

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

КОНТИНУУМ ОСНОВНИХ СТАНІВ У ДЕЯКИХ МОДЕЛЯХ ҐРАТКОВОГО ГАЗУ НА ТРИКУТНІЙ ҐРАТЦІ ЗІ ВЗАЄМОДІЯМИ СКІНЧЕННОГО РАДІУСА

Роботу отримано 30 грудня 2010 р.

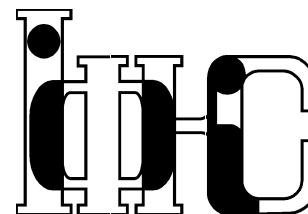
Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-10-23U

Ю.І.Дубленич

КОНТИНУУМ ОСНОВНИХ СТАНІВ У ДЕЯКИХ МОДЕЛЯХ
ҐРАТКОВОГО ГАЗУ НА ТРИКУТНІЙ ҐРАТЦІ
ЗІ ВЗАЄМОДІЯМИ СКІНЧЕННОГО РАДІУСА

ЛЬВІВ

УДК: 537.611.2, 538.971

PACS: 75.10.Hk, 68.43.Fg, 61.44.Br, 89.75.Kd

Континуум основних станів у деяких моделях ґраткового газу на трикутній ґратці зі взаємодіями скінченного радіуса

Ю.І.Дубленич

Анотація. В роботі показано, що існують моделі ґраткового газу (або еквівалентні спінові моделі) на трикутній ґратці зі взаємодіями скінченного радіуса, які в просторі параметрів взаємодії й хемічного потенціалу мають повновимірні області з континуумом основних станів. Цей континуум виникає через нелінійну залежність густини енергії від густини частинок і тісно пов'язаний з проблемою нескінченно адаптативних структур, які спостерігаються в багатьох кристалічних сполуках, а також з проблемою квазикристалів і так званих безладно упорядкованих структур.

Continuum of ground states in some finite-range lattice-gas models on the triangular lattice

Yu.I.Dublenych

Abstract. Here we prove that there are such finite-range lattice-gas models (or equivalent spin ones) on the triangular lattice which, in the space of the interaction parameters and the chemical potential, have a full-dimensional region with a continuum of ground states. This fact is due to the nonlinear dependence of the density of energy on the density of particles and is closely related to the problem of infinitely adaptive structures observed in a large number of compounds and the existence of the quasicrystalline and so-called irregularly ordered structures.

Подається в Physical Review E
Submitted to Physical Review E

Одна з найцікавіших проблем сучасної фізики — це проблема утворення структур. Попри те, що інтенсивні дослідження в цій галузі тривають вже не одне десятиліття, залишається чимало фундаментальних питань, на яких ще нема відповіді. Серед них ось які: чому формуються квазикристали? [1]- [2], що є причиною нескінченної адаптативності деяких сполук? [3]- [6], а також зовсім свіже питання про те, чи існують безладно упорядковані структури [7]. Сподіваємося, що наша робота проллє трохи світла на усі ці три проблеми. Ми розглянули доволі просту модель ґраткового газу на трикутній ґратці й проаналізували деякі з її основних станів. Ми строго довели існування континууму основних станів у цій моделі. Основні стани цього континууму параметризовані хемічним потенціалом й поміж них є як упорядковані, так і частково хаотизовані структури. А серед упорядкованих структур є як періодичні, так і упорядковані аперіодичні. Ми припускаємо, що серед останніх є як квазикристалічні структури (Фур'є-образ просторового розподілу частинок є набором дельта-піків), так і безладно упорядковані структури. Принаймні структури хоча б одного з цих двох класів мусять бути.

Існування континууму основних станів у моделі, яку ми тут розглядаємо, доводить, що нескінченна адаптативність, яку спостерігають у багатьох сполуках [3], може виникати і в системах зі взаємодіями скінченного, хоч і порівняно великого радіуса. Це суперечить припущенню Кіттеля про те, що за нескінченну адаптативність відповідають далекосяжні взаємодії [4]. Зауважмо, що деякі чисельні розрахунки узгоджуються з припущенням Кіттеля [5], однак у [6] нескінченну адаптативність одержано — так само чисельним способом — в системі зі взаємодіями скінченного радіуса. Наші ж результати цінні тим, що є аналітичними і їх не можна одержати чисельно.

У [8] ми довели, що в просторі параметрів (який включає також хемічний потенціал) моделі ґраткового газу на трикутній ґратці з парною взаємодією перших, других і третіх сусідів і тричастинковою взаємодією найближчих сусідів, є гіпергрань, де структури основного стану будуються з такої множини конфігурацій квітки (вузол з шістьма найближчими вузлами): , ,  і , тобто кожна квітка в цих структурах має мати одну з цих чотирьох конфігурацій. Рівняння частини цієї гіперграні у просторі параметрів спінового Гамільтоніану має вигляд:

$$12J_1 - 30J_2 + 12J_3 + 10J_\Delta - 3h = 0,$$

$$-J_3 < 0, \quad \text{flower symbol}$$

$$-J_2 + 2J_3 < 0, \quad \text{flower symbol} \quad \text{flower symbol} \quad \text{flower symbol}$$

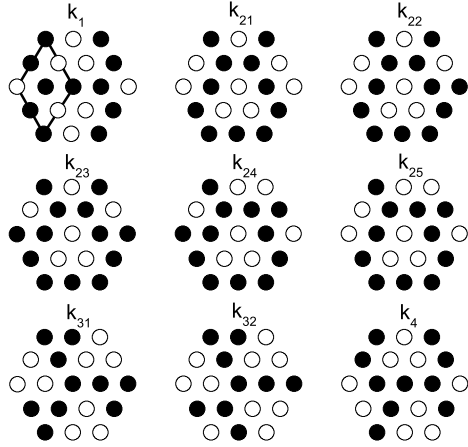


Рис. 1. Множина конфігурацій великої квітки. Чорні кружечки означають частинки, білі — вакантні вузли.

$$\begin{aligned}
 3J_2 - 6J_3 - 2J_\Delta &< 0, \quad \text{⦿} \\
 3J_1 - 9J_2 + 2J_\Delta &< 0, \quad \text{⦿} \\
 -3J_1 + 6J_2 - 2J_\Delta &< 0, \quad \text{⦿} \\
 3J_1 - 12J_2 + 3J_3 + 4J_\Delta &< 0, \quad \text{⦿}.
 \end{aligned} \tag{1}$$

Тут J_1 , J_2 , J_3 і J_Δ — взаємодія перших, других і третіх сусідів та триспінова взаємодія найближчих сусідів, відповідно, а h — зовнішнє поле. Збоку вказано додаткові конфігурації, що мають мінімальну енергію на відповідній 3-грані, яка обмежує гіпергрань. Треба зауважити, що це не вся гіпергрань, бо одна з умов, а саме умова $-J_2 + 2J_3 < 0$ занадто сильна (додаткові конфігурації не дають нових структур). Однак для нас не так важливо цілком визначити цю гіпергрань, як просто довести, що така гіпергрань існує.

Ми досліджуватимемо структури на цій гіперграні, однак нам треба буде враховувати взаємодії до восьмих сусідів включно, тому замість множини конфігурацій квітки доведеться використовувати еквівалентну множину конфігурацій більшого кластера, що містить 19 вузлів (Рис. 1). Цей кластер називатимемо "великою квіткою".

