

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-20-02U

Ю.І. Дубленич

ДІАГРАМИ ОСНОВНОГО СТАНУ УЗАГАЛЬНЕНОЇ МОДЕЛІ
БЛЮМА-ЕМЕРІ-ГРІФФІТСА НА НЕФРУСТРОВАНИХ
ҐРАТКАХ ТА НА ТРИКУТНІЙ ҐРАТЦІ І ҐРАТЦІ КАГОМЕ

УДК: 537.9; 53.072; 538.91

PACS: 75.10.Hk, 05.50.+q, 75.30.Kz

Діаграми основного стану узагальненої моделі Блюма-Емері-Гріффітса на нефрустрованих ґратках та на трикутній ґратці і ґратці кагоме

Ю.І. Дубленич

Анотація. За допомогою кластерного методу побудовано діаграми основного стану узагальненої моделі Блюма-Емері-Гріффітса (БЕГ) на нефрустрованих ґратках, а також на трикутній ґратці та ґратці кагоме зі взаємодією найближчих сусідів. На основі поняття несумісності конфігурацій кластера знайдено ті межі між фазами, які відповідають фазовим переходам першого роду. Також частково досліджено основні стани моделі БЕГ на квадратній ґратці зі взаємодією перших і других сусідів.

Ground-state diagrams for generalized Blume-Emery-Griffiths model on unfrustrated lattices and on the triangular and kagome lattices

Yu.I. Dublanych

Abstract. A simple cluster method is used for constructing ground-state diagrams of the most general spin-1 Ising model on the unfrustrated lattices and also on the triangular and kagome lattices with nearest-neighbor interaction. On the base of notion of incompatibility for cluster configurations the boundaries between phases which correspond to first order phase transitions are found. The same model is considered on the square lattice with nearest- and next-to-nearest-neighbor interactions (without constructing ground-state phase diagrams).

**Подається в Condensed Matter Physics
Submitted to Condensed Matter Physics**

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/>)

У 1971 році Блюм, Емері і Ґріффітс розглянули в наближенні середнього поля неповну модель Ізинґа зі спіном $S = 1$ і застосували її до конкретної фізичної системи — суміші ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ [1]. Відтоді цю модель активно вивчають і використовують для опису різноманітних фізичних об'єктів: систем газ-рідина-тверде тіло [2], багатокомпонентних плинів та сумішей рідинних кристалів [2], напівпровідникових стопів [3], мікроемульсій [4], систем адсорбованих частинок [5], інтеркальованих сполук [6] і т. д. З огляду на широке застосування моделі, добре б мати картину її основних станів для різного типу ґраток. Цього досі не зроблено, правда, детально досліджено одновимірну модель Блюма-Емері-Ґріффітса (БЕҐ) зі взаємодією перших і других сусідів [7], а також, у нашій статті за 2005 рік [8], проведено аналіз основних станів цієї моделі для нефрустрованих ґраток і частково для трикутної ґратки зі взаємодією найближчих сусідів та для квадратної ґратки зі взаємодією перших та других сусідів. Для цього ми використали простий кластерний метод пошуку основних станів моделей типу Ізинґа. У цій статті, ми вдосконалюємо і доповнюємо результати згаданої статті аналізом основних станів і фазових переходів на межах областей, а також повністю досліджуємо основні стани узагальненої моделі Блюма-Емері-Ґріффітса (БЕҐ) на трикутній ґратці та ґратці кагоме зі взаємодіями найближчих сусідів.

Отож знайдімо основні стани найзагальнішої моделі Ізинґа зі спіном $S = 1$:

$$H^* = -J^* \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - K^* \sum_{\langle ij \rangle} s_i^2 s_j^2 - C^* \sum_{\langle ij \rangle} (s_i^2 s_j + s_i s_j^2) + \sum_i (-h s_i + \Delta s_i^2), \quad (1)$$

Юрій Ігорович Дубленич

ДІАГРАМИ ОСНОВНОГО СТАНУ УЗАГАЛЬНЕНОЇ МОДЕЛІ
БЛЮМА–ЕМЕРІ–ҐРІФФІТСА НА НЕФРУСТРОВАНІХ ҐРАТКАХ ТА НА
ТРИКУТНІЙ ҐРАТЦІ І ҐРАТЦІ КАГОМЕ

Роботу отримано 3 червня 2020 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

де s_i — спінова змінна на i -му вузлі — набуває значень $-1, 0, +1$, $\sum_{\langle ij \rangle}$ означає суму за парами найближчих сусідів, J^* , K^* і C^* характеризують білінійну, біквадратну та мішану взаємодії між найближчими сусідами, відповідно; h і Δ — «поля».

