

УДК 531.19

С. В. Сёмкин<sup>1</sup>

В. П. Смагин<sup>2</sup>

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса  
Владивосток, Россия

## **Улучшение приближенных решений модели Изинга с помощью многочастичных спиновых корреляций**

Для теоретического анализа фазовых переходов в магнитных системах часто используется модель Изинга. Эта модель может служить точным описанием реальных систем. Кроме того, принцип универсальности позволяет распространить многие результаты, полученные для простых решеточных моделей Изинга и на более сложные системы. Однако точных решений для модели Изинга, практически нет. Фактически, единственным точным решением является решение Онзагера для квадратной решетки. Существуют, конечно, и приближенные методы решения, но они обладают принципиальными недостатками, а именно: приближенные методы дают завышенные оценки температуры Кюри и неправильно описывают особенности поведения системы вблизи точки фазового перехода. В настоящей работе показано, что существуют пути улучшения фактически любых приближенных методов. С помощью усреднения по обменным полям можно (в некоторых случаях) найти связь между спонтанной намагниченностью и средними произведениями трех и более соседних спинов. Используя эти связи, можно построить алгоритм улучшения приближенных решений. В работе найдены выражения для средних значений произведений трех соседних спинов в модели Изинга на решетках с координационными числами 3 и 4 как функции температуры и спонтанной намагниченности. С помощью этих выражений точное решение для модели Изинга на квадратной решетке сопоставляется с решениями, найденными приближенными методами. Предложен способ улучшения приближенных методов, применимый, в частности, к приближению Бете и приводящий к более точным значениям критической температуры и к изменению критического показателя температурной зависимости спонтанной намагниченности.

---

<sup>1</sup> Сёмкин Сергей Викторович – канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры информационных технологий и систем; e-mail: Li15@ Rambler.ru

<sup>2</sup> Смагин Виктор Павлович – д-р физ.-мат. наук, зав. лаборатории фундаментальной и прикладной физики; e-mail: Li15@ Rambler.ru

**Ключевые слова и словосочетания:** фазовые переходы, модель Изинга, критические индексы.

S. V. Semkin

V. P. Smagin

Vladivostok State University of Economics and Service

Vladivostok, Russia

## Improving approximate solutions of the Ising model using many-particle spin correlations

The Ising model is often used for the theoretical analysis of phase transitions in magnetic systems. This model can, in many cases, in itself serve as a fairly accurate description of real systems. In addition, the principle of universality allows one to extend many of the results obtained for simple lattice Ising models to more complex systems. However, there are practically no exact solutions for the Ising model. In fact, the only exact solution is Onsager's solution for a square lattice. There are, of course, approximate solution methods, but they have fundamental drawbacks. Namely, approximate methods give overestimated estimates of the Curie temperature and incorrectly describe the features of the behavior of the system near the phase transition point. However, as shown in this work, there are ways to improve virtually any approximate methods. It turns out that by averaging over the exchange fields it is possible (in some cases) to find a relationship between the spontaneous magnetization and the average products of three or more neighboring spins. Using these connections, one can construct an algorithm for improving approximate solutions. Expressions are found for the mean values of the products of three neighboring spins in the Ising model on lattices with coordination numbers 3 and 4 as a function of temperature and spontaneous magnetization. These expressions are used to compare the exact solution for the Ising model on a square lattice and the solutions found by approximate methods. A method for improving the approximate methods is proposed, applicable, in particular, to the Bethe approximation, and leading to more accurate values of the critical temperature and to a change in the critical exponent of the temperature dependence of the spontaneous magnetization.

**Keywords:** phase transitions, Ising model, critical exponents.

### Введение

Фазовые переходы в магнетиках являются предметом теоретических и экспериментальных исследований уже на протяжении многих лет [1–4]. Как известно, большинство приближенных методов описания критических явлений являются тем или иным вариантом теории среднего поля, в которой не учитываются корреляционные эффекты [1–5]. Однако и теоретические [5] и экспериментальные [2] исследования показывают, что роль крупномасштабных флуктуаций вблизи критической точки является определяющей. Феноменологически роль корреляционных эффектов можно учесть с помощью гипотезы подобия [3; 5], а микроскопически – в том или ином варианте ренормгруппового построения [2–5]. В настоящей работе мы показываем, что есть и другие пути учета влияния спиновых корреляций.

