

ОБОБЩЕННАЯ МОДЕЛЬ ИЗИНГА НА КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ

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

^a Российский федеральный ядерный центр —
Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е. И. Забабахина
456770, Снежинск, Челябинская обл., Россия

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

Поступила в редакцию 28 июня 2025 г.,
после переработки 24 сентября 2025 г.
Принята к публикации 30 сентября 2025 г.

Выведено точное аналитическое решение для свободной энергии Гельмгольца в обобщенной модели Изинга на квадратной решетке комбинаторным методом Вдовиченко–Фейнмана. Исследованы термодинамические, магнитные и фрустрационные свойства обобщенной модели Изинга на квадратной решетке с двумя трансляциями в горизонтальном и вертикальном направлениях. Установлены новые особенности, возникающие в обобщенной модели Изинга.

DOI: 10.7868/S3034641X25120102

1. ВВЕДЕНИЕ

В текущем году исполняется сто лет со времени опубликования исходной статьи по классической модели Изинга на цепочке спинов со взаимодействием между ближайшими соседями в присутствии внешнего магнитного поля [1]. Изинг провел точный расчет свободной энергии Гельмгольца и продемонстрировал, что в данной модели невозможен фазовый переход при конечной температуре. На основе полученных результатов он сделал заключение, что в рассматриваемой модели не может быть фазового перехода при любых размерностях.

Однако Пайерлс доказал [2], что в модели Изинга должен быть фазовый переход в двумерном (2D) и трехмерном (3D) случаях. Позже Крамерс и Ванье при сопоставлении низкотемпературного и высокотемпературного разложений статистической суммы и с помощью изобретенного ими дуального превращения вычислили критическую температуру фазового перехода в модели Изинга на квадратной решетке с обменным взаимодействием между ближайшими соседями по горизонтальному и вертикальному направлениям [3, 4].

Впоследствии Онзагер [5], используя метод трансфер-матрицы Крамерса–Ванье, получил точное аналитическое решение для свободной энергии Гельмгольца в модели Изинга на квадратной решетке. Эта работа открыла новую эпоху и фактически определила границу размежевания между предыдущими наивными, весьма упрощенными теориями типа молекулярного поля и современной эрой исследования критических явлений в статистической физике с сопутствующими особенностями поведения термодинамических величин.

Сложность оригинального метода Онзагера и его выдающийся результат побудили многих исследователей, как физиков, так и математиков, к поискам разнообразных направлений по разработке более простых и эффективных методов получения точных решений с одной стороны, а с другой стороны, к расширению объектов и задач исследований. Точное аналитическое решение для свободной энергии Гельмгольца в модели Изинга на квадратной решетке было успешно переполучено в разнообразных комбинаторных подходах, развитых, в частности, Кацем и Вардом [6], Поттсом и Вардом [7], Херстом и Грином [8], Вдовиченко [9, 10], Фейнманом [11], а в более поздних теориях, основанных на грассмановых переменных, — Самуэлем [12], Плечко [13], а также Вергелесом с использованием алгебры Клиффорда – Дирака [14].

* E-mail: eguny@mail.ru

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

К настоящему времени количество научных статей по модели Изинга исчисляется тысячами и продолжает увеличиваться. Однако следует отметить, что несмотря на огромные затраченные усилия, задачи о точном вычислении свободной энергии в ряде случаев оказались не решенными. Во-первых, это невозможность обобщения на 3D-объекты. Во-вторых, отсутствие решений во внешнем магнитном поле ни на одной из 2D-решеток. В-третьих, точно установлено, что решениям поддаются не все 2D-решетки, а только лишь планарные, т. е. те, в которых отсутствуют пересечения между обменными взаимодействиями. В-четвертых, модель Изинга при обобщении на спины с числом состояний более двух также не поддается точному решению.

Ввиду указанных препятствий на пути углубления исследований научные интересы постепенно переключались на применение модели Изинга к более широким объектам, в частности планарным 2D-решеткам: к классу одиннадцати архимедовых и классу дуальных архимедовым восьми решеток Лавэ. Подробное изложение свойств решеток этих классов и строгое доказательство их уникальности изложено в книге Грюнбаума и Шефарда [15].

К настоящему времени точные выводы свободной энергии Гельмгольца получены на многих архимедовых решетках, в том числе на квадратной решетке Онзагером [5], на треугольной решетке Ванье [16], на гексагональной решетке Гутапшелем [17], на решетке кагоме Кано и Найем [18], на решетке баунс (tuby) Лином и Ма [19], на решетке кросс (решетка 4-6-12) Лином и Хуангом [20].

Точные решения свободной энергии Гельмгольца в модели Изинга получены и на некоторых решетках Лавэ, среди них: Ваксом, Ларкиным и Овчинниковым на решетке типа «Union Jack» [21], Урюмовым на пятиугольной каирской решетке [22], Хольцером на решетке типа «игральная кость» (dice lattice) [23].

Существуют также точные выводы свободной энергии Гельмгольца на ряде решеток, не входящих ни в класс архимедовых, ни в класс Лавэ, в частности, Лином и Вангом на одном типе решетки 4-6 [24], Ойтмаа и Кеппертом на другом типе решетки 4-6 [25], Стречкой и Кановой на решетке типа «бабочка» (bow-tie lattice) [26], Чао, Лии и Лином на решетке 3-6 [27], а также Ло, Яо и Карлсоном на треугольной решетке кагоме [28].

Поскольку точному решению поддаются только планарные решетки, а даже учет взаимодействия между спинами на вторых соседях не отвечает условию планарности, то интерес исследователей пере-

ключился на новое направление, а именно, возникли множественные попытки решить задачу в случае взаимодействий только между ближайшими соседями, но разных между разными соседними спинами. Фактически это означает переход на более высокий уровень — исследование решеток с трансляциями на два периода решетки по всем направлениям. Строго говоря, на всех указанных выше решетках такая задача решается как бы компромиссным образом — число учитываемых взаимодействий больше, чем с трансляциями на один период решетки, но меньше, чем на два периода.

В качестве примера рассмотрим историю исследования решетки типа «Union Jack». Первоначально, Ваксом, Ларкиным и Овчинниковым [21] свободная энергия Гельмгольца выведена точно при учете двух взаимодействий (исходная решетка с трансляциями на один период решетки по двум направлениям), затем Чикью и Сузуки [29] вычислили свободную энергию Гельмгольца с тремя обменными взаимодействиями, Морита [30] обобщил задачу на четыре взаимодействия, и позднее Ву и Лином [31] задача решена точно с учетом шести взаимодействий. И тем не менее окончательного решения не найдено, поскольку в решетке Union Jack с трансляциями на два периода решетки число обменных взаимодействий равно восьми. В итоге получается, что задача с трансляциями на два периода решетки до конца не решена ни на одной из решеток, кроме одной, а именно на квадратной решетке, причем без какого либо вывода и исследования свойств полученного выражения (см., например, [32, 33]).

Целями настоящей работы является вывод точного аналитического выражения для свободной энергии Гельмгольца в модели Изинга на квадратной решетке с трансляционной инвариантностью на два периода решетки в горизонтальном и вертикальном направлениях с использованием наиболее удобного и эффективного метода Вдовиченко – Фейнмана, а также исследование физических свойств полученного решения при произвольном варьировании величин и знаков всех четырех обменных взаимодействий.

2. ВЫЧИСЛЕНИЕ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ КОМБИНАТОРНЫМ МЕТОДОМ

История комбинаторного метода начинается с важной работы [6]. В попытках получить интуитивное решение двумерной модели Изинга авторы предположили, что нахождение статистической суммы

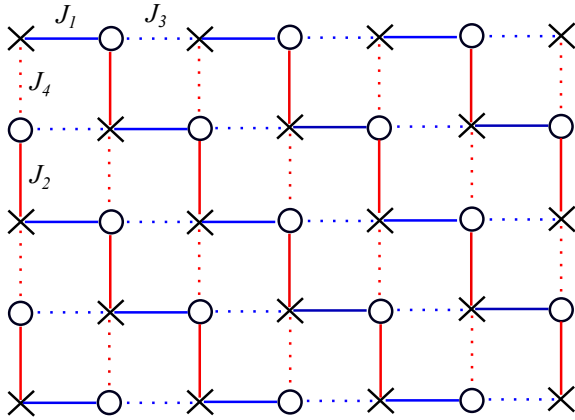


Рис. 1. Обобщенная квадратная решетка

можно свести к некоторой комбинаторной задаче. В этой статье авторы рассмотрели разложение статистической суммы в форме Ван дер Вардена [34] как сумму по определенным множествам замкнутых циклов (или путей) на решетке. Основываясь на топологической гипотезе, авторы установили соответствие между суммой по замкнутым циклам и определителем, построенное по некоторым правилам. В результате, авторы переполучили точное решение Онзагера. Работа вводит графовое представление модели, где ребра графа соответствуют взаимодействиям между спинами. Комбинаторный подсчет циклов на этом графе становится ключевым инструментом. Именно эта работа дала совершенно новый взгляд на проблему, однако решение все еще оставалось технически сложным и неполным. Тем не менее статья заложила фундамент для дальнейшего развития комбинаторных методов, показав важность графовых структур и циклов.

Статья [7] стала значительным расширением и обобщением идей, изложенных в [6]. Методы комбинаторного решения двумерной модели Изинга [6] были распространены на получение корреляционной функции. Это существенно расширило область применения комбинаторных методов в статистической механике и углубило понимание фазовых пере-

ходов и критических явлений. В результате авторы практически переполучили результат Кауфман [35] для парной корреляционной функции на квадратной решетке.