Перепишімо Гамільтоніян (1), замінивши суму за вузлами сумою за зв'язками. Розглядатимемо лише вузли з однаковою кількістю зв'язків навколо кожного вузла. Одновузлова енергія розподілиться рівномірно по z зв'язках, які оточують i -тий вузол. Замість Гамільтоніяну (1) розглядатимемо Гамільтоніян $H = zH^*$:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - K \sum_{\langle ij \rangle} s_i^2 s_j^2 - C \sum_{\langle ij \rangle} (s_i^2 s_j + s_i s_j^2) + \sum_{\langle ij \rangle} [-h (s_i + s_j) + \Delta (s_i^2 + s_j^2)], \quad (2)$$

Табл. 1. Двовузлові блоки, їх енергії та умови існування в площині (h, Δ) .

Конфігурація	Енергія	Умова існування
$\langle 0\ 0 \rangle$	0	Завжди
$\langle 0\ + \rangle$	$-h + \Delta$	$C \leq -(J + K)/2$
$\langle 0\ - \rangle$	$h + \Delta$	$C \geq (J + K)/2$
$\langle + - \rangle$	$J - K + 2\Delta$	$J \leq 0$
$\langle ++ \rangle$	$-J - K - 2C - 2h + 2\Delta$	Завжди
$\langle -- \rangle$	$-J - K + 2C + 2h + 2\Delta$	Завжди

де запроваджено такі позначення: $H = zH^*$, $J = zJ^*$, $K = zK^*$ і $C = zC^*$. Діаграми основного стану однакові для обох Гамільтоніанів.

Розгляньмо усі можливі зв'язки, або двовузлові блоки й відповідні енергії. Їх наведено в табл. 1. Порівнюючи ці енергії, розбиваємо простір параметрів Гамільтоніана на шість областей — п'ятивимірних полідральних конусів. Кожна область відповідає певному двовузловому блоку, який у цій області має найнижчу енергію порівняно з енергіями інших двовузлових блоків і визначає основний стан моделі в цій області. Діаграми основного стану будуватимемо в площині (h, Δ) . Легко знайти умови існування кожної з областей у цій площині. Однорідні області, або області феромагнетного типу $\langle 00 \rangle$, $\langle -- \rangle$ і $\langle ++ \rangle$ існують завжди, а неоднорідні, або області антиферомагнетного типу $\langle 0+ \rangle$, $\langle 0- \rangle$ і $\langle +- \rangle$ — за умов, які наведено в табл. 1. Ширина області $\langle +- \rangle$ дорівнює $-2J$, області $\langle 0- \rangle$ — , Якщо $J + K < 0$ і $|C| < -(J + K)/2$, то області $\langle 0+ \rangle$, $\langle 0- \rangle$ і $\langle +- \rangle$ існують одночасно. Зі сказаного вище випливає, що у випадку $J > 0$, $K > -J$ і $|C| < (J + K)/2$ неоднорідних областей немає взагалі. Отже умова додатності J і K , яку часто використовуюють [6, 9], є занадто сильною. Це видно з [10], де розглянуто неповну модель БЕГ.

Діаграми основного стану Ізингової моделі зі спіном $S = 1$ зображено на рис. 1 і 2. Коефіцієнт C вибрано додатним, оскільки діаграми для однакових за величиною і протилежних за знаком значень C симетричні відносно осі $O\Delta$. Треба лише замінити на протилежні знаки в позначеннях фаз. Як видно з рисунків, є дев'ять топологічно нееквівалентних діаграм: три для $J \geq 0$ і шість для $J < 0$.

Розгляньмо тепер узагальнену модель БЕГ на трикутній ґратці і ґратці кагоме зі взаємодією найближчих сусідів. Покриття цих ґраток однаковими трикутними плакетками показано на рис. 3. Оскільки

