

УДК 538.42.001; 548.713.021

ЗАДАЧА РАССЕЯНИЯ НА ИЗИНГОВСКОЙ ЦЕПОЧКЕ
С ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ВТОРЫХ СОСЕДЕЙФ. А. Кассан-Оглы, Е. В. Кормильцев,
В. Е. Найш, И. В. Сагардзе

Получено выражение для интенсивности рассеяния на изинговской цепочке с учетом взаимодействия ближайших и следующих за ближайшими соседями (модель BNNNI). Для моделирования эффектов, связанных с тенденцией к образованию несоизмерных фаз, исследовано поведение брэгговских рефлексов и диффузного рассеяния как функций температуры, волнового вектора и параметра s — отношения взаимодействия вторых соседей к взаимодействию первых. В качестве вспомогательных задач модифицированным методом трансфер-матрицы Крамерса—Ванье найдены точные выражения для статистической суммы и статической восприимчивости.

Первая попытка точного решения одномерной задачи Изинга с учетом взаимодействия вторых соседей принадлежит Стефенсону [1], который с помощью остроумного приема, предложенного Добсоном [2], свел рассматриваемую задачу к другой, в которой вторые соседи играют роль первых, а взаимодействие первых соседей сводится к действию некоторого «поля». В [1] получено выражение для $\chi(0)$ — нулевой статической восприимчивости в двух формальных моделях: ANNNI (alternate next-nearest-neighbour interactions) и BNNNI (both next-nearest-neighbour interactions). Первая модель соответствует учету не всех взаимодействий вторых соседей, а через одного, а вторая — всех. В терминологии Стефенсона наша задача относится к модели BNNNI. Следует еще отметить, что в дальнейшем аббревиатуру ANNNI стали употреблять для обозначения совсем другой, а именно трехмерной магнитной изинговской модели, в которой взаимодействие спинов внутри плоскости ферромагнитно и действует только между ближайшими соседями, а взаимодействие между плоскостями учитывается как между ближайшими, так и между вторыми соседями (см., например, обзор [3]), причем под А стали подразумевать «anisotropic» или «axial». Тогда формально одномерную модель BNNNI можно рассматривать как предельный случай трехмерной модели ANNNI (анизотропной), когда взаимодействие внутри плоскости бесконечно большое (много больше межплоскостного), а «спин» плоскости ведет себя как единое целое. Это обстоятельство дает основание думать, что формальное точное решение одномерной изинговской задачи BNNNI (нахождение статсуммы и статической восприимчивости, т. е. Фурье-образа пространственного коррелятора) может быть очень полезным для анализа свойств некоторых трехмерных физических систем.

Конкретно в задаче статьи входит: 1) получение точного выражения для статсуммы в модели BNNNI; 2) получение точного выражения для восприимчивости $\chi(q)$ в этой модели; 3) подробное исследование функции $\chi(q)$, в том числе с применением численного анализа и получения наглядного графического материала; 4) формулировка задачи о рассеянии излучения на трехмерном колеблющемся кристалле с жесткими протяженными объектами (плоскостями) в виде одномерной изинговской задачи BNNNI; 5) интерпретация формально полученных результатов исследования

функции $\chi(q)$ на языке брэгговского и диффузного рассеяния и их температурной эволюции. Анализ же экспериментальных ситуаций на конкретных примерах далеко не прост, он должен проводиться не формально, а с учетом многих экспериментальных и теоретических деталей, а потому выходит за рамки данной статьи.

