сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P17-90-59

В.Н.Плечко, И.К.Соболев

АНОМАЛЬНО УЗКАЯ КРИТИЧЕСКАЯ ОБЛАСТЬ В МОДЕЛИ ИЗИНГА НА СИЛЬНО ДЕКОРИРОВАННОЙ ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

1990

Точно решаемая двумерная модель Изинга [1] играет важную роль в теории фазовых переходов второго рода. Следует, однако, заметить, что большинство аналитических результатов в модели Изинга было получено для классических решеток с простой структурой – прямоугольной, треугольной и гексагональной [1,2]. Гораздо менее изучены модели на декорированных решетках, или решетках с нетривиальной внутренней структурой элементарной ячейки [2-5]. Изучение декорированных изинговских решеток может представлять интерес для ряда задач теории твердого тела, магнетизма, материаловедения и др., где часто приходится иметь дело с системами с достаточно сложной локальной структурой.

В данном сообщении, на основе результатов, полученных аналитическими методами, мы изучаем поведение теплоемкости во всей области температур для модели Изинга на последовательности сильно декорированных двумерных решеток треугольного типа, см. рис.1 и 2. Рассматриваемая серия моделей относится к классу точно решаемых изинговских систем на декорированных решетках из работ [3,4]. Статистическая сумма таких систем выражается через статсумму трехспиновых полиномов, которая, в свою очередь, вычисляется в аналитическом виде в терминах параметров трехспиновых полиномов [3]. Параметры трехспиновых полиномов мы определяем с помощью специальной рекурсионной техники, основанной на применении преобразований типа звезда-треугольник [6,7]. Зная статсумму и свободную энергию, можем вычислить теплоемкость.

Вычисления для теплоемкости показывают, что при больших значениях параметра декорирования n критическая область становится аномально узкой. Кроме того, при температуре выше критической на кривой теплоемкости проявляется хорошо заметный пик, который мы связываем с изменением в режиме корреляций спинов внутри декорированной ячейки. Аномальная узость критической области может быть проинтерпретирована, видимо, как следствие формирования достаточно сильных корреляций спинов во внутренней области декорированной ячейки к моменту достижения точки фазового перехода на глобальной решетке.

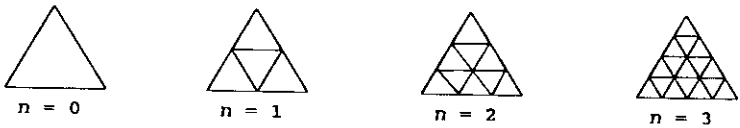

Рис. 1. Последовательность декорированных ячеек при малых n.

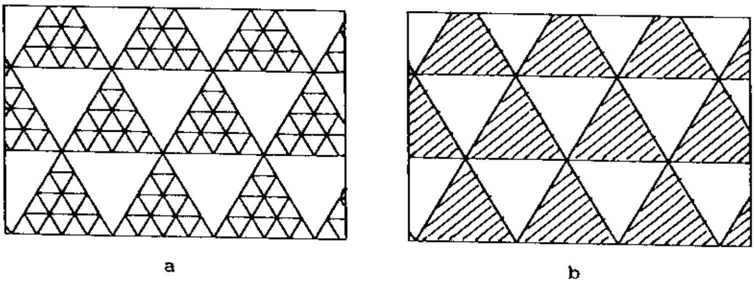

Рис. 2. Фрагмент глобальной n=3 решетки (a) и общая структура декорированных решеток (b). Для n-решетки заштрихованный треугольник реализуется как декорированная элементарная ячейка с номером n.

1. *Декорированные треугольные решетки.* Будем рассматривать последовательность сильно декорированных изинговских решеток со структурой, показанной на рис.1 и 2. Решетки нумеруются целочисленным индексом $n = 0,1,2,3,4,5,\ldots$. Элементарная декорированная ячейка для решетки n- го порядка представляет собой ограниченный фрагмент простой треугольной решетки, причем n+1 есть число элементарных треугольников вдоль ребра n-ячейки. Структура декорированных ячеек для $n = 0,1,2,3$ приведена на рис.1. Глобальная n-решетка получается периодическим повторением декорированной n-ячейки на плоскости, рис.2. Таким образом, при n=0 имеем обычную треугольную решетку. В качестве примера на рис.2a показан фрагмент глобальной n=3 решетки. На рис.2b приводится общая структура n-решеток, заштрихованные треугольники

для n-решетки реализуются как декорированные n-ячейки, рис. 1.

Гамильтониан модели Изинга имеет вид

$$-\beta H = \sum_{\langle ij\rangle} b_{ij}\sigma_i\sigma_j \quad , \qquad \beta = 1/kT \quad , \tag{1}$$

где $\sigma_i = \pm 1$, $\sigma_j = \pm 1$ изинговские спины в соседних узлах решетки i и j, b_{ij} – параметры взаимодействия, $b_{ij} = \varepsilon_{ij}/kT$, ε_{ij} – энергия взаимодействия спинов, случай $\varepsilon_{ij} > 0$ отвечает ферромагнитному взаимодействию, kT – температура. Сумма $\langle ij\rangle$ в (1) берется по всем связям, представленным на данной решетке. Гамильтониану (1) отвечает статистическая сумма

$$Z = \sum_{(\sigma)} e^{-\beta H} = \sum_{(\sigma)} \prod_{\langle ij\rangle} e^{-b_{ij}\sigma_i\sigma_j} . \tag{2}$$

Отметим известное тождество для больцмановских весов:

$$e^{b_{ij}\sigma_i\sigma_j} = c_{ij}(1+t_{ij}b_{ij}\sigma_i\sigma_j),\ c_{ij} = \mathrm{ch}(b_{ij}),\ t_{ij} = \mathrm{th}(b_{ij}), \tag{3}$$

которое легко проверяется перебором значений $(\sigma_i\sigma_j) = \pm 1$.