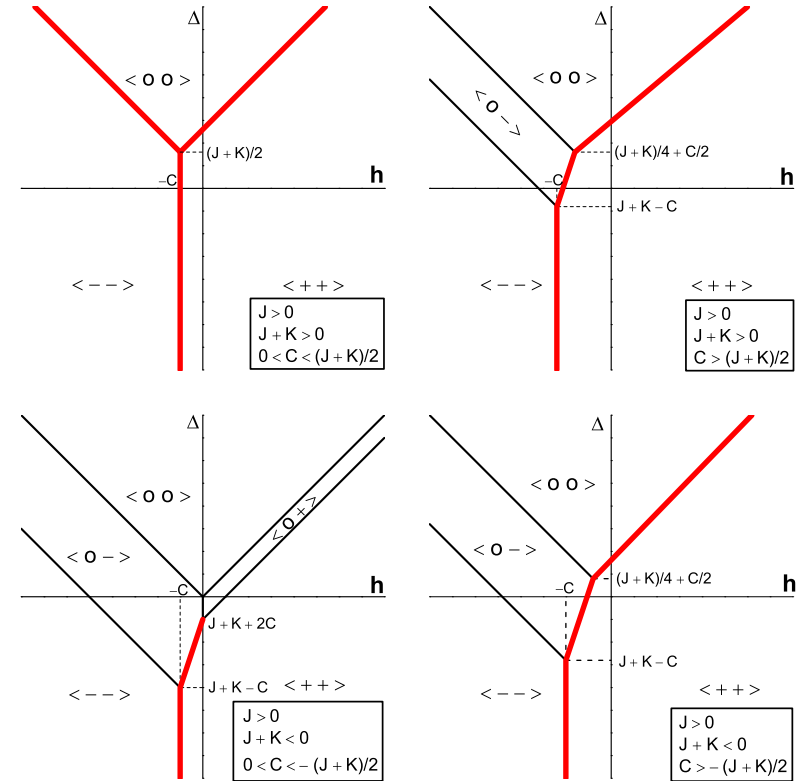


Рис. 1. Діаграми основного стану для моделі Ізинґа зі спіном $S = 1$ у випадку $J > 0$, $C > 0$ для нефрустрованих ґраток. Червоні потовщені лінії відповідають фазовим переходам першого роду.

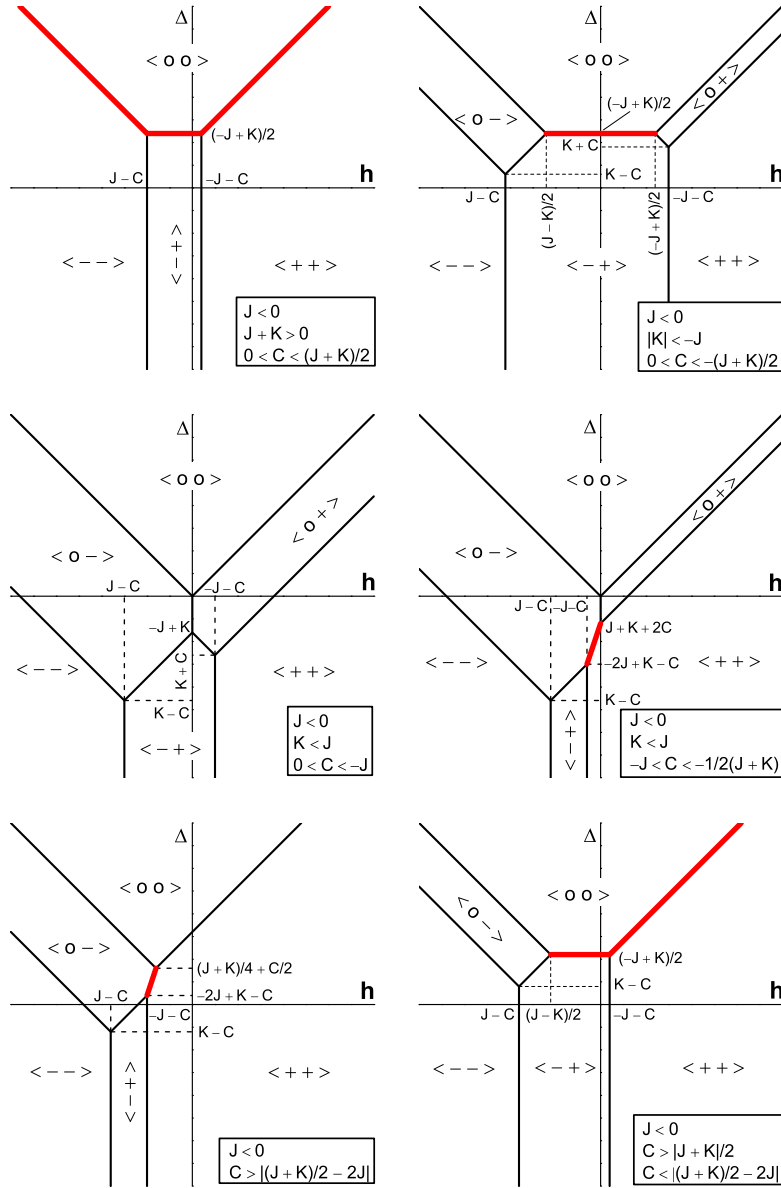


Рис. 2. Діаграми основного стану для моделі Ізинга зі спіном $S = 1$ у випадку $J < 0$, $C > 0$ для нефрустрованих ґраток. Червоні потовчені лінії відповідають фазовим переходам першого роду.

