10,05

Использование марковских цепей для анализа состояний одномерных спиновых систем

© *Д.Н. Ясинская, Ю.Д. Панов*[¶]

Уральский федеральный университет,
Екатеринбург, Россия

[¶] E-mail: yuri.panov@urfu.ru

Поступила в Редакцию 18 апреля 2024 г.
В окончательной редакции 18 апреля 2024 г.
Принята к публикации 8 мая 2024 г.

С помощью отображения на марковскую цепь выполнен анализ фрустрированных состояний одномерной цепочки Изинга, разбавленной заряженными взаимодействующими примесями двух типов. Проведена классификация и выявлено два типа марковских цепей: периодические с периодом 2 и апериодические. Фрустрированные фазы, принадлежащие разным типам цепей, обладают различными свойствами: в фазах с периодическими марковскими цепями реализуется дальнее упорядочение на одной из подрешеток, тогда как состояние второй подрешетки остается фрустрированным. Это приводит к сочетанию ненулевой остаточной энтропии и бесконечной корреляционной длины. Во фрустрированных фазах с апериодическими цепями отсутствует дальний порядок, и корреляционная длина остается конечной. Показано, что при включении магнитного поля наиболее значимому изменению структуры спиновой цепочки соответствует изменение типа марковской цепи.

Ключевые слова: марковские цепи, разбавленный изинговский магнетик, фрустрация, системы низких размерностей, основное состояние.

DOI: 10.61011/FTT.2024.07.58381.47HH

1. Введение

Одномерные спиновые модели, несмотря на свою очевидную простоту по сравнению с многомерными, обладают рядом уникальных свойств. Точные решения этих моделей закладывают основу для понимания сложного поведения реальных физических систем и занимают важное место в изучении таких явлений, как фазовые переходы в статистической физике [1]. Отсутствие или сложность формирования дальнего порядка лежит в основе необычного поведения низкоразмерных (псевдо)спиновых систем. Наличие в системе анизотропии и фрустрации приводит к наличию богатых фазовых диаграмм и к таким необычным явлениям как магнитные плато [2], квазифазы и псевдопереходы [3], а также усиление магнитокалорического эффекта [4]. Присутствие беспорядка также существенно влияет на фазовые, критические и магнитные свойства систем, и также является источником фрустрации. Наличие фрустрированных фаз при условии выполнения критерия Рохаса [5] может стать причиной такого тонкого псевдокритического явления как псевдопереходы, которые выражаются в скачкообразном изменении типа неупорядоченного состояния системы и сопровождаются резкими особенностями некоторых термодинамических функций.

Несмотря на возможность точного решения, анализ фазовых состояний одномерных систем в рамках стандартного формализма представляет собой нетривиальную задачу, особенно для состояний на границах между различными фазами. Альтернативным подходом в этом случае может служить построение отображения одномерной модели на марковскую цепь, которое ранее было использовано для анализа фрустрированных фазовых состояний разбавленной цепочки Изинга в магнитном поле [6,7], а также для модели Поттса на алмазной цепочке [8]. Такое отображение может быть построено для любой модели, статистическая сумма которой допускает представление через трансфер-матрицу, что справедливо, в частности, для различных вариантов моделей Изинга, Поттса, Блюма–Капеля и Блюма–Эмери–Гриффитса.

Одним из источников фрустрации в одномерных спиновых системах является введение примесей [7]. В данной работе мы рассматриваем разбавленную цепочку Изинга, где введены заряженные примеси двух типов. Двумерный вариант этой модели был получен и исследован ранее как атомный предел для псевдоспиновой модели купратов [9]. Основное состояние и термодинамические свойства разбавленной изинговской системы формируются под влиянием как фрустрации за счет примесей, так и конкуренции зарядового и магнитного упорядочений [10]. С помощью численного моделирования на квадратной решетке ранее было показано, что это приводит к наличию неуниверсального критического поведения [11], фазовых переходов первого рода [12], возвратных фазовых переходов [13].

Статья организована следующим образом. В разделе 2 построены и исследованы фазовые диаграммы одномерной модели Изинга с заряженными примесями в переменных „параметр обменного взаимодействия —

химический потенциал“. Также приведены концентрационные зависимости остаточной энтропии фрустрированных фаз. Раздел 3 посвящен методике отображения одномерной модели на марковскую цепь, приведены выражения для переходной матрицы, равновесного состояния и корреляционных функций. Проведен анализ свойств марковской цепи и корреляционных свойств для фрустрированных ферромагнитной и антиферромагнитной фаз. В разделе 4 осуществлена классификация типов марковских цепей в соответствии с их симметрией и корреляционными свойствами, рассмотрено влияние магнитного поля на марковские цепи. Краткие выводы сформулированы в разделе 5.

2. Фазовые диаграммы основного состояния и остаточная энтропия фрустрированных фаз

Фазовые диаграммы основного состояния, а также температурные фазовые диаграммы двумерной модели Изинга с двумя типами немагнитных примесей на квадратной решетке были рассчитаны ранее в работах [10,13] методами среднего поля и численного моделирования в нулевом магнитном поле при заданной плотности заряда немагнитных примесей n, как одного из параметров системы.

Гамильтониан одномерной разбавленной модели Изинга имеет вид

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \{\Delta S_{z,i}^2 + V S_{z,i} S_{z,i+1} + J P_{0,i} s_{z,i} s_{z,i+1} P_{0,i+1} - h P_{0,i} s_{z,i} - \mu S_{z,i}\}, \quad (1)$$

где Δ — одноузельные заряд-зарядовые корреляции, которые имеют вид одноионной анизотропии для псевдоспина $S = 1$; V — межузельное заряд-зарядовое взаимодействие; J — изинговское обменное взаимодействие спинов $s = 1/2$; h — внешнее магнитное поле; $P_{0,i} = 1 - S_{z,i}^2$ — оператор проектирования на магнитные состояния. Суммирование проводится по N узлам цепочки. С помощью химического потенциала μ на систему наложено ограничение в виде сохранения полного заряда, что можно выразить в виде фиксации плотности заряда немагнитных примесей: $n = \left\langle \sum_i S_{z,i} \right\rangle / N$. Подробное обсуждение формы заряд-зарядового взаимодействия в рамках псевдоспинового формализма было дано в работе[12]. Таким образом, каждый узел цепочки может находиться либо в одном из зарядовых состояний (бесспиновые состояния псевдоспина $S_z = \pm 1$ для положительно и отрицательно заряженных примесей соответственно), либо в одном из спиновых состояний (состояния спина $s_z = \pm 1/2$, соответствуют проекции псевдоспина $S_z = 0$).