Расчет статистической суммы

Одномерная задача Изинга с учетом взаимодействия вторых соседей определяется гамильтонианом

$$\mathcal{H} = -I \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - I' \sum_i \sigma_i \sigma_{i+2} + \sum_i h_i \sigma_i, \quad (1)$$

где операторы σ_i принимают независимо для разных узлов i значения $+1$ и -1 , и введено «локальное поле» h_i ; как будет видно из дальнейшего, — это удобный расчетный прием. Действуя в духе метода трансфер-матрицы Крамерса—Ваннье, изложенного, например, в книге Хуанга [4], введем трансфер-оператор

$$\exp \{ J \sigma_i \sigma_{i+1} + J \sigma_{i+1} \sigma_{i+2} + J' \sigma_i \sigma_{i+2} + J' \sigma_{i+1} \sigma_{i+3} - k_{i+1} \sigma_{i+1} - k_{i+2} \sigma_{i+2} \}, \quad (2)$$

где $J = I/k_B T$, $k_i = h_i/k_B T$. Трансфер-матрица этого оператора $\langle \sigma_i \sigma_{i+1} | W | \sigma_{i+2} \sigma_{i+3} \rangle$ имеет размеры 4×4 и в явном виде зависит от двух узельных индексов

$$= \begin{pmatrix} e^{2J+2J'-k_{i+1}-k_{i+2}} & e^{2J-k_{i+1}-k_{i+2}} & e^{-2J'-k_{i+1}+k_{i+2}} & e^{-k_{i+1}+k_{i+2}} \\ e^{-2J+k_{i+1}-k_{i+2}} & e^{-2J+2J'+k_{i+1}-k_{i+2}} & e^{k_{i+1}+k_{i+2}} & e^{-2J'+k_{i+1}+k_{i+2}} \\ e^{-2J'+k_{i+1}-k_{i+2}} & e^{k_{i+1}-k_{i+2}} & e^{2J+2J'+k_{i+1}+k_{i+2}} & e^{2J+k_{i+1}+k_{i+2}} \\ e^{-k_{i+1}-k_{i+2}} & e^{-2J'-k_{i+1}-k_{i+2}} & e^{-2J-k_{i+1}+k_{i+2}} & e^{-2J+2J'-k_{i+1}+k_{i+2}} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

Статистическая сумма $Z = \text{Sp } e^{-\beta \mathcal{H}}$ при наложении циклических условий запишется в терминах трансфер-матрицы в виде

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \langle \sigma_1 \sigma_2 | W | \sigma_3 \sigma_4 \rangle \langle \sigma_3 \sigma_4 | W | \sigma_5 \sigma_6 \rangle \dots \langle \sigma_{N-1} \sigma_N | W | \sigma_1 \sigma_2 \rangle. \quad (4)$$

Для дальнейшего удобно представить матрицу $W_{i+1, i+2}$ в виде произведения двух матриц, каждая из которых зависит только от одного узельного индекса

$$W_{i+1, i+2} = V_{i+1} V_{i+2}, \quad (5)$$

$$V_i = \begin{pmatrix} e^{J+J'-k_i} & e^{J-J'-k_i} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-J-J'+k_i} & e^{-J+J'+k_i} \\ 0 & 0 & e^{J+J'+k_i} & e^{J-J'+k_i} \\ e^{-J-J'-k_i} & e^{-J+J'-k_i} & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Следовательно,

$$Z = \text{Sp} \{ V_1 V_2 \dots V_N \}. \quad (7)$$

Заметим, кстати, что в частном случае, когда все локальные поля одинаковы, матрица V_i совпадает с приводившейся в работе [5].

В нулевом «поле», т. е. при $h_i = 0$, все матрицы V_i от узельного индекса не зависят и совпадают, а статсумма равна

$$Z_0 = \text{Sp} \{ P^N \} = \lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N + \lambda_4^N, \quad (8)$$

где $P = T^{-1} V T$, λ_i — собственные значения матрицы P

$$\lambda_{1,2} = \text{ch } J (\text{ch } J' + \text{sh } J') \pm \sqrt{\text{ch}^2 J (\text{ch } J' - \text{sh } J')^2 + 4 \text{sh}^2 J \text{ch } J' \text{sh } J'},$$

$$\lambda_{3,4} = \text{sh } J (\text{ch } J' + \text{sh } J') \pm \sqrt{\text{sh}^2 J (\text{ch } J' - \text{sh } J')^2 + 4 \text{ch}^2 J \text{ch } J' \text{sh } J'}, \quad (9)$$