Затем в работе [8] был значительно упрощен расчет, предложенный в [6]. Авторы ввели метод подсчета циклов на решетке с использованием алгебры пфаффианов. Их подход позволял свести задачу к вычислению определителей и матриц, связанных с графом решетки. Они связали статистическую сум-

му с определителем некоторого оператора, что открыло путь к более чистому и элегантному решению. Работа [8] фактически является мостом между чисто комбинаторным подходом и алгебраическими методами решения.

Впоследствии идея комбинаторного метода была доработана. В работах [9, 10] получено детальное решение двумерной модели Изинга с использованием методов теории графов и определителей, что позволило получить точное выражение для статистической суммы. В работе [11] была выдвинута догадка о том что, замкнутые циклы на решетке по своей сути являются марковскими цепями. Поэтому поиск всех возможных замкнутых не пересекающихся циклов на решетке различной длины сведется к задаче о случайных блужданиях. Эти идеи, в конце концов, позволили получить точное решение двумерной модели Изинга наиболее простым способом.

В работе [36] была упомянута квадратная решетка с обобщением на две трансляции в горизонтальном и вертикальном направлениях (см. рис. 1). В работе [32] предложена формула для расчета свободной энергии Гельмгольца (но без доказательства). В данной статье будет получено точное аналитическое решение обобщенной модели Изинга на квадратной решетке с помощью комбинаторного метода Вдовиченко – Фейнмана.

Статистическую сумму обобщенной квадратной решетки, изображенной на рис. 1, можно записать следующим образом:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}} \exp \left[K_1 \left(\sum_{i', j''} \sigma_{i', j''} \sigma_{i'+1, j''} + \sum_{i'', j'} \sigma_{i'', j'} \sigma_{i'', j'+1} \right) + K_2 \left(\sum_{i', j'} \sigma_{i', j'} \sigma_{i', j'+1} + \sum_{i'', j''} \sigma_{i'', j''} \sigma_{i'', j''+1} \right) + K_3 \left(\sum_{i'', j''} \sigma_{i'', j''} \sigma_{i''+1, j''} + \sum_{i', j'} \sigma_{i', j'} \sigma_{i'+1, j'} \right) + K_4 \left(\sum_{i', j'} \sigma_{i', j'} \sigma_{i', j'+1} + \sum_{i'', j''} \sigma_{i'', j''} \sigma_{i'', j''+1} \right) \right], \quad (1)$$

где $K_{1,2,3,4} = J_{1,2,3,4}/T$, $\sigma_{i,j} = \pm 1$.

В выражении (1) индексы i' и j' пробегает только нечетные, а индексы i'' и j'' — только четные значения спинов решетки, $i', j' = 1, 3, 5, \dots$, $i'', j'' = 2, 4, 6, \dots$

Используя тождество

$$\exp[x\sigma_i\sigma_j] = \text{ch } x(1 + \sigma_i\sigma_j \text{th } x),$$

преобразуем статистическую сумму к виду

$$Z_N = (\text{ch } K_1 \text{ch } K_2 \text{ch } K_3 \text{ch } K_4)^{N/2} S, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} S(v, u, w, t) = \sum_{\{\sigma\}} & \left\{ \prod_{i', j'} (1 + v\sigma_{i', j'} \sigma_{i'+1, j'}) \times \right. \\ & \times \prod_{i'', j''} (1 + v\sigma_{i'', j''} \sigma_{i''+1, j''}) \prod_{i', j'} (1 + u\sigma_{i', j'} \sigma_{i', j'+1}) \times \\ & \times \prod_{i'', j''} (1 + u\sigma_{i'', j''} \sigma_{i'', j''+1}) \prod_{i'', j''} (1 + w\sigma_{i'', j''} \sigma_{i''+1, j''}) \times \\ & \times \prod_{i', j'} (1 + w\sigma_{i', j'} \sigma_{i'+1, j'}) \prod_{i'', j''} (1 + t\sigma_{i'', j''} \sigma_{i'', j''+1}) \times \\ & \left. \times \prod_{i', j'} (1 + t\sigma_{i', j'} \sigma_{i'+1, j'}) \right\} \end{aligned}$$

где $v = \text{th } K_1$, $u = \text{th } K_2$, $w = \text{th } K_3$, $t = \text{th } K_4$, N — число спинов в решетке.

Параметры v, u, w и t всегда меньше единицы при всех значениях температуры T , за исключением $T = 0$, когда $v = u = w = t = 1$. В частности, эти параметры являются малыми в высокотемпературной области, поэтому разложение статистической суммы следует выполнять в окрестности $T \rightarrow \infty$.

На рис. 1 можно заметить, что на обобщенной квадратной решетке присутствуют два вида узлов (см. рис. 2, подробнее в работах [21, 29]). У узла, помеченного крестом (рис. 2 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 правым узлом — J_1 . У узла, обозначенного кружком (рис. 2 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 правым узлом — J_3 .

Если разложить все восемь произведений в формуле (2), получится 2^{2N} слагаемых, поскольку имеется $2N$ множителей (по $N/4$ с каждого произведения), и в каждом из них содержится по два слагаемых. Для удобства можно ввести графическое представление этого разложения. Линия, проведенная по

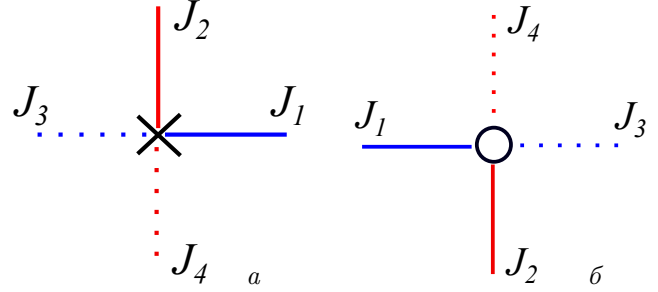


Рис. 2. Два вида узлов на обобщенной квадратной решетке

горизонтали, между узлом слева, помеченного крестом, и узлом справа, помеченного кружком, соответствует слагаемому с множителем v . Линия, проведенная по горизонтали, между узлом слева, помеченного кружком, и узлом справа, помеченного крестом, соответствует слагаемому с множителем w . Линия, проведенная по вертикали между узлом снизу, помеченного крестом, и узлом сверху, помеченного кружком, соответствует слагаемому с множителем u . Линия, проведенная по вертикали между узлом снизу, помеченного кружком, и узлом сверху, помеченного крестом, соответствует слагаемому с множителем t . Отсутствие линии между узлами соответствует 1. Повторяя эту операцию для всех 2^{2N} слагаемых, можно установить однозначное соответствие между членами разложения и графическими конфигурациями. Общее выражение этих слагаемых имеет вид

$$v^a u^b w^c t^d \sigma_1^{n_1} \sigma_2^{n_2} \sigma_3^{n_3} \dots,$$

где a, c — количество горизонтальных связей, проведенных из узлов разного вида, b, d — количество вертикальных связей, проведенных из узлов разного вида, n_i — количество линий, где i — конечный узел.

Теперь необходимо вычислить сумму по всем спинам решетки, чтобы получить статистическую сумму. Поскольку каждый спин $\sigma_{i,j}$ принимает значения ± 1 , сумма обращается в нуль, если хотя бы одно из чисел $n_1, n_2, \dots, n_N$ является нечетным. Если же числа $n_1, n_2, \dots, n_N$ четные, результат равен $2^N v^a u^b w^c t^d$. Исходя из этих соображений, статистическую сумму можно записать следующим образом:

$$Z_N = 2^N (\text{ch } K_1 \text{ch } K_2 \text{ch } K_3 \text{ch } K_4)^{N/2} S, \quad (3)$$

$$S(v, u, w, t) = \sum_P v^a u^b w^c t^d,$$

где сумма берется по всем конфигурациям линий на решетке, при этом на каждом узле должно быть четное количество линий, т. е. сумма охватывает

все замкнутые многоугольники P на решетке. Таким образом, статистическая сумма, за исключением множителя, выражается через геометрическую величину S . При этом каждое слагаемое в сумме S соответствует замкнутому многоугольнику с определенным числом связей. Для вычисления статистической суммы необходимо определить все члены разложения S .

Изящное решение данной проблемы было предложено в работе [9]. Метод Вдовиченко подразделяется на три шага: первый шаг состоит в выражении суммы по многоугольникам в виде суммы по замкнутым петлям без пересечений, второй шаг заключается в преобразовании суммы по замкнутым петлям без пересечений в сумму по всем возможным замкнутым петлям, на последнем шаге задача сводится к случайному блужданию на решетке.

Следуя этому методу, множитель S в выражении (3) можно записать в виде

$$S(v, u, w, t) = \sum_{a+b+c+d=r} g_{abcd} v^a u^b w^c t^d, \quad (4)$$

где g_{abcd} — общее число замкнутых многоугольников (сумма по петлям), построенных из r неповторяющихся связей.

Величина g_{abcd} в формуле (4) представлена в виде суммы по петлям без пересечений и общих частей. Однако такое представление неоднозначно в отношении самопересекающихся многоугольников, поскольку одна и та же фигура может состоять из различного числа одиночных петель. Чтобы избежать повторного включения самопересекающихся многоугольников в сумму S , необходимо каждой точке решетки с углом поворота α поставить в соответствие множитель $e^{i\alpha/2}$, и тогда при обходе всей петли произведение этих множителей будет равно $(-1)^{\nu+1}$, где ν — число самопересечений.

Для фигуры, состоящей из s замкнутых петель, произведение множителей $e^{i\alpha/2}$ на всех s петлях дает $(-1)^{\nu+s}$ (где теперь ν — общее число самопересечений во всех петлях).