Выражения для большого термодинамического потенциала системы в расчете на один узел для разных фаз основного состояния имеют следующий вид:

$$\omega_{\mathrm{I}}^{\pm} = \Delta + V \pm \mu, \quad \omega_{\mathrm{CO}} = \Delta - V, \quad \omega_{\mathrm{FM}}^{\pm} = J \pm h,$$
$$\omega_{\mathrm{AFM}} = -J, \quad \omega_{\mathrm{PM}}^{\pm\pm} = \frac{\Delta \pm h \pm \mu}{2}. \quad (2)$$

Примесная (I), ферромагнитная (FM), антиферромагнитная (AFM), шахматная зарядовая (CO) и парамагнитная (PM) фазы соответствуют следующим конфигурациям состояний ближайших соседей для $h > 0$: $\mathrm{I}^{\pm} \to (\pm 1, \pm 1)$, $\mathrm{FM} \to \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$, $\mathrm{AFM} \to \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$, $\mathrm{CO} \to (1, -1)$, $\mathrm{PM}^{\pm} \to (\pm 1, \frac{1}{2})$. Эти „чистые“ фазы характеризуются следующими значениями плотности заряда примесей: $n_{\mathrm{I}^{\pm}} = \pm 1$, $n_{\mathrm{FM}} = n_{\mathrm{AFM}} = n_{\mathrm{CO}} = 0$, $n_{\mathrm{PM}^{\pm}} = \pm \frac{1}{2}$.

Минимизируя большой потенциал системы, можно построить фазовые диаграммы в переменных (J, μ). Двумерные области в этом случае будут соответствовать крайним по n значениям для диаграмм, построенных в представлении с заданным n. Напротив, границы между областями на фазовых диаграммах в переменных (J, μ) будут соответствовать „смешанным“ фазам с промежуточным значением n, которые могут обладать ненулевой остаточной энтропией.

В сильном магнитном поле $(h \geq 2V)$ реализуются четыре типа фазовых диаграмм, представленных на рис. 1. Так, для больших отрицательных Δ „чистыми“ фазами являются (A)FM, COI (реализуются для $n = 0$) и $\mathrm{I}^{\pm}$ $(n = \pm 1)$. Тогда пересечение (A)FM-фазы с примесной фазой I даст разбавленную (анти)ферромагнитную фазу (dilute (A)FM) с фазовым расслоением на магнитные домены и заряженные капли — макроскопические области с суммарным объемом $|n|$, содержащие только занятые примесями узлы. Число перестановок заряженных капель в цепочке, не меняющих энергию основного состояния, имеет степенную асимптотику, и при переходе к термодинамическому пределу $N \to \infty$ остаточная энтропия этих фаз будет стремиться к нулю. Пересечение COI с I является фазой разбавленного зарядового порядка (dilute COI). В ней заряженные примеси одного типа случайным образом распределены на фоне шахматного зарядового порядка. При этом имеется экспоненциально большое число перестановок „избыточных“ примесей без изменения энергии, что приводит к ненулевой остаточной энтропии. Таким образом, dilute COI-фаза является фрустрированной. Плотность заряда примесей для обеих разбавленных фаз может быть любой: $0 < |n| < 1$.

При $\Delta = -h$ появляется „чистая“ парамагнитная фаза $\mathrm{PM}^{\pm}$ $\left(n = \pm\frac{1}{2}\right)$, которая на границе с COI порождает зарядовую парамагнитную фазу PM-COI, обладающую ненулевой остаточной энтропией и реализующуюся для $0 < |n| < \frac{1}{2}$. PM-COI представляет собой разбавленный шахматный зарядовый порядок с парамагнитными центрами в виде одиночных спинов, которые в основном состоянии направлены по полю. Границы (A)FM

