

Новый тип точных решений для обобщенной модели Эшкина–Теллера и анизотропной модели Изинга со спином 3/2

В. М. Розенбаум¹⁾

Институт химии поверхности НАН Украины, 03164 Киев, Украина

Поступила в редакцию 20 мая 2003 г.

Введена обобщенная модель Эшкина–Теллера, содержащая как биквадратичные, так и билинейные взаимодействия изинговских подсистем (σ и s) и эквивалентная анизотропной модели Изинга со спином 3/2. При определенной величине противоположных по знаку билинейных взаимодействий вдоль горизонтальных и вертикальных связей квадратной решетки получено точное аналитическое решение, описывающее фазовый переход между неупорядоченным ($\langle \sigma \rangle = \langle s \rangle = \langle \sigma s \rangle = 0$) и коррелированным упорядоченным ($\langle \sigma s \rangle \neq 0$ при $\langle \sigma \rangle = \langle s \rangle = 0$) состояниями.

PACS: 64.60.Cn, 68.35.Rh

Точно решаемые двумерные решеточные модели в статистической физике играют важную роль в теории фазовых переходов [1]. Они развиваются благодаря собственной внутренней логике, подсказывающей те изменения гамильтониана, которые позволяют получать новые точные решения, а также благодаря задачам, возникающим при описании фазовых переходов в различных реальных системах, таких как двумерные антиферромагнетики [2], искусственные двумерные решетки ферромагнитных наночастиц [3], адсорбированные молекулярные монослои [4, 5] и т.д. Среди моделей, допускающих четыре состояния частицы в узле решетки, активно используются модель Эшкина–Теллера и модель со спином 3/2. Эти модели, по существу, эквивалентны (с точностью до числа учитываемых типов взаимодействий между спинами 3/2 и ограничений, накладываемых на значения констант таких взаимодействий), что позволяет распространять результаты, полученные в рамках одной модели, на другую [6, 7].

Описание ориентационных фазовых переходов в системах с существенно анизотропными мультипольными кулоновскими взаимодействиями потребовало более детального изучения анизотропных моделей. Так, в качестве модели фазового перехода на квадратной решетке диполей с четырьмя возможными ориентациями вдоль диагоналей квадратов использовалась дипольная близкодействующая модель, сводящаяся к точно решаемой анизотропной модели Изинга [8]. В случае четырех ориентаций длинных осей молекул вдоль осей квадратной решетки возникает более сложная ситуация, связанная с флуктуационными взаимодействиями между двумя изинговски-

ми подсистемами спинов 1/2 и возникновением нового типа ориентационного упорядочения (выделенное направление длинных осей молекул при отсутствии спонтанной поляризации) [9]. Оказывается, что этот новый тип упорядочения допускает точное аналитическое описание не только на соответствующей решетке Бете [9], но и на квадратной решетке. Цель данного сообщения – показать, что (а) наиболее общая формулировка анизотропной модели со спином 3/2 эквивалентна обобщенной модели Эшкина–Теллера, в которой присутствуют не только биквадратичные, но и билинейные взаимодействия изинговских подсистем; (б) при определенной величине противоположных по знаку билинейных взаимодействий вдоль горизонтальных и вертикальных связей – так называемых флуктуационных взаимодействий – обобщенная модель Эшкина–Теллера имеет точное аналитическое решение.