Обозначим через f_r сумму по отдельным замкнутым петлям, состоящих из r связей. Сумма по всем парам петель с общим числом связей 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 многоугольников. Аналогичный множитель $s!$ присутствует в знаменателе суммы для s многоугольников.

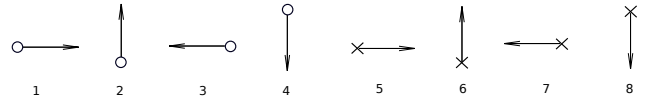


Рис. 3. Возможные направления на обобщенной квадратной решетке

Следовательно, функцию S можно записать как

$$S(v, u, t, w) = \sum_{s=0}^{\infty} (-1)^s \frac{1}{s!} \sum_{r_1+r_2+\dots+r_s=r} f_{r_1} f_{r_2} \dots f_{r_s}, \quad (5)$$

где $f_{r_s} = f_{r_s}(v, u, w, t)$.

Поскольку в S есть члены, соответствующие множествам замкнутых многоугольников 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

$$\sum_{r_1+r_2+\dots+r_s=r} f_{r_1} f_{r_2} \dots f_{r_s} = \left(\sum_{r=1}^{\infty} f_r \right)^s.$$

Таким образом, S выражается как

$$S(v, u, t, w) = \sum_{s=0}^{\infty} (-1)^s \frac{1}{s!} \left(\sum_{r=1}^{\infty} f_r \right)^s = \exp \left[- \sum_{r=1}^{\infty} f_r \right]. \quad (6)$$

Этим выражением завершаются первые два шага метода Вдовиченко. Остается только явным образом вычислить величину f_r .

В отличие от обычной квадратной решетки, в которой имеются только четыре направления (поскольку все узлы в решетке одинаковы), на обобщенной квадратной решетке имеются восемь различных направлений: четыре направления из узла, обозначенного кружком (вверх, вниз, влево, вправо) и четыре направления из узла, обозначенного крестом (вверх, вниз, влево, вправо). Удобно их пронумеровать индексом $\mu = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8$, как показано на рис. 3.

Так же как и в случае обычной квадратной решетки, вводится функция $W_r(i, j, \mu)$, которая определяется как сумма по всем возможным путям с длиной r , начинающимся из заданной точки с координатами (i_0, j_0) вдоль направления μ_0 и достигающим точки с координатами (i, j) вдоль направления μ . Каждая связь взвешена множителем $e^{i\alpha/2}$, где α — это изменение направления при переходе к следующей связи. 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 воз-

вращающимся в ту же точку. В результате, имеется тождество

$$f_r = \frac{1}{2r} \sum_{i_0, j_0, \mu} W_r(i_0, j_0, \mu), \quad (7)$$

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 рекуррентным соотношениям

$$\begin{aligned} W_{r+1}(i, j, 1) &= 0 + 0 + 0 + 0 + vW_r(i-1, j, 5) + \\ &+ u\alpha^{-1}W_r(i, j-1, 6) + 0 + t\alpha W_r(i, j+1, 8), \\ W_{r+1}(i, j, 2) &= 0 + 0 + 0 + 0 + v\alpha W_r(i-1, j, 5) + \\ &+ uW_r(i, j-1, 6) + w\alpha^{-1}W_r(i+1, j, 7) + 0, \\ W_{r+1}(i, j, 3) &= 0 + 0 + 0 + 0 + 0 + u\alpha W_r(i, j-1, 6) + \\ &+ wW_r(i+1, j, 7) + t\alpha^{-1}W_r(i, j+1, 8), \\ W_{r+1}(i, j, 4) &= 0 + 0 + 0 + 0 + v\alpha^{-1}W_r(i-1, j, 5) + \\ &+ 0 + w\alpha W_r(i+1, j, 7) + tW_r(i, j+1, 8), \quad (8) \\ W_{r+1}(i, j, 5) &= wW_r(i-1, j, 1) + t\alpha^{-1}W_r(i, j-1, 2) + \\ &+ 0 + u\alpha W_r(i, j+1, 4) + 0 + 0 + 0 + 0, \\ W_{r+1}(i, j, 6) &= w\alpha W_r(i-1, j, 1) + tW_r(i, j-1, 2) + \\ &+ v\alpha^{-1}W_r(i+1, j, 3) + 0 + 0 + 0 + 0 + 0, \\ W_{r+1}(i, j, 7) &= 0 + t\alpha W_r(i, j-1, 2) + vW_r(i+1, j, 3) + \\ &+ u\alpha^{-1}W_r(i, j+1, 4) + 0 + 0 + 0 + 0, \\ W_{r+1}(i, j, 8) &= w\alpha^{-1}W_r(i-1, j, 1) + 0 + \\ &+ v\alpha W_r(i+1, j, 3) + uW_r(i, j+1, 4) + 0 + 0 + 0 + 0, \end{aligned}$$

где $\alpha = \exp(i\pi/4)$.

Рассмотрим, например, первое соотношение (8). В точку $i, j, 1$ можно попасть, сделав последний $(r+1)$ -й шаг из узла, обозначенного крестом, который находится слева, снизу или сверху, но не справа. Кроме того, не существует направлений, при которых можно было бы попасть из узла, обозначенного кружком, в точку $i, j, 1$. Коэффициенты, представленные в этом соотношении, основаны на фазовых факторах, относящихся к изменению направлений. Используя те же аргументы, можно вывести другие соотношения в (8). Вводя матрицу коэффициентов Λ , рекуррентные соотношения можно записать в виде

$$W_{r+1}(i, j, \mu) = \sum_{i', j', \mu'} \Lambda(ij\mu | i'j'\mu') W_r(i', j', \mu'). \quad (9)$$

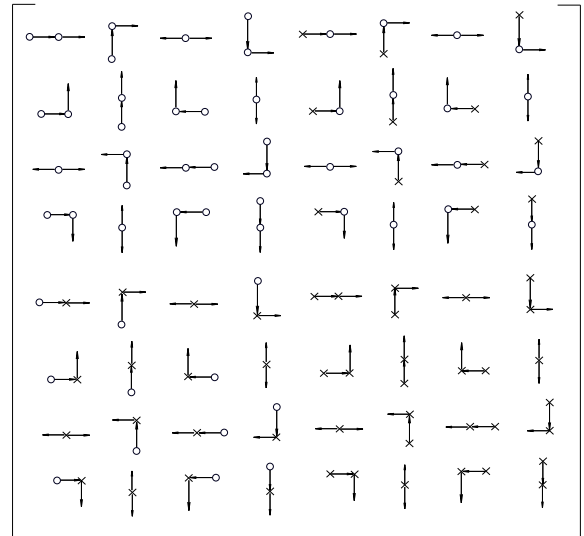


Рис. 4. Матричные элементы Λ

Согласно [11], эти уравнения можно интерпретировать как марковский процесс, связанный со случайным блужданием на решетке, с вероятностью перехода между двумя ближайшими соседними узлами, выраженными через соответствующие матричные элементы Λ .

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 рис. 4.

В свете приведенной выше интерпретации рекуррентных соотношений вероятность перехода относительно пути полной длины r выражается матрицей Λ^r . Заметим, что диагональные элементы этой матрицы выражают вероятность вернуться в исходную точку после прохождения цикла с длиной r , т. е. они совпадают с $W_r(i_0, j_0, \mu_0)$. Таким образом, справедлива следующая формула:

$$\text{Sp} \Lambda^r = \sum_{i_0, j_0, \mu} W_r(i_0, j_0, \mu). \quad (10)$$

Сравнив ее с (7), имеем

$$f_r = \frac{1}{2r} \text{Sp} \Lambda^r = \frac{1}{2r} \sum_i \lambda_i^r, \quad (11)$$

где λ_i — собственные значения матрицы Λ . Используя данное выражение в (6) и меняя местами индексы суммы, получаем

$$S(v, u, t, w) = \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_i \sum_{r=1}^8 \frac{1}{r} \lambda_i^r \right) = \\ = \exp \left(\frac{1}{2} \sum_i \ln(1 - \lambda_i) \right) = \prod_i \sqrt{1 - \lambda_i}. \quad (12)$$

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

$$W_r(p, q, \mu) = \sum_{i=0}^L \sum_{j=0}^L e^{-\frac{2\pi i}{L}(pi+qj)} W_r(i, j, \mu), \quad (13)$$

где L — количество узлов в решетке вдоль одного направления и $N = L^2$, получаем

$$\begin{aligned} W_{r+1}(p, q, 1) &= v\epsilon^{-p} W_r(p, q, 5) + \\ &+ u\alpha^{-1}\epsilon^{-q} W_r(p, q, 6) + t\alpha\epsilon^q W_r(p, q, 8), \\ W_{r+1}(p, q, 2) &= v\alpha\epsilon^{-p} W_r(p, q, 5) + \\ &+ u\epsilon^{-q} W_r(p, q, 6) + w\alpha^{-1}\epsilon^p W_r(p, q, 7), \\ W_{r+1}(p, q, 3) &= u\alpha\epsilon^{-q} W_r(p, q, 6) + \\ &+ w\epsilon^p W_r(p, q, 7) + t\alpha^{-1}\epsilon^q W_r(p, q, 8), \\ W_{r+1}(p, q, 4) &= v\alpha^{-1}\epsilon^{-p} W_r(p, q, 5) + \\ &+ w\alpha\epsilon^p W_r(p, q, 7) + t\epsilon^q W_r(p, q, 8), \\ W_{r+1}(p, q, 5) &= w\epsilon^{-p} W_r(p, q, 1) + \\ &+ t\alpha^{-1}\epsilon^{-q} W_r(p, q, 2) + u\alpha\epsilon^q W_r(p, q, 4), \\ W_{r+1}(p, q, 6) &= w\alpha\epsilon^{-p} W_r(p, q, 1) + \\ &+ t\epsilon^{-q} W_r(p, q, 2) + v\alpha^{-1}\epsilon^p W_r(p, q, 3), \\ W_{r+1}(p, q, 7) &= t\alpha\epsilon^{-q} W_r(p, q, 2) + \\ &+ v\epsilon^p W_r(p, q, 3) + u\alpha^{-1}\epsilon^q W_r(p, q, 4), \\ W_{r+1}(p, q, 8) &= w\alpha^{-1}\epsilon^{-p} W_r(p, q, 1) + \\ &+ v\alpha\epsilon^p W_r(p, q, 3) + u\epsilon^q W_r(p, q, 4), \end{aligned} \quad (14)$$

где $\epsilon = \exp(2\pi i/L)$.

