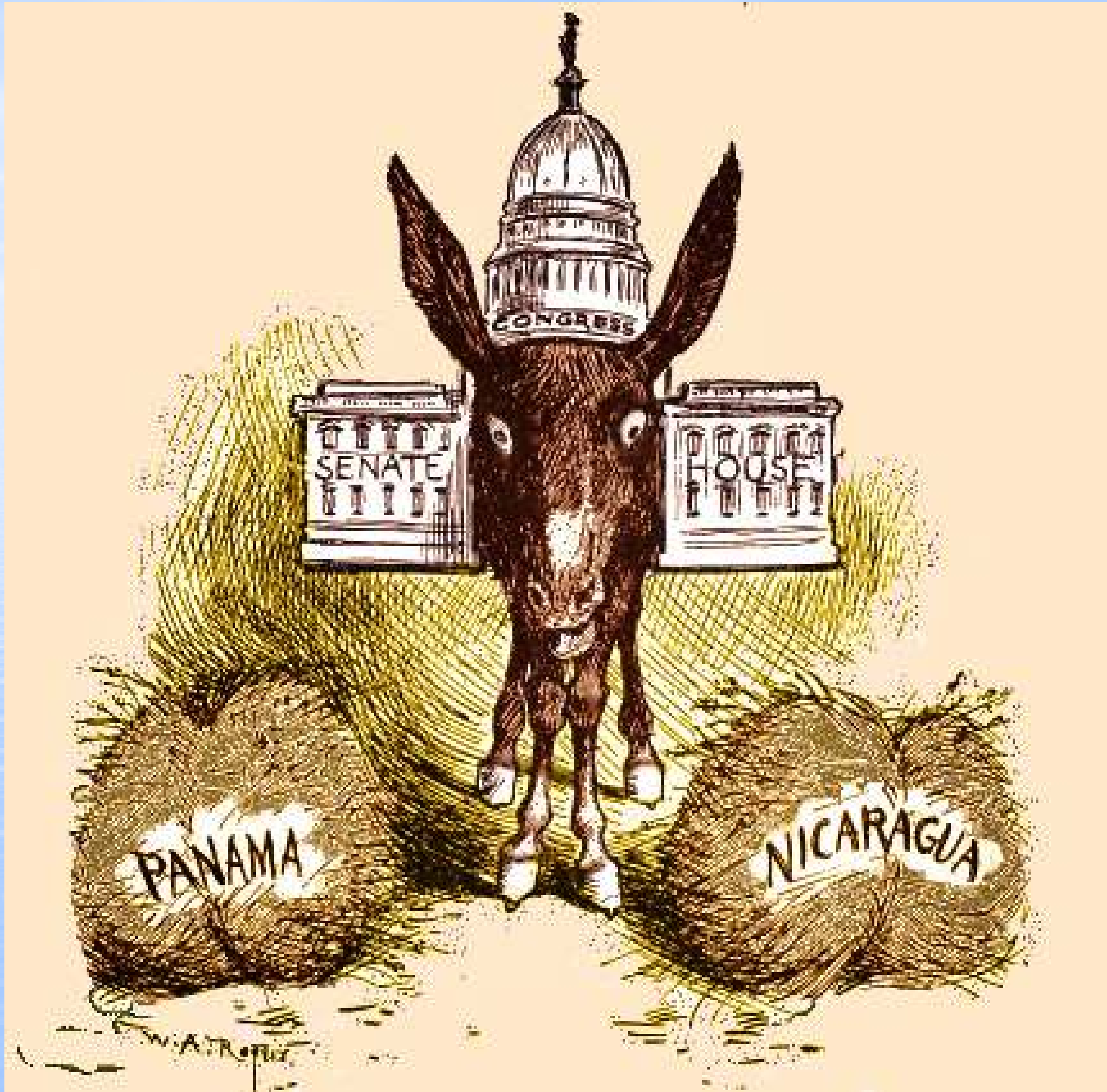
Фрустрации и фазовые переходы в магнитных системах

Ф.А. Кассан-Оглы, *Б.Н. Филиппов*

Институт физики металлов УрО РАН,
Екатеринбург, Россия



CONGRESS
SENATE
HOUSE
PANAMA
NICARAGUA
W.A. Rogers

Аннотация

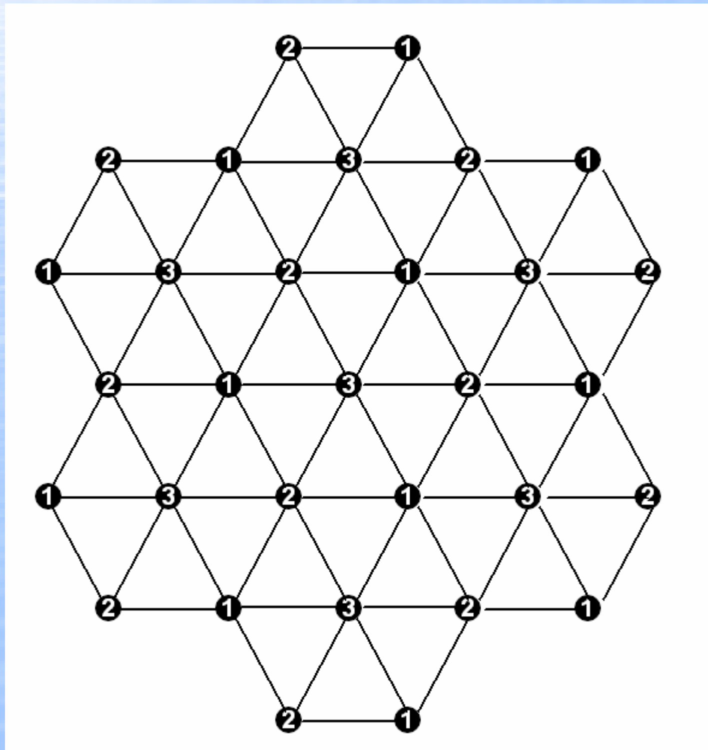
- Методом трансфер-матрицы Крамерса-Ванные получены точные аналитические решения для спин-спиновых корреляционных функций в одномерных 3-вершинной [1] , 4-вершинной стандартной модели Поттса [2] и модели Изинга [3,4] с учетом взаимодействия как между ближайшими соседями *J* так и между вторыми соседями *J'*. С помощью этих корреляционных функций исследованы явления возникновения и исчезновения фрустраций в зависимости от знаков и величины отношения взаимодействий $|J'/J|$.
- На основе точных решений [5-7] для двумерной модели Изинга исследованы фрустрации на треугольной, гексагональной, квадратной и кагоме решетках.

