

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-99-04U

С.І.Сороков, Р.Р.Левицький, Т.М.Верхоляк

ДОСЛІДЖЕННЯ МОДЕЛІ ІЗІНГА МЕТОДОМ
ЕФЕКТИВНОГО ПОЛЯ

УДК: 537.611.2; 537.635.

PACS: 05.50.+q, 75.10.Hk, 76.50.+g

Дослідження моделі Ізінга методом ефективного поля

С.І.Сороков, Р.Р.Левицький, Т.М.Верхоляк

Анотація. Оглянуто різні наближення методу ефективного поля. Наближення кореляційного ефективного поля поширено на модель Ізінга з довільною взаємодією. Це дозволяє перевірити точність отриманих раніше в наближенні ефективного поля результатів.

Investigation of Ising model by effective field method

S.I.Sorokov, R.R.Levitskii, T.M.Verkholyak

Abstract. Various approximations of effective field method are reviewed. Correlated effective field approximation is extended for Ising model with arbitrary interaction. It allows to test the accuracy of results obtained earlier in effective field approximation.

Подается в physica status solidi (b)

Submitted to physica status solidi (b)

1. Вступ

Тотожність Калена [1] і розвинутий на її основі метод ефективного поля широко використовуються для дослідження класичних спінових моделей. Застосовувавши до тотожності Калена техніку експоненціальних [2] чи інтегральних [3] операторів, можна отримати точні співвідношення для спінових кореляційних функцій моделі із взаємодією між найближчими сусідами. Різні версії методу ефективного поля полягають у відшуканні наближених розв'язків цих співвідношень. У найпростішому з них, наближенні ефективного поля, припускають статистичну незалежність спінових операторів на різних вузлах [2]. В інших наближеннях [4,5] для кращого врахування статичних кореляцій спінові оператори на різних вузлах виражалися через спін на певному виділеному вузлі [6]. Це дозволило позбутися в тотожності Калена кореляційних функцій вищих порядків. Невідомий кореляційний параметр, який виражає спінові оператори на різних вузлах, визначається з тотожності для кореляційних функцій [4]. Критична температура, отримана таким способом співпадає з наближенням Бете-Пайерлса [7]. В іншій роботі [5] з цією метою було використано обернену тотожність Калена. Результати для критичної температури двовимірної моделі Ізінга, отримані в [5], досить близькі до точних. Проте розв'язок містить функцію $\text{sth}(h)$, яка має розрив у нулі. У наближенні ефективного поля з кореляціями [8] кореляційні функції вищих порядків виражаються наближено через кумулянти другого порядку між сусідніми вузлами. Таке наближення дає кількісно кращі результати за наближення кореляційного ефективного поля [4], проте, як виявилось, містить додаткові нефізичні розв'язки для намагніченості. Загальним недоліком згаданих наближень є те, що вони не враховують геометричну структуру ґратки, а для них важливим є лише число найближчих сусідів. Крім того на основі цих теорій важко послідовно врахувати кореляції у вищих наближеннях. Недавно запропоновано "нове" наближення кореляційного ефективного поля [9]. В ньому ідея наближеного зображення спінових операторів застосовується для розв'язку рівняння для кореляційної функції 3-го порядку, в той час як в основному співвідношенні для середнього спінового моменту не зроблено жодних наближень. Результати для температури фазового переходу практично співпадають з точними, проте сама теорія є громіздкою. На жаль температурна залежність намагніченості в цьому наближенні не була досліджена і нам невідомо чи містить воно подібно до [8] нефізичні результати в околі T_c .