Розгляньмо підкластер великої квітки, який має форму ромба. Такий підкластер може займати дві нееквівалентні позиції у великій квітці. Використавши метод, описаний в [9], одержимо шість співвід-

ношень (окрім тривіального) між відносними вмістами k_{ij} дев'яти конфігурацій великої квітки в структурах, які вони генерують:

$$\begin{aligned}
 k_{32} &= 2k_1, \\
 2k_{21} + k_{22} &= 2k_1, \\
 k_{25} + k_{32} &= 2k_{32}, \\
 2k_{25} + 2k_{24} &= 2k_4, \\
 3k_{31} + k_{32} + k_4 &= 2k_4, \\
 2k_1 + k_{22} + 2k_{23} &= 2k_{32}, \\
 k_1 + k_{21} + k_{22} + k_{23} + k_{24} + k_{25} + k_{31} + k_{32} + k_4 &= 1.
 \end{aligned} \tag{2}$$

З цих співвідношень одержуємо:

$$\begin{aligned}
 k_1 &= \frac{3 - 7k_4}{13}, \quad k_{22} = -2k_{21} + \frac{6 - 14k_4}{13}, \quad k_{23} = k_{21}, \\
 k_{24} &= \frac{-6 + 27k_4}{13}, \quad k_{25} = \frac{6 - 14k_4}{13}, \quad k_{31} = \frac{-2 + 9k_4}{13}, \\
 k_{32} &= \frac{6 - 14k_4}{13}.
 \end{aligned} \tag{3}$$

Позаяк ми будемо розглядати багаточастинкові взаємодії, то musimо розрізняти кластери вузлів і кластери частинок (тобто кластери заповнених вузлів). Останні називатимемо "f-кластерами" (від англійського "filled cluster"). Розгляньмо f-кластер $\mathbf{K}$ й відповідну взаємодію. Щоби порахувати густину енергії структури, треба знати густину f-кластерів $\mathbf{K}$ у цій структурі, тобто число f-кластерів $\mathbf{K}$ на вузол. Найпростіший f-кластер — це одна частинка, а відповідна густина p_0 — число частинок на вузол. Замість числа f-кластерів $\mathbf{K}$ на вузол використовуватимемо число $p_{\mathbf{K}}$ f-кластерів $\mathbf{K}$ на частинку. Густина f-кластерів $\mathbf{K}$ дорівнює $p_0 p_{\mathbf{K}}$. Вирази (3) дають змогу легко знайти $p_{\mathbf{K}}$ для довільного f-кластера $\mathbf{K}$ в межах великої квітки. Знайдімо p_i ($i = 0 - 8$) і p_Δ , де p_0 — число частинок на вузол, тобто густина частинок, p_i ($i = 1 - 8$) — число пар частинок на частинку, які є i -тими сусідами (двочастинкові f-кластери), p_Δ — число трійок частинок на частинку, які є найближчими сусідами (тричастинковий f-кластер):

$$\begin{aligned}
 p_0 &= \frac{1}{19} (11k_1 + 11k_{21} + 12k_{22} + 13k_{23} + 12k_{24} + 11k_{25} + 10k_{31} \\
 &\quad + 9k_{32} + 10k_4) = \frac{7 + k_4}{13},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
p_{\Delta} &= \frac{1}{12p_0} (k_{22} + 2k_{23} + 2k_{24} + k_{25} + 3k_{31} + k_{32} + k_4) = \frac{13}{3} - \frac{7}{3p_0}, \\
p_1 &= \frac{1}{14p_0} (10k_1 + 11k_{21} + 13k_{22} + 15k_{23} + 14k_{24} + 12k_{25} + 12k_{31} \\
&\quad + 9k_{32} + 10k_4) = \frac{9 + 5k_4}{13p_0} = 5 - \frac{2}{p_0}, \\
p_2 &= \frac{1}{10p_0} (10k_1 + 10k_{21} + 11k_{22} + 12k_{23} + 10k_{24} + 9k_{25} + 6k_{31} \\
&\quad + 7k_{32} + 8k_4) = \frac{12 - 2k_4}{13p_0} = -2 + \frac{2}{p_0}, \\
p_3 &= \frac{1}{9p_0} (7k_1 + 7k_{21} + 9k_{22} + 11k_{23} + 9k_{24} + 7k_{25} + 6k_{31} \\
&\quad + 5k_{32} + 7k_4) = \frac{9 + 5k_4}{13p_0} = 5 - \frac{2}{p_0}, \\
p_4 &= \frac{1}{6p_0} (16k_1 + 16k_{21} + 18k_{22} + 20k_{23} + 19k_{24} + 17k_{25} + 12k_{31} \\
&\quad + 10k_{32} + 13k_4) = \frac{30 + 8k_4}{13p_0} = 8 - \frac{2}{p_0}, \\
p_5 &= \frac{1}{4p_0} (2k_1 + 3k_{21} + 4k_{22} + 5k_{23} + 5k_{24} + 4k_{25} + 3k_{31} \\
&\quad + k_{32} + 2k_4) = \frac{6 + 12k_4}{13p_0} = 12 - \frac{6}{p_0}, \\
p_6 &= \frac{1}{3p_0} (4k_1 + 2k_{21} + 4k_{22} + 6k_{23} + 3k_{24} + 2k_{25} + 3k_{31} \\
&\quad + 2k_{32} + 2k_4) = \frac{12 - 2k_4}{13p_0} = -2 + \frac{2}{p_0}, \\
p_7 &= \frac{1}{2p_0} (4k_1 + 4k_{21} + 5k_{22} + 6k_{23} + 5k_{24} + 3k_{25} + 3k_{31} \\
&\quad + 2k_{32} + 2k_4) = \frac{18 + 10k_4}{13p_0} = 10 - \frac{4}{p_0}, \\
p_8 &= \frac{1}{p_0} (2k_1 + 2k_{21} + 2k_{22} + 3k_{23} + k_{24} + k_{25} + k_4) \\
&= \frac{18 - 16k_4 + 13k_{21}}{13p_0} = -16 + \frac{10 + k_{21}}{p_0}.
\end{aligned} \tag{4}$$

Коефіцієнт при p_0 в знаменнику — це число великих квіток на ґратці, в які входить відповідний f-кластер. Як бачимо, густини $p_0 p_i$ ($i = 1 - 7$) і $p_0 p_{\Delta}$ лінійно залежать від густини частинок p_0 . Для во-смих сусідів ця залежність вже не лінійна. Неважко довести, що для

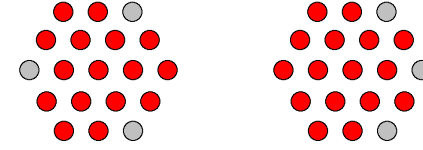


Рис. 2. Максимальні кластери (зabarвлені в червоний колір) на три-кутній ґратці, діаметр яких не перевищує відстані між сьомими су-сідами.

будь-якого f-кластера $\mathbf{K}$, діаметр якого не перевищує відстані між сьомими сусідами залежність $p_0 p_{\mathbf{K}}$ від p_0 лінійна. Такий f-кластер є f-підкластером принаймні одного з двох мінімальних f-кластерів, діаметр яких дорівнює відстані між сьомими сусідами (Рис. 2). До-сити довести, що для будь-якого f-підкластера $\mathbf{K}$ цих максимальних f-кластерів виконується така рівність:

$$n_{21} + n_{23} = 2n_{22}, \tag{5}$$

де n_{21} , n_{23} і n_{22} — числа f-підкластерів $\mathbf{K}$ у конфігураціях великої квітки 21, 23 і 22, відповідно. Тільки тоді $p_{\mathbf{K}}$ залежатиме лише від k_4 (яке у свою чергу залежить від p_0) і не залежатиме від k_{21} . Погля-нувши уважно на конфігурації 21, 23 і 22, можна легко переконатися, що ця рівність виконується для усіх f-підкластерів максимальних f-кластерів.

Знайдемо залежність k_{21} від p_0 . Розглянемо усі структури, збудо-вані з множини конфігурацій великої квітки, зображених на Рис. 1 (або з еквівалентної множини конфігурацій квітки ⬢⬢⬢ , ⬢⬢⬢ , ⬢⬢⬢ і ⬢⬢⬢) так, щоби конфігурація 31 великої квітки входила в кожну структу-ру. Можна показати, що такі структури утворені доменами, ієрархію яких зображено на Рис. 3 і лише два або три послідовні члени ієрархії можуть входити в одну й ту саму структуру. Домени сполучаються по шість так, як зображено на Рис. 4. Приклад таких структур і схеми їх доменів показано на Рис. 5.

