Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 4 — 1973

УДК 530.145

В. А. ЗАГРЕБНОВ

ОБ АСИМПТОТИЧЕСКИ ТОЧНОМ РЕШЕНИИ НЕКОТОРЫХ СПИНОВЫХ МОДЕЛЕЙ

Показано, что модель Изинга для некоторого класса взаимодействий имеет точное решение, совпадающее (при $N \to \infty$) с молекулярным полем Брэгга—Вильямса. Рассмотрено обобщение на спиновые модели общего вида.

Введение

Метод двухвременных температурных функций Грина был впервые применен для изучения модели Изинга, которая определяется обычно гамильтонианом

$$H = -\mu\mathscr{H}\sum_{f} S_f^z - \frac{1}{2}\sum_{f' \neq f} V_{ff'} S_f^z S_{f'}^z, \tag{1}$$

где H — магнитное поле, S_f^z и z — компоненты спинов в узлах f, V_{ff}' — обменный интеграл (см. [1]). Краткий обзор целого ряда нетривиальных результатов см. в [2].

В настоящей работе подход Тябликова—Федянина используется для рассмотрения модели Изинга со взаимодействием специального вида

$$V_{ff'} = \frac{J(f-f')}{R(N)}, \tag{2}$$

где $R(N)$ — некоторая функция числа узлов N-решетки, такая, что $\lim\limits_{N\to\infty} R(N) = \infty$, а $J(f-f')$ ограничена и для ферромагнитной модели Изинга, $0 < \sum\limits_{f'}^{N} V_{ff}' = J_N < \infty$ для любого N, $\lim\limits_{N\to\infty} J_N = J < \infty$. Для модели Изинга (1) со взаимодействием (2) можно получить явное решение, точное в пределе $N \to \infty$; это значит, что свободная энергия системы, описываемой (1) и (2), и все корреляционные функции в термодинамическом пределе ($N \to \infty$) совпадают с соответствующими функциями некоторого модельного гамильтониана H_0, термодинамические свойства которого хорошо известны. Для модели с $R(N) = N$ и $J_N = J = J(f-f')$ (модель Темперлея [3]) в [4] были проведены расчеты, показывающие, что соответствующая плотность свободной энергии $F(H)/N$ асимптотически (т. е. в пределе $N \to \infty$) мало отличается от плотности свободной энергии модельного гамильтониана H_0, т. е. H и H_0 — «термодинамически эквивалентные» гамильтонианы [5]. Однако эти расчеты так или иначе были проделаны по теории возмущений, и вывод о сходимости к нулю $\frac{F(H) - F(H_0)}{N}$ делался на том основании, что каждый член разложения [4] (либо каждая поправка к диаграммам деревьев [6]) функции $\frac{F(H) - F(H_0)}{N}$ асимптотически мал.

Против этого вывода можно выдвинуть следующие возражения: во-первых, отбрасывается бесконечное число асимптотически малых членов, суммарный вклад которых может быть и ненулевым; во-вторых, сходимость (в каком-то смысле) плотности $F(H)/N$ к $F(H_0)/N$ еще не означает совпадение термодинамик двух моделей, так как для этого требуется еще совпадение всех корреляционных функций, т. е. сходимость всевозможных производных от $f(H)$ по термодинамическим параметрам к производным от $f(H_0)$. Можно ли доказать последнее в методе «термодинамически эквивалентных гамильтонианов» заранее неясно (см. замечание в [5]). Для доказательства нами использован метод, развитый в [7] для модели БКШ; однако наши заключения отличаются от [7].