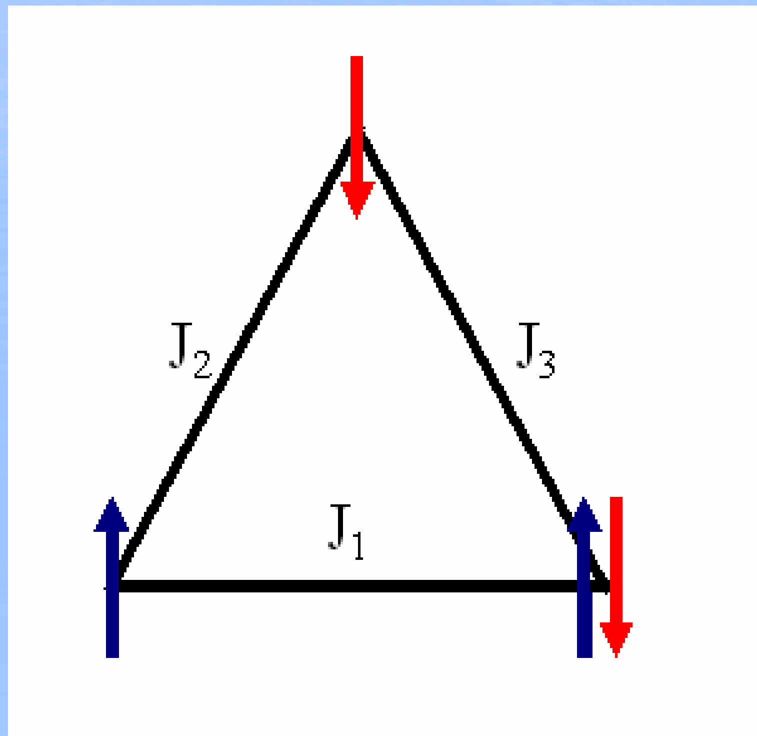
Введение

Фрустрации в физике это явление невозможности одновременной минимизации всех слагаемых гамильтониана в присутствие конкурирующих взаимодействий.

В магнетизм термин «фрустрация» введен Жераром Тулузом в 1977.

Обычно приводят пример антиферромагнитной модели Изинга на треугольной решетке с учетом взаимодействия только ближайших соседей. В ней невозможно расположить направления спинов так, чтобы каждая пара соседей была бы антипараллельна.





Мифы о фрустрациях

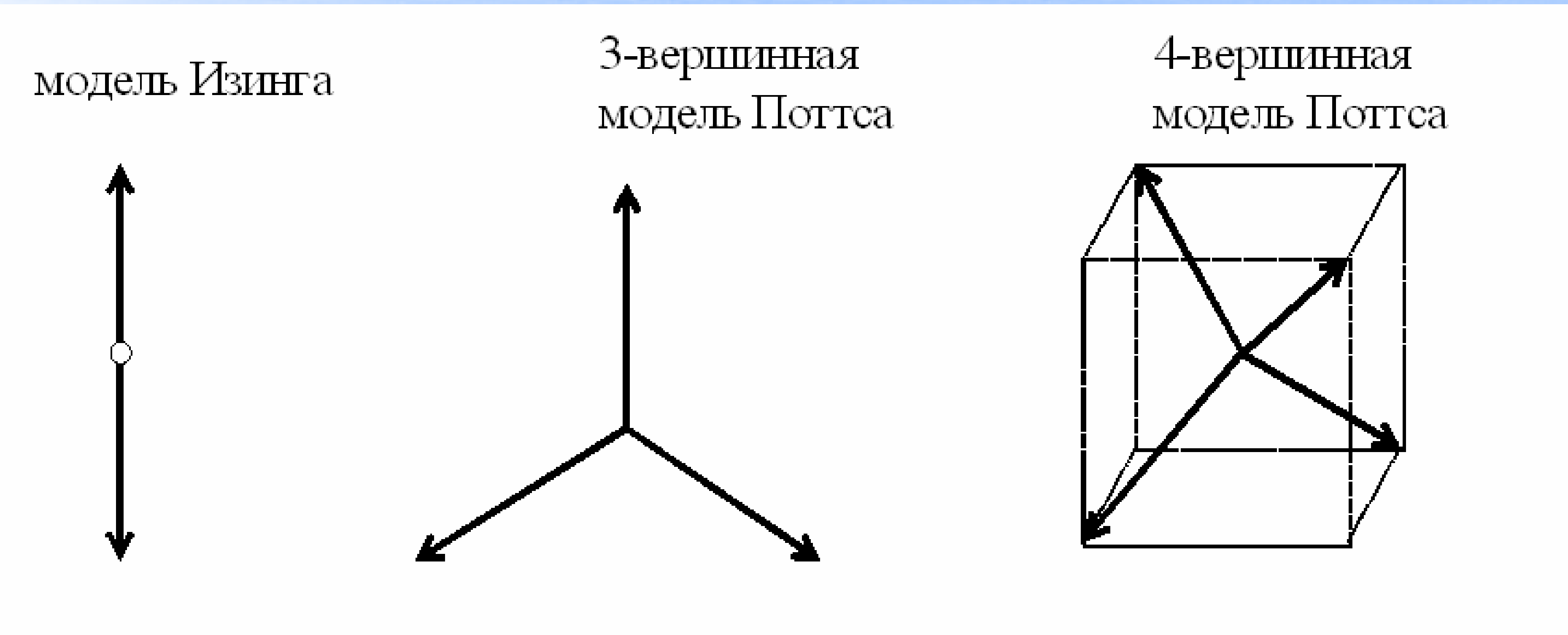
- Миф первый. Фрустраций в одномерных решетках не бывает.
- Миф второй. Для существования фрустраций необходимо иметь в решетке треугольный мотив, как в треугольной, кагоме или ГЦК.
- Миф третий. Фрустрации могут существовать только при наличие конкурирующих взаимодействий.
- Миф четвертый. Фрустрации существуют, если при $T \to 0$ энтропия не равна нулю.

Какие же условия необходимы для существования фрустраций и в каких решетках они могут существовать? Каковы самые общие качественные и количественные критерии ?

Основные формулы и модели

$$H = -\frac{J}{2}\sum_{x,x'}(\boldsymbol{\sigma}_x \boldsymbol{\sigma}_{x'}) \qquad Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\frac{H}{kT}}$$

$$K(q) = \frac{1}{N}\sum_{x,x'}\sum_{\{\sigma\}} e^{-iqa(x-x')}\cdot e^{-\frac{H}{kT}}(\boldsymbol{\sigma}_x \boldsymbol{\sigma}_{x'})/Z$$

