DOI dx.doi.org/10.24866/VVSU/2073-3984/2020-2/148-157

УДК 531.19

С. В. Сёмкин[1]

В. П. Смагин[2]

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса
Владивосток. Россия

Усреднение по полям взаимодействия и спиновые корреляции в модели Изинга

В теории фазовых переходов в магнитных системах существует небольшое количество точных результатов. Одним из них является известное решение Онзагера для модели Изинга на квадратной решетке. Проблема фазовых переходов в магнетиках является частным случаем проблемы многих тел. В этой области существует множество подходов и методов, в том числе метод усреднения по обменным полям. Функция распределения по полям взаимодействия к изучению свойств системы многих взаимодействующих частиц применяется давно. В предыдущих работах авторов метод усреднения по обменным полям был применен к анализу магнитных свойств чистых и разбавленных магнетиков. В настоящей работе сформулированы и доказаны соотношения, на которых может быть основан метод усреднения по обменным полям применительно к кластерам из нескольких спинов. Оказывается, что, основываясь только на возможности представить термодинамические средние в виде средних по функции распределения полей, можно получить некоторые нетривиальные точные соотношения. В работе рассмотрена модель Изинга на простых решетках с координационными числами, равными три и четыре. Найдены точные выражения, связывающие средние произведения трех спинов со спонтанной намагниченностью в системе. Получены неравенства, ограничивающие предельное значение температуры Кюри и максимальное значение спонтанной намагниченности при данной температуре.

Ключевые слова и словосочетания: фазовые переходы; модель Изинга; точное решение.

---

[1] Сёмкин Сергей Викторович – канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры информационных технологий и систем; e-mail: Li15@rambler.ru

[2] Смагин Виктор Павлович – д-р физ.-мат. наук, профессор, зав. лаборатории фундаментальной и прикладной физики; e-mail: Li15@rambler.ru

S.V. Semkin

V.P. Smagin

Vladivostok State University of Economics and Service
Vladivostok. Russia

Averaging over interaction fields and spin correlations in the Ising model

In the theory of phase transitions in magnetic systems, there are a small number of exact results. One of them is the well-known Onsager solution for the Ising model on a square lattice. The problem of phase transitions in magnets is a special case of the problem of many bodies. There are many approaches and methods in this area, including the method of averaging over exchange fields. The application of the distribution function over interaction fields to the study of the properties of a system of many interacting particles has been used for a long time. In previous works of the authors, the method of averaging over exchange fields was applied to the analysis of the magnetic properties of pure and diluted magnets. In this paper, we formulate and prove the relations on which the method of averaging over exchange fields can be based on clusters of several spins. It turns out that based only on the possibility of representing thermodynamic means as means of the distribution function of the fields, some nontrivial exact relations can be obtained. The paper considers the Ising model on simple lattices with coordination numbers of three and four. Exact expressions are found that connect the average products of three spins with spontaneous magnetization in the system. Inequalities are obtained that limit the limiting value of the Curie temperature and the maximum value of spontaneous magnetization at a given temperature.

Keywords: phase transitions, Ising model, exact solution.

В задачах статистической физики широко используется метод Гиббса, основанный на вычислении статистической суммы системы [1]. При всех достоинствах этого метода, с его помощью, как правило, не удается получить никаких конкретных результатов если статистическую сумму нельзя вычислить точно. В методе Гиббса термодинамические средние представляются как средние по так называемому ансамблю Гиббса. Эти средние можно представить и в иной форме, с помощью усреднения по функции распределения по полям взаимодействия [2]. Это представление не является альтернативой методу Гиббса, поскольку не содержит способа явного нахождения функций распределения полей. Однако его можно использовать для построения приближенных решений как для чистых, так и для разбавленных магнетиков [2]. В данной работе мы покажем, что это не единственный путь для использования представления термодинамических средних через функции распределения по полям взаимодействия. Это представление можно использовать для получения некоторых отдельных точных результатов в тех случаях, когда полное точное решение не представляется возможным.