§ 1. Модельный гамильтониан. Уравнения для функций Грина

Следуя [1, 2], рассмотрим в (1) случай спина $1/2$. Операторы S_f^z можно выразить через Ферми-операторы, сосредоточенные в узлах решетки:

$$S_f^z = \frac{1}{2} - a_f^+ a_f, \quad \{a_f, a_{f'}^+\} = \Delta(f - f'). \tag{3}$$

С помощью (3) гамильтониан (1) выражается через операторы числа частиц $N_f = a_f^+ a_f$:

$$H = E + L \sum_f N_j - \frac{1}{2} \sum_{f \neq f'} V_{ff'} N_f N_{f'}, \tag{4}$$

а уравнения движения для $a_f^\pm$ принимают вид

$$i\partial_t a_f^\pm = \mp \Big(L - \sum_{f'} V_{ff'} N_{f'}\Big) a_f^\pm. \tag{5}$$

Для получения модельного гамильтониана воспользуемся принципом, основанным на неравенстве Боголюбова [8, 9]. Введем функцию $A_f = \bar{A}_f$ и оператор $B_f = N_f - A_f$, тогда (1) представляется в виде

$$H = H_0 + H_I,$$

где

$$H_0 = E' + \sum_f \Big(L - \sum_{f'} V_{ff'} A_{f'}\Big) N_f, \qquad E' = E + \frac{1}{2} \sum_{f \neq f'} V_{ff'} A_f A_{f'},$$

$$H_I = -\frac{1}{2} \sum_{f \neq f'} V_{ff'} B_f B_{f'}. \tag{6}$$

Минимизируя правую часть неравенства Боголюбова $F(H) \leqslant F(H_0) + + \langle H - H_0 \rangle_0$ ($\langle \ldots \rangle_0$ среднее по H_0) по введенным параметрам A_f, получим уравнение $A_f = \langle N_f \rangle_0$, при этом $\langle H - H_0 \rangle_0 = 0$. Гамильтониан H_0 (6) с параметрами A_f, определяемыми из уравнения $A_f = \langle N_f \rangle_0$ и будем называть модельным гамильтонианом для задачи (1) (гамильтониан молекулярного поля для (1)). Покажем, что все термодинамические средние, рассчитанные с H определяемым по (1), (2), и с H_0 в термодинамическом пределе ($N \to \infty$) совпадают. Для этого рассмотрим уравнения для температурных функций Грина, с помощью которых по известным правилам определяются термодинамические величины системы.

Например, исходя из антикоммутаторной запаздывающей функции Грина $G_f(t-t') = \frac{1}{i}\theta(t-t')\langle\{a_f(t), \quad a_f^+(t')\}\rangle \equiv \langle\langle a_f(t) | a_f^+(t')\rangle\rangle$ с помощью (5) получим цепочку зацепляющихся уравнений Тябликова — Федянина для модели Изинга [1, 2]. Эти уравнения связывают функции вида $G_{fM}(t-t') = \langle\langle a_f(t) M(t) | a_f^+(t')\rangle\rangle$, где $M = \prod\limits_{\{g\}} N_g$, $a_f(t) = e^{iHt} a_f e^{-iHt}$, причем все индексы $\{f, g\}$ различны, $N_f^2 = N_f$:

$$i\partial_t G_{fM}(t-t') = \delta(t-t')\langle\{a_f M, a_f^+\}\rangle + LG_{fM}(t-t') -$$
$$- \sum_{f' \bar{\in} \{f,g\}} V_{ff'} \langle\langle a_f N_{f'} M | a_f^+ \rangle\rangle - \sum_{f' = \{g\}} V_{ff'} \langle\langle a_f M | a_f^+ \rangle\rangle. \tag{7}$$

Член с $i\partial_t M$ равен нулю, так как $[N_f, H] = 0$. Если для любого N $R(N) = c < \infty$, то цепочка уравнений (7) обрывается ($N_f^2 = N_f$), их число определяется количеством узлов взаимодействующих с выделенным f (числом «ближайших соседей»), получающаяся система уравнений незамкнута (см. [1, 2]). Для модельного гамильтониана H_0 цепочка Тябликова — Федянина также обрывается, но система уравнений уже замкнута:

$$\widetilde{G}_f^\circ(t-t') = \frac{1}{i}\theta(t-t')\langle\{\widetilde{a}_f(t), \quad \widetilde{a}_f^+(t')\}\rangle_0 \equiv \langle\langle \widetilde{a}_f | \widetilde{a}_f^+ \rangle\rangle_0,$$

$$\widetilde{a}_f(t) = e^{iH_0 t} a_f e^{-iH_0 t}, \quad i\partial_t \widetilde{G}_f^\circ(t-t') = \delta(t-t') + L\widetilde{G}_f^\circ - \sum_{f'} V_{ff'} A_{f'} \widetilde{G}_f^\circ. \tag{8}$$