Эффективным инструментом анализа систем многих взаимодействующих частиц (например, магнетики) являются решеточные модели: модель Изинга, модель Поттса или модель Гейзенберга [5]. К сожалению, эффективность подобных решеточных моделей ограничена, как правило, невозможностью получить точное решение в подавляющем большинстве нетривиальных случаев. Известное решение Онсагера для двумерной модели Изинга на квадратной решетке [5] в отсутствие внешнего поля является одним из редких исключений из этого правила. Существует большое количество приближенных методов решения, в частности, модели Изинга: метод среднего поля, приближение Бете и разного рода их обобщения [5–9]. Решения, полученные этими методами, дают различные (как правило, завышенные) оценки для температуры Кюри и обладают рядом общих черт, объединяющих их между собой и отличающих от точного решения Онсагера, а именно: критические показатели решений, полученных приближенными методами, имеют так называемые «классические» значения, в частности, критический показатель температурной зависимости спонтанной намагниченности вблизи температуры Кюри равен  $1/2$  [5], в то время как в решении Онсагера он равен  $1/8$  [5]. Одной из причин этого различия является то обстоятельство, что в любой реальной решетке с координационным числом  $q > 2$  существует бесконечно много различных путей, соединяющих любые два узла решетки, а в приближенных методах используется, как правило, конечное (и небольшое) число таких путей. Поэтому спиновые корреляции в реальных решетках имеют большее значение, чем это учитывается в приближенных методах. В настоящей работе мы попытались количественно сравнить некоторые спиновые корреляции в точном решении модели Изинга для квадратной решетки с соответствующими корреляциями, полученными приближенными методами. Это сравнение подсказывает способ искусственной «коррекции» приближенных спиновых корреляций, приводящий к модификации исходного приближенного решения. Оказывается, что модифицированные таким путем решения имеют критический показатель температурной зависимости спонтанной намагниченности  $1/4$ , а температуры Кюри становятся значительно ближе к известным точным значениям.

### Усреднение по обменным полям и спиновые корреляции

Вычисление спиновых корреляций в модели Изинга на решетке с координационным числом  $q$  можно произвести с помощью метода усреднения по локальным обменным полям [6]. Суть этого метода заключается в следующем. Рассмотрим систему из  $N$  взаимодействующих частиц, каждая из которых характеризуется некоторым параметром  $\sigma$ , который в дальнейшем, имея в виду применение к модели Изинга, будем называть спином. Обозначим  $\Omega$  множество всех этих спинов, а гамильтониан системы  $H(\Omega)$ . Два спина  $\sigma_i$  и  $\sigma_j$  будем называть взаимодействующими, если в гамильтониане есть слагаемое, неаддитивно зависящее от  $\sigma_i$  и  $\sigma_j$ .

Рассмотрим в системе группу, содержащую  $n$  спинов. Такую группу мы будем в дальнейшем называть *кластером*. Множество входящих в кластер спинов обозначим  $c$ . Обозначим  $r$  множество не входящих в кластер спинов, каждый из которых взаимодействует хотя бы с одним спином кластера, и  $s$  множество

всех остальных спинов. Очевидно,  $\Omega$  является объединением непересекающихся множеств  $c$ ,  $r$  и  $s$ . Пусть теперь  $f(r)$  – некоторая функция спинов, принадлежащих  $r$ , а  $\varphi(c)$  некоторая функция кластерных спинов  $c$ . Тогда, как показано в [10], среднее по ансамблю значение произведения  $f\varphi$ :

$$f\varphi = \sum_r f(r)\varphi_r W(r), \quad (1)$$

при

$$\varphi_r = \frac{1}{Z_c(r)} \sum_c \varphi(c) \exp\left(\frac{-1}{kT} H_c(c, r)\right), \quad (2)$$

где  $W(r)$  – функция распределения для наборов состояний спинов множества  $r$ ;  
 $H_c(c, r)$  – «кластерный гамильтониан» – слагаемые в гамильтониане  $H(\Omega)$ , связанные с взаимодействием спинов, принадлежащих  $c$  и  $r$ ;  
 $k$  – постоянная Больцмана;  
 $T$  – температура.

«Кластерная» статистическая сумма  $Z_c(r) = \sum_c \exp\left(\frac{-1}{kT} H_c(c, r)\right)$ .

Формулу (1) можно интерпретировать следующим образом. Выражение (2) можно понимать как «кластерное среднее» функции  $\varphi(c)$ , вычисленное при условии, что конфигурация взаимодействующих с кластером спинов задана и неизменна. Выражение (1) в этом случае можно понимать как усреднение произведения  $f(r)\varphi_r$  по функции распределения  $W(r)$ . На использовании формулы (1) основан метод усреднения по полям взаимодействия.

Рассмотрим модель Изинга на некоторой решетке. Пусть в каждом узле решетки содержится изинговский «спин», принимающий значения +1 и -1, а взаимодействуют только спины, находящиеся в связанных узлах. Тогда гамильтониан модели Изинга можно записать так:

$$H(\Omega) = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j - H_{ex} \sum_i \sigma_i, \quad (3)$$

где  $J$  – энергия обменного взаимодействия; суммирование в первой сумме проводится по всем парам связанных спинов, во второй – по всем узлам.

Выделим теперь на решетке кластер, состоящий только из одного спина  $\sigma_0$ . Множество  $c$  в этом случае состоит только из этого спина  $\sigma_0$ , а множество  $r$  – из спинов его первой координационной сферы. Кластерный гамильтониан  $H_c(c, r) = -J\sigma_0 h - \sigma_0 H_{ex}$ , где  $h$  – сумма значений спинов, принадлежащих  $r$ , то есть сумма спинов, непосредственно взаимодействующих с  $\sigma_0$  (спинов первой координационной сферы). Будем называть эту сумму «полем взаимодействия», «кластерное среднее» (2) некоторой функции  $\varphi(c)$ , которая в этом случае зависит только от  $\sigma_0$ :

$$\varphi_r = \frac{\varphi(+1)\exp(Kh + h_{ex}) + \varphi(-1)\exp(-Kh - h_{ex})}{\exp(Kh + h_{ex}) + \exp(-Kh - h_{ex})}, \quad (4)$$

где  $K = J/kT$  и  $h_{ex} = H_{ex}/kT$ .