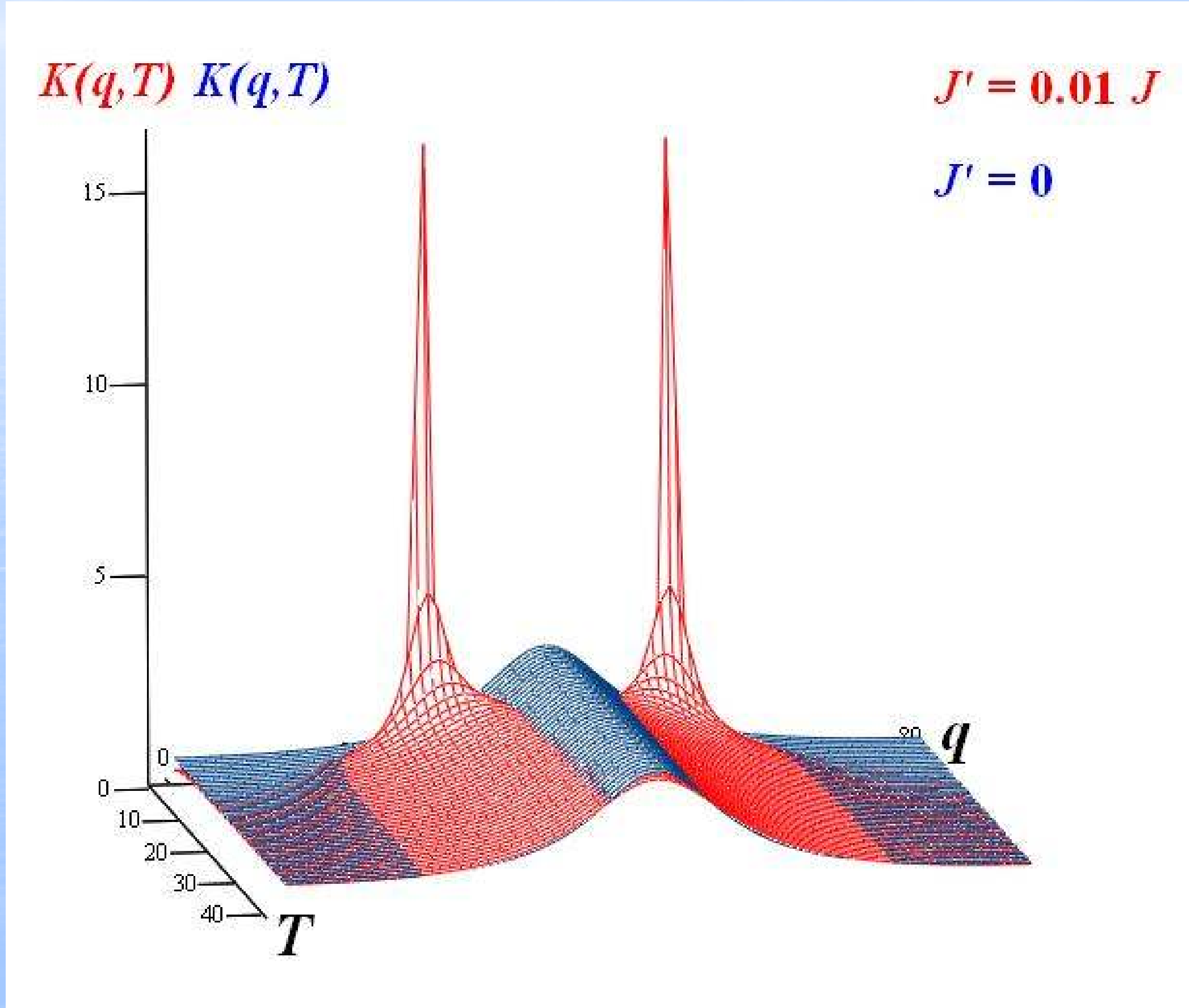


3-вершинная и 4-вершинная модели Поттса (результаты)

- В 3-вершинной антиферромагнитной модели Поттса: любое, даже сколь угодно малое положительное взаимодействие между вторыми соседями уничтожает фрустрации и порождает фазовый переход с удвоением периода трансляций; любое, даже сколь угодно малое отрицательное взаимодействие вторых соседей уничтожает фрустрации и порождает фазовый переход с *утроением* периода трансляций.
- В 4-вершинной антиферромагнитной модели Поттса: любое, даже сколь угодно малое положительное взаимодействие вторых соседей уничтожает фрустрации и порождает фазовый переход с удвоением периода трансляций. В отличие от 3-вершинной модели, любое, даже сколь угодно большое отрицательное взаимодействие вторых соседей не может уничтожить фрустрации и породить фазовый переход в 4-вершинной модели. Для этого требуется учесть еще взаимодействие и третьих соседей.
- В 3- и 4-вершинных ферромагнитных моделях фрустраций не существует, а существует фазовый переход при $T \to 0$. В этом случае возникает новое явление. Относительно сильное взаимодействие вторых соседей $|J'/J| > 0.5$ порождает фрустрации и подавляет фазовый переход при $T \to 0$.

3-вершинная модель Поттса

при нулевом взаимодействии ближайших соседей корфункция– ограниченная плавная кривая (фрустрации), но при сколь угодно слабом взаимодействии корфункция превращается в δ-функции при $T \to 0$ (фазовый переход)