Применение функции распределения по полям взаимодействия к изучению свойств системы многих взаимодействующих частиц началось с работы Чандрасекара [3]. В этой работе рассматривалось движение системы галактик, связанных гравитационным взаимодействием. Позднее этот метод был использован для оценки влияния магнитостатического взаимодействия мелких ферримагнитных частиц, находящихся в немагнитной матрице [4]. В работах [5–7] метод усреднения по обменным полям был применен к анализу магнитных свойств чистых и разбавленных магнетиков.

Сформулируем и докажем соотношения, на которых может быть основан метод усреднения по обменным полям применительно к кластерам из одного или нескольких спинов.

Рассмотрим систему из N взаимодействующих частиц, каждая из которых характеризуется некоторым параметром σ, который в дальнейшем, имея в виду применение к модели Изинга, будем называть спином. Обозначим Ω множество всех этих спинов, а гамильтониан системы обозначим $H(\Omega)$. Конкретный вид гамильтониана значения не имеет, но мы будем полагать, что для каждого спина σ_i в гамильтониане есть конечное число слагаемых, содержащих σ_i. Причем это число остается конечным и в термодинамическом пределе $N \to \infty$. Два спина σ_i и σ_j будем называть взаимодействующими, если в гамильтониане есть слагаемое, не аддитивно зависящее от σ_i и σ_j.

Рассмотрим в системе группу, содержащую n спинов. Такую группу мы будем в дальнейшем называть *кластером*. Множество входящих в кластер спинов будем обозначать c. Обозначим r множество не входящих в кластер спинов, каждый из которых взаимодействует хотя бы с одним спином кластера и обозначим s множество всех остальных спинов. Очевидно, Ω является объединением непересекающихся множеств c, r и s.

Выделим теперь в гамильтониане слагаемые, связанные с взаимодействием спинов, принадлежащих c и r:

$$H(\Omega) = H_c(c,r) + H_s(r,s).$$

Гамильтониан $H_c(c, r)$ содержит только слагаемые, зависящие от спинов кластера c и слагаемые, описывающие взаимодействие спинов кластера со спинами из множества r. Гамильтониан $H_s(r, s)$ содержит все остальные слагаемые, входящие в $H(\Omega)$. Тогда статистическую сумму системы можно записать в виде:

$$Z = \sum\nolimits_r Z_c(r) Z_s(r), \tag{1}$$

где

$$Z_s(r) = \sum\nolimits_s \exp\left(-\frac{1}{kT} H_s(r,s)\right) \text{ и } Z_c(r) = \sum\nolimits_c \exp\left(-\frac{1}{kT} H_c(c,r)\right).$$

Каждое слагаемое в (1) имеет смысл (ненормированной) вероятности того, что система спинов r будет находиться в некотором состоянии. Нормированная вероятность $W(r) = Z_c(r) Z_s(r) / Z$ есть функция распределения для наборов состояний спинов, взаимодействующих с кластером.

Пусть $f(r)$ – некоторая функция спинов, принадлежащих r, а $\varphi(c)$ – некоторая функция кластерных спинов c, тогда среднее по ансамблю значение произведения $f\varphi$ можно представить в виде:

$$\langle f\varphi\rangle = \frac{1}{Z}\sum_r f(r)\left(\sum_c \varphi(c)\exp\left(-\frac{1}{kT}H_c(c,r)\right)\right)Z_s(r).$$

Разделив и умножив каждое слагаемое в этой сумме на «кластерную» статсумму $Z_c(r)$, запишем полученное выражение в виде:

$$\langle f\varphi\rangle = \sum_r f(r)\langle\varphi\rangle_r W(r), \tag{2}$$

где

$$\langle\varphi\rangle_r = \frac{1}{Z_c(r)}\sum_c \varphi(c)\exp\left(-\frac{1}{kT}H_c(c,r)\right) \tag{3}$$

Выражение (3) можно понимать как «кластерное среднее» функции $\varphi(c)$, вычисленное при условии, что конфигурация взаимодействующих с кластером спинов задана и неизменна. Выражение (2) в этом случае можно понимать как усреднение произведения $f(r)\langle\varphi\rangle_r$ по функции распределения $W(r)$. На использовании формулы (2) и основан метод усреднения по полям взаимодействия.