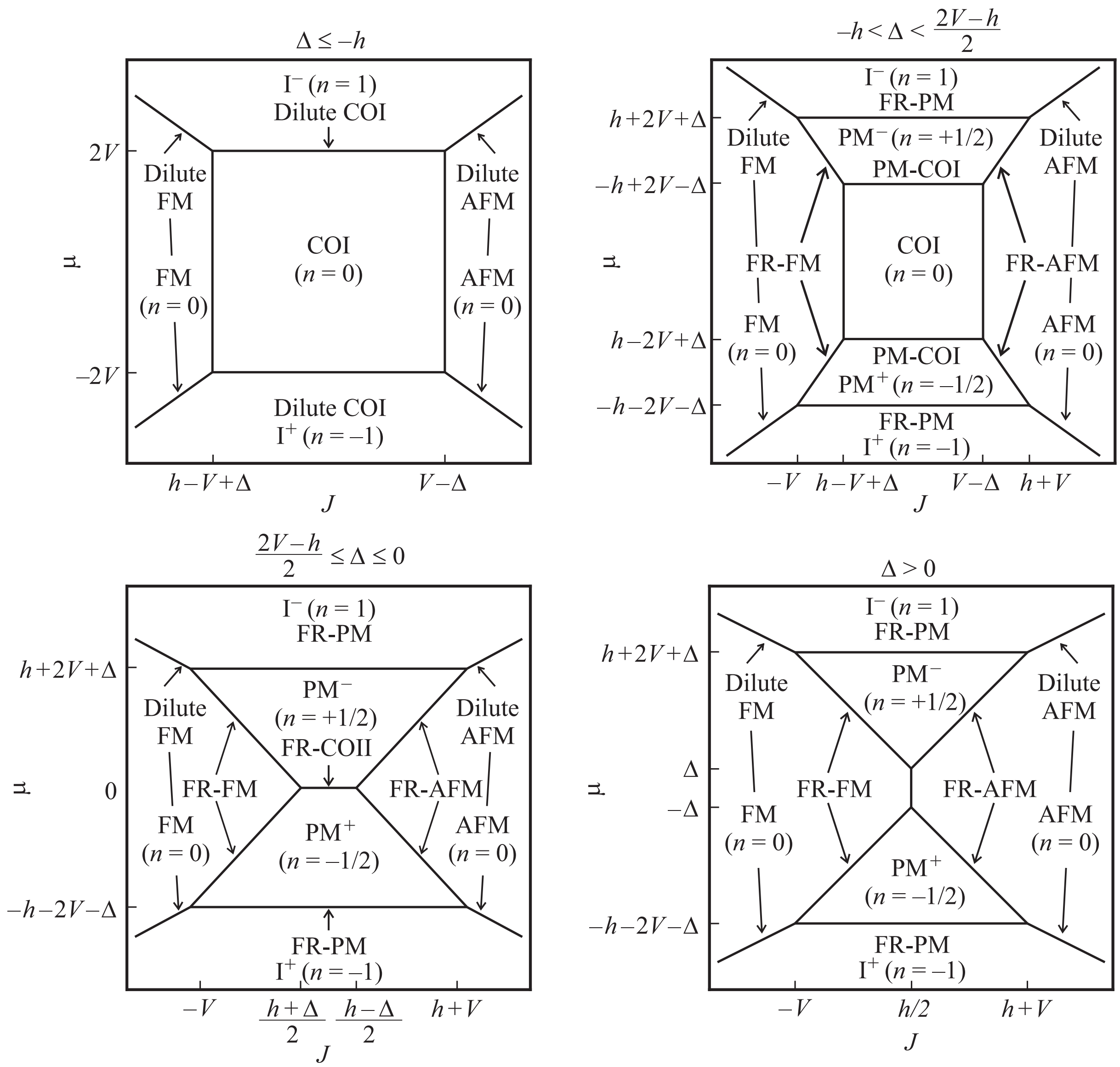


Рис. 1. Диаграммы основного состояния для $h \geq 2V$ (случай сильного магнитного поля) в переменных (J, μ).

с PM дают фрустрированную (анти)ферромагнитную фазу FR-(A)FM с $0 < |n| < \frac{1}{2}$. Она представляет собой разбавленную (A)FM-фазу с (анти)ферромагнитно упорядоченными кластерами (или одиночными спинами, сонаправленными с магнитным полем), разделенными одиночными немагнитными примесями с плотностью заряда n. Здесь, в отличие от разбавленной dilute (A)FM-фазы, немагнитные примеси не собираются в заряженную каплю, а разбросаны по всей системе случайным образом, что приводит к ненулевой остаточной энтропии. При $\frac{2V-h}{2} \leq \Delta \leq 0$ появляется дополнительная граница между двумя парамагнитными фазами PM$^+$ и PM$^-$, которая соответствует фрустрированной зарядовой фазе FR-COII с чередующимися по подрешеткам направленными по полю спинами и немагнитными примесями обоих зарядов. Эта фаза реализуется при $0 \leq |n| < \frac{1}{2}$.

Чтобы вычислить выражения для остаточной энтропии фрустрированных фаз в рамках „стандартного“ подхода трансфер-матрицы, необходимо найти наибольшее собственное значение трансфер-матрицы, с помощью химического потенциала определить параметрическую зависимость энтропии от плотности заряда, и найти предел при нулевой температуре. Это представляет собой нетривиальную задачу, однако, основываясь на марковском свойстве разбавленной цепочки Изинга [14], можно аналитически определить концентрационные зависимости остаточной энтропии всех фрустрированных фаз основного состояния альтернативным методом [6].

Зависимости остаточной энтропии фаз основного состояния от плотности заряда примесей n представлены на рис. 2 в нулевом (b) и отличном от нуля магнитном поле (a). Фаза dilute (A)FM имеет нулевую остаточную

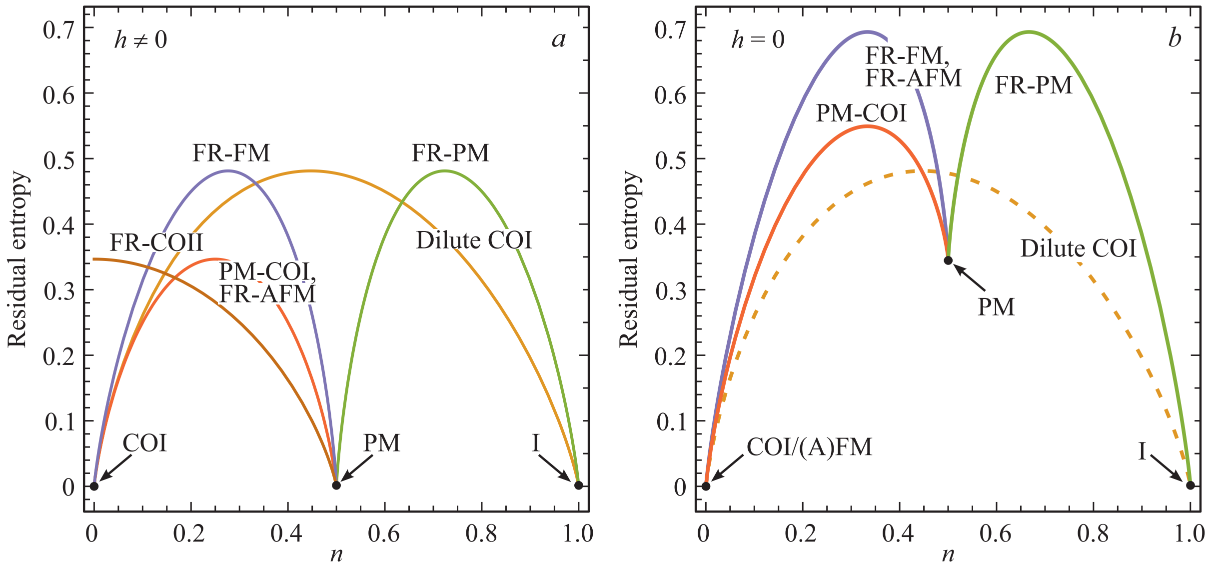


Рис. 2. Зависимость остаточной энтропии различных фаз основного состояния от плотности заряда немагнитных примесей n при (a) $h \neq 0$; (b) $h = 0$.