Домени зі стороною k зигзагів мають $9k$ бічних і $(k-1)(2k-1)$ внутрішніх заповнених вузлів; кількість вакантних вузлів дорівнює $\frac{3k(k+1)}{2}$. На кожному стику шести доменів є три вузли спільні для трьох доменів. Отже є $\frac{3}{2}$ вузла на домен, які спільні для трьох доме-нів. Решта бічних вузлів спільні для двох доменів. Тому таке число

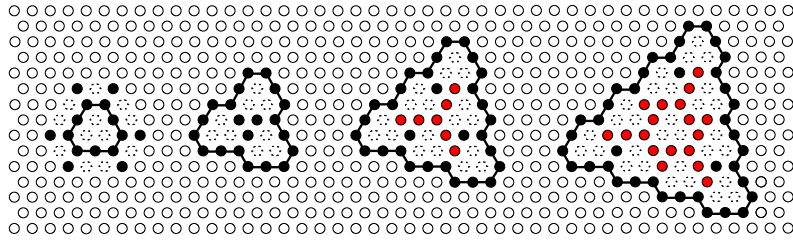


Рис. 3. Ієрархія доменів зі стороною 1, 2, 3, 4... зигзагів. Частинки зображено чорними й червоними кружечками, а вакансії — білими пунктирними кружечками.

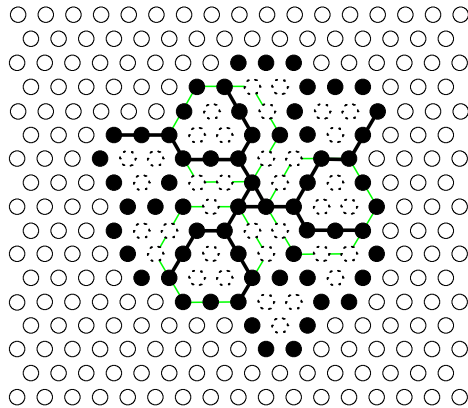


Рис. 4. Стик доменів. Конфігурації 21 показано зеленими шестикутниками.

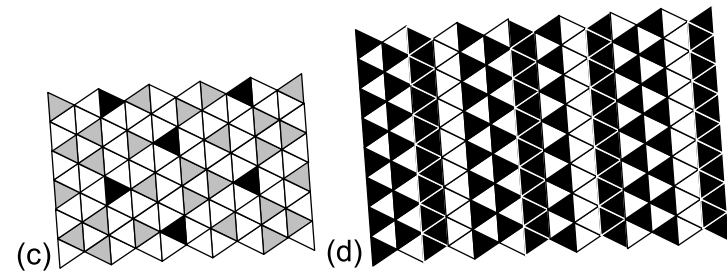
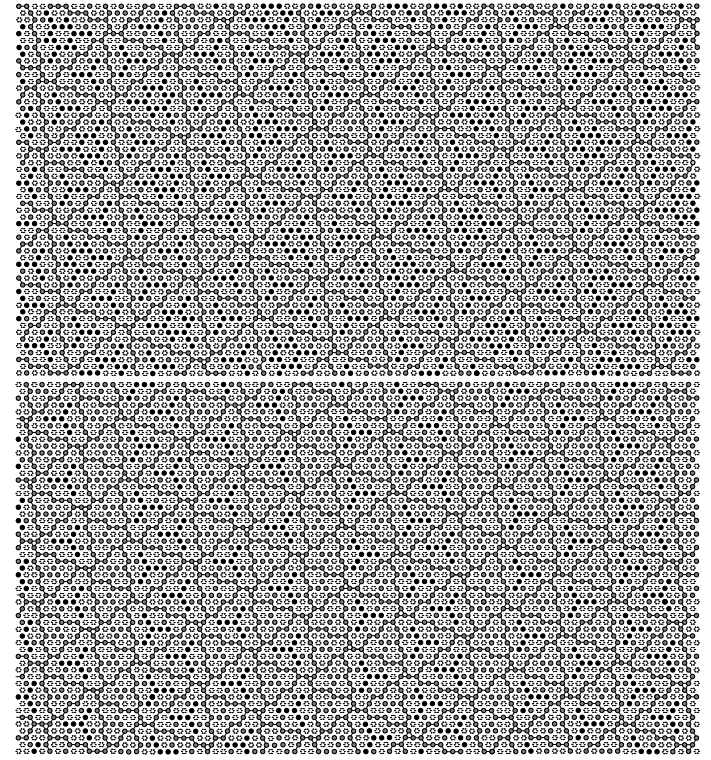


Рис. 5. Приклади структури з (а) трьома ($p_0 = \frac{460}{823}$) і (б) двома ($p_0 = \frac{34}{61}$) типами доменів, утворених множиною конфігурацій, які зображено на Рис. 1. Заповнені вузли зображено чорними і сірими кружечками, а вакантні вузли — білими пунктирними кружечками. Схема доменної надструктури структури з (с) трьома і (д) двома типами доменів. Малі, середні й великі домени зображено чорними, білими й сірими трикутниками, відповідно.

вакантних вузлів належить одному доменів зі стороною k :

$$2k^2 + \frac{3}{2}k + \frac{1}{4} = \frac{(2k+1)(4k+1)}{4}. \quad (6)$$

Нехай сторона найменшого домена в структурі дорівнює k , а відносний вміст таких доменів дорівнює n_1 . Позначимо відносний вміст доменів зі стороною $k+1$ і $k+2$ через n_2 і n_3 , відповідно. Простий підрахунок дає таку формулу для густини частинок у відповідній структурі:

$$p_0 = \frac{(8k^2 + 6k + 1)n_1 + (8k^2 + 22k + 15)n_2 + (8k^2 + 38k + 45)n_3}{(14k^2 + 12k + 1)n_1 + (14k^2 + 40k + 27)n_2 + (14k^2 + 68k + 81)n_3}. \quad (7)$$

Конфігурації 21 виникають лише на стику шести доменів і їх є по три на кожному стику. Отже відносний вміст цих конфігурацій в структурі такий:

$$k_{21} = \frac{6}{(14k^2 + 12k + 1)n_1 + (14k^2 + 40k + 27)n_2 + (14k^2 + 68k + 81)n_3}. \quad (8)$$

Розгляньмо структуру, утворену трьома типами доменів. Таку структуру можна розбити на вузькі й широкі смуги. Вузькі смуги утворені малими й середніми доменами, а широкі смуги — середніми й великими доменами. Таке розділення на паралельні стрічки єдине для даної структури і його можна здійснити одночасно у трьох напрямках. На перетині двох вузьких смуг є малий і середній домен, а на перетині двох широких смуг — середній і великий домен, на перетині ж вузької й широкої смуг — два середні домен. Не може бути двох малих або ж двох великих доменів на перетині двох смуг. Якщо структура періодична й має s вузьких і l широких смуг у періоді, то комірка такої структури містить s^2 малих, l^2 великих і $s^2 + l^2 + 4sl$ середніх доменів. Відносний вміст малих (n_1), середніх (n_2) і великих (n_3) доменів такий:

$$\begin{aligned} n_1 &= \frac{s^2}{2(s+l)^2}, \\ n_2 &= \frac{s^2 + 4sl + l^2}{2(s+l)^2}, \\ n_3 &= \frac{l^2}{2(s+l)^2}. \end{aligned} \quad (9)$$

З цих співвідношень випливає:

$$n_2 = \frac{1}{2} - 2n_1 + \sqrt{2n_1}, \quad n_3 = \frac{1}{2} + n_1 - \sqrt{2n_1}. \quad (10)$$

Зрозуміло, що співвідношення (9), а отже й співвідношення (10) справедливі й для аперіодичних структур, й легко переконатися, що вони виконуються й для структур з двома типами доменів ($n_3 = 0$).

Аналізуючи розглядувані структури, можна помітити й довести, що вони цілковито визначаються розташуванням трилисників , або ж конфігурацій 31. Введемо величину r — середню відстань між сусідніми трилисниками (в одиницях трійок вакантних вузлів, оточених частинками). Легко показати справедливість таких виразів для r :

$$r = \frac{s + 2l + k(s+l)}{-s + k(s+l)} = \frac{2 + k - \sqrt{2n_1}}{k - \sqrt{2n_1}}. \quad (11)$$

Тепер вирази (7) і (8) для p_0 і k_{21} можна переписати в простій формі:

$$p_0 = \frac{1 + 15r^2}{1 + 27r^2}, \quad (12)$$

$$k_{21} = \frac{3(r-1)^2}{1 + 27r^2}, \quad (13)$$

що дає змогу легко виразити k_{21} , а отже p_8 через густину частинок p_0 :

$$k_{21} = \frac{13p_0 - 7 - \sqrt{3(1-p_0)(9p_0-5)}}{2}, \quad (14)$$

$$p_8 = -\frac{19}{2} + \frac{13 - \sqrt{3(1-p_0)(9p_0-5)}}{2p_0}. \quad (15)$$

Вирази для k_{21} і p_8 справедливі для $\frac{5}{9} < p_0 \leq \frac{4}{7}$, тобто для структур, в які входить конфігурація 31. Залишається розглянути ще структури без конфігурації 31. Вони були частково проаналізовані в [8] (структури 12). Для них $p_0 = \frac{5}{9}$, $k_4 = \frac{2}{9}$, а k_{21} змінюється від $\frac{1}{9}$ [структура 12a, Рис. 6(b)] до $\frac{2}{27}$ [структура 12b, Рис. 6(c)].