Рассмотрим модель Изинга на некоторой решетке. Этой решеткой может быть какая-нибудь периодическая решетка с координационным числом q, но, в принципе, под словом «решетка» можно понимать произвольный граф (не содержащий, разумеется, петель и параллельных ребер). 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:

$$H(\Omega) = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j - H_{ex}\sum_i \sigma_i\ . \tag{4}$$

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 σ_0. Кластерный гамильтониан $H_c(c,r) = -J\sigma_0\sum_{\sigma_i\in r}\sigma_i - \sigma_0 H_{ex}$, а формула (2), в которой примем $f = 1$ и $\varphi = \sigma_0$, приводит к

$$\langle\sigma_0\rangle = \sum_r th\left(K\sum_{\sigma_i\in r}\sigma_i + h_{ex}\right)W(r), \tag{5}$$

что совпадает с полученным в [8].

Для простой решетки средние значения каждого спина равны между собой и равны m – макроскопической намагниченности системы. В более сложных случаях средние значения (5) (и функции распределения $W(r)$ могут быть различны для разных спинов.

Условная вероятность (5) является функцией суммы значений спинов, принадлежащих *r*, то есть суммы спинов, непосредственно взаимодействующих с σ_0. Будем называть эту сумму «полем взаимодействия» и обозначим *h*, усреднение в (5) является, в сущности, усреднением по функции распределения этого поля взаимодействия

$$\langle \sigma_0 \rangle = \int th(Kh + h_{вх})W(h)dh, \qquad (6)$$

где

$$W(h) = \sum_r \delta\left(h - \sum_{\sigma_i \in r} \sigma_i \right) W(\{\sigma\}_r), \qquad (7)$$

здесь δ – дельта-функция.

Таким образом, среднюю намагниченность каждого конкретного спина в модели Изинга на любой решетке можно рассматривать как среднее значение $th(Kh + h_{ex})$ по функции распределения «полей взаимодействия» $W(h)$, вычисленной для этого спина.

Рассмотрим кластер из одного атома со спином σ_0 на произвольной простой решетке с координационным числом *q*. В этом случае поле взаимодействия может принимать только дискретные значения $h_i = q - 2i$, $i = 1,...q$. При отсутствии внешнего поля, из (6) получим:

$$m = \sum_i W(h_i)th(Kh_i). \qquad (8)$$

Кроме того, среднее значение самого поля взаимодействия *h* равно qm. Другими словами,

$$m = \sum_i W(h_i)\frac{h_i}{q}. \qquad (9)$$

Вычитая (8) из (9) получим

$$\sum_i W(h_i)\left(\frac{h_i}{q} - th(Kh_i) \right) = 0. \qquad (10)$$

Учитывая нечетность функции $\frac{h}{q} - th(kh)$ как функции *h*, соотнощение (10) можно представить в виде суммы только по положительным значениям h_i:

$$\sum_i X_i \left(\frac{h_i}{q} - th(Kh_i) \right) = 0, \qquad (11)$$

где $X_i = W(h_i) - W(-h_i)$. При $m > 0 \quad 1 > X_i > 0$. Следовательно, для выполнения равенства (11) при $X_i > 0$ необходимо, чтобы хотя бы один коэффициент $\frac{h_i}{q} - th(Kh_i)$ был бы меньше нуля, то есть, *K* должно удовлетворять неравенству