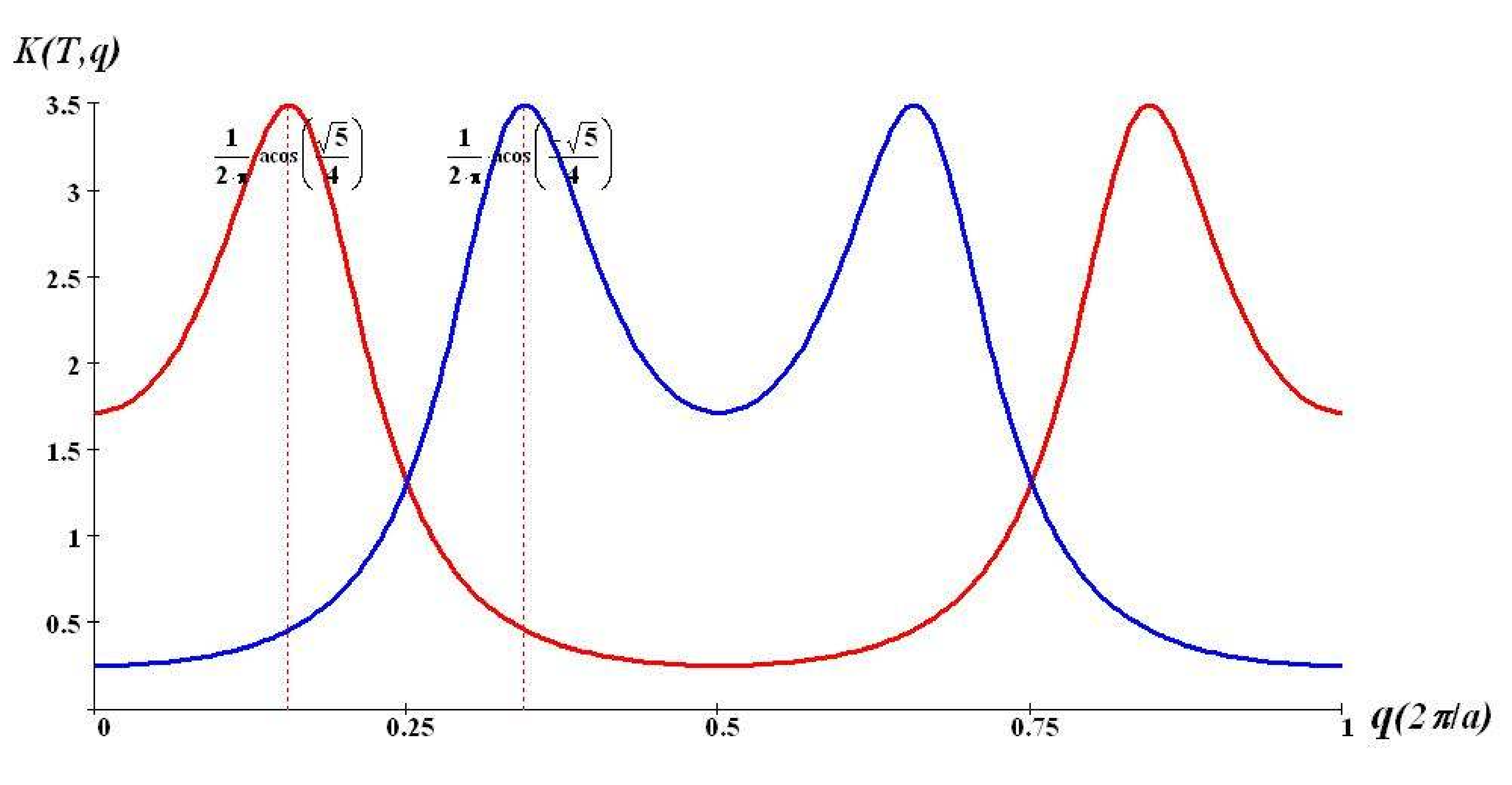


Одномерная модель Изинга (результаты)

- Для любых знаков и величин взаимодействий фрустраций не существует, а существует фазовый переход при $T \to 0$: при $J>0$ и $J'>0$ — с сохранением периода трансляций для любых значений $|J'/J|$; при $J<0$ и $J'>0$ — с удвоением периода для любых значений $|J'/J|$; при $J>0$ и $J'<0$ — с сохранением периода для $|J'/J|<0.5$ и с учетверением периода для $|J'/J|>0.5$; при $J<0$ и $J'<0$ — с удвоением периода для $|J'/J|<0.5$ и с учетверением периода трансляций для $|J'/J|>0.5$.
- Исключение составляют два особых значения взаимодействий, а именно, $J>0$ и $J'<0$ для значения $|J'/J|=0.5$, а также $J<0$ и $J'<0$ для значения $|J'/J|=0.5$, при которых возникают фрустрации, а фазового перехода не существует.

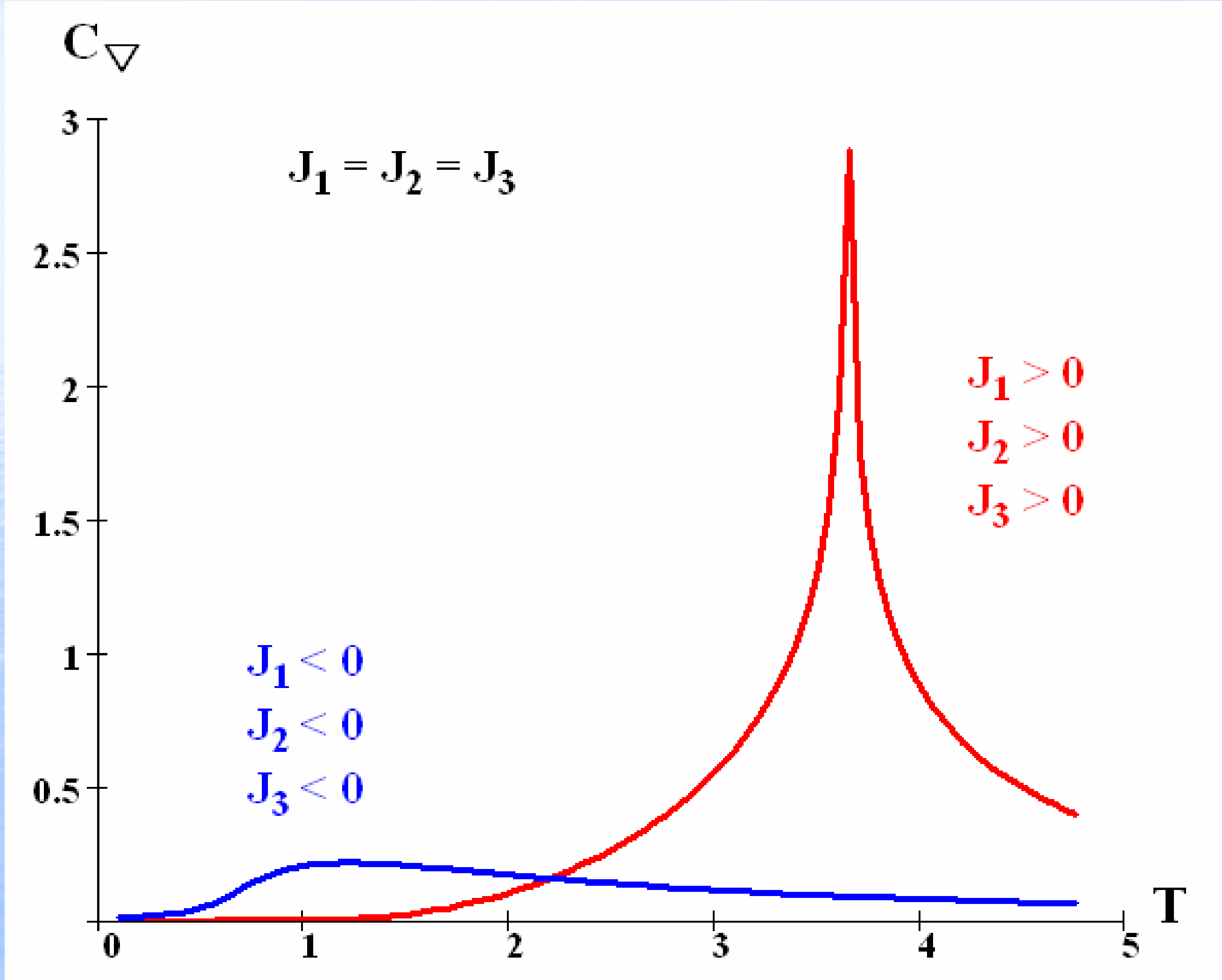
Одномерная модель Изинга (фрустрации)

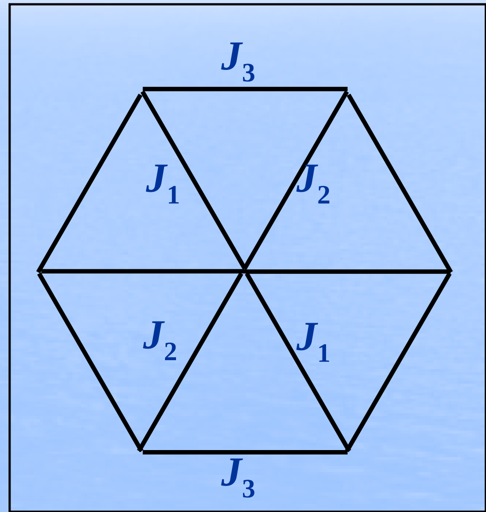
Корфункция при T=0: $|J'/J|$=0.5; $J>0$ $J'<0$, $J>0$ $J'<0$.



