

ТОЧНІ АНАЛІТИЧНІ ОБЧИСЛЕННЯ ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ДВОХ ЗВ'ЯЗАНИХ ЛАНЦЮГІВ ІЗИНГА

Виконано аналітичне підсумовування за набором спінових змінних статистичної суми двох зв'язаних ланцюгів Ізинга. При цьому врахована міжатомна (міжвузольна) взаємодія тільки для найближчих сусідів. Обраховано теплоємність системи для ланцюгів з вільними кінцями.

Модель Ізинга є найпростішою моделлю магнетизму, її сформулював Ленд у 1920 р., моделюючи магнетик системою магнітних диполів (спінів), розташованих у вузлах кристалічної ґратки; кожен спін може перебувати у двох станах: $s_i(k) = \pm 1$, де k — номер вузла. В одновимірному випадку, коли магнітні диполі утворюють ланцюжок і взаємодіють з найближчими сусідами, модель була точно розв'язана Е. Ізингом у 1925 р. У двовимірному випадку і за відсутності зовнішнього магнітного поля задача теж має точний розв'язок, який знайшов Л. Онсагер у 1944 р.

Добре відомо, що тривимірна задача Ізинга та двовимірна задача у зовнішньому магнітному полі не розв'язані дотепер, незважаючи на інтенсивні зусилля декількох поколінь фізиків і математиків. Спроби знайти точний розв'язок проблеми Ізинга становлять великий інтерес. Причина полягає в тому, що модель Ізинга зв'язана з багатьма іншими моделями статистичної механіки і квантової теорії поля.

Хоча статистика двовимірної (2D) моделі Ізинга в нульовому магнітному полі вважається відомою, однак багато питань залишається без відповіді, зокрема у випадку системи скінченних розмірів. Точний розв'язок 2D моделі добре відомий для періодичних граничних умов, але розв'язку для системи довільних розмірів і форми з вільними граничними умовами дотепер не отримано. У складніших випадках (ненульове однорідне поле, випадкова домішка, вішадкове поле і т. д.) точних розв'язків у замкнутій формі не отримано.

Статистика ланцюжка Ізинга (1D модель) доступна для точного обчислення. Під статистикою маємо на увазі імовірність будь-якого конкретного розміщення спінів чи, що те ж саме, значення кореляційної функції для ланцюжка з будь-яким набором спінів. Знання статистики ланцюжка Ізинга корисне у ряді випадків. Зокрема, можливе застосування принаймні до одного типу фізичних систем, а саме, до рідкоземельних кристалів хлориду, і результати, що впливають з проблеми ланцюжка Ізинга, можуть також успішно застосовуватися до інших осьових систем. Корисно мати нетривіальну

розв'язну систему, для якої можуть бути перевірені ті наближення, які конче необхідно зробити для реальних систем.

Модель Ізинга є чи не єдиною моделлю системи взаємодіючих частинок, для якої проведений строгий математичний розрахунок критичних індексів. Хоча спочатку ця модель була сформульована для ферромагнетиків, вона придатна для опису фазового переходу у будь-якій системі з набором змінних, що набувають двох значень у вузлах ґратки. Через свою простоту модель Ізинга є корисною тестовою підставою для численних досліджень у статистичній механіці.

Як зазначалось, функція розподілу для нескінченного ланцюга спінів була розрахована Ізингом. Крамере і Ваньє повторно сформулювали проблему в термінах 2×2 матриць. Обидва ці результати обмежуються випадком взаємодії найближчих сусідів. Коли взаємодія поширюється на довільну обмежену область, функцію розподілу обчислити складніше.

