Юрій Ігорович Дубленич

Структури на ґратках: деякі корисні співвідношення

Роботу отримано 28 грудня 2010 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

Національна академія наук України

ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

ICMP–10–19U

Ю.І.Дубленич

СТРУКТУРИ НА ҐРАТКАХ: ДЕЯКІ КОРИСНІ СПІВВІДНОШЕННЯ

ЛЬВІВ

УДК: 537.611.2, 538.971

PACS: 05.50.+q, 75.10.Hk, 68.43.Fg, 68.43.De

Структури на ґратках: деякі корисні співвідношення

Ю.І.Дубленич

Анотація. В роботі розглянуто структури на ґратці, згенеровані множиною конфігурацій деякого кластера. З загальних міркувань показано, що відносні вмісти цих конфігурацій в структурах пов'язані деякими лінійними співвідношеннями. Такі співвідношення можуть бути корисними для знаходження основних станів моделей ґраткового газу (або еквівалентних спінових моделей). Як приклад розглянуто множину конфігурацій семивузлового кластера на трикутній ґратці.

Structures on lattices: some useful relations

Yu.I.Dublenych

Abstract. We consider a lattice and structures on it generated by a set of configurations of a cluster. Using some general considerations, we show that there exist linear relations between fractional contents of these configurations in the structures. Such relations can be useful for the determination of the ground states of lattice-gas models (or equivalent spin models). As an illustration we consider a set of configurations of a seven-site cluster on the triangular lattice.

Подається в Physical Review E
Submitted to Physical Review E

У багатьох методах визначення основних станів моделей ґраткового газу (або еквівалентних спінових моделей) глобальні структури основного стану будують з локальних конфігурацій деякої множини вузлів [1]- [3]. Ми покажемо, що відносні вмісти цих конфігурацій в довільній структурі, яку ці конфігурації генерують, пов'язані деякими лінійними співвідношеннями. Щоби уникнути неоднозначностей, ми насамперед нагадаємо деякі означення.

Розгляньмо якусь ґратку без жодних обмежень на її розмірність і топологію, наприклад, трикутну ґратку на нескінченній площині, або ж тривимірну гранецентровану кубічну ґратку, або ж трикутну ґратку на поверхні нескінченного циліндра і т. д. Як приклад ми розглядатимемо нескінченну трикутну ґратку на площині.

Розгляньмо скінченну множину вузлів ґратки. Називатимемо її "кластером". У випадку трикутної ґратки це може бути, наприклад, вузол з шістьма сусідніми вузлами  (такий кластер називатимемо "квіткою"). Два кластери на ґратці називатимемо еквівалентними, якщо кожен з них переходить в інший при якійсь операції симетрії ґратки. Вважатимемо, що усі кластери, еквівалентні вибраному, покривають ґратку (звичайно, з перекриттями). Наприклад, трикутну ґратку можна покрити квітками: кожен вузол є центром квітки. Завдяки симетрії ізотропної трикутної ґратки кожна квітка на ґратці еквівалентна будь-якій іншій квітці й орієнтація квітки не має значення. Ми вважатимемо еквівалентні кластери одним і тим самим кластером з різним розташуванням на ґратці й просто говоритимемо, що ґратку можна покрити кластером.

Кожен вузол на ґратці може бути в одному із скінченного числа станів. У найпростішому випадку це число дорівнює два. Наприклад, вузол може бути зайнятим частинкою (такий вузол зображатимемо чорним кружечком) або ж вільним (білий кружечок). Якщо стан кожного вузла визначено, то говоримо, що на ґратці задано структуру. Якщо визначеним є кожен вузол кластера, то маємо конфігурацію кластера. Конфігурація кластера в структурі залежить від його розташування на ґратці.

Розгляньмо кластер $\boldsymbol{K}$, що покриває ґратку з перекриттями, і множину його конфігурацій $\{\boldsymbol{K}_l\}$ ($l = 1, 2, ..., L$). Розгляньмо підкластер $\boldsymbol{Q}$ цього кластера. Нехай підкластер може займати M *нееквівалентних* позицій в кластері. Нумеруватимемо їх індексом m ($m = 1, 2, ..., M$). Нехай кожен підкластер $\boldsymbol{Q}$ на ґратці міститься в c_m кластерах $\boldsymbol{K}$ в позиції m. Ось приклад: центральна і бічна позиції одновузлового підкластера в квітці ($M = 2$). $c_1 = 1$, бо кожен вузол входить лише у дві квітки у центральній позиції і $c_2 = 6$, бо кожен вузол входить у шість квіток в бічній позиції.

