $J_2 = 1$, $J_3 = 1$, $J_4 = -2$, после чего пик начинает растягиваться и происходит формирование малого дополнительного пика уже при $J_1 = 1$, $J_2 = 1$, $J_3 = 1$, $J_4 = -5$.

Дальнейшее рассмотрение этого случая показывает, что при увеличении (по модулю) антиферромагнитного взаимодействия J_4, сохраняя без изменения J_1, J_2 и J_3, значение у всех нуль-температурных энтропий остается одинаковым и равным (4.7).

Что касается теплоемкостей (рисунок **??**), то положение малого дополнительного пика совершенно не изменяется, что в принципе не характерно обыкновенным фрустрированным системам. Между тем, при увеличении J_4 большой широкий пик смещается в правую часть.

Теперь рассмотрим поведение системы при приближении к точке фрустрации с обменными взаимодействиями $J_1 = 1$, $J_2 = 1$, $J_3 = 1$, $J_4 = -1$. Начнем с параметров $J_1 = 1$, $J_2 = 1$, $J_3 = 1$, $J_4 = 0$. Известно, что при таком выборе взаимодействий реализуется случай гексагональной решетки. Энтропия и теплоемкость гексагональной решетки изображены фиолетовой кривой на рисунках **??** и **??** соответственно. Будем уменьшать параметр J_4 от 0 до -0.7. Глядя на рисунки **??** и **??**, можно сделать сразу несколько выводов. Во-первых, зависимости теплоемкостей изображены в виде Λ - образных пиков. Это значит, что в точках, где теплоемкость испытывает скачок, имеет место фазовый переход. Следовательно, в этих точках не наблюдается бесконечного числа конфигураций с одинаковой энергией, иначе говоря, фрустрации отсутствуют. Во-вторых, при приближении к точке фрустрации $J_1 = 1$, $J_2 = 1$, $J_3 = 1$, $J_4 = -1$ зависимости теплоемкостей, смещаясь влево по температуре, испытывают укручение левой части графика.

При увеличении взаимодействия J_4, начиная от 0, можно получить еще один частный случай. Подтверждением этого служат рисунки **??** и **??**. Видно, что при больших значениях J_4 графики как энтропий, так и теплоемкостей сходятся к некоторой точке перехода. Это ни что иное как температура перехода для треугольной решетки. Ведь при стремлении одного из взаимодействий в бесконечность, обобщенная квадратная решетка сводится к треугольной решетке. На рисунках **??** и **??** фиолетовыми кривыми указаны энтропия и теплоемкость гексагональной решетки, желтыми кривыми — для квадратной решетки, зелеными кривыми — для треугольной решетки.

4.3 Частные случаи обобщенной модели Изинга на квадратной решетке

4.3.1 Обычная квадратная решетка

Если положить, что $J_1 = J_3$ и $J_2 = J_4$, то обобщенная модель Изинга на квадратной решетке сводится к обычной модели Изинга на квадратной решетке. Решение обычной модели Изинга было подробно исследовано в Главе 1. Также, мы увидели, что квадратная решетка при любых параметрах обменного взаимодействия в отсутствие магнитного поля не является фрустрированной.

Кроме того, квадратная решетка является самодуальной, то есть она дуальна сама себе (рисунок **??**). Температура перехода — $T_c^{square} = J \cdot 2.2692\ldots$.

4.3.2 Треугольная решетка

Переход от обобщенной квадратной решетки к треугольной осуществляется при стремлении одного взаимодействия к бесконечности. На рисунке **??** мы устремляли к бесконечности обменное взаимодействие J_1.

