

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 МОДЕЛІ ІЗИНҐА НА РОЗШИРЕНІЙ ҐРАТЦІ
ШАСТРИ–САЗЕРЛЕНДА І ПЛАТО НАМАГНЕТОВАНOSTI $1/2$ В
ДЕЯКИХ ТЕТРАБОРАТАХ РІДКІСНОЗЕМЕЛЬНИХ МЕТАЛІВ

Роботу отримано 17 грудня 2012 р.

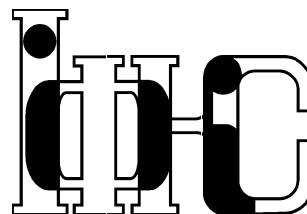
Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-12-12U

Ю.І.Дубленич

ОСНОВНІ СТАНИ МОДЕЛІ ІЗИНҐА
НА РОЗШИРЕНІЙ ҐРАТЦІ ШАСТРИ–САЗЕРЛЕНДА
І ПЛАТО НАМАГНЕТОВАНOSTI $1/2$ В ДЕЯКИХ
ТЕТРАБОРАТАХ РІДКІСНОЗЕМЕЛЬНИХ МЕТАЛІВ

ЛЬВІВ

УДК: 537.611.2, 538.971

PACS: 75.60.Ej, 05.50.+q, 75.10.Hk, 75.10.-b

Основні стани моделі Ізинґа на розширеній ґратці Шастри–Сазерленда і плато намагнетованості $1/2$ в деяких тетраборатах рідкісноземельних металів

Ю.І.Дубленич

Анотація. В роботі наведено повний розв'язок задачі про основні стани і їх аналіз для моделі Ізинґа в магнетному полі на ґратці Шастри–Сазерленда з додатковою взаємодією вздовж діагоналей “порожніх” квадратів. Показано, що ця взаємодія призводить до виникнення плато з намагнетованістю $1/2$ від намагнетованості насичення. Таке дробове плато спостерігають в деяких тетраборатах рідкісноземельних металів, зокрема, в Ізинґових магнетиках ErB_4 (де воно єдине) та в TmB_4 (де воно найширше), однак його походження не до кінця зрозуміле. Наша робота проливає світло на цю проблему.

Ground states of an Ising model on an extended Shastry–Sutherland lattice and the $1/2$ -magnetization plateau in some rare-earth-metal tetraborides

Yu.I.Dublenych

Abstract. A complete solution of the ground-state problem for an Ising model on a Shastry–Sutherland lattice with an additional interaction along the diagonals of “empty” squares in an applied magnetic field is presented. It is rigorously proven that this interaction gives rise to a plateau at the half-saturated magnetization. Such a fractional plateau has been observed in some rare-earth-metal tetraborides, in particular, in strong Ising magnets ErB_4 (where it is a single one) and TmB_4 (where it is a major one), but its origin remains unclear. Our study sheds new light on this problem.

Подається в Physical Review B
Submitted to Physical Review B

© Інститут фізики конденсованих систем 2012
Institute for Condensed Matter Physics 2012

1. Вступ

У цій статті ми розглядатимемо модель Ізинґа на ґратці Шастри–Сазерленда (ШС) з додатковою діагональною взаємодією. Ґратка ШС топологічно еквівалентна ґратці Архімеда $3^2.4.3.4$ (Рис. 1). Теоретичні дослідження спінових моделей на цій ґратці розпочалися після того, як було показано, що на ній можна точно знайти основні стани квантової спінової моделі у зовнішньому магнетному полі [1]. Інтерес до ґратки ШС значно зріс, коли відкрили сполуки, у яких магнетні атоми розташовані двовимірними шарами й атоми кожного шару утворюють ґратку, еквівалентну ґратці ШС. Ці сполуки називають магнетиками Шастри–Сазерленда. Окрім найбільш відомого й найкраще дослідженого магнетика ШС — $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ [2, 3], є ще чимало інших, зокрема, ціла група тетраборатів рідкісноземельних металів RB_4 ($R = \text{La} - \text{Lu}$). У деяких із них магнетні атоми мають великий спін, що дає змогу розглядати ці магнетики як класичні Гейзенбергові, а якщо є ще й сильне кристалічне поле, то навіть як Ізинґові. Саме такими є TmB_4 та ErB_4 , яких вважають строгими

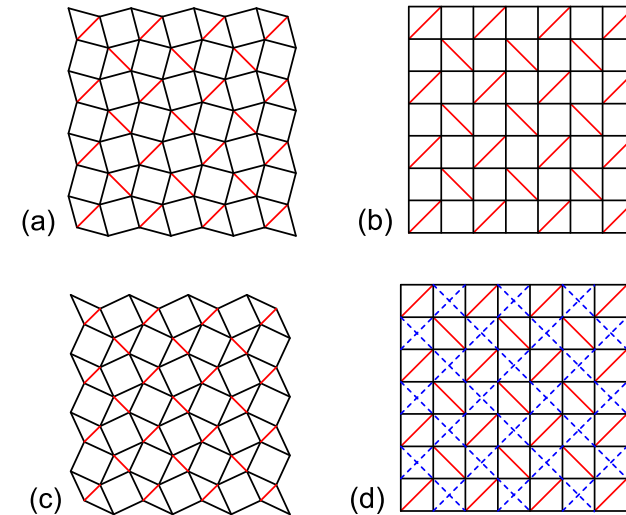


Рис. 1. (а) Ґратка Архімеда $3^2.4.3.4$ та топологічно еквівалентні їй (б) ґратка Шастри–Сазерленда і (с) ґратка, яку утворює шар магнетних іонів Cu^{2+} у сполуці $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. (с) Розширена ґратка Шастри–Сазерленда, яку ми розглядаємо у цій статті.

Ізинґовими магнетиками з ефективним спіном $S = 1/2$. В обох цих сполуках спостерігали широке плато при $m/m_s = 1/2$ від намагнетованості насичення m_s , а у сполуці TmB₄ ще й низку інших дробових плато: $m/m_s = 1/6, 1/7, 1/8, 1/9, 1/10, 1/11, 1/12$ (магнетне поле прикладене нормально до площин ШС, а температура нижча 4K) [4–6]. Виникнення дробових плато пробували пояснити на основі моделі Ізинґа на ґратці ШС, проте було показано, спочатку чисельно [7, 8], а згодом й аналітично [9], що в цій моделі є єдине дробове плато — з намагнетованістю $1/3$. З цього було зроблено висновок, що плато $1/2$ й інші дробові плато, спостережувані у тетраборатах рідкісноземельних металів, можуть дати лише квантові моделі [7], і, можливо, ще й з далекосяжними взаємодіями [10]. Так у роботах [10, 11] одержали плато $1/2$, розглядаючи квантову модель (а також її Ізинґову ґраницю) з додатковою взаємодією J_3 вздовж діагоналей “порожніх” квадратів і взаємодією J_4 вздовж сторін квадратів через один вузол. У попередній роботі ми показали, що дробові плато можуть бути породжені далекосяжними взаємодіями, наприклад, взаємодією РККЙ (така взаємодія є в тетраборатах рідкісноземельних металів, бо вони добрі метали), і що плато $1/2$ виникає завдяки додатковій діагональній Ізинґовій взаємодії J_3 [9]. А недавно в роботі [12] числовим способом було показано, що плато $1/2$ (й ще вузьке плато $2/3$) породжується диполь-дипольними взаємодіями.

На нашу думку, для пояснення низки плато намагнетованості в TmB₄ досить знайти основні стани моделі Ізинґового типу на ґратці ШС з далекосяжними взаємодіями. Чисельно це зробити важко, однак наші аналітичні методи пошуку основних станів моделей ґраткового газу й еквівалентних їм спінових моделей дають таку можливість.

Тут ми наводимо повний розв’язок задачі про основні стани моделі Ізинґа в магнетному полі на ґратці ШС з додатковою взаємодією J_3 уздовж діагоналей “порожніх” квадратів (надалі цю модель називатимемо моделлю Ізинґа на розширеній ґратці ШС). Щоб знайти цей розв’язок, ми використали метод основних променів й основних множин конфігурацій кластера, який розробили в попередніх роботах [13, 14], проте, узагальнюючи метод, розглядаємо конфігурації не одного, а двох кластерів, що цілком природно для ґратки ШС з додатковим діагональними зв’язками. Ми строго доводимо існування доволі широкого плато $1/2$ у цій моделі. Воно відповідає трьом різним фазам і неминуче виникає за умови, що взаємодія вздовж сторін квадратів (J_1) і ще хоча б одна із двох взаємодій — уздовж діагоналей ШС (J_2) і вздовж діагоналей “порожніх” квадратів (J_3)

— є антиферромагнетними. Яка з цих трьох фаз реалізується, залежить від знаків взаємодій J_2 і J_3 . Тільки одне дробове плато, а саме плато $1/2$, існує у цій моделі, зокрема, у тому випадку, якщо взаємодії J_1 і J_2 антиферромагнетні, а взаємодія J_3 ферромагнетна (за умови $J_2 < -2J_3$). Єдине дробове плато $1/2$ спостерігають у сполуці ErB₄, та досі не зрозуміло, як воно виникає. Отож, наше дослідження проливає світло на цю проблему.

Структура решти статті ось яка. У другому розділі описано дво-кластерний підхід для визначення основних станів моделей Ізинґового типу і на його основі знайдено розв’язок моделі Ізинґа на розширеній ґратці ШС. У третьому розділі проаналізовано повновимірні структури основного стану, а у четвертому — структури на тривимірних межах повновимірних областей, що дає змогу передбачити рід фазових переходів між повновимірними структурами й важливо для дослідження впливу взаємодій більшого радіуса. У п’ятому розділі проаналізовано основні стани на двовимірних гранях повновимірних областей, а в шостому наведено фазові діаграми основного стану у площині (h, J_2) й обговорено можливі послідовності фаз для кривих магнетування в ErB₄ і TmB₄. Сьомий розділ містить найважливіші висновки.