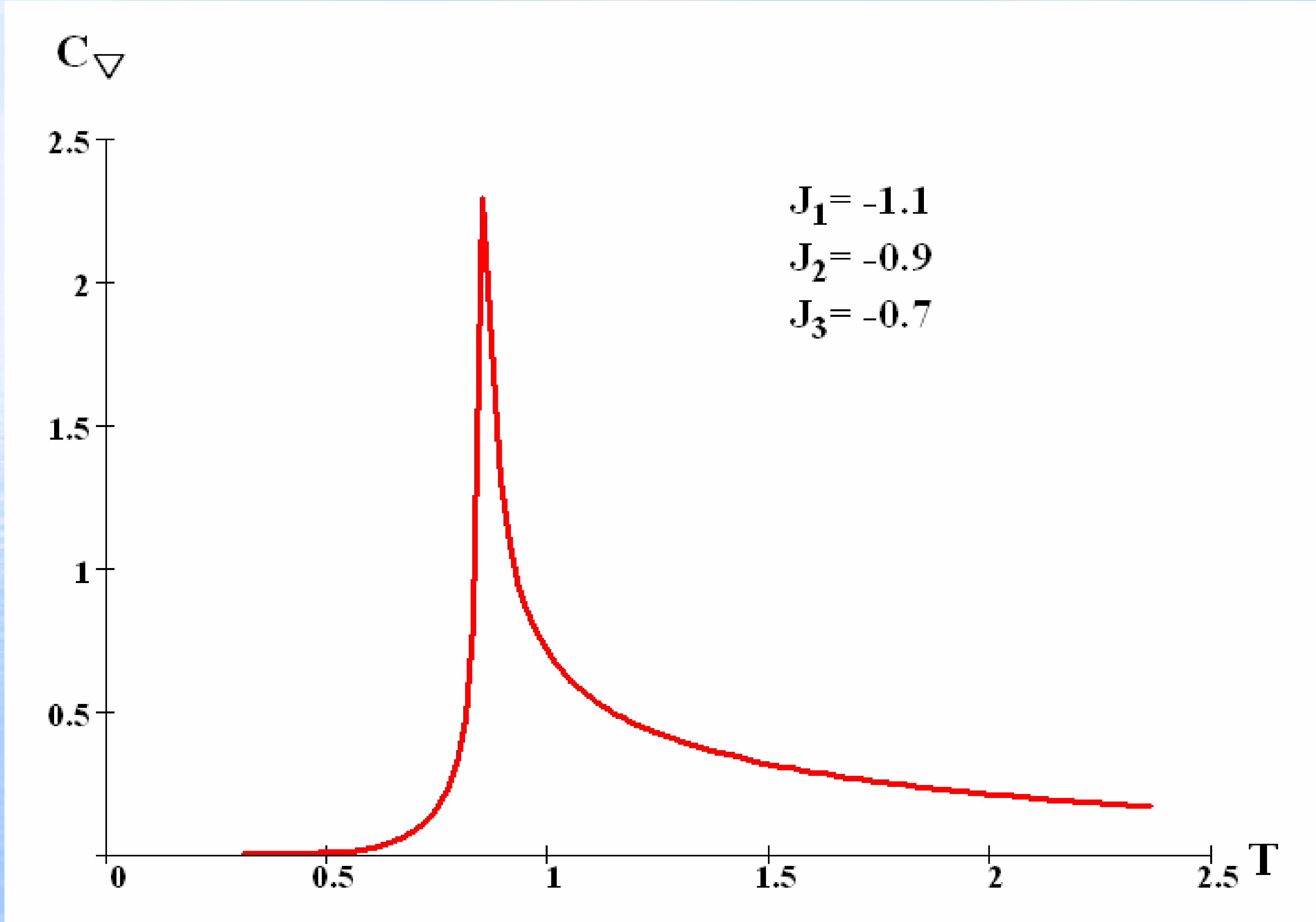
Антиферромагнитная двумерная модель Изинга
(треугольная решетка, результаты)

- Фрустрации существуют только при определенном соотношении взаимодействий: $J_1 = J_2 \geq J_3$ (в частности, при $J_1 = J_2 = J_3$).





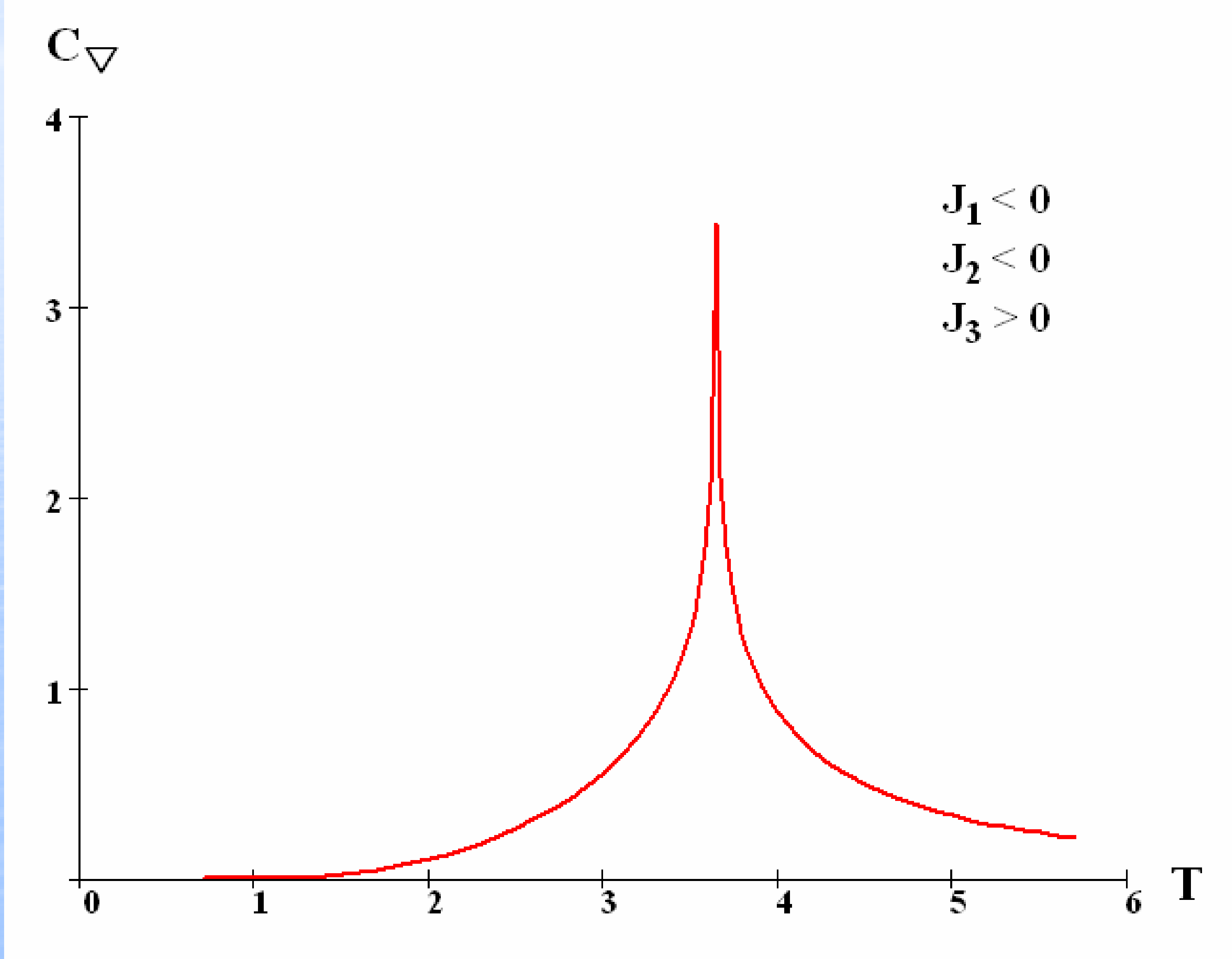
При любом отклонении от этого соотношения фрустрации исчезают и возникает фазовый переход.