Табл. 2. Тривузлові блоки, їх енергії та умови існування в площині (h, Δ) .

Конфігурація	Енергія	Умова існування
$\langle 0 0 0 \rangle$	0	Завжди
$\langle 0 0 + \rangle$	$-h + \Delta$	$C \leq -(J + K)/2$
$\langle 0 0 - \rangle$	$h + \Delta$	$C \geq (J + K)/2$
$\langle 0 + - \rangle$	$J - K + 2\Delta$	$J \leq 0$, $J \leq -3K$, $ C \leq -(J + K)/2$, $ C \leq -(7J + K)/4$
$\langle 0 + + \rangle$	$-J - K - 2C - 2h + 2\Delta$	$C \leq -(J + K)/2$
$\langle 0 - - \rangle$	$-J - K + 2C + 2h + 2\Delta$	$C \geq (J + K)/2$
$\langle + - - \rangle$	$J - 3K - 2C + h + 3\Delta$	$J \leq 0$
$\langle + + - \rangle$	$J - 3K - 2C + h + 3\Delta$	$J \leq 0$
$\langle + + + \rangle$	$-3J - 3K - 2C - 3h + 3\Delta$	Завжди
$\langle - - - \rangle$	$-3J - 3K + 6C + 3h + 3\Delta$	Завжди

ки на трикутній ґратці кожна вершина є спільною для трьох плакеток, а на ґратці кагоме — для двох, то для трикутної ґратки $J = 3J^*$, а для ґратки кагоме $J = 2J^*$. Те саме стосується коефіцієнтів K і C . Енергії тривузлових блоків (плакеток), а також умови існування відповідних областей в площині (h, Δ) наведено в табл. 2. Усі області, окрім області $\langle 0 + - \rangle$, — необмежені.

На трикутній ґратці дві конфігурації трикутника сумісні, якщо у них однакова хоча б одна сторона (наприклад, $\langle 0 0 + \rangle$ і $\langle 0 + + \rangle$), а для сумісності конфігурацій трикутника на ґратці кагоме досить, щоб вони мали хоча б одну однакову вершину. Тому, наприклад, конфігурації $\langle 0 - - \rangle$ і $\langle 0 + + \rangle$ сумісні на ґратці кагоме, однак несумісні на трикутній ґратці.

Застосуємо описаний метод до моделі БЕГ на квадратній ґратці зі взаємодією перших і других сусідів. У цьому випадку треба розглянути чотиривузлові блоки у вигляді квадратів зі взаємодіями J , K і C вздовж сторін квадрата і J_1 , K_1 , C_1 — вздовж його діагоналей. Враховуючи, що вершина квадрата належить чотирьом квадратам, сторона — двом, а діагональ — одному, запишімо енергію, яка приходить на один квадрат:

$$E = -\frac{J}{2} (s_1 s_2 + s_2 s_3 + s_3 s_4 + s_4 s_1) - \frac{K}{2} (s_1^2 s_2^2 + s_2^2 s_3^2 + s_3^2 s_4^2 + s_4^2 s_1^2)$$

