

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

Термодинаміка моделі Ізінга $S = 1$ на спіновій сітці

В.С.Янішевський

Анотація. Розглядаються термодинамічні функції: магнітна сприйнятливість, теплоємність і ентропія регулярної спінової сітки в моделі Ізінга $S = 1$ в наближенні середнього поля для вузлової підсистеми. Детально вивчається їх поведінка в околі низької і критичної температур. З'ясовується залежність різних складових термодинамічних функцій від загального числа частинок. Розглядається залежність ряду важливих параметрів в критичній точці від числа спінів в ланці, проводиться порівняння із результатами для ґратки.

Thermodynamics of spin net in Ising model $S = 1$

V.S.Yanishevsky

Abstract. The thermodynamic function such as magnetic susceptibility, heat capacity and entropy of regular spin net in Ising model $S = 1$ for knot subsystem in mean field approximation are investigated. Their behaviour in the low and high temperatures vicinity has been studied. The dependence of various components of thermodynamic functions upon the total number of particles in the systems is examined. The dependence of some important parameters in the critical point on the number of spins in the link is examined and the in comparison with results for the lattice is conducted.

Подається до Українського фізичного журналу
Submitted to Ukrainian Journal of Physics

ICMP-97-05U

В.С.Янішевський*

ТЕРМОДИНАМІКА МОДЕЛІ ІЗІНГА $S = 1$ НА СПІНОВІЙ
СІТЦІ

*Дрогобицький педагогічний інститут ім.І.Франка, 293720, Дрогобич, вул. І.Франка, 34

1. Загальні співвідношення

В роботі [1] досліджувались магнітні властивості регулярної спінової сітки в моделі Ізинга $S = 1$, вивчались фазові переходи в наближенні середнього поля. Структури такого типу розглядаються як в моделях магнітних фазових переходів, так і в деяких інших задачах статистичної фізики, перелік яких приведений в [1]. В даній роботі розглядаються термодинамічні властивості системи. Основна увага зосереджена на вивченні поведінки магнітної сприйнятливості, теплоємності і ентропії в нульовому полі з метою з'ясування термодинамічної узгодженості моделі.

Статсуму регулярної спінової сітки в моделі Ізинга $S = 1$ можна подати у вигляді [1]

$$Z = (Z_1(0, 0))^{Nz/2} \text{Sp}_{\{\sigma\}} \exp(-\beta \mathcal{H}). \quad (1.1)$$

Перший співмножник в (1.1) визначає факторизований внесок в статсуму спінових ланок сітки, другий – описує вузлову підсистему з ефективним гамільтоніаном. Ефективний гамільтоніан має структуру узагальненої моделі Ізинга (УМІ) для $S = 1$.

$$\mathcal{H} = \sum_i (zB - h)\sigma_i + \sum_i zD\sigma_i^2 + \sum_{\langle ij \rangle} I\sigma_i\sigma_j + \sum_{\langle ij \rangle} K\sigma_i^2\sigma_j^2 + \sum_{\langle ij \rangle} L\sigma_i\sigma_j^2, \quad (1.2)$$

де ефективні параметри гамільтоніану визначаються в результаті розв'язку одновимірної задачі і задаються формулами

$$\begin{aligned} B &= \frac{1}{2\beta} \ln \left(\frac{Z_1(-1, 0)}{Z_1(1, 0)} \right), \\ D &= -\frac{1}{2\beta} \ln \left(\frac{Z_1(-1, 0) \cdot Z_1(1, 0)}{Z_1^2(0, 0)} \right), \\ I &= -\frac{1}{4\beta} \ln \left(\frac{Z_1(1, 1) \cdot Z_1(-1, -1)}{Z_1^2(-1, 1)} \right), \\ K &= I - 2D - \frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{Z_1(1, -1)}{Z_1(0, 0)} \right), \\ L &= -2B + \frac{1}{2\beta} \ln \left(\frac{Z_1(-1, -1)}{Z_1(1, 1)} \right), \end{aligned} \quad (1.3)$$

$Z_1(s, s')$ - статсума одновимірного спінового ланцюжка, в якому крайні спіни фіксовані в станах s і s' (s набуває значень 1, 0, -1).

2. Магнітна сприйнятливість

Магнітну сприйнятливість спінової сітки в нульовому полі визначимо звичайним чином

$$\chi = \beta \partial^2 \ln Z / \partial \alpha^2 |_{\alpha=0}, \quad (2.1)$$

де $\alpha = \beta h$.

Виходячи із структури статсуми сітки (1.1) сприйнятливість подамо у вигляді

$$\chi = \chi_o + \chi_1, \quad (2.2)$$

де χ_o - сприйнятливість системи не взаємодіючих спінових ланцюжків, $\chi_1 = \beta \partial^2 \ln Z / \partial \alpha^2 |_{\alpha=0}$ - сприйнятливість вузлової ґратки. Як вже вказувалось, χ_o знаходиться внаслідок точного розв'язку одновимірної задачі, для χ_1 підсистема вузлових спінів розраховується в наближенні середнього поля. Після обчислення похідних за полем отримаємо

$$\chi_o = \frac{\beta Nz}{2} \partial^2 \ln Z_1(0, 0) / \partial \alpha^2 |_{\alpha=0}, \quad (2.3)$$

$$\chi_1 = -\beta^3 \langle \partial^2 \mathcal{H} / \partial \alpha^2 \rangle_{\mathcal{H}} + \beta^3 \langle (\partial \mathcal{H} / \partial \alpha)^2 \rangle_{\mathcal{H}} - \beta^3 \langle (\partial \mathcal{H} / \partial \alpha) \rangle_{\mathcal{H}}^2,$$