Рассмотрим случай, когда функция  $f(r)$  является функцией только поля взаимодействия  $h$ . Тогда, поскольку среднее (4) зависит только от  $h$ , среднее в (1) является, в сущности, усреднением по функции распределения  $W(h)$  этого поля взаимодействия:

$$f\varphi = \sum_h f(h)\varphi_r W(h). \quad (5)$$

Для модели Изинга на простой решетке с координационным числом  $q$  поле взаимодействия  $h$  может принимать только дискретные значения  $h_i = q - 2i$ ,  $i = 0, \dots, q$ . Среднее значение любого спина решетки одинаково и равно  $M$  – средней намагниченности в системе.

При отсутствии внешнего поля из (4) и (5) при  $f(h) = 1$  и  $\varphi = \sigma_0$  получим:

$$M = \sum_i W(h_i) h(Kh_i); \quad (6)$$

при  $\varphi = 1$  и  $f(h) = h^n$ , где  $n = 2p + 1$  – целое нечетное число

$$h^{2p+1} = \sum_i h_i^{2p+1} W(h_i); \quad (7)$$

а при  $\varphi = \sigma_0$  и  $f(h) = h^n$ , где  $n = 2p$  – целое четное число

$$h^{2p} \sigma_0 = \sum_i h_i^{2p} th(Kh_i) W(h_i). \quad (8)$$

Учитывая нечетность  $h^{2p+1}$ ,  $th(Kh)$  и  $h^{2p} th(Kh)$  как функций  $h$ , соотношения (6) – (8) можно представить в виде сумм только по положительным значениям  $h_i$ :

$$M = \sum_{i=0}^{n(q)} X_i th(K(q-2i)), \quad (9)$$

$$h^{2p+1} = \sum_{i=0}^{n(q)} X_i (q-2i)^{2p+1}, \quad (10)$$

$$h^{2p} \sigma_0 = \sum_{i=0}^{n(q)} X_i (q-2i)^{2p} th(K(q-2i)), \quad (11)$$

где  $X_i = W(h_i) - W(-h_i)$ , а  $n(q) = \left[ \frac{q-1}{2} \right]$  – целая часть  $\frac{q-1}{2}$ .

Выражения (9)–(11) дают возможность определить спиновые корреляции в модели Изинга на простой решетке. Рассмотрим, например, шестиугольную решетку ( $q = 3$ ). В этом случае в (9)–(11) остаются слагаемые, содержащие только  $X_0$  и  $X_1$ . Выражение (10) при  $p = 0$  дает среднее значение  $h$ , равное  $qM$ . Используя это выражение и равенство (9), найдем  $X_0$  и  $X_1$ :

$$X_0 = \frac{3thK - 1}{3thK - th3K} M, \quad X_1 = \frac{3(1 - th3K)}{3thK - th3K} M. \quad (12)$$

Рассмотрим среднее значение третьей степени поля взаимодействия  $h^3$ . Нетрудно показать, что

$$h^3 = q(3q-2)M + q(q-1)(q-2)S, \quad (13)$$

где  $S = \sigma_i \sigma_j \sigma_k$  – среднее значение произведения трех попарно различных спинов из первой координационной сферы.

При  $q = 3$  возможен только один выбор спинов, входящих в  $S$ , но в общем случае выбор трех спинов из первой координационной сферы можно произвести различными способами, тогда  $S$  – среднее взвешенное по всем таким способам.

Взяв в (10)  $p = 1$  и используя (12) и (13), получим:

$$S = \frac{3(thK + th3K) - 4}{3thK - th3K} M. \quad (14)$$

Из равенства (11) при  $p = 1$  можно аналогичным образом определить величину  $S_0 = \sigma_i \sigma_j \sigma_0$  – среднее значение произведения центрального спина и двух различных спинов из первой координационной сферы:

$$S_0 = \frac{4th3KthK - (thK + th3K)}{3thK - th3K} M. \quad (15)$$

Аналогичные вычисления можно сделать и для  $q = 4$ . Среднее значение  $S$  при этом оказывается равным:

$$S = \frac{(th4K + 2th2K) - 2}{2th2K - th4K} M, \quad (16)$$

а среднее значение  $S_0$ :

$$S_0 = \frac{(2th2K - 1)th4K}{2th2K - th4K} M. \quad (17)$$

На плоской квадратной решетке ( $q = 4$ )  $S_0 = (2S_{01} + S_{02})/3$ , где  $S_{01}$  – среднее значение произведения центрального спина и двух соседних спинов, связи между которыми и центральным узлом составляют прямой угол, а  $S_{02}$  – среднее для узлов, лежащих на одной линии.