2. Розв’язок задачі про основні стани моделі Ізинґа на розширеній ґратці ШС на основі двокластерного підходу

У попередніх роботах [9, 13, 14] ми будували структури основного стану моделей Ізинґового типу (або ж еквівалентних моделей ґраткового газу) з конфігурацій певного кластера. Ми використовували лише один вид кластера. Наприклад, для звичайної моделі Ізинґа на ґратці ШС досить було кластера у вигляді трикутника з діагоналлю ШС як гіпотенузою [9]. Тут ми розглядатимемо ту ж модель, проте з додатковою взаємодією J_3 уздовж усіх діагоналей квадратів без зв’язків ШС. Для побудови структур основного стану цієї моделі одного невеликого кластера вже не досить; доводиться використовувати не один, а два види кластерів: квадрат з діагоналлю ШС і квадрат без неї (Рис. 2(a)). Однак принципової різниці порівняно з однокластерним підходом тут нема: основний момент, як раніше, полягає в уведенні “вільних” коефіцієнтів, що враховують довільність розбиття між кластерами енергетичних внесків вузлів і деяких зв’язків між ними. (Як стане зрозуміло згодом, “вільні” коефіцієнти потрібні для того, щоб можна було зрівнювати й водночас

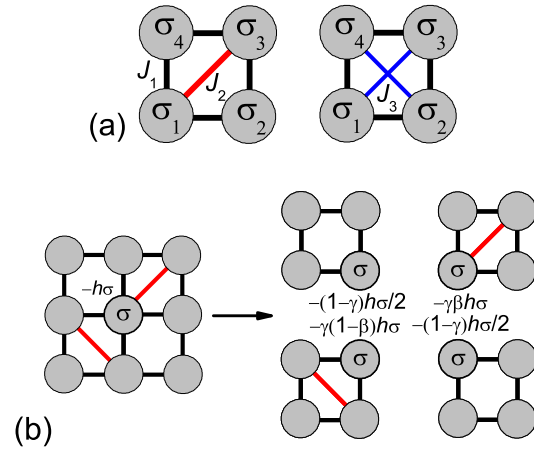


Рис. 2. (а) Кластери для знаходження основних станів: (зліва) кластер з діагоналлю ШС, який відповідає взаємодія J_2 , і (справа) кластер без діагоналю ШС, проте з діагоналями, яким відповідає взаємодія J_3 . (б) Розподіл енергії вузла між чотирма квадратами, яким він належить.

мінімізувати енергії двох і більше конфігурацій кластерів.) Кожна сторона належить двом квадратам: по одному кожного типу, а кожна вершина (вузол ґратки) — чотирьом квадратам: двом одного й двом другого типу. Енергетичний внесок сторони (вершини) можна по-різному розбити між квадратами, для яких ця сторона (вершина) є спільною. Довільність такого розбиття можна врахувати за допомогою “вільних” коефіцієнтів α , β і γ у формулах для енергетичних внесків квадратів різних типів (див. Рис. 2(b)):

$$\begin{aligned}
 e &= J_2 \sigma_1 \sigma_3 + \alpha J_1 (\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_1) \\
 &\quad - \gamma h [\beta (\sigma_1 + \sigma_3) + (1 - \beta) (\sigma_2 + \sigma_4)], \\
 \tilde{e} &= J_3 (\sigma_1 \sigma_3 + \sigma_2 \sigma_4) + (1 - \alpha) J_1 (\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_1) \\
 &\quad - \frac{1 - \gamma}{2} h (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4).
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

Тут e ($\tilde{e}$) — енергетичний внесок квадрата з діагоналлю ШС (без діагоналю ШС); J_1 , J_2 і J_3 — параметри взаємодії вздовж сторін квадратів, діагоналей ШС і звичайних діагоналей (лише для квадратів без діагоналей ШС), відповідно; h — прикладене магнетне поле. Чи-

сла σ_1 , σ_2 , σ_3 , σ_4 ($\sigma_i = \pm 1$) визначають спінову конфігурацію квадрата. Є дев'ять можливих конфігурацій квадрата з діагоналлю ШС і п'ять — без діагоналю ШС: $\begin{smallmatrix} \circ & \circ \\ \circ & \circ \end{smallmatrix}$, $\begin{smallmatrix} \circ & \bullet \\ \circ & \circ \end{smallmatrix}$, $\begin{smallmatrix} \circ & \circ \\ \bullet & \circ \end{smallmatrix}$, $\begin{smallmatrix} \circ & \bullet \\ \bullet & \circ \end{smallmatrix}$, $\begin{smallmatrix} \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet \end{smallmatrix}$ (білими і чорними кружечками позначено спіни вниз (−1) і вверх (+1), відповідно; квадрати різних типів відокремлено знаком $\parallel$).

Як і в попередніх роботах, тут ми використаємо метод основних променів (векторів) й основних множин конфігурацій кластерів. Далі ми коротко опишемо цей метод.

Розгляньмо простір (h, J_1, J_2, J_3) параметрів моделі. Кожній структурі основного стану моделі відповідає певна область у цьому просторі. Її можна одержати як розв'язок системи лінійних однорідних нерівностей, а тому вона є поліедричним конусом. Нагадаймо, що поліедричний конус — це конічна лінійна оболонка певної множини векторів, тобто усі їхні лінійні комбінації з невід'ємними коефіцієнтами. Серед поліедричних конусів, які відповідають тим чи тим структурам основного стану моделі, найважливішими є ті, вимірність яких дорівнює вимірності її простору параметрів. Ці області й відповідні структури називатимемо повновимірними. Якщо структура є структурою основного стану в якихось двох точках простору параметрів, то вона є такою на всьому відрітку, що сполучає ці точки. Це властивість опуклості. Кожній структурі основного стану відповідає опукла область. Властивість опуклості дає змогу знайти структури основного стану у кожній точці простору параметрів, якщо відомі ребра повновимірних областей (основні промені) й усі структури основного стану на цих ребрах. Ми визначатимемо спочатку не самі структури основного стану, а конфігурації кластерів, з яких ці структури збудовані. Множина конфігурацій кластерів генерує ту чи ту структуру, якщо у цій структурі є лише конфігурації кластерів, які належать цій множині. Множина конфігурацій кластерів генерує усі структури основного стану в точці (h, J_1, J_2, J_3) простору параметрів, якщо виконуються три умови: 1) “вільні” коефіцієнти α , β і γ в формулах (2.1) можна підібрати так, що усі конфігурації множини матимуть однакову енергію, 2) та енергія буде меншою, ніж енергії решти конфігурацій, і 3) з конфігурацій множини можна побудувати хоча б одну структуру. Треба зауважити, що ця сукупність умов є достатньою, однак не необхідною. Необхідною, зрозуміло, є лише третя умова.

Основні промені й основні множини конфігурацій наведено в Табл. 1. Конфігурації кластерів різного виду відокремлено знаком $\parallel$. Якщо в основній множині не вказано конфігурацій якогось виду

Табл. 1. Основні промені й основні множини конфігурацій кластерів для моделі Ізинга на розширеній графі Шастри–Сазерленда. Для променя $\mathbf{r}_{10}$ конфігурації, позначені зірочкою, входять у структури в блоках, показаних на Рис. 4. (Для променя $\mathbf{r}_{10}^-$ умова симетрична.)

Основний промінь $\mathbf{r}_i (h, J_1, J_2, J_3)$	Основна множина конфігурацій $\mathbf{R}_i$	Повновимірні області	“Вільні” коефіцієнти
$\mathbf{r}_1 (0, 0, 0, -1)$		$1, \bar{1}, 3, 9, 10, \overline{10}$	Довільні
$\mathbf{r}_2 (0, 0, -1, 0)$		$1, \bar{1}, 3, 7, 8$	Довільні
$\mathbf{r}_3 (0, -1, 0, 1)$		$1, \bar{1}, 5, 8$	$\alpha = 0$
$\mathbf{r}_4 (0, -1, 2, 0)$		$1, \bar{1}, 5, 9$	$\alpha = 1$
$\mathbf{r}_5 (0, 1, 2, 0)$		$3, 4, \bar{4}, 5, 9$	$\alpha = 1$
$\mathbf{r}_6 (2, 0, 0, 1)$		$1, 5, 6, 7, 8$	$\gamma = 0$
$\mathbf{r}_7 (4, 1, 0, 0)$		$1, 3, 4, 6, 7, 10$	$\alpha = 1, \beta = \frac{1}{2}, \gamma = 1$
$\mathbf{r}_8 (1, 0, 1, 0)$		$1, 4, 5, 6, 9, 10$	$\beta = 1, \gamma = 1$
$\mathbf{r}_9 (2, 1, 0, 1)$		$3, 4, 5, 6, 7, 8$	$\alpha = 0, \gamma = 0$
$\mathbf{r}_{10} (2, 1, 2, -1)$		$3, 4, 9, 10$	$\alpha = 1, \beta = \frac{1}{2}, \gamma = 1$
$\mathbf{r}_{10}^- (-2, 0, 0, 1)$		$\bar{1}, 5, \bar{6}, \bar{7}, 8$	$\gamma = 0$
$\mathbf{r}_7^- (-4, 1, 0, 0)$		$\bar{1}, 3, \bar{4}, \bar{6}, \bar{7}, \overline{10}$	$\alpha = 1, \beta = \frac{1}{2}, \gamma = 1$
$\mathbf{r}_8^- (-1, 0, 1, 0)$		$\bar{1}, \bar{4}, 5, \bar{6}, 9, \overline{10}$	$\beta = 1, \gamma = 1$
$\mathbf{r}_9^- (-2, 1, 0, 1)$		$3, \bar{4}, 5, \bar{6}, \bar{7}, 8$	$\alpha = 0, \gamma = 0$
$\mathbf{r}_{10}^- (-2, 1, 2, -1)$		$3, \bar{4}, 9, \overline{10}$	$\alpha = 1, \beta = \frac{1}{2}, \gamma = 1$

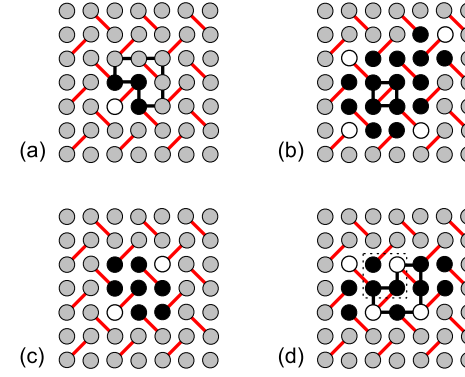


Рис. 3. (a) Область біля від’ємного квадрата, де є принаймні один додатний квадрат. (b) Квадрат $\bullet\bullet$ може утворити групу, яка має нульову енергію, однак тоді неминуче виникають інші групи з додатною енергією. (c) Група з квадратом $\bullet\bullet$, яка має нульову енергію. (d) Квадрат $\bullet\bullet$ може утворити групу з від’ємною енергією (суцільна лінія), однак тоді виникає новий квадрат $\bullet\bullet$ (в пунктирній рамці) з групою, що мусить мати нульову енергію, а тому він у свою чергу породжує ще один такий квадрат і т. д.