Поскольку $W_r(p, q, \mu)$ появляется с одинаковыми индексами p и q как в левой, так и в правой частях этих уравнений, и преобразование Фурье-матрицы μ диагонально по этим индексам, получаем окончательный вид матрицы коэффициентов Λ для обобщенной квадратной решетки:

$$\Lambda(p, q, \mu | p, q, \mu') = \begin{pmatrix} A & B \\ B_1 & A \end{pmatrix}, \quad (15)$$

где A — нуль-матрица 4×4 ,

$$B = \begin{pmatrix} v\epsilon^{-p} & u\alpha^{-1}\epsilon^{-q} & 0 & t\alpha\epsilon^q \\ v\alpha\epsilon^{-p} & u\epsilon^{-q} & w\alpha^{-1}\epsilon^p & 0 \\ 0 & u\alpha\epsilon^{-q} & w\epsilon^p & t\alpha^{-1}\epsilon^q \\ v\alpha^{-1}\epsilon^{-p} & 0 & w\alpha\epsilon^p & t\epsilon^q \end{pmatrix},$$

$$B_1 = \begin{pmatrix} w\epsilon^{-p} & t\alpha^{-1}\epsilon^{-q} & 0 & u\alpha\epsilon^q \\ w\alpha\epsilon^{-p} & t\epsilon^{-q} & v\alpha^{-1}\epsilon^p & 0 \\ 0 & t\alpha\epsilon^{-q} & v\epsilon^p & u\alpha^{-1}\epsilon^q \\ w\alpha^{-1}\epsilon^{-p} & 0 & v\alpha\epsilon^p & u\epsilon^q \end{pmatrix}.$$

Произведение собственных значений в выражении (12) равно определителю матрицы $1 - \Lambda$. Вычисляя определитель, получаем следующее выражение:

$$\begin{aligned} \text{Det}[1 - \Lambda(p, q)] &= D(p, q) = \\ &= (t^2 + u^2)(v^2 + w^2) + (t^2 u^2 + 1)(v^2 w^2 + 1) + 8tuvw - \\ &- 2 \cos(\omega_1 - \omega_2)[uv(t^2 - 1)(w^2 - 1) + tw(u^2 - 1)(v^2 - 1)] - \\ &- 2 \cos(\omega_1 + \omega_2)[uw(t^2 - 1)(v^2 - 1) + tv(u^2 - 1)(w^2 - 1)] - \\ &- 2vw(t^2 - 1)(u^2 - 1) \cos \omega_1 - 2tu(v^2 - 1)(w^2 - 1) \cos \omega_2, \end{aligned}$$

где $\omega_1 = 2\pi p/L$, $\omega_2 = 2\pi q/L$.

В результате выражение для свободной энергии Гельмгольца (приходящейся на один узел) обобщенной модели Изинга на квадратной решетке с двумя трансляциями в горизонтальном и вертикальном направлениях имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} F(T) &= -T \ln Z = -T \ln \lambda_g = \\ &= -T \ln 2 - \frac{T}{2} \ln \left\{ \text{ch } K_1 \text{ch } K_2 \text{ch } K_3 \text{ch } K_4 \right\} - \\ &- \frac{T}{16\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln D(\omega_1, \omega_2) d\omega_1 d\omega_2. \end{aligned} \quad (16)$$

Путем несложных преобразований в итоге получается точное аналитическое решение обобщенной модели Изинга на квадратной решетке, совпадающее с решением, приведенным в работе [32]:

$$\begin{aligned} \ln \frac{\lambda_g}{2} &= \frac{1}{16\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln \left\{ \frac{1}{2} \left[\text{ch } 2K_1 \text{ch } 2K_2 \text{ch } 2K_3 \text{ch } 2K_4 + \right. \right. \\ &+ \text{sh } 2K_1 \text{sh } 2K_2 \text{sh } 2K_3 \text{sh } 2K_4 + 1 - \\ &- \text{sh } 2K_1 \text{sh } 2K_3 \cos(\omega_1 + \omega_2) - \\ &- \text{sh } 2K_2 \text{sh } 2K_4 \cos(\omega_1 - \omega_2) - \\ &- (\text{sh } 2K_1 \text{sh } 2K_4 + \text{sh } 2K_2 \text{sh } 2K_3) \cos \omega_1 - \\ &\left. \left. - (\text{sh } 2K_1 \text{sh } 2K_2 + \text{sh } 2K_3 \text{sh } 2K_4) \cos \omega_2 \right] \right\} d\omega_1 d\omega_2. \end{aligned} \quad (17)$$

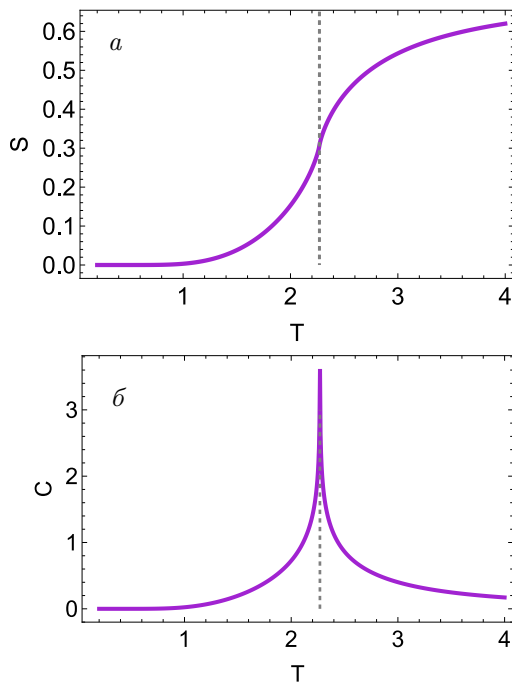


Рис. 5. Температурные зависимости энтропии (а) и теплоемкости (б) обычной квадратной решетки. Вертикальной линией обозначена температура перехода квадратной решетки $T_c = 2/\ln(1 + \sqrt{2}) \approx 2.2692$

3. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ И ФРУСТРАЦИОННЫЕ ОСОБЕННОСТИ ОБОБЩЕННОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА НА КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ

Обобщенная модель Изинга, в отличие от обычной, привлекательна тем, что позволяет задавать различные обменные взаимодействия между парами спинов не только по значению, но и по знаку. В данной работе имеется четыре обменных взаимодействия, J_1, J_2, J_3 и J_4 . Это означает, что существует $2^4 = 16$ различных комбинаций задания знаков между спинами, а вариантов обменных взаимодействий с различными значениями еще больше. Поэтому для начала рассматриваются обменные взаимодействия с различными знаками при условии, что их модули равны единице: $|J_1| = |J_2| = |J_3| = |J_4| = 1$. В дальнейшем в тексте обменное взаимодействие со знаком «+» обозначается как ферромагнитное, а со знаком «-» — как антиферромагнитное.

- | | |
|--------------|--------------|
| 1) + + + + , | 5) + - + + , |
| 2) + + + - , | 6) + - + - , |
| 3) + + - + , | 7) + - - + , |
| 4) + + - - , | 8) + - - - , |

- | | |
|---------------|---------------|
| 9) - + + + , | 13) - - + + , |
| 10) - + + - , | 14) - - + - , |
| 11) - + - + , | 15) - - - + , |
| 12) - + - - , | 16) - - - - . |

Случаи, отмеченные номерами 1), 16) вместе с $|J_1| = |J_2| = |J_3| = |J_4| = 1$, очевидно, дают обычную (необобщенную) квадратную решетку [5] с температурными зависимостями энтропии и теплоемкостью, указанных на рис. 5. Те же температурные зависимости дают случаи, отмеченные номерами 4), 6), 7), 10), 11) и 13). Эти случаи не приводят к фрустрациям (спины на квадратной решетке можно расположить таким образом, чтобы удовлетворить всем обменным взаимодействиям).

Фрустрацию можно получить, если положить одно из взаимодействий антиферромагнитным, а остальные ферромагнитными (или, наоборот, одно из взаимодействий ферромагнитное, а другие антиферромагнитные). Не важно, какое взаимодействие будет антиферромагнитным (или, наоборот, ферромагнитным). К таким вариантам относятся оставшиеся случаи из списка: 2), 3), 5), 8), 9), 12), 14) и 15).