Наиболее общая формулировка анизотропной модели Изинга с попарным взаимодействием спинов $S_i = \pm 1/2, \pm 3/2$ между соседними узлами i и j произвольной решетки характеризуется гамильтонианом вида [6, 7]

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} [J_{ij} S_i S_j + K_{ij} S_i^2 S_j^2 + L_{ij} S_i^3 S_j^3 + \frac{M_{ij}}{2} (S_i S_j^3 + S_i^3 S_j)] - \sum_i \Delta_i S_i^2. \quad (1)$$

Простейшая связь между спинами S_i и парой спинов $\sigma_i, s_i = \pm 1$ обеспечивается соотношением

$$S_i = \sigma_i + \frac{1}{2} s_i. \quad (2)$$

¹⁾e-mail: vrozen@mail.kar.net

Подстановка (2) в (1) приводит к гамильтониану в σ , s переменных:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} [J_{1,ij} \sigma_i \sigma_j + J'_{1,ij} s_i s_j + J_{2,ij} (\sigma_i s_j + s_i \sigma_j) + J_{4,ij} \sigma_i s_i \sigma_j s_j] - \sum_i \left[\left(\frac{5}{4} \sum_j J_{4,ij} + \Delta_i \right) \sigma_i s_i + \frac{5}{4} \left(\frac{5}{8} \sum_j J_{4,ij} + \Delta_i \right) \right], \quad (3)$$

в котором введены новые константы взаимодействий:

$$\begin{pmatrix} J_{1,ij} \\ J'_{1,ij} \\ J_{2,ij} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 49/16 & 7/4 \\ 1/4 & 169/64 & 13/16 \\ 1/2 & 91/32 & 5/4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_{ij} \\ L_{ij} \\ M_{ij} \end{pmatrix}, \quad J_{4,ij} = K_{ij}. \quad (4)$$

Модель, описываемую гамильтонианом (3), можно рассматривать как обобщенную модель Эшкина–Теллера. Она отличается от обычной модели Эшкина–Теллера [10, 11] (см. также [1]) тем, что константы взаимодействий вдоль различно ориентированных связей (i, j) имеют различные значения, а также тем, что в рассмотрение включены билинейные взаимодействия изинговских σ - и s -подсистем, пропорциональных константе $J_{2,ij}$. При этом одноузельные взаимодействия $\sigma_i s_i$ могут быть скомпенсированы соответствующим выбором констант Δ_{ij} . В работе [6] записывались условия сводимости модели Изинга со спином 3/2 к обычной модели Эшкина–Теллера, которые в нашей более общей форме записи эквивалентны дополнительному условию $J_{2,ij} = 0$ (аналогичный вывод о сводимости к восьмивершинной модели содержится также в [7], только с менее общим условием, чем $J_{2,ij} = 0$).

Перейдем теперь к рассмотрению квадратной решетки. Будем считать, что константы J_1, J'_1, J_4 одинаковы вдоль всех соседних связей, причем $J_1 = J'_1$ и $\Delta = -5J_4$ для компенсации одноузельных билинейных взаимодействий. Пусть анизотропия системы выражается только в том, что значения констант взаимодействий $J_{2,ij}$ вдоль горизонтальных $(i, j = x)$ и вертикальных $(i, j = y)$ связей противоположны по знаку: $J_2 = J_{2,x} = -J_{2,y}$. Соответствующий гамильтониан примет вид

$$H = \sum_{mn} [-J_1 (\sigma_{mn} \sigma_{m+1,n} + s_{mn} s_{m+1,n} + \sigma_{mn} \sigma_{m,n+1} + s_{mn} s_{m,n+1}) - J_2 (\sigma_{mn} s_{m+1,n} + s_{mn} \sigma_{m,n+1}) -$$

$$+ s_{mn} \sigma_{m+1,n} - \sigma_{mn} \sigma_{m,n+1} - s_{mn} s_{m,n+1}) - J_4 (\sigma_{mn} s_{mn} s_{m+1,n} \sigma_{m+1,n} + \sigma_{mn} s_{mn} \sigma_{m,n+1} s_{m,n+1})]. \quad (5)$$

Гамильтониан такого вида был введен в [12] и при $J_2 \approx 0.6J_1, J_4 \approx -0.2J_1, J_1 \approx 0.8$ мэВ хорошо описывал ориентационный фазовый переход в монослое 2×1 молекул CO, адсорбированных на поверхности NaCl(100).