#### **Модификация приближенных методов по спиновым корреляциям**

Вычисленные в предыдущем пункте средние значения (14)–(17) можно, в частности, использовать для оценки эффективности приближенных методов решения модели Изинга. Введем функции  $R(M)$  и  $R_0(M)$  следующим образом:

$$R_0(M) = \frac{S_0 - M^3}{M} \quad \text{и} \quad R(M) = \frac{S - M^3}{M}.$$

Эти функции (далее – «коррелянты») можно рассматривать как меру коррелированности значений некоторого спина в решетке и двух его соседей ( $R_0(M)$ )

или же трех спинов, соседних к одному узлу ( $R(M)$ ). Для квадратной решетки ( $q = 4$ ) эти функции, согласно (16) и (17), равны:

$$R_0(M) = \frac{(2th2K - 1)th4K}{2th2K - th4K} - M^2 = 1 - \left(\frac{1-x}{x}\right)^2 - M^2 \quad (18)$$

и

$$R(M) = \frac{(th4K + 2th2K) - 2}{2th2K - th4K} - M^2 = 1 - \frac{1}{x} \left(\frac{1-x}{x}\right)^2 - M^2, \quad (19)$$

где  $x = th2K$ .

Соотношения (18) и (19) позволяют найти  $R_0(M)$  и  $R(M)$ , если известна спонтанная намагниченность как функция температуры  $M = M(x)$  (точнее, обратная функция  $x = x(M)$ ). Однако эти же соотношения можно использовать в «обратном направлении»: если из каких-либо соображений найдены выражения для коррелянтов  $R_0$  или  $R$  как функции спонтанной намагниченности  $M$ , то из (18) и (19) можно найти спонтанную намагниченность как функцию температуры.

Для модели Изинга на квадратной решетке в отсутствие внешнего поля известно точное решение, полученное Онзагером и Янгом [5]:

$$M^8 = 1 - \frac{1}{sh^4 2K} = 1 - \left(\frac{1-x^2}{x^2}\right)^2, \quad (20)$$

откуда

$$x = 1 / \sqrt{1 + \sqrt{1 - M^8}}.$$

Используя это решение, из (18) и (19) получим точные значения коррелянтов  $R_0(M)$  и  $R(M)$  для квадратной решетки в отсутствие внешнего поля.

Пусть теперь есть некоторое приближенное решение для модели Изинга на квадратной решетке, определяющее приближенное значение спонтанной намагниченности  $M$  как функцию температурного параметра  $x$ . Представив это решение в виде  $x = \chi(M^2)$  и используя его в (18) и (19), можно получить приближенные значения спиновых коррелянтов  $\tilde{R}_0(M)$  и  $\tilde{R}(M)$ , соответствующих данному решению. (Мы полагаем, что  $x$  является функцией  $M^2$ , поскольку при отсутствии внешнего поля гамильтониан модели Изинга симметричен относительно одновременного изменения знаков всех спинов. Поэтому, если в приближенном решении учитывается это обстоятельство, каждому значению параметра  $x$  соответствуют два значения спонтанной намагниченности:  $+M$  и  $-M$ , а значит,  $x$  является четной функцией  $M$ .) Как уже было сказано ранее, в приближенных методах обычно недооценивается влияние корреляций, и поэтому мы ожидаем, что значения  $\tilde{R}_0(M)$  и  $\tilde{R}(M)$  будут меньше точных значений, вычисленных по (20). В частности, значения этих функций при  $M = 0$  должны быть меньше

соответствующих точных значений. Как видно из (18) и (19),  $R_0(0)$  и  $R(0)$  являются монотонно возрастающими функциями  $x$ . Поэтому чем меньше значения  $R_0(0)$  и  $R(0)$ , тем меньше критическое значение температурного параметра  $K_c$ . Другими словами, оценка температуры Кюри  $T_c = 1/K_c$  в приближенных решениях оказывается завышенной именно по причине недооценки спиновых корреляций.

Значение функции  $x = \chi(M^2)$  при  $M = 0$  определяет критическое значение температурного параметра  $x = th2K$ , то есть температуру Кюри, а критический показатель температурной зависимости спонтанной намагниченности определяется разложением этой функции в ряд по степеням  $M^2$ : если первый ненулевой член такого разложения имеет порядок  $M^{2n}$ , то критический показатель равен  $1/2n$ .

Рассмотрим в качестве примера приближение Бете [5] и его обобщение на некоторый класс рекурсивных решеток [7]. Как показано в работе [11], приближение Бете можно рассматривать как своего рода ренормгрупповое преобразование от единичного узла решетки с координационным числом  $q$  к димеру на той же решетке. Иначе говоря, рассмотрим кластер, состоящий из одного атома, находящегося в кристаллическом поле  $h_1$ . Средняя намагниченность этого атома равна:

$$m_1(h_1) = th(Kh_1 + h_{ex}). \quad (21)$$

Рассмотрим кластер из двух соседних атомов (димер), находящихся в кристаллическом поле  $h_2$ . Средняя намагниченность атома такого кластера:

$$m_2(h_2) = \frac{sh(2Kh_2 + 2h_{ex})}{ch(2Kh_2 + 2h_{ex}) + e^{-2K}}. \quad (22)$$