энтропию при всех величинах плотности заряда n и не показана на рисунке. Фаза dilute COI имеет ненулевую энтропию для $n \neq 0$, не зависящую от магнитного поля, она достигает максимума, равного $\frac{1}{2}\ln\frac{\sqrt{5}+1}{\sqrt{5}-1} \approx 0.481$ при $|n| = \frac{1}{\sqrt{5}} \approx 0.447$. Фазы PM-COI и FR-AFM в нулевом поле имеют идентичные остаточные энтропии, поскольку они являются симметричными относительно замены спиновых состояний на псевдоспиновые. Максимальная величина энтропии этих фаз равна $\frac{\ln 2}{2} \approx 0.347$, и достигается при $|n| = \frac{1}{4}$, тогда как при $h = 0$ максимальные значения достигают $\frac{\ln 3}{2}$ и $\ln 2$ при $|n| = \frac{1}{3}$ для PM-COI и FR-AFM соответственно. Энтропии FR-FM и FR-PM фаз симметричны относительно краевой точки $|n| = \frac{1}{2}$, и достигают своих максимальных значений, равных $\frac{1}{2}\ln\frac{\sqrt{5}+1}{\sqrt{5}-1} \approx 0.481$ при $|n| = \frac{5\mp\sqrt{5}}{10} \approx \frac{1}{2} \mp 0.224$ для $h \neq 0$ и $\ln 2$ при $|n| = \frac{1}{2} \mp \frac{1}{6}$ при $h = 0$. Отдельный интерес представляют фаза FR-COII, которая реализуется только в сильном магнитном поле, $h \geq 2V$. Остаточная энтропия этой фазы отлична от нуля и достигает максимума, равного $\frac{\ln 2}{2} \approx 0.347$, при $n = 0$, что связано с возможными перестановками зарядовых состояний без изменения энергии. Это единственная фаза, которая остается фрустрированной при $n = 0$.

Можно заметить, что максимальные значения энтропии фрустрированных фаз FR-COII, PM-COI, FR-AFM меньше, чем у dilute COI, FR-FM, FR-PM. Кроме того, в нулевом магнитном поле энтропии фаз FR-FM, FR-AFM, PM-COI, FR-PM становятся еще больше. Причина этого кроется в их структуре, детальный анализ которой также можно осуществить с использованием отображения одномерной системы на марковскую цепь [7,8]. Такое отображение может быть построено для любой модели, у которой статистическая сумма допускает представление через трансфер-матрицу, что справедливо, в частности, для различных вариантов моделей Изинга, Поттса, Блюма–Капеля и Блюма–Эмери–Гриффитса.

3. Отображение одномерной спиновой модели на марковскую цепь

Трансфер-матрица одномерной системы с гамильтонианом (1) в локальном базисе состояний

$$\Phi = \{|S_z, s_z\rangle\} = \left\{|+1,0\rangle, |-1,0\rangle, \left|0,+\frac{1}{2}\right\rangle, \left|0,-\frac{1}{2}\right\rangle\right\} \equiv \left\{+1,-1,+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\}$$

имеет структуру

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} e^{-\beta\omega_{\mathrm{I}}^{-}} & e^{-\beta\omega_{\mathrm{CO}}} & e^{-\beta\omega_{\mathrm{PM}}^{--}} & e^{-\beta\omega_{\mathrm{PM}}^{+-}} \\ e^{-\beta\omega_{\mathrm{CO}}} & e^{-\beta\omega_{\mathrm{I}}^{+}} & e^{-\beta\omega_{\mathrm{PM}}^{-+}} & e^{-\beta\omega_{\mathrm{PM}}^{++}} \\ e^{-\beta\omega_{\mathrm{PM}}^{--}} & e^{-\beta\omega_{\mathrm{PM}}^{-+}} & e^{-\beta\omega_{\mathrm{FM}}^{-}} & e^{-\beta\omega_{\mathrm{AFM}}} \\ e^{-\beta\omega_{\mathrm{PM}}^{+-}} & e^{-\beta\omega_{\mathrm{PM}}^{++}} & e^{-\beta\omega_{\mathrm{AFM}}} & e^{-\beta\omega_{\mathrm{FM}}^{+}} \end{pmatrix}, \qquad (3)$$

где использованы обозначения (2) для больших термодинамических потенциалов фаз основного состояния.

В качестве элементов переходной матрицы марковской цепи возьмем условные вероятности $P(b|a)$ реализации состояния b на $(i+1)$-м узле при условии, что i-й узел находится в состоянии a. Условные вероятности можно определить по формуле Байеса $P(ab) = P(a)P(b|a)$, где $P(a) = \langle P_{a,i}\rangle$ — вероятность реализации состояния a на i-м узле, $P(ab) = \langle P_{a,i}P_{b,i+1}\rangle$ — вероятность совместной реализации состояний a и b на соседних i-м и $(i+1)$-м узлах соответственно, $P_{a,i}$ — проектор на состояние a для узла i.

Используя трансфер-матрицу (3), построенную на состояниях a, можно найти [8] корреляторы

$$\langle P_{a,i}\rangle = \langle a|\lambda_1\rangle\langle\lambda_1|a\rangle, \tag{4}$$

$$\langle P_{a,i}P_{b,i+l}\rangle = \langle a|\lambda_1\rangle\,\frac{T^l_{ab}}{\lambda^l_1}\,\langle\lambda_1|b\rangle, \tag{5}$$

где λ_1 — наибольшее собственное значение трансфер-матрицы, $\langle a|\lambda_1\rangle = \upsilon_a$ — элемент собственного вектора трансфер-матрицы для состояния a, соответствующий наибольшему собственному значению λ_1.