У даній праці досліджуються узагальнені 1D моделі. На її основі розроблено статистико-термодинамічну теорію бінарного сплаву в одновимірній квазіперіодичній ґратці. Інтерес до ланцюжків Ізинга обумовлений тим, що ряд тривимірних задач для узагальненої моделі Ізинга може бути зведений до одновимірної. Приклад такого підходу міститься у роботі [1], де досліджується модельний кристал, складений із щільно упакованих атомних прошарків. Статистика такої системи цілком визначається розміщенням прошарків уздовж перпендикулярного до них напрямку. У цьому випадку тривимірний кристал можна описувати в рамках одновимірної моделі ґратчатого газу, яка еквівалентна моделі Ізинга. При дослідженні намагніченості спінової сітки у моделі Ізинга [3] на першому етапі також розв'язують одновимірну задачу для спінового ланцюжка скінченної довжини. Особливий інтерес викликають моделі, що мають точний розв'язок, оскільки вони дають можливість провести детальне дослідження термодинаміки системи. На сьогодні точних розв'язків для модельних систем отримано вкрай мало [2].

Особлива роль точно розв'язуваних моделей статистичної механіки полягає в розумінні фазових перетворень. Однак ні одновимірні, ні двовимірні моделі типу Ізинга не приводять до фазового переходу при температурі $T_0 \neq 0$. Проте існує клас статистичних механічних моделей з нетривіальною фазовою структурою, які можуть бути проаналізовані точно. Ці моделі найприродніше формулюються як вершинні моделі на квадратних ґратках з $2N$ вузлами і з періодичними граничними умовами. Вони розв'язуються за методом трансфер матриці, і фазові переходи в них виникають з огляду на перетинання власних значень, у результаті яких різні власні значення трансфер матриці стають найбільшими для різних областей температури і прикладених полів.

Відкриття численних високотемпературних надпровідників на основі окислів міді відновило інтерес до низькорозмірних систем. Для всіх сполук, які мають високу критичну температуру, відомо: високотемпературна надпровідність тісно зв'язана із шарами, що містять атоми кисню й міді. Деякі теоретики підходили до цієї проблеми, використовуючи для простоти одновимірний ланцюжок з атомів міді й кисню, хоча в цьому випадку доречніше використовувати двовимірну модель Хаббарда. Ідея щодо одновимірного ланцюжка розширена на багатоланкові оксиди міді, що мають структури пар окисних ланцюгів міді, зв'язаних додатковими атомами кисню між парами. Недавно кілька сполук з багатоланковою структурою були реалізовані експериментально, й одна з цих сполук, $\text{Sr}_{0.4}\text{Ca}_{13.6}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41.18}$, виявилась надпровідною. Ці сполуки можуть бути представлені багатоланковою антиферромагнітною структурою зі спіном $1/2$. Фосфати $\text{VO}(\text{HPO}_4) \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ – одна з реалізацій квантової моделі з двома спіновими ланцюжками. Квантовий двоплосинний ефект Хола також виявляє деякі властивості дволанцюжкової квантової спінової моделі. Взаємодію ланцюжків Ізинга досліджено у працях [3, 4].

У поданій праці розглядаються два рівнобіжні взаємодіючі ланцюги Ізинга з вільними кінцями (рис. 1). До розв'язання задачі застосовано новий метод, який може бути названо алгебраїчним. Як нам видається, раніше його не застосовували.

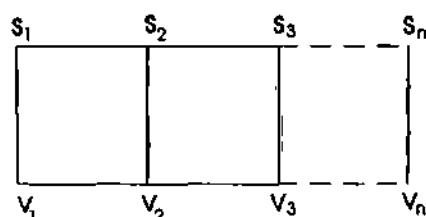


Рис. 1. Модель 1.

Розглянемо два взаємодіючі ланцюги Ізинга, кожен з яких містить n вузлів (рис. 1). У кожному вузлі i верхнього ланцюга визначені змінні s_i , що набувають значень -1 та $+1$; у кожному вузлі i нижнього ланцюга визначені змінні v_i , що набувають значень -1 та $+1$.

Енергія взаємодії найближчих (рівнобіжних) спінів, розташованих вздовж горизонталі, дорівнює J_1 , а енергія взаємодії спінів, розташованих уздовж вертикалі, дорівнює $|J_1|K$. Статистичною сумою такого ланцюга є:

$$Z = \sum_{\{s\}} \prod_{i,j} \exp \{-E_{ij}/k_B T\}, \quad (1)$$

де добуток узятий по всіх парах найближчих сусідів, а підсумовування ведеться по всіх наборах спінової змінної. Означимо параметри $p_1 = J_1/|J_1|$, $p_2 = K$, $t = k_B T/|J_1|$. Далі ми вважаємо, що $k_B = 1$.