В (2) спиновое усреднение осуществляется по всем конфигурациям $\sigma_j = \pm 1$ независимо в каждом узле. В дальнейшем будет удобно перейти к нормированному спиновому усреднению [3]:

$$\mathop{\mathrm{Sp}}_{(\sigma_j)}(\ldots) = \frac{1}{2}\sum_{\sigma_j=\pm 1}(\ldots) \quad , \qquad \mathop{\mathrm{Sp}}_{(\sigma_j)}(1) = 1 \quad , \qquad \mathop{\mathrm{Sp}}_{(\sigma_j)}(\sigma_j) = 0 \quad , \tag{4а}$$

при этом в (2) имеем

$$\sum_{(\sigma)}(\ldots) = 2^N \mathop{\mathrm{Sp}}_{(\sigma)}(\ldots), \qquad \mathop{\mathrm{Sp}}_{(\sigma)}(\ldots) = \mathop{\mathrm{Sp}}_{(\sigma_1)}\mathop{\mathrm{Sp}}_{(\sigma_2)}\cdots\mathop{\mathrm{Sp}}_{(\sigma_N)}(\ldots) \quad , \tag{4б}$$

где N общее число узлов и спиновых переменных на решетке. Отметим, что из $\sigma_j = \pm 1$ следует $\sigma_j^2 = 1$, и вообще $(\sigma_j)^{2n} = 1$, $(\sigma_j)^{2n+1} = \sigma_j$.

Из (2)–(4) получаем, что Z можно представить в виде:

$$Z = \left(2^N \prod_{\langle ij\rangle} c_{ij} \right) Q \ , \qquad Q = \mathop{\mathrm{Sp}}_{(\sigma_j)}\left\{ \prod_{\langle ij\rangle}(1+t_{ij}\sigma_i\sigma_j) \right\}, \tag{5}$$

где произведение берется по всем связям на решетке, а спиновое усреднение берется по всем узлам. Фактор 2^N возникает из-за ренормировки среднего (4).

Обратимся теперь к решеткам типа представленных на рис.1 и 2. Будем нумеровать декорированные ячейки индексом k и обозначим через $(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3)_k$ спины на концах k- й треугольной декорированной ячейки, см. рис.3. Как не трудно заметить, задача о вычислении Q для рассматриваемых решеток приводится к вычислению статсуммы для трехспиновых полиномов следующего вида [3,4]:

$$Q = \underset{(\sigma)}{\mathrm{Sp}} \prod_k (\alpha_0 + \alpha_1\sigma_2\sigma_3 + \alpha_2\sigma_3\sigma_1 + \alpha_3\sigma_1\sigma_2)_k . \tag{6}$$

В самом деле, только спины на концах ячейки входят одновременно, и в том же качестве, и в другие ячейки, поэтому можем осуществить суммирование по внутренним спинам в каждой ячейке независимо. Произведение больцмановских весов в (5), отвечающих какой-либо фиксированной k- й ячейке, представляет собой, очевидно, четный полином по спиновым переменным. Усредняя этот полином по всем внутренним переменным, получим четный полином по свободным спинам в углах ячейки:

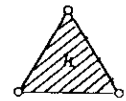

Рис. 3. Локальная нумерация спиновых переменных в углах элементарной ячейки.

$$(P_{123})_k = (\alpha_0 + \alpha_1\sigma_2\sigma_3 + \alpha_2\sigma_3\sigma_1 + \alpha_3\sigma_1\sigma_2)_k . \tag{7}$$

В правой части (7) выписан четный полином по $(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3)_k$ самого общего вида, числовые параметры $\alpha_0,\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3$ определяются конкретной структурой ячейки. Таким образом, мы приходим к представлению (6).

Свободная энергия в нормировке на одну декорированную ячейку была рассчитана методом интегралов по грассмановым переменным в [3] и имеет вид

$$\underset{(\text{per cell})}{-\beta f_0} = \left(\frac{1}{N_k} \ln Q \right)_{N_k \to \infty} =$$
$$= \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} dp \int_0^{2\pi} dq \ln\Big[(\alpha_0^2+\alpha_1^2+\alpha_2^2+\alpha_3^2) - 2(\alpha_0\alpha_1 - \alpha_2\alpha_3)\cos p -$$
$$- 2(\alpha_0\alpha_2 - \alpha_3\alpha_1)\cos q - 2(\alpha_0\alpha_3 - \alpha_1\alpha_2)\cos(p+q)\Big] , \tag{8}$$

здесь N_k — число элементарных ячеек на глобальной решетке, для числа спинов имеем $N=N_k(1+n_k)$, где n_k — число внутренних спинов (узлов) на одной ячейке. В нормировке на один спин находим

$$(-\beta f_Q)_{\text{per spin}} = \frac{1}{1+n_k}(-\beta f_Q)_{\text{per cell}} . \qquad (9)$$

Переходя от Q к Z, см. (5), получаем отсюда полную свободную энергию $(-\beta f_Z)$. Как обычно, в конце вычислений предполагается переход к бесконечной решетке, $N_k \to \infty$.