При $0 \leq J_2 \leq J_1$ энергии основных состояний этого гамильтониана и соответствующие им распределения спинов в узлах квадратной решетки задаются соотношениями

$$H_0 = \begin{cases} N(-4J_1 - 2J_4), & \sigma_{mn} = s_{mn} = 1, & J_4 > -J_1; \\ 2NJ_4, & \sigma_{mn} s_{mn} = (-1)^{m+n}, & J_4 < -J_1. \end{cases} \quad (6)$$

Эти состояния вырождены по константе взаимодействий J_2 . Вырождение имеет место и при произвольных соотношениях между параметрами J_1 и J_2 . Например, при $0 \leq J_1 \leq J_2$ константы J_1 и J_2 меняются местами и вырождение происходит уже по константе взаимодействий J_1 . В случае произвольных знаков констант J_1 и J_2 важно, какое из абсолютных значений $|J_1|$ и $|J_2|$ больше: большее из этих значений конкурирует с $-J_4$ ($J_4 < 0$) при определении структуры основного состояния, а меньшее соответствует константе, по которой происходит вырождение. Ясно, что путем переобозначения спиновых переменных каждая из получаемых фазовых областей может описываться гамильтонианом (5) с заменой $J_1 \leftrightarrow J_2$ и/или заменой знаков J_1 и J_2 . Поэтому статистические свойства всех фазовых областей одинаковы, и без потери общности можно ограничиться рассмотрением области $0 \leq J_2 \leq J_1$.

В работе [9] рассматривался частный случай гамильтониана (5) с $J_4 = 0$, который соответствует квазидипольной модели с четырьмя возможными ориентациями молекул вдоль осей квадратной решетки. Для билинейных взаимодействий изинговских σ - и s -подсистем, пропорциональных константе J_2 и не дающих вклада в основное состояние системы, в [9] был введен термин “флуктуационные взаимодействия”. Соответственно, назовем модель, характеризуемую гамильтонианом (5), обобщенной моделью Эшкина–Теллера с флуктуационными взаимодействиями. Фазовая диаграмма этой новой модели обещает быть чрезвычайно богатой, поскольку каждый из частных случаев $J_2 = 0$ [1] и $J_4 = 0$ [9] в отдельности характеризуется наличием как минимум трех фаз: $\langle \sigma \rangle = \langle s \rangle = \langle \sigma s \rangle = 0$ (фаза I), $\langle \sigma \rangle = \langle s \rangle \neq 0$ при $\langle \sigma s \rangle \neq 0$ (фаза II) и $\langle \sigma s \rangle \neq 0$ при $\langle \sigma \rangle = \langle s \rangle = 0$ (фаза III). Построение полной

фазовой диаграммы (при J_2 и $J_4 \neq 0$) представляет собой весьма интересную, но пока не решенную задачу, требующую привлечения определенных приближенных или численных методов (например, в [9] для случая $J_4 = 0$ рассматривалась решетка Бете с координационным числом 4 и использовалось монтекарловское моделирование на квадратной решетке). На сегодняшний день известны только точные решения, описывающие переход между фазами I и II в тривиальном случае $J_2 = J_4 = 0$ (двумерная модель Изинга) и при $-J_1 \leq J_4 \leq J_1$, $J_2 = 0$ [1]. Поэтому особый интерес представляет приведенное ниже новое точное решение, описывающее переход между фазами I и III в другом частном случае $J_1 = J_2$.