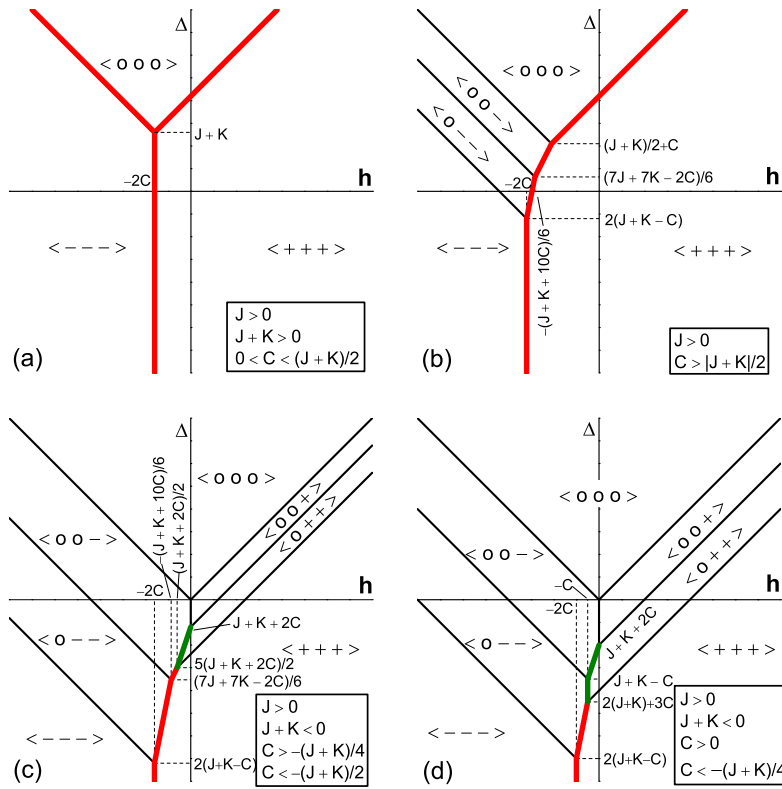


Рис. 3. Діаграми основного стану для моделі Ізинґа зі спіном $S = 1$ у випадку $J > 0$, $C > 0$ для трикутної ґратки та ґратки каґоме. Потовщені лінії відповідають фазовим переходам першого роду: червоні — як для трикутної ґратки, так і для ґратки каґоме, зелені — лише для трикутної ґратки.

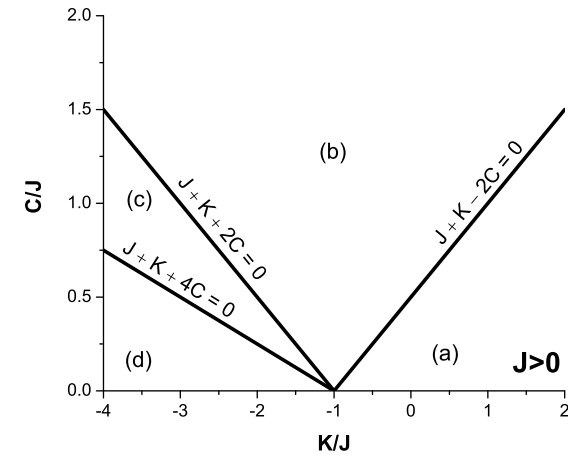


Рис. 4. Области в площині $(K/J, C/J)$, які відповідають фазовим діяграмам рис. 3.

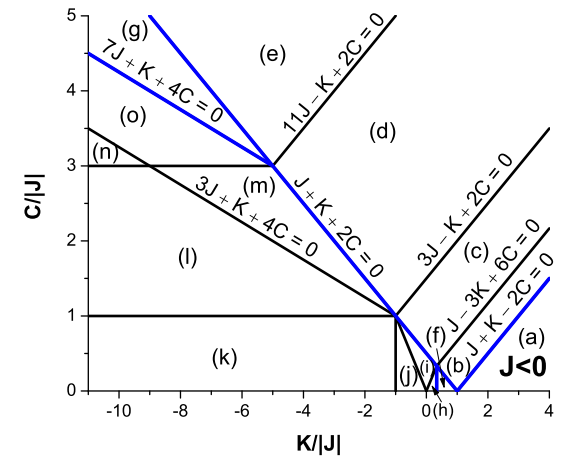


Рис. 5. Области в площині $(K/|J|, C/|J|)$, які відповідають топологічно різним діяграмам основного стану моделі БЕІ на трикутній ґратці та ґратці каґоме у випадку $J < 0$.