При таком выборе знаков обменных взаимодействий спины на квадратной решетке уже не могут удовлетворить всем взаимодействиям, возникает фрустрация, а энтропия при стремлении температуры к нулю оказывается не равной нулю (рис. 6а), а теплоемкость вместо острого онзагеровского пика принимает куполообразный вид (рис. 6б). Значение нуль-температурной энтропии найдено по формуле

$$S = \ln \lambda + T \frac{d}{dT} \ln \lambda$$

в виде двукратного определенного интеграла:

$$\frac{1}{16\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln(4 \sin \beta \cdot \sin \alpha + 4) d\alpha d\beta = 0.29156 \dots$$

С помощью несложных алгебраических выкладок оно выражается в виде частного двух математических констант

$$S_{T \rightarrow 0} = \frac{G}{\pi} = 0.29156 \dots, \quad (18)$$

где G — постоянная Каталана, важная константа в теории чисел и в комбинаторике. Любопытно отметить, что в противоположном (полностью ферромагнитном) случае, когда $J_1 = J_2 = J_3 = J_4 = 1$, величина главного собственного значения трансформатрицы Крамерса–Ваннье в точке фазового перехода выражается через те же две константы, что и

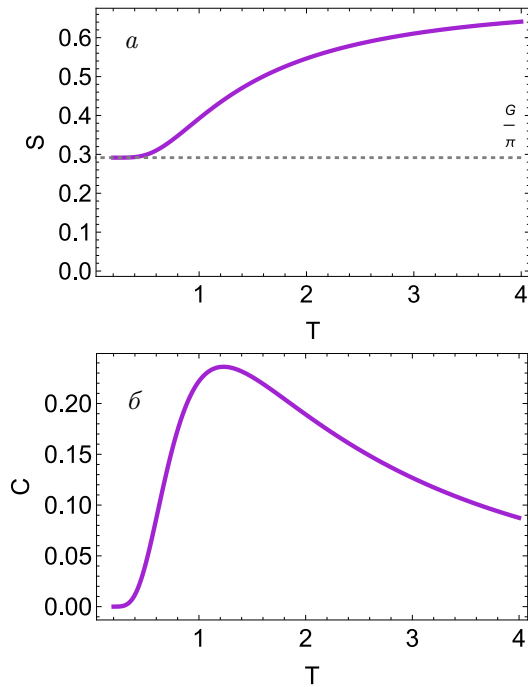


Рис. 6. Температурные зависимости энтропии (а) и теплоемкости (б) обобщенной квадратной решетки с одним ферромагнитным (или антиферромагнитным) взаимодействием и тремя антиферромагнитными (или ферромагнитными) взаимодействиями. Горизонтальной линией обозначена нуль-температурная энтропия $S_{T \rightarrow 0} = G/\pi \approx 0.29156$, где G — постоянная Каталана

нуль-температурная энтропия в антиферромагнитном случае, а именно:

$$\lambda = \sqrt{2} \exp\left\{\left(\frac{2G}{\pi}\right)\right\}, \quad (19)$$

и равна 2.5337373.

Исключим одно из четырех обменных взаимодействий, положив $J_4 = 0$, при этом сохраняется условие $|J_1| = |J_2| = |J_3| = 1$. В таком случае образуются восемь вариантов выбора знаков взаимодействий между спинами:

- | | |
|-------------|-------------|
| 1) + + + 0, | 5) - + + 0, |
| 2) + + - 0, | 6) - + - 0, |
| 3) + - + 0, | 7) - - + 0, |
| 4) + - - 0, | 8) - - - 0. |

В результате исключения одного из взаимодействий на обобщенной квадратной решетке получается гексагональная решетка, что проиллюстрировано на рис. 7. Действительно, при исключении, например взаимодействия J_4 , формируется решетка типа «кирпичной кладки», которая топологически

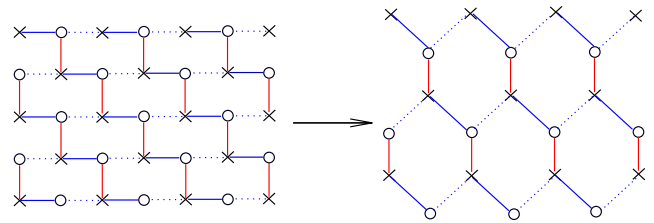


Рис. 7. Превращение при $J_4 = 0$ обобщенной квадратной решетки в так называемую кирпичную кладку, топологически эквивалентную гексагональной решетке

эквивалентна гексагональной решетке. Аналогичное преобразование возможно для любого из четырех взаимодействий на обобщенной квадратной решетке, что приводит к гексагональной решетке. Таким образом, количество вариантов выбора знаков взаимодействий ограничивается восемью.

При исследовании различных вариантов выбора знаков взаимодействий установлено, что все они приводят к одинаковым температурным зависимостям энтропии и теплоемкости, представленным на рис. 8. Это объясняется тем, что, как известно [17], гексагональная решетка при любом выборе знаков взаимодействий не обладает фрустрациями.

При исключении сразу двух обменных взаимодействий на обобщенной квадратной решетке получается линейная цепочка, а трех из четырех обменных взаимодействий, например $J_2 = J_3 = J_4 = 0$, получается решетка димеров, которая при любом знаке (но отличном от нуля) оставшегося обменного взаимодействия является фрустрированной. В случае димеров нуль-температурная энтропия принимает значение $\ln 2/2$, что отражает наличие вырожденного основного состояния и остаточной энтропии.

В случае, когда все взаимодействия равны нулю, $J_1 = J_2 = J_3 = J_4 = 0$, энтропия независимо от температуры принимает постоянное значение $\ln 2$. При рассмотрении энтропии на один узел решетки S/N данный результат отражает, что каждый спин может находиться в одном из двух состояний (спин вверх или спин вниз). Отсутствие взаимодействий между спинами приводит к их свободной ориентации, что соответствует парамагнитному состоянию системы. Такое состояние достигается при стремлении температуры к бесконечности.

Вернемся к рассмотрению четырех ненулевых обменных взаимодействий на обобщенной квадратной решетке, а именно к случаю $J_1 = -1, J_2 = -1, J_3 = -1, J_4 = 1$ (или $J_1 = 1, J_2 = 1, J_3 = 1, J_4 = -1$). Уже известно,

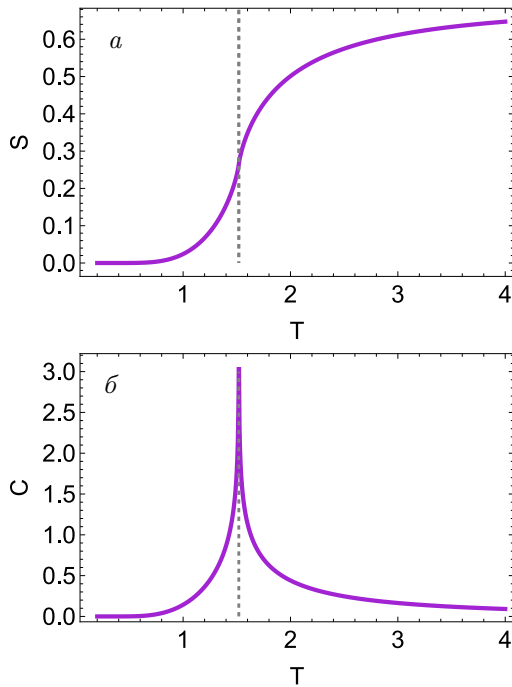


Рис. 8. Температурные зависимости энтропии (а) и теплоемкости (б) обобщенной квадратной решетки с тремя ненулевыми и одним нулевым взаимодействиями (гексагональная решетка). Вертикальной линией обозначена температура перехода гексагональной решетки $T_c = 2/\ln(2 + \sqrt{3}) \approx 1.5187$

что при таком выборе параметров обменного взаимодействия решетка будет фрустрированной с нуль-температурной энтропией равной G/π (рис. 6).

При увеличении ферромагнитного значения J_4 при сохранении остальных взаимодействий неизменными получаемые температурные зависимости энтропии для ряда значений обменных взаимодействий проиллюстрированы на рис. 9. На этих графиках видно, что при $J_4 > 1$ все кривые энтропии сходятся к одному и тому же значению при стремлении температуры к нулю ($T \rightarrow 0$).

Установлено, что нуль-температурное значение для энтропий, когда $J_4 > 1$, выражается в виде

$$S_{T \rightarrow 0} = \frac{1}{2\pi} \text{Cl}_2\left(\frac{\pi}{3}\right) = 0.16153\dots, \quad (20)$$

где $\text{Cl}_2(\varphi)$ — функция Клаузена — трансцендентная специальная функция одной переменной, которая связана с мнимой частью дилогарифма Li_2

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

Кроме того, функция Клаузена может быть записана через различные интегральные представле-

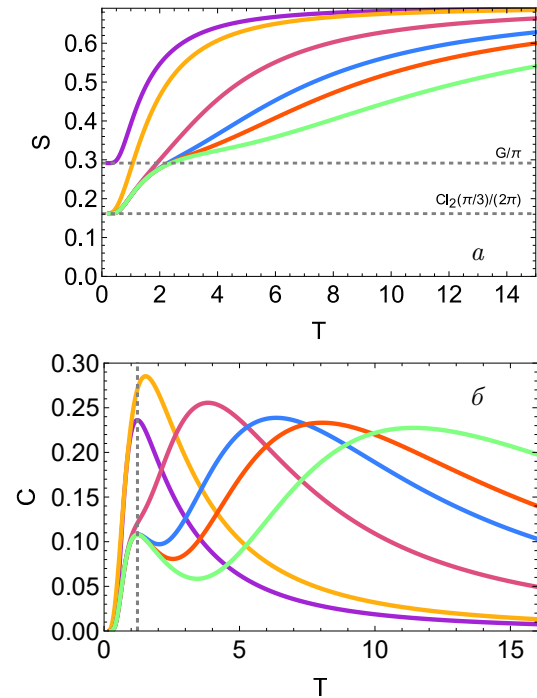


Рис. 9. Температурные зависимости энтропии (а) и теплоемкости (б) обобщенной квадратной решетки при различных параметрах обменных взаимодействий: фиолетовая кривая — $J_1 = -1, J_2 = -1, J_3 = -1, J_4 = 1$, желтая кривая — $J_1 = -1, J_2 = -1, J_3 = -1, J_4 = 2$, розовая кривая — $J_1 = -1, J_2 = -1, J_3 = -1, J_4 = 5$, синяя кривая — $J_1 = -1, J_2 = -1, J_3 = -1, J_4 = 8$, красная кривая — $J_1 = -1, J_2 = -1, J_3 = -1, J_4 = 10$, зеленая кривая — $J_1 = -1, J_2 = -1, J_3 = -1, J_4 = 14$. Горизонтальными линиями обозначены значения нуль-температурных энтропий: $S_{T \rightarrow 0} = G/\pi \approx 0.29156$ (G — постоянная Каталана) и $S_{T \rightarrow 0} = \frac{1}{2\pi} \text{Cl}_2(\frac{\pi}{3}) \approx 0.16153$ ($\text{Cl}_2(\varphi)$ — функция Клаузена). Вертикальной линией обозначено положение дополнительного гладкого пика ($T_{peak} \approx 1.232$)

ния, которые можно найти в математическом справочниках и статьях (например, [37, 38]).