§ 2. Асимптотически точное решение уравнений

В настоящем параграфе покажем, следуя [7], что для взаимодействия (2) всей цепочке уравнений (7) удовлетворяют в термодинамическом пределе ($N = \infty$) функции Грина, построенные по модельному гамильтониану, т. е. они являются решением задачи (1) и (2) в пределе $N = \infty$ (асимптотическое точное решение). Следовательно, все термодинамические средние исходной задачи совпадают при ($N = \infty$) с полученными с помощью H_0 [1]. Найдено, таким образом, асимптотически точное решение модели Изинга со взаимодействием (2).

Предварительно рассмотрим функции $G_{fM}^0(t-t') = \frac{1}{i}\theta(t-t')\langle\{a_f(t) \times \times M(t), \quad a_f^+(t')\}\rangle_0 = \langle\langle a_f M | a_f^+ \rangle\rangle_0$ и покажем, что они (при $N \to \infty$) удов-

[1] В этом смысле H и H_0 действительно термодинамически эквивалентны.

летворяют всей системе (7). Для этого необходимо доказать, что подстановка $G^0_{fM}(t-t')$ в (7):

$$i\partial_t G^0_{fM}(t-t') = \delta(t-t')\langle\{a_f M,\ a_f^+\}\rangle_0 + LG^0_{fM} -$$

$$-\frac{1}{R(N)}\sum_{f'\bar{\in}\{f,g\}} J(f-f')\ll a_f N_{f'} M \mid a_f^+ \gg_0 -$$

$$-\frac{1}{R(N)}\sum_{f'=\{g\}} J(f-f')\ll a_f M \mid a_f^+ \gg_0 \qquad (9)$$

обращает уравнения (7) в пределе $N=\infty$ в тождества.

Действительно, учитывая, что H_0 диагонален, можно воспользоваться теоремой Блоха — Де — Доминисиса [9], тогда $\ll a_f N_{f'} M \mid a_f^+ \gg = \langle N_{t'}\rangle_0 \times \times \langle M\rangle_0 \ll a_f \mid a_f^+ \gg$ и $\ll a_f M \mid a_f^+ \gg_0 = \langle M\rangle_0 \ll a_f \mid a_f^+ \gg_0$. Кроме того, набор $\{f,\ g\}$ для любой функции Грина $G^0_{fM}(t-t')$ состоит из конечного числа узлов, тогда, учитывая свойства (2), получаем

$$\lim_{N\to\infty}\frac{1}{R(N)}\sum_{f'=\{g\}} J(f-f')\ll a_f M \mid a_f^+ \gg_0 = 0,$$

т. е. с асимптонической точностью из (9) получаем соотношение (ср. (8)):

$$i\partial_t G^0_f(t-t') = \delta(t-t') + LG^0_f - \frac{1}{R(N)}\sum_{f'} J(f-f')\times$$

$$\times\langle N_t\rangle G^0_t + 0\left(\frac{1}{R(N)}\right). \qquad (10)$$

Покажем, что при $N\to\infty\ G^0_f\to\widetilde{G}^0_f$, т. е. соотношение (10) есть тождество в пределе $N=\infty$, и, кроме того, $G^0_{fM}\to\langle M\rangle_0\widetilde{G}^0_f(t-t')$. По определению

$$G^0_f(t-t') = \frac{1}{i}\theta(t-t')\frac{1}{Z_{H_0}} Sp\,[e^{-\beta H_0}(a_f(t)\,a_f^+(t') + a_f(t')(a_f(t))];$$

рассмотрим выражение

$$\frac{1}{Z_{H_0}} Sp\,(e^{-\beta H_0} e^{iHt} a_f e^{-iHt} e^{iHt'} a_f^+ e^{-iHt'}),$$