Таким образом, условные вероятности равны отношению корреляторов

$$P(b|a) = \frac{\langle P_{a,i}P_{b,i+l}\rangle}{\langle P_{a,i}\rangle} = \frac{T_{ab}\upsilon_b}{\lambda_1\upsilon_a} = \pi_{ab}. \tag{6}$$

Равновесное (стационарное) состояние системы определяется предельным распределением p марковской цепи, которое не изменяется в результате действия матрицы перехода. Соответственно, для компонент p_a предельного распределения выполняется

$$\sum_a p_a\pi_{ab} = p_b,\ \sum_a p_a = 1,\ p_a = P(a) = \langle P_{a,i}\rangle. \tag{7}$$

Учитывая (4), для симметричных трансфер-матриц предельное распределение связано с нормированным собственным вектором, соответствующим наибольшему собственному значению

$$p_a = \upsilon_a^2. \tag{8}$$

Парные функции распределения также можно выразить с помощью переходной матрицы, если воспользоваться следствием теоремы Колмогорова–Чепмена:

$$\begin{aligned}\langle P_{a,i}P_{b,i+l}\rangle &= \sum_{s_1,\ldots,s_{l-1}} P(a)P(a|s_1)P(s_1|s_2)\ldots P(s_{l-1}|b)\\ &= p_a\pi^l_{ab} = \pi^l_{ba}p_b.\end{aligned} \tag{9}$$

Корреляционная функция для состояний a и b, таким образом, имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}K_{ab}(l) &= \langle P_{a,i}P_{b,i+l}\rangle - \langle P_{a,i}\rangle\langle P_{b,i}\rangle = p_a\pi^l_{ab} - p_a p_b\\ &= p_b\pi^l_{ba} - p_a p_b.\end{aligned} \tag{10}$$

Учитывая $\sigma_{z,i} = P_{0,i}s_{z,i}/s = P_{\frac{1}{2},i} - P_{-\frac{1}{2},i}$, вычислим спиновую корреляционную функцию:

$$C(l) = \langle\sigma_{z,i}\sigma_{z,i+l}\rangle - \langle\sigma_{z,i}\rangle^2. \tag{11}$$

Для построения переходной матрицы и соответствующей марковской цепи для определенной фрустрированной фазы основного состояния в трансфер-матрице можно оставить только элементы ведущего порядка, а остальными элементами пренебречь ввиду их экспоненциальной малости при низких температурах. Проделаем это для фрустрированных магнитных фаз FR-AFM и FR-FM.

Рассмотрим систему во внешнем магнитном поле: $h > 0$. Для удобства будем рассматривать случаи положительного заряда примесей: $n > 0$. Поскольку фаза FR-AFM появляется на пересечении фаз AFM и PM на (J,μ)-диаграмме (см. рис. 1), в трансфер-матрице оставим только следующие члены, соответствующие необходимым конфигурациям состояний соседей:

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} 0 & e^{-\beta\omega^{--}_{\mathrm{PM}}} & 0\\ e^{-\beta\omega^{--}_{\mathrm{PM}}} & 0 & e^{-\beta\omega_{\mathrm{AFM}}}\\ 0 & e^{-\beta\omega_{\mathrm{AFM}}} & 0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & e & 0\\ e & 0 & d\\ 0 & d & 0\end{pmatrix}.$$

Состояние -1 отсутствует, пространство состояний системы сократится до $\Phi = \left\{+1, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\}$. Наибольшее собственное значение трансфер-матрицы равно $\lambda_1 = \sqrt{d^2+e^2}$ с собственным вектором $\upsilon = \left(\frac{e}{\sqrt{2}\lambda_1}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{d}{\sqrt{2}\lambda_1}\right)^T$.

Согласно формулам (6), (8) определим вид переходной матрицы и предельного распределения для данной фазы:

$$\pi = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0\\ \frac{e^2}{\lambda_1^2} & 0 & \frac{d^2}{\lambda_1^2}\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{p} = \frac{1}{2\lambda_1^2}\begin{pmatrix} e^2\\ \lambda_1^2\\ d^2\end{pmatrix}. \tag{12}$$

Условие постоянства плотности заряда примесей можно записать в виде

$$n = P(1) - P(-1) = p_1 - p_{-1}. \tag{13}$$

Тогда элементы переходной матрицы и предельного распределения можно выразить через n:

$$\pi = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0\\ 2n & 0 & 1-2n\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{p} = \begin{pmatrix} n\\ \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2}-n\end{pmatrix}. \tag{14}$$

Для фазы FR-AFM равновесным является состояние, когда половина цепочки заполнена спинами $+\frac{1}{2}$, а оставшаяся часть системы является смесью положительно заряженных примесей плотностью n (с псевдоспином $+1$) и спинов $-\frac{1}{2}$ плотностью $\frac{1}{2}-n$. На основании вида переходной матрицы удобно построить граф возможных переходов. Вершины графа обозначают возможные состояния системы, стрелки от одной вершины к другой указывают возможные переходы между состояниями. Для фазы FR-AFM он представлен на рис. 3, a. Более жирные линии соответствуют большим условным вероятностям перехода. Переходы в состояние $+\frac{1}{2}$ из прочих происходят с вероятностью 1, это состояние полностью занимает одну подрешетку, а вторая подрешетка хаотично заполнена состояниями $+1$ и $-\frac{1}{2}$ в соответствии с фиксированным значением n.

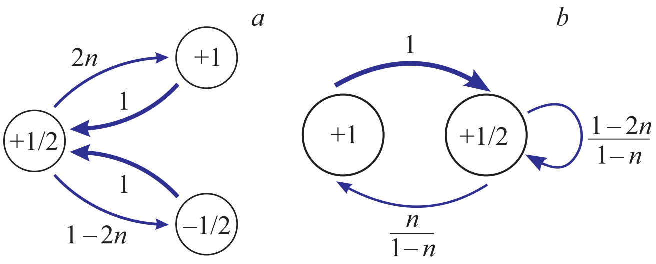


Рис. 3. Графы переходов между состояниями марковской цепи для переходной матрицы фаз *a*) FR-AFM; *b*) FR-FM.

Примесная и спиновая корреляционные функции равны соответственно

$$K_{+1,+1}(l) = (-1)^l n^2, \quad C(l) = (-1)^l (1-n)^2. \tag{15}$$

Обе корреляционные функции характеризуются бесконечной корреляционной длиной: $\xi = \infty$.