Двумерная модель Изинга (треугольная решетка)

заменим один из обменных параметров на положительный.

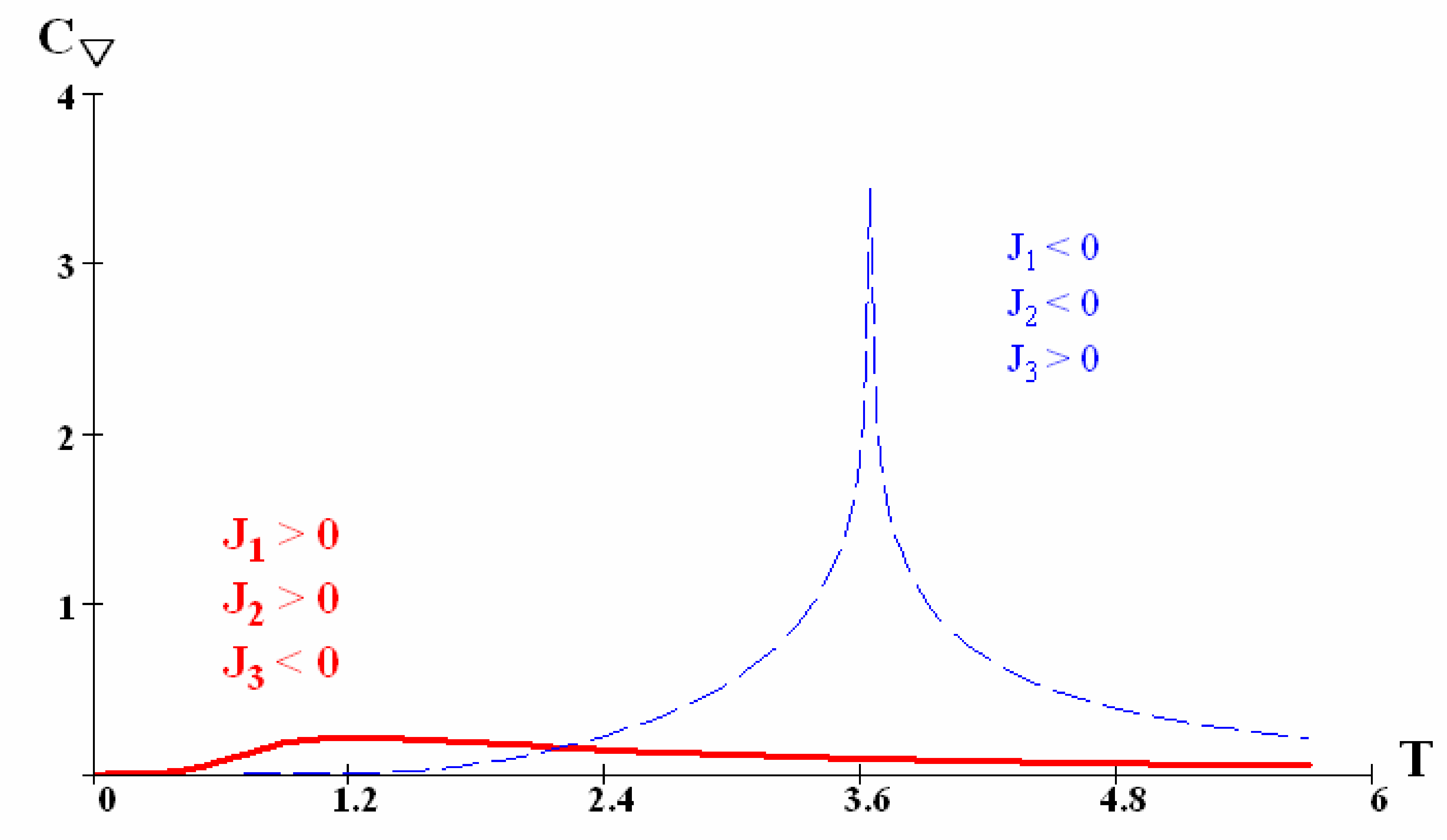
Что будет? Фрустрации или переход?



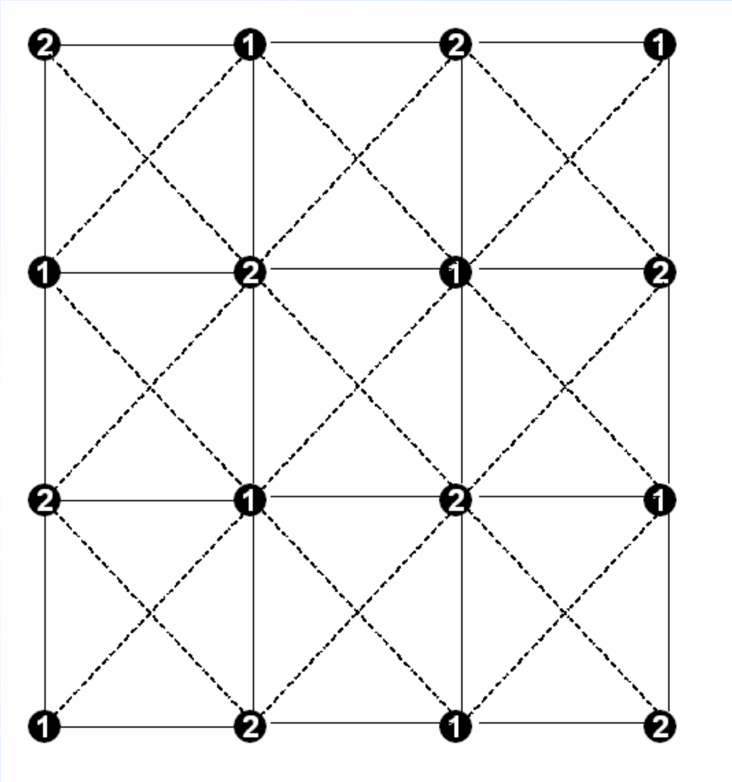
Двумерная модель Изинга (треугольная решетка)