де в (2.3) введено позначення середнього з гамільтоніаном (1.2)

$$\langle (\dots) \rangle_{\mathcal{H}} = \frac{1}{\tilde{Z}} \text{Sp}_{\{\sigma\}} \exp(-\beta \mathcal{H}) (\dots), \quad \tilde{Z} = \text{Sp}_{\{\sigma\}} \exp(-\beta \mathcal{H}). \quad (2.4)$$

Враховуючи симетрійні властивості величин B, D, I, K, L як функцій зовнішнього поля [1] для похідних від гамільтоніану в нульовому полі отримаємо

$$\partial \mathcal{H} / \partial \alpha = \sum_i (zB^{(1)} - 1/\beta) \sigma_i + \sum_{\langle ij \rangle} L^{(1)} \cdot \sigma_i \sigma_j^2, \quad (2.5)$$

$$\partial^2 \mathcal{H} / \partial \alpha^2 = \sum_i zD^{(2)} \sigma_i^2 + \sum_{\langle ij \rangle} I^{(2)} \sigma_i \sigma_j + \sum_{\langle ij \rangle} K^{(2)} \cdot \sigma_i^2 \sigma_j^2,$$

де верхні індекси в позначеннях $B^{(1)}, \dots$ вказують на відповідний порядок похідної в нульовому полі. В наближенні середнього поля ефективний гамільтоніан в моделі однієї ґратки (модель феромагнетика) при $h = 0$ матиме вигляд [2]

$$\mathcal{H}_o = NzD\hat{q}_o + \frac{NzI}{2} (\hat{\sigma}_o)^2 + \frac{NzK}{2} (\hat{q}_o)^2, \quad (2.6)$$

де введені позначення $\hat{\sigma}_o = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i$, $\hat{q}_o = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^2$.

Відповідно похідні за полем (2.5) в наближенні середнього поля матимуть наступний вигляд

$$\begin{aligned} \partial \mathcal{H}_o / \partial \alpha &= (zB^{(1)} - 1/\beta) \hat{\sigma}_o + \frac{NzL^{(1)}}{2} \hat{\sigma}_o \hat{q}_o, \\ \partial^2 \mathcal{H}_o / \partial \alpha^2 &= NzD^{(2)} \hat{q}_o + \frac{NzI^{(2)}}{2} (\hat{\sigma}_o)^2 + \frac{NzK^{(2)}}{2} (\hat{q}_o)^2, \end{aligned} \quad (2.7)$$

Таким чином, для знаходження сприйнятливості в наближенні середнього поля в формулах (2.3) і (2.4) необхідно використати вирази (2.6) і (2.7).

При розрахунку термодинамічних функцій зручно від розрахунку середніх за гамільтоніаном (2.6), що є оператором від спінових змінних, перейти до усереднення за функціоналом вільної енергії, вираз якого в наближенні середнього поля отриманий в [1]

$$\beta F = \frac{\tilde{I}}{2} \rho^2 - \frac{\tilde{K}}{2} q^2 - \ln(2 \operatorname{ch}(\tilde{I}\rho) e^{-\tilde{K}q - \beta z D} + 1), \quad (2.8)$$

де $\tilde{I} = \beta z |I|$, $\tilde{K} = \beta z K$, ρ - має зміст параметра феромагнітного порядку, q - визначає квадрат спінового моменту вузлової ґратки. Очевидно, (2.8) є найпростішою за структурою вільною енергією в наближенні середнього поля для спінової системи з $S = 1$, і узгоджується із концепцією опису термодинаміки таких систем [3]. Середнє значення будь-якої функції спінових змінних $\hat{\sigma}_o$, \hat{q}_o можна визначити використовуючи функціональне співвідношення (Д1.1), що приведене в додатку 1. Провівши необхідні обчислення, сприйнятливості сітки в розрахунку на один спін представимо у вигляді

$$\tilde{\chi} = \frac{\chi}{N(1 + zn/2)} = \tilde{\chi}_o + \tilde{\chi}_1, \quad (2.9)$$

де

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}_o &= \frac{\beta z}{2(1 + zn/2)} \partial^2 \ln Z_1(0, 0) / \partial \alpha^2 |_{\alpha=0}, \\ \tilde{\chi}_1 &= -\frac{\beta^2}{(1 + zn/2)} \left(\tilde{D}^{(2)} \bar{q} - \frac{\tilde{I}^{(2)}}{2} \bar{\rho}^2 + \frac{\tilde{K}^{(2)}}{2} \bar{q}^2 \right) + \\ &+ \beta N(1 + zn/2) \left(\langle m^2(\rho, q) \rangle_F - \langle m(\rho, q) \rangle_F^2 \right) + \\ &+ \beta(1 + zn/2) \left(\frac{1}{\tilde{K}} \left\langle (\partial / \partial q m(\rho, q))^2 \right\rangle_F - \frac{1}{\tilde{I}} \left\langle (\partial / \partial \rho m(\rho, q))^2 \right\rangle_F \right), \end{aligned} \quad (2.10)$$

де

$$m(\rho, q) = \rho \cdot \left(1 - \tilde{B}^{(1)} - \frac{1}{2} \tilde{L}^{(1)} q \right) / (1 + zn/2) \quad (2.11)$$

- має зміст функціоналу спонтанного моменту спінової сітки в розрахунку на один спін [1]; $\tilde{B}^{(1)} = z\beta B^{(1)}$, $\tilde{L}^{(1)} = z\beta L^{(1)}$. Тут введено також позначення усереднення за функціоналом вільної енергії (2.8)

$$\langle (\dots) \rangle_F = \frac{1}{Z} \int d\rho dq \exp(-\beta NF) (\dots). \quad (2.12)$$