Нехай I_1, I_2, I_3, I_8 — взаємодія перших, других, третіх і восьмих сусідів, відповідно, а I_Δ — тричастинкова взаємодія. Крім взаємодії восьмих сусідів, ми не розглядаємо додаткових взаємодій, які відповідають якимсь f-підкластерам максимальних f-кластерів, тому що густина цих підкластерів залежить від p_0 лінійно, а отже відповідні взаємодії не усувають виродження. Виродження усуває аж взаємодія восьмих сусідів. Енергія структур з густиною частинок p_0 така:

$$E = p_0 (p_1 I_1 + p_2 I_2 + p_3 I_3 + p_8 I_8 + p_\Delta I_\Delta - \mu_{lg}). \quad (16)$$

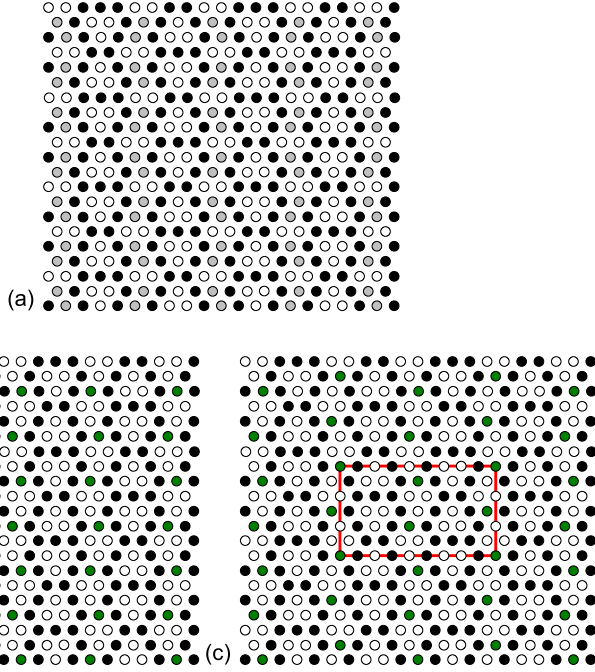


Рис. 6. (a) Структури 12. Верхній або нижній з кожної пари сірих вузлів має бути заповненим (однаково в парах однієї й тієї ж зигзаг-смуги). (b) Структура 12a. (c) Структура 12b.

Використовуючи вирази для p_1, p_2, p_3, p_8 і p_Δ , одержуємо:

$$E = p_0 \left(5I_1 - 2I_2 + 5I_3 + \frac{13}{3}I_\Delta - \mu_{lg} - \frac{19}{2}I_8 \right) - \frac{\sqrt{3(1-p_0)(9p_0-5)}}{2}I_8 - \left(2I_1 - 2I_2 + 2I_3 + \frac{7}{3}I_\Delta - \frac{13}{2}I_8 \right). \quad (17)$$

Рівняння гіперплощини, на якій структурами основного стану є структури (структура) з густиною частинок p_0 , таке:

$$\frac{\partial E}{\partial p_0} = 0, \quad \frac{\partial^2 E}{\partial p_0^2} > 0, \quad (18)$$

або у явній формі:

$$5I_1 - 2I_2 + 5I_3 + \frac{13}{3}I_\Delta - \mu_{lg} - \frac{19}{2}I_8 + \frac{3(9p_0-7)}{2\sqrt{3(1-p_0)(9p_0-5)}}I_8 = 0, \quad I_8 > 0. \quad (19)$$

Треба однак перевірити, чи якісь зі структур 12 мають меншу енергію на цій гіперплощині. Тому що $I_8 > 0$, структура 12b має мінімальну енергію з усіх структур 12. Ось вираз для цієї енергії:

$$E_{12b} = \frac{5}{9} \left(\frac{7}{5}I_1 + \frac{8}{5}I_2 + \frac{7}{5}I_3 + \frac{32}{15}I_8 + \frac{2}{15}I_\Delta - \mu_{lg} \right). \quad (20)$$

Прирівнюючи (17) і (20) з урахуванням (19), знаходимо, що рівність досягається, якщо $p_0 = \frac{34}{61}$. Рівняння відповідної гіперплощини таке:

$$5I_1 - 2I_2 + 5I_3 + \frac{13}{3}I_\Delta - \frac{89}{3}I_8 - \mu_{lg} = 0. \quad (21)$$

Отже для густин частинок в проміжку від $\frac{34}{61}$ до $\frac{4}{7}$ маємо континуум основних станів.

Ми можемо легко перейти до еквівалентної спінової моделі зі спіновими змінними $\sigma = \pm 1$, використовуючи такі перетворення параметрів взаємодії (див. [8]):

$$I_1 = 4J_1 - 8J_\Delta, \quad I_i = 4J_i \quad (i = 2, 3, 8), \quad I_\Delta = 8J_\Delta, \\ \mu_{lg} = 2h + 12(J_1 + J_2 + J_3 + J_8 - J_\Delta), \quad p_0 = \frac{1+M}{2}, \quad (22)$$

де M — намагнетованість на вузол. Для спінової моделі замість рівняння (17) маємо:

$$4J_1 - 10J_2 + 4J_3 + \frac{10}{3}J_\Delta - h - 25J_8 + \frac{3(9M-5)}{\sqrt{3(1-M)(9M-1)}}J_8 = 0, \quad (23)$$

Континуум основних станів існує для намагнетованостей в проміжку від $\frac{7}{61}$ до $\frac{1}{7}$. Залежність намагнетованості від зовнішнього поля в цьому проміжку показано на Рис. 7 (a), а відповідну залежність густини частинок від хемічного потенціалу — на Рис. 7 (b). Ми припускаємо, що $J_8 = 0.01$ є достатньо малим і не виходить за межі області існування континууму основних станів.

А тепер перейдімо до аналізу власне структур. Схему доменів структури (див. Рис. 5) називатимемо її 1-структурою. Саму ж структуру називатимемо 0-структурою. Розгляньмо спочатку структуру з трьома типами доменів. Нехай c_1 — відносний вміст малих доменів

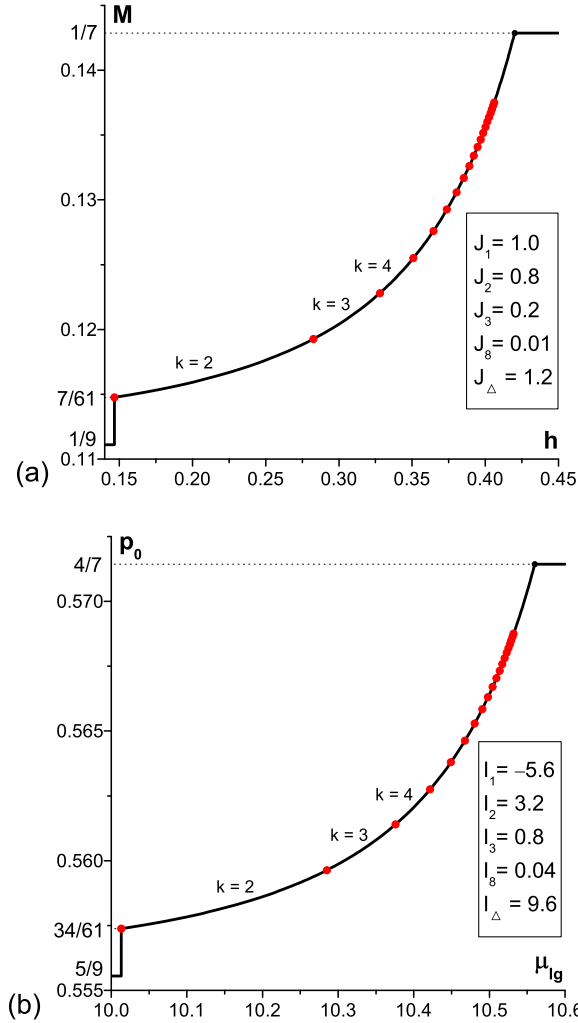


Рис. 7. (а) Залежність намагнетованості від зовнішнього поля і (б) залежність густини частинок від хемічного потенціалу в області континууму основних станів. Показано перші 20 точок, які відповідають структурам з двома типами доменів. Густини частинок для цих точок такі: $p_0 = \frac{4k^2 + 7k + 4}{7k^2 + 13k + 7}$ ($k = 2, 3, \dots$ — розмір малих доменів в зигзагах).