Введем новые спиновые переменные τ_{mn} , соответствующие основным состояниям, указанным в (6):

$$\tau_{mn} = \begin{cases} \sigma_{mn} s_{mn}, & J_4 > -J_1; \\ (-1)^{m+n} \sigma_{mn} s_{mn}, & J_4 < -J_1. \end{cases} \quad (7)$$

На рис. 1а показано заимствованное из дипольной модели соответствие между четырьмя парами возмож-

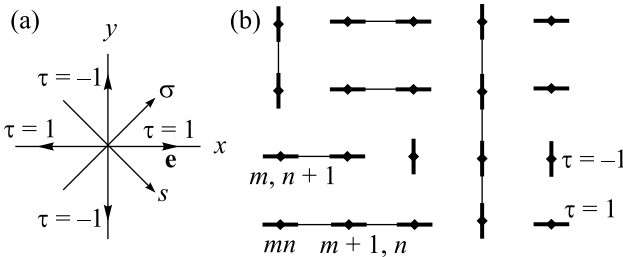


Рис. 1. (а) Схема соответствия между четырьмя парами значений спиновых переменных $\sigma_{mn} = \pm 1$ и $s_{mn} = \pm 1$ (или $\tau_{mn} = \sigma_{mn} s_{mn}$) и четырьмя ориентациями векторов \mathbf{e}_{nm} . (б) Пример распределения значений спиновых переменных по узлам квадратной решетки. Для случая $J_1 = J_2$ сплошные линии соединяют взаимодействующие σ -спины; энергии взаимодействий равны $\pm 4J_1$ (знак определяется значениями σ -переменных). После суммирования по состояниям σ -спинов энергия эффективного взаимодействия пары соседних τ_1 - и τ_2 -спинов становится равной $-\tilde{J}\tau_1\tau_2$, где \tilde{J} зависит от температуры и определяется соотношениями (10)–(12)

ных значений спиновых переменных и четырьмя ориентациями вектора \mathbf{e}_{mn} , которое удобно использовать для графической интерпретации решения. Используя переменные τ_{mn} и σ_{mn} , перепишем гамильтониан (5) в следующем виде:

$$H = - \sum_{mn} \{ [J_1 (1 \pm \tau_{mn} \tau_{m+1,n}) + J_2 (\tau_{mn} \pm \tau_{m+1,n})] \sigma_{mn} \sigma_{m+1,n} +$$

$$+ [J_1 (1 \pm \tau_{mn} \tau_{m,n+1}) - J_2 (\tau_{mn} \pm \tau_{m,n+1})] \sigma_{mn} \sigma_{m,n+1} + J_4 (\tau_{mn} \tau_{m+1,n} + \tau_{mn} \tau_{m,n+1}) \}. \quad (8)$$

Здесь и ниже верхние знаки соответствуют условию $J_4 > -J_1$, а нижние – условию $J_4 < -J_1$ ($J_1 > 0$). При $J_1 = J_2$ выражения в квадратных скобках могут принимать только 2 значения: $4J_1$ и 0. Первое значение соответствует горизонтальной связи с $\tau_{mn} = \tau_{m+1,n} = 1$ или вертикальной связи с $\tau_{mn} = \tau_{m,n+1} = -1$. Нулевое значение реализуется во всех остальных случаях. Это означает, что в диаграммном разложении статистической суммы по σ -спинам, использующем тождество $\exp(a\sigma) = \cosh a + \sigma \sinh a$, $\sigma = \pm 1$ [13], будут присутствовать только горизонтальные и вертикальные цепочки, не содержащие ни одного общего узла (см. рис. 1б). Подсистема σ -спинов становится квазиодномерной, и в ней исчезает дальний порядок, $\langle \sigma \rangle = 0$. Поэтому суммирование по 2^N состояниям σ -спинов обратит в нуль все слагаемые, содержащие в качестве множителя хотя бы один гиперболический синус, и статистическая сумма примет вид

$$Z = \sum_{\{\tau\}, \{\sigma\}} \exp(-H/T) = 2^N \sum_{\{\tau\}} \prod_{mn} \{ [\cosh K_1 (1 + \tau_{mn}) (1 \pm \tau_{m+1,n})] \times [\cosh K_1 (1 - \tau_{mn}) (1 \pm \tau_{m,n+1})] \times \exp[K_4 (\tau_{mn} \tau_{m+1,n} + \tau_{mn} \tau_{m,n+1})] \} \quad (9)$$