Точное решение для треугольной решетки можно получить комбинаторным методом Вдовиченко–Фейнмана. Матрица коэффициентов Λ треугольной решетки может быть записана в виде

$$\Lambda(p,q,\mu \mid p,q,\mu') =$$

$$= \begin{pmatrix} y\varepsilon^{-p} & x\alpha^{-1}\varepsilon^{-p-q} & z\alpha^{-2}\varepsilon^{-q} & 0 & x\alpha^{2}\varepsilon^{p+q} & z\alpha\varepsilon^{q} \\ y\alpha\varepsilon^{-p} & x\varepsilon^{-p-q} & z\alpha^{-1}\varepsilon^{-q} & y\alpha^{-2}\varepsilon^{p} & 0 & z\alpha^{2}\varepsilon^{q} \\ y\alpha^{2}\varepsilon^{-p} & x\alpha\varepsilon^{-p-q} & z\varepsilon^{-q} & y\alpha^{-1}\varepsilon^{p} & x\alpha^{-2}\varepsilon^{p+q} & 0 \\ 0 & x\alpha^{2}\varepsilon^{-p-q} & z\alpha\varepsilon^{-q} & y\varepsilon^{p} & x\alpha^{-1}\varepsilon^{p+q} & z\alpha^{-2}\varepsilon^{q} \\ y\alpha^{-2}\varepsilon^{-p} & 0 & z\alpha^{2}\varepsilon^{-q} & y\alpha\varepsilon^{p} & x\varepsilon^{p+q} & z\alpha^{-1}\varepsilon^{q} \\ y\alpha^{-1}\varepsilon^{-p} & x\alpha^{-2}\varepsilon^{-p-q} & 0 & y\alpha^{2}\varepsilon^{p} & x\alpha\varepsilon^{p+q} & z\varepsilon^{q} \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

где $x = \operatorname{th} K_1,\ y = \operatorname{th} K_2,\ z = \operatorname{th} K_3,\ \varepsilon = e^{2\pi i/L}$ и $\alpha = e^{i\pi/6}$.

Воспроизводя алгоритм комбинаторного метода Вдовиченко–Фейнмана, описанный в Главе 1, получаем точное решение модели Изинга на треугольной решетке [**wannier1950**]

$$\ln\frac{\lambda_t}{2} = \frac{1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi}\ln\Big[\operatorname{ch}2K_1\operatorname{ch}2K_2\operatorname{ch}2K_3 + \operatorname{sh}2K_1\operatorname{sh}2K_2\operatorname{sh}2K_3 -$$
$$- \operatorname{sh}2K_2\cos(\omega_1+\omega_2) - \operatorname{sh}2K_3\cos\omega_1 - \operatorname{sh}2K_1\cos\omega_2\Big]d\omega_1 d\omega_2, \quad (4.10)$$

$(K_1 = J_1/T,\ K_2 = J_2/T,\ K_3 = J_3/T)$.

Рассмотрим подлогарифмическое выражение при $J_1 = J_2 = J_3 = J$ и $\omega_1 = \omega_2 = 0$, тогда

$$\operatorname{ch}^3\left(\frac{2J}{T_c}\right) + \operatorname{sh}^3\left(\frac{2J}{T_c}\right) - 3\operatorname{sh}\left(\frac{2J}{T_c}\right) = 0. \quad (4.11)$$

Решая уравнение (4.11) относительно T_c, получим температуру перехода треугольной решетки

$$T_c^{triangle} = 4J/\ln 3; \qquad T_c^{triangle} = J\cdot 3.64096\ldots. \quad (4.12)$$

Как мы уже знаем, треугольная решетка допускает наличие фрустрационных состояний, а именно, при $J_1 = J_2 = J_3 = -1$. Однако, нуль-температурное значение энтропии, известное из статьи [**wannier1950**] и записанное в выражении (1.20), может быть переписано через функцию Клаузена как

$$S_{T\to 0} = \frac{1}{\pi}\operatorname{Cl}_2\left(\frac{\pi}{3}\right). \quad (4.13)$$

Дуальной к треугольной решетке является гексагональная решетка и наоборот (рисунок **??**).