у вузькій смузі структури. Легко побачити, що ця величина однакова для усіх вузьких смуг в структурі незалежно від їхньої орієнтації й дорівнює

$$c_1 = \frac{s}{2(s+l)} = \frac{k}{2} + \frac{1}{1-r}, \quad 0 < c < \frac{1}{2}. \quad (24)$$

Відносний вміст великих доменів у смузі такий:

$$C_1 = \frac{1}{2} - c_1. \quad (25)$$

Середню відстань між трилисниками можна виразити через c_1 або C_1 :

$$r = \frac{2}{k - 2c_1} + 1 = \frac{2}{k + 2C_1 - 1} + 1. \quad (26)$$

Відносний вміст малих і великих доменів також пов'язані з c_1 і C_1 :

$$n_1 = \frac{1}{2} \left(k - \frac{2}{r-1} \right)^2 = 2c_1^2, \quad (27)$$

$$n_3 = \frac{1}{2} \left(k - \frac{r+1}{r-1} \right)^2 = 2C_1^2. \quad (28)$$

Густина частинок є функцією c_1 і k :

$$p_0 = \frac{4(2c_1 - k)^2 - 15(2c_1 - k - 1)}{7(2c_1 - k)^2 - 27(2c_1 - k - 1)}. \quad (29)$$

Щоби побудувати 1-структуру з заданим c_1 , треба почати з побудови однієї смуги чорних і білих трикутників ("вузької" смуги), в якій густина чорних трикутників дорівнює c_1 , або ж зі смуги білих і сірих трикутників ("широка" смуга) з густиною сірих трикутників $C_1 = \frac{1}{2} - c_1$. Однак не усі такі смуги допустимі. Вони мусять бути сумісними з правилом побудови 1-структур (вже сформульованим вище): на перетині двох вузьких, двох широких і вузької й широкої смуг має бути чорний і білий, білий і сірий та два білі трикутники, відповідно. Це правило визначає сусідню (наприклад, праву) до побудованої смуги однозначно або ж двозначно. Приклади 1-структур наведено на Рис. 8. Якщо сторони усіх чорних і сірих трикутників зі смуги, в яку входить дві сусідні стрічки, лежать на її середній лінії, то ці трикутники і симетричні до них білі трикутники можна відображати відносно цієї лінії. Такі лінії називатимемо лініями хаотизації. Для структури з $c_1 = \frac{p}{q}$ відстань між сусідніми лініями

хаотизації дорівнює q , якщо q парне і $2q$, якщо q непарне. Отже усі 1-структури з раціональним c_1 хаотизовані. У напрямку ліній хаотизації маємо порядок, а в інших двох напрямках — безлад. Цей безлад одновимірний.

Зробімо ще таке зауваження: якщо у вузькій стрічці є ланцюжки середніх доменів лише двох різних довжин, то довший із них має довжину

$$\text{int} \left(\frac{1}{c_1} \right). \quad (30)$$

Розгляньмо деякі перетворення 1-структур. В 1-структурі з c_1 можна замінити чорні трикутнички на сірі й навпаки. Одержимо 1-структуру з $\tilde{c}_1 = \frac{1}{2} - c_1$. Інваріантом такого перетворення є 1-структура з $c_1 = \frac{1}{4}$ [Рис. 8 (b)], тому досить розглядати 1-структури з $\frac{1}{4} \leq c_1 \leq \frac{1}{2}$, тобто такі 1-структури, в яких густина сірих трикутничків не перевищує густину чорних. На цьому проміжку функція $p_0(k, c_1)$ є спадною. Для $k = 2$ величина p_0 змінюється від $\frac{34}{61}$ ($c_1 = \frac{1}{2}$) до $\frac{62}{111}$ ($c_1 = \frac{1}{4}$).

Розгляньмо ще одне перетворення 1-структур. Як видно з Рис. 8, чорні трикутнички в 1-структурах з $\frac{1}{4} \leq c_1 \leq \frac{1}{2}$ організовані в трикутні домени. І знову максимальне число типів доменів дорівнює трьом (малі, середні й великі домени), так як і в 0-структурах. Єдина 1-структура з лише одним типом "чорних" доменів — це 1-структура з $c_1 = \frac{1}{4}$. Ці нові домени (домени з доменів) назовемо 1-доменами, а їхню схему — 2-структурою (звичайно, відносно 0-структури). Зрозуміло, що 2-структури є водночас 1-структурами для відповідних 0-структур. Наведімо приклад: 1-структура з $c_1 = \frac{1}{3}$ (Рис. 8 (b)) є 2-структурою для 0-структур з $c_1 = \frac{7}{20}$ (Рис. 9 (a)).

Відносний вміст c_2 малих 2-доменів в кожній вузькій стрічці 2-структури пов'язаний з відносним вмістом c_1 малих 1-доменів в кожній вузькій стрічці 1-структури таким чином:

$$c_2 = 1 + \frac{k_1}{2} - \frac{c_1}{1 - 2c_1}, \quad (31)$$

де k_1 — сторона малого 1-домена. Обернене перетворення має вигляд:

$$c_1 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{k_1 + 3 - 2c_2} \right). \quad (32)$$

Підставляючи в це співвідношення $c_2 = \frac{1}{4}$, $k_1 = 1$, одержуємо $c_1 = \frac{5}{14}$. Це означає, що в 1-структурах з $\frac{1}{4} < c_1 < \frac{5}{14}$ маємо лише

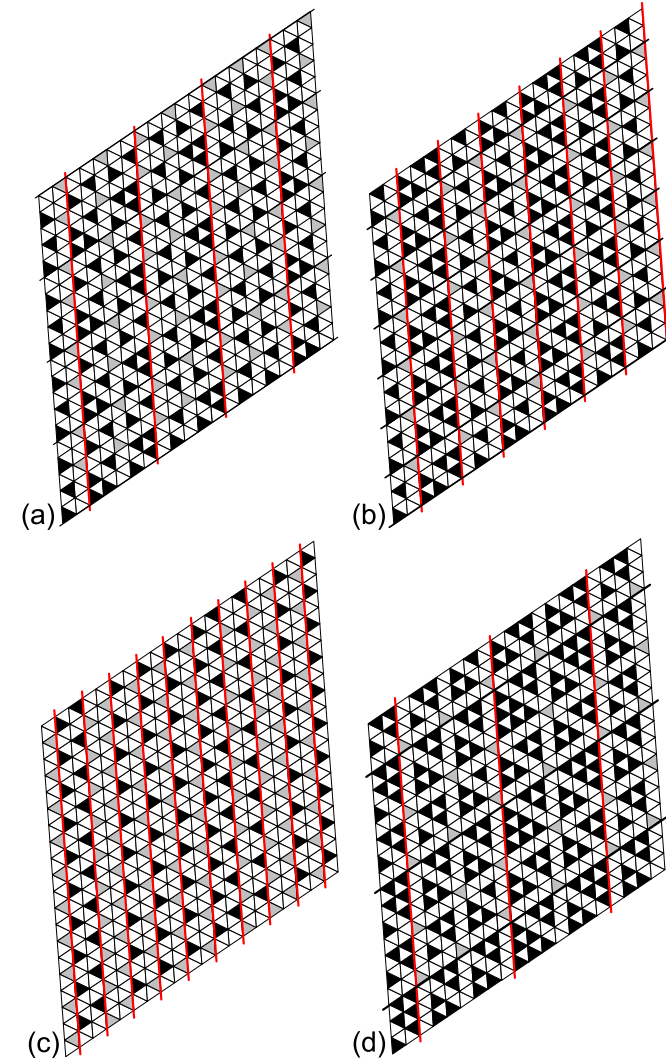


Рис. 8. 1-структури з (a) $c_1 = \frac{3}{10}$, (b) $c_1 = \frac{1}{3}$, (c) $c_1 = \frac{1}{4}$ і (d) $c_1 = \frac{5}{14}$. Чорні, білі й сірі трикутнички зображають малі, середні й великі домени, відповідно. Вертикальні червоні лінії — лінії хаотизації (див. текст). Чорні потовщені лінії відображають періодичність у вертикальному напрямку. 1-структура (c) є 2-структурою 0-структур з 1-структурою (d).