Розрахунок статистичної суми двох взаємодіючих ланцюгів Ізинга за циклічних граничних умов може бути легко виконаний методом трансфер матриці. Цей результат ми будемо вважати відомим. У цьому випадку статистична сума має форму:

$$Z_Q = -T \ln(b \operatorname{ch} K + \sqrt{b^2 \operatorname{ch}^2 K - b^2 + 4}), \quad (2)$$

де $b = 2 \cosh 2J$. Вираз (1) може бути поданий у формі [5]:

$$Z = 2^{2n} (\operatorname{ch} \frac{p_1}{t})^{2(n-1)} (\operatorname{ch} \frac{p_2}{t})^n S, \quad (3)$$

де

$$S = \sum_{\{s\}} \prod_{i=1}^n (1 + x s_i s_{i+1}) (1 + y s_i v_i) (1 + x v_i v_{i+1}), \quad (4)$$

де $x = \operatorname{tg}(p_1/t)$, $y = \operatorname{tg}(p_2/t)$. Для малих значень n ($n = 3, 4, 5 \dots$) підсумовування у виразі (4) за наборами спінових змінних може бути виконано безпосередньо. Вираз (4) можна представити як подвійну суму за степенями x та y , і ми можемо проаналізувати закон формування коефіцієнтів цієї суми.

Під знаком суми у виразі (4) перебуває поліном від змінних s_i і v_i . Оскільки кожен вузол ланцюжка (крім тих, що знаходяться на його кінцях) зв'язаний з трьома сусідами, то s_i і v_i можуть зустрітися в поліномі в степенях від нульової до третьої. Після підсумовування за всіма $s_i = \pm 1$ ($v_i = \pm 1$) члени, що містять непарні степені s_i (v_i), обернуться на нуль, а ненульовий внесок дадуть тільки члени, що містять s_i (v_i) у степенях 0 та 2. Оскільки $s_i^0 = s_i^2 = v_i^0 = v_i^2 = 1$, то кожен член полінома,

що містить усі змінні s_i і (v_i) у парних степенях дасть внесок у суму, пропорційний повному числу конфігурацій 2^{2n} . Таким чином, можна записати:

$$S = 2^{2n} P(x, y). \quad (5)$$

Поліном $P(x, y)$ можна представити у вигляді ряду за парними степенями змінної y :

$$P(x, y) = P_0(x) + y^2 P_2(x) + y^4 P_4(x) + y^6 P_6(x) + \dots \quad (6)$$

Для невеликих значень n поліноми $P_k(x)$ ($k = 0, 2, 4, 6, \dots$) можуть бути розраховані явно. Для отримання формули при довільних n необхідно мати вирази для поліномів $P_k(x)$ при будь-яких n . Спочатку розрахуємо $P_2(x)$ для різних n . Цей розрахунок зручно виконати в такий спосіб. Виходячи з виразу (4), розрахуємо $P(x, y) - 1$. При цьому вважаємо, що $y^4 = 0$ (у цьому випадку вищі степені y автоматично обертаються на нуль). Тоді з (5) і (6) видно, що в результаті розрахунку буде отриманий вираз $y^2 P_2(x)$. Реалізуючи цю програму, одержуємо: для $n = 7$

$$P_2(x) = x^2(x^{10} + 2x^8 + 3x^6 + 4x^4 + 5x^2 + 6); \quad (7)$$

для $n = 6$

$$P_2(x) = x^2(x^8 + 2x^6 + 3x^4 + 4x^2 + 5); \quad (8)$$

для $n = 5$

$$P_2(x) = x^2(x^6 + 2x^4 + 3x^2 + 4); \quad (9)$$

для $n = 4$

$$P_2(x) = x^2(x^4 + 2x^2 + 3); \quad (10)$$

для $n = 3$

$$P_2(x) = x^2(x^2 + 2) \quad (11)$$

для $n = 2$

$$P_2(x) = x^2. \quad (12)$$

Визначимо величини

$$U(x, y) = P(x, y) - 1 - x^2 y^2 (n - 1).$$

Поліноми $U(x, y)$ дозволяють нам спростити пошук закономірностей формування коефіцієнтів розкладу. Для $U(x, y)$ має місце розклад, аналогічний до (6):