4.3.3 Гексагональная решетка

Для получения гексагональной решетки из обобщенной квадратной решетки необходимо приравнять любое из четырех обменных взаимодействий нулю. Получим решетку типа «кирпичная кладка», которая в свою очередь топологически эквивалентна гексагональной решетке (рисунок **??**).

Точное решение для гексагональной решетки так же может быть получено комбинаторным методом Вдовиченко–Фейнмана. Матрица коэффициентов Λ для гексагональной решетки имеет следующий вид

$$\Lambda(p,q,\mu \mid p,q,\mu') = \\ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & x\alpha^{-1}\varepsilon^{-p} & 0 & z\alpha\varepsilon^{p+q} \\ 0 & 0 & 0 & x\alpha\varepsilon^{-p} & y\alpha^{-1}\varepsilon^{-q} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & y\alpha\varepsilon^{-q} & z\alpha^{-1}\varepsilon^{p+q} \\ y\alpha\varepsilon^{q} & z\alpha^{-1}\varepsilon^{-p-q} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & z\alpha\varepsilon^{-p-q} & x\alpha^{-1}\varepsilon^{p} & 0 & 0 & 0 \\ y\alpha^{-1}\varepsilon^{q} & 0 & x\alpha\varepsilon^{p} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.14)$$

где $x = \operatorname{th} K_1,\ y = \operatorname{th} K_2,\ z = \operatorname{th} K_3,\ \varepsilon = e^{2\pi i/L}$ и $\alpha = e^{i\pi/6}$.

Производя соответствующие расчеты, получаем точное аналитическое решение модели Изинга на гексагональной решетке [**houtapell1950**]

$$\ln\frac{\lambda_h}{2} = \frac{1}{16\pi^2}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi}\ln\left[\frac{1}{2}\Big(\operatorname{ch}2K_1\operatorname{ch}2K_2\operatorname{ch}2K_3 + 1 \\ - \operatorname{sh}2K_1\operatorname{sh}2K_3\cos(\omega_1-\omega_2) - \operatorname{sh}2K_1\operatorname{sh}2K_2\cos\omega_1 - \\ - \operatorname{sh}2K_2\operatorname{sh}2K_3\cos\omega_2\Big)\right]d\omega_1 d\omega_2, \quad (4.15)$$

$(K_1 = J_1/T,\ K_2 = J_2/T,\ K_3 = J_3/T)$.

Рассмотрим подлогарифмическое выражение при $J_1 = J_2 = J_3 = J$ и $\omega_1 = \omega_2 = 0$, тогда

$$\frac{1}{2}\left(\operatorname{ch}^3\left(\frac{2J}{T_c}\right) + 1 - 3\operatorname{sh}\left(\frac{2J}{T_c}\right)\right) = 0. \quad (4.16)$$

Решив уравнение (4.16), получим температуру перехода для гексагональной решетки

$$T_c^{hex} = \frac{2J}{\ln(2+\sqrt{3})}; \qquad T_c^{hex} = J \cdot 1.51865\ldots. \tag{4.17}$$

Гексагональная решетка, как и квадратная решетка, не является фрустрированной при любых параметрах обменных взаимодействий в отсутствие магнитного поля. Таким образом, это значит, что на гексагональной решетке можно расположить спины так, чтобы каждая пара ближайших соседей была антипараллельна.

4.3.4 Другие виды решеток

При равенстве двух обменных взаимодействий нулю, реализуется случай обобщенной модели Изинга на одномерной цепочке, который был подробно исследован в Главе 2.

Если все взаимодействия, кроме одного, оказываются равными нулю, то задача сводится к случаю решетки димеров, так же рассмотренных в Главе 2.