Величини $\bar{\rho}$, \bar{q} визначають рівноважні значення параметра порядку і квадрата спінового моменту і визначаються з умови екстремуму вільної енергії

$$\bar{\rho} = \frac{2 \operatorname{sh}(\tilde{I}\bar{\rho})}{2 \operatorname{ch}(\tilde{I}\bar{\rho}) + e^{\tilde{K}\bar{q} + \tilde{D}}}, \quad \bar{q} = \frac{2 \operatorname{ch}(\tilde{I}\bar{\rho})}{2 \operatorname{ch}(\tilde{I}\bar{\rho}) + e^{\tilde{K}\bar{q} + \tilde{D}}}. \quad (2.13)$$

Із структури формули (2.10) видно, що поява перші три доданки в $\tilde{\chi}_1$ зумовлені залежністю ефективних взаємодій гамільтоніану від магнітного поля, наступні - мають стандартний вигляд, що виражає зв'язок між флуктуаціями спонтанного моменту і сприйнятливостю магнітної системи [4]. Формули (2.10) визначають шукані залежності і будуть використані нижче для конкретних розрахунків. Використовуючи методику гаусових флуктуацій параметрів ρ , q навколо їх середніх значень $\bar{\rho}$, \bar{q} [5], складову сприйнятливості $\tilde{\chi}_1$ можна записати також в еквівалентному вигляді

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}_1 &= -\frac{\beta^2}{(1 + zn/2)} \left(\tilde{D}^{(2)} \bar{q} - \frac{\tilde{I}^{(2)}}{2} \bar{\rho}^2 + \frac{\tilde{K}^{(2)}}{2} \bar{q}^2 \right) + \\ &+ \beta(1 + zn/2) (\partial / \partial \rho \bar{m}(\rho, q))^2 \left(N \langle (\delta \rho)^2 \rangle_G - \frac{1}{\tilde{I}} \right) + \\ &+ \beta(1 + zn/2) (\partial / \partial q \bar{m}(\rho, q))^2 \left(N \langle (\delta q)^2 \rangle_G + \frac{1}{\tilde{K}} \right) + \\ &+ 2\beta \cdot (1 + zn/2) \left(\overline{\partial / \partial q m(\rho, q)} \right) \left(\overline{\partial / \partial \rho m(\rho, q)} \right) N \langle \delta \rho \delta q \rangle_G. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Риска зверну над величинами в (2.14) вказує, що їх значення беруться для рівноважних $\bar{\rho}$, \bar{q} . Загальні формули обчислення флуктуацій величин ρ , q за гаусовим розподілом приведені в додатку 2.

3. Теплоємність

Теплоємність визначимо як похідну за температурою від середньої енергії

$$\begin{aligned} C &= \partial U / \partial T, \quad U = k_B T^2 \partial \ln Z / \partial T, \\ C &= k_B \partial / \partial T T^2 \partial \ln Z / \partial T. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Аналогічно, як і в попередньому випадку представимо як суму двох складових

$$C = C_o + C_1, \quad (3.2)$$

де C_o - теплоємність системи невзаємодіючих спінових ланцюжків, C_1 - теплоємність вузлової підсистеми. Після обчислення похідних за температурою одержимо

$$C_1 = \left\langle \hat{\Delta}_T(-\beta\mathcal{H}) \right\rangle_{\mathcal{H}} + T^2 \langle (\partial/\partial T(-\beta\mathcal{H}))^2 \rangle_{\mathcal{H}} - T^2 \langle \partial/\partial T(-\beta\mathcal{H}) \rangle_{\mathcal{H}}^2, \quad (3.3)$$

де введено позначення $\hat{\Delta}_T = \partial/\partial T \cdot T^2 \cdot \partial/\partial T$, усереднення в (3.3) визначається згідно формули (2.4). Очевидно, що поява першого доданку в (3.3) зумовлена залежністю ефективних взаємодій від температури, наступні мають типову структуру, що виражає зв'язок теплоємності із флуктуацією енергії [4]. Після аналогічних перетворень, описаних в п.2 для теплоємності сітки в розрахунку на один спін наступні можна отримати наступні співвідношення

$$c = \frac{C}{N(1 + zn/2)} = c_o + c_1, \quad (3.4)$$

де

$$c_o/k_B = \frac{z/2}{(1 + zn/2)} \hat{\Delta}_T \cdot \ln Z_1(0, 0), \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} c_1/k_B = & -\frac{\partial/\partial T \cdot T^2 \tilde{\mathcal{H}}(\bar{\rho}, \bar{q})}{(1 + zn/2)} + \\ & + \frac{T^2}{(1 + zn/2)} \left(\overline{\partial/\partial \rho \tilde{\mathcal{H}}(\rho, q)} \right)^2 \left(N \langle (\delta\rho)^2 \rangle_G - \frac{1}{\tilde{I}} \right) + \\ & + \frac{T^2}{(1 + zn/2)} \left(\overline{\partial/\partial q \tilde{\mathcal{H}}(\rho, q)} \right)^2 \left(N \langle (\delta q)^2 \rangle_G + \frac{1}{\tilde{K}} \right) + \\ & + \frac{2T^2}{(1 + zn/2)} \left(\overline{\partial/\partial \rho \tilde{\mathcal{H}}(\rho, q)} \right) \left(\overline{\partial/\partial q \tilde{\mathcal{H}}(\rho, q)} \right) N \langle \delta\rho\delta q \rangle_G. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Тут введено наступне позначення

$$\tilde{\mathcal{H}}(\bar{\rho}, \bar{q}) = \tilde{D}'\bar{q} - \frac{\tilde{I}'}{2}\bar{\rho}^2 + \frac{\tilde{K}'}{2}\bar{q}^2. \quad (3.7)$$

Штрихи в (3.7) означають похідну за температурою.