Зная свободную энергию, можем вычислить теплоемкость:

$$\left(C_Z \right)_{(\text{per spin/cell})} = \beta^2 \frac{\partial^2}{\partial \beta^2}\left[-\beta f_Z \right] , \qquad \beta=1/kT . \qquad (10)$$

Таким образом, изучение термодинамики решеток со структурой типа рис. 2(b) сводится к изучению параметров полиномов (7). Заметим, что P_{123} в (7) представляет собой редуцированную матрицу плотности изолированной декорированной ячейки. При этом[1)]

$$\alpha_0 = \underset{(\sigma)}{\mathrm{Sp}}\ (P_{123}) \qquad (11)$$

есть статистическая сумма изолированной ячейки, а величины α_j/α_0 выражаются через корреляторы угловых спинов на концах изолированной ячейки:

$$\frac{\alpha_1}{\alpha_0} = \langle\sigma_2\sigma_3\rangle , \quad \frac{\alpha_2}{\alpha_0} = \langle\sigma_1\sigma_3\rangle , \quad \frac{\alpha_3}{\alpha_0} = \langle\sigma_1\sigma_2\rangle , \qquad (12)$$

где через $\langle\ldots\rangle$ обозначено обычное гиббсовское среднее с гамильтонианом изолированной ячейки. Статсумма в (11) получается в той же нормировке, что и матрица плотности P_{123}. Если, как подразумевалось, в качестве больцмановских весов берутся $1+t_{ij}\sigma_i\sigma_j$ (см. (5)), то статсумма для изолированной ячейки в обычной нормировке будет

$$Z_{\text{cell}} = \left(2^{n_k+3} \prod_{\langle ij\rangle} c_{ij} \right) \alpha_0 , \qquad (13)$$

это соотношение аналогично по смыслу (5), здесь n_k+3 — полное число спинов в ячейке. При желании нормировочный коэффициент в (13) можно было бы включить в определение параметров α_j. Выбор нормировки не отражается на соотношениях (12).

---

1) Индекс k здесь и далее опускаем.

Выше мы провели обсуждение на уровне несколько более общем, чем нам потребуется при расчетах, чтобы показать структуру задачи.

В дальнейшем мы ограничимся случаем однородного и изотропного взаимодействия, когда параметры взаимодействия на всех связях в наших декорированных решетках одинаковы, т.е. каждой связи в гамильтониане $-\beta H$ (см. (1)) отвечает член $b(\sigma_i\sigma_j)$, причем $b = \varepsilon/kT > 0$ (ферромагнитный случай). В матрице плотности Q (5) имеем тогда больцмановские веса $1+t(\sigma_i\sigma_j)$, $t=\text{th}(b)$, и в редуцированном представлении для Q (6), см. также (7), будем иметь симметричный трехспиновый полином ($\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3$), который запишем в виде:

$$(P_{123})_n = R_n[1+\lambda_n(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_1\sigma_3)] , \tag{14}$$

где n – индекс решетки.

Формула (8) тогда приобретает вид:

$$\left(-\beta f_Q\right)_{\text{per cell}} = \frac{1}{8\pi^2}\int\limits_0^{2\pi}dp\int\limits_0^{2\pi}dq\ \ln R_n^2\left[(1+3\lambda_n^2) - \right. \tag{15a}$$

$$\left. - 2\lambda_n(1-\lambda_n)(\cos p + \cos q + \cos(p+q))\right] ,$$

и, с учетом всех ренормировок, полная свободная энергия на один спин, отвечающая статсумме Z, см. (2), получается в виде

$$\left(-\beta f_Z\right)_{\text{per spin}} = \left(\frac{1}{N}\ln Z\right)_{N\to\infty} = \ln 2 + \frac{1}{1+n_k}\ln(c^{n_b}R_n) +$$

$$+ \frac{1}{1+n_k}\iint\limits_0^{2\pi}\frac{dpdq}{8\pi^2}\ln\left[(1+3\lambda_n^2) - 2\lambda_n(1-\lambda_n)(\cos p + \cos q + \cos(p+q))\right] , \tag{15б}$$

здесь n_k – число внутренних спинов, n_b – число связей в ячейке n- го уровня. Простые вычисления дают

$$n_k = \frac{(n+2)(n+3)}{2} - 3 , \qquad n_b = \frac{3(n+1)(n+2)}{2} . \tag{16}$$

Температура входит в (15) через зависимость параметров λ_n и R_n от $t=\text{th}(b)$, $b=\varepsilon/kT>0$. В дальнейшем под температурой будем подразумевать безразмерный параметр $b^{-1}=(kT/\varepsilon)$. В формуле (10) для теплоемкости удобно перейти от $\beta=1/kT$ к параметру $b=\varepsilon/kT$:

$$C_{\text{per spin}} = b^2 \frac{\partial^2}{\partial b^2}\Big[-\beta f_z\Big]_{\text{per spin}} \quad . \tag{17}$$

Таким образом, исследование модели сводится к определению функций $R_n=R_n(t)$ и $\lambda_n=\lambda_n(t)$, $t=\text{th}(b)$, характеризующих свойства n-ячейки. Вычисляя тем или иным способом параметры R_n и λ_n для трехспинового полинома (14) при различных значениях обратной температуры b, по формулам (15) и (17) можем изучить поведение теплоемкости в зависимости от температуры. Заметим в заключение этого раздела, что критическая точка для n-решетки определяется уравнением [3]:

$$3\lambda_n-1 = 0 \quad . \tag{18}$$

В связи с условием (18) полезно отметить, что параметр λ_n представляет собой коррелятор угловых спинов на концах изолированной n-ячейки, $\lambda_n=(\langle\sigma_i\sigma_j\rangle)_n$, см.(12).