которое, учитывая что $[H_0,\ H_I]=0$, можно переписать в виде

$$\frac{1}{Z_{H_0}} Sp\,(e^{-\beta H_0} e^{iE_f(t-t')} e^{iH_I(t-t')} a_f e^{-i-H_I(t-t')} a_f^+),$$

$$E_f = L - \frac{1}{R(N)}\sum_{f'} J(f-f')\langle N_{f'}\rangle_0. \qquad (11)$$

С помощью явного выражения для H_I (6) получаем

$$e^{iH_I(t-t')} a_f e^{-iH_I(t-t')} = e^{i\frac{1}{R(N)}\sum_{f'} J(f-f')B_{f'}(t-t')} a_f.$$

В таком случае выражение (11) с помощью теоремы Блоха—Де Доминисиса приводится к виду

$$\langle a_f a_f^+\rangle_0 \langle e^{i(t-t')\frac{1}{R(N)}\sum\limits_{f'} J(f-f')B_{f'}}\rangle_0 e^{iE_f(t-t')}. \qquad (12)$$

Если учесть, что среднее в (12) вычисляется по модельному гамильтониану, т. е. $\langle B_f^{2k+1}\rangle_0 = 0 \quad k = 0, 1, 2 \ldots$, то

$$\langle e^{i(t-t')\frac{1}{R(N)}\sum\limits_{f'} J(f-f')B_{f'}}\rangle_0 =$$

$$= \left\langle \cos\left[(t-t')\frac{1}{R(N)}\sum_{f'} J(f-f')B_{f'}\right]\right\rangle_0. \qquad (13)$$

Для (13) можно дать оценку, если принять во внимание, что

$$\langle B_f^2\rangle_0 = A_f - A_f^2 \leqslant 1: \qquad (14)$$

$$1 \geqslant \left\langle \cos\left[(t-t')\frac{1}{R(N)}\sum_{f'} J(f-f')B_{f'}\right]\right\rangle_0 \geqslant 1 -$$

$$-\frac{1}{2!}(t-t')^2\frac{1}{R(N)}\sum_{f'} J^2(f-f') \geqslant 1 - \frac{1}{2}(t-t')^2\frac{1}{R(N)} \times$$

$$\times [\max J(f-f')]^2.$$

Из (14) с учетом свойств (2) следует, что (13) при $N \to \infty$ стремится к единице, т. е. (12) при $N = \infty$ совпадает с $\langle \widetilde{a}_f(t)\widetilde{a}_f^+(t')\rangle_0$ и $G_{fM}^0(t-t')$ с $\widetilde{G}_{fM}^0(t-t')$. Таким образом, (10) при $N \to \infty$ обращается в тождество, так как $G_f^0(t-t')$ в этом пределе совпадает с $\widetilde{G}_f^0(t-t')$, удовлетворяющей (8), если усреднения и временная эволюция осуществляются в (10) с помощью модельного гамильтониана (§ 1). Значит функции $\widetilde{G}_{fM}^0(t-t')$ с асимптотической точностью удовлетворяют бесконечной ($N = \infty$) цепочке уравнений (7) для взаимодействия (2) и являются, таким образом, решением задачи (1) и (2) в термодинамическом пределе; т. е. модельный гамильтониан H_0 определяет все свойства (1) и (2) в пределе $N = \infty$.

В заключение полученный результат можно сформулировать следующим образом. Показано, что для некоторого класса обменных взаимодействий (2), включающего, в частности, $V_{ff'} = J/N$, модель Изинга имеет асимптотически точное решение, которое совпадает с молекулярным полем Брэгга—Вильямса. Значит все термодинамические функции, вычисленные с помощью модельного гамильтониана H_0, в пределе $N = \infty$ совпадают с расчетами с помощью исходного гамильтониана H. Из этого следует, что вариационный принцип (см. § 1) дает асимптотически точное решение задачи (1) и (2).