$$K > \frac{1}{2h_i} In\left(\frac{q+h_i}{q-h_i}\right) \tag{12}$$

хотя бы для одного h_i . Иными словами, *K* не может быть меньше, чем самое маленькое значение в правой части неравенства (12). Легко показать, что это минимальное значение достигается при наименьшем ненулевом h_i , которое равно 2 при четных *q* и равно 1 при нечетных. Таким образом, для модели Изинга на простой решетке с координационным числом *q* ненулевое значение спонтанной намагниченности возможно только при $K > K_{min}$, где

$$K_{\min} = \begin{cases} \frac{1}{4} In\left(\frac{q+2}{q-2}\right), \text{при } q = 2n \\ \frac{1}{2} In\left(\frac{q+1}{q-1}\right), \text{при } q = 2n-1. \end{cases} \tag{13}$$

Рассмотрим шестиугольную решетку (*q* = 3). В этом случае в (8) и (9) остаются слагаемые, содержащие только X_0 и X_1. Выразив эти величины через *m*, получаем следующий результат:

$$X_0 = \frac{3thK - 1}{3thK - th3K^m}, \tag{14}$$

$$X_1 = \frac{3(1 - th3K)}{3thK - th3K^m}. \tag{15}$$

Видно, что при $m > 0$ условие $X_1 > 0$ выполняется при любом значении *K*, а условие $X_0 > 0$ дает нижнюю границу значений *K*, при которых возможна спонтанная намагниченность: $K > arcth\left(\frac{1}{3}\right) \approx 0{,}347$, что совпадает с (13) при $q = 3$. Однако в этом случае можно получить более сильное ограничение на критическое значение температурного параметра *K*. Вычислим *S* – среднее значение произведения всех трех спинов, соседних с центральным узлом. Это произведение равно +1 в случае, когда каждый из этих спинов равен +1 и в случае, когда в точности два из трех спинов равны -1, а третий равен +1; во всех остальных случаях это произведение равно -1. Другими словами,

$$S = W(3) + W(-1) - W(-3) - W(1) = X_0 - X_1 .$$

Очевидно, при $m > 0$ должно выполняться и условие $S > 0$ или

$$S=\frac{3(thK+th3K)-4}{3rhK-th3K}m>0. \qquad (16)$$

Это условие выполняется при $K>\tilde{K}$, где $\tilde{K}\approx 0{,}475$ корень уравнения $thK+th3K=\frac{4}{3}$. (Отметим, что если в выражении (20) полностью пренебречь корреляцией спинов и принять $S = m^3$, получим приближение усреднения по обменным полям, описанное в [5].)

Вычислим теперь среднее значение произведения центрального спина σ_0 на квадрат поля взаимодействия:

$$9X_0th3K+X_1thK=3m+6S_1,$$

где S_1 – среднее значение произведения центрального спина σ_0 и двух из трех соседних к нему спинов. Учитывая, что $X_0th3K+X_1thK=m$, приводим выражение к виду

$$S_1=\frac{4th3KthK-(thK+th3K)}{3thK-th3K}m. \qquad (17)$$

Уравнение (17) тоже можно использовать для нахождения нижней границы критического параметра, но полученная таким путем оценка не улучшает полученную из (15). Однако из (16) и (17) следует, что в области существования спонтанной намагниченности должно выполняться равенство

$$\frac{S}{S_1}=\frac{3(thK+th3K)-4}{4th3KthK-(thK+th3K)}. \qquad (18)$$

Из равенств (16) и (17) можно получить известное приближение Бете, если предположить, что соседние к центральному узлу спины скоррелированы только через этот центральный спин, то есть приближение Бете получится, если предположить, что

$$S=\left(\frac{1+m}{2}\right)\mu_1^3+\left(\frac{1-m}{2}\right)\mu_2^3 \text{ и } S_1=\left(\frac{1+m}{2}\right)\mu_1^2+\left(\frac{1-m}{2}\right)\mu_2^2,$$

где μ_1 и μ_2 – параметры, связанные соотношением $m=\left(\frac{1+m}{2}\right)\mu_1+\left(\frac{1-m}{2}\right)\mu_2$.