2. *Вычисление параметров трехспиновых полиномов.* Нам необходимо уметь вычислять параметры трехспинового полинома

$$(P_{123})_n = P_n(\sigma_1|\sigma_2|\sigma_3) = R_n\ [1 + \lambda_n(\sigma_1\sigma_2+\sigma_2\sigma_3+\sigma_1\sigma_3)] \ , \tag{19}$$

который получается как редуцированная матрица плотности декорированной ячейки n- го уровня со свободными угловыми спинами, причем каждой связи на ячейке сопоставляется больцмановский вес:

$$1 + t\sigma\sigma' = \overset{\sigma}{\circ}\!\underset{t}{\text{———}}\!\overset{\sigma'}{\circ} \quad . \tag{20}$$

В простейшем случае n=0, когда ячейка представляет собой простой треугольник, рис.1, имеем

$$(P_{123})_0= (1+t\sigma_1\sigma_2)(1+t\sigma_2\sigma_3)(1+t\sigma_1\sigma_3) = \tag{21a}$$

$$= (1+t^3) + t(1+t)(\sigma_1\sigma_2+ \sigma_2\sigma_3+ \sigma_1\sigma_3) \ ,$$

и, следовательно,

$$R_0= (1+t^3) \ , \qquad \lambda_0 = \frac{t(1+t)}{1+t^3} = \frac{t}{1-t+t^2} \quad . \tag{21б}$$

Подстановка этих значений в (14) (здесь $n_k=0$, $n_b=3$) приводит к известному выражению для свободной энергии стандартной треугольной решетки.

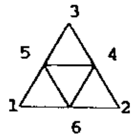

Рис. 4

В следующем порядке, $n=1$, требуются более громоздкие вычисления. Обозначив спиновые переменные, как на рис. 4, имеем задачу:

$$(P_{123})_1 = P_1(\sigma_1|\sigma_2|\sigma_3) = \tag{22а}$$

$$= \mathop{Sp}\,\mathop{Sp}\,\mathop{Sp}_{(\sigma_4,\sigma_5,\sigma_6)} \left\{P_0(\sigma_1|\sigma_6|\sigma_5)P_0(\sigma_6|\sigma_2|\sigma_4)P_0(\sigma_5|\sigma_4|\sigma_3)\right\} ,$$

где мы объединили 9 имеющихся связей в треугольники и воспользовались уже известным выражением (21) для полинома при $n=0$. В результате вычислений в терминах R_0 и λ_0 получаем

$$R_1 = R_0^3(1+\lambda_0^3) \quad , \qquad \lambda_1 = \frac{\lambda_0^2}{1-\lambda_0+\lambda_0^2} \quad . \tag{22б}$$

Аналогичным образом можно рассчитать параметры R_2 и λ_2. Однако уже при проведении вычислений (22) можно заметить, что какой-либо вариант прямого метода усреднения при больших n (фактически при $n>3$) не приемлем из-за экспоненциального роста сложности вычислений. В самом деле, формально в (22а) имеем 3 фактора, каждый из которых имеет 4 слагаемых, и их произведение содержит уже 4^3 слагаемых. Для ячейки n- го порядка потребуется учет порядка $n^2/4$ таких факторов, перемножение которых даст порядка $2^{n^2/2}$ слагаемых, с последующим усреднением возникающего полинома[2]. Поэтому мы разработали другой метод, со степенным ростом сложности относительно n, который позволяет проводить аналитические и численные вычисления при достаточно больших n.

В предложенном методе существенно используется преобразование звезда-треугольник [5,6]. В интерпретации, удобной для нашей

---

[2] Это согласуется со следующей оценкой: на ячейке n- го уровня имеется порядка $n^2/2$ спиновых переменных $\sigma=\pm1$, следовательно, имеем порядка $2^{n^2/2}$ спиновых конфигураций, которые надо перебрать при усреднении.

задачи, соотношение звезда-треугольник устанавливает связь между параметрами трехспиновых полиномов, отвечающих "треугольнику" и "звезде", см. рис. 5. Интерпретация ребер и узлов здесь имеет обычный изинговский смысл, при этом предполагается усреднение по спиновой переменной $\sigma_0 = \pm 1$ в центре "звезды".

В общем несимметричном случае треугольнику (рис. 5) отвечает полином

$$T_{123} = (1+t_1\sigma_2\sigma_3)(1+t_2\sigma_3\sigma_1)(1+t_3\sigma_1\sigma_2) = \\ = (1+t_1t_2t_3)+(t_1+t_2t_3)\sigma_2\sigma_3+(t_2+t_1t_3)\sigma_1\sigma_3+(t_3+t_1t_2)\sigma_1\sigma_2 , \tag{23}$$

а звезде отвечает полином

$$H_{123} = \underset{(\sigma_0)}{\mathrm{Sp}} (1+h_1\sigma_1\sigma_0)(1+h_2\sigma_2\sigma_0)(1+h_3\sigma_3\sigma_0) = \\ = 1 + h_1h_2\sigma_1\sigma_2 + h_2h_3\sigma_2\sigma_3 + h_1h_3\sigma_1\sigma_3 . \tag{24}$$

Приравнивая полиномы (с точностью до нормировочного фактора R_{123}),

$$T_{123}(\sigma_1|\sigma_2|\sigma_3) = R_{123}H_{123}(\sigma_1|\sigma_2|\sigma_3) , \tag{25a}$$

получаем параметрические соотношения звезда-треугольник:

$$R_{123} = 1+t_1t_2t_3 , \qquad h_ih_j = \frac{t_k+t_it_j}{1+t_1t_2t_3} , \tag{25б}$$

где i,j,k суть несовпадающие индексы, принимающие значения 1,2,3.

