



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

Аспирант:

Цуварев Егор Сергеевич

Научный руководитель:

Кассан-Оглы Феликс Александрович

д.ф.-м.н., г.н.с. лаборатории квантовой теории
конденсированного состояния ИФМ УрО РАН

Екатеринбург, 2022

Идея обобщения трансфер-матрицы

До обобщения

1D

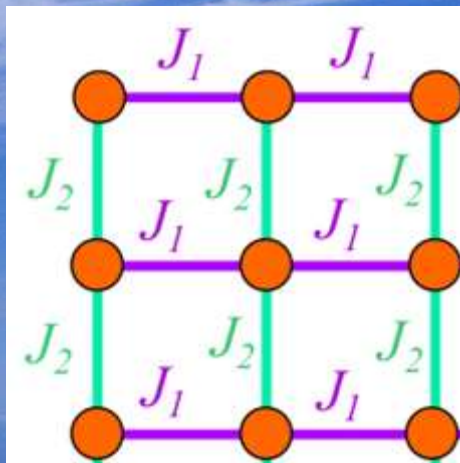


После обобщения

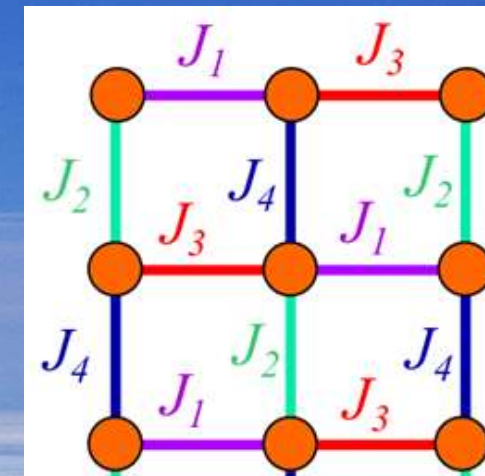


До обобщения

2D



После обобщения



Появилась возможность менять взаимодействия не только по величине, но и по знаку
→ получаем фрустрации !!! (из-за конкурирующих взаимодействий)

Классическая трансфер-матрица

$s_i \backslash s_{i+1}$	+	-
+	$V(+, +)$	$V(+, -)$
-	$V(-, +)$	$V(-, -)$

$$s_i = \pm 1, \\ s_{i+1} = \pm 1$$

$$Z_N = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}(s)} \quad \longrightarrow \quad Z_N = \lambda_{\max}^N$$

$$V(s_i, s_{i+1}) = \exp \left[\frac{J}{T} s_i s_{i+1} + \frac{H}{T} s_i \right],$$

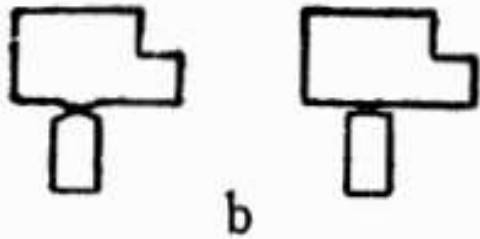
$$V = \begin{pmatrix} V(+, +) & V(+, -) \\ V(-, +) & V(-, -) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\frac{J+H}{T}} & e^{\frac{-J+H}{T}} \\ e^{\frac{-J-H}{T}} & e^{\frac{J-H}{T}} \end{pmatrix}$$

Термодинамические и магнитные величины выражаются исключительно через наибольшее собственное значение $\lambda_{\max}$ трансфер-матрицы!!!

Комбинаторный метод

$$g_r = \text{[diagram 1]} + \text{[diagram 2]} + \text{[diagram 3]} + \dots$$

a



$$g_r = \text{[diagram 1]} - \text{[diagram 2]} + \text{[diagram 3]} + \text{[diagram 4]} + \dots$$

c

	→	↑	←	↓
→	→→	↑→	↔	↓→
↑	→↑	↑↑	↑←	↑↓
←	↔	←↑	←←	←↓
↓	→↓	↑↓	↓←	↓↓

Статсумма сводится к подсчету всех суперпозиций замкнутых многоугольников (без общих сторон)!!!

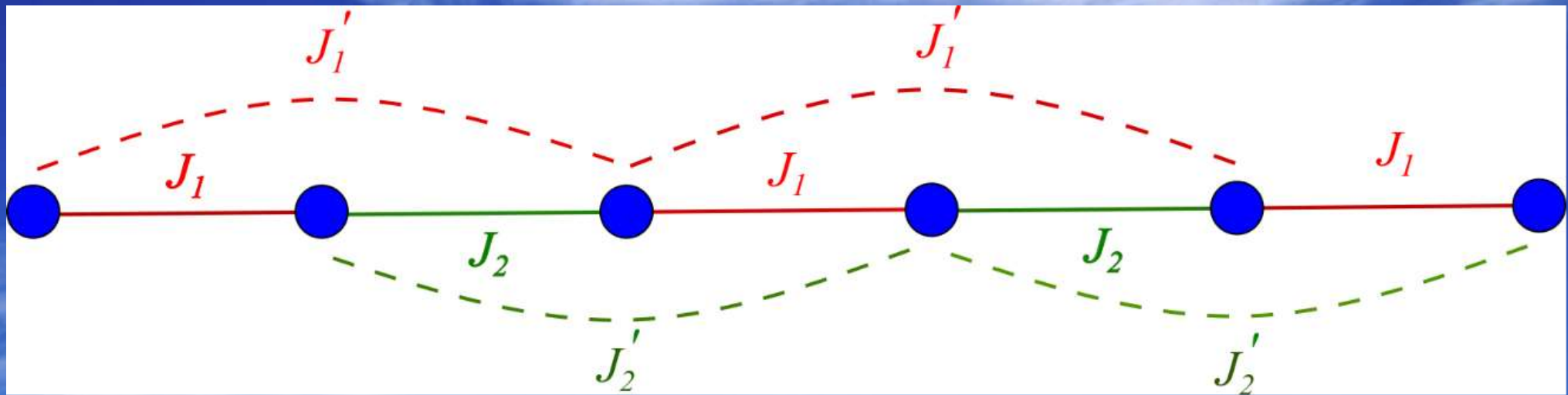
Обобщенная трансфер-матрица

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

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

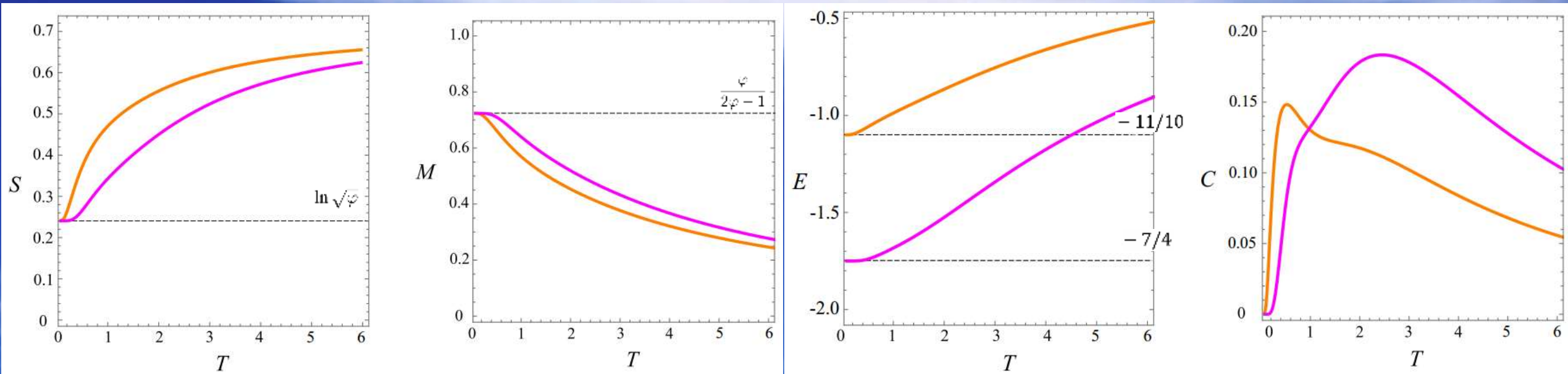
Получение точного решения в общем случае невозможно, однако возможно для некоторых частных случаев, к примеру, когда $n = 2$!

Точное решение обобщенной модели Изинга



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

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

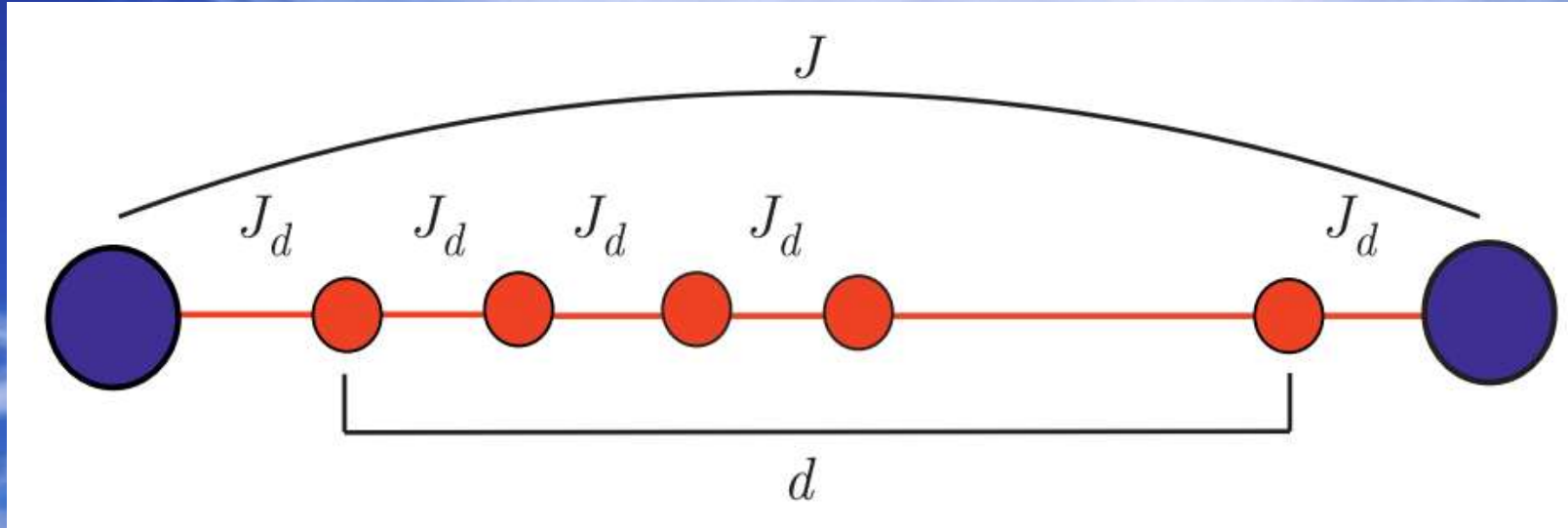


$$J_1 = 1.0, J'_1 = -2.0, J_2 = 1.0, J'_2 = -0.5, H = 2$$

$$J_1 = -0.2, J'_1 = -0.4, J_2 = -1.0, J'_2 = -0.2, H = 2$$

Получение истинного поведения системы может быть достигнуто только при комплексном исследовании, а исследование ограниченного числа наблюдаемых приводит к ошибочным результатам!!!