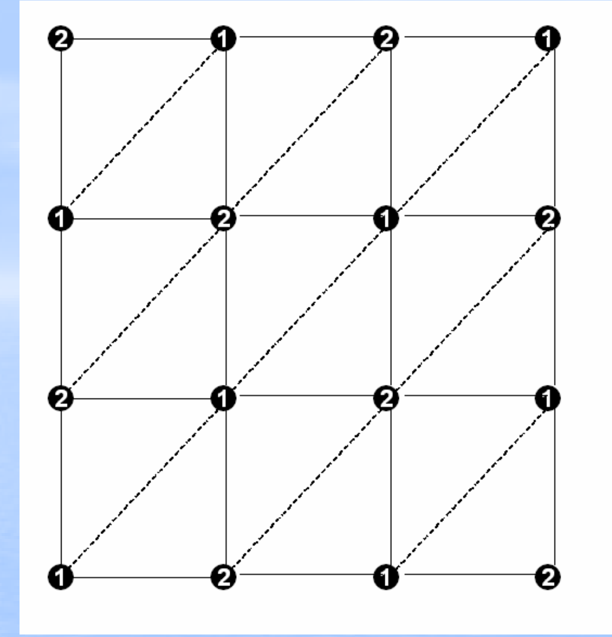
заменим два из обменных параметров на положительные.

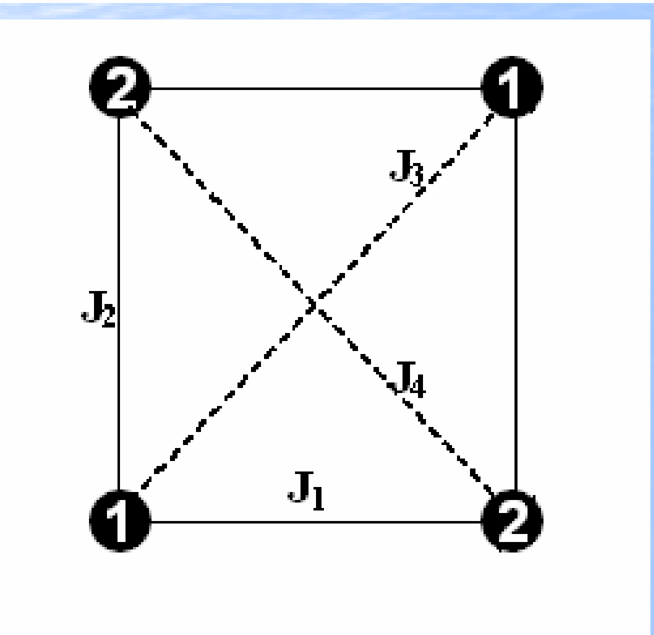
Что будет? Фрустрации или переход?



Двумерная модель Изинга (квадратная решетка)







Фрустрации существуют только при определенных соотношениях взаимодействий: $J_1 + J_2 = 2\,J_3 + 2\,J_4$ (при $J_1 = J_2 < 0$, $J_3 < 0$, $J_4 < 0$),

или $J_1 = J_3 + J_4$ (при $J_1 > J_2$, $J_1 < 0$, $J_2 < 0$, $J_3 < 0$, $J_4 < 0$).

При отклонениях от этих соотношений фрустрации исчезают и возникает фазовый переход.