кластера, то це означає, що у множину входять усі його конфігурації, тобто конфігурація цього кластера довільна. В останньому стовпчику Табл. 1 вказано значення “вільних” коефіцієнтів α , β і γ , за яких конфігурації основної множини мають енергію однакову і меншу від енергій усіх решти конфігурацій (звичайно, на промені, якому ця множина відповідає). Пізніше, знайшовши на основі Табл. 1 повновимірні структури й області, ми покажемо, що наведений у ній набір основних променів повний. Слід зауважити, що тут ми подаємо лише остаточні результати, правильність яких легко перевірити. Насправді ми спочатку знайшли повновимірні структури основного стану моделі (усі вони, крім однієї, наведені в роботі [9]), а знаючи їх, визначили основні промені.

На кожному з наведених променів, крім променів $\mathbf{r}_{10}$ і $\mathbf{r}_{10}^-$, усі структури, згенеровані конфігураціями відповідної основної множини, є структурами основного стану на цих променях. Що ж до променів $\mathbf{r}_{10}$ і $\mathbf{r}_{10}^-$, то тут мусять виконуватися ще додаткові умови. Для променя $\mathbf{r}_{10}$ ці умови полягають у тому, що позначені зірочкою конфігурації входять у структури основного стану в блоках, зображених

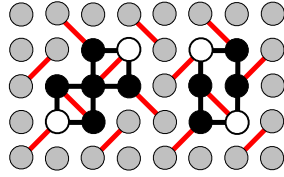


Рис. 4. Блоки для побудови основних станів на промені r_{10} , в які входять квадрати $\bullet\bullet$ і $\bullet\circ$.

на Рис. 4, і ці блоки на ґратці не перекриваються ні між собою, ні з іншими квадратами. (Для симетричного променя r_{10}^- виконується симетрична умова.) Дове́димо це. За формулами (2.1) знайдемо енергії усіх можливих конфігурацій кластерів у точці $h = 2J_1$, $J_2 = 2J_1$ і $J_3 = -J_1$ (промінь r_{10}) при $\alpha = 1$, $\beta = \frac{1}{2}$ і $\gamma = 1$, змістивши нульовий рівень енергії на $2J_1 > 0$: $\bullet\bullet$ ($-2J_1$); $\bullet\circ$, $\circ\bullet$, $\bullet\bullet$ (0); $\bullet\bullet$, $\bullet\bullet$ ($2J_1$); $\bullet\bullet$ ($4J_1$); $\bullet\bullet$ ($6J_1$); $\bullet\bullet$ ($12J_1$); $\bullet\bullet$, $\bullet\bullet$, $\bullet\bullet$ (0); $\bullet\bullet$, $\bullet\bullet$ ($2J_1$); $\bullet\bullet$ ($4J_1$). Після кожної групи конфігурацій у дужках вказано їхню енергію (однакову для усіх конфігурацій групи). Квадрати з від'ємною, нульовою і додатною енергією називатимемо коротко “від'ємними”, “нульовими” і “додатними”, відповідно. Дове́димо, що енергія довільної структури не може бути від'ємною на промені r_{10} . Для цього досить було б довести, що кількість від'ємних квадратів у структурах не може перевищувати кількість додатних. Однак ми подаємо доведення ширшого твердження, сформульованого вище.

Біля кожного від'ємного квадрата $\bullet\bullet$ в області, що зі сторони чорних кружечків (див. Рис. 3(a)), є принаймні один додатний квадрат (один із трьох). Об'єднаймо квадрати в структурі у групи таким чином: кожен нульовий квадрат утворює окрему групу; кожен від'ємний квадрат входить у групу того додатного квадрата, який розташований зі сторони чорних кружечків. Якщо від'ємний квадрат входить у дві чи більше груп, то його енергію розподіляємо порівну між цими групами. Легко переконатися, що за такого правила групування додатні квадрати $\bullet\bullet$, $\bullet\bullet$ і $\bullet\bullet$ не можуть утворити групи з жодним від'ємним квадратом. Квадрати $\bullet\bullet$ і $\bullet\bullet$ можуть утворити групу лише з одним від'ємним квадратом, однак її енергія буде додатною. Квадрат $\bullet\bullet$ може утворити групу з двома від'ємними квадратами, яка має нульову енергію, однак тоді неминуче виникають інші групи з додатною енергією (Рис. 3(b)). Квадрат $\bullet\bullet$ може утворити групу з нульовою енергією лише в такому поєд-

нанні з від'ємним квадратом, яке зображено на Рис. 3(c). Єдиний квадрат, який може творити групу з від'ємною енергією ($-J_1$) — це квадрат $\bullet\bullet$ (Рис. 3(d)). Однак тоді виникає додатний квадрат $\bullet\circ$ або $\circ\bullet$. Перший з них дає групу з енергією $3J_1$, яку не компенсує від'ємна енергія групи квадрата $\bullet\bullet$. Щоби уникнути цього квадрата, треба замість нього взяти квадрат $\bullet\bullet$, який може дати групу з нульовою енергією, однак тоді ситуація повториться, і таким чином група квадрата $\bullet\bullet$ з від'ємною енергією породить нескінченну півстрічку, у якій усі решта груп матимуть нульову енергію. Отже груп з від'ємною енергією, як на Рис. 3(d), у структурі може бути лише нескінченно мала кількість. З цих міркувань випливає, що в структурі основного стану на промені r_{10} , крім нульових квадратів, можуть входити ще й додатні квадрати $\bullet\bullet$ і $\bullet\bullet$, однак лише в таких поєднаннях з квадратом $\bullet\bullet$, які зображено на Рис. 4.

3. Повновимірні структури основного стану

Таблиця 1 — це повний розв'язок задачі про основні стани, яку ми розглядаємо. Знаючи основні промені й основні множини конфігурацій й використовуючи властивість опуклості, легко визначити повновимірні структури основного стану й відповідні області. Для цього треба знайти усі підмножини основних множин конфігурацій з такими властивостями: 1) кожна з них є підмножиною не менше чотирьох основних множин і лінійна оболонка відповідних основних векторів є повновимірною (чотиривимірною), 2) з конфігурацій підмножини можна побудувати хоча б одну структуру. Повновимірні області й множини конфігурацій, з яких будуються структури основного стану в цих областях, наведено в Табл. 2. У першому стовпчику Табл. 2 вказано номер повновимірної області. З огляду на симетрію моделі відносно інверсії поля h з одночасною інверсією усіх спінів, наведено лише області з додатною або нульовою намагнетованістю. Область з від'ємною намагнетованістю позначатимемо тим самим числом, що й симетричну їй область з додатною намагнетованістю, тільки з рискою над ним. У третьому стовпчику Табл. 2 наведено енергію структури (структур) на один вузол, а також (у квадратних дужках) відносні вміст конфігурацій кластерів у структурах (див. [15]). Якщо відносний вміст кластерів може бути різний (область 7), то існує виродження, і тоді у квадратних дужках є позначка “Безлад”. (В області 6 також є безлад, проте відносний вміст кластерів однаковий в усіх структурах.) У четвертому стовпчику наведено намагнетованість відповідних структур, у п'ятому — основні промені, що визна-

Табл. 2. Повновимірні області й структури основного стану для моделі Ізинґа на розширеній ґратці Шастри-Сазерленда (для $h \geq 0$).

Об- ласть	Твірні конфігурації	Характеристики структури	m/m_s	Основні промені	Число 3-граней
1	$\bullet\bullet \parallel \bullet\bullet$	$2J_1 + \frac{J_2}{2} + J_3 - h, [1 \parallel 1]$	1	$\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4, \mathbf{r}_6, \mathbf{r}_7, \mathbf{r}_8$	8
3	$\bullet\bullet \parallel \bullet\bullet$	$-2J_1 + \frac{J_2}{2} + J_3, [\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \parallel 1]$	0	$\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_5, \mathbf{r}_7, \mathbf{r}_9, \mathbf{r}_{10}, \mathbf{r}_7^-, \mathbf{r}_9^-, \mathbf{r}_{10}^-$	11
4	$\bullet\bullet \parallel \bullet\bullet$	$-\frac{2J_1}{3} - \frac{J_2}{6} + \frac{J_3}{3} - \frac{h}{3}, [\frac{1}{3}, \frac{2}{3} \parallel \frac{1}{3}, \frac{2}{3}]$	1/3	$\mathbf{r}_5, \mathbf{r}_7, \mathbf{r}_8, \mathbf{r}_9, \mathbf{r}_{10}$	5
5	$\bullet\bullet \parallel \bullet\bullet$	$-\frac{J_2}{2} - J_3, [1 \parallel 1]$	0	$\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5, \mathbf{r}_6, \mathbf{r}_8, \mathbf{r}_9, \mathbf{r}_6^-, \mathbf{r}_8^-, \mathbf{r}_9^-$	9
6	$\bullet\bullet \parallel \bullet\bullet$	$-\frac{h}{2}, [0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0 \parallel 1]$	1/2	$\mathbf{r}_6, \mathbf{r}_7, \mathbf{r}_8, \mathbf{r}_9$	4
7	$\bullet\bullet \parallel \bullet\bullet$	$\frac{J_2}{2} - \frac{h}{2}, [\text{Безлад} \parallel 1]$	1/2	$\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_6, \mathbf{r}_7, \mathbf{r}_9$	4
8	$\bullet\bullet \parallel \bullet\bullet$	$\frac{J_2}{2} - J_3, [\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4} \parallel 1]$	0	$\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_6, \mathbf{r}_9, \mathbf{r}_6^-, \mathbf{r}_9^-$	6
9	$\bullet\bullet \parallel \bullet\bullet$	$-\frac{J_2}{2} + J_3, [1 \parallel \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}]$	0	$\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5, \mathbf{r}_8, \mathbf{r}_{10}, \mathbf{r}_8^-, \mathbf{r}_{10}^-$	8
10	$\bullet\bullet \parallel \bullet\bullet$	$J_3 - \frac{h}{2}, [\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \parallel \frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$	1/2	$\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_7, \mathbf{r}_8, \mathbf{r}_{10}$	4