Декорированная цепочка

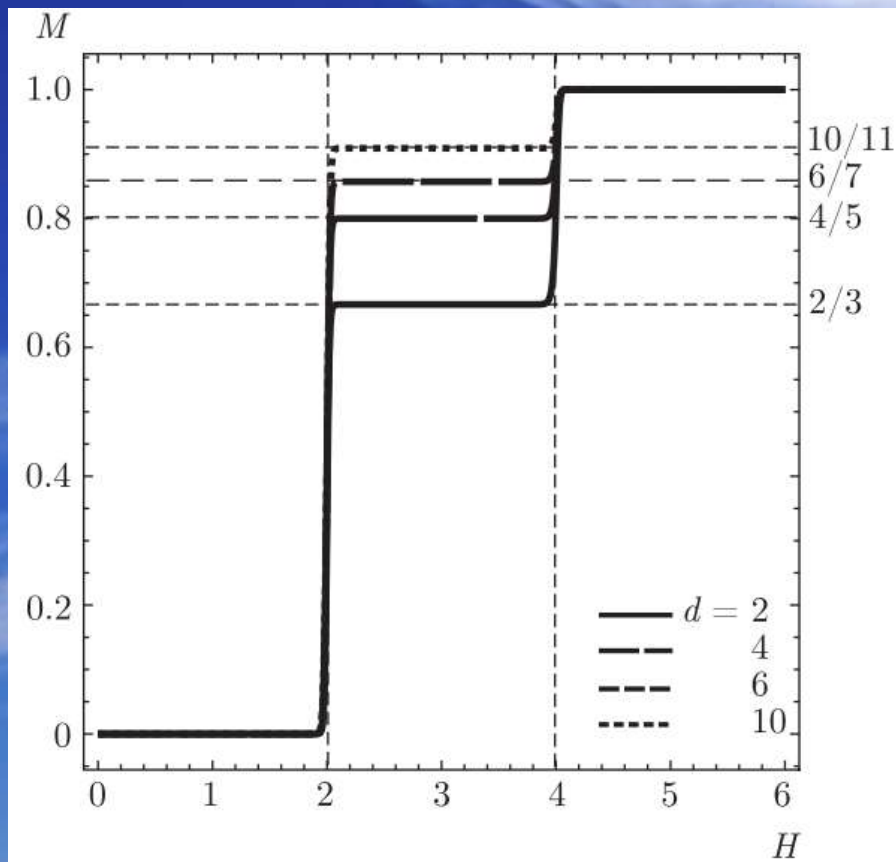


$$\lambda_{\max} = \frac{1}{2} \left(e^{\frac{J}{T}} (\lambda_1^{d+1} + \lambda_2^{d+1}) + e^{-\frac{J}{T}} (\lambda_1^{d+1} - \lambda_2^{d+1}) \varepsilon \right),$$

$$\lambda_1 = e^{\frac{J_d}{T}} \left(\operatorname{ch} \left(\frac{H}{T} \right) + \sqrt{\operatorname{sh}^2 \left(\frac{H}{T} \right) + e^{-\frac{4J_d}{T}}} \right), \quad \lambda_2 = e^{\frac{J_d}{T}} \left(\operatorname{ch} \left(\frac{H}{T} \right) - \sqrt{\operatorname{sh}^2 \left(\frac{H}{T} \right) + e^{-\frac{4J_d}{T}}} \right),$$

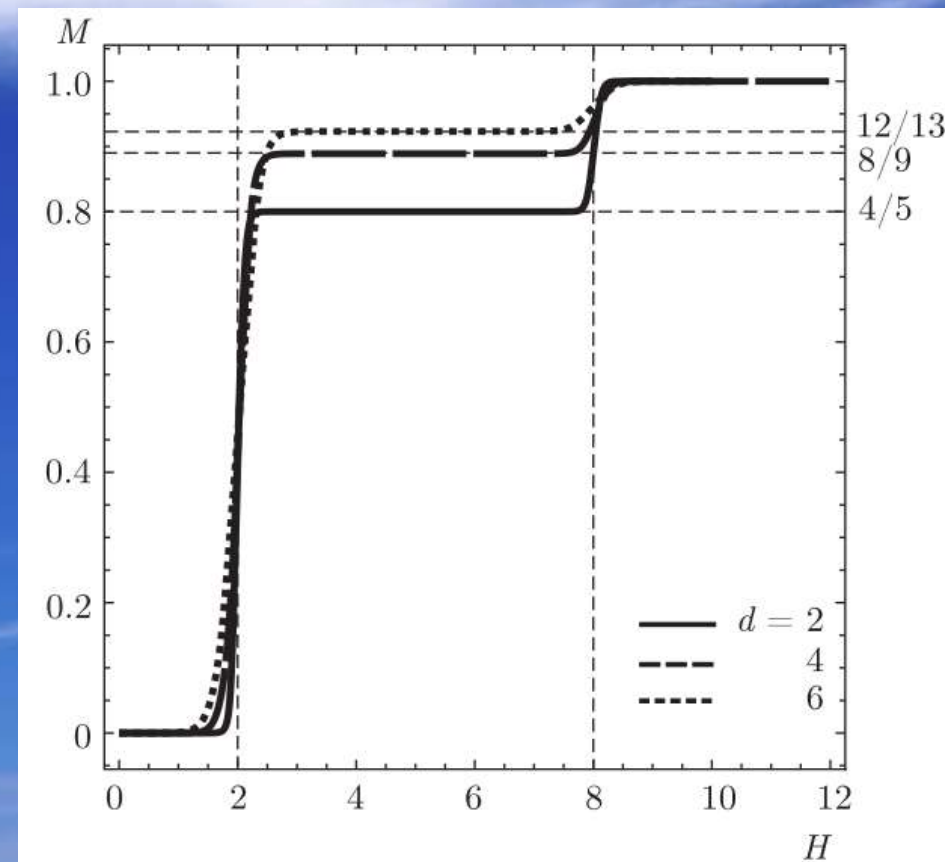
$$\varepsilon = \sqrt{1 + \frac{2e^{\frac{2J}{T}} \operatorname{sh} \left(\frac{2J}{T} \right) \operatorname{sh}^2 \left(\frac{H}{T} \right)}{\operatorname{sh}^2 \left(\frac{H}{T} \right) + e^{-\frac{4J_d}{T}}}}.$$

Намагниченность декорированной цепочки



$$J_d = -1, J = -1$$

$$T = 0.02$$



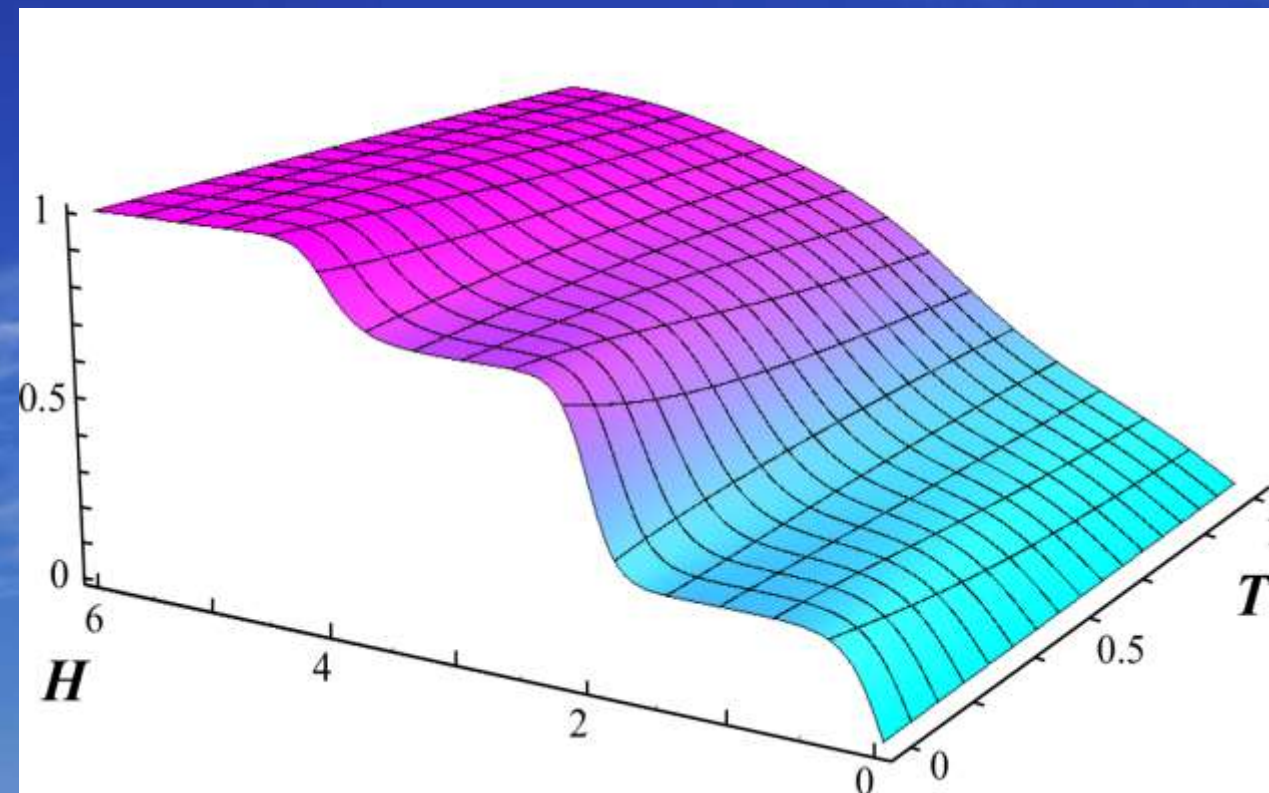
$$J_{dx} = -1, J_{dy} = -1, J_x = -1, J_y = -1$$

$$T = 0.005$$

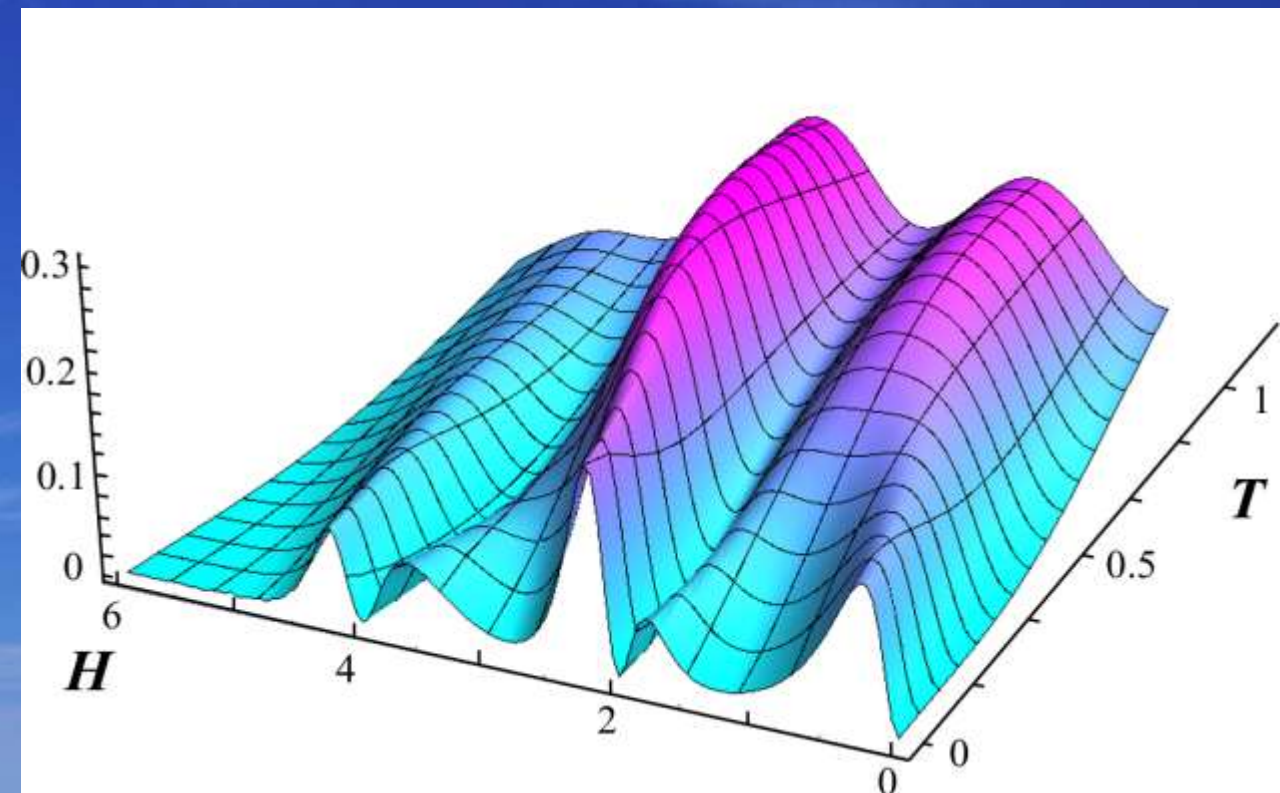
При $d \rightarrow \infty$ задача на декорированной решетке сводится к обычной (недекорированной) модели Изинга!!!