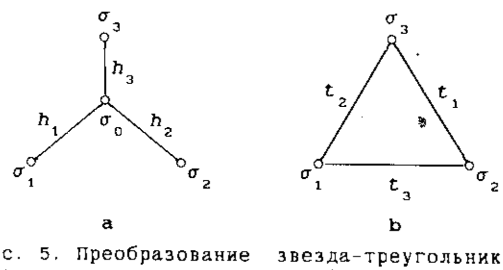

Рис. 5. Преобразование звезда-треугольник - иллюстрация к соотношениям (29) - (30). По состояниям переменной $\sigma_0=\pm1$ в центре звезды производится усреднение.

Уравнения разрешаются относительно h_i- х, в терминах правых частей (25б), следующим образом:

$$h_i = \sqrt{\frac{\lambda_j\lambda_k}{\lambda_i}} , \qquad \lambda_k = \frac{t_k+t_it_j}{1+t_1t_2t_3} . \tag{26}$$

Чтобы разрешить условия (26) относительно t_i удобно перейти к Крамерс-Ванье сопряженным параметрам t^*_j и h^*_j:

$$t^*_i = \frac{1-t_i}{1+t_i}, \qquad t_i = \frac{1-t^*_i}{1+t^*_i}, \qquad h^*_i = \frac{1-h_i}{1+h_i}, \qquad h_i = \frac{1-h^*_i}{1+h^*_i}. \tag{27}$$

Введем также параметры λ^*_k, получающиеся при замене $t_j \to h^*_j$ и $h_j \to t^*_j$ в (26):

$$\lambda^*_k = \frac{1+\lambda_k-\lambda_i-\lambda_j}{1+\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3}, \qquad \lambda_k = h_i h_j, \tag{28}$$

тогда параметры t_j определяются по следующей схеме:

$$t^*_i = \sqrt{\frac{\lambda^*_j\lambda^*_k}{\lambda^*_i}}, \qquad t_i = \frac{1-t^*_i}{1+t^*_i}. \tag{29}$$

В частном случае симметричных ячеек звезды и треугольника, $\lambda_i=\lambda$, $h_i=h$, $t_i=t$, формулы упрощаются. Уравнения (25б) приобретают вид

$$R = 1 + t^3, \qquad h^2 = \frac{t}{1-t+t^2} = \lambda, \tag{30}$$

и при этом

$$h = \sqrt{\lambda}, \qquad t = \frac{1+\lambda - \sqrt{1+2\lambda-3\lambda^2}}{2\lambda}. \tag{31}$$

Кроме соотношений звезда-треугольник нам еще потребуются более простые соотношения "склейки" и "приклеивания хвостов".

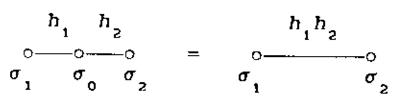

Рис. 6. Преобразование "склейки" двух последовательных связей. По переменной σ_0 производится усреднение, см. (32).

Под склейкой мы понимаем объединение двух последовательных связей в одну:

$$\underset{(\sigma_0)}{\mathrm{Sp}}\,(1+h_1\sigma_1\sigma_0)(1+h_2\sigma_2\sigma_0) = 1 + h_1h_2\sigma_1\sigma_2, \tag{32}$$

что иллюстрируется графически на рис. 6.

Операция "приклеивание хвостов" иллюстрируется на рис.7. Предположим, что мы знаем трехспиновый полином, отвечающий внутреннему заштрихованному треугольнику (некоторой декорированной ячейке) на рис. 7. Пусть y_1, y_2, y_3 — изинговские спины на концах внутреннего треугольника, и требуется перейти к полиному полной ячейки с "хвостами", рис. 7, со свободными спинами $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ и усреднением по y_1, y_2, y_3. Эта операция на уровне полиномов выглядит следующим образом:

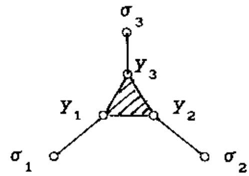

Рис.7. Операция "приклеивания хвостов", иллюстрация к (33).

$$\mathop{\mathrm{Sp}}_{(y_1, y_2, y_3)} (1+\lambda_3 y_1 y_2+\lambda_1 y_2 y_3+\lambda_2 y_3 y_1)(1+h_1 y_1 \sigma_1)(1+h_2 y_2 \sigma_2)(1+h_3 y_3 \sigma_3) =$$
$$= 1 + \lambda_3 h_1 h_2 \sigma_1 \sigma_2 + \lambda_1 h_2 h_3 \sigma_2 \sigma_3 + \lambda_2 h_1 h_3 \sigma_1 \sigma_3 \ . \qquad (33)$$

Покажем теперь, что описанные выше преобразования позволяют организовать рекурсию, последовательно понижающую порядок задачи. Начав с n-ячейки, мы сводим задачу к (несимметричной) $(n-1)$-ячейке, затем к $(n-2)$-ячейке и т. д. Схема вычислений

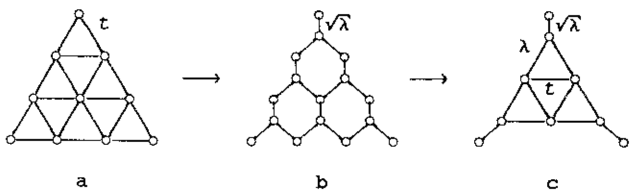

Рис. 8. Редукция 2-ячейки к обобщенной 1-ячейке.