($K_j = J_j/T$, $j = 1, 2, 4$). Поскольку аргументы гиперболических косинусов принимают только два значения, $4K_1$ и 0, то использование тождества

$$\cosh(1 + \tau_1)(1 + \tau_2)K_1 = \exp[(1 + \tau_1)(1 + \tau_2)\tilde{K}_1], \quad \tilde{K}_1 = \frac{1}{4} \ln(\cosh 4K_1) \quad (10)$$

сводит рассматриваемую статистическую сумму к следующей:

$$Z = 2^N (\cosh 4K_1)^{N/2} Z_{\text{Ising}}(\tilde{K}), \quad \tilde{K} = \begin{cases} \tilde{K}_1 + K_4, & K_1 + K_4 > 0, \\ -\tilde{K}_1 + |K_4|, & K_1 + K_4 < 0. \end{cases} \quad (11)$$

Здесь $Z_{\text{Ising}}(\tilde{K})$ обозначает статистическую сумму двумерной модели Изинга с эффективным гамильтонианом

$$H_{\text{eff}} = -\tilde{J} \sum_{mn} [\tau_{mn} \tau_{m+1,n} + \tau_{mn} \tau_{m,n+1}], \quad \tilde{J} = T\tilde{K}, \quad (12)$$

в котором константа взаимодействия \tilde{J} зависит от температуры и описывает термодинамически усредненное взаимодействие двух соседних σ -спинов. Температура фазового перехода из неупорядоченного ($\langle \tau \rangle = 0$) в коррелированное упорядоченное ($\langle \tau \rangle \neq 0$) состояние находится из уравнения $\sinh 2\tilde{K} = 1$ для критической температуры двумерной модели Изинга:

$$\cosh 4K_1 = \begin{cases} (3 + 2\sqrt{2}) \exp(-4K_4), & K_1 + K_4 > 0, \\ (3 + 2\sqrt{2})^{-1} \exp(-4K_4), & K_1 + K_4 < 0. \end{cases} \quad (13)$$

На рис.2 представлена фазовая диаграмма обобщенной модели Эшкина–Теллера с флуктуационными взаимодействиями в частном случае $J_1 = J_2$. Линии

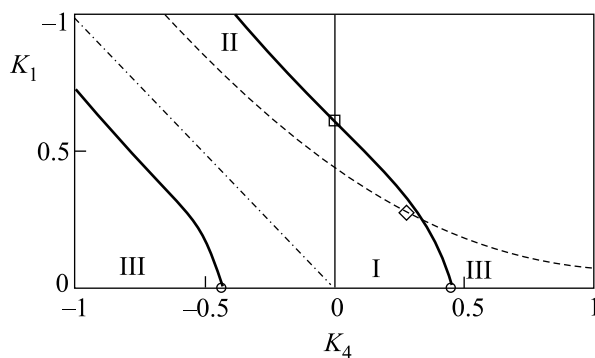


Рис.2. Фазовая диаграмма обобщенной модели Эшкина–Теллера для частных случаев $J_1 = J_2$ (сплошные линии, разделяющие фазы I и III) и $J_2 = 0$ (пунктирные линии, разделяющие фазы I, II, III, в области $K_4 > -K_1$). Маркерами помечены особые точки, обсуждаемые в тексте

существования фаз I и III определяются уравнениями (13). Точки с $K_1 = K_2 = 0$ и $K_4 = \pm 0.4407$ (круговые маркеры на рис.2) соответствуют критическим значениям двумерной модели Изинга, рассматриваемой относительно спиновой переменной τ . Точка с $K_4 = 0$ и $K_1 = K_2 = 0.6121$ (квадратный маркер на рис.2) определяет точное значение $T_c = 1.6337 J_1$ температуры фазового перехода квазидипольной модели с четырьмя возможными ориентациями молекул вдоль осей квадратной решетки. Полученное в [9] значение $T_c = 1.94 J_1$ для соответствующей решетки Бете можно рассматривать как результат кластерного приближения для квадратной решетки.