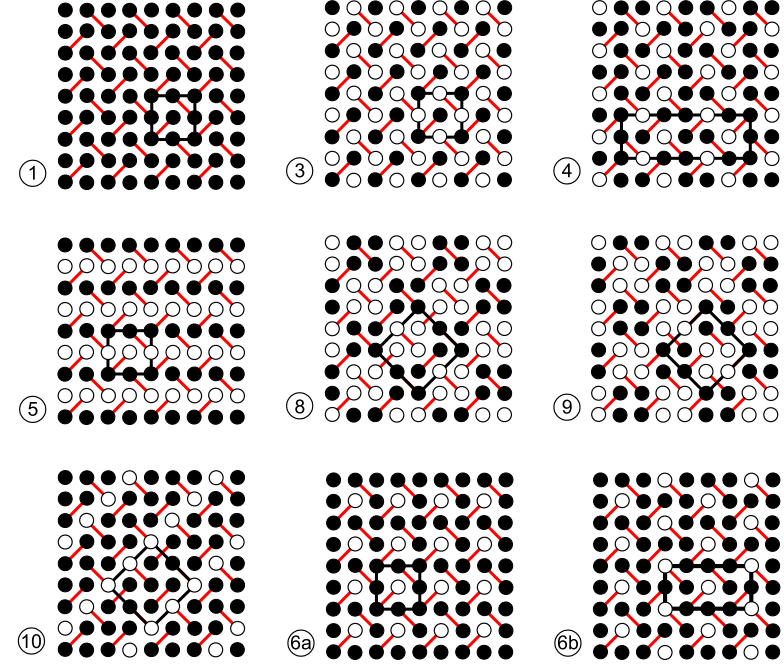


Рис. 5. Повновимірні структури основного стану моделі Ізинґа на розширеній ґратці ШС (для $h \geq 0$). 1 — цілком поляризована фаза; 3 — фаза Нееля; 4 — фаза з $m/m_s = 1/3$; 5 — колінеарна фаза; 8 і 9 — фази з шаховим порядком; 10, 6a і 6b — фази з $m/m_s = 1/2$. Суміші фаз 6a і 6b є основним станом в області 6. Вказано елементарні комірки.

чають відповідну область (тобто її ребра), а в шостому — кількість тривимірних граней, що має область.

Повновимірні структури основного стану розглядуваної моделі зображено на Рис. 5. Їх побудовано з тих конфігурацій кластерів, які наведені в Табл. 2. Усі повновимірні структури, окрім структур в області 6 і 7, цілком детерміновані. А в областях 6 і 7 існує нескінченна кількість структур основного стану: фази 6 і 7 хаотизовані (Рис. 6). Легко перекоонатися в тому, що безлад фази 7 одновимірний: в одному напрямку — порядок, в іншому — безлад.

Встановити характер (вимірність) безладу в фазі 6 трохи складніше. Структурний елемент, зображений на Рис. 7, породжує у стру-

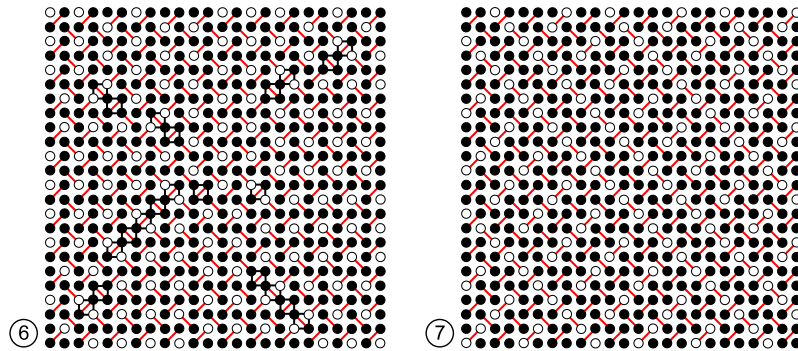


Рис. 6. Повновимірні структури основного стану моделі Ізинґа на розширеній ґратці ШС. Хаотизовані фази 6 і 7. У структурі 6 виділено квадрати-“дефекти”.

ктурах фази 6 (і навіть на межі фаз 4 і 6) нескінченну півстрічку. На основі цього можна показати, що безлад фази 6 також є одновимірним. Кількість квадратів $\begin{smallmatrix} \circ & \circ \\ \circ & \circ \end{smallmatrix}$ і $\begin{smallmatrix} \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet \end{smallmatrix}$ нескінченно мала порівняно з кількістю решти квадратів. Хоча їх енергія така ж, як і енергія решти квадратів, що генерують структуру 6, ці квадрати породжують ніби дефекти структури. Тому фазу 6 можна вважати простою сумішшю структур 6a і 6b, зображених на Рис. 5.

Цікаво, що повновимірна структура 9 є кіральною. Це добре видно, якщо зобразити цю структуру не на ґратці ШС, а на еквівалентній їй ґратці, показаній на Рис. 1(с). Можливі дві структури: структура зі зв'язками ШС, закрученими вліво навколо “білих” чи “чорних” квадратів, та її кіральний двійник — зі зв'язками ШС, закрученими вправо (Рис. 8). Отже з хаотизованої некіральної фази Ізинґових димерів (різні спіни на кінцях кожної діагоналі ШС) [9]

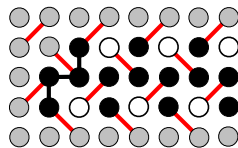


Рис. 7. Структурний елемент у фазах 4 і 6 (а також на їхній межі) та породжена ним нескінченна півстрічка.

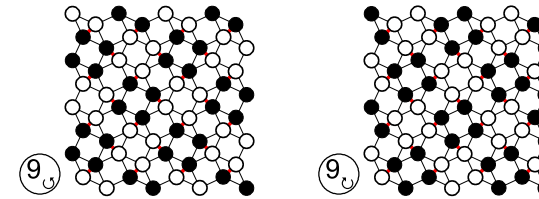


Рис. 8. Кіральність структур 9. Діагоналі ШС навколо “білих” чи “чорних” квадратів можуть закручуватися як за годинниковою стрілкою, так і проти, але однаково для усіх квадратів.

взаємодія J_3 , усунувши виродження, породила дві упорядковані фази, одна з яких кіральна. Слід зауважити, що на ґратці Архімеда (Рис. 1(а)) з однаковими взаємодіями J_1 і J_2 , ця структура вже не є кіральною. Виникнення кіральних структур (яких так багато в природі) внаслідок спонтанного порушення симетрії й досі не до кінця зрозуміле [16].

4. Структури основного стану на тривимірних гранях повновимірних областей

Розгляньмо тепер основні стани на тривимірних гранях (3-гранях) повновимірних областей. 3-грань задається підмножиною множини основних векторів повновимірної області. Алгоритм знаходження 3-граней повновимірної області описано в [13]. Це проста задача аналітичної геометрії в багатовимірних просторах, і ми не будемо тут повторювати опис цього алгоритму. Знайшовши 3-грані усіх повновимірних областей, легко довести повноту набору основних векторів. Для цього досить переконатися, що кожна знайдена 3-грань є 3-гранню двох повновимірних областей, а отже повновимірні області заповнюють простір параметрів без щілин і перекриттів.

Знаючи основні вектори для 3-грані, легко знайти множину конфігурацій кластерів, яка генерує усі структури основного стану на тій 3-грані. Ця множина є перетином основних множин конфігурацій для основних векторів грані. Відтак можна описати відповідні структури основного стану.

Основні вектори, що генерують 3-грані повновимірних областей, а також відповідні множини конфігурацій кластерів наведено в Табл. 3–4. 3-грань у цій Таблиці позначено парою номерів повнови-

Табл. 3. Основні промені і конфігурації для 3-граней повновимірних областей основного стану моделі Ізинґа на розширеній ґратці Шастри–Сазерленда (для $h \geq 0$). Для неперервних переходів в дужках вказано вимірність безладу.

Області	Основні промені 3-грані	Конфігурації основного стану для 3-грані	Перехід між фазами
1, $\bar{1}$	$\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4$		Стр.
1, 3	$\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_7$		Стр.
1, 5	$\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4, \mathbf{r}_8, \mathbf{r}_6$		Неп. (1)
1, 6	$\mathbf{r}_6, \mathbf{r}_7, \mathbf{r}_8$		Неп. (2)
1, 7	$\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_6, \mathbf{r}_7$		Неп. (2)
1, 8	$\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_6$		Неп. (1)
1, 9	$\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_4, \mathbf{r}_8$		Стр.
1, 10	$\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_7, \mathbf{r}_8$		Неп. (1)
3, 4	$\mathbf{r}_5, \mathbf{r}_9, \mathbf{r}_7, \mathbf{r}_{10}$		Неп. (1)
3, 5	$\mathbf{r}_5, \mathbf{r}_9, \mathbf{r}_9^-$		Неп. (2)
3, 7	$\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_7, \mathbf{r}_9$		Неп. (2)
3, 8	$\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_9, \mathbf{r}_9^-$		Неп. (1)
3, 9	$\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_{10}, \mathbf{r}_5, \mathbf{r}_{10}^-$		Стр.
3, 10	$\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_7, \mathbf{r}_{10}$		Неп. (1)

Табл. 4. (Продовження Табл. 3.) Основні промені і конфігурації для 3-граней повновимірних областей основного стану моделі Ізинґа на розширеній ґратці Шастри–Сазерленда (для $h \geq 0$). Для неперервних переходів в дужках вказано вимірність безладу. Конфігурації, позначені зірочкою, входять у структури в блоках, показаних на Рис. 4.

Області	Основні промені 3-грані	Конфігурації основного стану для 3-грані	Перехід між фазами
4, 5	$\mathbf{r}_5, \mathbf{r}_8, \mathbf{r}_9$		Неп. (?)
4, 6	$\mathbf{r}_7, \mathbf{r}_8, \mathbf{r}_9$		Неп. (1)
4, 9	$\mathbf{r}_5, \mathbf{r}_8, \mathbf{r}_{10}$		Стр. + Неп. (1)
4, 10	$\mathbf{r}_7, \mathbf{r}_8, \mathbf{r}_{10}$		Стр.
5, 6	$\mathbf{r}_6, \mathbf{r}_8, \mathbf{r}_9$		Неп. (2)
5, 8	$\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_6, \mathbf{r}_9, \mathbf{r}_9^-, \mathbf{r}_6^-$		Неп. (1)
5, 9	$\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_8, \mathbf{r}_5, \mathbf{r}_8^-$		Неп. (2)
6, 7	$\mathbf{r}_6, \mathbf{r}_7, \mathbf{r}_9$		Неп. (2)
7, 8	$\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_6, \mathbf{r}_9$		Неп. (2)
9, 10	$\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_8, \mathbf{r}_{10}$		Неп. (1)

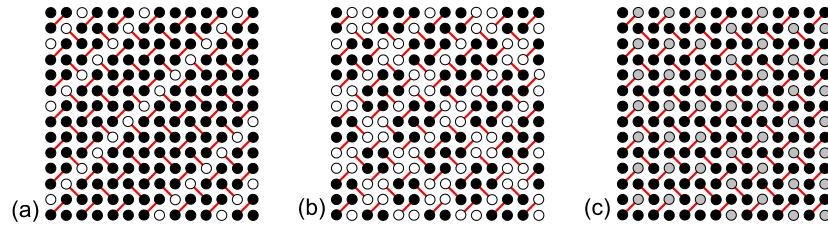


Рис. 9. Приклади структур основного стану на межі фаз (а) 1 і 10 та (b) 9 і 10. Безлад на цих межах одновимірний. (с) Приклад структур основного стану на межі фаз 1 і 6. Кожен сірий кружечок може бути як білим, так і чорним, отже безлад на цій межі двовимірний. Якщо усі сірі кружечки зробити білими, то це буде суміш структур 6a і 6b, яка є основним станом в області 6.