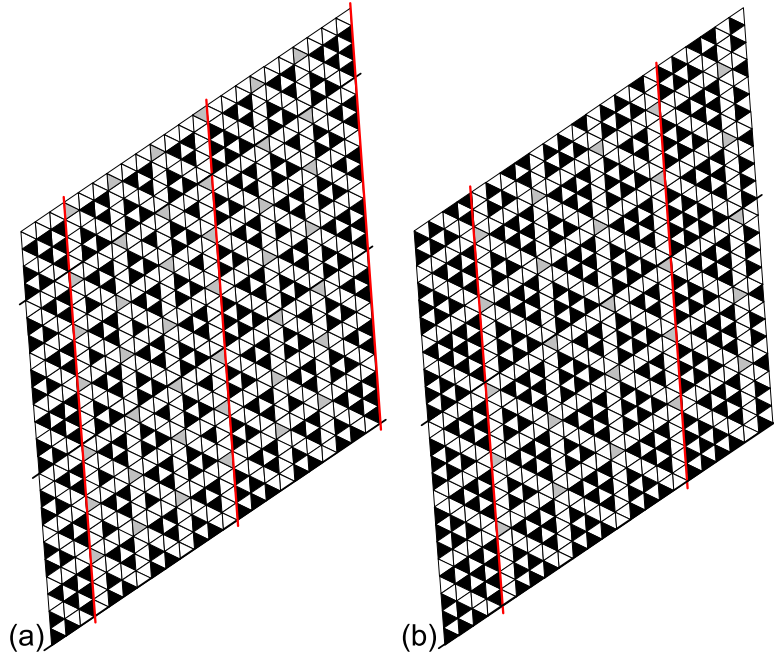


Рис. 9. 1-структури з (а) $c_1 = \frac{7}{20}$, (б) $c_1 = \frac{5}{13}$. Чорні, білі й сірі трикутники зображають малі, середні й великі домені, відповідно. Вертикальні червоні лінії — лінії хаотизації (див. текст). Чорні потовщені лінії відображають періодичність у вертикальному напрямку.

два види 1-доменів, утворених з малих 0-доменів (чорних трикутників) — 1-домени зі сторонами 1 і 2. Застосовуючи описане перетворення (в загальному випадку не один раз), в такі структури можна перетворити будь-яку структуру з трьома видами доменів.

В 1-структурах з $\frac{5}{14} \leq c_1 < \frac{1}{2}$, тобто в 1-структурах з трьома видами 1-доменів, можна однаково збільшувати сторону усіх 1-доменів. Легко довести, що збільшення сторони 1-доменів на m (зменшенню відповідають від'ємні m), дає 1-структуру з

$$c_{1m} = \frac{m(2c_1 - 1) - 2c_1}{2(m(2c_1 - 1) - 1)}. \quad (33)$$

Приклад таких 1-структур показано на Рис. 9.

Як побудувати допустиму стрічку чорних і білих трикутни-

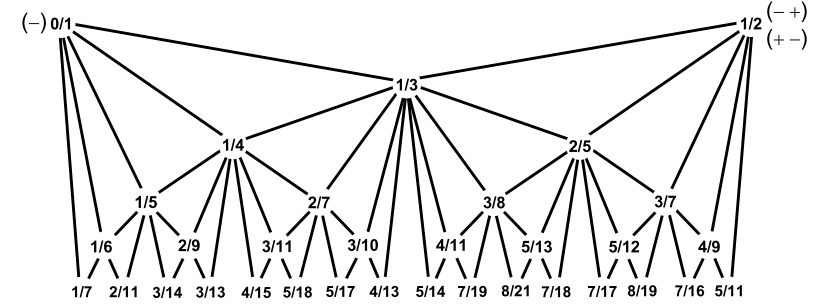


Рис. 10. Частина дерева Фарея для побудови вузьких стрічок.

чків? Виявляється, що це можна зробити за допомогою дерева Фарея — бінарного дерева раціональних чисел між нулем і одиницею. Дерево Фарея застосовували для побудови основних станів моделей ґраткового газу переважно в одновимірному випадку, однак також і в двовимірному (див. [10] і цитовану там літературу). Частина дерева Фарея зображено на Рис. 9. Воно поширюється вниз на безмежність за таким правилом: кожна пара сусідніх раціональних чисел $\frac{p_1}{q_1}$ і $\frac{p_2}{q_2}$ породжує число нижчого ярусу $\frac{p_1+p_2}{q_1+q_2}$. Кожне раціональне число між 0 і 1 виникає на дереві Фарея один раз. Стрічка з $c_1 = \frac{p}{q}$ має період q , якщо q — парне число, і цей період є зчепленням періодів, що відповідають тим числам, які породжують число $\frac{p}{q}$ на дереві Фарея. Якщо q — непарне, то період матиме довжину $2q$. Числу $\frac{0}{1}$ ставимо у відповідність "−" (білий трикутник), а числу $\frac{1}{1}$ — "+" (чорний трикутник). Якщо число c_1 ірраціональне, то будемо послідовність раціональних чисел, які ведуть до числа c_1 по гілках дерева Фарея (воно розташоване нескінченно низько). Побудуємо таку послідовність чисел для $c_1 = \ln \frac{3}{2}$ і стрічки, які відповідають цим числам.

$$\begin{aligned} \frac{0}{1} &< \ln \frac{3}{2} < \frac{1}{2}, & -, -+ \\ \frac{0}{1} &< \frac{1}{3} < \ln \frac{3}{2} < \frac{1}{2}, & --+ \\ \frac{1}{3} &< \frac{2}{5} < \ln \frac{3}{2} < \frac{1}{2}, & --+-+ \\ \frac{2}{5} &< \ln \frac{3}{2} < \frac{3}{7} < \frac{1}{2}, & \text{chn} \left(\frac{2}{5} \right) \parallel \text{chn} \left(\frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{2}{5} < \ln \frac{3}{2} < \frac{5}{12} < \frac{3}{7}, & \text{chn} \left(\frac{2}{5} \right) \parallel \text{chn} \left(\frac{1}{2} \right) \parallel \text{chn} \left(\frac{2}{5} \right) \\
\frac{2}{5} < \ln \frac{3}{2} < \frac{7}{17} < \frac{5}{12}, & \text{chn} \left(\frac{2}{5} \right) \parallel \text{chn} \left(\frac{1}{2} \right) \parallel 2 \times \text{chn} \left(\frac{2}{5} \right) \\
\frac{2}{5} < \ln \frac{3}{2} < \frac{9}{22} < \frac{7}{17}, & \text{chn} \left(\frac{2}{5} \right) \parallel \text{chn} \left(\frac{1}{2} \right) \parallel 3 \times \text{chn} \left(\frac{2}{5} \right) \\
\frac{2}{5} < \ln \frac{3}{2} < \frac{11}{27} < \frac{9}{22}, & \text{chn} \left(\frac{2}{5} \right) \parallel \text{chn} \left(\frac{1}{2} \right) \parallel 4 \times \text{chn} \left(\frac{2}{5} \right) \\
\frac{2}{5} < \ln \frac{3}{2} < \frac{13}{32} < \frac{11}{27}, & \text{chn} \left(\frac{2}{5} \right) \parallel \text{chn} \left(\frac{1}{2} \right) \parallel 5 \times \text{chn} \left(\frac{2}{5} \right) \\
\frac{2}{5} < \frac{15}{37} < \ln \frac{3}{2} < \frac{13}{32}, & \text{chn} \left(\frac{2}{5} \right) \parallel \text{chn} \left(\frac{1}{2} \right) \parallel 6 \times \text{chn} \left(\frac{2}{5} \right) \\
\frac{15}{37} < \ln \frac{3}{2} < \frac{28}{69} < \frac{13}{32}, & \text{chn} \left(\frac{15}{37} \right) \parallel \text{chn} \left(\frac{13}{32} \right) \\
\frac{15}{37} < \ln \frac{3}{2} < \frac{43}{106} < \frac{28}{69}, & 2 \times \text{chn} \left(\frac{15}{37} \right) \parallel \text{chn} \left(\frac{13}{32} \right) \\
\frac{15}{37} < \ln \frac{3}{2} < \frac{58}{143} < \frac{43}{106}, & 3 \times \text{chn} \left(\frac{15}{37} \right) \parallel \text{chn} \left(\frac{13}{32} \right) \quad (34)
\end{aligned}$$