Особенности декорированной цепочки

Намагниченность

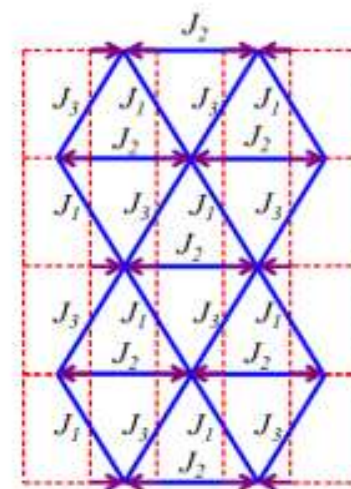
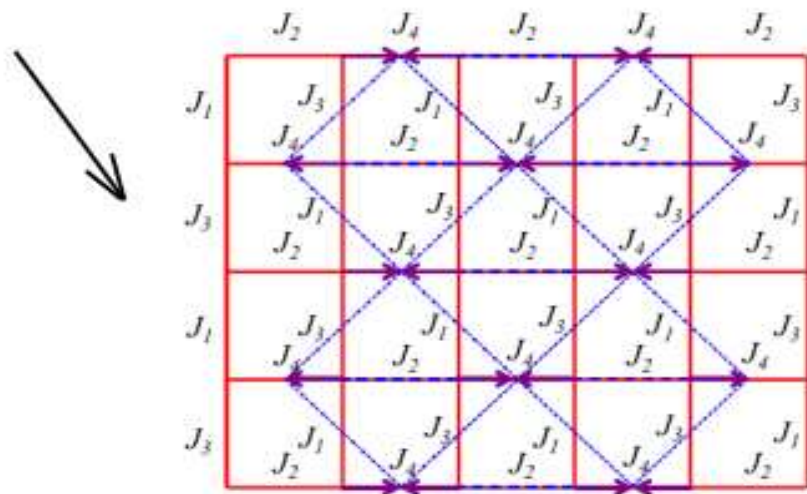
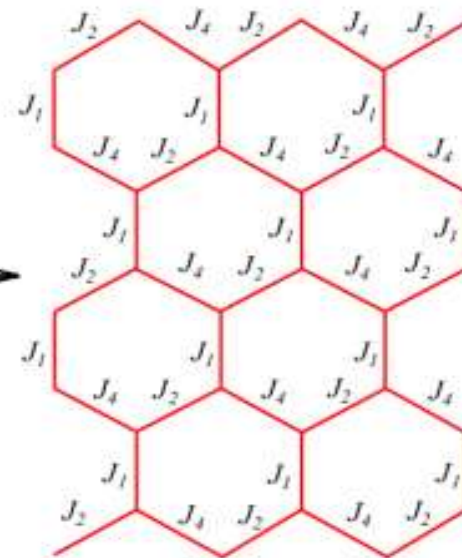
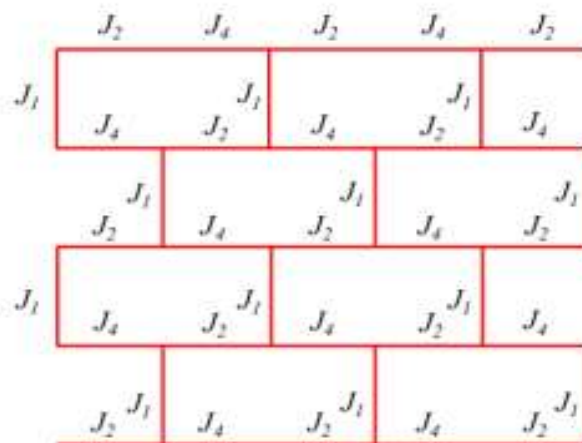
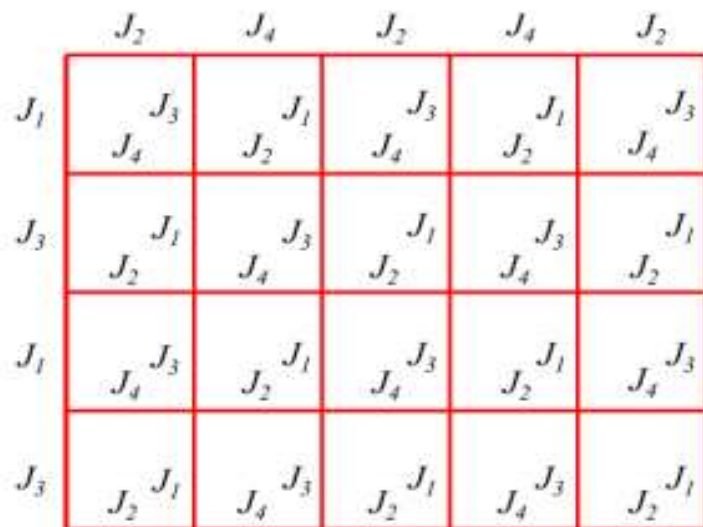


Теплоемкость



Многократное декорирование порождает множественные низкотемпературные плато намагниченности и расщепление теплоемкости!!!

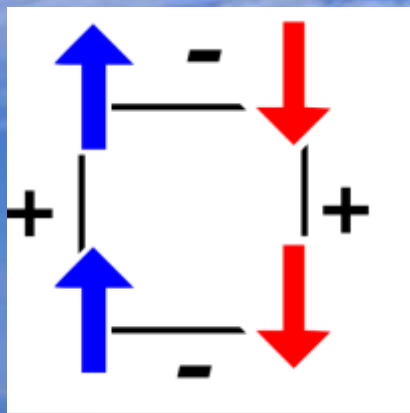
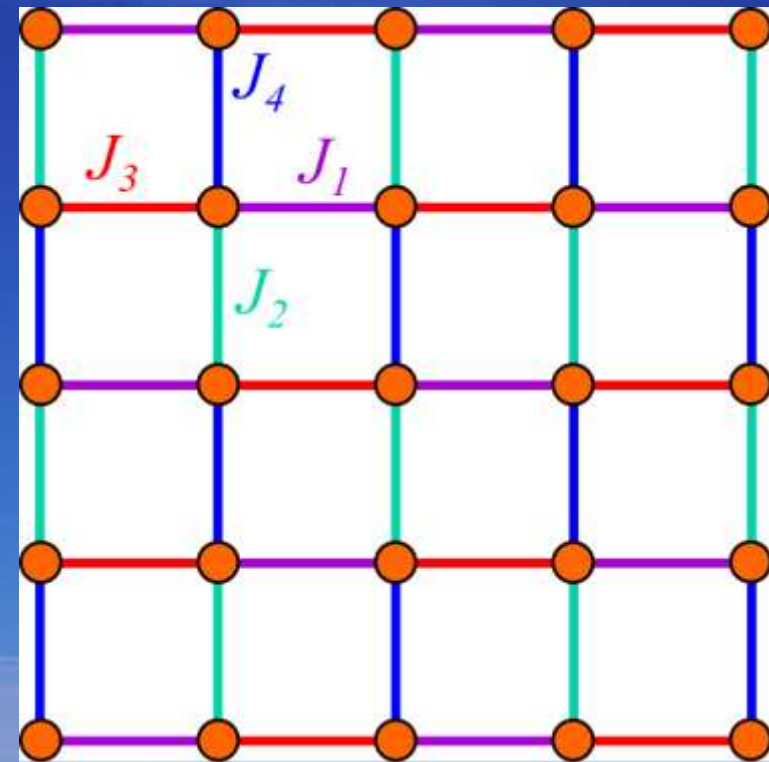
Обобщенная квадратная решетка



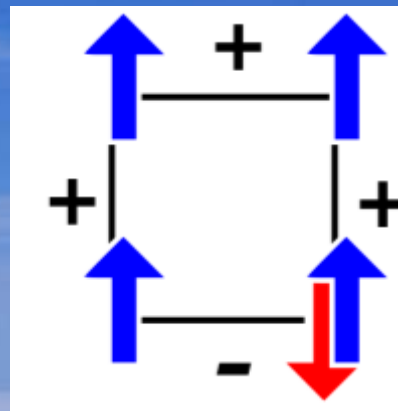
Точное решение обобщенной квадратной решетки

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

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



обычная квадратная решетка

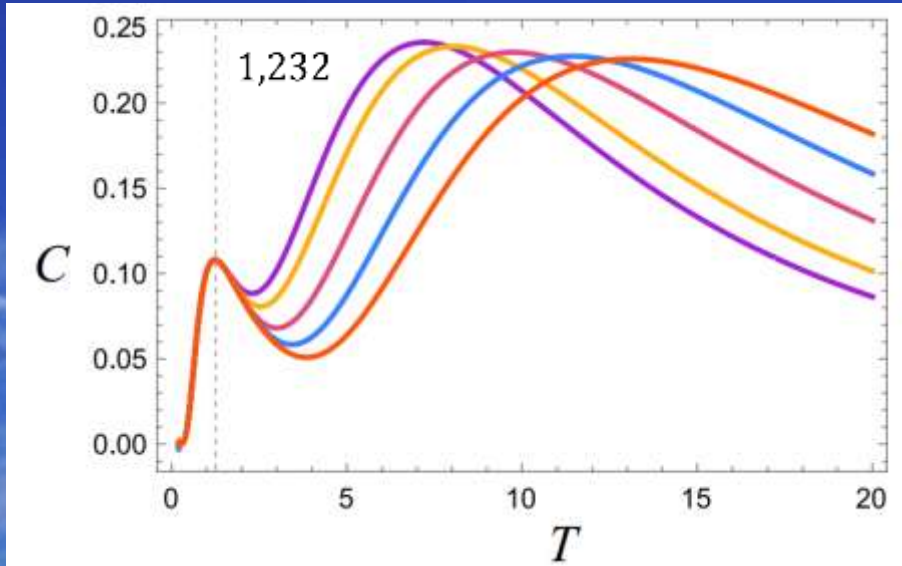


обобщенная квадратная решетка

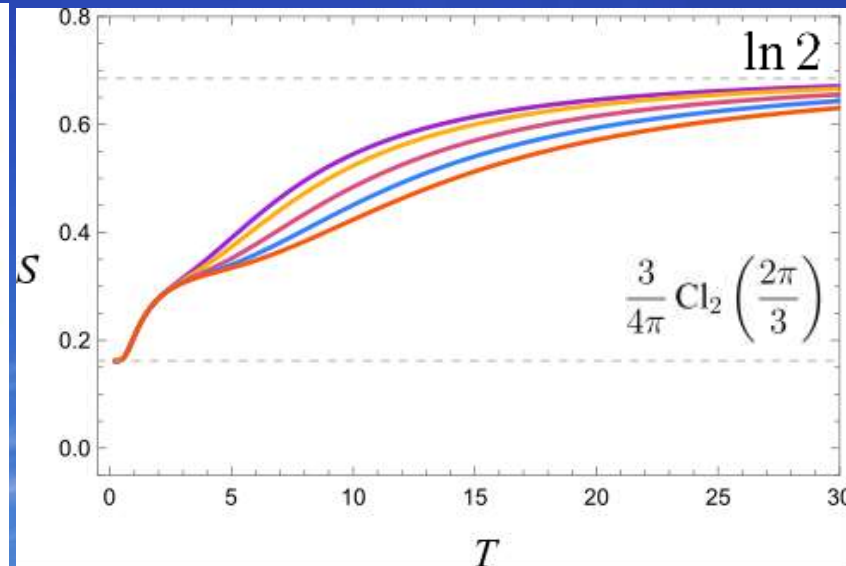
На обобщенной квадратной решетке наблюдаются фрустрации, в отличие от обычной квадратной решетки!!!