4. Ентропія

Ентропію визначимо як похідну від вільної енергії за температурою і також запишемо у вигляді суми двох доданків

$$S = S_o + S_1, \quad (4.1)$$

де

$$S_o/Nk_B = \frac{z}{2} \partial/\partial T (T \ln Z_1(0, 0)), \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned} S_1/Nk_B = & -\tilde{I}\bar{\rho}^2 + \tilde{K}\bar{q}^2 + \tilde{D}\bar{q} + \ln(2 \operatorname{ch}(\tilde{I}\bar{\rho})e^{-\tilde{K}\bar{q}-\tilde{D}} + 1) + \\ & + (-zD'\bar{q})/k_B + \frac{z\tilde{I}'}{2k_B}\bar{\rho}^2 - \frac{z\tilde{K}'}{2k_B}\bar{q}^2, \end{aligned} \quad (4.3)$$

де S_o - ентропія системи нез'язаних спінових ланцюжків, S_1 - ентропія вузлової підсистеми. Формули (4.2) і (4.3) визначають складові ентропій в розрахунку на один вузол сітки. Перші чотири доданки в (4.3) мають стандартний вигляд для теорії середнього поля, поява останніх пов'язана із залежністю ефективних параметрів гамільтоніану від температури.

5. Обговорення результатів

Отримані вище в п.2-4 загальні вирази описують сприйнятливості, теплоємність і ентропію спінової сітки в наближенні середнього поля. Використовуючи ефективні взаємодії моделі, які розраховані в [1], а також розв'язки рівнянь (2.13), можна дослідити їх залежність від температури і довжини ланки спінової сітки. Очевидно, що провести такий аналіз в широких межах зміни параметрів можна лише чисельними методами. Ми основну увагу зосередимо на вивченні поведінки термодинамічних функцій в області низької і критичної температур.

5.1. Область низьких температур

За методом роботи [1] можна показати, що при $T \rightarrow 0$ з точністю до членів квадратичних за полем $\approx \alpha^2$ має місце наближена рівність

$$Z_1(0, 0) \approx (2 + n^2\alpha^2)a^{n-1}. \quad (5.1)$$

На основі (5.1) отримуємо, асимптотику складової сприйнятливості $\tilde{\chi}_o$ при $T \rightarrow 0$

$$\tilde{\chi}_o \approx \beta \frac{zn^2/2}{1 + zn/2}. \quad (5.2)$$

Залежність від температури $\sim 1/T$ є характерною для одновимірних ізінгівських феромагнетиків, поява ж квадратичної залежності від числа спінів в ланцюжку, що не узгоджується із термодинамічним граничним переходом $n \rightarrow \infty$ (для нескінченно довгих ланцюжків) є насправді тут тимчасовим явищем, оскільки, як буде показано далі, цей доданок компенсується відповідними членами в $\tilde{\chi}_1$. Розглянемо з цією метою внесок перших трьох доданків в (2.14) в сприйнятливості при $T \rightarrow 0$. Поведінку похідних другого порядку від ефективних взаємодій в нульовому полі в області низьких температур можна оцінити за методом [1], і вони мають наступний вигляд

$$\begin{aligned} \beta D^{(2)} &\approx (n^2 - a); & \beta I^{(2)} &\approx \frac{n(n+1)}{6} - \frac{na^2}{8}, \\ \beta K^{(2)} &\approx -\frac{n(n+1)}{6} - n^2 + 2a - \frac{na^2}{8}. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Враховуючи формули (5.3) неважко показати, що в сумі з $\tilde{\chi}_0$ внесок згаданих доданків при $T \rightarrow 0$ буде наступним

$$\approx \frac{zn}{zn+2} \frac{\beta^2 a^2}{4}, \quad (5.4)$$

де $a = \exp(-\varepsilon/k_B T)$, ε - обмінна взаємодія між найближчими сусідами в спіновому ланцюжку. Отже, ми отримуємо правильну термодинамічну поведінку в розрахунку на один спін системи і величина (5.4) при великих n від n практично не залежить. Таким чином, незважаючи, на перший погляд, на структуру статсуми сітки (1.1) характерний внесок спінових ланцюжків в сприйнятливості $\sim 1/T$ відсутній. Очевидно, це пов'язане з тим, що спінові ланцюжки зв'язані в сітку.

Розглянемо поведінку флуктуаційної частини магнітної сприйнятливості при $T \rightarrow 0$. Зокрема, маємо

$$\begin{aligned} \overline{\partial/\partial \rho m(\rho, q)} &\approx 1 + \frac{zn/2}{1+zn/2}(1 - \bar{\rho}), \\ \overline{\partial/\partial q m(\rho, q)} &\approx -\frac{zn/2}{1+zn/2}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Для визначення асимптотики квадратичних флуктуацій параметрів ρ, q (2.14), скористатемось асимптотикою матриці квадратичної форми, що приведена в додатку 3. На основі формул (5.5), (Д2.1), (Д3.2) можна показати, що флуктуаційна складова сприйнятливості в $\tilde{\chi}_1$ при $T \rightarrow 0$ матиме в головному порядку визначається виразом

$$\approx \frac{\beta}{1 + zn/2}(1 - \bar{\rho}), \quad (5.6)$$

що згідно прийнятої термінології [4], означає подавленість флуктуацій. Із розв'язку системи рівнянь (2.13) можна встановити, що асимптотика $\bar{\rho}$ при $T \rightarrow 0$ має вигляд

$$\bar{\rho} \approx 1 - \frac{1}{2} \exp(\tilde{K}' - \tilde{I}' + \tilde{D}') \approx 1 - a^z/2. \quad (5.7)$$

Звернемо увагу на відмінність між формулами (5.4) і (5.6) пов'язану із залежністю від числа спінів в ланці n . Із (5.6) випливає, що ця складова пропорційна лише до числа вузлових спінів, і при великих n її вклад порівняно з (5.4) незначний. Другий фактор, який послаблює вклад флуктуаційного члена при низьких температурах порівняно з (5.4) - залежність від a у вищій степені ($z > 2$).