Глава 5. Математические сечения и последовательности в одномерной модели Изинга

Как уже отмечено, некоторые значения нуль-температурных энтропий и нуль-температурных намагниченностей выражаются через сечения, хорошо известные в теории 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, то эта величина может принимать значение только в промежутке $1 \leqslant \Omega \leqslant 2$. Откуда следует, что $S = \ln\Omega = \ln 1 = 0$ (при $T \to 0$), что в результате соответствует ситуациям, при которых система обладает лишь одной конфигурацией (фрустрации отсутствуют). Поэтому все остальные найденные значения статистического веса (при $T \to 0$), выраженные через φ, ρ, ψ, $\sqrt{2}$ и другие математические сечения, в том числе и новые (безымянные), приходящегося на один узел цепочки, помимо того, что они являются числами Перрона [**wu2010**]–[**boyd1985**], 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 фрустрированной системой, что впервые отмечено в работе [**zarubin2019**].

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

$$S_{\mathrm{fr}} = \lim_{N\to\infty} \ln\left[\frac{\widetilde{Z}_{N+1}}{\widetilde{Z}_N}\right], \tag{5.1}$$

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

Фрустрационную нуль-температурную намагниченность также можно найти как предел последовательности

$$M_{\mathrm{fr}} = \lim_{N\to\infty} \frac{M_\Sigma}{\widetilde{Z}_N}, \tag{5.2}$$

где M_Σ — общая (суммарная) намагниченность всех допустимых конфигураций в основном состоянии.

Произведя подсчет возможных конфигураций $\widetilde{Z}_N$ для конкретного числа узлов N для случая только ближайших соседей во внешнем магнитном поле, была определена последовательность

$$\widetilde{Z}_N^{\varphi} = 1, 3, 4, 7, 11, 18, 29, 47, 76, \ldots$$

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 [**sloane1973**]–[**hoggatt1969**], отношение $\widetilde{Z}_{N+1}^{\varphi}/\widetilde{Z}_N^{\varphi}$ стремится к золотому сечению φ, а, следовательно, $\ln(\widetilde{Z}_{N+1}^{\varphi}/\widetilde{Z}_N^{\varphi})$ 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 рекуррентным соотношением $a_n = a_{n-1} + a_{n-2}$, но с начальными условиями $a_0 = 0$ и $a_1 = 1$

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

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

В правильности полученных выше результатов можно убедиться, глядя на рисунок **??**. Видно, что последовательности $\ln(\widetilde{Z}_{N+1}^{\varphi}/\widetilde{Z}_{N}^{\varphi})$ и $M_{\Sigma}^{\varphi}/\widetilde{Z}_{N}^{\varphi}$ быстро сходятся к нуль-температурной энтропии равной $\ln\varphi$ и нуль-температурной намагниченности равной $1/(2\varphi - 1)$ соответственно.

Учитывая 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 $a_1 = a_2 = a_3 = 1$

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

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

$$\widetilde{Z}_{N}^{\xi} = 4, 0, 0, 3, 4, 0, 3, 7, 4, 3, 10, 11, 7, 13, \ldots$$

Взяв отношение первой последовательности ко второй при $N \to \infty$ 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* [**allouche1996**, **lin2021**] с рекуррентным уравнением $a_n = a_{n-1} + a_{n-3}$ и начальными значениями $a_0 = a_1 = a_2 = 1$

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

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

$$\widetilde{Z}_{N}^{\psi} = 3, 1, 1, 4, 5, 6, 10, 15, 21, \ldots$$

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

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 $a_0 = 0$, $a_1 = a_2 = a_3 = 1$

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

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

$$\widetilde{Z}_{N}^{\mu} = 4, 1, 1, 1, 5, 6, 7, 8, 13, \ldots$$

Обратим внимание на то, что последовательность $\widetilde{Z}_{N}^{\mu}$ также до настоящего момента не была исследована. При $N \to \infty$ 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 представлены через пределы последовательностей (также известных из математики [**sloane1973**, **sloane1995**], [**bicknell1975**]–[**adams1982**]) только с помощью формул (5.1) и (5.2) 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 теории чисел, известными уже на протяжении столетий.

Глава 6. Обобщенная модель Изинга на квадратной решетке при учете декорирования

Заключение

Основные результаты работы заключаются в следующем.