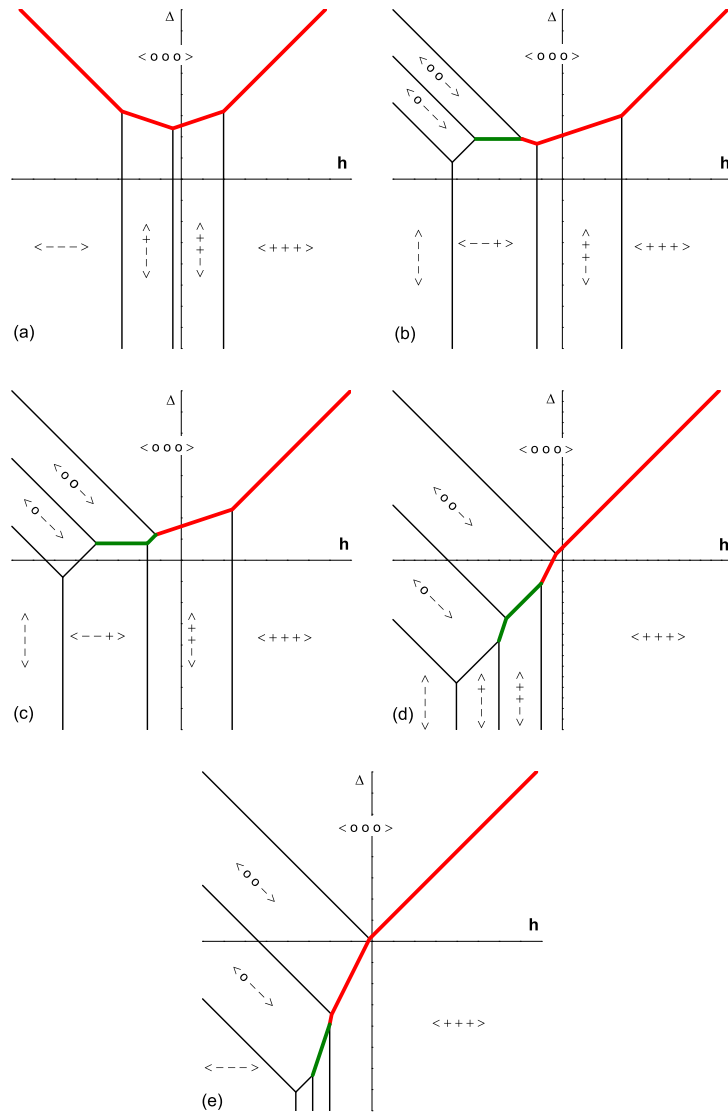


Рис. 6. Діаграми основного стану для моделі Ізинґа зі спіном $S = 1$ у випадку $J < 0, C > 0$ для трикутної ґратки та ґратки каґоме. Потовщені лінії відповідають фазовим переходам першого роду: червоні — як для трикутної ґратки, так і для ґратки каґоме, зелені — лише для трикутної ґратки.