иллюстрируется на рис. 8 и 9 для случая $n=2$ ячейки. На рис 8a имеем исходную $n=2$ ячейку с параметрами связи t на каждом ребре. Применив преобразование треугольник-звезда, переходим к структуре на рис 8b, где каждой связи отвечает параметр $h=\sqrt{\lambda}$ (см. (31)). После этого мы можем "склеить" двойные связи по периметру треугольника, рис 8b, по правилу (32), а внутри периметра перейти от звезды обратно к треугольнику, что приводит к ячейке на рис 8c. Здесь мы имеем структуру типа рис. 7, и задача сводится к рассмотрению внутреннего треугольника, имеющего уже порядок $n=1$, к которому в любой момент можно присоединить имеющиеся "хвосты" по правилу (33). Отметим здесь ту характерную особенность, что связи на внутреннем треугольнике на рис. 8c, в отличие от исходного положения, рис. 8a, уже не эквивалентны. Внутри треугольника сохранились связи с параметром t, однако, по внешнему периметру, из-за операции склейки, связи изменились и равны теперь $h^2=\lambda$.

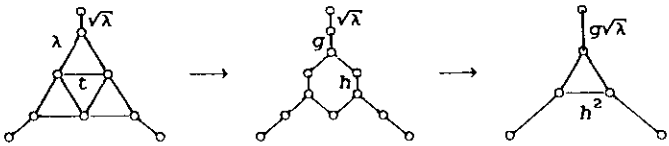

Рис. 9. Редукция обобщенной 1-ячейки к обобщенной 0-ячейке.

Процесс дальнейшей редукции показан на рис. 9 и состоит из тех же операций, что и на первых этапах преобразований. В конечном итоге задача приводится к простому треугольнику с "хвостами", рис. 9c. Можно сделать и следующий шаг и через преобразование звезда-треугольник перейти к звезде.

Нетрудно видеть, что подобная схема работает и для ячейки любого уровня n, которая последовательными трансформациями с понижением порядка может быть сведена к уровню $n=0$, или (если добавить еще шаг) к обобщенной звезде. По мере редукции вся информация накапливается в "хвостах", а возникающие при трансформациях звезда-треугольник нормировочные множители генерируют параметр R_n (см. (19)), т. е. статистическую сумму изолированной ячейки. Отметим, что возникающие здесь рекурсионные соотношения несколько более сложны, чем это видно в графических иллюстрациях, в связи с тем, что по мере итераций от периферии и углов ячейки распространяются внутрь видоизмененные связи (влияние склейки на периметре) и приходится иметь дело с несимметричными элементарными треугольниками.

Изложенная здесь техника редукции позволяет провести вычисление параметров полиномов $(P_{123})_n$ для нескольких первых значений n аналитически. По этой схеме для $n=1$ легко получаем результат (22б). В следующем порядке, $n=2$, в терминах R_0 и λ_0, см. (21б), находим:

$$R_2=R_0^6(1+3\lambda_0^3+3\lambda_0^5+\lambda_0^6)\ , \qquad \lambda_2 R_2=R_0^6\lambda^3(1+3\lambda_0+\lambda_0^2+3\lambda_0^3)\ . \tag{34}$$

В случае $n=3$ довольно громоздкие вычисления дают

$$R_3 = R_0^{10}(1+6\lambda_0^3+9\lambda_0^5+10\lambda_0^6+12\lambda_0^7+15\lambda_0^8+15\lambda_0^9+6\lambda_0^{10})\ ,$$
$$\lambda_3 R_3 = R_0^{10}\lambda^4(1+6\lambda_0+6\lambda_0^2+12\lambda_0^3+17\lambda_0^4+14\lambda_0^5+8\lambda_0^6)\ . \tag{35}$$

В более высоких порядках аналитические вычисления не целесообразны и следует переходить к численным расчетам.

3. *Компьютерные вычисления.* При рекурсионных вычислениях параметров R_n и λ_n на компьютере общая схема остается такой же, как в подробно описанных низших порядках по n, за исключением некоторых деталей. Так, с точки зрения экономии количества арифметических операций, и во избежание потери точности, удобно осуществить преобразования к (*)-сопряженным параметрам на стадии звезд, см. рис. 8 и 9, то есть удобно использовать параметры h_i^*, где

$$h_i^* = \frac{(1-h_i)}{(1+h_i)}\ , \quad h_i = \frac{(1-h_i^*)}{(1+h_i^*)}\ . \tag{36}$$

При этом, при моделировании несимметричного полинома

$$P_{123} = \alpha_0 + \alpha_1\sigma_2\sigma_3 + \alpha_2\sigma_3\sigma_1 + \alpha_3\sigma_1\sigma_2 \tag{37}$$

через эффективный треугольник с параметрами t_1, t_2, t_3 (см. (23))или эквивалентную ему звезду (см. (25)) с параметрами h_1, h_2, h_3 (см. (24)) оказывается полезным ввести преобразование параметров α_j:

$$D_i = \frac{\alpha_0\alpha_i + \alpha_j\alpha_k - 2\sqrt{\alpha_0\alpha_1\alpha_2\alpha_3}}{\alpha_0\alpha_i - \alpha_j\alpha_k} \qquad (i,\ j,\ k \text{ все различны}). \tag{38}$$