а T — матрица, диагонализующая матрицу V

$$T = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} t_{11} - t_{12} & t_{12} + t_{22} & t_{33} - t_{34} & t_{34} + t_{44} \\ t_{11} + t_{12} & t_{12} - t_{22} & t_{33} + t_{34} & t_{34} - t_{44} \\ t_{11} - t_{12} & t_{12} + t_{22} & -t_{33} + t_{34} & -t_{34} - t_{44} \\ t_{11} + t_{12} & t_{12} - t_{22} & -t_{33} - t_{34} & -t_{34} + t_{44} \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Матрица T может быть представлена в виде произведения $T = T_1 T_2$

$$T_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad T_2 = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} & 0 & 0 \\ -t_{12} & t_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_{33} & t_{34} \\ 0 & 0 & -t_{34} & t_{44} \end{pmatrix}, \quad (11)$$

и это облегчает процедуру нахождения искомой матрицы T . Здесь

$$\begin{aligned} t_{11} &= \frac{\text{sh } J \text{ sh } J'}{\sqrt{\Delta_1}}, & t_{12} &= \frac{\text{ch } J \text{ ch } J' - \lambda_1}{\sqrt{\Delta_1}}, \\ t_{22} &= \frac{\text{sh } J \text{ ch } J'}{\sqrt{\Delta_1}}, & \Delta_1 &= \text{sh}^2 J \text{ sh } J' \text{ ch } J' + (\text{ch } J \text{ ch } J' - \lambda_1)^2, \\ t_{33} &= \frac{\text{ch } J \text{ sh } J'}{\sqrt{\Delta_3}}, & t_{34} &= \frac{\text{sh } J \text{ ch } J' - \lambda_3}{\sqrt{\Delta_3}}, \\ t_{44} &= \frac{\text{ch } J \text{ ch } J'}{\sqrt{\Delta_3}}, & \Delta_3 &= \text{ch}^2 J \text{ sh } J' \text{ ch } J' + (\text{sh } J \text{ ch } J - \lambda_3)^2. \end{aligned} \quad (12)$$

Интенсивность рассеяния

Наша основная физическая задача состоит в вычислении среднестатистической интенсивности рассеяния $I_{hkl}(T)$ (например, рентгеновских лучей) на трехмерном кристалле, в картине тепловых колебаний которого большую роль играют жесткие протяженные объекты с размерностью $\nu=1$ или 2, т. е. атомные цепочки или плоскости, сохраняющие свою когерентность в процессе колебаний. Экспериментальными доказательствами их существования являются картины диффузного рассеяния, полученные к настоящему времени на большом числе разных кристаллов и содержащие протяженные «светящиеся» дифракционные образы дополнительной размерности $3 - \nu$, т. е. «светящиеся» плоскости или стержни, на монолауграммах или электрограммах. Обычное хаотическое тепловое колебание атомов дает в дифракционной картине известный тепловой фон, а здесь мы рассматриваем только ту часть теплового рассеяния, которая связана с когерентными объектами. Физическая постановка такой задачи, модель и математический аппарат ее рассмотрения, а также обзор экспериментальных данных по этому вопросу подробно описаны, например, в наших работах [6, 7] или более ранних. Если рассматривать одно кристаллографическое семейство объектов-плоскостей, а колебания их утрированно описывать перескоками из «левого» положения в «правое», т. е. моделью Изинга, то формально каждому объекту приписывается изинговский оператор σ_i , а последовательность объектов-плоскостей образует тогда одномерную изинговскую цепочку. Решение подобной дифракционной задачи с учетом взаимодействия только ближайших соседей, т. е. вычисление среднестатистической интенсивности и интерпретация результатов, выполнено нами в [5, 6], где большую роль играло также нахождение кристаллических структур новых фаз, возникающих в результате спонтанных структурных фазовых переходов из исходной фазы при конденсации таких кооперативных колебаний, т. е. при $T \rightarrow T_c$ или $T \rightarrow 0$. Учет взаимодействия со вторыми соседями в такой задаче естественно

расширяет физические возможности как для самой температурной зависимости $I_{hkl}(T)$, так и для новых фаз.