1. На основе анализа ...
2. Численные исследования показали, что ...
3. Математическое моделирование показало ...
4. Для выполнения поставленных задач был создан ...

И какая-нибудь заключающая фраза.

В настоящей диссертационной работе изложены основные результаты исследования термодинамических, магнитных и фрустрационных свойств обобщенной модели Изинга на низкоразмерных решетках с учетом различных взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями, разных знаков обменных взаимодействий, декорирования и внешнего магнитного поля.

Определены точки и поля фрустраций, установлены критерии существования фрустраций в рассмотренных системах. Впервые в мировой литературе получено точное аналитическое решение модели Изинга на декорированной решетке при наличии магнитного поля. Также, выведены точные выражения для намагниченностей и энтропий при нулевой температуре.

Цель работы состояла в рассмотрении обобщенной модели Изинга с произвольным количеством различных обменных взаимодействий как между ближайшими, так и между вторыми соседями с учетом декорирования и магнитного поля на одномерной цепочке, а также обобщенной модели Изинга с четырьмя различными обменными взаимодействиями между ближайшими соседями на квадратной решетке, с последующим изучением их термодинамических, магнитных и фрустрационных свойств.

Для выполнения поставленной цели были решены следующие задачи:

1. Получено точное аналитическое решение обобщенной модели Изинга при учете различных обменных взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями в магнитном поле методом трансфер-матрицы Крамерса-Ваннье. Введена обобщенная трансфер-матрица Крамерса–Ваннье.
2. Исследованы термодинамические, магнитные и фрустрационные свойства обобщенной модели Изинга на одномерной цепочке, в том числе при учете декорирования. Установлено важное правило исследования

фрустрированных систем, которое гласит, что получение истинного поведения системы может быть достигнуто только при комплексном исследовании, а исследование ограниченного числа наблюдаемых приводит к ошибочным результатам. Выяснено, что фрустрационные значения нуль-температурных энтропий и намагниченностей могут быть представлены как пределы некоторых последовательностей без привлечения формализма трансфер-матрицы.

3. Получено точное аналитическое решение обобщенной модели Изинга на квадратной решетке комбинаторным методом Вдовиченко-Фейнмана.
4. Исследованы термодинамические и фрустрационные свойства обобщенной модели Изинга на квадратной решетке. Исследование фрустрационных состояний при $J_1 = 1$, $J_2 = 1$, $J_3 = 1$, $J_4 = -1$ показало, что происходит возникновение дополнительного малого пика теплоемкости, который, впоследствии, никак не изменяется при бесконечном увеличении (по модулю) взаимодействия J_4. Значение нуль-температурной энтропии при $J_1 = 1$, $J_2 = 1$, $J_3 = 1$, $J_4 = -1$ принимает значение G/π, где G — постоянная Каталана, а при дальнейшем бесконечном увеличении (по модулю) взаимодействия J_4 значения нуль-температурных энтропий всегда равны $3/(4\pi)\,\mathrm{Cl}_2(2\pi/3)$, где $\mathrm{Cl}_2(\varphi)$ — функция Клаузена.

Несмотря на то, что была проделана значительная работа, еще многое остается неясным: в частности, не ясна причина возникновения и сохранения дополнительного малого пика теплоемкости при рассмотрении фрустрированных состояний обобщенной модели Изинга на квадратной решетке.

Ценность данной работы заключается в полученных точных решениях усовершенствованной, так называемой обобщенной, модели Изинга, анализ которых позволил установить совершенно новые фрустрационные особенности спиновых систем.

Дальнейшее развитие представленной работы направлено на получение точных решений на других обобщенных решетках (треугольная, гексагональная, кагоме и другие), а также в анализе термодинамических, магнитных и фрустрационных свойств этих моделей.

В заключение автор выражает благодарность и большую признательность научному руководителю доктору физико-математических наук Кассан-Оглы

Феликсу Александровичу за предоставленную тему настоящей диссертации и конструктивную помощь в ее решении.