Сумма X_0+X_1 имеет смысл среднего знака поля взаимодействия и поэтому не может превышать 1. То есть

$$\frac{3(thK-th3K)+2}{3thK-th3K}m<1,$$

что приводит к ограничению максимального значения спонтанной намагниченности m

$$m < \frac{3thK - th3K}{3thK - th3K + 2(1 - th3K)} . \tag{19}$$

Аналогично для q = 4 (плоской квадратной и объемной тетраэдрической решеток) из (8), (9) получим

$$X_0 = \frac{2th2K - 1}{2th2K - th4K^m}, \tag{20}$$

$$X_1 = \frac{2(1 - th4K)}{2th2K - th4K^m}. \tag{21}$$

Сумма $X_0 + X_1$ имеет, как и для шестиугольной решетки, смысл среднего знака поля взаимодействия и не может превышать 1. Отсюда

$$m < \frac{2th2K - th4K}{2th2K - th4K + (1 - th4K)} . \tag{22}$$

Расчет показывает, что известное точное решение Онзагера [1] для плоской квадратной решетки $m = \left(1 - \frac{1}{sh^4(2K)}\right)^{1/8}$, а также решение в приближении Бете [1] удовлетворяют ограничению (22), а решение в приближении среднего поля нарушает это ограничение. Этот результат согласуется с тем, что приближение Бете можно рассматривать как точное решение на рекурсивной решетке – решетки Бете.

Найдем теперь S – среднее значение произведения трех из четырех спинов, соседних с центральным узлом:

$$S = X_0 - \frac{X_1}{2} = \frac{(th4K + 2th2K) - 2}{2th2K - th4K} m. \tag{23}$$

Найдем теперь $\overline{S}_1$ – среднее значение произведения центрального спина σ_0 и двух из четырех соседних к нему спинов. В тетраэдрической решетке все тройки узлов, состоящих из центрального узла и двух его соседей, переводятся одна в другую операциями симметрии решетки, поэтому $\overline{S}_1 = S_1$. На плоской квадратной решетке такой эквивалентности нет и $\overline{S}_1 = \frac{2S_1 + S_1'}{3}$, где S_1 – среднее значение произведения центрального спина и двух соседних узлов, связи между которыми и центральным узлом составляют прямой угол, а S_1' – среднее для узлов, лежащих на одной линии.

$$\overline{S}_1 = X_0 th4K = \frac{(2th2K - 1)th4K}{2th2K - th4K} m. \tag{24}$$

Из (23) и (24) следует соотношение, аналогичное (18), но для решеток с координационным числом 4:

$$\frac{S}{S_1} = \frac{(th4K + 2th2K) - 2}{(2th2K - 1)th4K}. \qquad (25)$$

Как и в случае $q = 3$, если полностью пренебречь корреляциями соседних к центральному узлу спинов и считать в (27) $S = m^3$, получим приближение усреднения по обменным полям [2; 5]. Если же полагать, что эти соседние спины скоррелированы только через центральный, получим приближение Бете [1].

Таким образом, основываясь только на возможности представить термодинамические средние, такие как средняя намагниченность m, средний знак поля взаимодействия и средние значения произведения троек спинов S и S_1 в виде средних по функции распределения полей, можно получить некоторые нетривиальные связи между этими величинами. А именно, мы показали, что между этими величинами на решетках с координационными числами 3 и 4 выполняются соотношения, выражаемые равенствами (16) – (18) и (23) – (25). Для плоской квадратной решетки, для которой известно точное значение спонтанной намагниченности, эти соотношения позволяют в явном виде найти средние значения произведения троек спинов. Кроме того, мы показали, что из самой возможности представления величин в виде усреднения по функции распределения по полям взаимодействия следуют ограничения на максимально возможное значение температуры Кюри в модели Изинга ((13), (17) и (23)) и на максимально возможное значение спонтанной намагниченности при любой температуре (неравенства (19) и (22)).

1. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике. – Москва: Мир, 1985. – 486 с.
2. Сёмкин С.В., Смагин В.П. Приближенные методы в теории чистых и разбавленных магнетиков: монография. – Владивосток: Изд-во ВГУЭС, 2019. – 217 с.
3. Чандрасекар С. Стохастические проблемы в физике и астрономии / пер. с англ.; под ред. Н.Н. Боголюбова. – Москва: ИЛ, 1947. – 168 с.
4. Белоконь В.И., Кочегура В.В., Шолпо Л.Е. Методы палеомагнитных исследований горных пород. – Ленинград: Недра, 1973. – 248 с.
5. Белоконь В.И., Семкин, С.В. Метод случайного поля в модели Изинга разбавленного ферромагнетика // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1992. Т. 102, вып. 4(10). – С. 1254–1258.
6. Сёмкин С.В., Смагин В.П. Использование метода усреднения по полям взаимодействия для построения ренормгруппового преобразования фиксированного масштаба // Физика твердого тела. –2013. – Т. 55, вып. 5. – С. 892–895.
7. Сёмкин С.В., Смагин В.П. Методы получения самосогласованных уравнений для изинговского магнетика // Известия вузов. Физика. – 2013. – Т. 56, вып. 2. – С. 9–14
8. Callen, H.B. A note on Green functions and the Ising model // Phys. Lett. – 1963. – V. 4. – P. 161–175.

Транслитерация

1. Bekster R. Tochno reshaemye modeli v statisticheskoj mekhanike. – Moskva: Mir, 1985. – 486 s.

2. Syomkin S.V., Smagin V.P., Priblizhennye metody v teorii chistyh i razbavlennyh magnetikov: monografiya – Vladivostokskij gosudarstvennyj universitet ekonomi-ki i servisa. – Vladivostok: Izd-vo VGUES, 2019. – 217 s.
3. Chandrasekar S. Stohasticheskie problemy v fizike i astronomii/ Per.s angl. pod red. N.N. Bogolyubova. – Moskva: IL, 1947. – 168 s.
4. Belokon'V.I., Kochegura V.V., Sholpo L.E. Metody paleomagnitnyh issledovanij gornyh porod. Leningrad: Nedra, 1973. – 248 s.
5. Belokon'V.I., Semkin S.V. Metod sluchajnogo polya v modeli Izinga razbavlennogo ferromagnetika // Zhurnal eksperimental'noj i teoreticheskoj fiziki. – 1992. T. 102, vyp. 4(10). – S. 1254–1258
6. Syomkin S.V., Smagin V.P. Ispol'zovanie metoda usredneniya po polyam vzaimodejst-viya dlya postroeniya renormgruppovogo preobrazovaniya fiksirovannogo masshtaba // Fizika tverdogo tela, 2013. – T. 55, vyp. 5. – S. 892–895.
7. Syomkin S.V., Smagin V.P. Metody polucheniya samosoglasovannyh uravnenij dlya izingovskogo magnetika // Izvestiya vuzov. Fizika.– 2013. – T. 56, vyp. 2. – S. 9–14

Для цитирования: Сёмкин С.В., Смагин В.П. Усреднение по полям взаимодействия и спиновые корреляции в модели Изинга // Территория новых возможностей. Вестник Владивостокского государственного университета экономики и сервиса. – 2020. – Т. 12, № 2. – С. 148–157.

For citation: Semkin S.V., Smagin V.P. Averaging over interaction fields and spin correlations in the Ising model, *The Territory of New Opportunities. The Herald of Vladivostok State University of Economics and Service*, 2020, Vol. 12, № 2, pp. 148–157.

DOI dx.doi.org/10.24866/VVSU/2073-3984/2020-2/148-157

Дата поступления: 12.05.2020.