Итак, общая формула для интенсивности рассеяния на изинговской цепочке имеет вид

$$I(q) = \frac{f^2}{N} \sum_{nn'} e^{-iqa(n-n')} \sum_{\{\sigma\}} e^{-iq\Delta(\sigma_n - \sigma_{n'})} e^{-\beta\mathcal{H}} / \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta\mathcal{H}}, \quad (13)$$

где f — атомный форм-фактор, a — постоянная решетки, Δ — амплитуда колебаний, \mathcal{H} — изинговский гамильтониан (1). Заметим сразу, что объединение экспонент в числителе (13) делает задачу об интенсивности формально эквивалентной изинговской задаче с чисто мнимым и локальным магнитным полем. Используя трансфер-матрицу V_i из (6), можно записать интенсивность в виде

$$I(q) = \frac{f^2}{N} \sum_{nn'} e^{-iqa(n-n')} X_{nn'} / Z_0, \quad (14)$$

где

$$X_{nn'} = \text{Sp} \{ V V V \dots V_n \dots V_{n'} \dots V \}. \quad (15)$$

Здесь на месте n стоит матрица V_n с «полем» $k_n = -iq\Delta$, на месте n' стоит матрица $V_{n'}$ с «полем» $k_{n'} = iq\Delta$, а на всех остальных местах стоят матрицы V без «поля». Используя диагоналирующую матрицу T из (10), перепишем $X_{nn'}$ в виде

$$X_{nn'} = \text{Sp} \{ P P P \dots P_n \dots P_{n'} \dots P \}, \quad (16)$$

где

$$P_n = T^{-1} V_n T = \begin{pmatrix} \lambda_1 \cos q\Delta & 0 & \lambda_{13} i \sin q\Delta & \lambda_{14} i \sin q\Delta \\ 0 & \lambda_2 \cos q\Delta & \lambda_{23} i \sin q\Delta & \lambda_{24} i \sin q\Delta \\ \lambda_{31} i \sin q\Delta & \lambda_{32} i \sin q\Delta & \lambda_3 \cos q\Delta & 0 \\ \lambda_{41} i \sin q\Delta & \lambda_{42} i \sin q\Delta & 0 & \lambda_4 \cos q\Delta \end{pmatrix}, \quad (17)$$

$$P_{n'} = P_n^*. \quad (18)$$

Выпишем здесь только те величины λ_{ij} в (17), которые понадобятся в дальнейшем, а именно

$$\begin{aligned} \lambda_{13} &= -t_{22} t_{33} \text{ch } J \text{ ch } J' + t_{12} t_{33} \text{sh } J \text{ ch } J' + t_{22} t_{34} \text{sh } J \text{ sh } J' - t_{12} t_{34} \text{ch } J \text{ sh } J', \\ \lambda_{31} &= -t_{11} t_{44} \text{sh } J \text{ ch } J' + t_{11} t_{34} \text{ch } J \text{ ch } J' + t_{12} t_{44} \text{ch } J \text{ sh } J' - t_{12} t_{34} \text{sh } J \text{ sh } J', \\ \lambda_{14} &= -t_{22} t_{34} \text{ch } J \text{ ch } J' + t_{12} t_{34} \text{sh } J \text{ ch } J' - t_{22} t_{44} \text{sh } J \text{ sh } J' + t_{12} t_{44} \text{ch } J \text{ sh } J', \\ \lambda_{41} &= -t_{11} t_{34} \text{sh } J \text{ ch } J' - t_{11} t_{33} \text{ch } J \text{ ch } J' + t_{12} t_{34} \text{ch } J \text{ sh } J' + t_{12} t_{33} \text{sh } J \text{ sh } J'. \end{aligned} \quad (19)$$