Грубим шрифтом виділено послідовні наближення (назвемо їх наближеннями Фарей) до числа $\ln \frac{3}{2}$. Для них побудовано стрічки за описаним вище правилом, однак з тією модифікацією, що стрічка добувається лише справа. Символом $\text{chn} \left(\frac{p}{q} \right)$ позначатимемо стрічку для дробу $\frac{p}{q}$, а зчеплення (конкатенацію) двох стрічок — символом $\parallel$. $n \times \text{chn} \left(\frac{p}{q} \right)$ означає зчеплення n однакових стрічок. Зчеплення стрічок можна робити й так, щоб та стрічка, яка відповідає меншому числу завжди була зліва, а та, що більшому, — справа. Тоді стрічка буде добуватися і з одного боку, і з другого. Однак не можна робити зчеплення в довільному порядку, бо це може призводити до побудови недопустимих стрічок.

Для дробу $\frac{58}{143}$ (Фарейового наближення до $\ln \frac{3}{2}$) ми одержали стрічку

$$B A B B B B B B A B B B B B B A B B B B B B A B B B B B B,$$

де через A позначено фрагмент " $-+$ " а через B — фрагмент " $- - + - +$ ". Структуру з $c_1 = \ln \frac{3}{2}$ зображено на Рис. 11, а на Рис. 12 — 3-структуру тієї ж 0-структури.

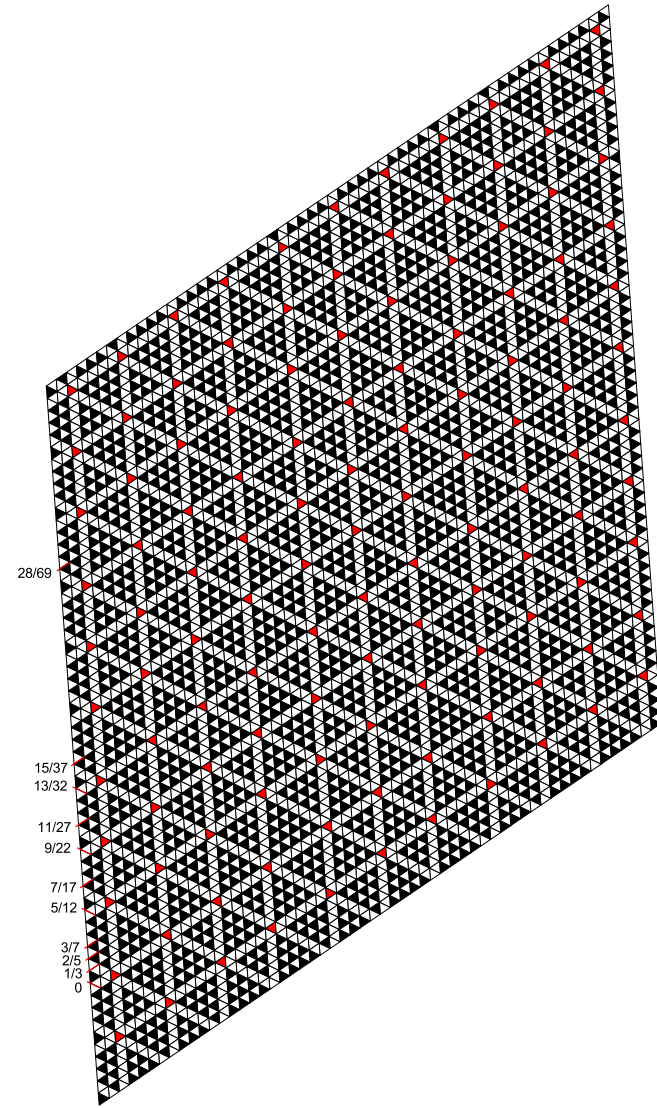


Рис. 11. 1-структура з $c_1 = \ln \frac{3}{2}$. Малі домени зображено чорними трикутниками, середні — білими, а великі — червоними.

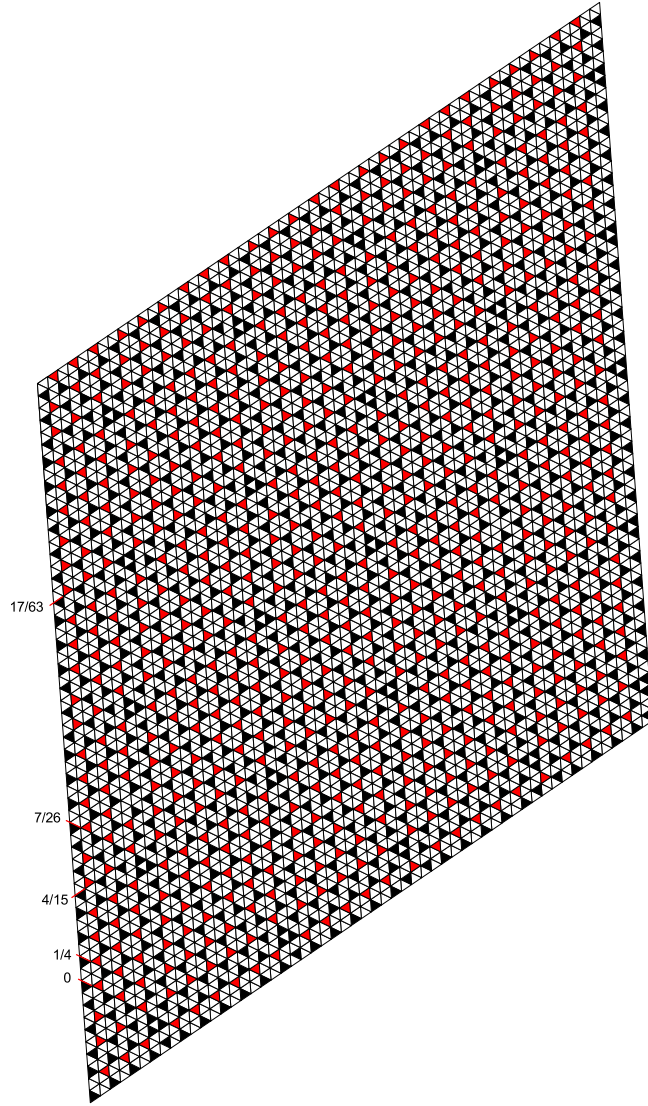


Рис. 12. 3-структура 0-структур з $c_1 = \ln \frac{3}{2}$. $c_3 = \frac{42 \ln \frac{3}{2} - 17}{4(5 \ln \frac{3}{2} - 2)} \approx 0.27021$. Малі домени зображено чорними трикутниками, середні — білими, а великі — червоними.

Зауважмо, що наближення Фарея для числа з проміжку від 0 до 1 пов'язані з розвиненням цього числа в неперервний дріб: всі наближення такого розвинення є Фарейовими наближеннями (але не навпаки). Ось розклад в неперервний дріб числа $\ln \frac{3}{2}$:

$$\ln \frac{3}{2} = 0 + \frac{1}{2 + \frac{1}{2 + \frac{1}{6 + \frac{1}{1 + \frac{1}{11 + \frac{1}{2 + \frac{1}{\dots}}}}}}}. \quad (35)$$

Послідовні наближення цього розкладу: $0, \frac{1}{2}, \frac{2}{5}, \frac{13}{32}, \frac{15}{37}, \frac{178}{439}, \frac{371}{915}, \dots$. Як бачимо, вони є й Фарейовими наближеннями.