Таким образом, цепочка разбивается на две подрешетки. Одна из них полностью упорядочена — заполнена спинами $+\frac{1}{2}$, что и дает бесконечную корреляционную длину. Во второй подрешетке спины $-\frac{1}{2}$ заменяются на примеси $+1$ с ростом n и расположены хаотично. Состояние этой подрешетки является фрустрированным и характеризуется корреляционными функциями, равными нулю. За счет этого в фазе FR-AFM сочетается упорядоченность на одной подрешетке и хаотичность на второй, что дает одновременно бесконечную корреляционную длину и ненулевую энтропию. Явным образом это видно при рассмотрении двухшаговой переходной матрицы

$$\pi^2 = \begin{pmatrix} 2n & 0 & 1-2n \\ 0 & 1 & 0 \\ 2n & 0 & 1-2n \end{pmatrix}. \tag{16}$$

Пространство состояний двухшаговой марковской цепи распадается на два независимых подпространства: $\Phi = \{+\frac{1}{2}\} \cup \{+1, -\frac{1}{2}\}$, которые описывают две подрешетки спиновой цепочки.

В результате, фазу FR-AFM можно представить как набор AFM-кластеров, разделенных одиночными примесями. При этом AFM-кластеры всегда содержат нечетное количество спинов и имеют на краях состояния $+\frac{1}{2}$, сонаправленные со внешним магнитным полем $h > 0$.

Рассмотрим аналогичную фрустрированную ферромагнитную фазу FR-FM в поле $h > 0$. Она соответствует границе между фазами FM и PM на (J, μ)-диаграмме (см. рис. 1). Трансфер-матрица, переходная матрица и равновесное состояние системы в данной фазе будут иметь следующий вид:

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} 0 & e^{-\beta\omega_{\mathrm{PM}}^{--}} \\ e^{-\beta\omega_{\mathrm{PM}}^{--}} & e^{-\beta\omega_{\mathrm{FM}}^{+}} \end{pmatrix},$$

$$\pi = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{n}{1-n} & \frac{1-2n}{1-n} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{p} = \begin{pmatrix} n \\ 1-n \end{pmatrix}. \tag{17}$$

Теперь пространство состояний сократилось до $\Phi = \{+1, +\frac{1}{2}\}$. Равновесное состояние системы представляет собой ферромагнитные кластеры, разделенные одиночными немагнитными примесями. Граф переходов представлен на рис. 3, *b*.

Примесная и спиновая корреляционные функции одинаковы:

$$K_{+1+1}(l) = K_{+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}(l) = C(l) = (-1)^l n(1-n)e^{-l/\xi}, \tag{18}$$

где корреляционная длина ξ является конечной и зависит от плотности заряда:

$$\xi = \left[\ln\left(\frac{1-n}{n}\right)\right]^{-1}. \tag{19}$$

Это означает, что при $h \neq 0$ отсутствуют критические флуктуации, а состояние остается фрустрированным и неупорядоченным даже при $T = 0$. Корреляционная длина становится равной нулю лишь при $n = 0$, когда FR-FM-фаза переходит в упорядоченную FM-фазу с энтропией, равной нулю.

В отсутствие внешнего магнитного поля свойства фаз FR-AFM и FR-FM несколько изменятся. Для фазы FR-AFM в марковской цепи добавятся обоюдные связи между примесным состоянием $+1$ и спиновым $-\frac{1}{2}$. Для фазы FR-FM появится спиновое состояние $-\frac{1}{2}$, обладающее такой же связью с примесями, как и состояние $+\frac{1}{2}$. Теперь спиновые состояния $\pm\frac{1}{2}$ входят в марковскую цепь симметричным образом. Корреляционные функции в нулевом поле убывают по экспоненте для обеих фаз

$$K_{+1+1}^{\text{FR-AFM}}(l) = K_{+1+1}^{\text{FR-FM}} = (-1)^l (1-n) n e^{-l/\xi_c}, \tag{20}$$

$$C^{\text{FR-AFM}}(l) = (-1)^l C^{\text{FR-FM}}(l) = (-1)^l (1-n) e^{-l/\xi_s}, \tag{21}$$

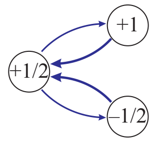
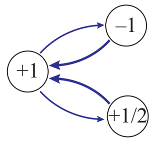
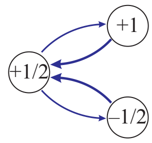
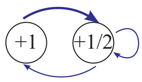
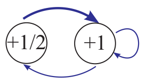
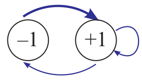
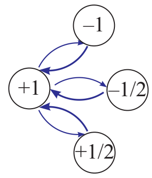
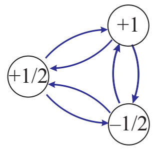
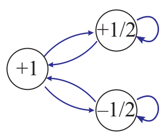
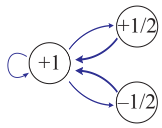
где зарядовая и спиновые корреляционные длины равны соответственно

$$\xi_c = \left[\ln\left(\frac{1-n}{n}\right)\right]^{-1}, \quad \xi_s = \left[\ln\left(\frac{1-n}{1-2n}\right)\right]^{-1}. \tag{22}$$

В результате, если в антиферромагнитной фазе FR-AFM при включении магнитного поля происходит тонкая перестройка состояний таким образом, что на одной из подрешеток формируется дальнее упорядочение с бесконечной корреляционной длиной, то в ферромагнитной фазе FR-FM происходит только переворачивание спиновых кластеров по направлению магнитного поля.

Таким образом, анализ фаз основного состояния с использованием марковских цепей позволяет выявить особенности структуры фаз и скрытого упорядочения в них, аналитически определить корреляционные функции и корреляционные длины, и, кроме того, посчитать остаточную энтропию.