Используя явный вид матриц P , P_n и $P_{n'}$, после довольно громоздких преобразований получим

$$\begin{aligned} I(q) &= \frac{f^2}{N} \cos^2 q\Delta \sum_{nn'} e^{-iqa(n-n')} + f^2 \sin^2 q\Delta \sum_k e^{-iqak} \times \\ &\times \{ \lambda_3^{k-1} \lambda_1^{N-k-1} \lambda_{13} \lambda_{31} + \lambda_4^{k-1} \lambda_1^{N-k-1} \lambda_{14} \lambda_{41} + \lambda_3^{k-1} \lambda_2^{N-k-1} \lambda_{23} \lambda_{32} + \lambda_4^{k-1} \lambda_2^{N-k-1} \lambda_{24} \lambda_{42} + \\ &+ \lambda_1^{k-1} \lambda_3^{N-k-1} \lambda_{31} \lambda_{13} + \lambda_2^{k-1} \lambda_3^{N-k-1} \lambda_{32} \lambda_{23} + \lambda_1^{k-1} \lambda_4^{N-k-1} \lambda_{41} \lambda_{14} + \\ &+ \lambda_2^{k-1} \lambda_4^{N-k-1} \lambda_{42} \lambda_{24} \} / (\lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N + \lambda_4^N). \end{aligned} \quad (20)$$

Можно показать, что при любых значениях параметров задачи λ_1 является наибольшим собственным значением матрицы P . Тогда в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$)

$$\begin{aligned} I(q) &= f^2 \cos^2 q\Delta \delta(q-b) + f^2 \sin^2 q\Delta \times \\ &\times \frac{(1 - \tilde{\lambda}_3^2)(1 - \tilde{\lambda}_4^2)(1 - \tilde{\lambda}_3 \tilde{\lambda}_4)(1 + \tilde{\lambda}_3 \tilde{\lambda}_4)^{-1}}{(1 + \tilde{\lambda}_3^2)(1 + \tilde{\lambda}_4^2) - 2[\tilde{\lambda}_3(1 + \tilde{\lambda}_4^2) + \tilde{\lambda}_4(1 + \tilde{\lambda}_3^2)] \cos qa + 4\tilde{\lambda}_3^2 \tilde{\lambda}_4^2 \cos^2 qa}, \end{aligned} \quad (21)$$

где для краткости обозначено $\tilde{\lambda}_{3,4} = \lambda_{3,4} / \lambda_1$.

Как видно, интенсивность рассеяния состоит из двух слагаемых: первое — это брэгговские рефлексy, модулированные множителем $\cos^2 q\Delta$, а второе — диффузное рассеяние. Покажем, что температурно-зависящий множитель в диффузном рассеянии совпадает с восприимчивостью $\chi(q)$, т. е. Фурье-образом пространственного коррелятора $\langle \sigma_0 \sigma_n \rangle$. Действительно, возвращаясь к выражению (13), преобразуя множитель $e^{-iq\Delta(\sigma_n - \sigma_{n'})}$ по формуле Эйлера и используя тривиальные соотношения

$$\cos(q\Delta\sigma_n) = \cos q\Delta, \quad \sin(q\Delta\sigma_n) = \sigma_n \sin q\Delta, \quad (22)$$

получим

$$I(q) = \frac{f^2}{N} \cos^2 q\Delta \sum_{nn'} e^{-iq\Delta(n-n')} + \frac{f^2}{N} \sin^2 q\Delta \sum_{nn'} \sum_{\{\sigma\}} e^{-iq\Delta(n-n')} \sigma_n \sigma_{n'} e^{-\beta\mathcal{E}} \left| \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta\mathcal{E}} \right|. \quad (23)$$