Если полином (37) получается из треугольника, то $D_i = D_i(t_1, t_2, t_3)$, и при этом

$$h_i^* = D_i(t_1, t_2, t_3)\ , \tag{39}$$

причем оказывается, что преобразование (39) совпадает со своим обратным (самодуально), и мы имеем в то же время

$$t_1 = D_1(h_1^*, h_2^*, h_3^*) \tag{40}$$

Один цикл вычислений заключается при этом в повторении преобразования (39) n_T раз, для каждого элементарного треугольника для данной ячейки, где n_T – число этих треугольников на ячейке. Тем самым мы приходим к звездам (см. рис 8b) в терминах (*)-сопряженных параметров. Затем осуществляется склейка ребер по периметру и перераспределения ребер в новые (*)-звезды. Включением обратного преобразования (40), переводящего звезды в треугольники, цикл завершается. В результате одного цикла происходит редукция обобщенной треугольной n-ячейки к ячейке $(n-1)$-го порядка. Процесс редукции продолжается, пока не получится 0-ячейка. Параметр λ_n при этом формируется за счет "хвостов", возникающих в каждом цикле (см. рис. 8 и 9). Независимо на первом этапе каждого цикла появляются нормировочные множители (см. R_{123} в (25)), из которых формируется статсумма ячейки R_n. Таким образом, для различных значений температуры kT/ε и параметра $t=\mathrm{th}(b)$, $b=\varepsilon/kT$, можно вычислить значения R_n и λ_n, для решетки n- го порядка и по формулам (15) и (17) получить теплоемкость.

Результаты вычислений теплоемкости C и коррелятора λ_n для различных значений n приведены на рис. 10 и 11. Алгоритм был реализован на языке QuickBASIC, версия фирмы Microsoft. Расчет графиков при n=22 занимает около 10 мин времени персонального компьютера типа PC AT. Время вычислений возрастает пропорционально n^3. В таблице приведены также значения критической температуры $(T_c)_n$, полученные путем численного решения уравнения $\lambda_n(T_c)=1/3$, см. (18). Физическое обсуждение результатов проводится в следующем разделе.

4. *Фазовый переход и поведение теплоемкости во всей области температур.* Поведение теплоемкости в зависимости от температуры для ряда n-решеток показано на рис. 10. На графиках видно, что для каждой решетки при соответствующей температуре $(T_c)_n$ у теплоемкости имеется сингулярный пик . Этот пик отвечает фазовому переходу второго рода на глобальной n-решетке. Отметим, сингулярности в самих точках перехода имеют логарифмический характер, как это следует из общих аналитических результатов для моделей рассматриваемого типа [3,4].

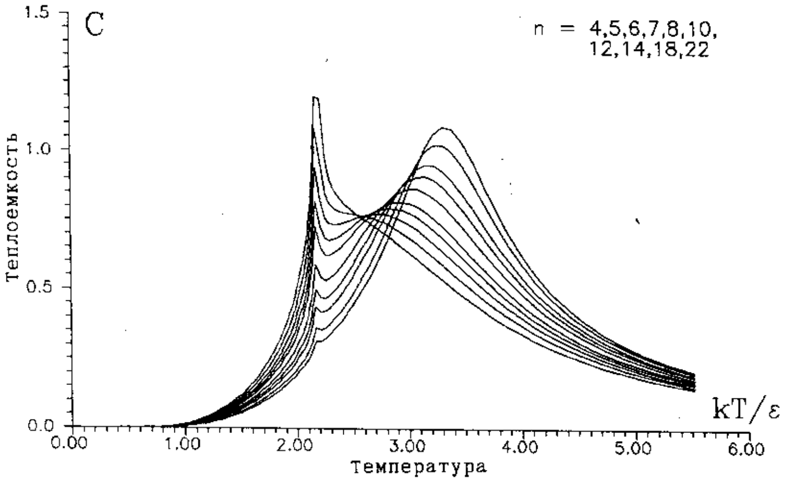

Рис.10. Теплоемкость в расчете на один спин для глобальной решетки n- го уровня.

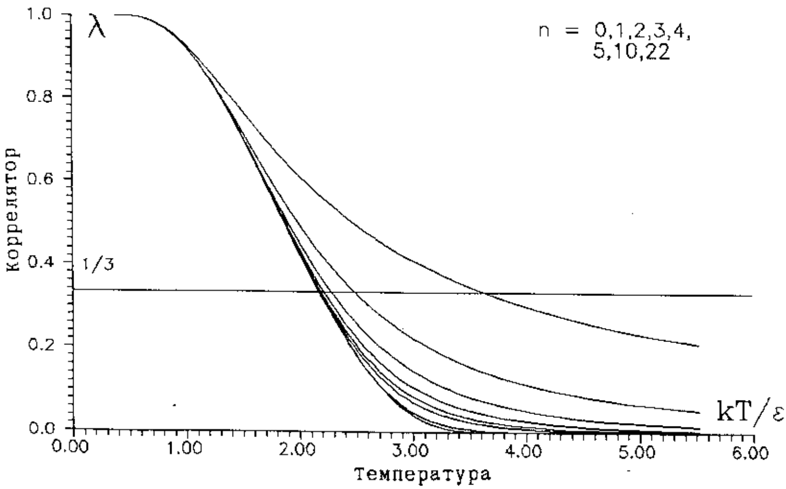

Рис. 11. Зависимость коррелятора угловых спинов $\lambda_n=(\langle\sigma_1\sigma_2\rangle)_n$ от температуры для n-ячейки при различных n. Точка пересечения коррелятора λ_n и горизонтального уровня 1/3 определяет температуру фазового перехода на глобальной n-решетке.