Таблица отображений фрустрированных фаз на марковские цепи ($n > 0$)

Тип марковской цепи	Фаза	Переходная матрица π	Равновесное состояние $\boldsymbol{p}$	Граф переходов	Корреляционные функции $K_{+1+1}(l), C(l)$ и корреляционные длины
Периодическая с периодом 2	FR-AFM ($h > 0$)	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 2n & 0 & 1-2n \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} n \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}-n \end{pmatrix}$		$C(l) = (-1)^l(1-n)^2$, $K_{+1+1}(l) = (-1)^l n^2$, $\xi = \infty$
	PM-COI ($h > 0$)	$\begin{pmatrix} 0 & 1-2n & 2n \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}-n \\ n \end{pmatrix}$		$K_{+1+1}(l) = \frac{(-1)^1}{4}$, $C(l) = (-1)^l n^2$, $\xi = \infty$
	FR-COII	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{2}+n & \frac{1}{2}-n & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1+2n}{4} \\ \frac{1-2n}{4} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$		$K_{+1+1}(l) = \frac{(-1)^l(1+2n)^2}{16}$, $C(l) = \frac{(-1)^l}{4}$, $\xi = \infty$
Апериодическая	FR-FM ($h > 0$)	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{n}{1-n} & \frac{1-2n}{1-n} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} n \\ 1-n \end{pmatrix}$		$K_{+1+1}(l) = C(l)$ $= (-1)^1 n(1-n)e^{-l/\xi}$, $\xi = \left[\ln\left(\frac{1-n}{n}\right)\right]^{-1}$
	FR-PM ($h > 0$)	$\begin{pmatrix} \frac{2n-1}{n} & \frac{1-n}{n} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$			$K_{+1+1}(l) = C(l)$ $= (-1)^l n(1-n)e^{-l/\xi}$, $\xi = \left[\ln\left(\frac{n}{1-n}\right)\right]^{-1}$
	dilute COI	$\begin{pmatrix} \frac{2n}{1+n} & \frac{1-n}{1+n} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1+n}{2} \\ \frac{1-n}{2} \end{pmatrix}$		$K_{+1+1}(l) = \frac{(-1)^l}{4}(1-n^2)e^{-l/\xi}$, $\xi = \left[\ln\left(\frac{1+n}{1-n}\right)\right]^{-1}$
Периодическая с периодом 2	PM-COI ($h = 0$)	$\begin{pmatrix} 0 & 1-2n & n & n \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}-n \\ \frac{n}{2} \\ \frac{n}{2} \end{pmatrix}$		$K_{+1,+1}(l) = \frac{(-1)^l}{4}$ $C(l) = 0, \xi_c = \infty$
Апериодическая	FR-AFM ($h = 0$)	$\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{n}{1-n} & 0 & \frac{1-2n}{1-n} \\ \frac{n}{1-n} & \frac{1-2n}{1-n} & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} n \\ \frac{1-n}{2} \\ \frac{1-n}{2} \end{pmatrix}$		$K_{+1,+1} = (-1)^l(1-n)ne^{-l/\xi_c}$, $\xi_c = \left[\ln\left(\frac{1-n}{n}\right)\right]^{-1}$, $C(l) = (\mp 1)^l(1-n)e^{-l/\xi_s}$, $\xi_s = \left[\ln\left(\frac{1-n}{1-2n}\right)\right]^{-1}$
	FR-FM ($h = 0$)	$\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{n}{1-n} & \frac{1-2n}{1-n} & 0 \\ \frac{n}{1-n} & 0 & \frac{1-2n}{1-n} \end{pmatrix}$			
	FR-PM ($h = 0$)	$\begin{pmatrix} \frac{2n-1}{n} & \frac{1-n}{2n} & \frac{1-n}{2n} \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$			$K_{+1,+1} = (-1)^l ne^{-l/\xi}$, $\xi_c = \left[\ln\left(\frac{n}{1-n}\right)\right]^{-1}$, $C(l) = 0$

4. Типы марковских цепей одномерной разбавленной модели Изинга

Классифицируем типы марковских цепей и определим их вид для имеющихся фаз. Результаты для фрустрированных фаз основного состояния представлены в таблице, где для каждой из фаз приведены переходная матрица π, вид равновесного состояния p, граф переходов между состояниями в пространстве Φ, вид корреляционных функций и длины.

В присутствии магнитного поля можно выделить 2 типа марковских цепей, они представлены в первых двух частях таблицы. Фазы FR-AFM, FR-COII и PM-COI имеют марковские цепи с периодом 2 и бесконечную корреляционную длину за счет упорядоченной подрешетки. За счет этого их остаточная энтропия меньше, чем у фрустрированных фаз второго типа. Фазы второго типа FR-FM, dilute COI и FR-PM характеризуются марковской цепью из двух состояний и конечной корреляционной длиной, зависящей от n.

Перестройки марковских цепей при $h = 0$ происходят и в других чувствительных к магнитному полю фазах. Характеристики марковских цепей для таких фаз при отсутствии магнитного поля представлены в последней части таблицы. Марковская цепь для парамагнитной зарядовой фазы PM-COI в отсутствие магнитного поля сохраняет период 2, однако теперь, равноценно с состоянием $+\frac{1}{2}$, появляется противоположное спиновое состояние $-\frac{1}{2}$. Хотя дальнее упорядочение примесей на подрешетке сохраняется при любом магнитном поле, в отсутствие магнитного поля спиновые состояния оказываются нескоррелированы. Марковская цепь фрустрированной парамагнитной фазы FR-PM в нулевом поле содержит дополнительное состояние $-\frac{1}{2}$, симметричное $+\frac{1}{2}$. Зарядовая корреляционная длина не претерпевает изменений, однако спиновая корреляционная функция становится равной нулю, за счет чего и увеличивается остаточная энтропия данной фазы.

На рис. 4 в логарифмическом масштабе представлены концентрационные зависимости корреляционных длин различных фрустрированных фаз таблицы в магнитном поле h и без него. Корреляционные длины фаз с марковскими цепями периодического типа не изображены, поскольку они являются бесконечными для любых n.