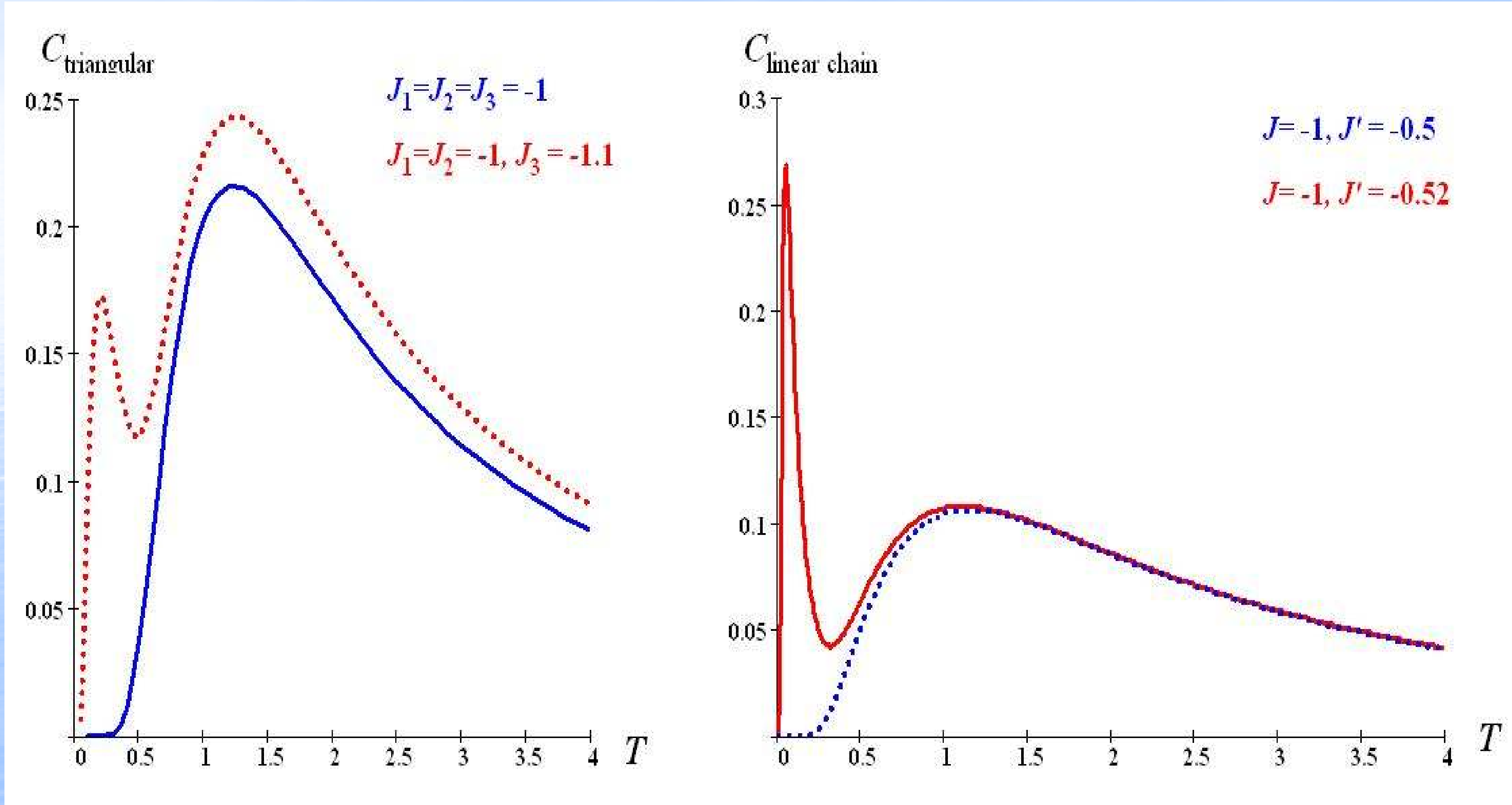
Критерии

- Критерий существования фазового перехода и отсутствия фрустраций на языке конфигураций – все энергетически выгодные конфигурации должны обладать трансляционной инвариантностью. Если среди энергетически выгодных конфигураций существуют также и конфигурации, не обладающие трансляционной инвариантностью, то возникают фрустрации, и фазовый переход отсутствует.
- Математический критерий существования фазового перехода и отсутствия фрустраций – стремление по температуре хотя бы одного из собственных значений трансфер-матрицы Крамерса-Ваннье к максимальному собственному значению. Если все собственные значения трансфер-матрицы меньше максимального собственного значения, то существуют фрустрации, корреляционная функция не вырождается в дельта-функцию, дальний порядок не возникает, и фазового перехода не происходит.

Выводы

- Фрустрации и фазовые переходы – это взаимоисключающие явления.
- Фрустрации могут существовать в решетках любой размерности.
- Фрустрации могут существовать или отсутствовать в одной и той же решетке, но для разных моделей.
- Фрустрации могут существовать не только при наличие конкурирующих взаимодействий, но и при наличие одного взаимодействия.
- Существование фрустраций – это ограниченность модели. Они возникают только при специфических численных соотношениях параметров взаимодействия. В реальности всегда существует либо отклонение от такого соотношения, либо найдется дополнительное взаимодействие, которое уничтожит фрустрации, а по величине оно может быть *сколь угодно малым*.

Полезное физическое следствие нашего исследования –
вблизи точки фрустраций теплоёмкость расщепляется и в 1D и в 2D случае



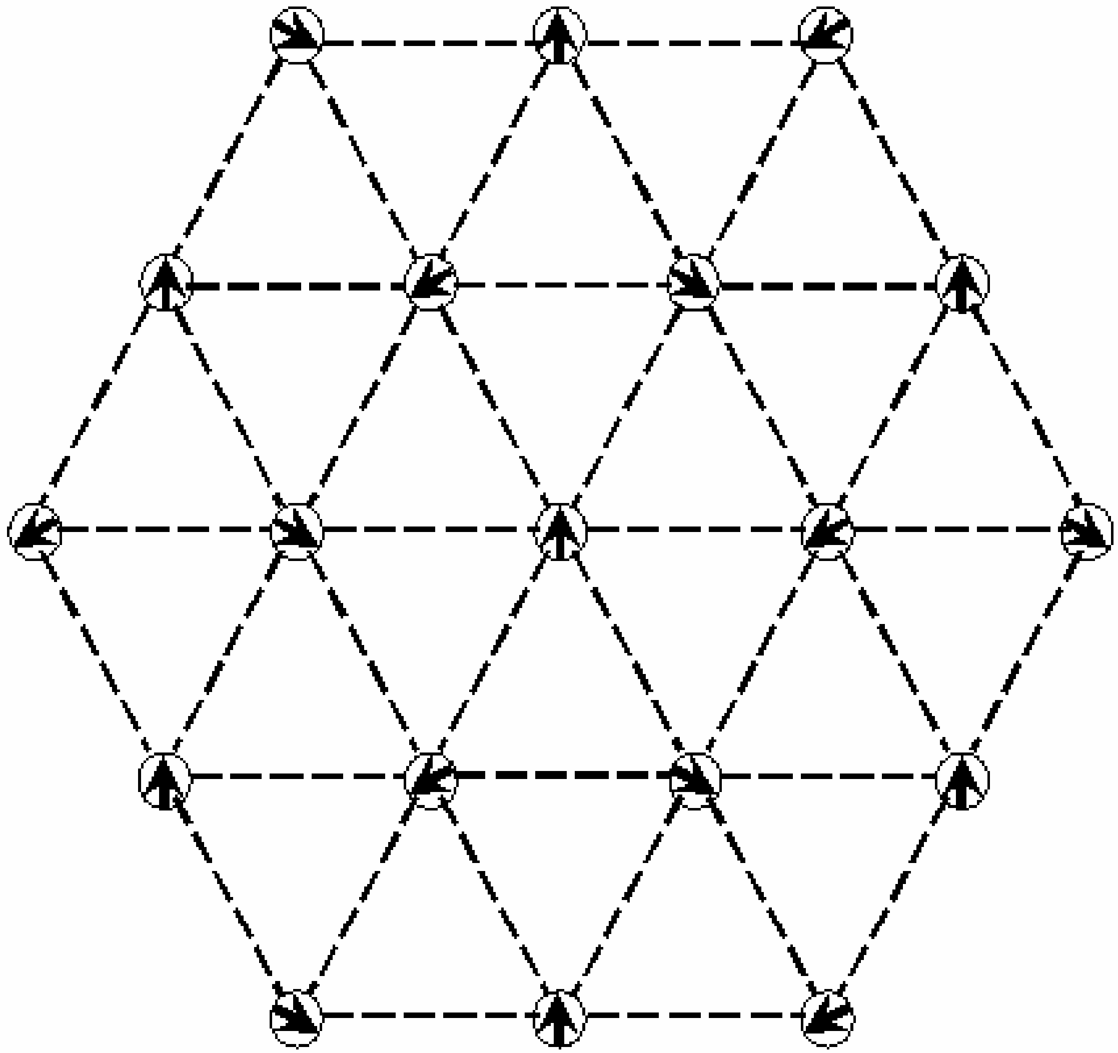


Рис.2.
Пример отсутствия фрустраций на треугольной решетке
(антиферромагнитная модель Поттса).

Литература

- [1]. Kassan-Ogly F.A., Filippov B.N., *Phase Transitions*, 77, 261 (2004).
- [2]. Кассан-Оглы Ф.А. и Филиппов Б.Н., *ФММ*. **95**, 12 (2003).
- [3]. Stephenson J., *Canad. J. Phys*., 48, 1724, (1970).
- [4]. Кассан-Оглы Ф.А., Найш В.Е., Сагарадзе И.В. *ФММ*. **96**, 39 (2003).
- [5]. Onsager L. *Phys. Rev*. **65**, 117 (1944).
- [6]. Houtappel R.M.F. *Physica* **16**, 425 (1950).
- [7]. Kanô K., Naya S., *Prog. Theor. Phys*., v.**10**, p. 158 (1953)
- [8]. Gerard Toulouse, *Commun. Phys.*2, 115 (1977).

Благодарю за внимание