Одновимірна часткова хаотизація структур існує лише для раціональних $c_1 = \frac{p}{q}$. Відстань між сусідніми лініями хаотизації дорівнює періоду в напрямку, в якому нема хаотизації, тобто q , якщо q парне, і $2q$, якщо q непарне. Звідси випливає, що в структурі з ірраціональним c_1 є лише одна лінія хаотизації, тобто для ірраціональних c_1 структура аперіодична й цілком упорядкована (ірраціональному c_1 відповідає дві структури, якщо вже бути цілком точним). Чи ця структура квазикристалічна? Щоби відповісти на це питання, треба знайти Фур'є-образ просторового розподілу частинок. Якщо Фур'є-образ буде сукупністю дельта-піків, то структура квазикристалічна, якщо ж ні, то структура безладно упорядкована (irregularly ordered) [7]. Зауважмо, що означення безладно упорядкованої структури, яке дає в [7] Шін-іші Саса, не цілком коректне. Бо структура, ентропія якої за нульової температури прямує в термодинамічній границі до нуля, може бути частково хаотизованою, як, наприклад, структури з раціональним c_1 , які ми тут розглядаємо. Чи структури з ірраціональним c_1 квазикристалічні, чи безладно упорядковані? А може серед них є як одні, так і інші? Відповіді на ці питання ми поки що не знаємо.

Конфігурації $\bullet\bullet\bullet$, $\bullet\bullet\bullet$, $\bullet\bullet\bullet$ і $\bullet\bullet\bullet$ генерують ще один клас структур — багатодоменні структури. Приклад такої структури та її 1-структури зображено на Рис. 13 (а). Легко показати, що існує лише дві багатодоменні 1-структури, які показано на на Рис. 13 (b) і (c).

Ми розглянули структури з трьома видами доменів. Структури з двома видами доменів мають єдину з точністю до хаотизації 1-структуру. Її зображено на Рис. 14 (а).

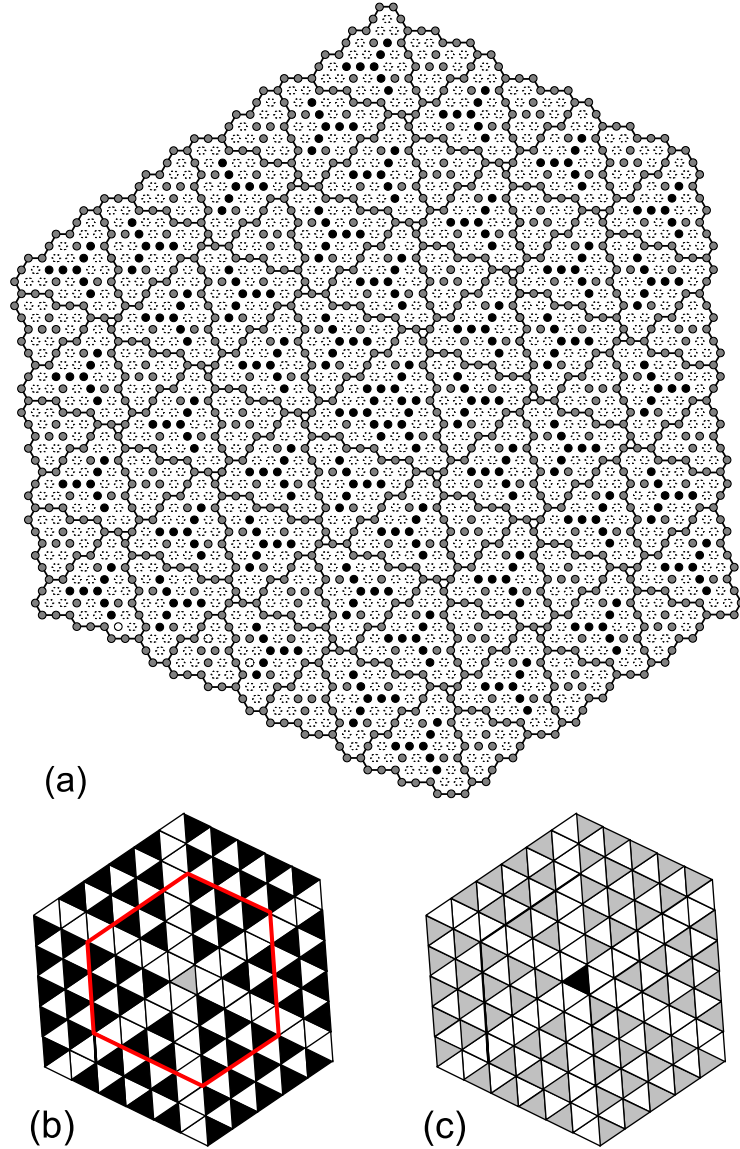


Рис. 13. (a) Багатодоменна 0-структура, (b) її 1-структура та (c) симетрична 1-структура.

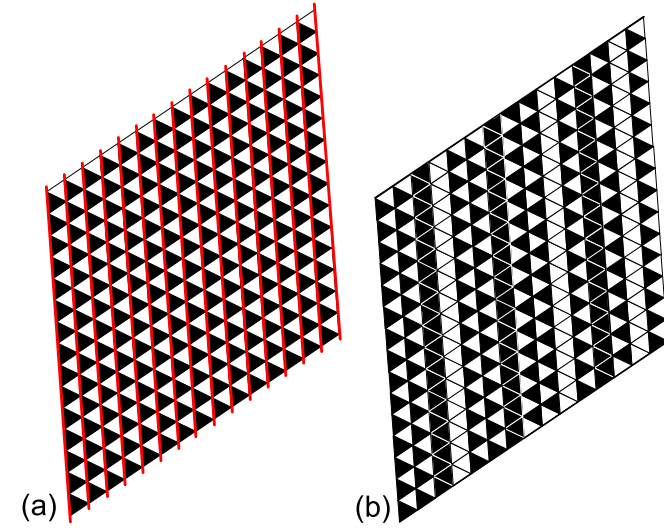


Рис. 14. (a) 1-структури з $c_1 = \frac{1}{2}$. (b) Хаотизована 1-структура з $c_1 = \frac{1}{2}$. Чорні й білі трикутники зображають малі й великі домени, відповідно. Вертикальні червоні лінії — лінії хаотизації (див. текст).

Сформулюймо основні висновки. В моделі ґраткового газу на трикутній ґратці з парною взаємодією перших, других, третіх та восьмих сусідів і тричастинковою взаємодією найближчих сусідів існує континуум основних станів, параметризованих хемічним потенціалом. Існування континууму зумовлено нелінійною залежністю густини енергії структур (точніше, внеску в густину енергії від взаємодії восьмих сусідів) від густини частинок. В області континууму залежність густини частинок від хемічного потенціалу (або намагнетованості від поля) є гладкою зростаючою функцією. Серед структур континууму, крім періодичних і частково хаотизованих, а також багатодоменних структур, є аперіодичні упорядковані структури, які можуть бути квазикристалом або безладно упорядкованими структурами. Вони мали б "вижити" й при відмінних від нуля температурах, що свідчило б на користь енергетичної (на відміну від ентропійної) концепції утворення упорядкованих аперіодичних структур. Однак це питання потребує додаткових досліджень.

Література

1. C. Janot, *Quasicrystals: A Primer*, Oxford University Press, Oxford, 1994.
2. J. Miękisz, J. Stat. Phys. **88**, 691 (1997).
3. J.S. Anderson, J. Chem. Soc. Dalton Trans. **10**, 1107 (1973).
4. C. Kittel, Solid State Commun. **25**, 519 (1978).
5. M. Sanati, L.G. Wang, and A. Zunger, Phys. Rev. Lett. **90**, 045502 (2003).
6. R. Drautz, A. Diaz-Ortiz, M. Fahnle, and H. Dosch, Phys. Rev. Lett. **93**, 067202 (2004).
7. Shin-ishi Sasa, J. Phys. A **43**, 465002 (2010).
8. Yu.I. Dublenych, Phys. Rev. E **83**, (2011) [in print].
9. Yu.I. Dublenych, Phys. Rev. E **83**, (2011) [in print].
10. G.I. Watson, Physica A **246**, 253 (1997).

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”
 - “Dzherelo”
-

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. Mryglod, *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; N. Plakida, *Dubna*; G. Röpke, *Rostock*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; M. Vavrukh, *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>