Розглянемо поведінку теплоємності при низьких температурах. Вклад спінових ланцюжків можна оцінити використовуючи асимптотику трансферматриці в нульовому полі, зокрема із (5.1) отримуємо ($n \geq 2$)

$$Z_1(0, 0) \approx 2/a^{n-1}. \quad (5.8)$$

На основі (5.8) неважко показати, що $c_0 \rightarrow 0$ при $T \rightarrow 0$. Для визначення головного члена асимптотики c_0 , необхідно знайти наступний до (5.8) член розкладу $Z_1(0, 0)$ в області низьких температур. Після нескладних підрахунків, які ми опускаємо, отримуємо, що при $T \rightarrow 0$ температурна залежність цієї складової наближено визначається виразом

$$c_0/k_B \approx \frac{zn/2}{(1 + zn/2)} \left(\frac{z\varepsilon}{k_B T}\right)^2 \exp(-\varepsilon/k_B T). \quad (5.9)$$

Тобто, ми отримали правильну термодинамічну поведінку за числом спінів в ланці n , про що вже згадувалось вище. Для асимптотики c_1 (3.6), виходячи з того, що

$$\begin{aligned} \tilde{D}' &\approx \frac{z\varepsilon}{k_B T^2}, & \tilde{I}' &\approx -\frac{z\varepsilon}{k_B T^2}, & \tilde{K}' &\approx -\frac{z\varepsilon}{k_B T^2}, \\ \overline{\partial/\partial \rho \tilde{H}(\rho, q)} &= -\tilde{I}' \bar{\rho} \approx \frac{z\varepsilon}{k_B T^2}, \\ \overline{\partial/\partial q \tilde{H}(\rho, q)} &= \tilde{D}' + \tilde{K}' \bar{q} \approx \frac{z\varepsilon}{k_B T^2}(1 - \bar{\rho}), \end{aligned} \quad (5.10)$$

можна отримати

$$c_1/k_B \approx \frac{3}{2(1 + zn/2)} \left(\frac{z\varepsilon}{k_B T}\right)^2 \exp(-z\varepsilon/k_B T). \quad (5.11)$$

Поява залежності від n в знаменнику (5.11) означає, як і в попередньому випадку, що ця складова теплоємності спінової сітки пропорційна числу вузлових спінів N . Переважаючий вклад в теплоємність при $T \rightarrow 0$, як видно із порівняння (5.9) і (5.11) вносить складова c_0 .

Для ентропії, використовуючи значення асимптотик величин D, I, K при $T \rightarrow 0$ [1], неважко показати, що сума трьох останніх доданків в (3.3) прямує до нуля і в цілому $S_1 \rightarrow 0$ при $T \rightarrow 0$. Головний член асимптотики при цьому має наступний вигляд

$$S_1/Nk_B \approx \beta z \varepsilon (1 - \bar{\rho}) \approx \frac{z \varepsilon}{2k_B T} \exp(-z \varepsilon/k_B T). \quad (5.12)$$

Тобто, ми отримали правильну термодинамічну поведінку і з (5.12) випливає також, що ця складова асимптотики пропорційна числу вузлових спінів в системі. З'ясуємо поведінку S_o (3.4), що пов'язана із вкладом спінових ланцюжків при $T \rightarrow 0$. Знову ж таки використовуючи асимптотику трансфер матриці [1] отримаємо для $n \geq 2$

$$S_o/k_B N \approx \frac{z}{2} \partial/\partial T \cdot T (\ln 2 + (n-1)\varepsilon/k_B T) = \frac{z}{2} \ln 2. \quad (5.13)$$

Для $n = 1$ відповідно матимемо $S_o/k_B N = \frac{z}{2} \ln 3$ (детальніше про це [1]). Існування залишкової ентропії пов'язане із виродженням і відоме також в теорії декорованих ґраток [6]. Дійсно, таке виродження завжди присутнє при точному розв'язку одновимірної задачі (до здійснення граничного термодинамічного переходу). В термінах власних значень трансферматриці, це означає, що максимальне власне значення є виродженим при $T \rightarrow 0$ [7]. При розгляді нескінчено довгих спінових ланцюжків цим виродженням звичайно нехтують, оскільки розглядається лише максимальне власне значення [7]. Із (5.13) видно також, що в розрахунку на один спін сітки $S_o \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$. Таким чином в сенсі правильної термодинамічної поведінки ентропії модель є фізично конструктивною. Тут відсутні інші фізичні недоліки, що притаманні деяким моделям на декорованих ґратках [6].

Підсумовуючи, відзначимо, що складові термодинамічних функцій (5.6), (5.11), (5.12), що пов'язані із кооперативними властивостями системи, пропорційні числу вузлових спінів N сітки. На цю особливість фазового переходу в спіновій сітці, на наш погляд, не було звернуто достатньої уваги як [6], де розглядалась модель дислокаційного феромагнетика, так і в теорії декорованих решіток [9].