Намагниченность в приближении Бете находится приравниванием правых частей (21) и (22):

$$M = m_1(h_1) = m_2(h_2) \quad (23)$$

при дополнительном условии  $\frac{h_2}{h_1} = \frac{q-1}{q}$  [11]. Такая «ренормгрупповая» трактовка приближения Бете подсказывает естественное обобщение [8]: помимо димера можно рассмотреть более сложный кластер на решетке, например, циклический кластер, состоящий из  $N$  атомов, находящихся в кристаллическом поле  $h_N$ . Величину  $N$  можно взять равной количеству узлов, содержащихся в кратчайшем замкнутом пути на данной решетке, например, для квадратной решетки  $N = 4$ , для шестиугольной  $N = 6$  и т.д. Средняя намагниченность атома такого кластера:

$$m_N(h_N) = \frac{\lambda_1^N - \lambda_2^N}{\lambda_1^N + \lambda_2^N} \frac{e^K sh(Kh_N + h_{ex})}{\sqrt{e^{2K} sh^2(Kh_N + h_{ex}) + e^{-2K}}}, \quad (24)$$

где  $\lambda_{1,2} = e^K ch(Kh_N + h_{ex}) \pm \sqrt{e^{2K} sh^2(Kh_N + h_{ex}) + e^{-2K}}$ . Приравнивая теперь правые части (22) и (25) при дополнительном условии  $\frac{h_N}{h_1} = \frac{q-2}{q}$  и правые части (22) и (24)

при условии  $\frac{h_N}{h_2} = \frac{q-2}{q-1}$ , получим, аналогично (23), два приближения, улучшающие приближение Бете. Будем называть их «кластерными приближениями  $1-N$  и  $2-N$ ». (В работе [8] показано, что для некоторых значений  $q$  эти приближения можно понимать как точные решения для определенным образом построенных рекурсивных решеток.) Нетрудно показать, что и приближение Бете и его кластерные улучшения имеют критический показатель температурной зависимости спонтанной намагниченности, равный  $1/2$ .

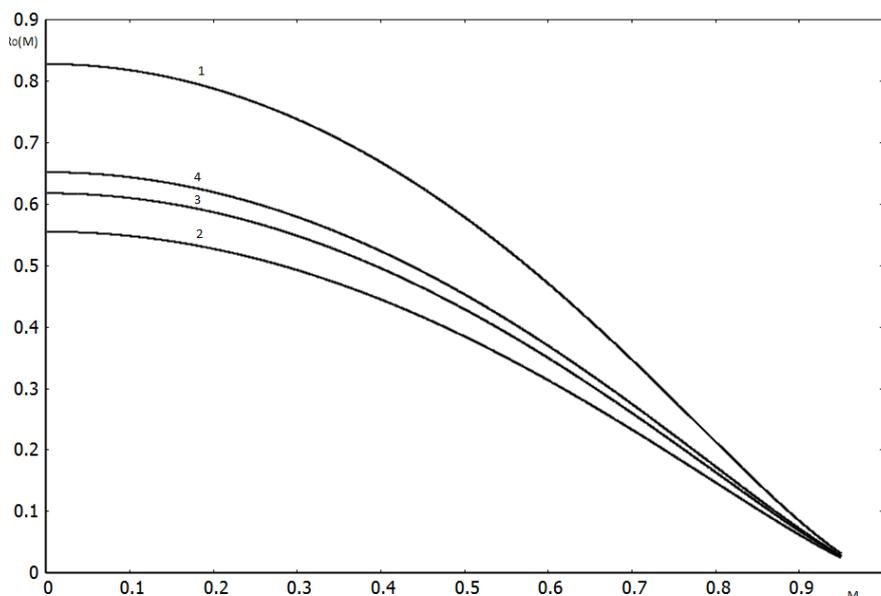


Рис. 1. Коррелянт  $R_0(M)$  как функция спонтанной намагниченности  $M$  для квадратной решетки: кривая 1 – точное значение, кривая 2 – приближение Бете, кривые 3 и 4 – кластерные приближения  $1-N$  и  $2-N$  соответственно

На рисунке 1 приведены графики коррелянта  $R_0(M)$  (кривая 1) и его приближенных значений  $R_0(M)$  в приближении Бете (кривая 2) и в кластерных приближениях  $1-N$  и  $2-N$  (кривые 3 и 4 соответственно), вычисленные для  $q = 4$  и  $h_{ex} = 0$ . Видно, что для всех приближений значения коррелянтов при любом  $M$  меньше точных значений, найденных по (20) (кривые 1), что подтверждает высказанное выше предположение. Аналогично ведут себя коррелянт  $R(M)$  и его приближенные значения  $\tilde{R}(M)$ .

Однако графики и точных, и приближенных коррелянтов, как видно из рис. 1, имеют сходный вид. Построим для каждого из приближенных коррелянтов отношение его значения к точному –  $\tilde{R}_0(M)/R_0(M)$  и  $\tilde{R}(M)/R(M)$ . На рисунке 2

приведены графики отношений  $\tilde{R}_0(M)/R_0(M)$  для всех трех рассматриваемых приближений. Видно, что за исключением области вблизи  $M = 1$  эти отношения близки к некоторым постоянным значениям, своим для каждого приближения, но всегда меньшим единицы. Отношения  $\tilde{R}(M)/R(M)$  имеют аналогичный вид.