Примесная корреляционная длина ξ_c для фаз FR-(A)FM при $h = 0$ такая же, как для FR-FM-фазы при $h \neq 0$. Она становится равной нулю при $n = 0$, когда фрустрированные фазы переходят в „чистые“ фазы (A)FM. При этом спиновая корреляционная длина ξ_s стремится к бесконечности. Это свидетельствует о магнитном фазовом переходе при $T = 0$, когда (A)FM-состояние становится полностью упорядоченным. Другой граничной точкой является $n = \frac{1}{2}$, соответствующая „чистому“ парамагнитному упорядочению PM. В этой точке примесная корреляционная длина расходится, тогда как спиновая равна нулю. В фазе FR-PM, по сравнению с фазой FR-FM, примесные и спиновые состояния меняются местами, что приводит к симметрии свойств этих фаз относительно точки $n = \frac{1}{2}$; исключением является отсутствие в фазе FR-PM спин-спиновых корреляций в нулевом магнитном поле. В фазе шахматного разбавленного порядка dilute COI дальнее зарядовое упорядочение при $T = 0$ наступает лишь в „чистом“ пределе COI, при $n = 0$, когда зарядовая корреляционная длина расходится.

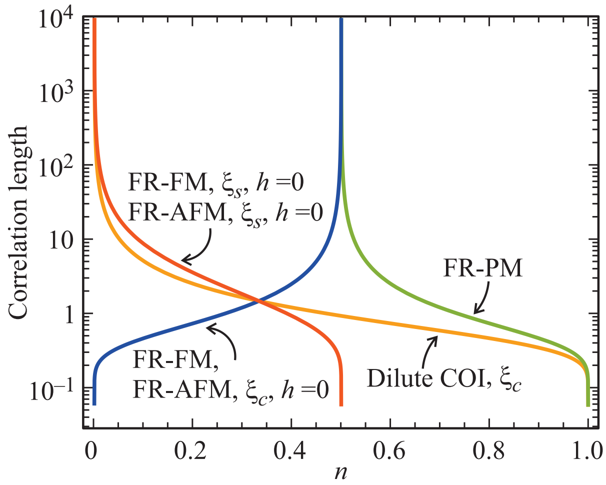


Рис. 4. Зависимость корреляционной длины различных фаз основного состояния от плотности заряда немагнитных примесей n в логарифмическом масштабе.

5. Заключение

С помощью метода, основанного на анализе марковских цепей, изучены свойства фрустрированных фаз изинговской цепочки с двумя типами заряженных примесей.

Рассмотренная модель обладает большим разнообразием фаз основного состояния, большинство из которых имеют ненулевую остаточную энтропию, и в этом смысле являются фрустрированными. В нулевом магнитном поле каждой фрустрированной фазе соответствует свой тип марковской цепи. Во внешнем поле в системе реализуются только 2 типа марковских цепей, каждый из которых является типичным для трех разных фрустрированных фаз основного состояния. Свойства фаз этих двух типов марковских цепей сильно различаются. Так, фрустрированные антиферромагнитная фаза FR-AFM, парамагнитная зарядовая фаза PM-COI и смесь примесных парамагнитных фаз FR-COII имеют периодические марковские цепи с периодом 2 и тремя состояниями, что означает наличие упорядочения на одной из подрешеток спиновой цепочки, в то время как вторая подрешетка полностью неупорядочена. За счет такого скрытого упорядочения корреляционная длина системы бесконечна, а остаточная энтропия сравнительно невелика. Фрустрированные фазы ферромагнитная FR-FM, шахматная зарядовая dilute COI и парамагнитная FR-PM описываются апериодической марковской цепью с двумя состояниями. Этому соответствует спиновая цепочка из кластеров состояний одного типа, разделенных единичными узлами в состояниях второго типа. При этом в системе не реализуется никакого дальнего порядка, так что корреляционная длина оказывается конечной и зависящей от плотности заряда n, а остаточная энтропия — выше, чем у фаз первого типа.

Проведенный анализ показывает, что при включении магнитного поля наиболее значимому изменению структуры спиновой цепочки соответствует изменение типа марковской цепи: для фрустрированной антиферромагнитной фазы FR-AFM апериодическая цепь становится периодической, что означает появление в системе дальнего порядка.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-22-00196.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] R.J. Baxter. Exactly Solved Models in Statistical Mechanics. Academic, London(1982).
[2] E. Aydıner, C. Akyüz, M, Gönülol, H. Polat. Phys. Status Solidi B **243**, 2901 (2006).
[3] S.M. de Souza, O. Rojas. Solid State Commun. **269**, 131 (2017).
[4] M.E. Zhitomirsky. Phys. Rev. B **67**, 104421 (2003).
[5] O. Rojas. Acta Phys. Pol. A **137**, 933 (2020).
[6] Y. Panov. Phys. Rev. E **106**, 054111 (2022).
[7] Ю.Д. Панов. ФТТ **65**, *7*, 1201 (2023). [Y.D. Panov. Phys. Solid State **65**, *7*, 1148 (2023)].
[8] Y. Panov, O. Rojas. Phys. Rev. E **108**, 044144 (2023).
[9] A.S. Moskvin. J. Phys. Condens. Matter **25**, 085601 (2013).
[10] Ю.Д. Панов, В.А. Улитко, К.С. Будрин, Д.Н. Ясинская, А.А. Чиков. ФТТ **61**, *5*, 822 (2019). [Yu.D. Panov, V.A. Ulitko, K.S. Budrin, D.N. Yasinskaya, A.A. Chikov. Phys. Solid State **61**, *5*, 707 (2019)].
[11] D.N. Yasinskaya, V.A. Ulitko, Y.D. Panov. IEEE Trans. Magn. **58**, *2*, 1 (2022).
[12] Д.Н. Ясинская, В.А. Улитко, Ю.Д. Панов. ФТТ **63**, *9*, 1350 (2021). [D.N. Yasinskaya, V.A. Ulitko, Y.D. Panov. Phys. Solid State **63**, 1588 (2021)].
[13] Д.Н. Ясинская, В.А. Улитко, Ю.Д. Панов. ФТТ **62**, *9*, 1543 (2020). [D.N. Yasinskaya, V.A. Ulitko, Y.D. Panov. Phys. Solid State **62**, 1713 (2020)].
[14] Yu.D. Panov. JMMM **514**, 167224 (2020).

Редактор Ю.Э. Китаев

Продолжение публикации материалов Симпозиума см. в ФТТ No 8/23