5.2. Критична область

Виходячи із системи рівнянь (2.13) проаналізуємо поведінку параметрів середнього поля $\bar{\rho}, \bar{q}$ в критичній області. Необхідні результати приведені в додатку 4 і є характерними для середнього поля. Зауважимо, що для моделі Ізинга для ґратки знайдені амплітуди

параметрів переходять у наступні $A_c \rightarrow 8/3, q_1^{(-)} \rightarrow 2/3, q_1^{(+)} \rightarrow 0$. Тобто можна сказати, що у випадку сітки має місце згладження зламу в температурній залежності параметра \bar{q} в критичній точці. На основі отриманих виразів (Д4.1), (Д4.3) можна дослідити флуктуації параметрів $\bar{\rho}, \bar{q}$ в критичній області, результати приведені в додатку 5.

На основі виразів додатків 2 і 5 легко встановити, що при підході до критичної точки ($\tau \rightarrow 0$) як в області феромагнітної, так і парамагнітної фаз, основний внесок в сприйнятливості дає складова, що пов'язана із флуктуацією параметра порядку $\bar{\rho}$

$$\tilde{\chi}_1 \sim \beta(1 + zn/2) \left(\overline{\partial/\partial \rho m(\rho, q)} \right)^2 N \langle (\delta \rho)^2 \rangle_G, \quad (5.14)$$

яка розбігаються як τ^{-1} , що є типовим для теорії середнього поля. Всі інші складові сприйнятливості (2.14), що також легко встановити із відповідних формул Д.4 і Д.5 є скінченними в критичній точці. Для відношення амплітуд складової (5.14) вище і нище точки фазового переходу відповідно отримуємо

$$\tilde{\chi}_1^{(+)} / \tilde{\chi}_1^{(-)} \approx \frac{\det^{(-)}}{a_{22}^{(-)}} \cdot \frac{1}{a_{11}^{(+)}}, \quad (5.15)$$

де зміст всіх позначень визначений в Д.5.

З формул (5.15), здійснивши граничний перехід до ґратки ($n \rightarrow 0$), можна отримати, що це відношення дорівнює 2 [7]. У випадку сітки таке відношення амплітуд є складною функцією параметрів моделі. Залежність від довжини спінової ланки n знайдена чисельними розрахунками приведена на рис.1. Щодо поведінки теплоємності, то як відомо [7] в наближенні середнього поля вона в критичній точці терпить скінченний розрив. Відповідно із формули (3.6) можна визначити стрибок теплоємності в критичній точці, що зумовлений флуктуаціями параметрів моделі і він визначається виразом

$$\Delta c_1/k_B = \frac{T_c^2}{(1 + zn/2)} \left((\tilde{I}'_c)^2 A_c \frac{a_{22}^{(-)}}{\det^{(-)}} + 2\tilde{I}'_c (\tilde{D}'_c + \right. \quad (5.16)$$

$$\left. \tilde{K}'_c / \tilde{I}'_c \right) \sqrt{A_c} \frac{a_{12}^{(-)}}{\det^{(-)}} + (\tilde{D}'_c + \tilde{K}'_c / \tilde{I}'_c)^2 \left(\frac{a_{11}^{(-)}}{\det^{(-)}} - \frac{1}{a_{22}^{(-)}} \right). \quad (5.17)$$

Формула за структурою є досить складною і можливим є лише її чисельний аналіз. Здійснивши граничний перехід до ґратки ($n \rightarrow 0$) ми отримуємо стрибок теплоємності $\Delta c_1/k_B = 2$ [7]. На рис.2. приведена залежність величини $\Delta \tilde{c} = (1 + zn/2)\Delta c_1/k_B$ від числа спінів в ланці n .

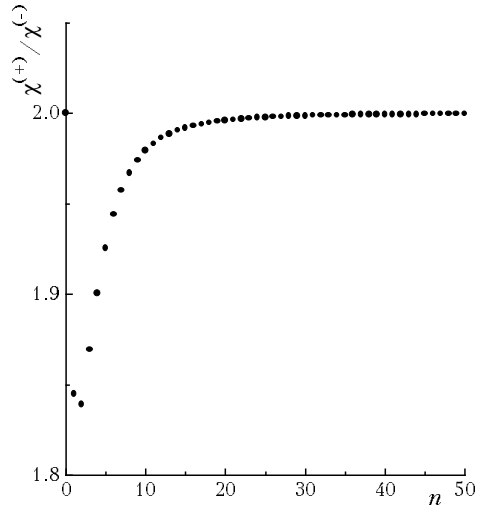


Рис. 1: Відношення амплітуд флуктуаційної складової сприйнятливості спінової сітки вище і нижче критичної точки як функція числа спінів в ланці n .

Ентропія, звичайно, є неперервною величиною при переході через критичну точку. При високих температурах ентропія прямує до максимального значення $S_{\max} = N(1 + zn/2)k_B \ln 3$, причому для складових в формулах (4.2) і (4.3), зокрема, маємо $S_o \rightarrow Nz n/2 \cdot k_B \ln 3$, $S_1 \rightarrow Nk_B \ln 3$. В зв'язку з цим розглянемо відхилення максимального значення S_1 від значення в критичній точці. Після нескладних перетворень отримуємо

$$\Delta S_1 / k_B N = (1 - 1/\tilde{I}_c) \ln(2\tilde{I}_c - 2) - \ln(2/3\tilde{I}_c) - \frac{z}{\tilde{I}_c} (D' + K'/2\tilde{I}_c). \quad (5.18)$$

У випадку ґратки $\tilde{I}_c \rightarrow 3/2$ і відповідно $\Delta S_1 = 0$, що має місце для середнього поля [10]. Залежність величини (5.17) від довжини спінової ланки n приведена на рис.3. За фізичним змістом, очевидно, відмінність від нуля величини (5.17) пов'язана із “залишковим” порядком в спінових ланцюжках. Із рис.1-3 видно також, що для $n \geq 20$ розглянуті величини практично від n не залежать, а при $n = 0$ отримуються відповідні значення для ґратки.