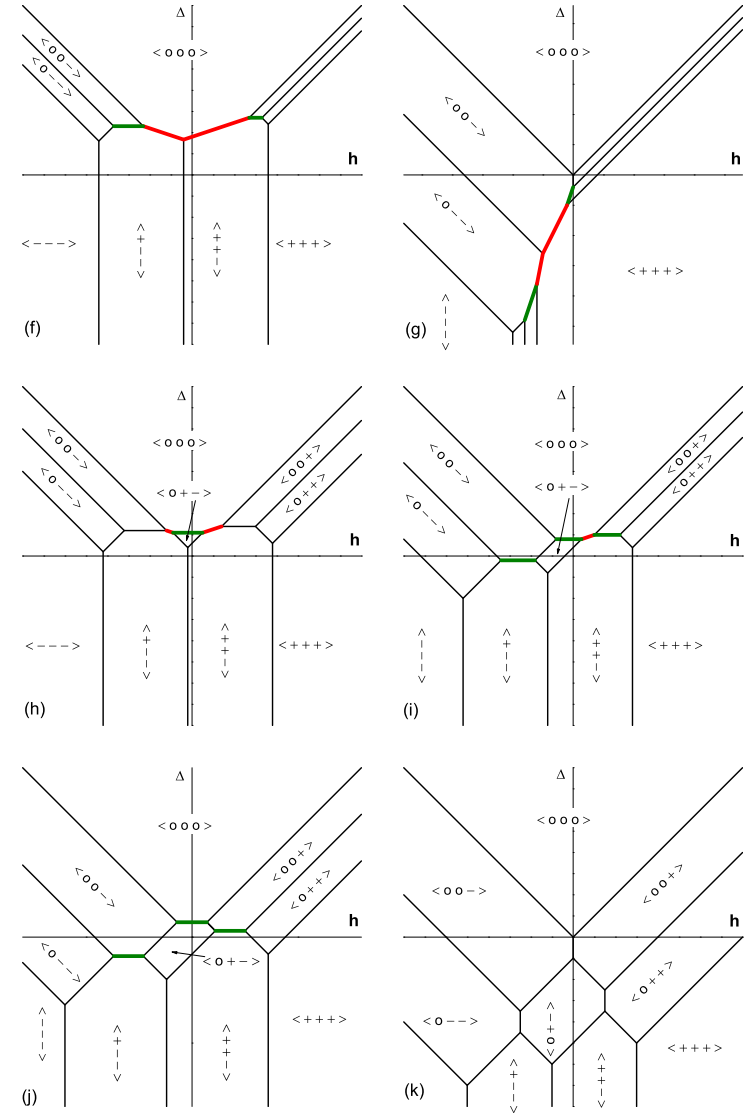


Рис. 7. Діаграми основного стану для моделі Ізинґа зі спіном $S = 1$ у випадку $J < 0, C > 0$ для трикутної ґратки та ґратки каґоме. Потовщені лінії відповідають фазовим переходам першого роду: червоні — як для трикутної ґратки, так і для ґратки каґоме, зелені — лише для трикутної ґратки.

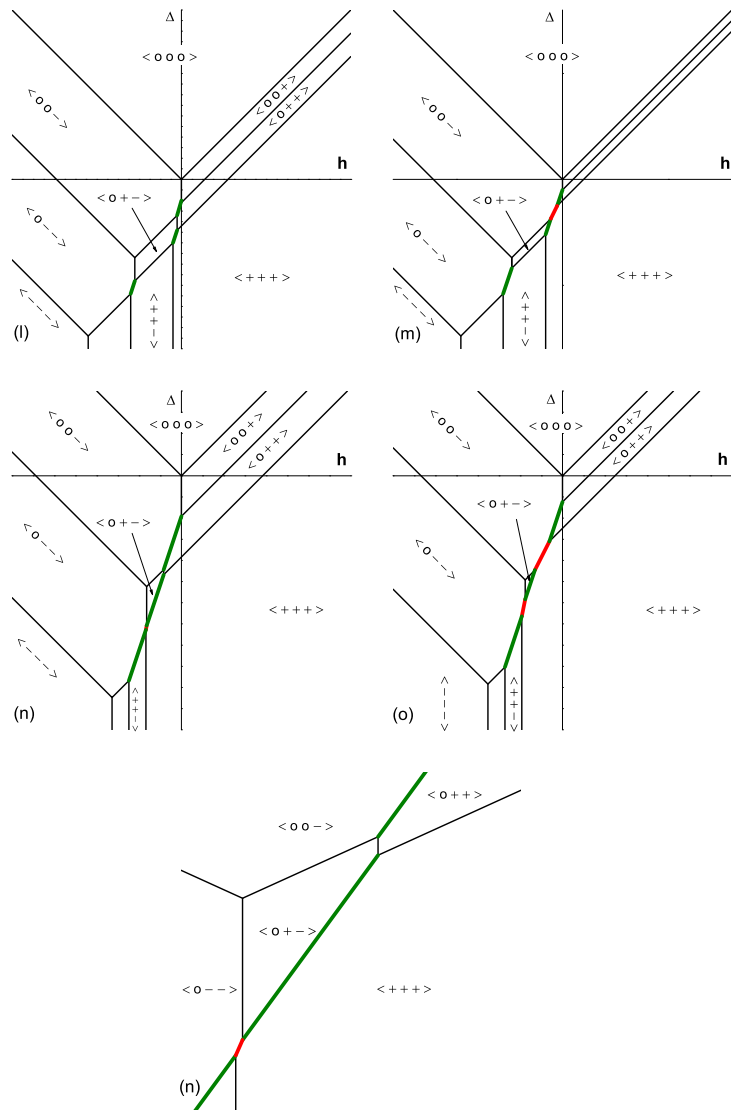


Рис. 8. Діаграми основного стану для моделі Ізинґа зі спіном $S = 1$ у випадку $J < 0, C > 0$ для трикутної ґратки та ґратки каґоме. Потовщені лінії відповідають фазовим переходам першого роду: червоні — як для трикутної ґратки, так і для ґратки каґоме, зелені — лише для трикутної ґратки.

Табл. 3. Конфігурації, що відповідають необмеженим областям, та умови їх існування в площині (h, Δ) .