Видно, что множитель при $f^2 \sin^2 q\Delta$ есть $\langle \sigma_q \sigma_{-q} \rangle$, т. е. $\chi(q)$. Здесь следует отметить, что непосредственно восприимчивость для рассматриваемой задачи вычислялась в [8] на основе результатов Стефенсона [1] и было получено выражение, пригодное в ограниченной области значений параметров задачи; однако из-за расчетных ошибок и неоправданного распространения границ применимости авторы работы [8] получили ряд неправильных результатов.

Анализ функции $\chi(q)$ и диффузного рассеяния

За исключением плавно меняющегося в обратном пространстве множителя $f^2 \sin^2 q\Delta$, анализ поведения диффузного рассеяния сводится к исследованию $\chi(q)$ как функции температуры и параметров взаимодействия. Целесообразно выразить $\chi(q)$ через более удобные переменные (своеобразные «параметры порядка») $t = \text{th } J$ и $t' = \text{th } J'$

$$\chi(q) = \frac{(1+t')(1-t')^2(1-t^2) [\sqrt{(1-t')^2 + 4t^2 t'}]^{-1}}{(1+t^2)(1+t')^2 - 2t(1+t') \sqrt{(1-t')^2 + 4t^2 t'} \cos qa - 4t'(1-t^2) \cos^2 qa}. \quad (24)$$

Это общее выражение пригодно для любых комбинаций знаков параметров взаимодействия J и J' : 1) ++, 2) -+, 3) +-, 4) --. Первые два из них не представляют особого интереса, так как это случаи конкурирующих взаимодействий J и J' . Качественно поведение диффузного рассеяния для них определяется взаимодействием ближайших соседей, и лишь концентрирование диффузного рассеяния при понижении температуры происходит быстрее при учете J' .

Наиболее интересны варианты «3» и «4». Это случаи конкурирующих взаимодействий. Введем параметр $s = J'/J$, а температуру будем измерять в единицах $|J|/k_B$. Тогда $\text{th } J = \pm \text{th}(1/T)$, $\text{th } J' = \text{th}(s/T)$, знаки «+» и «-» относятся соответственно к вариантам «3» и «4». Таким образом, $\chi(q)$ становится зависящей от двух новых параметров T и s .

Исследование восприимчивости

Температурное поведение функции $\chi(q)$ описывает фактически происходящее при изменении температуры пространственное перераспределение интенсивности внутри светящегося стержня. При этом формируются наблюдающиеся на экспериментальных дифракционных картинах диффузные максимумы на стержнях, способные с изменением T менять как свою пиковую интенсивность и остроту, так и координату местонахождения на стержне. Общее исследование функции $\chi(q)$ приводит к следующим результатам. Во-первых, при $T = \infty$ зарождаются диффузные максимумы, при снижении T они растут и концентрируются, а при $T \rightarrow 0$

превращаются в δ -функции, т. е. настоящие брэгговские рефлексы новой фазы. Полученные численным анализом функции $\chi(q)$ примеры температурного поведения пиков приведены на рис. 1. Во-вторых, в зависимости от значений параметра s положение этих пиков в обратном пространстве может быть различным: как не зависящим от T (соразмерная фаза), так и зависящим (несоразмерная фаза). В-третьих, запираание волнового вектора в соразмерное значение (lock-in переход) для различных значений s происходит либо при конечной температуре, либо при $T=0$. Результаты приведены на фазовой диаграмме T, s на рис. 2, где сплошными линиями изображены температуры lock-in перехода.