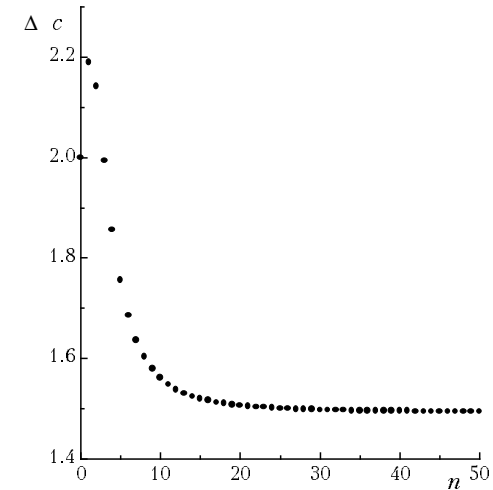


Рис. 2: Стрибок теплоємності в критичній точці для спінових сіток з різним числом спінів в ланці n .

6. Висновки

Підсумовуючи, відзначимо, що критична поведінка термодинамічних функцій спінової сітки в основному має характерний вигляд для середнього поля. Зокрема, отримуються відомі критичні індекси для параметра порядку (відповідно спонтанного моменту (2.11)) і сприйнятливості, має місце скінчений стрибок теплоємності. Складові термодинамічних функцій, що пов'язані із впорядкуванням в системі пропорційні до числа вузлових спінів, а число спінів в ланці відіграє роль внутрішнього параметра (спонтанний момент, звичайно, пропорційний числу всіх спінів сітки). В низькотемпературній області переважаючий внесок в розглянуті термодинамічні функції вносять спіни ланок, які ефективно входять в статсуму (1.1) як система незв'язаних спінових ланцюжків. Звичайно, ряд наведених результатів стосується лише регулярної сітки і наближення середнього поля. Більш точний розгляд критичної поведінки, а також деякі моделі безпорядку будуть розглянуті в наступних роботах.

Автор виражає подяку І.В.Стасюку за постановку задачі, корисні зауваження та поради.

Робота виконана також завдяки фінансовій підтримці - стипендії Кабінету Міністрів України.

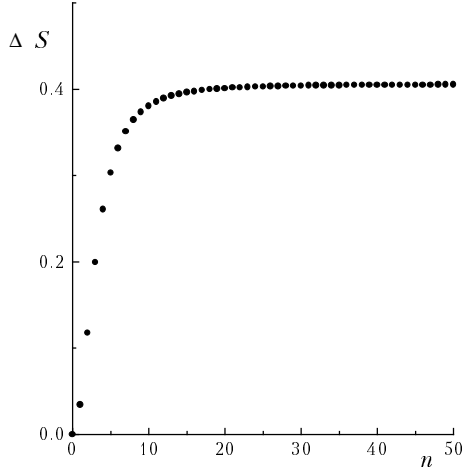


Рис. 3: Відхилення ентропії впорядкування в критичній точці від максимального значення як функція n .

Додаток 1.

$$\langle \varphi(\hat{\sigma}_o, \hat{q}_o) \rangle_{\mathcal{H}_o} = \frac{1}{\tilde{Z}} \int d\rho d q \exp(-\beta N \Delta F) \varphi\left(-\frac{1}{N\tilde{I}} \partial/\partial \rho, \frac{1}{N\tilde{K}} \partial/\partial q\right) \exp(-\beta N F_o), \quad (\text{Д1.1})$$

де введені позначення: $\beta F_o = \frac{\tilde{I}}{2} \rho^2 - \frac{\tilde{K}}{2} q^2$, $\beta \Delta F = -\ln(2 \operatorname{ch}(\tilde{I}\rho) e^{-\tilde{K}q - \beta z D} + 1)$, $\tilde{Z} = \int d\rho d q \exp(-\beta N F)$.

Додаток 2.

$$\langle (\dots) \rangle_G = \frac{\int d(\delta\rho) d(\delta q) \exp(-\frac{1}{2} N \delta^2 F) (\dots)}{\int d(\delta\rho) d(\delta q) \exp(-\frac{1}{2} N \delta^2 F)},$$

де

$$\delta^2 F = \begin{pmatrix} \delta\rho & \delta q \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \delta\rho \\ \delta q \end{pmatrix} \quad (\text{Д2.1})$$

квадратична форма з матричними елементами

$$a_{11} = \tilde{I}(1 + \tilde{I}(\bar{\rho}^2 - \bar{q})); \quad a_{12} = \tilde{I}\tilde{K}\bar{\rho}(1 - \bar{q}); \quad a_{22} = -\tilde{K}(1 + \tilde{K}\bar{q}(1 - \bar{q})).$$

Тоді маємо [4], що

$$\begin{aligned} \langle (\delta\rho)^2 \rangle_G &= (A^{-1})_{11}, & \langle (\delta q)^2 \rangle_G &= (A^{-1})_{22}, \\ \langle \delta\rho\delta q \rangle_G &= (A^{-1})_{12}, \end{aligned} \quad (\text{Д2.2})$$

де введено позначення A^{-1} – матриці оберненої до матриці квадратичної форми (Д2.1).

Додаток 3.