Розгляньмо на ґратці структуру $\boldsymbol{S}$, згенеровану множиною $\{\boldsymbol{K}_l\}$ конфігурацій кластера. Це означає, що кожен кластер $\boldsymbol{K}$ на ґратці має одну з конфігурацій з множини $\{\boldsymbol{K}_l\}$. Позначатимемо відносний вміст конфігурації $\boldsymbol{K}_l$ в структурі $\boldsymbol{S}$ через k_l. Виконується таке тривіяльне співвідношення:

$$\sum_l k_l = 1. \tag{1}$$

Розгляньмо тепер підкластер $\boldsymbol{Q}_t$ з множини $\{\boldsymbol{Q}_t\}$ усіх можливих конфігурацій підкластера й знайдімо її вміст в структурі $\boldsymbol{S}$. Це можна зробити різними способами, залежно від позиції підкластера в кластері. Нехай це позиція m. Тоді кількість конфігурацій $\boldsymbol{Q}_t$ на один кластер $\boldsymbol{K}$ дорівнює

$$\sum_l \frac{k_l n_{ml}}{c_m}, \tag{2}$$

де n_{ml} — число конфігурацій $\boldsymbol{Q}_t$ підкластера в позиції m в конфігурації $\boldsymbol{K}_l$ кластера.

Число конфігурацій $\boldsymbol{Q}_t$ не має залежати від m, тому виконується таке співвідношення:

$$\sum_l \frac{k_l n_{m_1 l}}{c_{m_1}} = \sum_l \frac{k_l n_{m_2 l}}{c_{m_2}}, \tag{3}$$

де m_1 і m_2 — довільні *нееквівалентні* позиції підкластера $\boldsymbol{Q}$ в кластері $\boldsymbol{K}$. Ця рівність пов'язує величини k_l. Розглядаючи різні пари позицій підкластера в кластері, одержимо інші співвідношення. Ми можемо також розглянути якийсь інший підкластер кластера $\boldsymbol{K}$. Важливо тільки, щоби підкластер мав принаймні дві нееквівалентні позиції в кластері.

Розгляньмо ***приклад***. Кластер "квітка" на трикутній ґратці має тільки три підкластери цього типу: (1) одновузловий підкластер, (2) пара найближчих сусідів і (3) тривузловий кластер з кутом 120°. Кожен з цих підкластерів має дві нееквівалентні позиції в кластері "квітка".

Розгляньмо таку множину конфігурацій кластера "квітка" на трикутній ґратці: { , , , ,  }. Їхні відносні вмісти в структурі позначимо k_1, k_2, k_3, k_4 і k_5, відповідно. Виберімо підкластер у вигляді двох сусідніх вузлів. Цей підкластер може займати дві різні позиції в кластері (Рис. 1): радіяльну ($m = 1$) й бічну ($m = 2$).

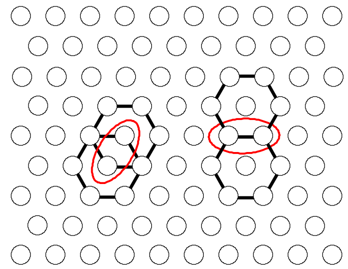

Рис. 1. Двовузловий підкластер (в червоному овалі) на трикутній ґратці входить у дві квітки в радіяльній позиції (зліва) й у дві квітки в бічній позиції (справа).

Розгляньмо конфігурацію підкластера, в якій обидва вузли зайняті. Для цієї конфігурації маємо:

$$\begin{aligned} &c_1 = 2, \quad n_{11} = 1,\ n_{12} = 2,\ n_{13} = 0,\ n_{14} = 0,\ n_{15} = 2; \\ &c_2 = 2, \quad n_{21} = 0,\ n_{22} = 0,\ n_{23} = 1,\ n_{24} = 2,\ n_{25} = 1. \end{aligned} \tag{4}$$

$c_1 = c_2 = 2$, бо підкластер входить у дві квітки як в радіяльній, так і бічній позиціях.