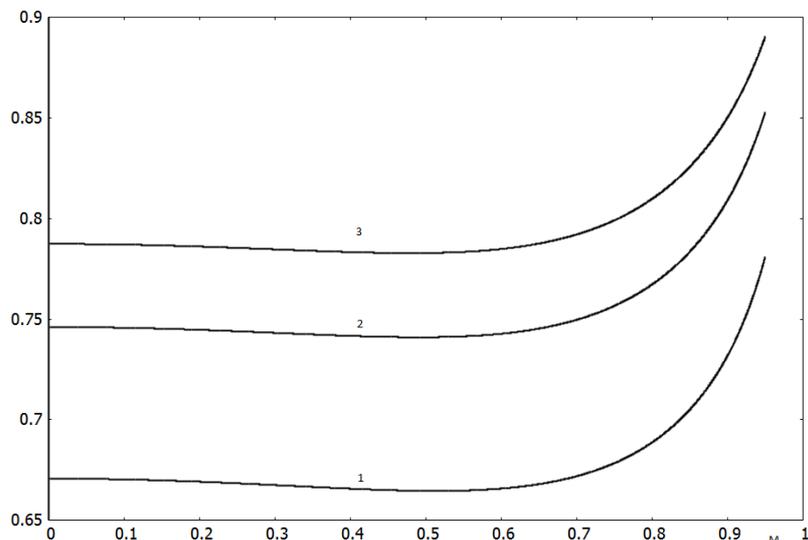


Рис. 2. Отношения приближенных значений коррелянта  $R_0(M)$  к точному как функция спонтанной намагниченности  $M$  : кривая 1 – приближение Бете, кривые 2 и 3 – кластерные приближения  $1-N$  и  $2-N$  соответственно

Такое поведение этих функций наводит на мысль о возможности улучшения приближенных методов расчета спонтанной намагниченности путем модификации соответствующих коррелянтов. Вычислив в некотором приближении, например, коррелянт  $R(M)$ , умножим его на некоторую константу  $A > 1$ . Полученный таким образом коррелянт будем называть модифицированным. Подставим теперь модифицированный коррелянт в формулу (19) и решим полученное уравнение относительно  $M$ . Это решение и есть модифицированная спонтанная намагниченность как функция температуры, т. е. модифицированная спонтанная намагниченность как функция температурного параметра.

$x = th2K$  находится, согласно (19), из условия

$$F(x) = AF(\chi(M^2)) - (A-1)M^2, \tag{25}$$

где

$$F(x) = 1 - \frac{1}{x} \left( \frac{1-x}{x} \right)^2.$$

Значение константы  $A$  ограничено условием однозначности модифицированной спонтанной намагниченности как функции температуры. Для малых значений  $M$  разложим правую часть (26) до первого порядка по  $M^2$  :

$$F(x) = AF(\chi(0)) + (1 - A(1 - F'(\chi(0))\chi'(0))M^2 + \dots \quad (26)$$

Поскольку  $F(x)$  – монотонно возрастающая функция  $x$ , коэффициент при  $M^2$  в этом выражении не может быть отрицательным, то есть

$$A \leq A_m = 1 / (1 - F'(\chi(0))\chi'(0)).$$

Из этого выражения видно, что, если  $\chi'(0) \neq 0$ , то есть приближенный метод, из которого находится функция  $x = \chi(M^2)$ , приводит к классическому критическому показателю температурной зависимости спонтанной намагниченности, его можно нетривиально модифицировать описанным выше способом, выбрав максимально возможное значение параметра  $A = A_m$ . Модифицированное критическое значение температурного параметра  $x_c = th2K_c$  находится из условия  $F(x_c) = F(\chi(0)) / (1 - F'(\chi(0))\chi'(0))$ , а разложение в правой части (27) начинается с членов порядка  $M^4$ , что приводит к уменьшению критического показателя с  $1/2$  до  $1/4$ .

Аналогичным образом можно использовать для модифицирования и коррелянт  $R_0(M)$ , умножая его на постоянную  $B_m = 1 / (1 - F_0'(\chi(0))\chi'(0))$ , где  $F_0(x) = 1 - \left(\frac{1-x}{x}\right)^2$ .

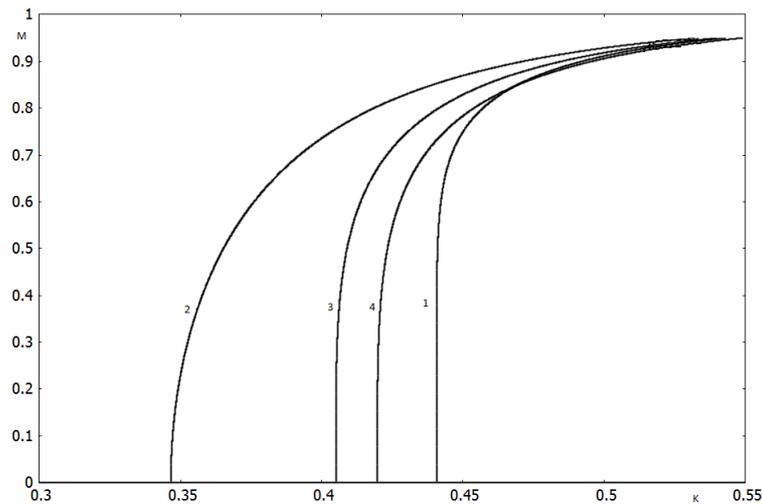


Рис. 3. Спонтанная намагниченность  $M$  как функция температурного параметра  $K = \frac{J}{kT}$  для модели Изинга на квадратной решетке: кривая 1 – точное значение, кривая 2 – приближение Бете, кривые 3 и 4 – модифицированное приближение Бете по коррелянтам  $R(M)$  и  $R_0(M)$  соответственно