Интересно, что постоянную Каталана так же можно выразить через функцию Клаузена [38]

$$G = \text{Cl}_2\left(\frac{\pi}{2}\right) = \text{Im}(\text{Li}_2(i)),$$

поэтому фрустрационное значение энтропии в выражении (18) может быть переписано в виде

$$\frac{G}{\pi} = \frac{1}{\pi} \text{Cl}_2\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0.29156\dots \quad (21)$$

Кроме того, при увеличении ферромагнитного значения J_4 наблюдается необычная особенность в поведении теплоемкости, представленная на рис. 9.

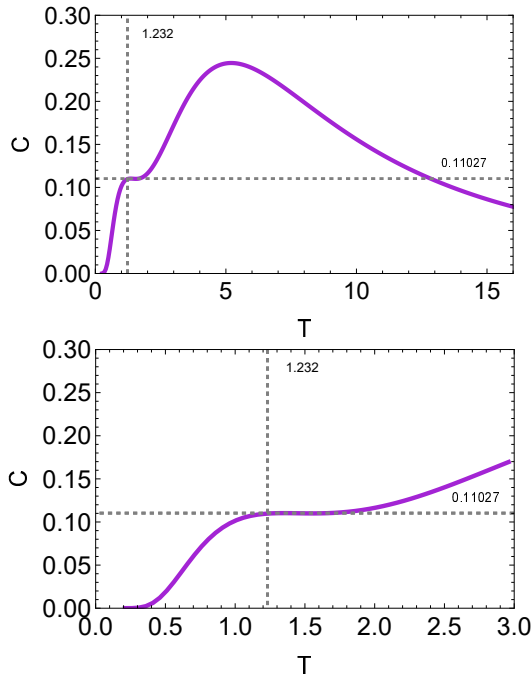


Рис. 10. Теплоемкость обобщенной квадратной решетки как функция температуры при $J_1 = -1$, $J_2 = -1$, $J_3 = -1$, $J_4 = 6.63$

До значения обменного взаимодействия J_4 , равно-го пяти, кривая теплоемкости одnogорбая, т.е. наблюдается только один плавный максимум (розовая кривая на рис. 9б). Начиная с обменного взаимодействия $J_4 = 8$, кривая теплоемкости становится двугорбой, а именно, возникает дополнительный гладкий пик теплоемкости, тогда как основной широкий пик одновременно растягивается и смещается вправо по температурной оси. Кроме того, детальное исследование показывает, что этот переход от одnogорбого поведения теплоемкости к двугорбому происходит при $J_4 = 6.63$, причем при этом значении взаимодействия J_4 на кривой теплоемкости наблюдается своеобразное плато (см. рис. 10). Положение дополнительного пика остается практически неизменным при дальнейшем увеличении J_4 , в то время как основной пик теплоемкости продолжает смещаться. Что касается энтропий, то их нуль-температурные значения при $J_4 > 1$ равны одному и тому же значению $\frac{1}{2\pi}\text{Cl}_2(\frac{\pi}{3})$. Аналогичные рассуждения применимы и для случая $J_1 = 1$, $J_2 = 1$, $J_3 = 1$ при антиферромагнитном увеличении J_4 .

Наблюдаемое поведение теплоемкости и энтропии при увеличении ферромагнитного взаимодействия J_4 во фрустрированной системе представляет собой нетипичное явление. Появление дополнительного стабильного пика теплоемкости вместе с

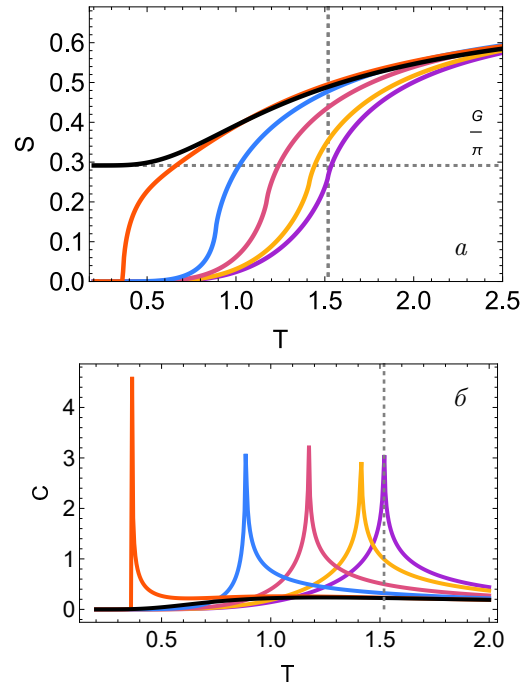


Рис. 11. Температурные зависимости энтропии (а) и теплоемкости (б) обобщенной квадратной решетки при различных параметрах обменных взаимодействий: фиолетовая кривая — $J_1 = -1$, $J_2 = -1$, $J_3 = -1$, $J_4 = 0$, желтая кривая — $J_1 = -1$, $J_2 = -1$, $J_3 = -1$, $J_4 = 0.1$, розовая кривая — $J_1 = -1$, $J_2 = -1$, $J_3 = -1$, $J_4 = 0.3$, синяя кривая — $J_1 = -1$, $J_2 = -1$, $J_3 = -1$, $J_4 = 0.5$, красная кривая — $J_1 = -1$, $J_2 = -1$, $J_3 = -1$, $J_4 = 0.8$, черная кривая — $J_1 = -1$, $J_2 = -1$, $J_3 = -1$, $J_4 = 1$. Горизонтальной линией обозначено значение нуль-температурной энтропии: $S_{T \rightarrow 0} = G/\pi \approx 0.29156$, где G — постоянная Каталана, вертикальной линией обозначена точка перехода для гексагональной решетки $T_c = 2/\ln(2 + \sqrt{3}) \approx 1.5187$

изменением положения основного пика указывает на сложную перестройку низкотемпературного состояния и возможное возникновение новых корреляционных или квазипериодических структур в системе. Чтобы понять природу и механизм данной перестройки, требуется более глубокий теоретический и численный анализ. Такие исследования могут пролить свет на новые физические эффекты во фрустрированных магнитных системах и расширить представления о термодинамическом поведении моделей с многокомпонентными обменными взаимодействиями.

Рассмотрим поведение системы при приближении к точке фрустрации с обменными взаимодействиями $J_1 = -1$, $J_2 = -1$, $J_3 = -1$, $J_4 = 1$ (черная кривая на рис. 11). Исходно принимаются параметры $J_1 = -1$, $J_2 = -1$, $J_3 = -1$, $J_4 = 0$, что соответствует случаю гексагональной решетки (см. рис. 8).

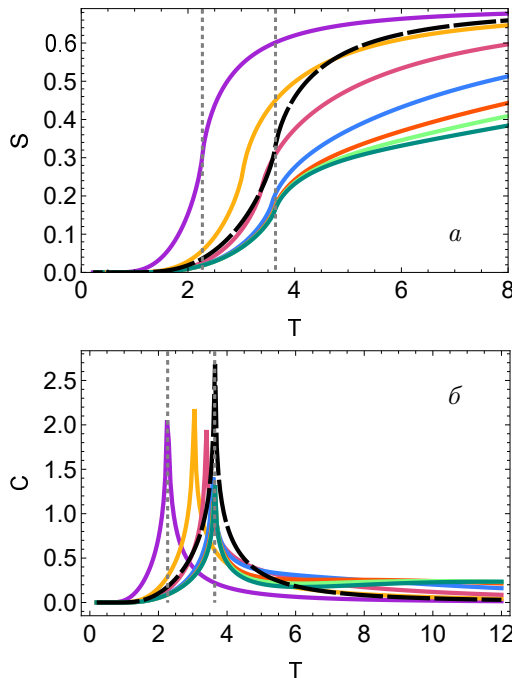


Рис. 12. Температурные зависимости энтропии (а) и теплоемкости (б) обобщенной квадратной решетки при различных параметрах обменных взаимодействий: фиолетовая кривая — $J_1 = 1, J_2 = 1, J_3 = 1, J_4 = 1$, желтая кривая — $J_1 = 1, J_2 = 1, J_3 = 1, J_4 = 3$, розовая кривая — $J_1 = 1, J_2 = 1, J_3 = 1, J_4 = 5$, синяя кривая — $J_1 = 1, J_2 = 1, J_3 = 1, J_4 = 8$, красная кривая — $J_1 = 1, J_2 = 1, J_3 = 1, J_4 = 11$, зеленая кривая — $J_1 = 1, J_2 = 1, J_3 = 1, J_4 = 13$, темно-зеленая кривая — $J_1 = 1, J_2 = 1, J_3 = 1, J_4 = 15$. Вертикальными линиями обозначены значения точек перехода для квадратной и треугольной решеток соответственно: $T_c = 2/\ln(1 + \sqrt{2}) \approx 2.2692$, $T_c = 4/\ln 3 \approx 3.64096$. Черной штриховой линией приведены температурные зависимости энтропии и теплоемкости треугольной решетки с параметрами $J_1 = J_2 = J_3 = 1$

Энтропия и теплоемкость для этой решетки представлены фиолетовой кривой на рис. 11а и 11б соответственно. При постепенном увеличении ферромагнитного параметра J_4 от 0 до 1 на основе рис. 11а,б делаются следующие выводы. Во-первых, зависимости теплоемкости имеют форму λ -образных пиков, что свидетельствует о наличии фазовых переходов в точках скачков теплоемкости. Это означает отсутствие бесконечного числа вырожденных конфигураций с одинаковой энергией, т. е. фрустрация отсутствует. Во-вторых, при приближении к точке фрустрации $J_1 = -1, J_2 = -1, J_3 = -1, J_4 = 1$ (черная кривая на рис. 11а) наблюдается смещение пиков теплоемкости влево по температурной оси с характерным ростом крутизны левой части теплоемкости.