Интересно сопоставить полученную фазовую диаграмму с известной диаграммой модели Эшкина–Теллера с $J_2 = 0$. Линии раздела фаз I и III содержат одни и те же точки $K_1 = 0$, $K_4 = \pm 0.4407$. В то время как в левой области диаграммы линии I–III имеют одинаковую асимптотику $K_1 = -K_4$, линия

I–III с $K_2 = 0$ в правой области диаграммы доходит до бифуркационной точки $K_1 = K_4 = 0.2747$ (ромбический маркер на рис.2), соответствующей точке сосуществования трех фаз (см. пунктирные линии на рис.2). Легко понять, что по мере роста параметра J_2 область, занимаемая фазой II, вытесняется фазой III, причем бифуркационная точка смещается вверх и влево, стремясь к линии $K_1 = -K_4$, при $J_2 \rightarrow J_1$.

В заключение отметим, что в данной статье получено точное аналитическое решение обобщенной модели Эшкина–Теллера, когда константа J_2 флуктуационных билинейных взаимодействий изинговских подсистем равна константе J_1 билинейных взаимодействий соседних спинов в обеих подсистемах. Построена фазовая диаграмма, соответствующая этому решению, которая показывает, что фаза III ($\langle \sigma s \rangle \neq 0$ при $\langle \sigma \rangle = \langle s \rangle = 0$) может возникать вследствие не только биквадратичных, но и билинейных взаимодействий между изинговскими подсистемами (этот последний тип взаимодействий характерен и для анизотропной модели со спином $3/2$, и для дипольной модели). Полученное точное решение дает ключ к пониманию механизма возникновения фазы III. При $J_2 = J_1$ одна из спиновых подсистем становится квазиодномерной, что позволяет выполнить суммирование статистической суммы по состояниям этой спиновой подсистемы в явном виде. Тогда суммирование по состояниям второй спиновой подсистемы формально выражается через статистическую сумму двумерной модели Изинга с необычным параметром взаимодействия: он является результатом термодинамического усреднения по спинам первой подсистемы.

1. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, М.: Мир, 1985 [R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, London, 1982].
2. C. L. Henley, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2056 (1989).
3. С. А. Гусев, Ю. Н. Ноздрин, М. В. Сапожников, А. А. Фраерман, *Усп. физ. наук* **170**, 331 (2000).
4. В. М. Розенбаум, В. М. Огенько, А. А. Чуйко, *Усп. физ. наук* **161**, № 10, 79 (1991).
5. V. M. Rozenbaum and S. H. Lin, *Spectroscopy and Dynamics of Orientationally Structured Adsorbates*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, Singapore, 2002.
6. Т. Horiguchi and Y. Honda, *Prog. Theor. Phys.* **93**, 981 (1995).
7. Н. Ш. Измаилян, *Письма в ЖЭТФ* **63**, 270 (1996) [*JETP Lett.* **63**, 290 (1996)].

8. В. М. Розенбаум, В. М. Огенько, Письма в ЖЭТФ **35**, 151 (1982) [JETP Lett. **35**, 184 (1982)].
9. В. М. Розенбаум, А. Н. Морозов, Письма в ЖЭТФ **75**, 756 (2002) [JETP Lett. **75**, 631 (2002)].
10. J. Ashkin and E. Teller, Phys. Rev. **64**, 178 (1943).
11. R. V. Ditzian, J. R. Vanavar, G. S. Grest, and L. P. Kadanoff, Phys. Rev. **B22**, 2542 (1980).
12. V. M. Rozenbaum and S. H. Lin, J. Chem. Phys. **112**, 9083 (2000).
13. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, часть 1, М.: Наука, 1976, § 151.