	Конфігурація	Умови існування
1	$\langle 0\ 0\ 0\ 0 \rangle$	Завжди
2	$\langle 0\ 0\ 0\ + \rangle$	$a \leq 0, a_1 \leq 0$
3	$\langle 0\ 0\ 0\ - \rangle$	$b \leq 0, b_1 \leq 0$
4	$\langle 0\ 0\ ++ \rangle$	$ a \leq -2a_1$
5	$\langle 0\ +\ 0\ + \rangle$	$a \leq 0, a \leq 2a_1$
8	$\langle 0\ 0\ -- \rangle$	$ b \leq -2b_1$
9	$\langle 0\ -\ 0\ - \rangle$	$b \leq 0, b \leq 2b_1$
10	$\langle 0\ ++\ ++ \rangle$	$a \leq 0, a_1 \leq 0$
15	$\langle 0\ --\ -- \rangle$	$b \leq 0, b_1 \leq 0$
16	$\langle ++\ ++ \rangle$	Завжди
17	$\langle ++\ +- \rangle$	$J \leq 0, J_1 \leq 0$
18	$\langle +-\ +- \rangle$	$ J \leq -2J_1$
19	$\langle +- \ - \ - \rangle$	$J \leq 0, J \leq 2J_1$
20	$\langle + \ - \ - \ - \rangle$	$J \leq 0, J_1 \leq 0$
21	$\langle --\ -- \rangle$	Завжди

$$-\frac{C}{2} (s_1^2 s_2 + s_1 s_2^2 + s_2^2 s_3 + s_2 s_3^2 + s_3^2 s_4 + s_3 s_4^2 + s_4^2 s_1 + s_4 s_1^2) - \frac{h}{4} (s_1 + s_2 + s_3 + s_4) + \frac{\Delta}{4} (s_1^2 + s_2^2 + s_3^2 + s_4^2) \quad (3)$$

де s_i — значення спіну на i -му вузлі. Усього маємо 21 конфігурацію чотиривузлового блока. Усім конфігураціям відповідають восьмивимірні області у просторі параметрів Гамільтона. У площині (h, Δ) може існувати від трьох до п'ятнадцяти областей: фази, які відповідають конфігураціям, що різняться лише порядком спінів (наприклад, $\langle ++\ -- \rangle$ і $\langle +- \ +- \rangle$), не можуть існувати одночасно. Зміна знаку обох коефіцієнтів C і C_1 еквівалентна відображенню діаграм відносно осі $O\Delta$ з одночасною заміною знаків у позначеннях фаз, отже досить розглянути лише випадок $C \geq 0$ (або $C_1 \geq 0$).

Деякі з областей обмежені, інші — ні. Умови існування конфігурацій квадрата, які відповідають необмеженим областям, наведено в табл. 3, де запроваджено позначення: $a = (J + K)/2 + C$, $a_1 = (J_1 + K_1)/2 + C_1$, $b = (J + K)/2 - C$, $b_1 = (J_1 + K_1)/2 - C_1$.

Умови існування конфігурацій квадрата, які відповідають обмеженим областям, громіздкіші, тому не будемо їх наводити. З таблиці видно, що за умов $a > 0, a_1 > -a/2, b > 0, b_1 > -b/2, J > 0$,

$J_1 > -J/2$ з необмежених областей існують лише однорідні.

Таким чином, розглянутий метод дає змогу будувати діаграми основних станів для досить широкого класу Ізинґових моделей: дво- і тривимірних, зі взаємодією найближчих сусідів, а також — у деяких випадках — зі взаємодією перших і других сусідів. Крім того, такий метод дає змогу знайти лінії фазових переходів першого роду за нульової температури.

Література

1. M. Blume, V. J. Emery, and R. B. Griffiths, *Phys. Rev. A* **4**, 1071 (1971).
2. J. Sivardière and J. Lajzerowicz, *Phys. Rev. A* **11**, 2079 (1975).
3. K. E. Newman and J. D. Dow, *Phys. Rev. B* **27**, 7495 (1983).
4. M. Schick and W.-H. Shih, *Phys. Rev. B* **34**, 1797 (1986).
5. P. J. Kundrotas, S. Lapinskas, and A. Rosengren, *Phys. Rev. B* **56**, 6486 (1997).
6. І. В. Стасюк, К. Д. Товстюк, О. Б. Гера, О. В. Величко, Фазові переходи в моделі дипольного ґраткового газу. Препринт ІФКС НАН України, Львів, 2002, ІСМР-02-09U.
7. M. Kaburagi, M. Kang, T. Tonegawa, and K. Okunishi, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, S765 (2004).
8. Yu. I. Dublenych, *Phys. Rev. B* **71**, 012411 (2005).
9. D. Mukamel and M. Blume, *Phys. Rev. A* **10**, 610 (1974).
10. W. Hoston and A. N. Berker, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1027 (1991).

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; “Referatyvnyy 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, *Liniz*; 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. Sokołowski, *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>