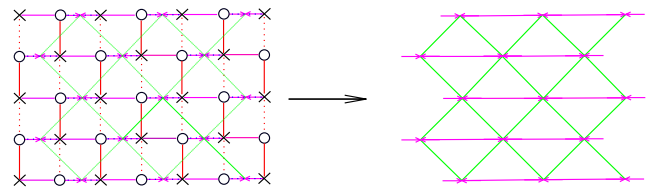


Рис. 13. Преобразование обобщенной квадратной решетки к треугольной при устремлении одного из обменных взаимодействий к бесконечности

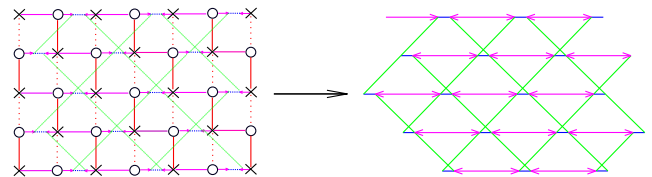


Рис. 14. Получение искаженной решетки кагоме из обобщенной модели Изинга при конечном увеличении одного из параметров обменного взаимодействия

Далее продемонстрирован еще один частный случай обобщенной квадратной решетки с двумя трансляциями. Пусть параметры обменных взаимодействий равны $J_1 = J_2 = J_3 = J_4 = 1$ (фиолетовая кривая на рис. 12). Этот случай соответствует классической онзагеровской квадратной решетке с температурой фазового перехода $T_c = 2/\ln(1 + \sqrt{2})$ [3, 4]. При увеличении ферромагнитного параметра J_4 значения энтропии и теплоемкости сходятся к определенной точке перехода, что иллюстрируют рис. 12а,б. Эта точка соответствует температуре фазового перехода треугольной решетки $T_c = 4/\ln 3$ [16]. Треугольная решетка в данном случае может быть получена в пределе, когда одно из взаимодействий стремится к бесконечности. Таким образом, обобщенная квадратная решетка сводится к треугольной решетке. Подтверждением данного факта служит рис. 13.

При рассмотрении обобщенной квадратной решетки с параметрами $J_1 = J_2 = J_3 = -1$ и $J_4 > 0$ наблюдалось аналогичное поведение: увеличение значения параметра J_4 приводило к трансформации обобщенной квадратной решетки в другую структуру. Однако на практике параметр J_4 можно увеличить лишь до некоторого конечного значения, а не до бесконечности. В результате система не переходит в треугольную решетку, а формируется топологически искаженная решетка кагоме (см. рис. 14). Такая решетка характеризуется наличием шестиугольников и треугольников различных размеров, в отличие от классической решетки кагоме, где все треугольники имеют одинаковый размер.

Следует отметить, что на данной решетке наблюдается фрустрация при параметрах $J_1 = J_2 = J_3 = -1$, $J_4 = 1$. При дальнейшем увеличении J_4 состояние фрустрации сохраняется, при этом все значения нуль-температурной энтропии совпадают и равны $\frac{1}{2\pi} \text{Cl}_2(\frac{\pi}{3})$, а теплоемкость демонстрирует дополнительный гладкий пик (см. рис. 9б).

Кратко резюмируя изложенные фрустрационные свойства рассмотренной модели на обобщенной квадратной решетке, приведем фазовую диаграмму на рис. 15 при обменных взаимодействиях $J_1 = J_2 = J_3 = -1$, а J_4 — пробегаящем значения от -10 до $+10$ по оси абсцисс. На рисунке видно, что главной точкой, вокруг которой происходят все события, является значение $J_4 = +1$, при котором фрустрации максимальны (остаточная энтропия равна 0.2916). При сколь угодно малом отклонении от этой точки вправо остаточная энтропия скачком падает до 0.1616 и дальше не меняется, причем температуры фазового перехода отсутствуют. При сколь угодно малом отклонении от этой точки влево остаточная энтропия скачком падает до нуля, а температуры фазового перехода растут от нуля и асимптотически до температуры перехода, соответствующей треугольной решетке, проходя при $J_4 = 0$ через температуру перехода, соответствующую гексагональной решетке.

4. ЗАМОЩЕНИЕ ШАХМАТНОЙ РЕШЕТКИ ПЛИТКАМИ ДОМИНО

Помимо классических подходов к решению двумерной модели Изинга, таких как точное аналитическое решение Онзагера и комбинаторные методы, существует альтернативный и весьма мощный метод, известный как метод димеров. Этот метод был существенно развит в работах Кастелайна [39–41], Темперли [42] и Фишера [43].

Димер — это ребро графа, которое покрывает ровно две соседние вершины. Задача подсчета числа димерных покрытий графа, т. е. разбиений множества вершин графа на пары, связанных ребрами, является классической в комбинаторике и статистической механике. Она тесно связана с изучением различных моделей взаимодействующих систем.

Идея применения димерных покрытий к решению модели Изинга возникла из наблюдения, что конфигурации спинов в модели Изинга можно однозначно сопоставить с определенными димерными покрытиями специально построенного графа. Для

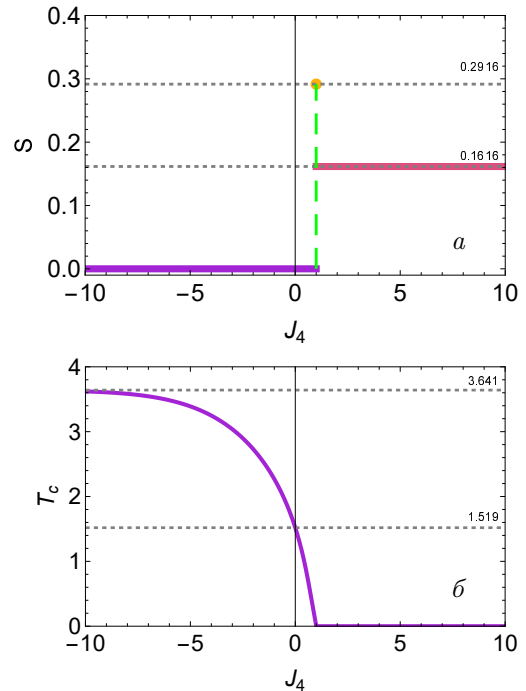


Рис. 15. Зависимости нуль-температурной энтропии (а) и температуры перехода (б) обобщенной квадратной решетки при $J_1 = J_2 = J_3 = -1$ от величины обменного взаимодействия J_4

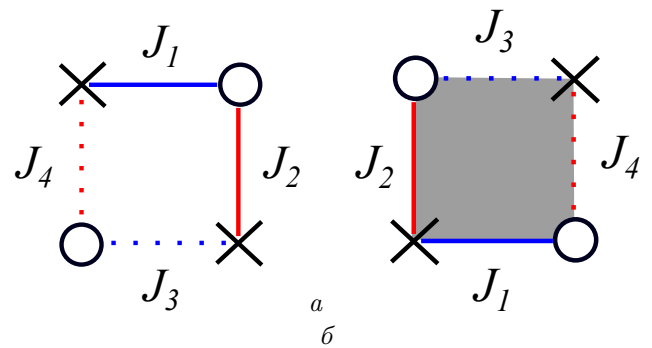


Рис. 16. Два вида ячеек на обобщенной квадратной решетке

двумерной модели Изинга на квадратной решетке существует соответствие между конфигурациями спинов и димерными покрытиями некоторого связанного графа, что позволяет свести задачу вычисления статистической суммы модели Изинга к задаче подсчета числа димерных покрытий.

В начале 1960-х годов Кастелайн разработал метод вычисления числа димерных покрытий плоских графов, введя понятие так называемой ориентации Кастелайна. Эта ориентация представляет собой направление ребер графа, обладающее особым свой-

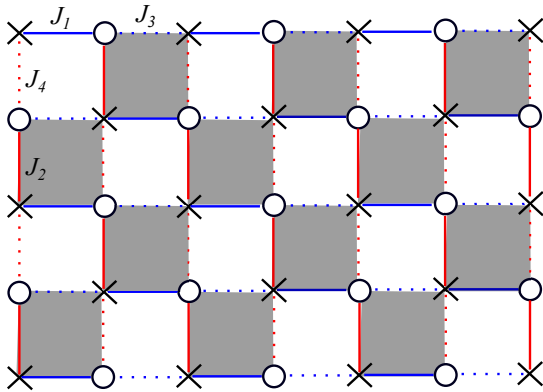


Рис. 17. Шахматная решетка

ством: для каждого цикла нечетной длины число ребер, ориентированных в определенном направлении, должно быть нечетным. Благодаря такой ориентации задача подсчета числа димерных покрытий сводится к вычислению определителя специально построенной матрицы смежности графа, что значительно упрощает вычисления.