Для приближения Бете при  $q = 4$  и  $h_{ex} = 0$  нетрудно вычислить  $\chi(0) = 3/5$ ,  $\chi'(0) = 2/25$ ,  $F(\chi(0)) = 7/27$  и  $F'(\chi(0)) = 200/27$ . Используя эти значения, найдем модифицированное значение  $K_c \approx 0,405$ , что ближе к получаемому из (21) точному значению 0,441, чем значение 0,347, которое дает немодифицированный метод Бете. Если же использовать для модификации коррелянт  $R_0(M)$ , модифицированное значение  $K_c \approx 0,420$ , что еще ближе к точному значению. На рисунке 3 показаны графики спонтанной намагниченности как функции  $K$ , найденные в приближении Бете (кривая 2) и в приближении Бете, модифицированном по коррелянтам  $R(M)$  и  $R_0(M)$  (кривые 3 и 4 соответственно). На этом же рисунке приведено точное значение  $M(K)$ , вычисленное по (20) (кривая 1). Подобным образом можно произвести модификацию кластерных приближений  $1-N$  и  $2-N$  по коррелянтам  $R_0(M)$  и  $R(M)$ , но это выходит за рамки настоящей работы.

Используя спиновые средние (14) и (15), можно построить выражения для коррелянтов  $R_0(M)$  и  $R(M)$  для решетки с координационным числом  $q = 3$  (шестиугольная решетка):

$$R(M) = \frac{4th3KthK - (thK + th3K)}{3thK - th3K} - M^2 = 1 - \frac{1}{2} \left( \frac{1-y}{y} \right)^3 - M^2 \quad (27)$$

и

$$R_0(M) = \frac{3(thK + th3K) - 4}{3thK - th3K} - M^2 = 1 - \frac{y}{2} \left( \frac{1-y}{y} \right)^3 - M^2, \quad (28)$$

где  $y = thK$ .

Для модели Изинга на этой решетке не найдено точное решение, хотя известно [5], что критическое значение температурного параметра  $K_c \approx 0,658$ , а приближение Бете дает значение  $K_c \approx 0,549$ , это меньше точного значения, как и для квадратной решетки. Построив процедуру модификации приближения Бете тем же способом, что и для квадратной решетки, найдем модифицированное по коррелянту  $R(M)$  значение  $K_c \approx 0,629$ , а модификация по коррелянту  $R_0(M)$  дает  $K_c \approx 0,640$ , что заметно ближе к точному значению, чем немодифицированное приближение Бете.

### Заключение

С помощью метода усреднения по обменным полям [10] было показано, что для модели Изинга на решетках с координационными числами 3 и 4 средние значения произведений трех соседних спинов в отсутствие внешнего поля прямо пропорциональны спонтанной намагниченности; вычислены коэффициенты этой пропорциональности (выражения (14)–(17)), зависящие только от температуры. Для квадратной решетки эти выражения позволяют найти точные значения спиновых средних, используя известное точное решение Онзагера.

По выражениям (14)–(17) можно построить приближенные значения спиновых средних (или связанных с этими средними коррелянтов  $R_0(M)$  и  $R(M)$ ), если для температурной зависимости спонтанной намагниченности использовать значения, найденные приближенными методами. Показано, что приближение Бете и некоторые его обобщения дают заниженные по сравнению с точным значением спиновых коррелянтов (см. рис. 1).

Предложен способ модификации приближенных методов решения модели Изинга, основанный на искусственной коррекции приближенных коррелянтов. Показано, что для приближения Бете такая модификация дает более точные значения критической температуры и меняет значение критического показателя температурной зависимости спонтанной намагниченности с  $1/2$  до  $1/4$ .