Особенности обобщенной квадратной решетки

Теплоемкость

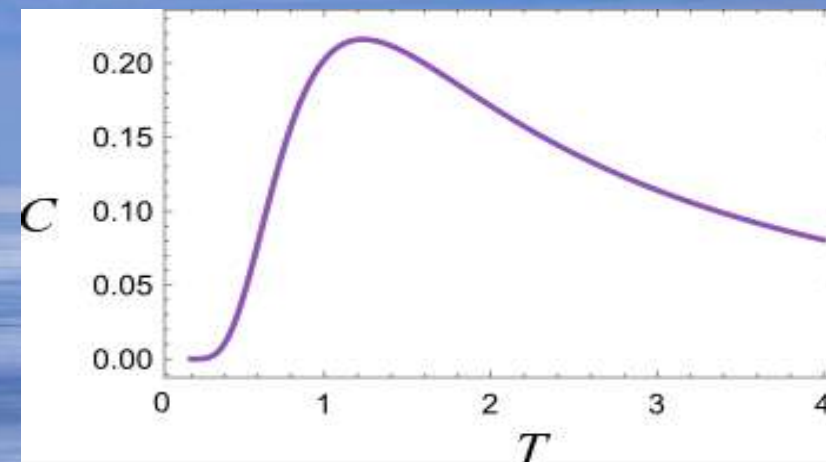


Энтропия



Возникает дополнительный малый пик теплоемкости, который не изменяется ни по положению, ни по высоте!

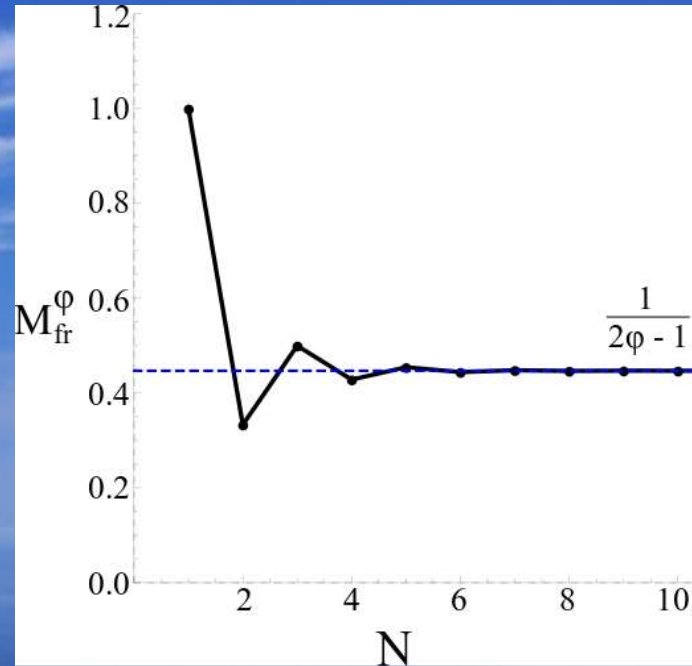
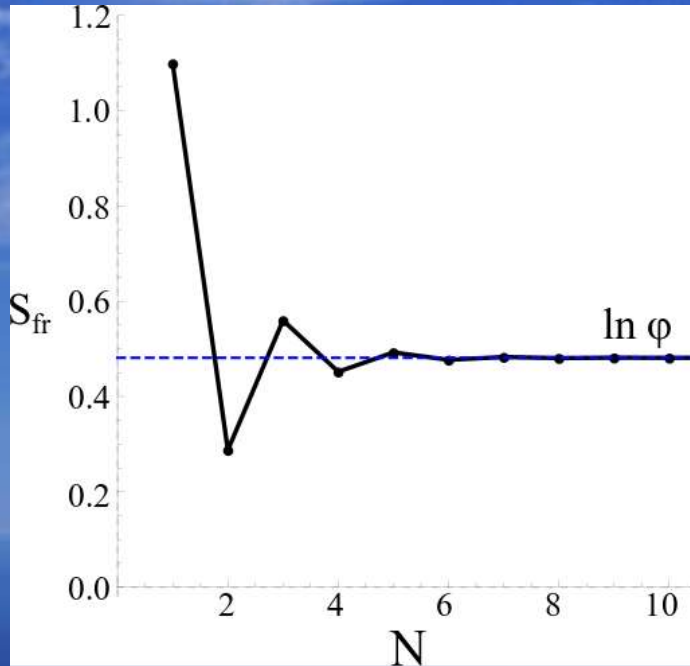
Обычно во фрустрированном состоянии наблюдается только ОДИН плавный пик теплоемкости!!!



Появилась возможность определять фрустрационные значения энтропий и намагниченностей простым подсчетом конфигураций в основном состоянии!!!

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

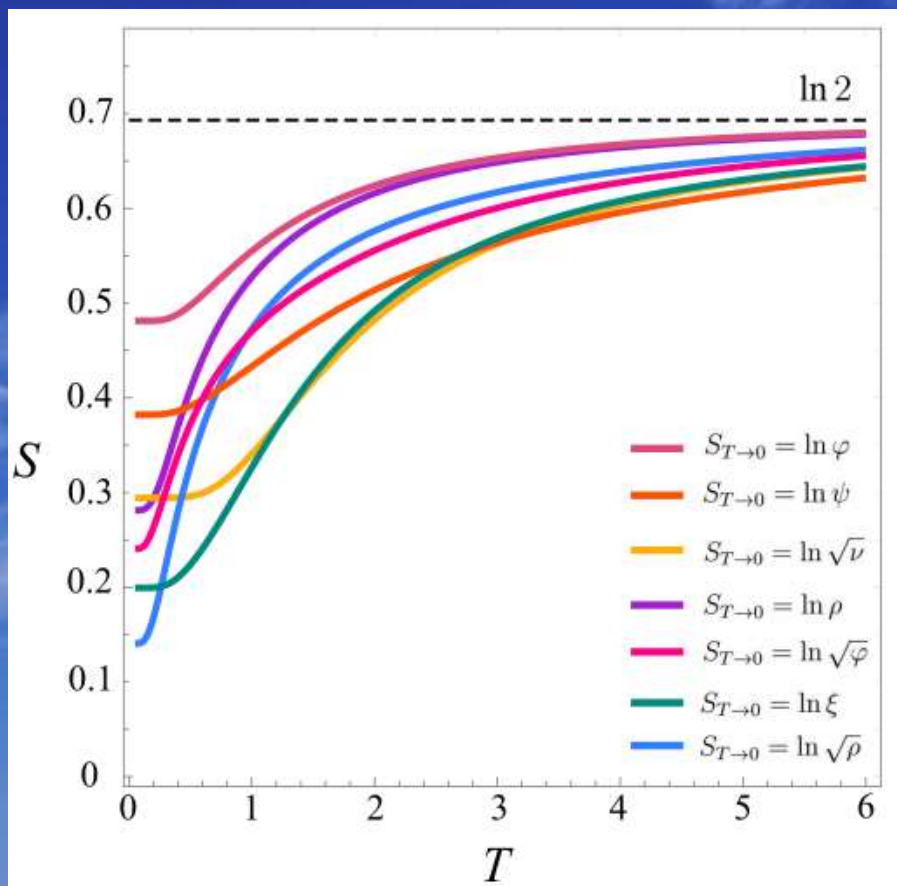
$$M_{\text{fr}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{M_{\Sigma}}{\tilde{Z}_N}$$



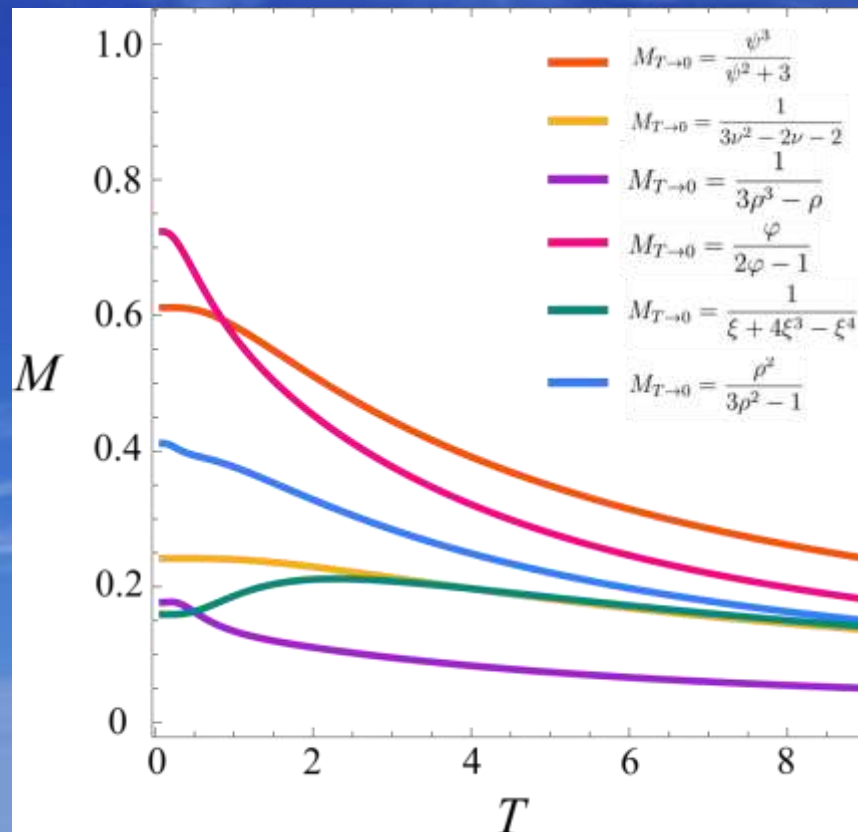
$\tilde{Z}_N$
 = 1, 3, 4, 7, 11, 18, 29, 47, 76, ...
 — числа Люка

M_{Σ}
 = 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, ...
 — числа Фибоначчи