Независимо от Кастелайна Фишер совместно с Темперли разработали методы, позволяющие выразить статистическую сумму модели Изинга через задачи подсчета димерных покрытий. Фишер предложил конструкцию, которая переводит исходную задачу Изинга в задачу димеров на так называемом расширенном графе (Fisher graph). В этом графе вершины и ребра модифицированы таким образом, чтобы сохранить всю информацию об исходной модели, что дает возможность применить методы подсчета димерных покрытий к вычислению статистической суммы.

Таким образом, метод димеров является еще одним способом получения точного аналитического решения двумерной модели Изинга.

Важным связным понятием является задача замощения квадратной решетки плитками домино (domino tiling). Эта задача формулируется как поиск числа всех возможных способов покрытия квадратной решетки плитками размером 2×1 , без наложений и пропусков. Эта задача эквивалентна подсчету совершенных паросочетаний на графе, где каждая вершина соответствует ячейке решетки, а ребро — смежности ячеек. Данная задача была решена в работах [39, 42].

Из этих работ можно выделить два ключевых результата. Во-первых, была получена формула Ка-

стелайна для подсчета числа замощений квадратной решетки плитками домино (или числа совершенных паросочетаний графа) [39]. Эта формула корректно работает для решеток с четным числом квадратов по обеим сторонам (m и n). При нечетных значениях m или n число замощений равно нулю, что интуитивно понятно — решетку с нечетным количеством ячеек невозможно полностью покрыть плитками размером 2×1 . Во-вторых, было получено асимптотическое выражение для числа замощений при стремлении размеров решетки к бесконечности. Поскольку абсолютное количество замощений экспоненциально растет с увеличением площади решетки, полезнее рассматривать количество замощений на одну плитку домино (или один димер). Это значение оказалось равным $\exp(2G/\pi)$. Натуральный логарифм этого выражения, равный $2G/\pi$, является энтропией, приходящейся на одну плитку домино (или один димер).

Возвращаясь к настоящей работе, следует отметить, что обобщенная квадратная решетка с двумя трансляциями по горизонтали и вертикали совпадает с так называемой шахматной решеткой. Это легко увидеть, если оставить один тип ячеек обобщенной квадратной решетки (см. рис. 1) незакрашенными (рис. 16а), а другой — закрашенными (рис. 16б). В результате получится решетка, показанная на рис. 17.

Фактически, в упомянутых выше работах рассматривалась именно шахматная решетка. При этом каждый димер в решетке покрывает пару соседних узлов разных типов — в настоящей работе эти два типа узлов обозначены кружком и крестом (см. рис. 2). Аналогично, при замощении квадратной решетки плитками домино каждая плитка покрывает две соседние, но различные ячейки, изображенные на рис. 16.

В рамках проведенного исследования получено значение нуль-температурной энтропии на один спин обобщенной квадратной решетки с двумя трансляциями, равное G/π . Кроме того, обнаружено еще одно значение нуль-температурной энтропии, равное $1/(2\pi)\text{Cl}_2(\pi/3)$, что ровно в два раза меньше значения $\text{Cl}_2(\pi/3)/\pi = 0.3230\dots$ для треугольной решетки [16].

Все эти факты свидетельствуют о связи между значениями фрустрационной энтропии в модели Изинга и комбинаторными задачами, такими как димерные покрытия и замощение плитками домино. Однако данный тезис требует дальнейшей проверки и более тщательного теоретического обоснования.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе выведено точное аналитическое решение обобщенной модели Изинга с двумя трансляциями в горизонтальном и вертикальном направлениях на квадратной решетке комбинаторным методом Вдовиченко – Фейнмана.

Анализ физических характеристик модели показал богатую картину поведения, включающую как классические случаи без фрустраций, так и разнообразные фрустрированные состояния с остаточной энтропией при нулевой температуре. Важным результатом является выявление двух фундаментальных значений нуль-температурной энтропии в антиферромагнетике, связанных со специальными математическими константами — постоянной Каталана и функцией Клаузена, а также выражения для свободной энергии Гельмгольца в ферромагнетике в точке фазового перехода, также связанного с постоянной Каталана. Эти значения отражают связь фрустраций в модели Изинга с комбинаторными задачами, такими как замощение решетки плитками домино.

Кроме того, исследование продемонстрировало, что при варьировании знаков и величин обменных взаимодействий можно наблюдать новое свойство фрустрированных спиновых систем, а именно, появление дополнительного пика теплоемкости, причину которого еще предстоит выяснить. Также варьирование знаков и величин обменных взаимодействий позволяет трансформировать структуру обобщенной решетки вплоть до перехода к топологически различным решеткам (например к треугольной или искаженной решетке кагоме). Это подчеркивает универсальность и гибкость обобщенной модели Изинга для описания широкого спектра магнитных и фрустрированных систем.

Наконец, установлена связь между фрустрационной энтропией обобщенной модели Изинга и классической задачей подсчета димерных покрытий (замощений плитками домино), что открывает перспективы для дальнейших исследований, объединяющих методы статистической физики, комбинаторики и теории графов.

В заключение следует сказать, что обобщенная модель Изинга позволяет исследовать как новые решетки, так и решетки, которые давно известны, но до сих пор привлекают внимание ученых.

ЛИТЕРАТУРА

1. E. Ising, Z. Phys. **21**, 253 (1925).
2. R. Peierls, Proc. Cambridge Phil. Soc. **32**, 477 (1936).
3. H. A. Kramers and G. H. Wannier, Phys. Rev. **60**, 252 (1941).
4. H. A. Kramers and G. H. Wannier, Phys. Rev. **60**, 263 (1941).
5. L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
6. M. Kac and J. C. Ward, Phys. Rev. **88**, 1332 (1952).
7. R. B. Potts and J. C. Ward, Prog. Theor. Phys. **13**, 38 (1955).
8. C. A. Hurst and H. S. Green, J. Chem. Phys. **33**, 1059 (1960).
9. Н. В. Вдовиченко, ЖЭТФ **47**, 715 (1964).
10. Н. В. Вдовиченко, ЖЭТФ **48**, 526 (1965).
11. R. P. Feynman, *Statistical Mechanics. A Set of Lectures*, Addison-Wesley, Reading, MA (1972).
12. S. Samuel, J. Math. Phys. **21**, 2015 (1980).
13. В. Н. Плечко, ТМФ **64**, 150 (1985).
14. С. Н. Бергелес, ЖЭТФ **135**, 820 (2009).
15. B. Grünbaum and G. C. Shephard, *Tilings and Patterns*, Freeman, New York (1987).
16. G. H. Wannier, Phys. Rev. **79**, 357 (1950).
17. R. M. F. Houtappel, Prog. Theor. Phys. **16**, 425 (1950).
18. K. Kanô and S. Naya, Prog. Theor. Phys. **10**, 158 (1953).
19. K. Y. Lin and W. J. Ma, J. Phys. A **16**, 3895, (1983).
20. K. Y. Lin and W. N. Huang, Aust. J. Phys. **38**, 227, (1985).
21. В. Г. Вакс, А. И. Ларкин, Ю. Н. Овчинников, ЖЭТФ **49**, 1180 (1965).
22. V. Urumov, J. Phys. A **35**, 7317 (2002).
23. M. Holzer, Phys. Rev. B **42**, 10570, (1990).
24. K. Y. Lin and S. C. Wang, Phys. Lett. A **128**, (1988).
25. J. Oitmaa and M. Keppert, J. Phys. A **35**, L219 (2002).
26. J. Strečka and L. Čanová, Acta Phys. Pol. A **113**, 457 (2008).

27. N. C. Chao, F. J. Lee, and K. Y. Lin, *Int. J. Mod. Phys. B* **4**, 113 (1990).
28. Y. L. Loh, D. X. Yao, and E. W. Carlson, *Phys. Rev. B* **77**, 134402 (2008).
29. T. Chikyu and M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **78**, 1242 (1987).
30. T. Morita, *J. Phys. A* **19**, 1701 (1986).
31. F. Y. Wu and K. Y. Lin, *J. Phys. A* **20**, 5737 (1987).
32. I. Syozi, *Transformation of Ising Models*, in *Phase Transitions and Critical Phenomena, Vol. 1. Exact Results*, ed. by C. Domb and M. S. Green, Acad. Press, London, (1972), p. 270.
33. T. Utiyama, *Prog. Theor. Phys.* **6**, 907 (1951).
34. B. L. van der Waerden, *Z. Phys.* **118**, 473 (1941).
35. B. Kaufman and L. Onsager, *Phys. Rev.* **76**, 1244, (1949).
36. Е. С. Цуварев, Ф. А. Кассан-Оглы, *ЖЭТФ* **160**, 232 (2021).
37. M. Abramowitz and A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, Applied Mathematics Series, Dover Publications, New York (1972).
38. Van E. Wood, *Math. Comp.* **22**, 883 (1968).
39. P. W. Kasteleyn, *Physica* **27**, 1209 (1961).
40. P. W. Kasteleyn, *J. Math. Phys.* **4**, 287 (1963).
41. P. W. Kasteleyn, *Physica* **29**, 1329 (1963).
42. H. N. V. Temperley and M. E. Fisher, *Philos. Mag.* **6**, 1061 (1961).
43. M. E. Fisher, *J. Math. Phys.* **7**, 1776 (1966).