$$U(x, y) = y^2 U_2(x) + y^4 U_4(x) + y^6 U_6(x) + \dots \quad (13)$$

Розрахунки показують, що при будь-яких значеннях n поліноми $U_k(x)$ ($k = 2, 4, 6, 8, \dots$) можуть бути представлені у вигляді:

$$U_2(x) = x^2 R_2(x), \quad (14)$$

$$U_4(x) = x^4 R_4(x), \quad (15)$$

$$U_6(x) = x^6 R_6(x), \quad (16)$$

$$U_8(x) = x^8 R_8(x), \quad (17)$$

$$U_{10}(x) = x^{10} R_{10}(x), \quad (18)$$

$$U_{12}(x) = x^{12} R_{12}(x). \quad (19)$$

де $R_k(x)$ — поліноми, які зручно представити у вигляді таблиць. Наприклад, поліному $R_2(x)$ відповідає така таблиця

n	x^{12}	x^{10}	x^8	x^6	x^4	x^2	x^0
9	1	2	3	4	5	6	7
8		1	2	3	4	5	6
7			1	2	3	4	5
6				1	2	3	4
5					1	2	3
4						1	2
3							1
2							0

У першому стовпчику таблиці зазначено кількість вузлів у кожному ланцюжку. У рядку з номером n наведені коефіцієнти полінома при степенях, зазначених у першому рядку таблиці. Таким чином, таблиця представляє поліном $R_2(x)$ для будь-яких n . Аналогічно представимо решту поліномів: $R_4(x)$:

n	x^{10}	x^8	x^6	x^4	x^2	x^0
9	6	15	24	30	30	21
8		5	12	18	20	15
7			4	9	12	10
6				3	6	6
5					2	3
4						1
3						0
2						0

$R_6(x)$:

n	x^{10}	x^8	x^6	x^4	x^2	x^0
11	21	60	100	120	60	56
10		15	40	60	60	35
9			10	24	30	20
8				6	12	10
7					3	4
6						1
5						0
4						0
3						0
2						0

n	x ⁸	x ⁶	x ⁴	x ²	x ⁰
12		200			
11				105	
10	15		60		35
9		10			20
8			6		10
7				3	4
6					1

Рис. 2. Правило утворення коефіцієнтів.

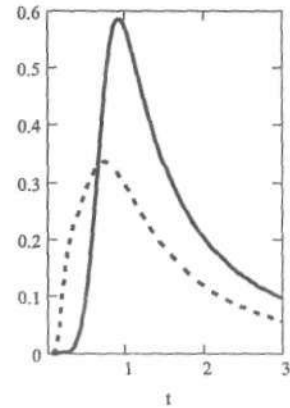


Рис. 3. Температурна залежність теплоємності: суцільна крива — $p_1 = 1, p_2 = 0, 2$; пунктирна — $p_1 = 0, 2, p_2 = 1$.

$R_8(x)$:

n	x ¹⁰	x ⁸	x ⁶	x ⁴	x ²	x ⁰
13	56	175	300	350	280	126
12		35	100	150	140	70
11			20	50	60	35
10				10	20	15
9					4	5
8						1
7						0
6						0
5						0
4						0
3						0
2						0

$R_{10}(x)$:

n	x ¹⁰	x ⁸	x ⁶	x ⁴	x ²	x ⁰
15	126	420	735	840	630	252
14		70	210	315	280	126
13			35	90	105	56
12				15	30	21
11					5	6
10						1
9						0
...						...
2						0

$R_{12}(x)$:

n	x ⁸	x ⁶	x ⁴	x ²	x ⁰
16	126	392	588	504	210
15		56	147	168	84
14			21	42	28
13				6	7
12					1
11					0
...					...
2					0