Підставляючи ці числа в (3), одержуємо зв'язок між відносними вмістами конфігурацій квітки у будь-якій структурі, яку ці конфігурації генерують (див. Рис. 2):

$$k_1 + 2k_2 - k_3 - 2k_4 + k_5 = 0. \tag{5}$$

Розгляньмо тепер конфігурацію підкластера, в якій обидва вузли вакантні. Числа n_{ml} для цієї конфігурації такі:

$$\begin{aligned} &n_{11} = 0,\ n_{12} = 0,\ n_{13} = 3,\ n_{14} = 2,\ n_{15} = 0; \\ &n_{21} = 4,\ n_{22} = 2,\ n_{23} = 1,\ n_{24} = 0,\ n_{25} = 3. \end{aligned} \tag{6}$$

Підсталяючи ці числа в рівняння (3), одержуємо ще одне співвідношення:

$$4k_1 + 2k_2 - 2k_3 - 2k_4 + 3k_5 = 0. \tag{7}$$

Отже, крім тривіяльного співвідношення (1), є ще два співвідношення між відносними вмістами конфігурацій , , , ,  в структурах, які вони генерують. Можна показати, що інші співвідношення (одержані за допомогою інших підкластерів) будуть лінійними комбінаціями цих трьох. Якщо ми маємо множину з трьох конфігурацій квітки, то три співвідношення цілком визначають їхній

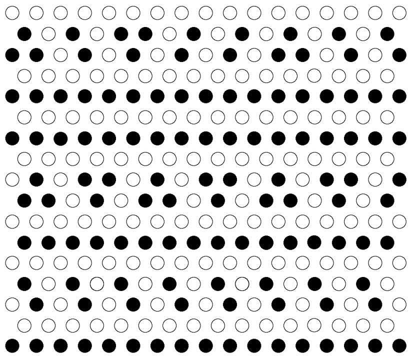

Рис. 2. Приклад структури, згенерованої множиною конфігурацій, про яку йдеться в тексті.

вміст у будь-якій структурі, яку ці конфігурації генерують. Якщо ж структуру генерує множина з чотирьох конфігурацій квітки, то в загальному випадку лише один із відносних вмістів може бути незалежним.

Знання відносних вмістів k_l конфігурацій кластера в структурі дає змогу знайти густину $p_{\boldsymbol{Q}_t}$ (кількість на один кластер $\boldsymbol{K}$) будь-якої конфігурації $\boldsymbol{Q}_t$ довільного підкластера $\boldsymbol{Q}$ в структурі:

$$p_{\boldsymbol{Q}_t} = \frac{\sum_l k_l n_{\boldsymbol{Q}_t l}}{c_{\boldsymbol{Q}}}, \tag{8}$$

де $n_{\boldsymbol{Q}_t l}$ — число конфігурацій $\boldsymbol{Q}_t$ в l-ій конфігурації кластера $\boldsymbol{K}$, $c_{\boldsymbol{Q}}$ — повне число кластерів $\boldsymbol{K}$ на ґратці, в які входить підкластер $\boldsymbol{Q}$. Для тієї цілі можна використати також вираз (2).

Усе вищесказане незастосовне для кластера, в якому нема підкластерів з принаймі двома різними позиціями в кластері. Кільце  є прикладом такого кластера на трикутній ґратці.

Співвідношення (3) між відносними вмістами конфігурацій кластера в структурі цікаві самі собою. Та крім цього вони корисні, а інколи й необхідні для аналізу основних станів моделей ґраткового газу (або ж еквівалентних спінових моделей). Це буде показано в нашій наступній роботі.

Виникають деякі питання, на які ми поки що не знаємо відповіді. Чи існує простий спосіб знайти кількість лінійно незалежних співвідношень для заданого кластера? Чи завжди існує підкластер, який генерує всі лінійно незалежні співвідношення, як у розглянутому прикладі?

Література

1. T. Kennedy, Rev. Math. Phys. **6**, 901 (1994).
2. V. Derzhko, J. Jędrzejewski, Physica A **349**, 511 (2005).
3. Yu. I. Dublenych, Phys. Rev. E **80**, 011123 (2009).