При малых n поведение качественно близко к хорошо известному плавному поведению C для обычной решетки (n=0). Однако, начиная примерно с $n = 6$, проявляются быстро растущие с ростом n отличия. Как видно из рис. 10, при больших n критическая область становится аномально узкой[3]. Кроме того, при больших n наблюдается хорошо

Таблица. Значения критической температуры при различных уровнях решетки n

n	$(kT_c/\varepsilon)_n$	n	$(kT_c/\varepsilon)_n$	n	$(kT_c/\varepsilon)_n$
0	3.640956907	8	2.172176108	16	2.171607613
1	2.485339738	9	2.171844416	17	2.171607352
2	2.279408177	10	2.171705332	18	2.171607247
3	2.214188448	11	2.171647497	19	2.171607206
4	2.189333928	12	2.171623634	20	2.171607189
5	2.179123888	13	2.171613857	21	2.171607183
6	2.174803611	14	2.171609875	22	2.171607180
7	2.172960608	15	2.171608263	23	2.171607179

заметный пик справа от критической точки. Мы интерпретируем этот пик как назревающий фазовый переход (квазипереход) в отдельных n-ячейках. В самом деле, n-ячейки представляют собой конечные фрагменты простой треугольной решетки. Можно предположить, что при больших числах n спины внутри ячейки начинают слабее чувствовать наличие границы и во внутренней области ячейки устанавливаются корреляции, напоминающие корреляции на бесконечной простой треугольной решетке. При понижении температуры происходит смена в режиме корреляций от слабых к сильным. На бесконечной простой решетке это проявилось бы как фазовый переход. Такая интерпретация подтверждается близостью температуры квазиперехода (отвечающей конечному пику в С) при максимальном рассчитанном значении n=22 к

---

[3] Заметим, что такой же эффект наблюдается и для декорированных решеток с фрактальной структурой элементарной ячейки [5].

температуре перехода $(T_c)_{n=0}$ простой бесконечной треугольной решетки, см. рис 10 и таблицу.

С другой стороны, мы знаем, что настоящий фазовый переход на глобальной декорированной решетке происходит, когда коррелятор угловых спинов на изолированной ячейке $\lambda_n = (\langle\sigma_1\sigma_2\rangle)_n$ достигает величины 1/3 (это следует из общих аналитическмх результатов для моделей рассматриваемого типа [3]). Численные значения обезразмеренных критических температур $(kT_c/\varepsilon)_n$ представлены в таблице. Любопытно, что при $n \to \infty$ последовательность $(kT_c/\varepsilon)_n$ стремится, видимо, к конечному значению в районе 2,171607... .

Поведение коррелятора λ_n в зависимости от температуры для различных n представлено на рис. 11. Как видно из графиков, в области конечных правых пиков у теплоемкости корреляторы малы и достигают значения 1/3 при более низких температурах, где и осуществляется фазовый переход на глобальной решетке. Запаздывание возрастания коррелятора λ_n по мере понижения T по сравнению с предполагаемой сменой режима в корреляциях внутри ячейки следует, видимо, связывать с геометрией ячейки.

При такой интерпретации мы можем предположить, в свою очередь, что в фазовом переходе на глобальной решетке в точке $(T_c)_n$ участвуют уже не отдельные спины, а "целиком" довольно сильно упорядоченные декорированные ячейки. Это приводит к эффективному уменьшению степеней свободы и подавлению критических флуктуаций, что может служить физическим объяснением аномально узкой критической области при больших n. Для более детального изучения вопроса было бы интересно исследовать температурную зависимость корреляторов между различными точками как для изолированной ячейки, так и для глобальной решетки. Не исключено, что системы с подобными свойствами у теплоемкости, которые изучены здесь на основе точных аналитических решений, могут встречаться в экспериментальных исследованиях магнетиков со сложной структурой [8]. Проявления таких свойств можно ожидать, видимо, вообще в любых системах из слабо связанных подсистем со многими внутренними степенями свободы. В частности, двумерность пространства, вероятно, не играет здесь определяющей роли и подобные эффекты могут, по-видимому, проявляться и в трехмерных системах.

Авторы выражают благодарность К.И. Гроздеву, Е.И. Корнилову, И. Мертиг, Н. М. Плакиде, В. Б. Приезжеву, В. Салейде, Р. Хайну за обсуждение и полезные замечания.

Литература

1. McCoy B. M., Wu T. T. - *The Two-Dimensional Ising Model*, Harward U. Press, Cambridge, Mass., 1973.

2. Syosi I. - *Transformation of Ising Models*, In: *Phase Transitions and Critical Phenomena, vol.I.*, C. Domb and M. S. Green, eds., Academic Press, London,1972, p. 269-329.

3. Plechko V. N. - *Grassmann Path-Integral Solution for a Class of Triangular Type Decorated Ising Models*, Physica A, 1988, 152, p. 51-97.

4. Плечко В. Н. - *Фермионный функциональный интеграл в двумерных изинговских моделях на декорированных решетках*, В тр. "*IV международный симпозиум по избранным проблемам статистической механики*", ОИЯИ, Д-17-87-477, Дубна, 1987, стр. 291-303.

5. Plechko V. N. - *Critical Point of 2D Ising Models with Fractal-Type Structure of Elementary Cell*, In: "*V International Symposium on Selected Problems in Statistical Mechanics, Abstracts*". JINR, D17-89-535, Dubna, 1989, p. 53.

6. Wannier G.H. - *Rev. Mod. Phys.*, 1945, 17, p. 50.

7. Бэкстер Р. - *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, М., 1985.

8. Givord D., ed. - *Proceedings of the International Conference on Magnetism, Paris, July 25-29, 1988*, - J. de Phys., 1988, 49, parts I-III.

Рукопись поступила в издательский отдел
29 января 1990 года.