Энтропия



Намагниченность

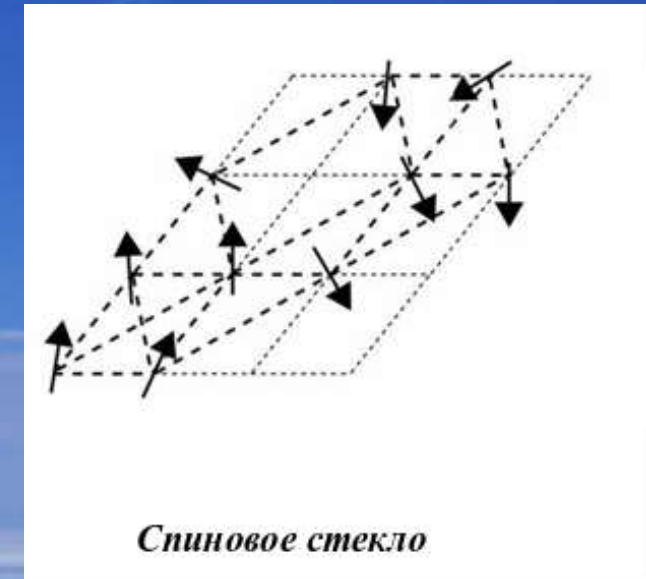
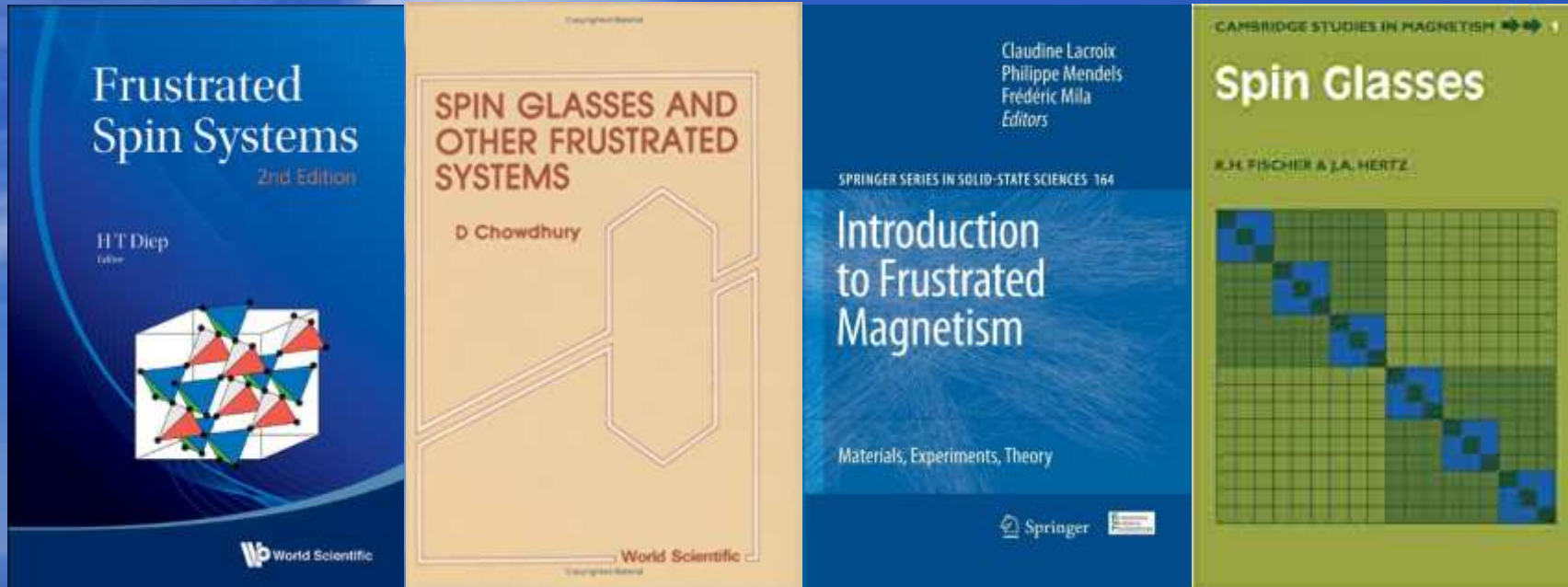


φ – золотое сечение,
 ψ – сверхзолотое сечение,
 ρ – пластическое число,
 ξ, ν – пока что безымянные математические сечения.

Установлена связь между фрустрационными свойствами модели Изинга и достижениями в теории чисел!!!

Явление фрустраций в физике магнетизма

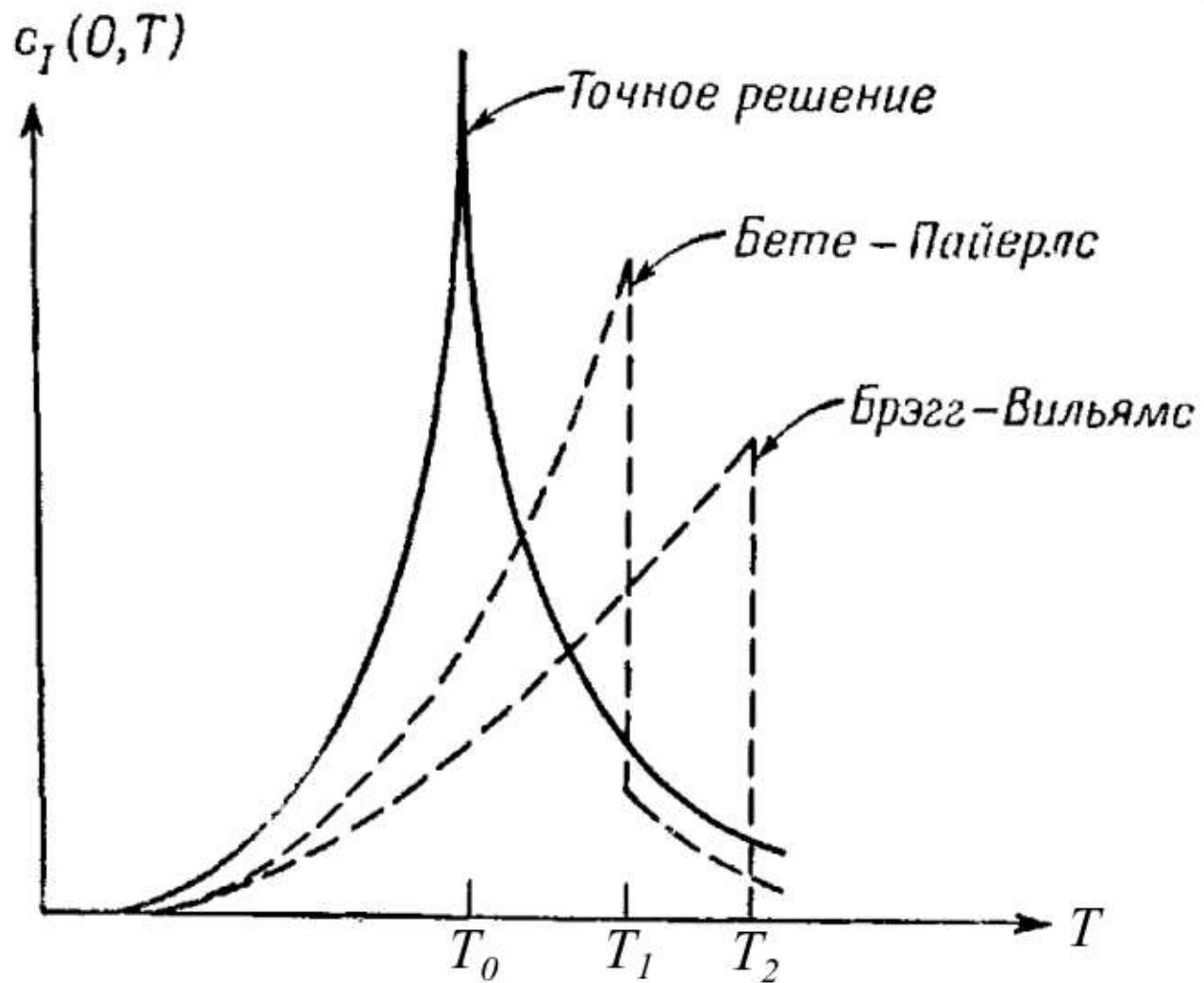
Рассмотрение обобщенной модели Изинга с различными обменами приводит к существованию множества фрустрационных состояний и фрустрационных эффектов, по сравнению с обычной моделью Изинга!!!



- H.T. Diep, *Frustrated Spin Systems* (2nd Edition), World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd (2013).
D. Chowdhury, *Spin Glasses and Other Frustrated Systems*, Princeton University Press, (1987).
C. Lacroix, P. Mendels, F. Mila, *Introduction to Frustrated Magnetism*, Springer Series in Solid-State Sciences (2011).
K. H. Fischer, J. A. Hertz, *Spin Glasses*, Nordisk Institut for Teoretisk Fysik, Copenhagen (1991).



СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!



Онзагер (1944)

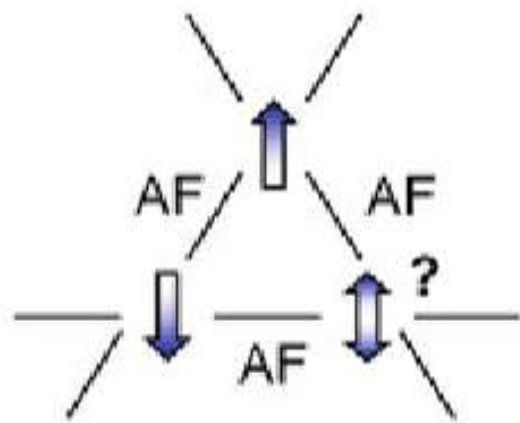
$$T_0 = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2,27$$

Бете-Пайерлс (1939)

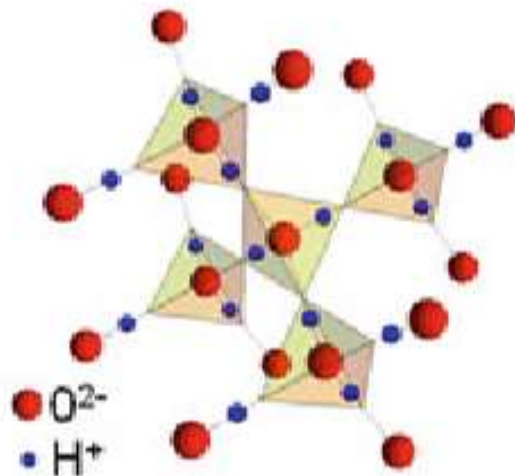
$$T_1 = \frac{2}{\ln 2} \approx 2,88$$

Брэгг-Вильямс
(теория среднего
поля) (1934)