мірних областей (фаз), для яких ця 3-грань є спільною. Якщо якась конфігурація з множини несумісна з іншими (тобто не може входити в структури основного стану на 3-грані), її відокремлено знаком $|$. Рід переходу між областями (фазами) залежить від сукупності структур основного стану на їхній межі, тобто спільній 3-грані. Якщо з множини конфігурацій кластерів для 3-грані можна побудувати лише ті структури, які є в повновимірних областях по обидва боки від неї, то перехід між фазами цих областей є першого роду — стрибок (позначка “Стр.” в Табл. 3–4). Стрибок існує між фазами 1 і $\bar{1}$, 1 і 3, 1 і 9, 3 і 9 та 4 і 10 (а також між парами симетричних фаз). Якщо ж для будь-якого значення намагнетованості з проміжку між намагнетованостями сусідніх повновимірних фаз можна побудувати хоча б одну структуру основного стану, то перехід між цими фазами неперервний (позначка “Неп.” в Табл. 3–4). Як видно з Табл. 3–4, такими є більшість переходів. А ось між фазами 4 і 9 є як стрибок, так і неперервний перехід.

Важливим і цікавим є питання про безлад і ентропію на 3-гранях (і не лише на них), де кількість структур основного стану нескінченна. Розгляньмо, наприклад, 3-грань між областями 1 і 10. Типовий приклад структури на цій грані зображено на Рис. 9(а): структура має вигляд діагональних ланцюжків зі спінів вниз (вздовж “діагоналей” порожніх квадратів), розділених довільною непарною кількістю (але не менше трьох) діагональних ланцюжків зі спінів вверх. Це проста суміш структур 1 і 10. Зрозуміло, що вздовж цих ланцюжків є порядок, а в перпендикулярному напрямку — безлад. Такий безлад

можна назвати одновимірним. Він не призводить до макроскопічного виродження: ентропія на вузол прямує до нуля, якщо розміри ґратки прямують до нескінченності. Подібна проста суміш повновимірних структур існує також на межах фаз 1 і 5, 1 і 8, 3 і 4, 3 і 8 та 3 і 10. На межі фаз 9 і 10 хоч безлад і одновимірний, проте структури основного стану не є простою сумішшю повновимірних структур 9 і 10, а радше їх гібридом. Вони мають вигляд структури 10 з додатковими “білими” діагональними ланцюжками, перпендикулярними до таких же ланцюжків структури 10 (Рис. 9(б)).

Ще інший тип безладу виникає, наприклад, на межі фаз 1 і 6. Структури на ній можна одержати із суміші структур 6a і 6b, яка є основним станом в області 6, замінивши частину спінів вниз на спіни вверх (Рис. 9(с)). Зрозуміло, що безлад тут двовимірний: в структурах на цій межі не можна знайти жодного напрямку, в якому був би порядок. Про двовимірність безладу свідчить і те, що в структурах можна робити локальні зміни, не виходячи за межі основного стану. Кожен п'ятий спін у структурі, зображеній на Рис. 9(с), вільний, тобто може бути спрямований як униз, так і вверх, отже ентропія на вузол дорівнює $\frac{1}{5} \ln 2$. Насправді ентропія на цій 3-грані може бути ще більша, бо Рис. 9(б) не вичерпує усіх можливих структур.

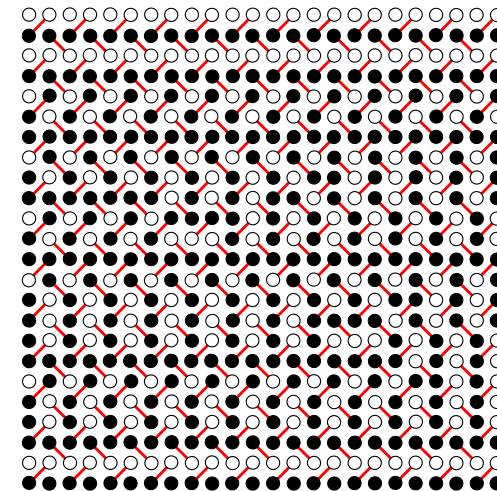


Рис. 10. Приклад структури основного стану на межі фаз 4 і 5. Виглядає, що безлад на цій межі одновимірний, проте довести це ми не змогли.

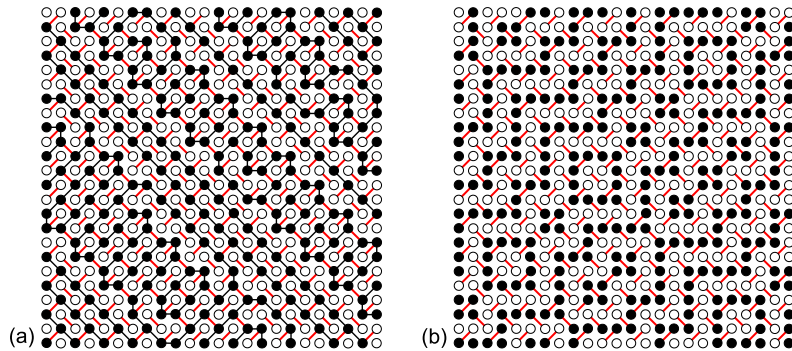


Рис. 11. Приклади структур основного стану на межах фаз (а) 3 і 5 та (б) 5 і 8. На межі фаз 3 і 5 існує залишкова ентропія, а на межі фаз 5 і 8 залишкової ентропії нема, хоч безлад є у двох взаємно перпендикулярних напрямках. Деякі вузли сполучено лініями для кращого сприймання структури.

У Табл. 3–4 вимірність безладу вказано у четвертому стовпчику. Її не завжди можна встановити так легко, як у випадках, розглянутих вище. Для межі між фазами 4 і 5 (Рис. 10) ми не змогли цього зробити. Радше всього безлад на цій 3-грані одновимірний, проте довести це нам не вдалося. Проаналізуємо структури ще на деяких 3-гранях, де встановлення вимірності безладу нетривіальне.

З Рис. 11 видно, що у структурах на межі фаз 3 і 5 можна робити локальні зміни, не виходячи за межі основного стану, а отже цей безлад двовимірний і ентропія на вузол відмінна від нуля. На межі фаз 5 і 8 безлад існує у двох напрямках незалежно, проте безлад не є двовимірним, бо достатньої кількості локальних змін, які б не виводили за межі основного стану, зробити не можна. Структури на межі фаз 5 і 8 цікаві ще й тим, що вони визначаються єдиною умовою: усі “порожні” квадрати мають конфігурацію $\begin{smallmatrix} \bullet & \bullet \\ \bullet & \circ \end{smallmatrix}$.

Цікава сукупність структур виникає також на межі фаз 4 і 9. Безлад на цій межі одновимірний, бо структура цілком визначається зигзаг-стрічкою, приклад якої зображено на Рис. 12. Найближчою (за намагнетованістю) до структури 9 у цій сукупності є упорядкована структура з $m/m_s = 1/5$ (Рис. 13(a)). Отож між структурою 9 і цією структурою є перехід першого роду, а з неї — неперервний перехід у фазу 4, тобто на межі фаз 4 і 9 є як перехід першого роду, так і неперервний. Крім структур такого типу, як зображено на

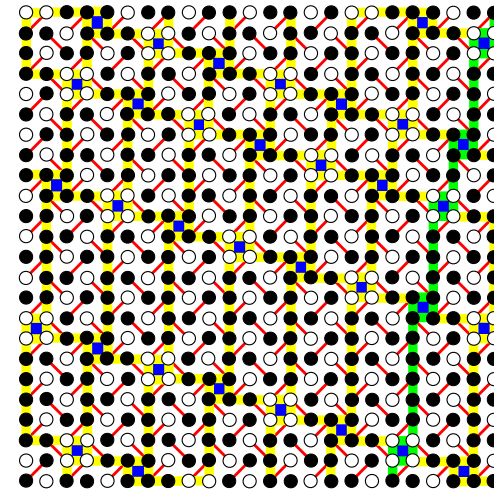


Рис. 12. Приклад структури основного стану на межі фаз 4 і 9. Виділено прямокутники, утворені феромагнетними ланцюжками разом з “білими” і “чорними” квадратами, а також одну із зигзаг-стрічок, яка породжує усю структуру. Ця структура кіральна: навколо “білих” квадратів діагоналі ПС закручені за годинниковою стрілкою, а навколо “чорних” — проти (у кірального двійника — навпаки).

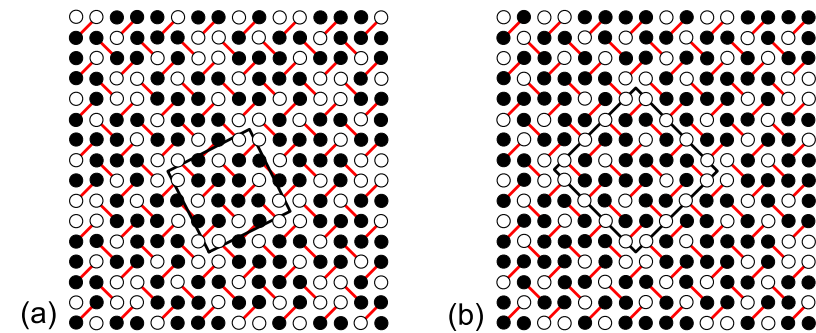


Рис. 13. Приклади структур основного стану на межі фаз 4 і 9: (а) $m/m_s = 1/5$, (б) $m/m_s = 1/4$. Вказано елементарні комірки.