1. Изюмов Ю. А., Медведев М. В. Теория магнитоупорядоченных кристаллов с примесями. – Москва: Наука, 1970. – 271 с.
2. Фольк Р., Головач Ю., Яворский Т. Критические показатели трехмерной слабо разбавленной замороженной модели Изинга // Успехи физических наук. – 2003. Т. 173, № 2. – С. 175–200.
3. Шалаев Б. Н. Дуальные симметрии и универсальность критического поведения неупорядоченного изинговского ферромагнетика // Физика твердого тела. – 2010. – Вып. 1 – С. 283.
4. Мейлихов Е. З., Фарзетдинова Р. М. Максимальная плотность магнитной записи и распределение переключающих полей // Физика твердого тела. – 2014. – Т. 56. – Вып. 12.
5. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике. – Москва: Мир, 1985 = Baxter R. J. Exactly solved models in statistical mechanics. – New-York: Academic Press, 1982.
6. Смагин В. П., Семкин С. В. Рекуррентные решетки и самосогласованные уравнения в модели Изинга // Территория новых возможностей. Вестник Владивостокского государственного университета экономики и сервиса. – 2019. – Т. 11, № 2. – С. 139–149.
7. Сёмкин С. В., Смагин В. П., Гусев Е. Г. Модель Изинга с немагнитным разбавлением на рекурсивных решетках // Теоретическая и математическая физика. – 2020. – Т. 202, № 2. – С. 304–311.
8. Семкин С. В., Смагин В. П. Приближенные методы в теории чистых и разбавленных магнетиков. – Владивосток: Изд-во ВГУЭС, 2019. – 220 с.
9. Сёмкин С. В., Смагин В. П., Юдин П. В. Самосогласованное приближение в модели Изинга чистого и разбавленного магнетика с использованием парной корреляции // Теоретическая и математическая физика. – 2020. – Т. 205, № 1. – С. 138–146.
10. Сёмкин С. В., Смагин В. П., Люлько В. И. Использование усреднения по полям взаимодействия для построения приближенных методов в модели Изинга разбавленного магнетика // Физика твердого тела. – 2020. – Т. 62, №8. – С. 1209.
11. Сёмкин С. В., Смагин В. П. Кластерный способ построения приближения Бете для модели Изинга разбавленного магнетика // Известия вузов. Физика. – 2017. – Т. 60, Вып. 10. – С. 140–145.

#### Транслитерация

1. Izyumov Yu. A., Medvedev M. V. Teoriya magnitoporyadochennyh kristallov s primesyami. – Moskva: Nauka, 1970. – 271 s.
2. Fol'k R., Golovach Yu., YAvorskij T. Kriticheskie pokazateli trekhmernoj slabo razbavlennoj zamorozhennoj modeli Izinga // Uspekhi fizicheskikh nauk. – 2003. Т. 173, № 2. – S. 175–200.

3. Shalaev B. N. Dual'nye simmetrii i universal'nost' kriticheskogo povedeniya neuporyadochennogo izingovskogo ferromagnitika // Fizika tverdogo tela. – 2010. – Vyp. 1 – S. 283.
4. Mejlilov E. Z., Farzetdinova R. M. Maksimal'naya plotnost' magnitnoj zapisi i raspredelenie pereklyuchayushchih polej // Fizika tverdogo tela. – 2014. – Т. 56. – Vyp. 12.
5. Bekster R. Tochno reshaemye modeli v statisticheskoy mekhanike. – Moskva: Mir, 1985 = Baxter R. J. Exactly solved models in statistical mechanics. – New-York: Academic Press, 1982.
6. Smagin V. P., Semkin S. V. Rekurrentnye reshetki i samosoglasovannye uravneniya v modeli Izinga // Territoriya novyh vozmozhnostej. Vestnik Vladivostokskogo gosudarstvennogo universiteta ekonomiki i servisa. – 2019. – Т. 11, № 2. – S. 139–149.
7. Sëmkin S. V., Smagin V. P., Gusev E. G. Model' Izinga s nemagnitnym razbavleniem na rekursivnyh reshetkah // Teoreticheskaya i matematicheskaya fizika. – 2020. – Т. 202, № 2. – S. 304–311.
8. Semkin S. V., Smagin V. P. Priblizhennyye metody v teorii chistyyh i razbavlenyyh magnetikov. – Vladivostok: Izd-vo VGUES, 2019. – 220 s.
9. Semkin S. V., Smagin V. P., Yudin P. V. Samosoglasovannoe priblizhenie v modeli Izinga chistogo i razbavlennoy magnetika s ispol'zovaniem parnoy korrelyacii // Teoreticheskaya i matematicheskaya fizika. – 2020. – Т. 205, № 1. – S. 138–146.
10. Semkin S. V., Smagin V. P., Lyul'ko V. I. Ispol'zovanie usredneniya po polyam vzaimodejstviya dlya postroeniya priblizhennykh metodov v modeli Izinga razbavlennoy magnetika // Fizika tverdogo tela. – 2020. – Т. 62, №8. – S. 1209.
11. Semkin S. V., Smagin V. P. Klasternyy sposob postroeniya priblizheniya Bete dlya modeli Izinga razbavlennoy magnetika // Izvestiya vuzov. Fizika. – 2017. – Т. 60, Vyp. 10. – S. 140–145.

© С. В. Сёмкин, 2021

© В. П. Смагин, 2021

**Для цитирования:** Сёмкин С. В., Смагин В. П. Улучшение приближенных решений модели Изинга с помощью многочастичных спиновых корреляций // Территория новых возможностей. Вестник Владивостокского государственного университета экономики и сервиса. – 2021. – Т. 13, № 1. – С. 171–184.

**For citation:** Semkin S. V., Smagin V. P. Improving approximate solutions of the Ising model using many-particle spin correlations, *The Territory of New Opportunities. The Herald of Vladivostok State University of Economics and Service*, 2021, Vol. 13, № 1, pp. 171–184.

DOI <https://doi.org/10.24866/VVSU/2073-3984/2021-1/171-184>

Дата поступления: 05.02.2021.