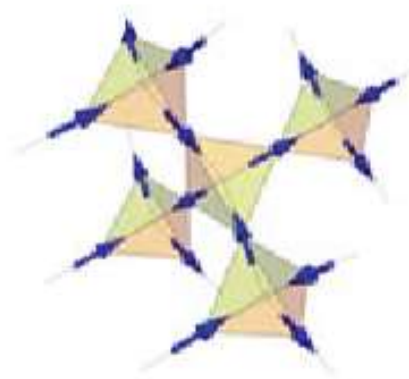
$$T_2 = \frac{2}{\ln(e^{1/2})} = 4$$



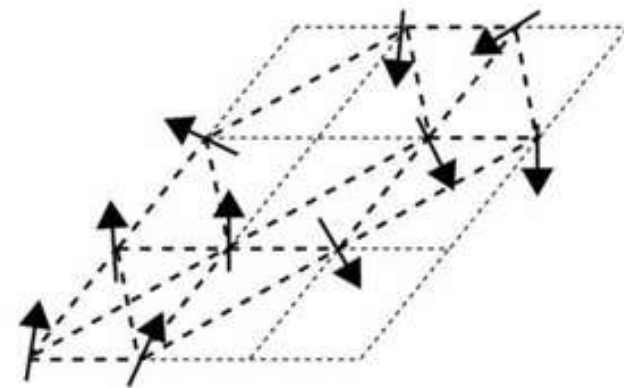
Геометрическая фрустрация



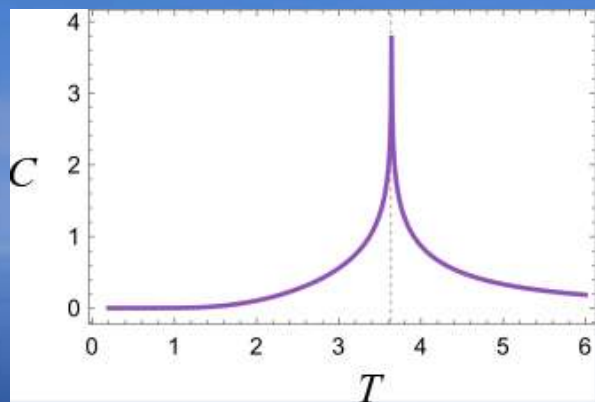
Водяной лед



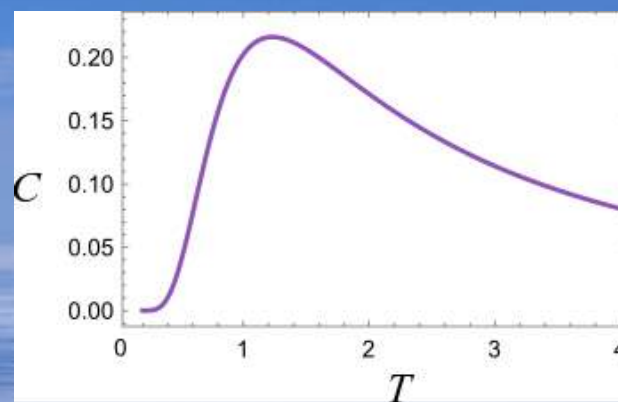
Спиновый лед



Спиновое стекло

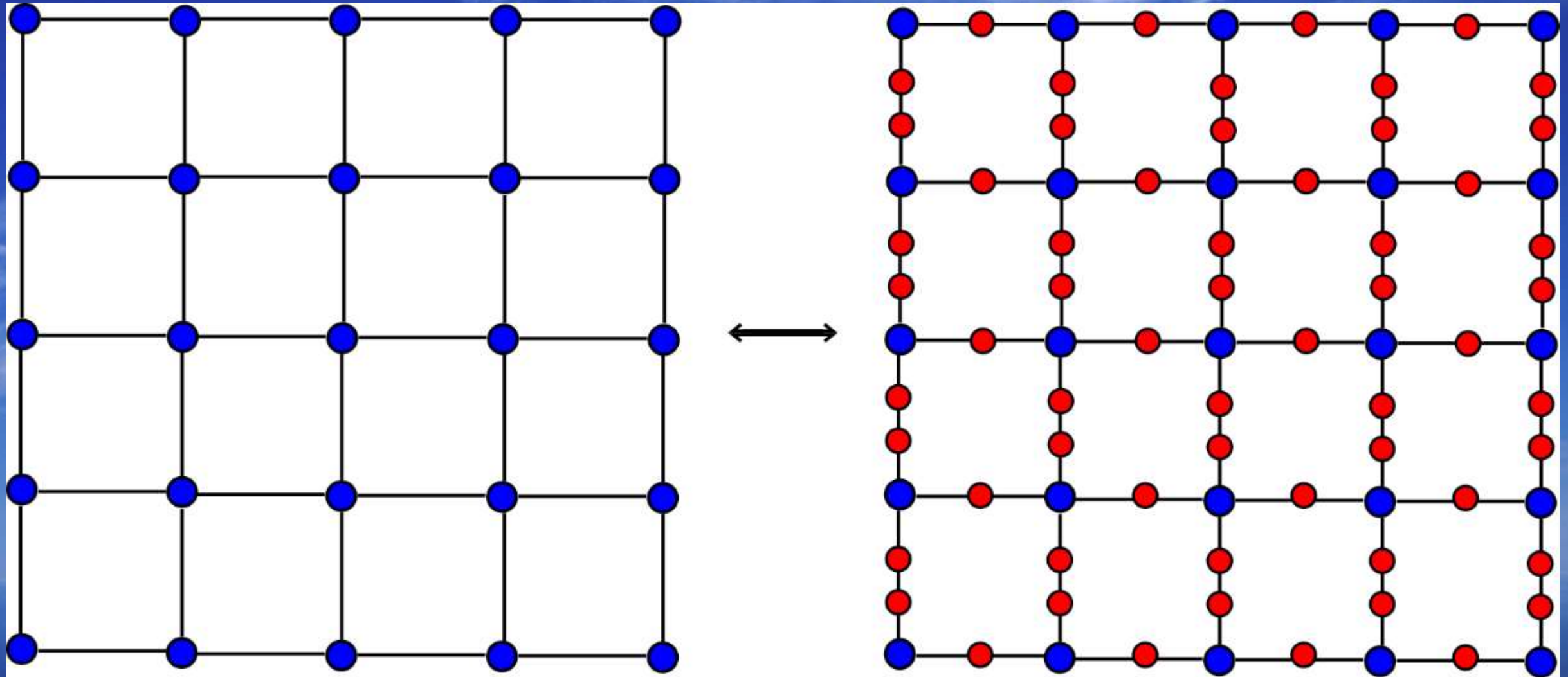


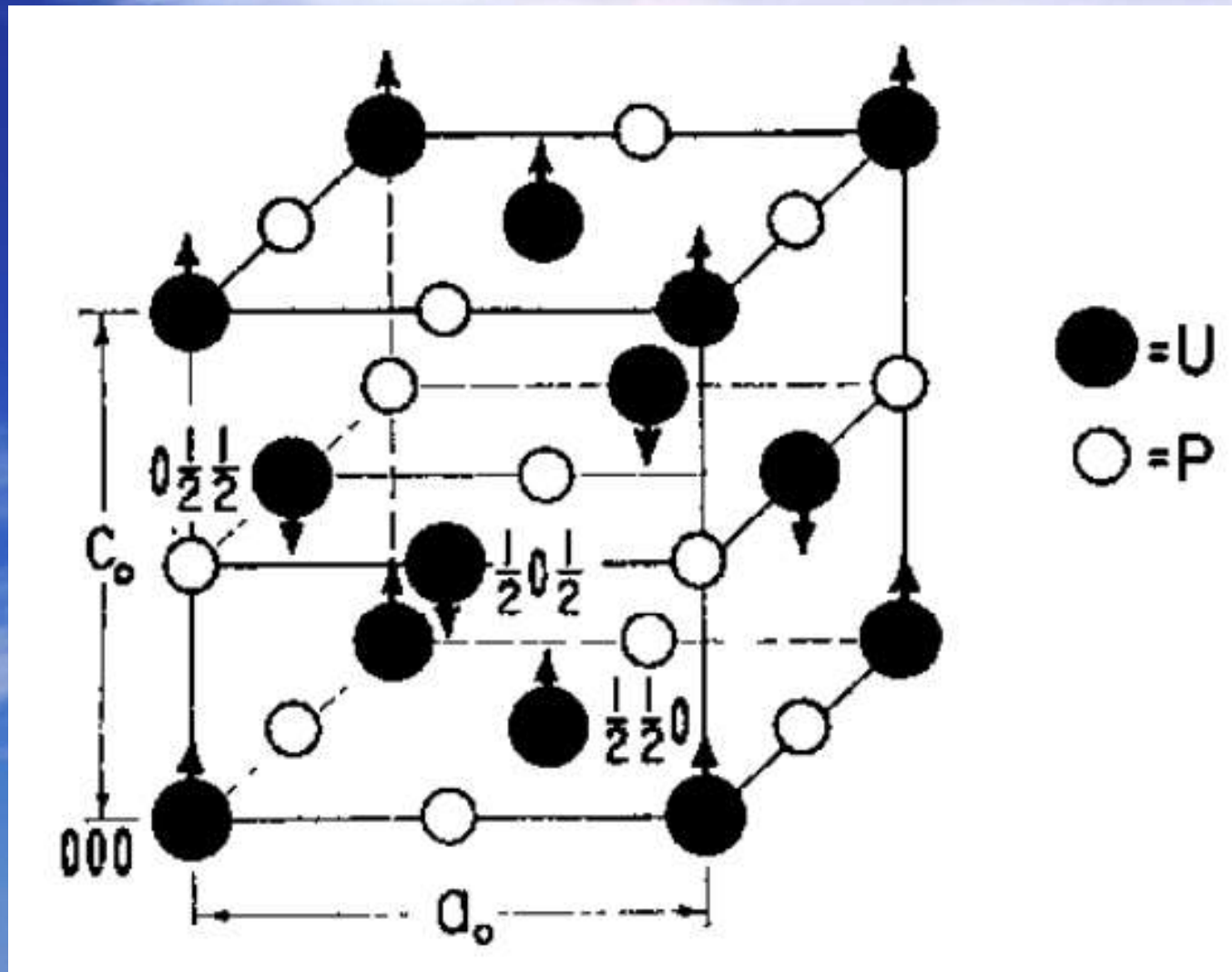
**Наличие фазового перехода –
система не фрустрирована**



**Отсутствие фазового перехода –
система фрустрирована**

Декорационное преобразование

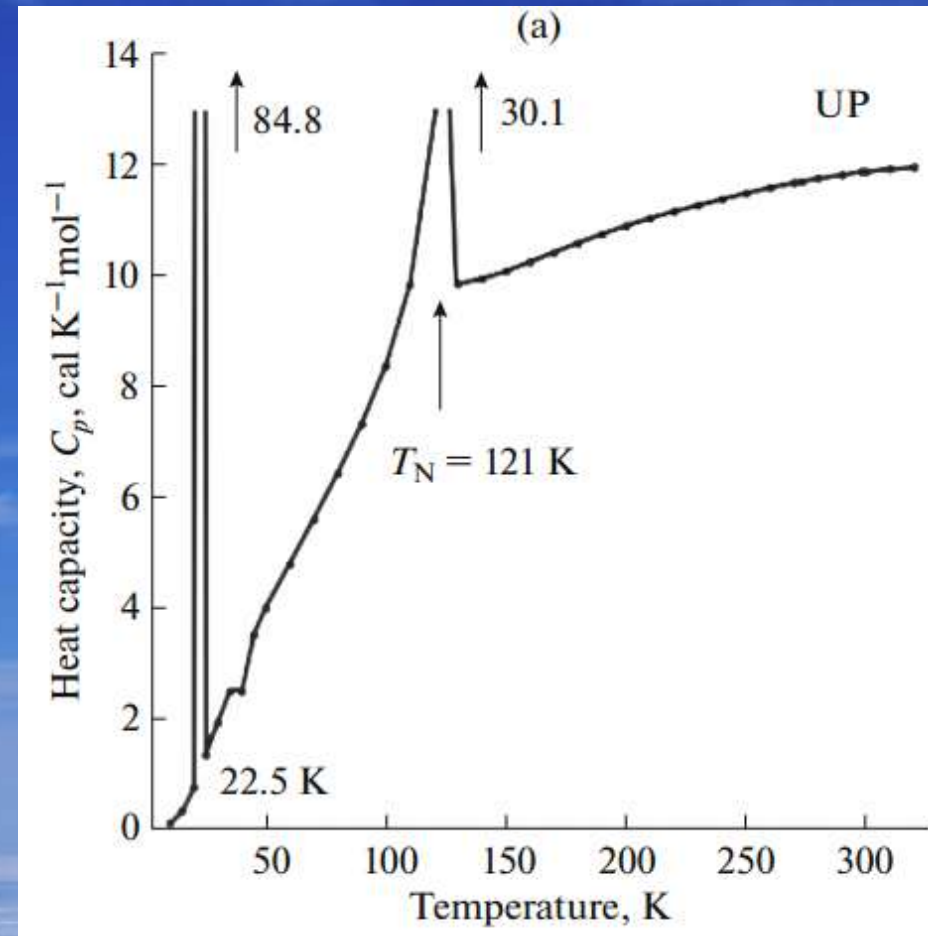
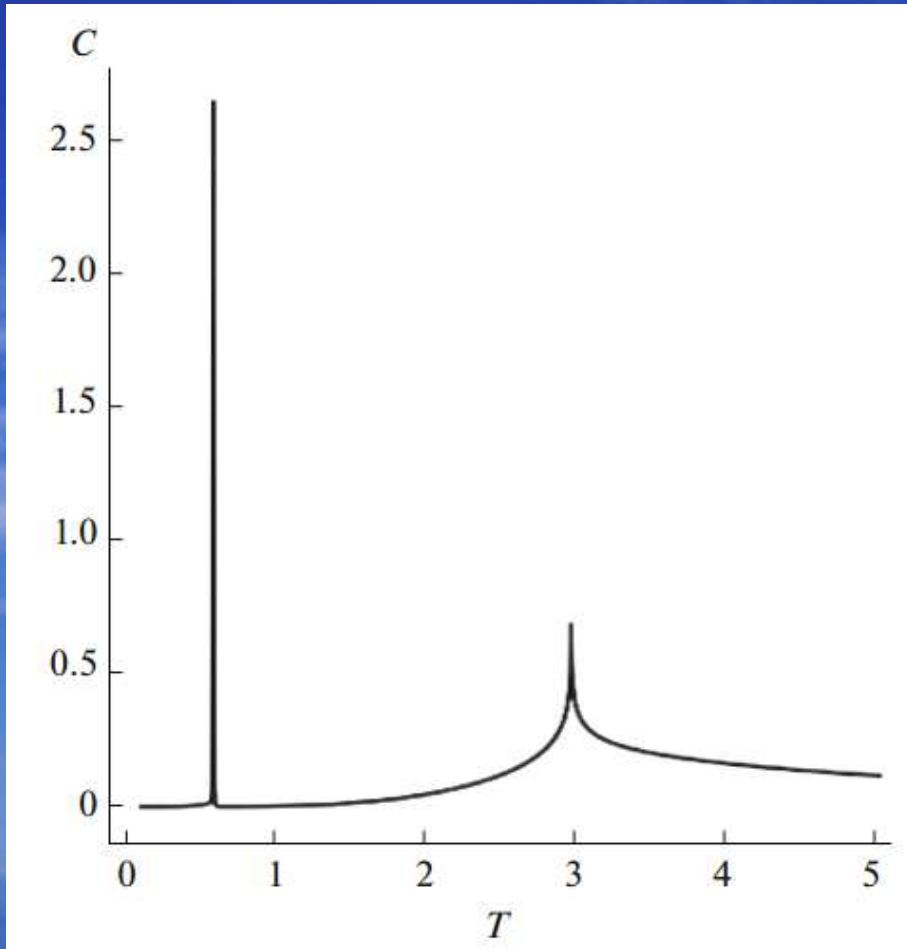