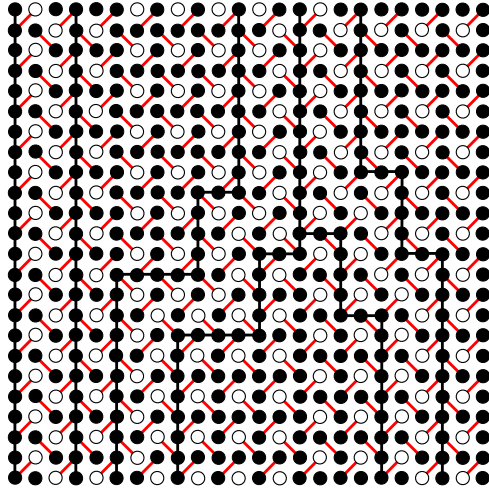


Рис. 14. Приклад структури основного стану на межі фаз 4 і 6. Лінії розмежовують домени фаз 4 і 6.

Рис. 12, на межі фаз 4 і 9 є одна структура іншого типу. Це структура з $m/m_s = 1/4$; її показано на Рис. 13(b). Усі ці структури, крім структури 4, кіральні (див. Рис. 8 і пояснення до нього в тексті).

Ще одна сукупність структур, де важко встановити вимірність безладу, існує на межі фаз 4 і 6. Приклад структури на цій межі показано на Рис. 14. Може здатися, що безлад тут двовимірний, та глибший аналіз показує, що все-таки одновимірний, бо, як і у фазі 6, структурний елемент, зображений на Рис. 7, породжує нескінченну півстрічку.

На межі фаз 3 і 4 існує сукупність стрічкових структур, деякі з яких, певно, породжують дробові плато намагнетованості в TmV_4 . Ми не будемо тут описувати ці структури, бо це зроблено в [9]. Взаємодія J_3 не усуває виродження на цій межі.

5. Структури основного стану на двовимірних гранях повновимірних областей

Хоча основні стани на 2-гранях повновимірних областей не такі важливі, як основні стани на 3-гранях, для повноти картини розглянемо ще й їх. Ми позначаємо 2-грань взятими у фігурні дужки векто-

Табл. 5. Основні стани на двовимірних гранях повновимірних областей основного стану моделі Ізинґа на розширеній ґратці ПС (для $h \geq 0$).

2-грань	Конфігурації основного стану для 2-грані		Безлад	Повновимірні структури	Координати в площині (h, J_2)
$\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\}$			0	1, $\bar{1}$, 3	$h = 0, J_1 = 0$
$\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_4\}$			0	1, $\bar{1}$, 9	$(0, -2J_1)$
$\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_7\}$			1	1, 3, 10	$(4J_1, 0)$
$\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_8\}$			1	1, 9, 10	$h = J_2, J_1 = 0$
$\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_{10}\}$			1	3, 9, 10	$(2J_1, 2J_1)$
$\{\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3\}$			1	1, $\bar{1}$, 8	$h = 0, J_3 = -J_1$
$\{\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_6\}$			2	1, 7, 8	$h = 2J_3, J_1 = 0$
$\{\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_7\}$			2	1, 3, 7	$h = 4J_1, J_3 = 0$
$\{\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_9\}$			2	3, 7, 8	$h = 2J_1, J_3 = J_1$
$\{\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4\}$			2	1, $\bar{1}$, 5	$(0, -2J_1 - 2J_3)$
$\{\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_6\}$			2	1, 5, 8	$(2J_1 + 2J_3, 0)$
$\{\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_8\}$			2	1, 5, 9	$h = J_2 + 2J_1, J_3 = 0$

Табл. 6. (Продовження Табл. 5.) Основні стани на двовимірних гранях повновимірних областей основного стану моделі Ізинга на розширеній ґратці ШС (для $h \geq 0$). Конфігурації, позначені зірочкою, входять у структури в блоках, показаних на Рис. 4.

2-грань	Конфігурації основного стану для 2-грані	Безлад	Повновимірні структури	Координати в площині (h, J_2)
$\{\mathbf{r}_5, \mathbf{r}_8\}$		2	4, 5, 9	$h = J_2 - 2J_1, J_3 = 0$
$\{\mathbf{r}_5, \mathbf{r}_9\}$		2	3, 4, 5	$(2J_3, 2J_1 - 2J_3)$
$\{\mathbf{r}_5, \mathbf{r}_{10}\}$		2	3, 4, 9	$(-2J_3, 2J_1)$
$\{\mathbf{r}_6, \mathbf{r}_7\}$		2	1, 6, 7	$(4J_1 + 2J_3, 0)$
$\{\mathbf{r}_6, \mathbf{r}_8\}$		2	1, 5, 6	$h = J_2 + 2J_3, J_1 = 0$
$\{\mathbf{r}_6, \mathbf{r}_9\}$		2	5, 6, 7, 8	$(2J_3, 0)$
$\{\mathbf{r}_7, \mathbf{r}_8\}$		2	1, 4, 6, 10	$h = J_2 + 4J_1, J_3 = 0$
$\{\mathbf{r}_7, \mathbf{r}_9\}$		2	3, 4, 6, 7	$(4J_1 - 2J_3, 0)$
$\{\mathbf{r}_7, \mathbf{r}_{10}\}$		1	3, 4, 10	$(4J_1 + 2J_3, -2J_3)$
$\{\mathbf{r}_8, \mathbf{r}_9\}$		2	4, 5, 6	$h = J_2 + 2J_1, J_1 = J_3$
$\{\mathbf{r}_8, \mathbf{r}_{10}\}$		2	4, 9, 10	$h = J_2, J_1 = -J_3$
$\{\mathbf{r}_9, \mathbf{r}_9^-\}$		2	3, 5, 8	$J_1 = J_3, J_2 = 0$

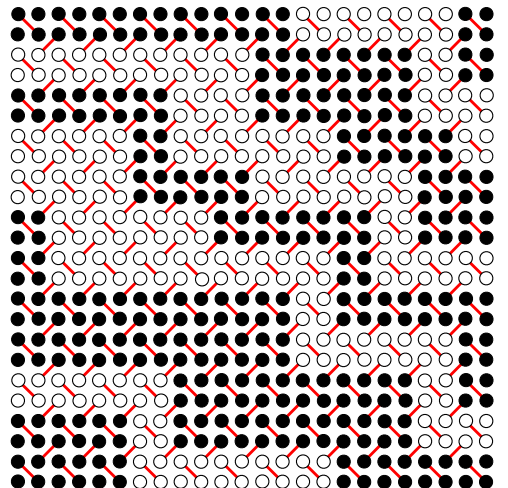


Рис. 15. Приклад структури основного стану на межі фаз 1, $\bar{1}$ і 5 (2-грань $\{\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4\}$), який показує іонування двовимірного безладу на цій межі.

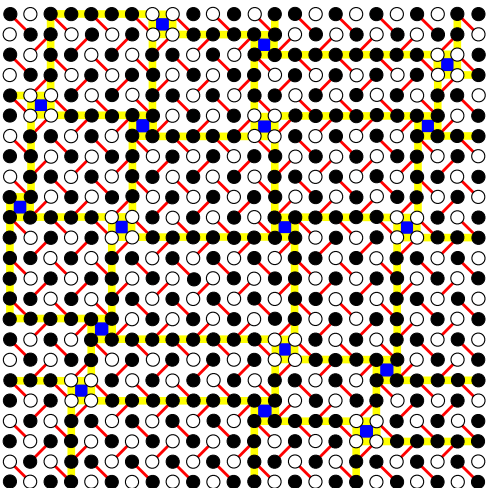


Рис. 16. Приклад структури основного стану на межі фаз 3, 4 і 9 (2-грань $\{\mathbf{r}_5, \mathbf{r}_{10}\}$). Виділено прямокутники, утворені феромагнетними ланцюжками разом з “білими” і “чорними” квадратами.

рами, які її генерують. У Табл. 3–4 вектори кожної 3-грані розташовано у такому порядку, що будь-яка пара сусідніх векторів (перший і останній також вважаються сусідніми) генерує 2-грань. Конфігурації основного стану для 2-грані є перетином основних множин конфігурацій для цих векторів. 2-грані повновимірних областей для $h \geq 0$ та конфігурації основного стану на них наведено в Табл. 5–6. У третьому стовпчику Табл. 5–6 вказано вимірність безладу на 2-гранях, у четвертому — повновимірні області, для яких ця 2-грань є спільною, а в п'ятому — координати точки, яка відповідає цій 2-грані у площині (h, J_2) . Якщо у п'ятому стовпчику координати не вказані в дужках, то така 2-грань не перетинає площину (h, J_2) або цілком лежить у цій площині за певних значень J_1 і J_3 .

Вимірність безладу на багатьох 2-гранях легко встановити, зважаючи на те, що безлад на 2-грані не може бути меншим, ніж безлад на 3-грані, яку ця 2-грань обмежує. Проте, на деяких 2-гранях встановлення вимірності безладу — не цілком просте завдання. Для прикладу розглянемо кілька таких 2-граней. На 2-грані $\{r_3, r_4\}$ безлад двовимірний. Це ілюструє Рис. 15. Значно складніше показати, що двовимірним є й безлад на 2-грані $\{r_5, r_{10}\}$. На Рис. 16, де це доведено, виділені зигзаг-стрічки, що йдуть зліва направо, можуть не тільки опускатися зверху вниз, а й трохи підніматися вгору. Саме тому безлад на цій 2-грані двовимірний. На 2-грані $\{r_8, r_{10}\}$ безлад також двовимірний. Це стає зрозуміло з Рис. 17, де в зображених

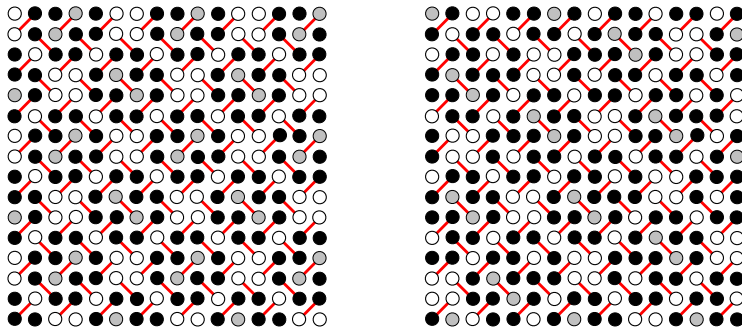


Рис. 17. Приклади структур основного стану на межі фаз 4, 9 і 10 (2-грань $\{r_8, r_{10}\}$), які показують існування залишкової ентропії на цій межі. Із кожної пари сріблястих кружечків один має бути білим, а другий — чорним. Обидві структури можуть змішуватися одна з одною.

структурах із кожної пари сріблястих кружечків один має бути білим, а другий — чорним.

Зауважмо ще, що на усіх основних променях безлад двовимірний.

6. Фазові діаграми основного стану і дробові плато намагнетованості

Для того, щоби наші результати було зручно використовувати, ми наводимо усі можливі типи фазових діаграм основного стану в площині (h, J_2) . Маємо три типи діаграм, якщо $J_1 < 0$ (Рис. 18), і чотири

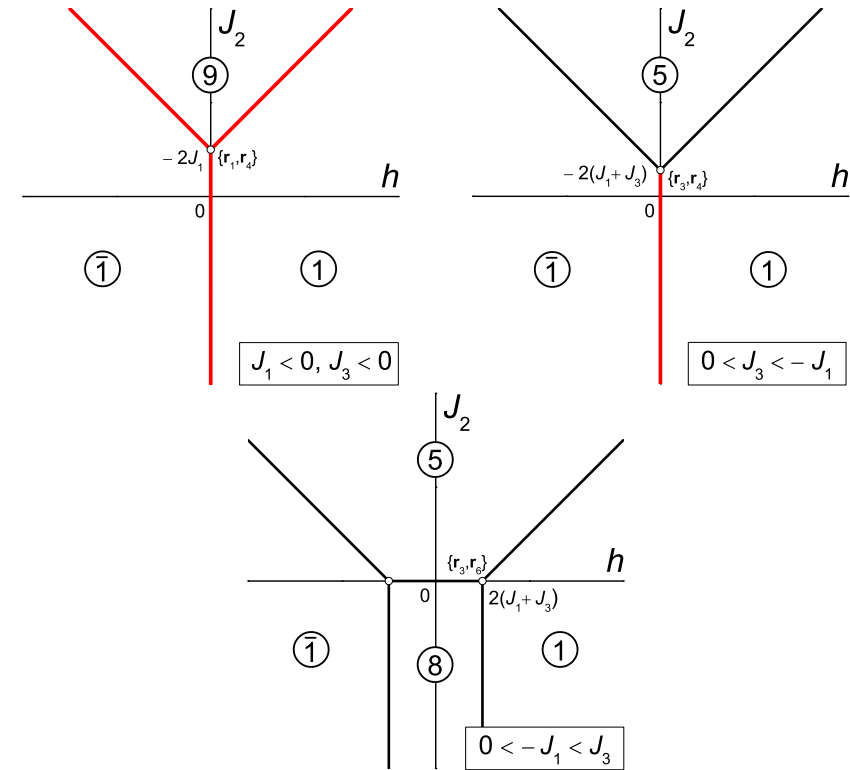


Рис. 18. Діаграма основних станів моделі Ізинґа на розширеній ґратці ШС (для $J_1 < 0$). Чорні лінії відповідають неперервним фазовим переходам, а червоні лінії — фазовим переходам першого роду. (Див. також Табл. 2 та Рис. 5 і 6.)

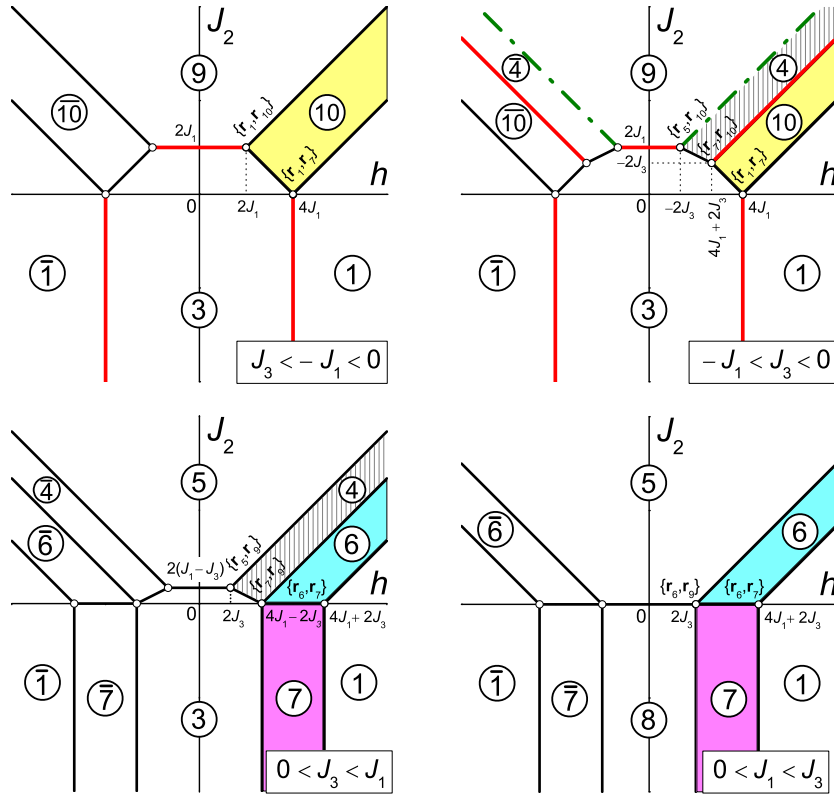


Рис. 19. Діаграма основних станів моделі Ізинґа на розширеній ґратці ШС (для $J_1 > 0$). Чорні лінії відповідають неперервним фазовим переходам, червоні лінії — фазовим переходам першого роду, а зелена штрих-пунктирна лінія — стрибкові разом з неперервним переходом. Кольором виділено ті області, які породжують плато 1/2. Заштриховано область 4, яка породжує плато 1/3. (Див. також Табл. 2 та Рис. 5 і 6.)

типи, якщо $J_1 > 0$ (Рис. 19). 3-граням на цих діаграмах відповідають лінії, що розділяють сусідні області, а 2-граням — точки, де сходяться три чи більше областей. Якщо фазовий перехід між сусідніми фазами першого роду, то на діаграмах межа між ними — червона суцільна лінія, якщо ж перехід неперервний — то чорна суцільна. Зелена штрих-пунктирна лінія між фазами 4 і 9 відповідає поєднанню двох типів фазових переходів. Області фаз 6, 7 і 10, які поро-

джують плато 1/2, що нас найбільше цікавить у цій роботі, виділено кольором, а область фази 4, яка дає плато 1/3, заштриховано.

Як видно з Рис. 19 і Табл. 2, ширина плато 1/2, породженого фазою 10 для послідовності фаз 3 – 10 – 1 дорівнює $2J_2$ і $4J_1$ для послідовності 9 – 10 – 1, а для усіх решти послідовностей, що дають таке плато, його ширина дорівнює $|4J_3|$. Ширини нульового й дробових плато для різних послідовностей фаз, а також умови існування цих послідовностей наведено в Табл. 7.

Яка послідовність фаз відповідає кривій магнетування у сполуці ErB_4 ? Ця сполука дає лише одне дробове плато — плато 1/2, тому можливі перші п'ять послідовностей в Табл. 7. Однак з огляду на те, що взаємодії J_1 і J_2 антиферомагнетні й приблизно однакові, а взаємодія J_3 порівняно велика і феромагнетна [5], залишається єдиний варіант — 3 – 10 – 1. Це суперечить твердженню авторів [5] про магнетну структуру ErB_4 за нульового поля. В їхніх позначеннях це має бути структура AF1, а не фаза Нееля (AF3). Структура AF1 на їхній фазовій діаграмі основного стану ($J_1 = J_2$, $h = 0$) мала б відповідати нашій структурі 5. Проте там зображено якусь іншу фазу, тому ми зробили висновок, що автори [5] допустили помилку (можливо, чисто механічну).

Використавши структури основного стану, які ми знайшли в [9], автори роботи [18] побудували фазову діаграму основного стану для $J_1 = J_2 > 0$ та довільного J_3 і, стартуючи з цієї діаграми, числовим способом одержали надтвердий (supersolid) спіновий основний стан квантової моделі ШС з сильною Ізинґовою анізотропією. Вони стверджують, що такий основний стан існує в сполуці ErB_4 , яка, як вони вважають, за відсутності магнетного поля має магнетну структуру 5. Однак це можливо лише для $J_3 > J_1 > 0$, що виглядає сумнівним. Виникає враження, що експериментальні результати, які вказують на існування колінеарної магнетної структури 5 в ErB_4 за відсутності поля [6, 19], і результати, з яких випливає, що взаємодія J_3 у цій сполуці феромагнетна й порівняно велика [5], суперечать одні одним.

Помилковою, на нашу думку, є й структура з $m/m_s = 1/2$, яку наведено в [4] для TmB_4 . Це суміш структур 1 і 5. У моделі, яку ми розглядаємо, ця структура існує на межі фаз 1 і 5, для якої $J_1 < 0$. Автори [4, 5] стверджують, що в TmB_4 взаємодія $J_1 \approx J_2$ антиферомагнетна, тому нам видається малоймовірним, щоби така структура виникла у цій сполуці.

Так само малоймовірним є існування в TmB_4 структури з $m/m_s = 1/9$, яку наводять автори [4] (Рис. 20). У ній, порівняно

Табл. 7. Ширини дробових плато для різних шляхів переходу з фази за нульового магнетного поля у феро-магнетну фазу.