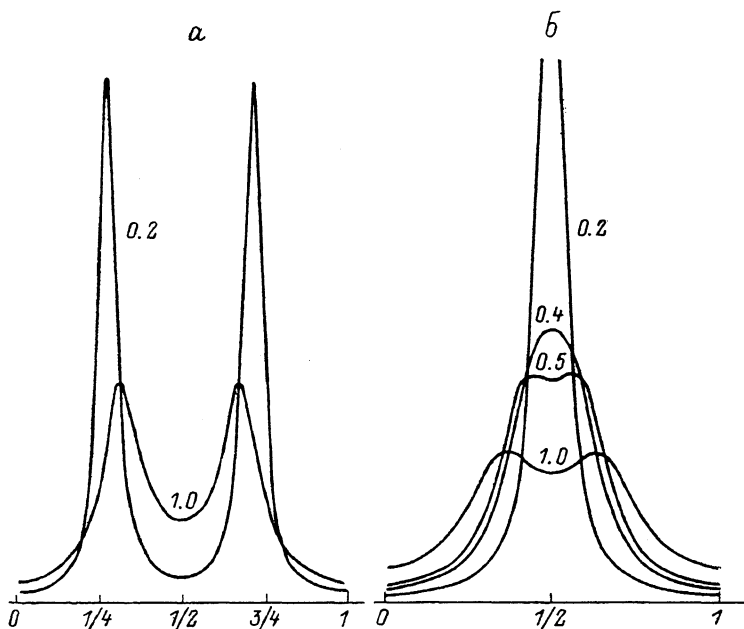


Рис. 1. Температурная эволюция формы и положения несоразмерных диффузных пиков.

Температура дана в единицах T/k_B , $s=0.6$ (а) и 0.4 (б).

Из рис. 2 видно, что в областях $0 < |s| < 0.25$, т. е. в случае относительно слабого взаимодействия вторых соседей, положение диффузного пика определяется только взаимодействием ближайших соседей и не зависит от температуры. В области $0.25 < |s| < 0.5$, т. е. при умеренной величине взаимодействия вторых соседей, конкуренция взаимодействий при высоких температурах приводит к существованию несоразмерного диффузного пика, который при понижении температуры запирается в соразмерное положение: 1 для $J > 0$ и $1/2$ для $J < 0$ (в единицах $2\pi/a$). Для сильного взаимодействия вторых соседей, т. е. при $|s| > 0.5$, при любой конечной температуре диффузный пик является несоразмерным и лишь при $T=0$ запирается в соразмерное положение, причем в одно и то же $1/4$ как при $J > 0$, так и при $J < 0$. На рис. 3 изображено движение диффузных пиков в обратном пространстве с температурой.

Отметим еще некоторые особенности температурного поведения диффузных пиков. При $-0.25 < s < 0$ пик зарождается при $T=\infty$ в положениях, уже совпадающих с брэгговскими рефлексами, и потому он не меняет своего положения. Аналогично при $0 < s < 0.25$ пик зарождается точно в середине между брэгговскими рефлексами и тоже не меняет своего положения. Для всех остальных значений s положение пика меняется с температурой, а при $T=\infty$ координата его зарождения определяется соотношением

$$\cos qa = -1/4s. \quad (25)$$

Это выражение получается из более общего выражения для $\cos qa$ (координата экстремума функции $\chi(q)$) при $T=\infty$ и соответствует классическому (высокотемпературному) выражению, известному в литературе. Например, для несоразмерной магнитной структуры соотношение (25) известно в виде $\cos \varphi = -I_1/4I_2$, где I_i — обменные интегралы с первыми и вторыми соседями.

В математическом аспекте особое внимание часто обращают на две особые точки $s = \pm 0.5$, хотя самостоятельная физическая актуальность их,

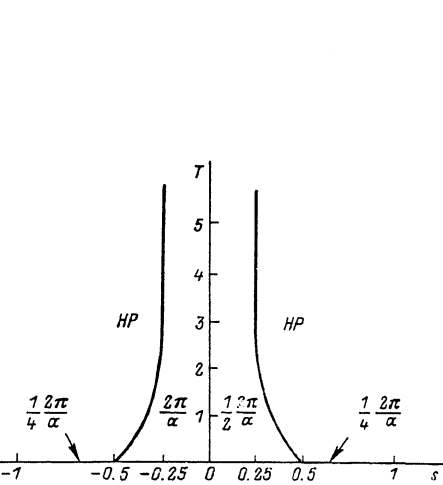


Рис. 2. Фазовая диаграмма в переменных T и $s=I'/I$.