Решетка UP: основная решетка
 урана (гранедекорирована) +
 каждое ребро единожды
 декорировано атомом фосфора +
 объемодекорирована атомом
 фосфора

Магнитная структура фосфида урана UP

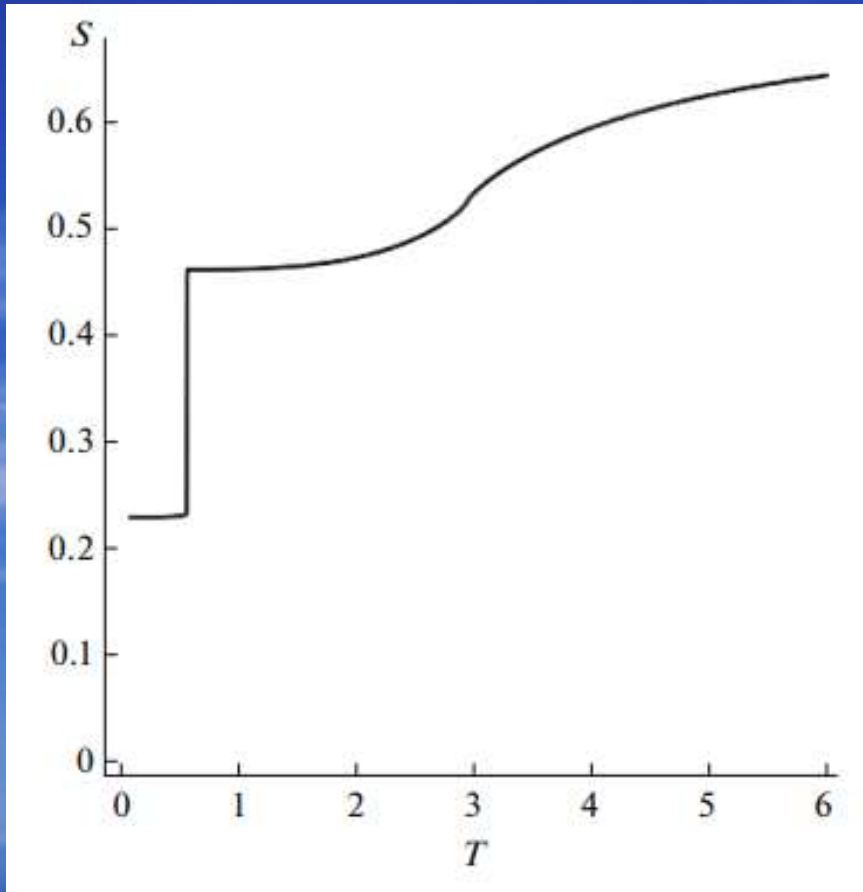
Сравнение с экспериментальными результатами (теплоемкость)



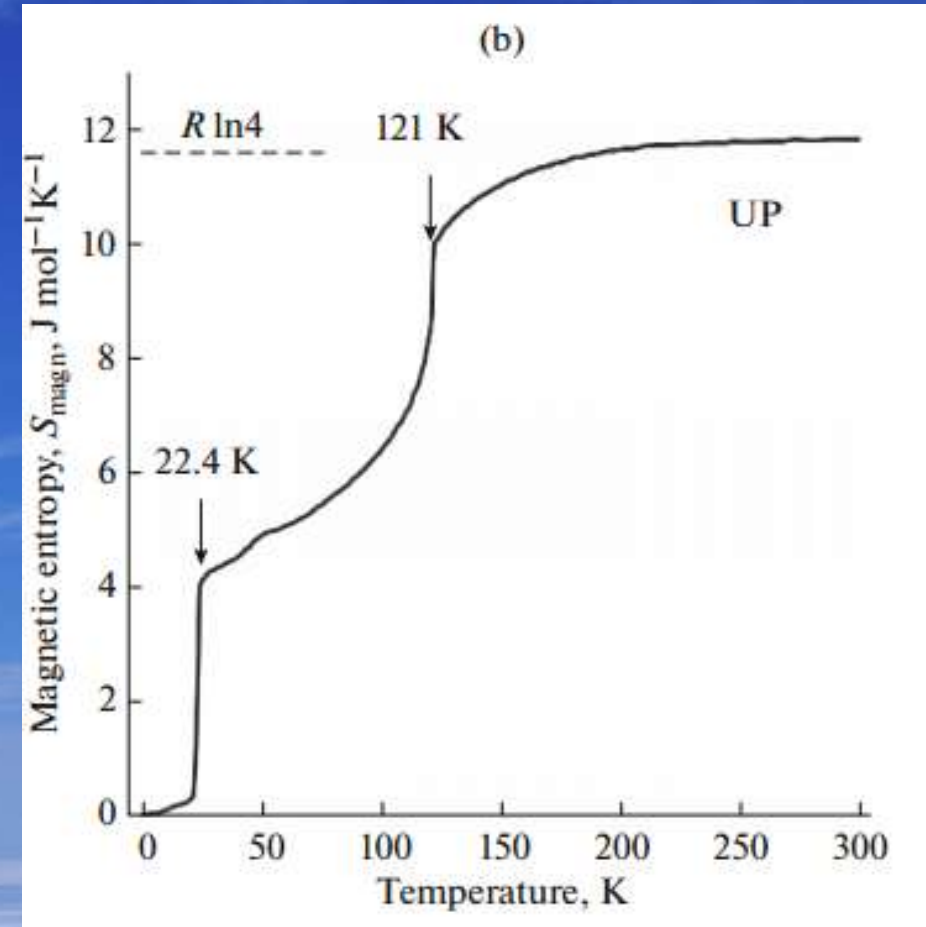
$$J_{xd} = J_{yd} = -1, J_x = -0.8, J_y = -3, d_x = d_y = 1$$

Фосфид урана UP

Сравнение с экспериментальными результатами (энтропия)

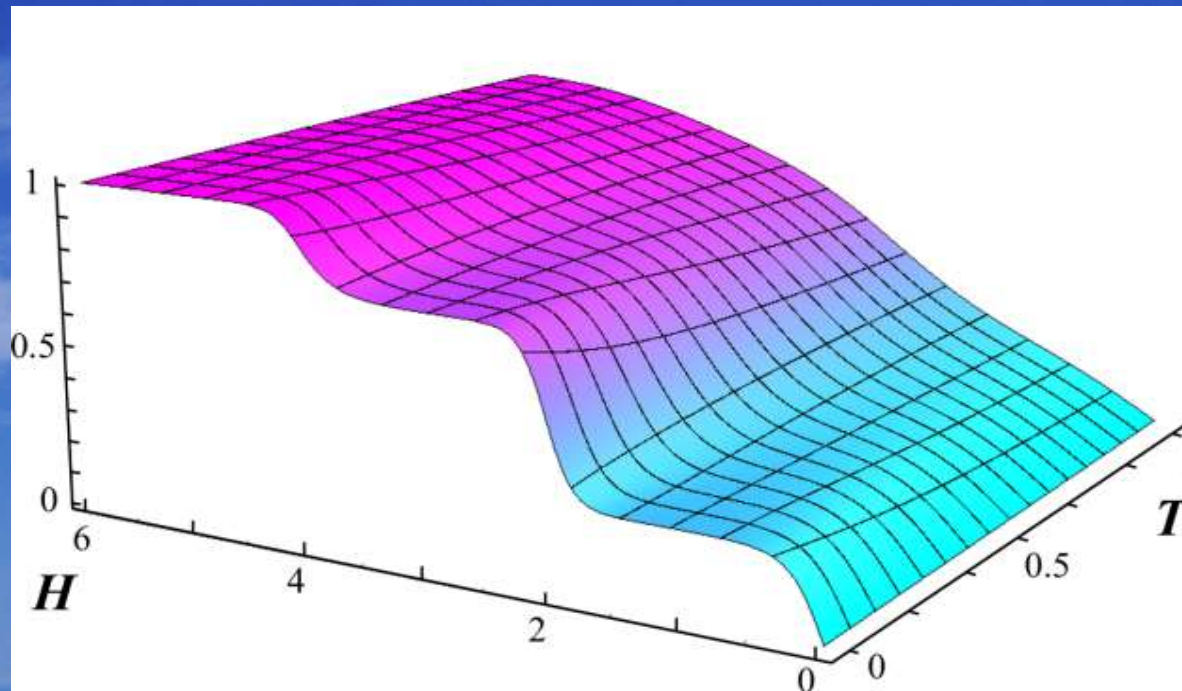


$$J_{xd} = J_{yd} = -1, J_x = -0.8, J_y = -3, d_x = d_y = 1$$

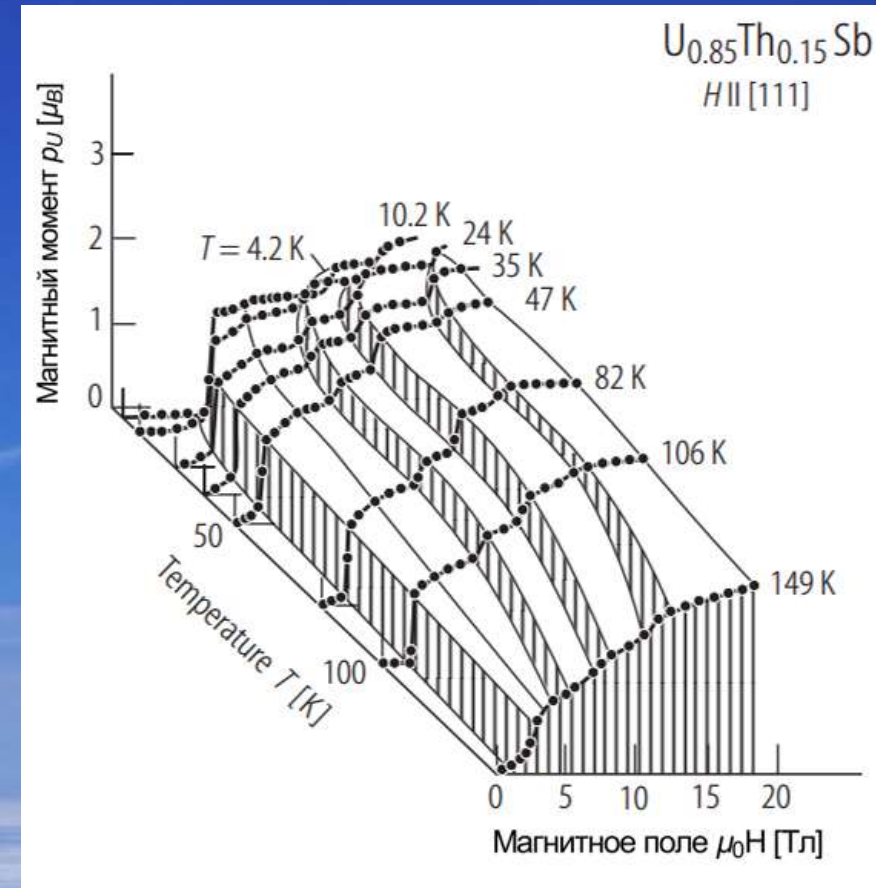


Фосфид урана UP

Сравнение с экспериментальными результатами (плато намагниченности)