Послідовність фаз	Ширина		Ширина		Умови існування
	плато 0	плато 1/3	плато 1/2	плато 1/2	
3 - 10 - 1	$4J_1 - J_2$	0	$2J_2$	$J_1 > 0, J_3 < 0, 0 < J_2 < \min[2J_1, -2J_3]$	
3 - 7 - 1	$4J_1 - 2J_3$	0	$4J_3$	$0 < J_3 < J_1$	
5 - 6 - 1	$J_2 + 2J_3$	0	$4J_3$	$0 < J_1 < J_3$	
8 - 7 - 1	$2J_3$	0	$4J_3$	$0 < J_1 < J_3$	
9 - 10 - 1	J_2	0	$4J_1$	$J_3 < -J_1 < 0, J_2 > 2J_1$	
3 - 4 - 10 - 1	$4J_1 - 2J_2 - 2J_3$	$3J_2 + 6J_3$	$-4J_3$	$-J_1 < J_3 < 0, -2J_3 < J_2 < 2J_1$	
9 - 4 - 10 - 1	$-2J_1 + J_2 - 2J_3$	$6(J_1 + J_3)$	$-4J_3$	$-J_1 < J_3 < 0, J_2 > 2J_1$	
3 - 4 - 6 - 1	$4J_1 - 2J_2 - 2J_3$	$3J_2$	$4J_3$	$0 < J_3 < J_1, 0 < J_2 < 2(J_1 - J_3)$	
5 - 4 - 6 - 1	$-2J_1 + J_2 + 4J_3$	$6(J_1 - J_3)$	$4J_3$	$0 < J_3 < J_1, J_2 > 2(J_1 - J_3)$	

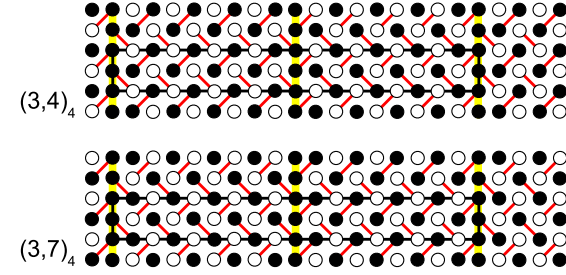


Рис. 20. Структура $(3,4)_4$ для плато $1/9$ в TmV_4 , яку запропонували ми [9], і структура $(3,7)_4$, запропонована для цього плато в [4]. Ці структури різняться розташуванням антиферомагнетних ланцюжків. Вказано елементарні комірки.

зі структурою, яку запропонували ми в [9], антиферомагнетні ланцюжки зсунуті. У нашій моделі структура $(3,7)_4$, наведена цими авторами, існує на межі фаз 3 і 7, тобто за додатних значень J_1 і J_3 , однак від'ємних J_2 .

Автори [5] наводять такі експериментальні значення констант взаємодії для TmV_4 : $J_1 = J_2 = 0.85 \text{ K}$, $J_3 = 0.3 \text{ K}$. Цим значенням у нашій моделі відповідає послідовність фаз 3 - 4 - 6 - 1, однак тоді плато $1/3$ приблизно удвічі більше, ніж плато $1/2$. (Якщо б $J_3 = -0.3 \text{ K}$, то для послідовності фаз 3 - 4 - 10 - 1 було б навпаки.) Плато ж $1/3$ у TmV_4 не спостерігали. Можливо, взаємодії більшого радіуса, породжуючи дробові плато $1/6$, $1/7$..., водночас усувають плато $1/3$.

В роботі [17] для пояснення дробових плато намагнетованості в TmV_4 розглянуто спин-електронну модель. Для плато $1/2$ автори чисельно одержали структуру $6b$ (або симетричну їй структуру). На рисунках, де зображено решту структур, нема однозначності, бо автори не показали зв'язків ШС, тому не зрозуміло, чи це структури такого типу, як у [4], чи такого, як одержали ми в [9] (Рис. 20). Легко показати, що взаємодія J_4 (вздовж сторін квадратів через один вузол) усуває виродження в фазі 6 і стабілізує одну із структур $6a$ або $6b$ із їхньої суміші. Феромагнетна взаємодія J_4 стабілізує структуру $6a$ [10, 11], а антиферомагнетна — структуру $6b$.

Цікаво, що у випадку, коли усі три взаємодії антиферомагнетні ($J_1 > 0$, $J_2 > 0$, $J_3 > 0$), повновимірні фази при $h \geq 0$ (1, 3, 4, 5, 6) можна розглядати як одновимірне упорядкування феро- й антиферомагнетних ланцюжків. Чи не можна було б для дослідження

впливу дальших взаємодій на основні стани перейти від двовимірної задачі до одновимірної моделі з ефективною взаємодією між ланцюжками? [20]

7. Висновки

Отож ми знайшли повний розв'язок задачі про основні стани моделі Ізинґа на ґратці ШС з додатковою взаємодією уздовж діагоналей “порожніх” квадратів, використавши для цього метод основних векторів й основних множин конфігурацій кластерів, який розробили у попередніх роботах. Проте тут, узагальнюючи метод, ми розглядаємо конфігурації не одного, а двох кластерів. Ми побудували фазові діаграми основного стану і дослідили структури основного стану як у повновимірних областях, так і на їх три- і двовимірних межах. Це дало змогу встановити, що додаткова взаємодія уздовж діагоналей порожніх квадратів породжує плато $1/2$. Цьому плато, залежно від співвідношень між константами взаємодій, може відповідати три різні фази, дві з яких частково хаотизовані. Крім плато $1/2$ можливе ще одне дробове плато — плато $1/3$. Як було показано раніше [9], воно є єдиним дробовим плато в моделі без додаткової діагональної взаємодії. За певних співвідношень між константами взаємодій плато $1/2$ також може бути єдиним дробовим плато у моделі з додатковою діагональною взаємодією. Це дає підстави вважати, що нам вдалося пояснити походження єдиного дробового плато — плато $1/2$ — у сполуці ErB_4 . Щодо TmB_4 , де не спостерігали плато $1/3$, але спостерігали плато $1/2$ і низку інших дробових плато, то для теоретичного відтворення кривої магнетування у цій сполуці, треба досліджувати вплив взаємодій більшого радіуса. Однак, знаючи основні стани на межах повновимірних областей досліджуваної моделі, ми вже можемо зробити деякі висновки про вплив таких взаємодій.

Про корисність аналізу основних станів на межах повновимірних областей свідчить і порівняння результатів цієї роботи з результатами нашої попередньої роботи [9]. Побудувавши діаграму основних станів для звичайної моделі Ізинґа на ґратці ШС і проаналізувавши, які зі станів, що існують лише на межах повновимірних областей, стають повновимірними, якщо “увімкнути” невеличку додаткову взаємодію J_3 , ми одержали усі повновимірні структури основного стану розширеної моделі, крім однієї — структури 8 (тому що вона виникає за умови $J_3 > |J_1|$).

Результати, одержані тут і в роботі [9], можуть бути корисними в дослідженні причин виникнення дробових плато намагнетованості

в близьких до Ізинґових магнетиках ШС числовими методами за відмінних від нуля температур [18].

В нашій роботі продовжено розвиток аналітичних методів дослідження основних станів моделей ґраткового газу й еквівалентних їм спінових моделей Ізинґового типу. Ці методи можна застосувати для дослідження структури стопів заміщення, що є на сьогодні дуже актуальною проблемою. (Про це свідчить недавня ініціатива Президента США Барака Обами [21].) В майбутній роботі, далі розвиваючи свій метод, ми покажемо, як враховувати вплив на структури основного стану далеких взаємодій.

8. Подяки

Автор дякує Т. Верхолякові за корисні дискусії і рекомендації.

Література

1. B.S. Shastri and B. Sutherland, *Physica B+C* **108**, 1069 (1981).
2. R.W. Smith and D.A. Keszler, *J. Solid State Chem.* **93**, 430 (1991).
3. H. Kageyama, K. Yoshimura, R. Stern, N.V. Mushnikov, K. Onizuka, M. Kato, K. Kosuge, C.P. Slichter, T. Goto, and Y. Ueda, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3168 (1999).
4. K. Siemensmeyer, E. Wulf, H.-J. Mikeska, K. Flachbart, S. Gabáni, S. Mat’áš, P. Priputen, A. Efdokimova, and N. Shitsevalova, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 177201 (2008).
5. S. Mat’áš *et al.*, *J. Phys: Conf. Ser.* **200**, 032041 (2010).
6. S. Michimura, A. Shigekawa, F. Iga, M. Sera, T. Takabatake, K. Ohoyama, and Y. Okabe, *Physica B* **378-380**, 596 (2006).
7. M.-C. Chang and M.-F. Yang, *Phys. Rev. B* **79**, 104411 (2009).
8. F. Liu and S. Sachdev, *arXiv:0712.1537* (unpublished) (2009).
9. Yu.I. Dublenych, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 167202 (2012).
10. T. Suzuki, Y. Tomita, and N. Kawashima, *Phys. Rev. B* **80**, 180405(R) (2009).
11. T. Suzuki, Y. Tomita, N. Kawashima, and P. Sengupta, *Phys. Rev. B* **82**, 214404 (2010).
12. W.C. Huang, L. Huo, G. Tian, H.R. Qian, X.S. Gao, M.H. Qin, and J.-M. Liu, *J. Phys: Condens. Matter* **24**, 386003 (2012).
13. Yu.I. Dublenych, *Phys. Rev. E* **84**, 011106 (2011).
14. Yu.I. Dublenych, *Phys. Rev. E* **84**, 061102 (2011).
15. Yu.I. Dublenych, *Phys. Rev. E* **83**, 022101 (2011).

16. E. Edlund, O. Lindgren, and M.N. Jacobi, Phys. Rev. Lett. **108**, 165502 (2012).
17. P. Farkašovský, H. Čenčariková, and S. Mat'áš, Phys. Rev. B **82**, 054409 (2010).
18. K. Wierschem, P. Sengupta, arXiv:1212.0926 (unpublished) (2012).
19. W. Schafer, G. Will, and K.H.J. Buschow, J. Chem. Phys. **64**, 1994 (1976).
20. Т. Верхоляк, (приватне повідомлення).
21. G.L.W. Hart, Nature **491**, 764 (2012).

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; "Referativnyi Zhurnal"; "Dzherelo".

EDITOR IN CHIEF: Ihor Yukhnovskii.

EDITORIAL BOARD: T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk (Associate Editor), *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Coventry*; R. Folk, *Linz*; L.E. Gonzalez, *Valladolid*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch (Associate Editor), *Lviv*; M. Holovko (Associate Editor), *Lviv*; O. Ivankiv (Managing Editor), *Lviv*; Ja. Ilnytskyi (Assistant Editor), *Lviv*; N. Jakse, *Grenoble*; W. Janke, *Leipzig*; J. Jedrzejewski, *Wroclaw*; Yu. Kalyuzhnyi, *Lviv*; R. Kenna, *Coventry*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; O. Lavrentovich, *Kent*; M. Lebovka, *Kyiv*; R. Lemanski, *Wroclaw*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Loktev, *Kyiv*; E. Lomba, *Madrid*; O. Makhanets, *Chernivtsi*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod (Associate Editor), *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; O. Pizio, *Mexico*; N. Plakida, *Dubna*; G. Ruocco, *Rome*; A. Seitsonen, *Zürich*; S. Sharapov, *Kyiv*; Ya. Shchur, *Lviv*; A. Shvaika (Associate Editor), *Lviv*; S. Sokolowski, *Lublin*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; J. Strečka, *Košice*; S. Thurner, *Vienna*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; V. Vlachy, *Ljubljana*; 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)2761978; Fax: +38(032)2761158
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>