Розглянемо закономірність формування коефіцієнтів наведених вище поліномів. Спочатку розглянемо поліном $R_2(x)$. Коефіцієнти при найбільших степенях x для будь-якого n (тобто розташовані на діагоналі в таблиці) дорівнюють 1. Коефіцієнти при x^0 формуються в такий спосіб. Перший відмінний від нуля коефіцієнт (для $n = 3$) дорівнює 1. Піднімаючись по таблиці на один рядок, додаємо до 1 коефіцієнт, розташований у даному рядку на діагоналі. Для полінома $R_2(x)$ це 1. Таким чином, у даному випадку при підйомі на один рядок щораз додається 1. Розглянемо формування таблиці коефіцієнтів для полінома $R_4(x)$. У цьому випадку на діагоналі розташовані коефіцієнти з передостаннього стовпчика таблиці для $R_2(x)$. Коефіцієнти при x_0 виходять, як і в попередньому випадку, в результаті послідовного підсумовування: $1 + 2 = 3$, $3 + 3 = 6$, $6 + 4 = 10$ і т. д. Для наступних таблиць процедура повторюється.

Таким чином, коефіцієнти, розташовані на діагоналях і правих стовпцях у таблицях, сформовані для всіх поліномів $R_k(x)$. На рис. 2 показано правило формування інших коефіцієнтів. Це правило є універсальним. У результаті ми одержуємо такий вираз:

$$S = 1 + (n-1)x^2y^2 + x^4y^2 \sum_{k=0}^{n-3} x^{2k} q_{0,k} q_{1,n-k-3} + \sum_{j=2}^G x^{2j} y^{2j} \sum_{k=0}^{n-2j} x^{2k} q_{j-1,k} q_{j,n-k-2j}. \quad (20)$$

Тут $G = n/2$, коли n парне, і $G = (n-1)/2$, коли n непарне. Для факторів $q_{j,l}$ ми маємо рекурентні співвідношення:

$$q_{j,l} = q_{j,l-1} + q_{j-1,l}. \quad (21)$$

Початкові значення факторів у виразі (21) є $q_{0,l} = 1$, $q_{l,0} = 1$, для усіх l .

Результати обчислення теплоємності $C(t, p_1, p_2)$ (у розрахунку на вузол), як функції зведеної температури, показані на рис. 3. Із цього рисунка видно, що для значень параметрів $p_1 = 1$, $p_2 = 0, 2$ максимальне значення теплоємності приблизно дорівнює 0,6. Це значення помітно перевершує максимальне значення теплоємності поодинокого ланцюжка Ізинга, що приблизно дорівнює 0,4. Однак

при значеннях параметрів $p_1 = 0, 2$, $p_2 = 1$ максимальне значення теплоємності двох зв'язаних ланцюжків Ізинга виявляється близьким до теплоємності звичайного ізинговського ланцюжка. З отриманих результатів можна зробити такий висновок: термодинамічні властивості ґраткової системи виявляються дуже чутливими до співвідношення енергетичних параметрів.

Запропонований у статті метод може бути застосований до інших ґраткових систем.

1. Удотов В. Н., Паскаль Ю. И., Потеев А. И. и др. Фазовые переходы в малых решеточных моделях как аналог переходов в больших системах // Металлофизика и новейшие технологии. — 1994. — Т. 16. — № 5. — С. 43-51.
2. Eqsquiza I. L., Macfarlane A. J. Easily soluble models in statistical mechanics with non-trivial phase structure II Phys. Lett. A. - 1990. - Vol. 151. - № 9.
3. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике. — М.: Мир, 1985.
4. Bariev R. Z. Integrable model of interacting XY chains II J. Phys. A. - 1991. - Vol. 24. - P. L919-L923.
5. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Ч. 1. — М.: Наука, 1976.

Yu. V. Sherstennikov, V. M. Danylenko

EXACT ANALYTICAL CALCULATION OF THERMODYNAMICS OF TWO CONNECTED ISING CHAINS

The analytical summation over the spin variable sets in the expression for the statistical sum of two connected Ising chains is performed. The interatomic interaction was taken into account only for the nearest neighbours. The heat capacity of system is calculated. The calculations are performed for chains with free ends.