HP — область существования несоразмерной фазы. Выражения вида $(2\pi/a)/2$ указывают координату диффузного максимума в соразмерной фазе, а также при $T=0$ для несоразмерной фазы.

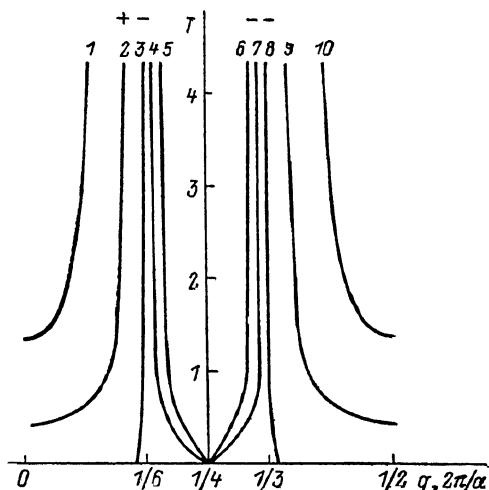


Рис. 3. Температурное перемещение диффузных максимумов для $s=I'/I = -0.3$ (1), -0.4 (2), -0.5 (3), -0.6 (4), -0.7 (5), 0.7 (6), 0.6 (7), 0.5 (8), 0.4 (9), 0.3 (10).

конечно, невелика. Прокомментируем формальные результаты, относящиеся к этим точкам. При $s=-0.5$ диффузный пик при $T=\infty$ зарождается в соразмерном положении $q=1/6$, а затем при понижении T его координата плавно стремится к иррациональному значению с $\cos qa = \sqrt{5}/4$. Аналогично для $s=0.5$ пик зарождается в точке $q=1/3$ и при $T \rightarrow 0$ стремится к иррациональному положению с $\cos qa = -\sqrt{5}/4$.

В результате в рассматриваемой модели с конкурирующими взаимодействиями при $T=0$ достигается разный дальний порядок (основное состояние) в зависимости от значения параметра s : при $-0.5 < s < 0$ «ферромагнитный», при $0 < s < 0.5$ «антиферромагнитный», при $|s| > 0.5$ структура типа $++--++--$ с учетверением ячейки. Лишь формально при $s = \pm 0.5$ достигаются истинно несоразмерные структуры; их волновые векторы близки к значениям $1/3$ и $1/6$ соответственно, но не равны им.

Список литературы

- [1] Stephenson J. // Canadian J. Phys. 1970. V. 48. P. 1724—1734.
- [2] Dobson J. F. // J. Math. Phys. 1969. V. 10. N 1. P. 40—45.
- [3] Selke W., Duxbury P. M. // Z. Phys. 1984. V. B57. N 1. P. 49—58.
- [4] Хуанг К. Стагистическая механика. М.: Мир, 1966. 520 с.
- [5] Oguchi T. // J. Phys. Soc. Jap. 1965. V. 20. N 12. P. 2236—2243.
- [6] Kassar-Ogly F. A., Naish V. E. // Acta Cryst. 1986. V. B42. N 1. P. 325—335.
- [7] Кассан-Оглы Ф. А., Найш В. Е., Сагарадзе И. В. // ФММ. 1989. Т. 67. № 3. С. 451—461.
- [8] Pires A. S. T., Silva N. P., Franco B. J. O. // Phys. St. Sol. (b). 1982. V. 114. N 1. P. K63—K66.

Институт физики металлов
УрО АН СССР
Свердловск

Поступило в Редакцию
2 декабря 1988 г.