Матричні елементи матриці квадратичної форми при $T \rightarrow 0$ можна записати наближено у вигляді

$$a_{11} \approx \tilde{I} - \tilde{I}^2(1 - \bar{\rho}); \quad a_{12} \approx \tilde{I}\tilde{K}(1 - \bar{\rho}); \quad a_{22} \approx -\tilde{K} - \tilde{K}^2(1 - \bar{\rho}). \quad (\text{Д3.1})$$

Для оберненої матриці в цьому ж наближенні матимемо співвідношення

$$A^{-1} \approx \begin{pmatrix} 1/\tilde{I} & 0 \\ 0 & -1/\tilde{K} \end{pmatrix} + (1 - \bar{\rho}) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{Д3.2})$$

Додаток 4.

При прямуванні до критичної температури в феромагнітній області параметр порядку прямує до нуля за законом

$$\bar{\rho} \approx A_c |\tau|, \quad (\text{Д4.1})$$

де

$$A_c = T_c \frac{3 \left[(\tilde{I}'_c)^2 - (\tilde{I}_c - 1)(\tilde{D}'_c + (\tilde{K}/\tilde{I})'_c) \right]}{\tilde{I}_c^2 (\tilde{I}_c^2 - 3\tilde{I}_c - 2(\tilde{I}_c - 1)\tilde{K}_c)}, \quad \tau = \frac{T - T_c}{T_c}. \quad (\text{Д4.2})$$

Тут штрихи біля величин позначають похідну за температурою, а нижній індекс вказує, що значення всіх величин беруться в критичній точці.

Параметр q в критичній точці виявляє наступну поведінку.

$$\bar{q} \approx \begin{cases} q_o + q_1^{(-)} |\tau|, & T < T_c \\ q_o + q_1^{(+)} \tau, & T > T_c \end{cases}, \quad (\text{Д4.3})$$

де

$$q_o = 1/\tilde{I}_c, \quad q_1^{(-)} = \frac{T_c \tilde{I}'_c}{\tilde{I}_c^2} + \frac{\tilde{I}_c A_c}{3},$$

$$q_1^{(+)} = \frac{T_c(1 - \tilde{I}_c) [\tilde{K}'_c/\tilde{I}_c + \tilde{D}'_c]}{\tilde{I}_c^2 - (1 - \tilde{I}_c)\tilde{K}_c}. \quad (\text{Д4.4})$$

Додаток 5.

На основі формул Д.2 і Д.4 можна встановити, що в околі критичної точки мають місце співвідношення

$$\langle (\delta\rho)^2 \rangle_G^{(-)} = \frac{1}{N} \frac{a_{22}^{(-)}}{\det^{(-)}} (|\tau|)^{-1}, \quad \langle (\delta q)^2 \rangle_G^{(-)} = \frac{1}{N} \frac{a_{11}^{(-)}}{\det^{(-)}},$$

$$\langle \delta\rho\delta q \rangle_G^{(-)} = -\frac{1}{N} \frac{a_{12}^{(-)}}{\det^{(-)}} (\sqrt{|\tau|})^{-1}, \quad (\text{Д5.1})$$

$$\langle (\delta\rho)^2 \rangle_G^{(+)} = \frac{1}{N} \frac{1}{a_{11}^{(+)}} \tau^{-1}, \quad \langle (\delta q)^2 \rangle_G^{(+)} = \frac{1}{N} \frac{1}{a_{22}^{(+)}} \tau^{-1}, \quad \langle \delta\rho\delta q \rangle_G^{(+)} = 0.$$

де верхні індекси $(-)$, $(+)$ вказують на області нижче і вище критичної точки відповідно, і введені наступні позначення

$$a_{22}^{(-)} = -\tilde{K}_c \left(1 + \frac{\tilde{K}_c}{\tilde{I}_c} - \frac{\tilde{K}_c}{\tilde{I}_c^2} \right),$$

$$a_{11}^{(-)} = \tilde{I}_c^2 (A_c - q_1^{(-)}) + T_c \tilde{I}'_c, \quad (\text{Д5.2})$$

$$a_{12}^{(-)} = \tilde{K}_c \sqrt{A_c} (\tilde{I}_c - 1), \quad a_{11}^{(+)} = -(T_c \tilde{I}'_c + \tilde{I}_c^2 q_1^{(+)}),$$

$$\det^{(-)} = a_{11}^{(-)} a_{22}^{(-)} - (a_{12}^{(-)})^2.$$

Формули (Д.5.2) визначають поведінку матричних елементів матриці квадратичної форми (Д.2.1) в околі критичної точки.

Література

- [1] В.М.Цмоць, В.С.Янішевський, Я.Л.Заяць. // УФЖ. – 1996. – 41, № 7-8, – С.727-736.
- [2] Ю.М.Гуфан. Структурные фазовые переходы. – М.:“Наука”, 1982. с.304
- [3] Калита В.М., Локтев В.М. // УФЖ. – 1995. – 40, № 3, – С.235-240.
- [4] Р. Браут. Фазовые переходы. – М.:“Мир”, 1967, с.288.
- [5] Ф.М. Куни. Статистическая физика и термодинамика. – М.: “Наука”, 1981, с.352.

- [6] Замкова Н.Г, Зиненко В.М. ТМФ. – 1989. – 79, № 2. – с.272-281.
- [7] Д. Маттис. Теория магнетизма. М.:“Мир”, 1967, с.408.
- [8] Косевич А.М., Шкловський В.А. ЖЭТФ. – 1968. – 55, в.3(9). – с.1131-1141.
- [9] М. Фишер Природа критического состояния. – М.:“Мир”, 1968. с.222.
- [10] Керзон Хуанг, Статистическая механика. – М.:“Мир”, 1966. с.520

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Василь Степанович Янішевський

ТЕРМОДИНАМІКА МОДЕЛІ ІЗІНГА $S = 1$ НА СПІНОВІЙ СІТЦІ

Роботу отримано 25 лютого 1997 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені