

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Юрій Ігорович Дубленич

ОСНОВНІ СТАНИ МОДЕЛЕЙ ҐРАТКОВОГО ГАЗУ НА ТРИКУТНІЙ І ШЕСТИКУТНІЙ ҐРАТКАХ: ЧОРТОВА СХОДИНКА І КВАЗИКРИСТАЛИ

Роботу отримано 27 грудня 2008 р.

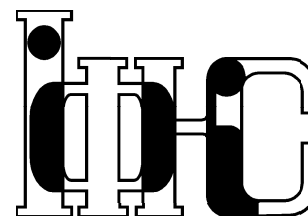
Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділ квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-08-22U

Ю.І.Дубленич

ОСНОВНІ СТАНИ МОДЕЛЕЙ ҐРАТКОВОГО ГАЗУ НА
ТРИКУТНІЙ І ШЕСТИКУТНІЙ ҐРАТКАХ: ЧОРТОВА
СХОДИНКА ТА КВАЗИКРИСТАЛИ

ЛЬВІВ

УДК: 537.611.2, 538.971

PACS: 05.50.+q, 05.70.Fh, 75.10.Hk, 68.43.De, 68.43.Fg, 61.44.Br

Основні стани моделей ґраткового газу на трикутній і шестикутній ґратках: чортова сходи́нка і квазикристали

Ю.І. Дубленич

Анотація. Запропоновано метод пошуку основних станів моделей ґраткового газу (або Ізингових моделей). Метод дає змогу знайти усі типи основних станів, у тому числі хаотизовані, а також впорядковані неперіодичні, й ідентифікувати фазові переходи першого роду між ними. За допомогою цього методу ми довели існування нескінченної послідовності фаз за нульової температури (так званої "чортової сходи́нки") в моделі ґраткового газу на трикутній ґратці зі взаємодією перших, других і третіх сусідів і дослідили вплив на цю послідовність парних взаємодій аж до 19-го рангу включно. Це, здається, другий приклад нультемпературної чортової сходи́нки в моделях ґраткового газу з одним сортом частинок.

Ground-states of lattice gas models on the triangular and honeycomb lattices: devil's step and quasicrystals

Yu.I. Dublenych

Abstract. We propose a method for determination of the ground states of lattice gas (or Ising) models. The method permits to find all types of ground states, including chaotic and ordered-but-aperiodic ones, and to identify the first order phase transitions between them. Using this method we prove the existence of an infinite series of ground states (the so-called "devil's step") in the lattice gas model on the triangular lattice with up to the third nearest neighbor interactions and we study the effect of the interactions up to the 19-th neighbors on this series. To our best knowledge, it is the second example of the devil's step at zero temperature in the lattice gas models with one kind of particles.

Подається в Physical Review B
Submitted to Physical Review B

© Інститут фізики конденсованих систем 2008
Institute for Condensed Matter Physics 2008

1. Вступ

Починаючи зі знаменитої роботи Ванье [1], моделі ґраткового газу, зокрема, на трикутній і шестикутній ґратках, (або еквівалентні їм Ізингові моделі) вивчали дуже інтенсивно й різноманітними методами. Широкий інтерес до цих моделей був зумовлений тим, що вони описують низку фізичних систем і явищ, зокрема, адсорбцію частинок на поверхні кристалів, а також систему частинок, впроваджених в міжатомні пустоти деяких сполук (так звані інтеркальовані кристали). Багато робіт було присвячено дослідженню основних станів, які дають уявлення про низькотемпературну поведінку моделей. Основні стани найпростішої моделі Ізинга на трикутній ґратці (зі взаємодією найближчих сусідів і без поля) дослідив ще Ванье. Однак інтенсивне вивчення основних станів складних моделей ґраткового газу почалося аж після того, як у 1966 році Канаморі запропонував метод геометричних нерівностей [2]. Після того було запропоновано й інші методи, деякі з яких виникли у зв'язку з проблемою пошуку основних станів квантової моделі Фалікова-Кімбала. Та хоча з часу появи піонерської роботи Канаморі минуло більше сорока років, проте ефективного алгоритму пошуку основних станів моделей ґраткового газу немає й досі.

Нещодавно в журналі "Nature" було опубліковано роботу, в якій йдеться про експерименти над системою нового типу — пожолоблених моношарах немагнітних колоїдних частинок [3]. Показано, що ця система в багатьох аспектах описується моделлю Ізинга на трикутній ґратці з антиферромагнетними взаємодіями, можна навіть сказати, візуалізує її. В роботі, зокрема, досліджено основні стани такої системи колоїдних частинок. Автори спостерігали утворення цікавих стрічкових і зигзагуватих структур. Ця робота ще раз підкреслює важливість розробки ефективних методів пошуку основних станів моделей Ізинга або еквівалентних їм моделей ґраткового газу.

Значну частину нашої роботи буде присвячено дослідженню основних станів моделі ґраткового газу на трикутній ґратці зі взаємодією перших і других сусідів. Це може здатися дивним, бо цю проблему розглядали вже не в одній роботі. Вперше основні стани такої моделі обчислив Меткаф у 1974 році [4]. За допомогою методу Монте Карло він знайшов шість упорядкованих структур. У цьому ж році їх строго визначили Кабурагі й Канаморі, використавши свій метод геометричних нерівностей [5]. Вони виявили ще одну структуру, яку Меткаф упустив. У 1986 році Брандт і Штольце за допомогою методу, подібного до методу геометричних нерівностей Ка-

наморі, повторили результати попередніх досліджень [6]. Здавалось би, проблема основних станів цієї моделі давно вичерпана. Проте, як не парадоксально, це не так. У цій роботі ми розвиваємо й застосовуємо до цієї старої задачі підхід, значно загальніший від простого підходу, який ми використали в [7]. Запропонований метод дає цілком повну картину основних станів. Крім того, він дає змогу доволі легко ідентифікувати фазові переходи першого роду.

Використовуючи новий підхід, ми показуємо, що додаткова як завгодно мала відштовхувальна взаємодія третіх сусідів породжує нескінченну послідовність структур із як завгодно великою елементарною коміркою. Фазові переходи між ними є переходами першого роду. Це приклад так званої "чортової сходинки" за нульової температури. Поняття "(верхньої) чортової сходинки" як частини повних чортових сходів увів Фішер. А існування чортової сходинки за нульової температури вперше довів Канаморі. Він виявив аж три такі сходинки в моделі ґраткового газу зі взаємодією перших, других і третіх сусідів на шестикутній ґратці.

Проблема існування чортових сходок цікава, окрім іншого, ще й тим, що вона тісно пов'язана з проблемою так званої нескінченної адаптивності, яку в 1973 році експериментально виявив Андерсон в групі кристалічних матеріалів (див. [8] і цитовану там літературу). У 1978 році Кіттель припустив, що до нескінченної адаптивності призводять далекосяжні відштовхувальні взаємодії. Канаморі довів, що ранг таких взаємодій не мусить бути великий. Однак приклад Канаморі — це, здається, єдиний відомий на сьогодні приклад чортової сходинки за нульової температури в моделях ґраткового газу з одним сортом частинок.

Ми дослідили вплив на чортову сходинку парних взаємодій аж до дев'ятнадцятих сусідів включно і показали, що взаємодії одних рангів сприяють формуванню чортової сходинки лише у випадку відштовхування (як взаємодія третіх сусідів), інших — лише у випадку притягання, а ще інших — ні в одному, ні в другому випадку.

Наш метод дає змогу яскраво продемонструвати вплив топології ґратки на формування структур основного стану. Для цього ми розглянули основні стани моделі ґраткового газу ще на шестикутній ґратці зі взаємодією перших і других сусідів у випадку притягальної взаємодії перших сусідів і показали можливість формування упорядкованих структур без трансляційної симетрії — двовимірних квазикристалів, а також частково хаотизованих структур.

Будова статті така: у другому розділі на прикладі моделі ґраткового газу на трикутній ґратці зі взаємодією перших і других сусідів

описано метод пошуку основних станів; у третьому розділі розглянуто цю ж модель на шестикутній ґратці (лише у випадку притягальної взаємодії перших сусідів) й знайдено основні стани квазикристалічного типу; в четвертому розділі показано, як ідентифікувати фазові переходи першого роду між основними станами, й доведено існування чортової сходинки за нульової температури в моделі ґраткового газу на трикутній ґратці зі взаємодією перших, других і третіх сусідів; у п'ятому розділі досліджено вплив на чортову сходинку парної взаємодії аж до дев'ятнадцятого рангу і знайдено деякі необхідні умови існування чортової сходинки; в шостому розділі наведено найважливіші висновки.

2. Метод побудови основних станів

Метод пошуку основних станів пояснимо на прикладі моделі ґраткового газу на трикутній ґратці зі взаємодією перших і других сусідів. Ось Гамільтоніан цієї моделі:

$$H_{lg} = I_1 \sum_{nn} c_i c_j + I_2 \sum_{nnn} c_i c_j - \mu_{lg} \sum_i c_i. \quad (2.1)$$

Тут c_i — число заповнення i -го вузла ($c_i = 1$, якщо на вузлі є частинка, і $c_i = 0$, якщо вузол порожній); I_1 і I_2 — взаємодія перших і других сусідів, відповідно; μ_{lg} — хемічний потенціал частинок. nn і nnn означають, що підсумовування ведеться за першими і другими сусідами, відповідно.

Як відомо, ця модель математично еквівалентна спіновій моделі

$$H_I = J_1 \sum_{nn} \sigma_i \sigma_j + J_2 \sum_{nnn} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (2.2)$$

зі взаємодіями $J_1 = \frac{I_1}{4}$, $J_2 = \frac{I_2}{4}$ і зовнішнім полем $h = \frac{\mu_{lg}}{2} - 6(J_1 + J_2)$, де $\sigma_i = 2c_i - 1 = \pm 1$ — спінові змінні. Позаяк фазова діяграма останньої симетрична відносно інверсії поля $h \leftrightarrow -h$, то будуватимемо діяграми основного стану саме для неї, хоча задля більшої ясности говоритимемо на "мові частинок а не спінів.

Наш метод пошуку основних станів ґрунтується, окрім іншого, на тому, що вони однакові не лише для Гамільтоніанів (2.1) і (2.2), а й для цілої сім'ї Гамільтоніанів

$$H = V_1 \sum_{nn} (a_1 \sigma_i + b_1)(a_1 \sigma_j + b_1) + V_2 \sum_{nnn} (a_2 \sigma_i + b_2)(a_2 \sigma_j + b_2) - \mu \sum_i (a_0 \sigma_i + b_0), \quad (2.3)$$

у яких взаємодії і "хімічний потенціал" пов'язані з параметрами моделі (2.2) таким чином:

$$V_1 = \frac{J_1}{a_1^2}, \quad V_2 = \frac{J_2}{a_2^2}, \quad \mu = \frac{1}{a_0} (h + 6(a_1 b_1 V_1 + a_2 b_2 V_2)), \quad (2.4)$$

де $a_i \neq 0$ і b_i — довільні незалежні від спінових змінних величини.

Розгляньмо на трикутній ґратці чотиривузлові кластери у формі вітрячка. Гамільтоніан (2.3) можна записати у вигляді єдиної суми за усіма можливими такими вітрячками:

$$\begin{aligned} H = \sum_{\text{і}} H_i = \sum_{\text{і}} \left\{ \frac{V_1}{2} \sigma_{i0}^1 (\sigma_{i1}^1 + \sigma_{i2}^1 + \sigma_{i3}^1) \right. \\ \left. + \frac{V_2}{2} (\sigma_{i1}^2 \sigma_{i2}^2 + \sigma_{i2}^2 \sigma_{i3}^2 + \sigma_{i3}^2 \sigma_{i1}^2) \right. \\ \left. - \frac{\mu}{2(\alpha_1 + 3\alpha_2)} [\alpha_1 \sigma_{i0}^0 + \alpha_2 (\sigma_{i1}^0 + \sigma_{i2}^0 + \sigma_{i3}^0)] \right\}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

де запроваджено такі позначення:

$$\sigma_{ij}^k = a_k \sigma_{ij} + b_k, \quad k = 0, 1, 2. \quad (2.6)$$

Перший індекс при спінових змінних σ_{ij} позначає номер вітрячка- "господаря а другий — номер вузла в цьому вітрячку (центральный вузол — нульовий). Внесок кожного зв'язку між першими або другими сусідами враховується в цій сумі двічі, бо такий зв'язок входить у два вітрячки, — звідси й коефіцієнти $\frac{1}{2}$ у першому й другому членах. Внесок кожного вузла враховується вісім разів: два рази — як центрального і шість — як бічного. Ці внески можна брати з різними вагами, що й зроблено за допомогою довільних коефіцієнтів α_1 і α_2 ($\alpha_1 \neq -3\alpha_2$ й принаймні один з них відмінний від нуля). Зауважмо, що Гамільтоніан H не залежить від α_1 і α_2 , хоча локальний Гамільтоніан H_i від них залежить. Як буде показано далі, запис Гамільтоніану в такому вигляді дає змогу побудувати повну діаграму основних станів для випадку $J_1 < 0$.

Знаходження основних станів ґрунтується на такому твердженні: якщо в певній точці простору (V_1 , V_2 , μ) параметрів Гамільтоніану (2.5) можна знайти такий набір величин a_k , b_k і α_k , що ті чи ті конфігурації (одна або більше) вітрячка матимуть однакову й меншу порівняно з рештою конфігурацій енергію H_i і *цими конфігураціями можна заповнити ґратку*, то вони генерують усю сукупність основних станів у цій точці. (Точніше, усю сукупність нерозшарованих основних станів без дефектів, тобто таких основних станів,

де нема навіть нескінченно малої кількості конфігурацій з більшою енергією.) Не втрачаючи загальності, коефіцієнти a_k можна вважати рівними, наприклад, $\frac{1}{2}$.

Методи пошуку основних станів моделей ґраткового газу, що ґрунтуються на записі Гамільтоніану у вигляді єдиної суми за певними кластерами, відомі з 80-х років минулого століття. В літературі їх називають методами m -потенціалу [9]. Ці методи використовували для знаходження основних станів моделі Фалікова-Кімбала [10, 11]. Однак наш метод відрізняється від відомих способом побудови таких m -потенціалів. До того ж ми шукаємо m -потенціали не для цілих областей діаграми основного стану, а лише для так званих "особливих" точок, в тому числі "нескінченних" (нескінченно віддалених від початку координат), і розглядаємо не тільки періодичні структури, а й хаотизовані та упорядковані, однак неперіодичні.

Будуватимемо діаграму основних станів нашої моделі у площині $\left(\frac{h}{|J_1|}, \frac{J_2}{|J_1|}\right)$. Позаяк кожна область діаграми, що відповідає певній структурі, мусить бути *опуклою*, то досить знайти точки, в яких сходяться області, й основні стани в тих точках. Однак деякі області сходяться на нескінченності, тому треба ще розглянути точки, нескінченно віддалені від початку координат. Точки, в яких сходяться області на двовимірній діаграмі основного стану називатимемо особливими.

"Нескінченних" особливих точок є чотири. Якщо $J_2 \rightarrow +\infty$, $\alpha_1 = 0$, а решта параметрів фіксовані й довільні, то найменшу (й однакову!) енергію мають такі конфігурації вітрячка: $\textcircled{\bullet}$, $\textcircled{\circ}$, $\textcircled{\bullet\bullet}$ і $\textcircled{\circ\circ}$ (чорний кружечок означає, що на вузлі є частинка, білий — що частинки нема). Ці конфігурації і визначають основний стан у точці, нескінченно віддаленій в додатному напрямку осі ординат. Основним станом там буде будь-яка конфігурація трикутної ґратки, в якій нема інших конфігурацій вітрячка, окрім цих чотирьох. Якщо ж $J_2 \rightarrow -\infty$, $\alpha_1 = 0$, то найменшу енергію мають конфігурації $\textcircled{\circ}$, $\textcircled{\bullet\bullet}$, $\textcircled{\circ\bullet}$ і $\textcircled{\bullet\circ}$. Вони визначають основний стан у точці, нескінченно віддаленій у від'ємному напрямку осі ординат. Ще дві симетричні відносно інверсії поля нескінченні особливі точки одержуємо, спрямувавши до нескінченності одночасно h і J_2 . Якщо $J_2 = \frac{h}{6} \rightarrow -\infty$, $\alpha_1 = 0$, то найменшу енергію мають конфігурації $\textcircled{\circ\bullet}$, $\textcircled{\bullet\circ}$, $\textcircled{\bullet\bullet}$ і $\textcircled{\circ\circ}$. В симетричній точці основний стан творять конфігурації, які одержуємо з наведених заміною білих кружечків на чорні, і навпаки.

У випадку $J_1 < 0$ маємо лише три "скінченні" особливі точки. Якщо $h = 0$, $J_2 = -\frac{J_1}{2}$, $b_1 = 0$, $\alpha_1 = 0$, то при $J_1 < 0$ найменшу

енергію мають такі конфігурації вітрячка: $\begin{smallmatrix} \circ & \circ \\ \circ & \circ \end{smallmatrix}$, $\begin{smallmatrix} \circ & \bullet \\ \circ & \circ \end{smallmatrix}$, $\begin{smallmatrix} \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet \end{smallmatrix}$ і $\begin{smallmatrix} \bullet & \circ \\ \bullet & \bullet \end{smallmatrix}$. Вони й визначають основні стани в точці $\frac{h}{|J_1|} = 0$, $\frac{J_2}{|J_1|} = \frac{1}{2}$ для $J_1 < 0$. В точці $\frac{h}{|J_1|} = -2$, $\frac{J_2}{|J_1|} = 1$ основний стан при $J_1 < 0$ творять конфігурації $\begin{smallmatrix} \circ & \circ \\ \circ & \bullet \end{smallmatrix}$, $\begin{smallmatrix} \circ & \bullet \\ \circ & \circ \end{smallmatrix}$, $\begin{smallmatrix} \bullet & \bullet \\ \bullet & \circ \end{smallmatrix}$ і $\begin{smallmatrix} \bullet & \circ \\ \bullet & \bullet \end{smallmatrix}$. Вони мають найменшу енергію при $\alpha_1 = 0$, $b_1 = \frac{a_1}{3}$. Основний стан в симетричній точці $\frac{h}{|J_1|} = 2$, $\frac{J_2}{|J_1|} = 1$ творять конфігурації, які одержуємо з наведених заміною білих кружечків на чорні, і навпаки.

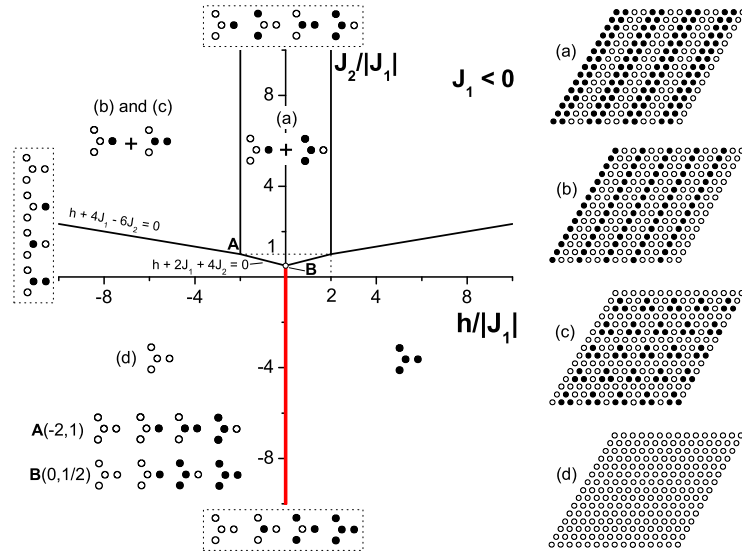


Рис. 1. Діаграма основного стану моделі Ізинга на трикутній ґратці зі взаємодією перших і других сусідів у випадку $J_1 < 0$. Вказано конфігурації вітрячка для трьох нескінченних і двох скінченних точок (A і B), а також для різних областей. Потовщена червона лінія — це лінія фазових переходів першого роду.

На рис. 1 показано діаграму основних станів для $J_1 < 0$. Для її побудови досить було знайти основні стани в трьох скінченних і чотирьох нескінченних точках. На лінії, що з'єднують будь-які дві точки, основні стани творять ті конфігурації вітрячка, котрі є спільні для обох тих точок, а в трикутнику між трьома точками — ті, котрі є спільні для усіх трьох точок. Так конфігурації $\begin{smallmatrix} \circ & \bullet \\ \circ & \circ \end{smallmatrix}$ і $\begin{smallmatrix} \bullet & \bullet \\ \bullet & \circ \end{smallmatrix}$, що є спільними для усіх трьох скінченних точок і однієї нескінченної, творять стрічкову структуру, зображену на рис. 1 (структура (a)). А

з конфігурацій $\begin{smallmatrix} \circ & \bullet \\ \circ & \bullet \end{smallmatrix}$ і $\begin{smallmatrix} \bullet & \bullet \\ \bullet & \circ \end{smallmatrix}$, які є спільними для точки A і двох нескінченних точок, можна утворити не одну, а дві (і лише дві!) структури (рис. 1, структури (b) і (c)). Тобто маємо двократне виродження, яке, до речі, не усуває жодна парна ізотропна взаємодія [6]. Отож у випадку $J_1 < 0$, $h < 0$, крім "порожньої" маємо ще три структури.

Розгляньмо тепер випадок $J_1 > 0$. Як стане зрозуміло пізніше, у цьому випадку при $h \leq 0$ існує чотири скінченні точки. Однак лише у двох із них основний стан можна побудувати з вітрячків. У точці $\frac{h}{J_1} = -4$, $\frac{J_2}{J_1} = 1$ при $J_1 > 0$ мінімальну енергію мають конфігурації $\begin{smallmatrix} \circ & \bullet \\ \circ & \bullet \end{smallmatrix}$, $\begin{smallmatrix} \bullet & \bullet \\ \bullet & \circ \end{smallmatrix}$ і $\begin{smallmatrix} \bullet & \circ \\ \bullet & \bullet \end{smallmatrix}$ ($\alpha_1 = 0$, $b_1 = \frac{a_1}{3}$), а у точці $\frac{h}{J_1} = -6$, $\frac{J_2}{J_1} = 0$ — конфігурації $\begin{smallmatrix} \circ & \circ \\ \circ & \bullet \end{smallmatrix}$, $\begin{smallmatrix} \circ & \bullet \\ \circ & \circ \end{smallmatrix}$, $\begin{smallmatrix} \bullet & \bullet \\ \bullet & \circ \end{smallmatrix}$ і $\begin{smallmatrix} \bullet & \circ \\ \bullet & \bullet \end{smallmatrix}$ ($b_1 = a_1$). Щоби побудувати основні стани у ще двох особливих точках, потрібно розглянути більший кластер, наприклад, кластер у формі "квітки" (шестикутник з центральним вузлом). Такий кластер дає змогу знайти всі особливі точки й побудувати в них основні стани як у випадку $J_1 > 0$, так і у випадку $J_1 < 0$. Запишімо Гамільтоніян (2.3) як єдину суму за "квітками":

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{\text{квітки}} H_i \\
 &= \sum_{\text{квітки}} \left\{ \frac{V_1}{2(\beta_1 + \beta_2)} [\beta_1 \sigma_{i0}^1 (\sigma_{i1}^1 + \sigma_{i2}^1 + \sigma_{i3}^1 + \sigma_{i4}^1 + \sigma_{i5}^1 + \sigma_{i6}^1) \right. \\
 &\quad \left. + \beta_2 (\sigma_{i1}^1 \sigma_{i2}^1 + \sigma_{i2}^1 \sigma_{i3}^1 + \sigma_{i3}^1 \sigma_{i4}^1 + \sigma_{i4}^1 \sigma_{i5}^1 + \sigma_{i5}^1 \sigma_{i6}^1 + \sigma_{i6}^1 \sigma_{i1}^1)] \right. \\
 &\quad \left. + \frac{V_2}{2} (\sigma_{i1}^2 \sigma_{i3}^2 + \sigma_{i3}^2 \sigma_{i5}^2 + \sigma_{i5}^2 \sigma_{i1}^2 + \sigma_{i2}^2 \sigma_{i4}^2 + \sigma_{i4}^2 \sigma_{i6}^2 + \sigma_{i6}^2 \sigma_{i2}^2) \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\mu}{\alpha_1 + 6\alpha_2} [\alpha_1 \sigma_{i0}^0 + \alpha_2 (\sigma_{i1}^0 + \sigma_{i2}^0 + \sigma_{i3}^0 + \sigma_{i4}^0 + \sigma_{i5}^0 + \sigma_{i6}^0)] \right\}, \quad (2.7)
 \end{aligned}$$

де запроваджено такі позначення:

$$\sigma_{ij}^1 = a_1 \sigma_{ij} + b_1, \quad \sigma_{ij}^2 = a_2 \sigma_{ij} + b_2, \quad \sigma_{ij}^0 = a_0 \sigma_{ij} + b_0. \quad (2.8)$$

Тут, як і у випадку вітрячків, перший індекс — це номер квітки-господаря, а другий — номер вузла в квітці (центральный вузол — нульовий). За допомогою довільних величин α_1 і α_2 враховано те, що кожен вузол входить в одну квітку як центральний і в шість квіток як бічний. Аналогічним чином довільні величини β_1 і β_2 враховують те, що кожен зв'язок між найближчими сусідами входить у дві квітки як радіальний й у дві квітки як бічний.

Якщо $h = -\frac{12J_1}{5}$, $J_2 = \frac{J_1}{5}$, $b_1 = \frac{a_1}{3}$, $\alpha_1 = 0$, $\beta_2 = \frac{2\beta_1}{3}$, то при $J_1 > 0$

найменшу енергію мають такі конфігурації квітки: і .

Якщо $h = 0$, $J_2 = 0$, $b_1 = 0$, $\beta_2 = \frac{\beta_1}{2}$, то при $J_1 > 0$ найменшу енергію мають конфігурації квітки і .

Тепер маємо повний набір особливих точок для побудови діаграми основного стану у випадку $J_1 > 0$. Її показано на рис. 2, де також зображено три нові структури, що виникають у цьому випадку.

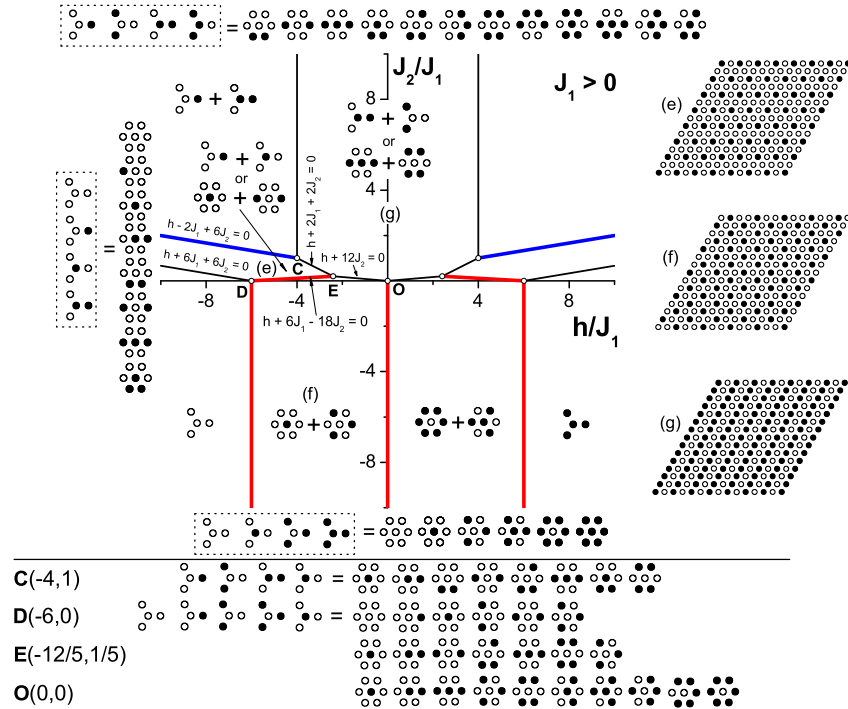


Рис. 2. Діаграма основного стану моделі Ізинга на трикутній ґратці зі взаємодією перших і других сусідів у випадку $J_1 > 0$. Вказано конфігурації вітрячка і квітки для особливих точок і різних областей. Зображено три нові структури [(e), (f) і (g)], що виникають у цьому випадку. Потовщені червоні лінії — це лінії фазових переходів першого роду, а потовщені голубі лінії — лінії багатозначних точок.

Для повноти картини нам залишилося побудувати діаграму

основного стану у випадку $J_1 = 0$. Це легко зробити, бо, крім вже знайдених нескінченних особливих точок, у цьому випадку існує лише одна скінченна особлива точка. Це — початок координат. У цій точці основний стан творять усі можливі конфігурації вітрячка або ж квітки, тобто будь-який стан є основним. Діаграму основного стану для $J_1 = 0$ показано на рис. 3.

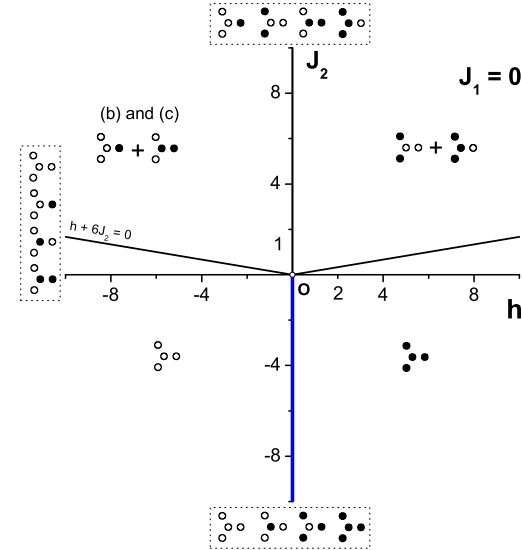


Рис. 3. Діаграма основного стану моделі Ізинга на трикутній ґратці зі взаємодією перших і других сусідів у випадку $J_1 = 0$. Вказано конфігурації вітрячка для нескінченних особливих точок і різних областей. Потовщена голуба лінія — лінія багатозначних точок.

3. Роль топології ґратки: порівняння основних станів моделей ґраткового газу (моделей Ізинга) зі взаємодією перших і других сусідів на трикутній і шестикутній ґратках

Як бачимо, задачу знаходження основних станів моделей ґраткового газу можна розбити на дві пов'язані між собою підзадачі: алгебричну (знаходження конфігурацій кластера, які мають мінімальну енергію)

й топологічну чи комбінаторно-геометричну (заповнення ґратки знайденими наборами конфігурацій кластера). Щоби продемонструвати роль топології ґратки у формуванні основних станів, знайдімо основні стани Гамільтоніану (2.2) ще на шестикутній ґратці. Обмежмося випадком $J_1 < 0$.

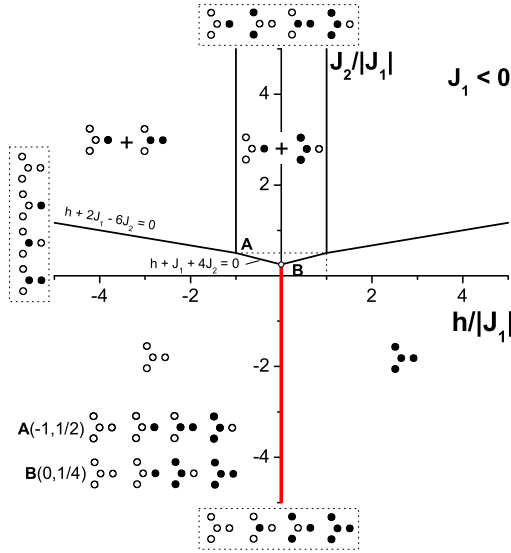


Рис. 4. Діяграма основного стану моделі Ізинга на шестикутній ґратці зі взаємодією перших і других сусідів у випадку $J_1 < 0$. Вказано конфігурації вітрячка для особливих точок і різних областей. Потовщена червона лінія — це лінія фазових переходів першого роду.

Так само, як і для трикутної ґратки, розгляньмо сім'ю Гамільтоніанів з однаковими основними станами й запишімо їх у вигляді єдиної суми за вітрячками:

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{\text{вітрячки}} H_i \\
 &= \sum_{\text{вітрячки}} \left\{ \frac{V_1}{2} \sigma_{i0}^1 (\sigma_{i1}^1 + \sigma_{i2}^1 + \sigma_{i3}^1) + V_2 (\sigma_{i1}^1 \sigma_{i2}^1 + \sigma_{i2}^1 \sigma_{i3}^1 + \sigma_{i3}^1 \sigma_{i1}^1) \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\mu}{\alpha_1 + 3\alpha_2} [\alpha_1 \sigma_{i0}^0 + \alpha_2 (\sigma_{i1}^0 + \sigma_{i2}^0 + \sigma_{i3}^0)] \right\}, \quad (3.1)
 \end{aligned}$$

де

$$\sigma_{ij}^k = a_k \sigma_{ij} + b_k, \quad k = 0, 1, 2. \quad (3.2)$$

Перейти від цих Гамільтоніанів до Гамільтоніану Ізинга можна за такими формулами:

$$V_1 = \frac{J_1}{a_1^2}, \quad V_2 = \frac{J_2}{a_2^2}, \quad \mu = \frac{1}{a_0} (h + 3a_1b_1V_1 + 6a_2b_2V_2). \quad (3.3)$$

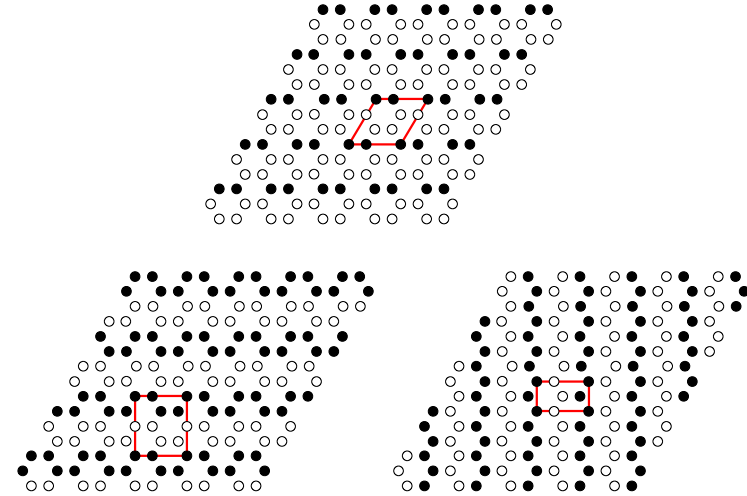


Рис. 5. Структури основного стану моделі Ізинга на шестикутній ґратці зі взаємодією перших і других сусідів у випадку $J_1 < 0$.

Діяграму основного стану моделі Ізинга на шестикутній ґратці зі взаємодією перших і других сусідів у випадку $J_1 < 0$ будемо так само, як і для трикутної ґратки. Цю діяграму зображено на рис. 4. Як бачимо, вона майже така сама, як і відповідна діяграма для трикутної ґратки. Відмінність лише в тому, що координати точок A і B для шестикутної ґратки у два рази більші. Однак, будуючи зі знайдених конфігурацій структури основного стану для шестикутної ґратки, ми виявимо різочу відмінність від того, що мали для ґратки трикутної. Так конфігурації вітрячка $\bullet\bullet\bullet$ і $\circ\circ\circ$ на шестикутній ґратці творять вже не дві, а лише одну структуру. Зате конфігурації $\bullet\bullet\circ$ і $\circ\circ\bullet$, які на трикутній ґратці давали єдину структуру, на шестикутній творять нескінченну кількість структур. Це структури, зображені на

рис. 5 (b) і (c) і їх суміш у довільній пропорції (рис. 6). Більше того, ці конфігурації вітрячка на шестикутній ґратці творять дві шестидоменні структури з нульовою енергією формування доменних стінок (рис. 7). Вони виникають у тому випадку, якщо утворюється замкнутий ланцюжок — кільце з частинок. Ці впорядковані структури подібні до квазикристалічних, бо не мають глобальної трансляційної симетрії. Вони не змішуються ні між собою, ні з попередніми структурами.

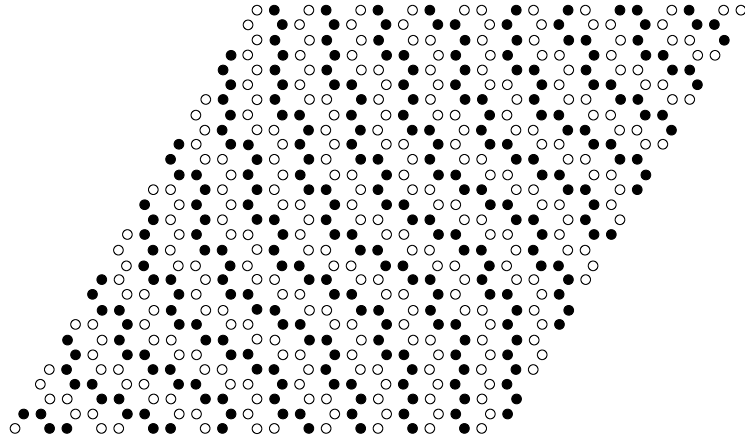


Рис. 6. Суміш двох останніх структур, зображених на попередньому рисунку.

Попри те, що квазикристали інтенсивно вивчають уже більше двадцяти років, чіткого розуміння, чому вони утворюються, немає й досі (див. [12] і цитовану там літературу, а також [13]). Хоча структури квазикристалічного типу, які ми одержали, нестійкі — навіть нескінченно мала взаємодія третіх сусідів їх зруйнує, — наші дослідження можуть сприяти розумінню механізму утворення квазикристалічних і хаотизованих структур, зокрема, на двовимірних ґратках [14, 15]. Як і автори [12], ми показуємо, що локальні взаємодії призводять до утворення впорядкованої структури без глобальної трансляційної симетрії.

Ми розглядаємо ґраткові моделі, однак, відійшовши від обмежень, нав'язаних ґраткою, можна поставити питання такого типу: які структури можна утворити, наприклад, з блоків $\bullet$ і $\circ$? Зрозуміло, що відповідь на це питання така: "трикутну" структуру

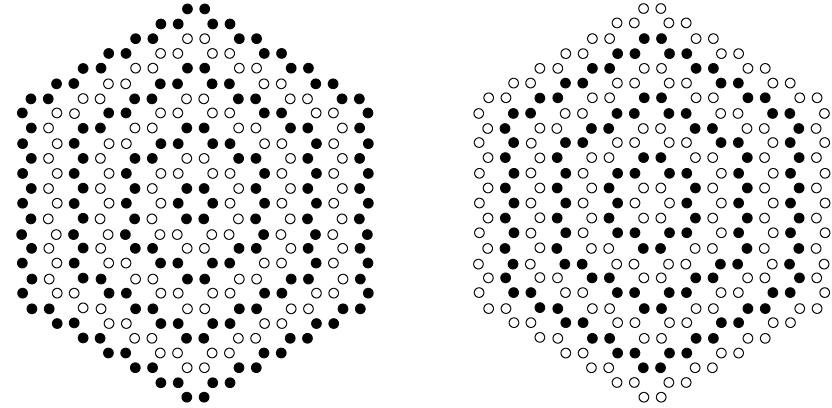


Рис. 7. Шестидоменні структури основного стану в моделі ґраткового газу на шестикутній ґратці зі взаємодією перших і других сусідів.

(а), а також "шестикутні" структури, зображені на рис. 6 та рис. 7. Гібридні "трикутно-шестикутні" структури утворитися не можуть.

4. Фазові переходи першого роду і чортова сходи́нка

Щоби можна було відповісти на питання, які структури матимуть найменшу енергію, якщо задати концентрацію частинок, треба ще розглянути основні стани на межах областей. До того ж це дасть нам змогу знайти фазові переходи першого роду за хемічним потенціалом в моделі ґраткового газу, або за полем в моделі Ізинга.

На межі "порожньої" фази (d) і фази (a) виникає хаотизована фаза, утворена конфігураціями $\bullet\circ$, $\circ\bullet$ і $\bullet\bullet$. Це суміш обох цих фаз у довільній пропорції (рис. 8). На межі "порожньої" і "цілком заповненої" фаз основні стани творять лише дві конфігурації: $\bullet\circ$ і $\bullet\bullet$. Ці конфігурації *несумісні*, іншими словами, *незмішувані*, — з них можна утворити лише дві фази (з кожної по одній): "порожню" і "цілком заповнену". На межі між цими фазами нема проміжних основних станів без дефектів, а є лише розшаровані. Отже фазовий перехід за хемічним потенціалом (за полем у моделі Ізинга) між цими фазами — першого роду.

На межі "порожньої" фази і фази (f) маємо двократне виродження, тому що конфігурація $\bullet\bullet$ і множина конфігурацій $\{\bullet\bullet, \bullet\bullet\}$,

що генерує фазу (f), — несумісні. Така сама ситуація на межі фази (f) і симетричної до неї фази (симетрія частинка-дірка), бо множини конфігурацій $\{ \text{⬢}, \text{⬢} \}$ і $\{ \text{⬢}, \text{⬢} \}$ також несумісні. Отже, якщо взаємодія між другими сусідами притягальна ($J_2 < 0$), усі переходи між фазами є переходами першого роду. Це узгоджується з результатами числових розрахунків методом Монте Карло за відмінної від нуля температури [16]. Однак фазовий перехід першого роду є й між фазами (e) та (f), коли обидві взаємодії відштовхувальні ($J_1 > 0$ і $0 < J_2 < \frac{J_1}{5}$), бо сукупності конфігурацій $\{ \text{⬢}, \text{⬢} \}$ і $\{ \text{⬢}, \text{⬢} \}$ несумісні. Й справді, розрахунки методом Монте Карло дають у цій області фазовий перехід першого роду (вірніше, розширення фаз) [17].

Розгляньмо ще межу між областями (a) і (b)[(c)]. Основні стани на ній творить сукупність конфігурацій вітрячка $\{ \text{⬢}, \text{⬢}, \text{⬢} \}$ або еквівалентна сукупність конфігурацій квітки $\{ \text{⬢}, \text{⬢}, \text{⬢}, \text{⬢}, \text{⬢}, \text{⬢}, \text{⬢}, \text{⬢} \}$. Останні дві конфігурації не можуть зреалізуватися в такій сукупності, а конфігурація ⬢ може входити лише в дводоменну структуру, зображену на рис. 8. Ця структура цілком упорядкована, але не має повної трансляційної симетрії, тому її можна вважати структурою квазикристалічного типу. Решта конфігурацій, окрім структур (a), (b) і (c), творить ще нескінченну кількість структур, які є сумішшю фаз (a) і (b) у довільній пропорції (рис. 8). Отже одна з вироджених незмішуваних між собою фаз (b) і (c), а саме фаза (b), змішувана з фазою (a), інша — незмішувана.

Розгляньмо нарешті, які фази виникають на межі областей (b)[(c)] і (e). Їх творить така сукупність конфігурацій вітрячка: $\{ \text{⬢}, \text{⬢}, \text{⬢} \}$, або еквівалентна сукупність конфігурацій квітки: $\{ \text{⬢}, \text{⬢}, \text{⬢}, \text{⬢}, \text{⬢}, \text{⬢} \}$. Якщо стартувати з конфігурації ⬢ , то одержимо лише структуру (b). Та решта конфігурацій творять нескінченну послідовність структур, які нумеруватимемо числом $m = 0 \div \infty$ і позначатимемо S_m . Член S_0 цієї послідовності — це структура (e); наступні три члени зображено на рис. 9.

У системі позначень Кабурагі й Канаморі (див. [18]) кожній структурі відповідає послідовність чисел

$$p_0, p_1, p_2, p_3, \dots, \quad (4.1)$$

де число p_0 — це кількість частинок на один вузол (для структур з нескінченної послідовності S_m воно змінюється в проміжку від $\frac{1}{4}$ для $m = 0$ до $\frac{1}{3}$ для $m = \infty$), а p_1, p_2, p_3 і т. д. — кількість пар частинок, що є першими, другими і т. д. сусідами, відповідно, на одну частинку

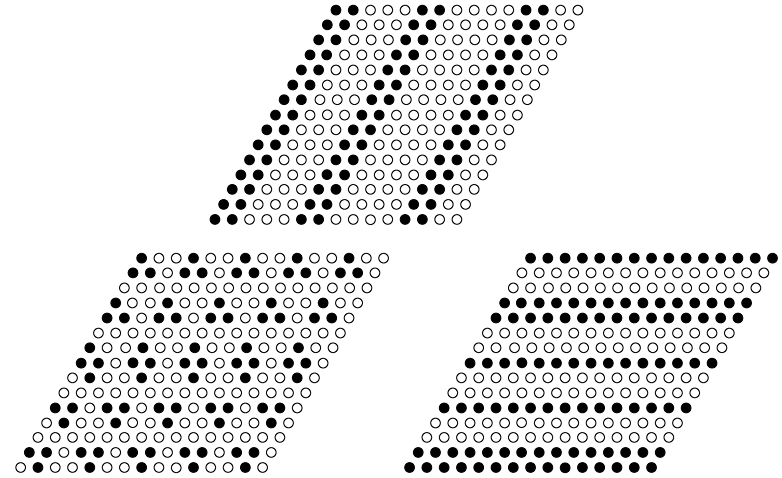


Рис. 8. Хаотизована суміш фаз (a) і (d), дводоменна структура на межі фаз (a) і (b)[(c)] та хаотизована суміш фаз (a) і (b).

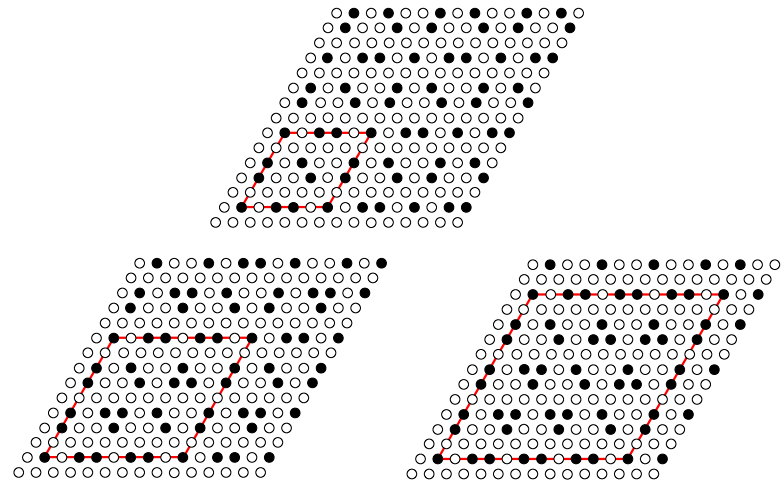


Рис. 9. Структури S_1, S_2 і S_3 з нескінченної послідовності S_m .

(чорний кружечок). Сукупність структур з однаковими числами p_i позначатимемо як

$$S(p_0; p_1, p_2, p_3, \dots). \quad (4.2)$$

Знаючи числа p_0, p_1, p_2 і т. д., можна обчислити густину енергії структури. На один вузол припадає енергія

$$E = \sum_i p_0 p_i I_i - p_0 \mu_{lg}, \quad i = 1, 2, \dots \quad (4.3)$$

Тут I_i і μ_{lg} — параметри взаємодії і хемічний потенціал Гамільтоніану ґраткового газу. До параметрів Гамільтоніану Ізинга можна перейти за формулами:

$$I_i = 4J_i, \quad \mu_{lg} = 2h + 2 \sum_k z_i J_i, \quad (4.4)$$

де z_i — координаційне число i -их сусідів (див. рис. 10).

$$z_i = \begin{cases} 6 & \text{для } i = k^2 + k - 1, \quad i = k^2 + k, \quad i = k^2 + 2k \quad (k = 1, 2, 3, \dots) \\ 12 & \text{для усіх решти начень } i. \end{cases} \quad (4.5)$$

Для структур S_m ми обчислили числа p_0, p_1, p_2 і т. д. аж до дев'ятнадцятих сусідів включно (спосіб обчислення p_i описано в Додатку 1):

$$p_0 = \frac{3m^2 + 3m + 1}{(3m + 2)^2}, \quad p_1 = \frac{3m^2}{3m^2 + 3m + 1},$$

$$p_2 = 0, \quad p_3 = \frac{3(m + 1)^2}{3m^2 + 3m + 1},$$

$$p_4 = \frac{6m(m + 1)}{3m^2 + 3m + 1}, \quad p_5 = \frac{3m(3m + 1)}{3m^2 + 3m + 1},$$

$$p_6 = \frac{3(m + 1)}{3m^2 + 3m + 1}, \quad p_7 = \frac{6m(m - 1)}{3m^2 + 3m + 1},$$

$$p_8 = \begin{cases} 3 & \text{для } m = 0, \\ \frac{3(m^2 - 2m + 2)}{3m^2 + 3m + 1}, \end{cases} \quad p_9 = \frac{6m(m + 3)}{3m^2 + 3m + 1},$$

$$p_{10} = \frac{6m}{3m^2 + 3m + 1}, \quad p_{11} = \begin{cases} 0 & \text{для } m = 0, \\ \frac{3(m^2 + 4m + 2)}{3m^2 + 3m + 1}, \end{cases}$$

$$p_{12} = \frac{3m(3m - 1)}{3m^2 + 3m + 1}, \quad p_{13} = \begin{cases} 6 & \text{для } m = 0, \\ \frac{6(m^2 - 1)}{3m^2 + 3m + 1}, \end{cases}$$

$$p_{14} = \begin{cases} 0 & \text{для } m = 0, \\ \frac{6(m^2 + 2m - 2)}{3m^2 + 3m + 1}, \end{cases} \quad p_{15} = \begin{cases} 3 & \text{для } m = 0, \\ \frac{3(3m^2 - m - 1)}{3m^2 + 3m + 1}, \end{cases}$$

$$p_{16} = \begin{cases} 0 & \text{для } m = 0, \\ \frac{6(m^2 - 3m + 4)}{3m^2 + 3m + 1}, \end{cases} \quad p_{17} = \begin{cases} 0 & \text{для } m = 0, \\ \frac{12(m + 1)}{3m^2 + 3m + 1}, \end{cases}$$

$$p_{18} = \begin{cases} 0 & \text{для } m = 0, 1, \\ \frac{6m(m - 2)}{3m^2 + 3m + 1}, \end{cases} \quad p_{19} = \begin{cases} 0 & \text{для } m = 0, \\ \frac{3(m^2 - 4m + 8)}{3m^2 + 3m + 1}. \end{cases} \quad (4.6)$$

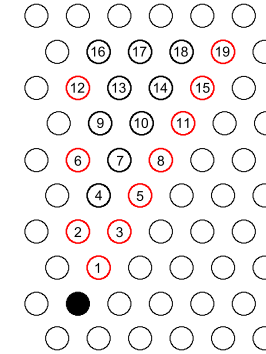


Рис. 10. Сусіди на трикутній ґратці. Червоним кольором виділено сусіди з координаційним числом 6.

Структури, зображені на рис. 9 знайшли з зовсім інших міркувань Наканіші й Шіба й назвали їх трикутними доменними структурами [19]. В моделі зі взаємодією лише перших і других сусідів такі структури виникають на межі між першою (S_0) й останньою

(граничною) структурами цієї послідовності й інших нерозшарованих структур на цій межі немає. Вони *несумісні* або ж *незмішувані*. Відмінна від нуля температура усуває виродження й ці структури утворюють "верхню" чортову сходинку" [19, 20], тобто нескінченну послідовність фаз зі щораз більшою елементарною комірною. Однак виродження усуває не лише температура, а й *відштовхувальна взаємодія третіх сусідів*, і при $J_3 > 0$ маємо чортову сходинку навіть за нульової температури (див. рис. 11).

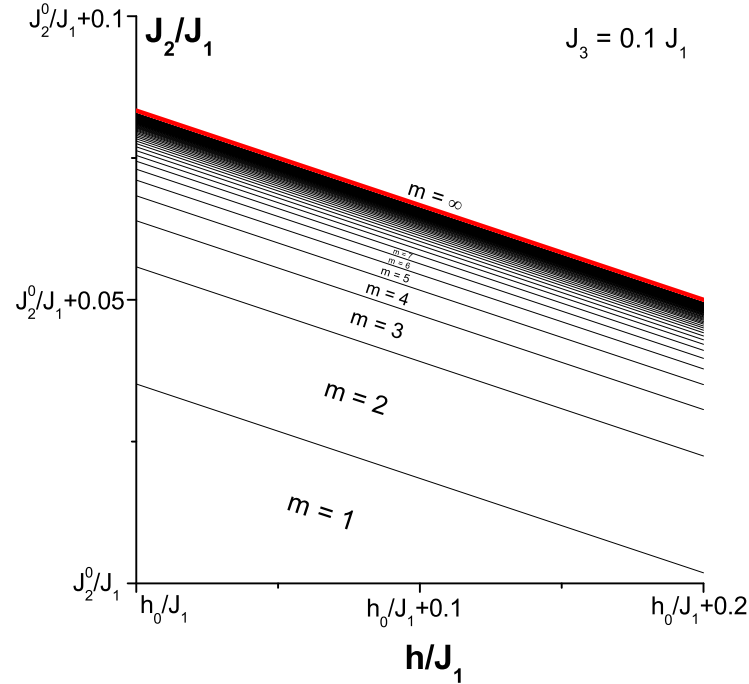


Рис. 11. Области в площині $\left(\frac{h}{J_1}, \frac{J_2}{J_1}\right)$, які відповідають нескінченній послідовності структур S_m при $J_3 = 0.1J_1$ й досить великому від'ємному $\frac{h_0}{J_1}$. Рисунок одержано шляхом порівняння енергій структур S_m . h_0 уведено тому, що ми не можемо знайти ті значення h , де закінчуються межі між фазами S_m (крім межі між S_0 і S_1).

Тут треба пояснити, як на двовимірній діаграмі основного стану в певних координатах виникають нові області (фази), коли вмикаємо нову взаємодію, тобто вносимо новий член в Гамільтоніан. Якщо

нова взаємодія досить мала, то нові області можуть виростати лише з меж між областями, де вони вже були й раніше. Інакше порушувався б принцип опуклості областей. Нові структури утворитись не можуть. Може лише усунутися виродження і збільшитися розмірність області, яка відповідає тій чи тій структурі (фазі), тобто з нульвимірної чи одновимірної вона стає двовимірною. Зникати ж старі структури можуть і тоді, коли нова взаємодія як завгодно мала, однак знову ж таки лише на межах областей або у тих областях, де є виродження.

Зі сказаного випливає, що, які б додаткові взаємодії ми не ввели в Гамільтоніан (2.2), між фазою (e) і фазою (c) (якщо вони, звичайно, існують) за достатньо великих від'ємних h не може бути інших фаз, окрім тих, які є на границі між ними в моделі зі взаємодією перших і других сусідів. Вироджені фази (b) і (c) існують завжди в площині $\left(\frac{h}{|J_1|}, \frac{J_2}{|J_1|}\right)$, якими б не були ізотропні парні взаємодії J_i ($i \geq 3$), бо ці фази утворені конфігураціями вітрячка $\begin{smallmatrix} \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet \end{smallmatrix}$ і $\begin{smallmatrix} \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet \end{smallmatrix}$, що є спільними для двох нескінченних точок. Якщо в Гамільтоніан ввести взаємодію якогось іншого типу, наприклад, тричастинкову, то одна зі структур (b) і (c) може зникнути, залишившись однак на "лінії" між двома нескінченними точками.

Для дослідження умов існування чортової сходинки при $J_3 \neq 0$, введемо під знак суми в Гамільтоніан (2.7) ще член, який описує взаємодію третіх сусідів:

$$V_3 (\sigma_{i1}^3 \sigma_{i4}^3 + \sigma_{i2}^3 \sigma_{i5}^3 + \sigma_{i3}^3 \sigma_{i6}^3), \quad (4.7)$$

де запроваджено позначення

$$\sigma_{ij}^3 = a_3 \sigma_{ij} + b_3. \quad (4.8)$$

Формули переходу до простої спінової моделі тепер будуть такими:

$$V_1 = \frac{J_1}{a_1^2}, \quad V_2 = \frac{J_2}{a_2^2}, \quad V_3 = \frac{J_3}{a_3^2}, \quad \mu = \frac{1}{a_0} (h + 6(a_1 b_1 V_1 + a_2 b_2 V_2 + a_3 b_3 V_3)). \quad (4.9)$$

Які б додаткові взаємодії ми не вводили в Гамільтоніан, нескінченні особливі точки в площині $\left(\frac{h}{|J_1|}, \frac{J_2}{|J_1|}\right)$ будуть ті ж самі, що й раніше; змінюватимуться лише скінченні особливі точки. Таке твердження випливає з самого означення нескінченних особливих точок. Знайдемо кілька корисних для дослідження умов існування чортової сходинки скінченних особливих точок у випадку відмінної від нуля

взаємодії третіх сусідів. У переліку конфігурацій для цих точок до крапки з комою йдуть ті, які реалізуються на лінії між вказаною точкою і нескінченно віддаленою точкою $J_2 = \frac{h}{6} \rightarrow -\infty$.

Якщо $J_2 = 0$, $h = -6J_1 - 6J_3$, то при $J_1 > 0$, $J_3 > 0$ ($\alpha_1 = 0$, $\beta_1 = 0$) найменшу енергію мають конфігурації $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$; $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$ і $\otimes\otimes$, однак останні три не можуть зреалізуватися в такій сукупності.

Якщо $J_2 = 2J_3$, $h = -6J_1 - 4J_3$, то при $0 < J_3 < \frac{J_1}{4}$ ($\alpha_1 = 0$, $\beta_1 = \frac{J_1-2J_3}{2J_3}\beta_2$, $b_1 = \frac{3J_1-8J_3}{3(J_1-2J_3)}a_1$) найменшу енергію мають конфігурації $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$; $\otimes\otimes$ і $\otimes\otimes$ (остання не може зреалізуватися в такій сукупності).

Якщо $J_2 = J_1 - 4J_3$, $h = -4J_1$, то при $0 < J_3 < \frac{J_1}{6}$ ($\alpha_1 = 0$, $\beta_1 = \frac{J_1-2J_3}{2J_3}\beta_2$, $b_1 = \frac{J_1}{3(J_1-2J_3)}a_1$) найменшу енергію мають конфігурації $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$; $\otimes\otimes$ і $\otimes\otimes$ (остання не може зреалізуватися в такій сукупності). Якщо $J_3 = \frac{J_1}{6}$, то до цих конфігурацій додаються ще конфігурації $\otimes\otimes$ і $\otimes\otimes$.

Якщо $J_2 = 2J_3$, $h = 2J_1 - 36J_3$, то при $\frac{J_1}{6} < J_3 < \frac{J_1}{4}$ ($\alpha_1 = 0$, $\beta_1 = \frac{J_1-2J_3}{2J_3}\beta_2$, $b_1 = \frac{J_1}{3(J_1-2J_3)}a_1$) найменшу енергію мають конфігурації $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$; $\otimes\otimes$. Якщо $J_3 = \frac{J_1}{4}$, то до цих конфігурацій додається ще конфігурація $\otimes\otimes$.

Якщо $J_2 = J_1 - 2J_3$, $h = -4J_1 + 2J_3$, то при $0 < J_3 < \frac{J_1}{4}$ ($\alpha_1 = 0$, $\beta_1 = \frac{J_1-2J_3}{2J_3}\beta_2$, $b_1 = \frac{a_1}{3}$) найменшу енергію мають конфігурації $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$; $\otimes\otimes$ і $\otimes\otimes$, однак остання не може зреалізуватися в такій сукупності. Якщо $J_3 = \frac{J_1}{4}$, то до цих конфігурацій додаються ще конфігурації $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$ і $\otimes\otimes$ (остання не реалізується).

Якщо $J_2 = 2J_3$, $h = 2J_1 - 22J_3$, то при $\frac{J_1}{4} < J_3 < \frac{J_1}{2}$ ($\alpha_1 = 0$, $\beta_1 = \frac{J_1-2J_3}{2J_3}\beta_2$, $b_1 = \frac{a_1}{3}$) найменшу енергію мають конфігурації $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$; $\otimes\otimes$ і $\otimes\otimes$ (остання не може зреалізуватися в такій сукупності). Якщо $J_3 = \frac{J_1}{2}$, то до цих конфігурацій додається ще конфігурація $\otimes\otimes$.

Якщо $J_2 = \frac{1}{2}J_1$, $h = -\frac{11}{2}J_1 - 6J_3$, то при $0 < \frac{J_1}{4} < J_3$ ($\alpha_1 = 0$, $\beta_1 = \beta_2$, $b_1 = \frac{2}{3}a_1$) найменшу енергію мають конфігурації $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$; $\otimes\otimes$.

Якщо $J_2 = 2J_3$, $h = -5J_1 - 8J_3$, то при $\frac{J_1}{4} < J_3 < \frac{J_1}{2}$ ($\alpha_1 = 0$, $\beta_1 = \frac{J_1-2J_3}{2J_3}\beta_2$, $b_1 = \frac{2}{3}a_1$) найменшу енергію мають конфігурації $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$; $\otimes\otimes$.

Якщо $J_2 = J_1$, $h = -6J_1 - 6J_3$, то при $0 < \frac{J_1}{2} < J_3$ ($\alpha_1 = 0$, $\beta_1 = 0$), найменшу енергію мають конфігурації $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$; $\otimes\otimes$ і $\otimes\otimes$ (остання не може зреалізуватися в такій сукупності).

Якщо $J_2 = 2J_3$, $h = -4J_1 - 10J_3$, то при $0 < \frac{J_1}{2} < J_3$ ($\alpha_1 = 0$, $\beta_1 = \frac{J_1-2J_3}{2J_3}\beta_2$, $b_1 = \frac{a_1}{3}$), найменшу енергію мають конфігурації $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$; $\otimes\otimes$ і $\otimes\otimes$ (остання не може зреалізуватися в такій сукупності).

Здобуті особливі точки дають змогу знайти послідовність областей (фаз) на діаграмі основного стану в площині $\left(\frac{h}{|J_1|}, \frac{J_2}{|J_1|}\right)$ при $0 < J_3 < \frac{J_1}{4}$, які сходяться в нескінченно віддаленій особливій точці $J_2 = \frac{h}{6} \rightarrow -\infty$ і, окрім двох крайніх, мають вигляд паралельних смуг. Це така послідовність фаз: "порожня" фаза, фаза $S(\frac{1}{7}; 0, 0, 0)$ (рис. 12), утворена конфігураціями $\otimes\otimes$ і $\otimes\otimes$, нескінченна послідовність фаз S_m ($m = 0 \div \infty$).

У випадку $\frac{J_1}{4} < J_3 < \frac{J_1}{2}$ фази S_0 немає: після фази $S(\frac{1}{7}; 0, 0, 0)$ йде фаза $S(\frac{1}{5}; \frac{1}{2}, 0, 0)$, утворена конфігураціями $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$ і $\otimes\otimes$ (рис. 12). Як видно з рисунка, ця фаза хаотизована. До речі, в статті [18], де досліджено основні стани ґраткового газу на трикутній ґратці зі взаємодією до третіх сусідів, нічого не сказано про хаотизацію фаз, хоча велика частина знайдених у цій статті фаз — це хаотизовані фази. Причина, певно, в тому, що використаний авторами метод геометричних нерівностей, на відміну від запропонованого нами, не дає змогу легко досліджувати хаотизацію. Фаза, яка йде за фазою $S(\frac{1}{5}; \frac{1}{2}, 0, 0)$, має бути утворена з конфігурацій $\otimes\otimes$, $\otimes\otimes$ і $\otimes\otimes$. Ці конфігурації утворюють нескінченну кількість структур, які реалізуються на межі фази $S(\frac{1}{5}; \frac{1}{2}, 0, 0)$. За нею ж йде не фаза $S(\frac{1}{4}; \frac{1}{2}, 0, 1)$, як впливає з даних статті [18] (вона є лише на межі), а хаотизована фаза $S(\frac{4}{15}; \frac{1}{2}, 0, \frac{5}{4})$ (рис. 13, 14). При $J_3 = \frac{9}{26}J_1$ ця фаза цілком витісняє фазу S_1 . Між цими двома фазами немає фазового переходу першого роду (див. Додаток 2).

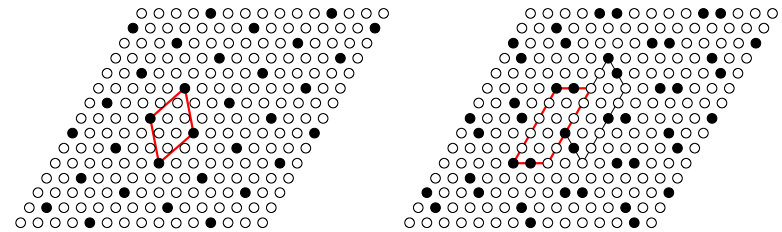


Рис. 12. Фаза $S(\frac{1}{7}; 0, 0, 0)$ і хаотизована фаза $S(\frac{1}{5}; \frac{1}{2}, 0, 0)$. Для першої показано елементарну комірку, для другої — мотив.

Чи виникають нові фази, коли взаємодія J_3 зростає й далі, ми

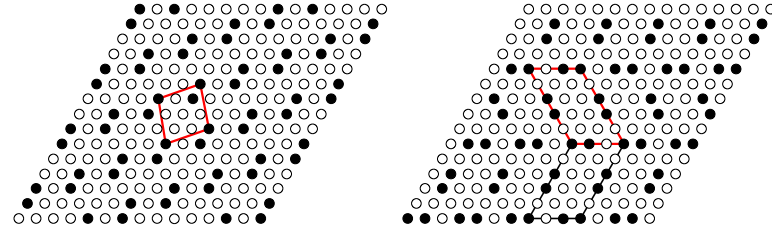


Рис. 13. Структура $S(\frac{1}{4}; \frac{1}{2}, 0, 1)$ та хаотизована фаза $S(\frac{4}{15}; \frac{1}{2}, 0, \frac{5}{4})$ (виділено мотив).

не знаємо, тому що для відповіді на це питання наш метод вимагає розгляду щораз більших кластерів. Якщо не враховувати симетрію кластера, то кількість його станів дорівнює 2^n , де n — кількість вузлів у кластері, тому обсяг обчислювальної роботи стрімко зростає з ростом n . Проте ми можемо стверджувати, що остаточно чортова сходинка зникає аж при $J_3 = \frac{J_1}{2}$, бо лише тоді з граничної лінії нескінченної послідовності фаз починає виростати нова фаза. Справді, граничною лінією нескінченної послідовності фаз (4.6) є лінія $J_2 = -\frac{J_1}{6} + \frac{1}{3}J_1 - \frac{5}{3}J_3$, яка простягається від $J_2 = \max(2J_3, J_1 - 2J_3)$ в нескінченність. Якщо $0 < J_3 < \frac{J_1}{2}$, то основний стан на цій лінії (структури (b) і (c)) творять конфігурації ⬢⬢⬢ , ⬢⬢⬢ , ⬢⬢⬢ , ⬢⬢⬢ і ⬢⬢⬢ . Якщо ж $J_3 = \frac{J_1}{2}$, то до цих конфігурацій долучається ще конфігурація ⬢⬢⬢ і далі зростання J_3 призводить до появи нової фази $S(\frac{1}{4}; 1, 0, 0)$, яка виростає з граничної лінії нескінченної послідовності фаз. Це хаотизована фаза, утворена конфігураціями ⬢⬢⬢ , ⬢⬢⬢ і ⬢⬢⬢ (рис. 15).

Отож ми довели існування нультемпературної чортової сходинки в моделі ґраткового газу на трикутній ґратці зі взаємодією перших, других і третіх сусідів або у відповідній моделі Ізинга за умов $J_1 > 0$, $0 < J_3 < \frac{J_2}{2}$.

Вперше чортову сходинку за нульової температури (точніше, аж три такі сходинки) відкрив Канаморі в моделі ґраткового газу на шестикутній ґратці зі взаємодією перших, других, або ще й третіх сусідів [21]. Дотепер це був, здається, єдиний приклад нультемпературної чортової сходинки в моделях ґраткового газу з одним сортом частинок. Хоча Канаморі разом з Кабурагі й досліджували основні стани моделі ґраткового газу на трикутній ґратці зі взаємодією перших, других і третіх сусідів [18], чортової сходинки вони на трику-

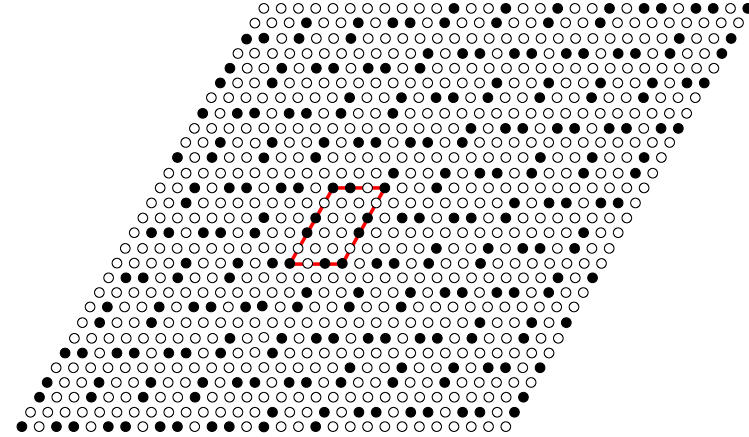


Рис. 14. Ще один спосіб хаотизації фази $S(\frac{4}{15}; \frac{1}{2}, 0, \frac{5}{4})$ (виділено мотив).

тній ґратці не виявили. Правда, в 1990 році вони разом з Тонегавою знайшли нескінченну послідовність упорядкованих структур в моделі ґраткового газу з двома сортами частинок на трикутній ґратці зі взаємодією перших і других сусідів [22]. Проте наявність не одного, а саме двох сортів частинок там дуже суттєва.

Повні чортові сходи, а також верхня чортова сходинка як їх частина — не лише один з найцікавіших об'єктів теоретичної фізики. Вони існують в реальних фізичних системах [23]. Так нещодавно чортові сходи було відкрито в системі атомів свинцю, адсорбованих на поверхні кристалу кремнію, Pb/Si(111) [24]. Вони, за словами авторів [24], свідчать про "високий ступінь самоорганізації, зумовленої далекосяжними відштовхувальними взаємодіями між адсорбованими атомами".

Існування чортової сходинки означає, що навіть скінченного рангу взаємодії (у двовимірних і тривимірних моделях) можуть породжувати нескінченну кількість областей на діаграмі основного стану. А ще чортову сходинку пов'язують з проблемою нескінченної адаптивності, яку в 1973 році експериментально відкрив Андерсон (див. [8] і цитовану там літературу). Вона полягає в тому, що кожному можливому складу (взятому в певних межах), відповідає своя, єдина й цілком упорядкована кристалічна структура без дефектів. Нультемпературна чортова сходинка якраз і є прикладом

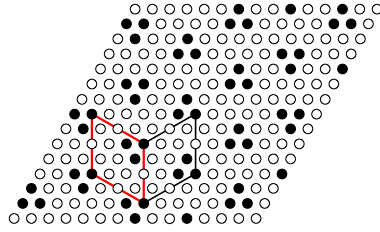


Рис. 15. Хаотизована фаза $S(\frac{1}{4}; 1, 0, 0)$ (виділено мотив).

нескінченної адаптивності. У 1978 році Кіттель припустив, що до нескінченної адаптивності призводять далекосяжні відштовхувальні взаємодії. Наш приклад, як і приклад Канаморі, показує, що ранг цих взаємодій не мусить бути дуже великий, тим паче нескінченний. А в наступному розділі буде показано, що ці взаємодії навіть не мусять бути чисто відштовхувальними.

5. Вплив на чортову сходинку парної взаємодії сусідів від четвертого до дев'ятнадцятого рангу

Чи усувають виродження на лінії між крайніми структурами досліджуваної нескінченної послідовності (S_0 і S_∞) парні взаємодії рангу вищого від трьох, породжуючи чортову сходинку? Маючи вирази (4.6), це не важко дослідити. Вважаючи, що $J_1 > 0$, і занулюючи усі взаємодії рангу $r \geq 3$, окрім досліджуваної, приходимо до такого результату: взаємодії рангу $r = 6, 7, 8, 12, 16, 18, 19$ породжують чортову сходинку у випадку відштовхування, а взаємодії рангу $r = 4, 5, 9, 10, 14$ — у випадку притягання. Ні відштовхувальна, ні притягальна взаємодія сусідів рангу $r = 11, 13, 15, 17$ не породжують чортової сходинки. Взаємодія одинадцятих, тринадцятих, п'ятнадцятих і сімнадцятих сусідів породжують лише фазу S_1 (одинадцятих і сімнадцятих — у випадку притягання, тринадцятих і п'ятнадцятих — у випадку відштовхування).

Щоби пояснити, чому парні взаємодії одних рангів породжують чортову сходинку у випадку притягання, інших рангів — у випадку відштовхування, а ще інших — не породжують її ні в одному, ні в другому випадку, розгляньмо вираз для енергії m -тої структури з

нескінченної послідовності структур:

$$E_m = 2p_0(m) \left[\sum_i (2p_i(m) - z_i) J_i - h \right]. \quad (5.1)$$

Запишімо рівняння межі між фазами S_m і S_{m+1} :

$$E_{m+1} - E_m = 2p_0(m+1) \left[\sum_i (2p_i(m+1) - z_i) J_i - h \right] - 2p_0(m) \left[\sum_i (2p_i(m) - z_i) J_i - h \right] = 0, \quad (5.2)$$

або

$$h = \frac{2 \sum_i [p_0(m+1)p_i(m+1) - p_0(m)p_i(m)] J_i}{p_0(m+1) - p_0(m)} - \sum_i z_i J_i. \quad (5.3)$$

Кількість i -тих сусідів на одну частинку для структури S_m має вигляд

$$p_i(m) = \frac{a_i(m)m^2 + b_i(m)m + c_i(m)}{3m^2 + 3m + 1}. \quad (5.4)$$

Якщо ранг взаємодії скінченний, то існує таке натуральне число m_0 , що для всіх $m \geq m_0$ коефіцієнти в чисельнику вже не залежать від m :

$$\begin{aligned} a_i(m) &= a_i(m_0) = a_i(\infty) = a_i, \\ b_i(m) &= b_i(m_0) = b_i(\infty) = b_i, \\ c_i(m) &= c_i(m_0) = c_i(\infty) = c_i. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Перейшовши в (5.3) до границі $m \rightarrow \infty$, одержимо рівняння межі нескінченної послідовності фаз:

$$h = \sum_i \frac{8a_i - 6b_i - 3z_i}{3} J_i. \quad (5.6)$$

Якщо максимальний ранг взаємодії дорівнює 19, то рівняння межі має вигляд

$$\begin{aligned} h &= 2J_1 - 6J_2 - 10J_3 - 8J_4 + 12J_5 - 12J_6 + 16J_7 \\ &+ 14J_8 - 32J_9 - 24J_{10} - 22J_{11} + 24J_{12} + 4J_{13} \\ &- 20J_{14} + 24J_{15} + 40J_{16} - 36J_{17} + 28J_{18} + 26J_{19}. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Ми не можемо знайти умови існування чортової сходинки для великих рангів парної взаємодії, однак можемо записати "внутрішні" (у межах множини фаз нескінченної послідовності S_m) умови існування чортової сходинки (не обов'язково повної). Вони мають вигляд:

$$E_\infty < E_m \text{ для } h = h(\infty), \quad m = 0, 1, 2, \dots, \quad (5.8)$$

де

$$h(\infty) = \lim_{m \rightarrow \infty} h(m) = \sum_i \frac{8a_i - 6b_i - 3z_i}{3} J_i. \quad (5.9)$$

Ці умови рівносильні таким:

$$\sum_i [3m^2 (a_i(\infty) - a_i(m)) + 3m (b_i(\infty) - b_i(m)) + b_i(\infty) - 3c_i(m)] J_i < 0. \quad (5.10)$$

Вони стають однаковими, починаючи з $m = m_0$, про яке йшлося вище:

$$\sum_i \frac{b_i - 3c_i}{3} J_i < 0. \quad (5.11)$$

Якщо максимальний ранг взаємодії дорівнює дев'ятнадцять, то маємо три "внутрішні" умови існування чортової сходинки:

$$\begin{aligned} & -J_3 + 2J_4 + J_5 - 2J_6 - 2J_7 - 8J_8 + 6J_9 + 2J_{10} \\ & -2J_{11} - J_{12} + 6J_{13} + 16J_{14} + 2J_{15} \\ & -30J_{16} - 8J_{17} - 4J_{18} - 28J_{19} < 0 \quad (\text{для } m > 1), \end{aligned} \quad (5.12)$$

$$\begin{aligned} & -J_3 + 2J_4 + J_5 - 2J_6 - 2J_7 - 8J_8 + 6J_9 + 2J_{10} \\ & -2J_{11} - J_{12} + 6J_{13} + 16J_{14} + 2J_{15} \\ & -30J_{16} - 8J_{17} - 10J_{18} - 28J_{19} < 0 \quad (\text{для } m = 1), \end{aligned} \quad (5.13)$$

$$\begin{aligned} & -J_3 + 2J_4 + J_5 - 2J_6 - 2J_7 - 5J_8 + 6J_9 + 2J_{10} \\ & + 4J_{11} - J_{12} - 6J_{13} + 4J_{14} - 4J_{15} \\ & -6J_{16} + 4J_{17} - 4J_{18} - 4J_{19} < 0 \quad (\text{для } m = 0). \end{aligned} \quad (5.14)$$

Ми знайшли лише необхідні, "внутрішні" умови існування чортової сходинки у випадку парної взаємодії до дев'ятнадцятого рангу включно. Якщо коефіцієнт при J_i від'ємний в усіх трьох умовах, то відповідна взаємодія сприяє утворенню чортової сходинки у випадку відштовхування, якщо додатний — у випадку притягання, якщо ж в

одних умовах додатний, а в інших від'ємний, то відповідна взаємодія в жодному випадку не сприяє утворенню чортової сходинки.

Достатні умови знайти складно, тому ми обмежимося взаємодією до четвертих сусідів включно. Розглянемо кластер з десяти вузлів, зображений на рис. 16, і запишімо Гамільтоніан у вигляді єдиної суми за такими кластерами:

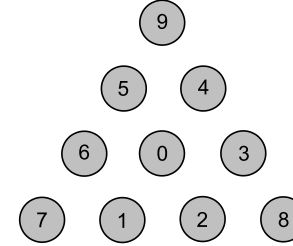


Рис. 16. Нумерація вузлів у великому трикутному кластері.

$$\begin{aligned} H = \sum_{\text{triangles}} H_i = \sum_{\text{triangles}} & \left\{ \frac{V_1}{2(2\beta_1 + \beta_2 + \beta_3 + 2\beta_4)} \right. \\ & \times [\beta_1 \sigma_{i0}^1 (\sigma_{i1}^1 + \sigma_{i2}^1 + \sigma_{i3}^1 + \sigma_{i4}^1 + \sigma_{i5}^1 + \sigma_{i6}^1) \\ & + \beta_2 (\sigma_{i1}^1 \sigma_{i2}^1 + \sigma_{i3}^1 \sigma_{i4}^1 + \sigma_{i5}^1 \sigma_{i6}^1) + \beta_3 (\sigma_{i2}^1 \sigma_{i3}^1 + \sigma_{i4}^1 \sigma_{i5}^1 + \sigma_{i6}^1 \sigma_{i1}^1) \\ & + \beta_4 (\sigma_{i7}^1 (\sigma_{i1}^1 + \sigma_{i6}^1) + \sigma_{i8}^1 (\sigma_{i2}^1 + \sigma_{i3}^1) + \sigma_{i9}^1 (\sigma_{i4}^1 + \sigma_{i5}^1))] \\ & + \frac{V_2}{2(2\gamma_1 + \gamma_2)} [\gamma_1 (\sigma_{i1}^2 \sigma_{i3}^2 + \sigma_{i3}^2 \sigma_{i5}^2 + \sigma_{i5}^2 \sigma_{i1}^2 + \sigma_{i2}^2 \sigma_{i4}^2 + \sigma_{i4}^2 \sigma_{i6}^2 \\ & + \sigma_{i6}^2 \sigma_{i2}^2) + \gamma_2 \sigma_{i0}^2 (\sigma_{i7}^2 + \sigma_{i8}^2 + \sigma_{i9}^2)] \\ & + \frac{V_3}{2(\delta_1 + 2\delta_2)} [\delta_1 (\sigma_{i1}^3 \sigma_{i4}^3 + \sigma_{i2}^3 \sigma_{i5}^3 + \sigma_{i3}^3 \sigma_{i6}^3) + \delta_2 (\sigma_{i7}^3 (\sigma_{i2}^3 + \sigma_{i5}^3) \\ & + \sigma_{i8}^3 (\sigma_{i1}^3 + \sigma_{i4}^3) + \sigma_{i9}^3 (\sigma_{i3}^3 + \sigma_{i6}^3))] \\ & + \frac{V_4}{2} [\sigma_{i7}^4 (\sigma_{i3}^4 + \sigma_{i4}^4) + \sigma_{i8}^4 (\sigma_{i5}^4 + \sigma_{i6}^4) + \sigma_{i9}^4 (\sigma_{i1}^4 + \sigma_{i2}^4)] \\ & + \frac{V_5}{2} [\sigma_{i7}^5 \sigma_{i8}^5 + \sigma_{i8}^5 \sigma_{i9}^5 + \sigma_{i9}^5 \sigma_{i7}^5] \\ & - \frac{\mu}{2(\alpha_1 + 6\alpha_2 + 3\alpha_3)} [\alpha_1 \sigma_{i0}^0 + \alpha_2 (\sigma_{i1}^0 + \sigma_{i2}^0 + \sigma_{i3}^0 + \sigma_{i4}^0 + \sigma_{i5}^0 + \sigma_{i6}^0) \\ & + \alpha_3 (\sigma_{i7}^0 + \sigma_{i8}^0 + \sigma_{i9}^0)] \Big\}, \end{aligned} \quad (5.15)$$

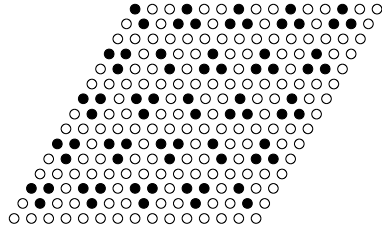


Рис. 17. Дводоменна структура на межі нескінченної послідовності фаз S_m .

де запроваджено позначення

$$\sigma_{ij}^4 = a_4 \sigma_{ij} + b_4, \quad \sigma_{ij}^5 = a_5 \sigma_{ij} + b_5. \quad (5.16)$$

Позаяк кожен вузол має дванадцять четвертих сусідів і шість п'ятих, формули переходу до простої спінової моделі такі:

$$V_i = \frac{J_i}{a_i^2}, \quad i = 1 \div 5,$$

$$\mu = \frac{1}{a_0} (h + 6(a_1 b_1 V_1 + a_2 b_2 V_2 + a_3 b_3 V_3 + 2a_4 b_4 V_4 + a_5 b_5 V_5)).$$

Як видно з наведених вище формул, кластер у вигляді великого трикутника дає змогу розглядати взаємодії до п'ятого рангу, та ми обмежимося четвертим рангом ($J_5 = 0$). Кількість конфігурацій великого трикутника з урахуванням симетрії дорівнює 208. Тому в цьому випадку, та й навіть у випадку квітки, кількість конфігурацій якої дорівнює 26, неможливо обійтися без допомоги комп'ютерних програм аналітичних обчислень.

Умови існування нескінченної послідовності фаз S_m у площині $\left(\frac{h}{|J_1|}, \frac{J_2}{|J_1|}\right)$ тотожні умовам існування на межі цієї послідовності дводоменної структури, зображеної на рис. 17. Дводоменну структуру творять конфігурації квітки ⬢ , ⬢ , ⬢ і ⬢ , або конфігурації великого трикутника, показані на рис. 18.

Якщо $-J_3 + 2J_4 < 0$, $-J_1 + 2J_3 - 2J_4 < 0$, $-J_1 + 2J_3 + 4J_4 < 0$, то можна так вибрати "вільні коефіцієнти" в (5.15), що на межі нескінченної послідовності фаз $h = 2J_1 - 6J_2 - 10J_3 - 8J_4$, починаючи з певного значення J_2 , мінімальну енергію матимуть конфігурації трикутника, зображені на рис. 18. Ці коефіцієнти можуть бути, наприклад,

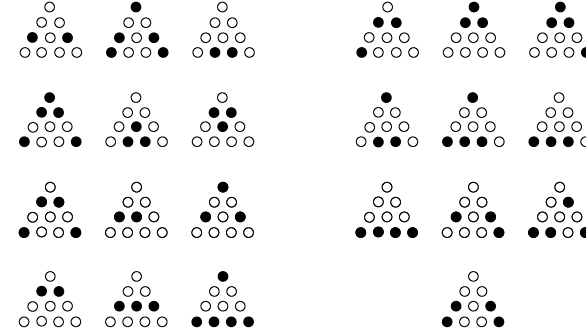


Рис. 18. Зліва: Конфігурації великого трикутника, з яких утворена дводоменна структура (перші три стрічки) та структура (b) (остання стрічка). Справа: Конфігурації великого трикутника, що мають на межі нескінченної послідовності фаз ту саму енергію, що й конфігурації, з яких утворена дводоменна структура та структура (b).

такими: $\alpha_1 = 0$, $\alpha_2 = \alpha_3$, $\beta_1 = \frac{J_1 - 2J_3 + 2J_4}{2J_4} \beta_4$, $\beta_2 = \beta_3 = \frac{J_3 - 2J_4}{J_4} \beta_4$, $\gamma_1 = \gamma_2$, $\delta_1 = \frac{J_3 - 2J_4}{J_4} \delta_2$, $a_i = \frac{1}{2}$, $b_2 = \frac{-2J_1 + J_2 + 4J_3 - 4J_4}{2J_2}$, $b_1 = b_4 = \frac{1}{2}$, $b_3 = \frac{-J_1 - J_3 + 13J_4}{6(J_3 - 3J_4)}$. Правда, таку саму енергію мають ще десять конфігурацій великого трикутника (рис. 18), та вони не можуть бути зреалізовані у цій сукупності. Це легко перевірити безпосередньо, та потреби в цьому нема, тому що ні в одну з цих конфігурацій великого трикутника не входить жодна інша квітка, крім тих, які творять дводоменну структуру та структуру (b).

Отож, маємо достатні умови існування нескінченної послідовності фаз у моделі зі взаємодією до четвертого рангу включно. Запишімо їх іще раз:

$$-J_3 + 2J_4 < 0, \quad -J_1 + 2J_3 - 2J_4 < 0, \quad -J_1 + 2J_3 + 4J_4 < 0. \quad (5.17)$$

Ці умови задають області, які зображено на рис. 19. Як бачимо, якщо ранг взаємодії більший від трьох, то чортова сходинка може існувати й у випадку притягальної взаємодії між найближчими сусідами ($J_1 < 0$). Перша з цих умов є водночас і необхідною, бо це умова (5.12). Друга (третя) умова не є необхідною, бо коли вона виконується, то на межі нескінченної послідовності фаз, окрім конфігурацій великого трикутника, зображених на рис. 18, найменшу енергію має лише перша (друга) конфігурація, яку показано на рис. 19. Проте вона не дає нових структур. Щоби знайти всю область існування

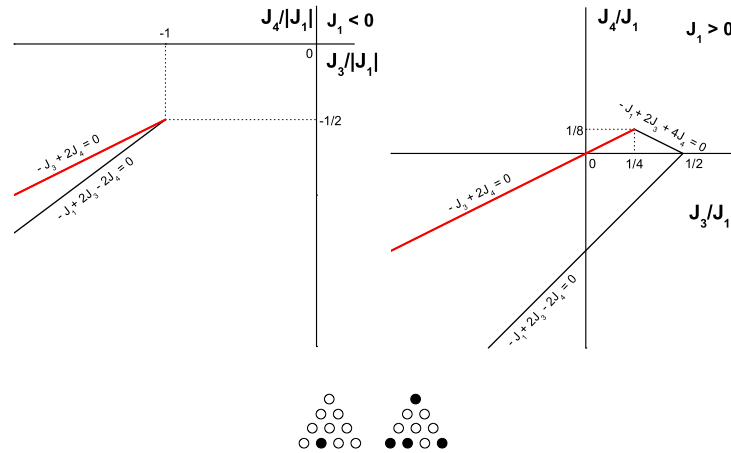


Рис. 19. Частина області існування чортової сходинки для $J_1 < 0$ і $J_1 > 0$ у випадку парної взаємодії до четвертого рангу включно, а також додаткові конфігурації великого трикутника, які реалізуються на межах областей. Червоною лінією вказано справжню межу області.

чортової сходинки у випадку парної взаємодії до четвертого рангу включно, треба розглядати більші кластери.

6. Висновки

За допомогою запропонованого методу можна побудувати повну діаграму основних станів для багатьох моделей ґраткового газу або еквівалентних їм спінових моделей. Метод особливо ефективний для дослідження виродження, що виникає на межах областей у просторі параметрів Гамільтоніану. Це дозволяє ідентифікувати фазові переходи першого роду, а також виявити нескінченні послідовності фаз — так звані нультемпературні чортові сходинки. На відміну від методу, запропонованого Брандтом і Штольце, наш метод дає змогу знаходити хаотизовані фази, а також упорядковані, однак неперіодичні структури (в тому числі квазикристалічні).

Використовуючи наш метод, ми знайшли основні стани в будь-якій точці простору параметрів Гамільтоніану моделі ґраткового газу (моделі Ізинга) на трикутній ґратці зі взаємодією перших і других сусідів й ідентифікували фазові переходи першого роду. Ми довели,

що вмикання відштовхувальної взаємодії третіх сусідів призводить до виникнення нультемпературної чортової сходинки. Це — найважливіший результат роботи. Щодо дальших сусідів, то взаємодія одних сприяє виникненню чортової сходинки у випадку відштовхування, інших — у випадку притягання, а ще інших — не сприяє ні в одному, ні в другому випадку. Ми також показали, що в моделі зі взаємодією до четвертих сусідів включно чортова сходинка може існувати й у випадку притягальної взаємодії найближчих сусідів.

Насамкінець треба зауважити, що наш метод побудови основних станів моделей ґраткового газу застосовний і для моделей з багатьма сортами частинок (або для спінових моделей зі спіном більшим однієї другої). Однак, попри цікаві результати, одержані за допомогою цього методу, він усе-таки не вирішує до кінця проблему знаходження основних станів складних моделей ґраткового газу і потребує подальшого розвитку і вдосконалення.

Автор вдячний Стасюку І. В., Мриглодові І. М., Верхоляку Т. М. і Держкові В. О. за корисні поради й обговорення результатів.

Література

1. G. H. Wannier, Phys. Rev. **79**, 357 (1950), Phys. Rev. B **7**, 501 (E) (1973).
2. J. Kanamori, Prog. Theor. Phys. **35**, 16 (1966).
3. Y. Han, Y. Shokef, A. M. Alsayed, P. Yunker, T. C. Lubensky, and A. G. Yodh, Nature **456**, 898 (2008).
Y. Shokef and T. C. Lubensky, Phys. Rev. Lett. **102**, 048303 (2009).
4. B. D. Metcalf, Phys. Lett. **46A**, 325 (1974).
5. M. Kaburagi and J. Kanamori, Japan. J. Appl. Phys. Suppl. **2**, Pt. 2, 145 (1974).
6. U. Brandt and J. Stolze, Z. Phys. B. **64**, 481 (1986).
7. Yu. I. Dublennykh, Phys. Rev. B **71**, 012411 (2005).
8. M. Sanati, L. G. Wang, and Alex Zunger, Phys. Rev. Lett. **90**, 045502 (2003).
9. J. Slawny, *Low-temperature properties of classical lattice systems: phase transitions and phase diagrams*, in: C. Domb, J. Lebowitz (Eds.), Phase Transitions and Critical Phenomena, vol. 11, Academic Press, London, New York, 1985.
10. C. Gruber, J. Jędrzejewski, and P. Lemberger, J. Stat. Phys. **66**, 913 (1992).
11. T. Kennedy, Rev. Math. Phys. **6**, 901 (1994).
12. A. S. Keys and S. C. Glotzer, Phys. Rev. Lett. **99**, 235503 (2007).

13. P. J. Steinhardt, Nature **452**, 43 (2008).
14. M. O. Blunt, J. C. Russell, M. C. Giménez-López, J. P. Garrahan, X. Lin, M. Schröder, N. R. Champness, and P. H. Beton, Science **322**, 1077 (2008).
15. R. Otero, M. Lukas, R. E. A. Kelly, W. Xu, E. Lægsgaard, I. Stensgaard, L. N. Kantorovich, and F. Besenbacher, Science **319**, 312 (2008).
16. D. P. Landau, Phys. Rev. B **27**, 5604 (1983).
17. M. Sandhoff, H. Pfnur, H.-U. Everts, Europhys. Lett. **25**, 105 (1994). J. Glosli, M. Plischke, Can. J. Phys. **61**, 1515 (1983).
18. M. Kaburagi and J. Kanamori, J. Phys. Soc. Japan **44**, 718 (1978).
19. K. Nakanishi and H. Shiba, J. Phys. Soc. Japan **51**, 2089 (1982).
20. M. E. Fisher and W. Selke, Phil. Trans. Roy. Soc. London **A302**, 1 (1981).
M. E. Fisher and W. Selke, Phys. Rev. Lett. **44**, 1502 (1980).
21. J. Kanamori, J. Phys. Soc. Japan **53**, 250 (1984).
22. T. Tonegawa, M. Kaburagi and J. Kanamori, J. Phys. Soc. Japan **59**, 1660 (1990).
23. P. Bak, Phys. Today **39**, 38 (1986).
24. M. Hupalo, J. Schmalian, and M. C. Tringides, Phys. Rev. Lett. **90**, 216106 (2003).

Додаток 1. Обчислення виразів для p_i

Вираз для p_i ($i = 1, 2, \dots$), що відповідає структурі номер m , починаючи з певного m , має вигляд

$$p_i = \frac{a_i m^2 + b_i m + c_i}{3m^2 + 3m + 1}, \quad (6.1)$$

де коефіцієнти a_i , b_i і c_i не залежать від m . Коефіцієнт a_i — це три другі від кількості i -тих сусідів частинки у граничній структурі нескінченної послідовності структур, тобто в структурі (с). Коефіцієнт b_i визначаємо таким чином:

$$b_i = 3(\Delta_0 + \Delta_1 + \Delta_2 + \dots + \Delta_k) - (6k + 1)a_i, \quad (6.2)$$

Δ_0 — кількість i -тих сусідів віддаленої від вершини частинки на межі між трикутними доменами,

Δ_l ($l = 1, 2, \dots, k$) — кількість i -тих сусідів віддаленої від вершини трійки частинок l -го шару трійок,

k — кількість шарів трійок (по один бік доменної стінки), з якими взаємодіє частинка доменної стінки.

Приклад: для восьмих сусідів $a_8 = 3$, $k = 1$, $\Delta_0 = 1$, $\Delta_1 = 4$, $b_8 = 3(1 + 4) - (6 + 1)3 = -6$.

Додаток 2. Доведення відсутності фазового переходу першого роду між двома фазами

Нехай маємо суміш двох фаз: $S(p_0^1; p_1^1, p_2^1, p_3^1, \dots)$ з вагою ε і $S(p_0^2; p_1^2, p_2^2, p_3^2, \dots)$ з вагою $1 - \varepsilon$, які утворюють фазу $S(p_0; p_1, p_2, p_3, \dots)$. Якщо границя і взаємодія між однаковими мотивами така сама, як і між різними, тобто якщо доменна стінка між доменами різних фаз має нульову енергію утворення, то для p_0 і p_i матимемо:

$$\begin{aligned} p_0 &= \frac{\varepsilon p_0^1 + \delta(1 - \varepsilon)p_0^2}{\varepsilon + \delta(1 - \varepsilon)}, \\ p_i &= \frac{\varepsilon p_i^1 p_0^1 + \delta(1 - \varepsilon)p_i^2 p_0^2}{\varepsilon p_0^1 + \delta(1 - \varepsilon)p_0^2} \quad (i = 1, 2, 3, \dots). \end{aligned} \quad (6.3)$$

Тут δ — відношення кількості вузлів у мотиві другої фази до кількості вузлів у мотиві першої фази.

Суміш фази $S(\frac{4}{15}; \frac{1}{2}, 0, \frac{5}{4})$ з вагою ε і фази $S(\frac{7}{25}; \frac{3}{7}, 0, \frac{12}{7})$ з вагою $1 - \varepsilon$ — це фаза $S(\frac{7-3\varepsilon}{5(5-2\varepsilon)}; \frac{3-\varepsilon}{7-3\varepsilon}, 0, \frac{12-7\varepsilon}{7-3\varepsilon})$ (див. рис. 20). На лінії $J_2 = -\frac{4}{3}J_1 + \frac{8}{3}J_3 - \frac{1}{6}h$, тобто на межі між фазами $S(\frac{4}{15}; \frac{1}{2}, 0, \frac{5}{4})$ і $S(\frac{7}{25}; \frac{3}{7}, 0, \frac{12}{7})$ усі можливі суміші цих фаз мають однакову енергію. Тому фазового переходу першого роду між цими фазами нема.

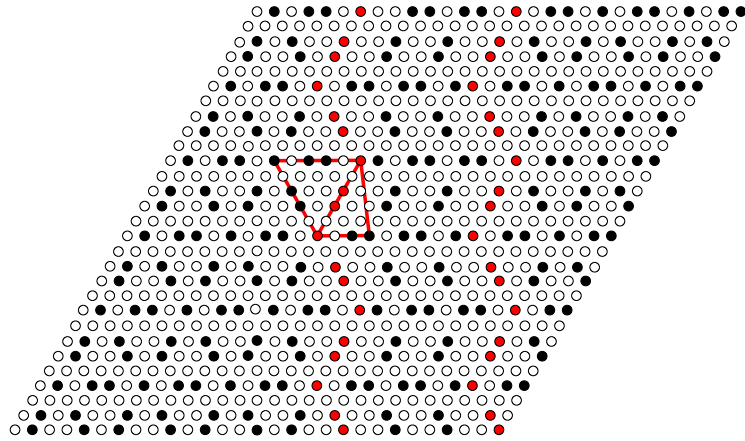


Рис. 20. Одна з можливих конфігурацій на межі фаз $S(\frac{4}{15}; \frac{1}{2}, 0, \frac{5}{4})$ та $S(\frac{7}{25}; \frac{3}{7}, 0, \frac{12}{7})$. Червоні вузли — це заповнені вузли доменних стінок між фазами.

CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

AIMS AND SCOPE: The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

ABSTRACTED/INDEXED IN:

- Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences
- ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alerting Services
- INSPEC
- Elsevier Bibliographic Databases (EMBASE, EMNursing, Compendex, GEOBASE, Scopus)
- "Referativnyi Zhurnal"
- "Dzhereło"

EDITOR IN CHIEF:

Ihor Yukhnovskii

EDITORIAL BOARD: T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk, *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Freiburg*; R. Folk, *Linz*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch, *Lviv*; M. Holovko, *Lviv*; O. Ivankiv, *Lviv*; W. Janke, *Leipzig*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; H. Krienke, *Regensburg*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Morozov, *Moscow*; I. Myrghod, *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; N. Plakida, *Dubna*; G. Röpke, *Rostock*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; M. Vavruk, *Lviv*; A. Zagorodny, *Kyiv*

CONTACT INFORMATION:

Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +38(032)2760908; Fax: +38(032)2761978
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>