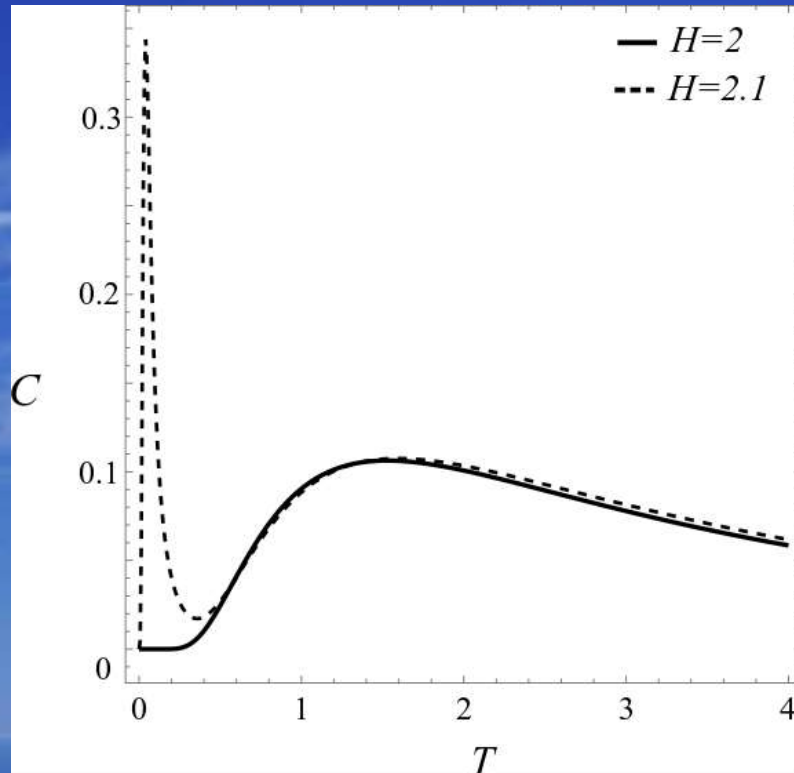


$$d = 3$$

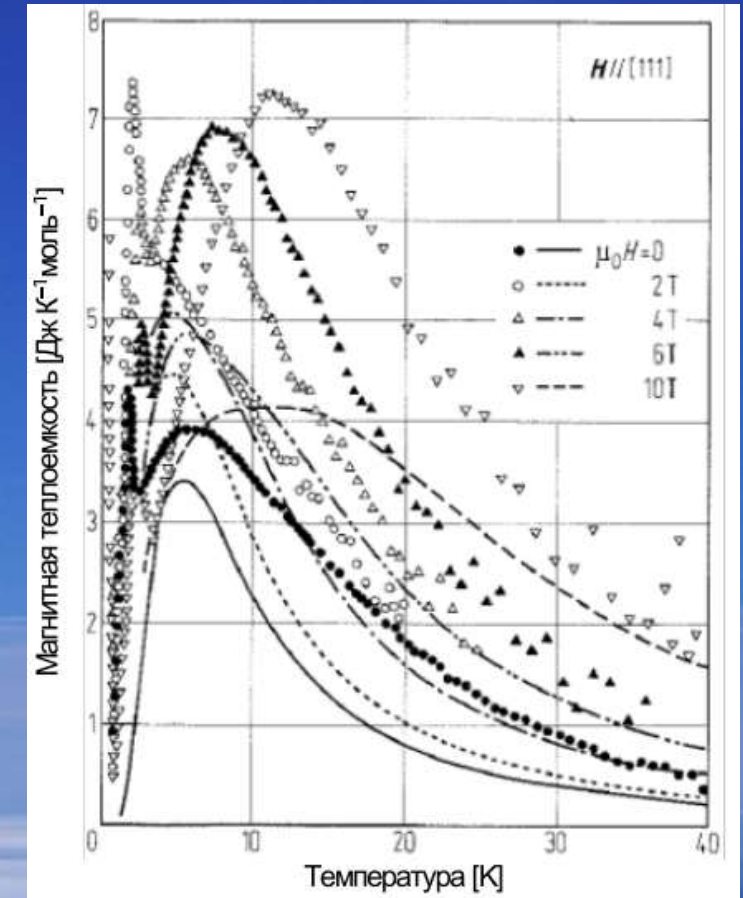
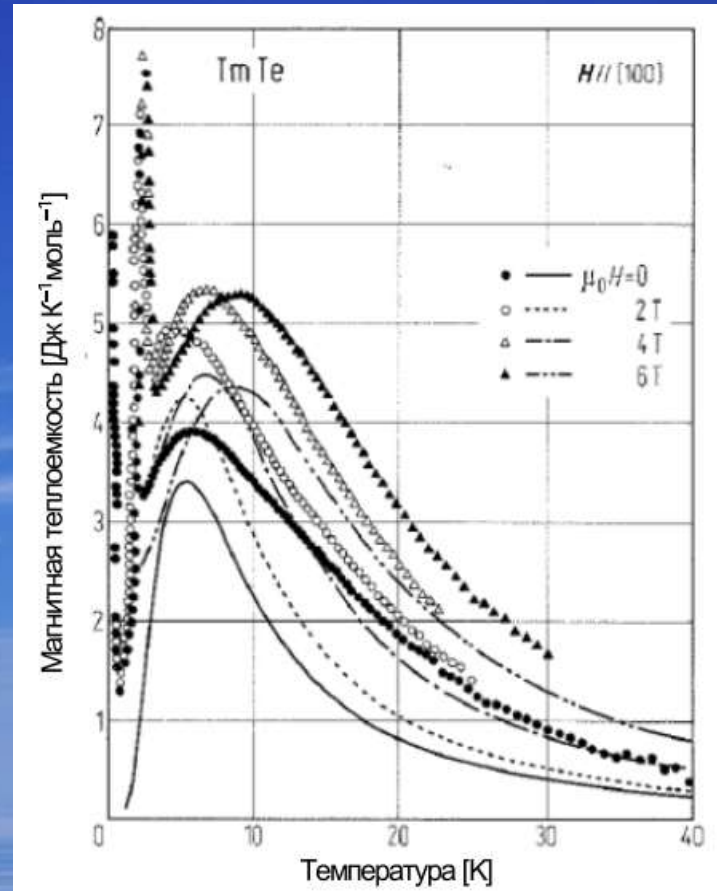


Намагниченность $UThSb$

Сравнение с экспериментальными результатами (расщепление теплоемкости)



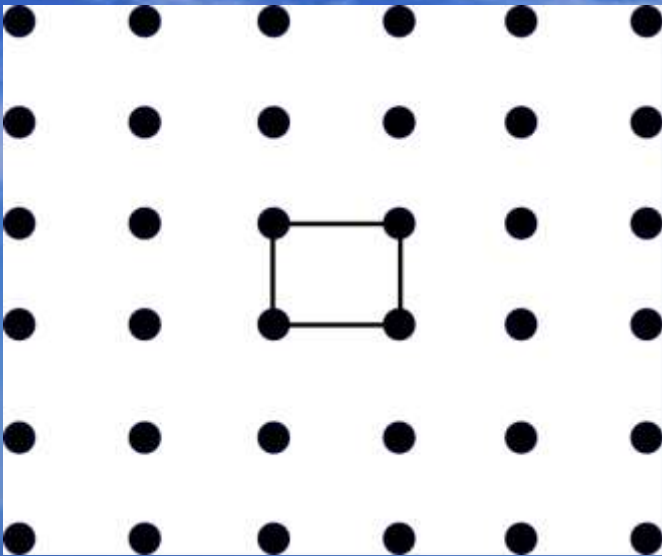
Модель Изинга



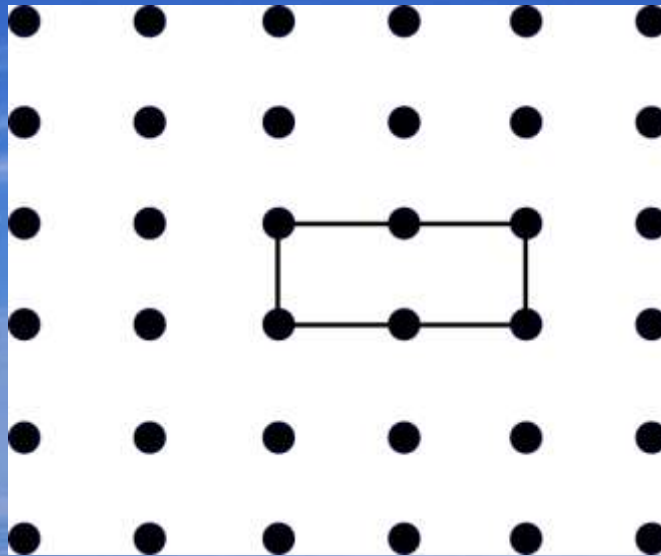
Магнитная теплоемкость TmTe [16] для двух направлений внешнего поля [100] и [111]

*Что означает сумма по замкнутым
многоугольникам в комбинаторном методе
Вдовиченко-Фейнмана?*

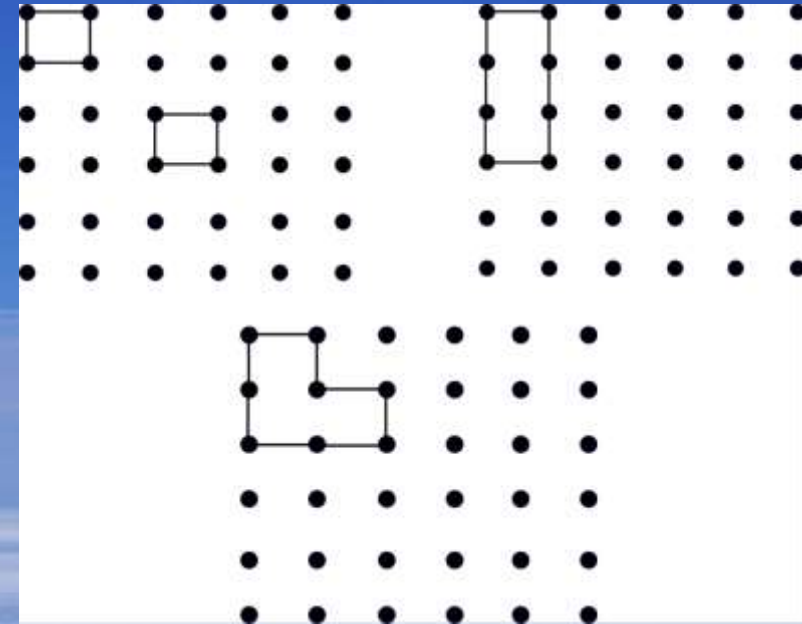
$$\Phi(v) = \sum_r g_r v^r = 1 + N \cdot v^4 + N \cdot v^6 + N \cdot v^8 + \dots$$



v^4



v^6



v^8