Изложенное выше доказательство без труда переносится на спиновые гамильтонианы более общего вида, описывающие взаимодействующие кластеры из четного числа (требование инвариантности относительно отражения $S_f^z \to -S_f^z$ узлов (ср. [4])

$$H = -\mu\mathscr{H}\sum_f S_f^z - \sum_{n=1}^{k}\sum_{f_1\ldots f_{2n}} V_{f_1\ldots f_{2n}} S_{f_1}^z \ldots S_{f_{2n}}^z, \qquad (15)$$

если на взаимодействие $V_{f_1 \ldots f_{2n}}$ наложить требования, аналогичные (2),

$$V_{f_1 \ldots f_{2n}} = \frac{J_{f_1 \ldots f_{2n}}}{R_1(N) \ldots R_{2n-1}(N)}, \quad 0 \leqslant J_{f_1 \ldots f_{2n}} \leqslant c < \infty,$$

$$\lim_{N \to \infty} R_i(N) = \infty, \qquad \lim_{N \to \infty} \sum_{f_1 \ldots f_{2n-1}} V_{f_1 \ldots f_{2n}} = J_{2n} < \infty. \tag{16}$$

Модельный гамильтониан в этом случае принимает вид

$$H_0 = -\mu \mathscr{H} \sum_f S_f^z - \sum_f S_f^z \left(\sum_{n=1}^{k} 2nJ_{2n} \sigma^{2n-1} \right), \tag{17}$$

а параметр σ (средняя намагниченность одного узла) определяется из уравнения самосогласования (ср. § 1) $\langle S_f^z \rangle_0 = \sigma_f = \sigma$, т. е.

$$\sigma = \frac{1}{2} \operatorname{th} \left[\frac{\mu \mathscr{H} + \sum\limits_{n=1}^{k} 2nJ_{2n} \sigma^{2n-1}}{\theta} \right]. \tag{18}$$

Уравнение (18) для различных наборов постоянных $\{J_{2n}\}$ определяет термодинамические свойства системы (15) и (16), которые для некоторых комбинаций J_{2n} могут иметь довольно необычный характер, поэтому изучение системы (15) и (16) представляет определенный интерес.

В частности, при $J_2 > 0$ и $J_4/J_2 > 1/6$ ($k=2$) в системе (15) и (16) имеет место фазовый переход первого рода [10], который характеризуется скачкообразным изменением ($H=0$) самопроизвольной намагниченности. При $J_2 > 0$, $J_4 < 0$ и $J_2/|J_4| \leqslant 1/2$ система (15) и (16) соответствует ферримагнетику, нескомпенсированный момент которого при $\theta = 0$ ($H=0$) определяется соотношением $\sigma(\theta=0) = (J_2/2|J_4|)^{1/2} \leqslant 1/2$. Возможность интерпретации некоторых свойств реальных магнетиков с помощью модели (15) и (16) обсуждается.

Автор выражает благодарность В. К. Федянину и Я. П. Терлецкому за помощь, полезные обсуждения и критические замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Тябликов С. В., Федянин В. К. ФММ, **23**, 193, 1967; Тябликов С. В., Федянин В. К., **23**, 999, 1967; Федянин В. К. Phys. Lett., **29** A, 40, 1969; «Теоретическая и математическая физика», **7**, 241, 1971.
2. Федянин В. К. Метод корреляционных функций в модели Изинга. Тарту, 1971.
3. Temperly H. N. Proc. Phys. Soc., London, **A67**, 233, 1954.
4. Morita M., Tanaka R., Phys. Rev., **A 138**, 1088, 1965; Girardeau M. J. Math. Phys., **3**, 131, 1962; Girardeau M. Phys. Rev., **A 140**, 1139, 1965.
5. Wentzel G. Phys. Rev., **120**, 1572, 1960.
6. Brout R. Phys. Rev., **115**, 824, 1959; Bloch C., Langer J. J. Math. Phys., **6**, 554, 1965.
7. Боголюбов Н. Н., Зубарев Д. Н., Церковников Ю. А. ЖЭТФ, **39**, 120, 1960.
8. Квасников И. А. ДАН СССР, **110**, 755, 1956.
9. Тябликов С. В. Методы квантовой теории магнетизма, гл. 4. М., 1965.
10. Загребнов В. А., Федянин В. К. «Теоретическая и математическая физика», **10**, 127, 1972.

Поступила в редакцию
19.2 1972 г.

Кафедра
теоретической физики