В останні роки різні наближення методу ефективного поля застосовують для дослідження неупорядкованої моделі Ізінга [8,10-13]. У цих роботах усереднення за випадковими конфігураціями проведено окремо для випадкових параметрів та кореляційних функцій. Випадки, коли міжспінова взаємодія не обмежується найближчими сусідами розглянуті в [13-15]. Дослідження неупорядкованої моделі із диполь-дипольною взаємодією між випадково розміщеними в просторі електричними диполями було здійснено у статті [14]. Проте ці результати не можна застосувати до дослідження кристалічних систем. Виникнення фази спінового скла в розчинених ізінгових магнетиках з РККУ міжспіновою взаємодією розглянуто в [13] за допомогою числового підходу та в межах лінійного наближення за $\langle S \rangle$ у наближенні ефективного поля. В статті [15] наближення ефективного поля поширено на випадок взаємодії довільного радіусу.

В даній роботі буде здійснено огляд робіт, які стосуються методу ефективного поля та його варіантів. В параграфі 2 тотожність Калена буде отримана двома способами. В параграфі 3 розглядається операторне та інтегральне представлення тотожності Калена і отримуються точні співвідношення для кореляційних функцій. В параграфі 4 оглянуто різні наближення в теорії ефективного поля. В параграфі 5 отримано термодинамічні функції як інтеграли від функції розподілу локальних полів. А в параграфі 6 розглянуто поширення наближення ефективного та кореляційного ефективного поля поширено на випадок моделі із довільною взаємодією.

2. Тотожність Калена

Розглянемо гамільтоніан моделі Ізінга

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J(R_{ij}) S_i S_j - \sum_j \Gamma_j S_j, \quad (2.1)$$

де $S_j = \pm 1$ – z компонента оператора спіну, Γ_j – зовнішнє поле, $J(R_{ij})$ – константа обмінної взаємодії. Виділимо у гамільтоніані частину, яка містить всі доданки з операторами на деякому вузлі k

$$H = -h_k S_k + H', \quad (2.2)$$

де $h_k = \sum_{j(j \neq k)} J(R_{kj}) S_j + \Gamma_k$ – операторне поле, яке діє на спін вузла k з боку оточуючих спінів, H' – частина з доданками, серед яких немає S_k . Середнє значення оператора $\{k\} S_k$ ($\{k\}$ – довільна

операторна функція, що не містить S_k) можна легко отримати:

$$\begin{aligned} \langle \{k\} S_k \rangle &= \frac{\text{Sp}_{\{S_1, \dots, S_k, \dots\}} \{k\} S_k e^{-\beta H}}{\text{Sp}_{\{S_1, \dots, S_k, \dots\}} e^{-\beta H}} \\ &= \frac{\text{Sp}_{\{S_1, \dots, S_{k-1}, S_{k+1}, \dots\}} \{k\} 2 \text{sh}(\beta h_k) e^{-\beta H'}}{\text{Sp}_{\{S_1, \dots, S_k, \dots\}} e^{-\beta H}}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Враховуючи те, що $2 \text{ch}(\beta h_k) = \text{Sp}_{\{S_k\}} e^{\beta h_k S_k}$, отримаємо тотожність Калена

$$\langle \{k\} S_k \rangle = \frac{\text{Sp}_{\{S_1, \dots, S_k, \dots\}} \{k\} \text{th}(\beta h_k) e^{-\beta H}}{\text{Sp}_{\{S_1, \dots, S_k, \dots\}} e^{-\beta H}} = \langle \{k\} \text{th}(\beta h_k) \rangle. \quad (2.4)$$

Цю тотожність можна також отримати, виходячи з властивостей часових кореляційних функцій [16]. Для цього потрібно розглянути спектральне представлення для наступної функції:

$$\langle \{S_k^+(t), \{k\} S_k^-(0)\} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \rho_{\{k\}}(\omega) e^{i\omega t}, \quad (2.5)$$

де $S_k^\alpha(t) = e^{iHt} S_k^\alpha e^{-iHt}$, $S_k^\pm = \frac{1}{2}(S_k^x \pm iS_k^y)$. Використавши властивості спектральних представлень кореляційних функцій [17]:

$$\begin{aligned} \langle \{k\}(0) S_k^-(0) S_k^+(t) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega I_{\{k\}}(\omega) e^{i\omega t}, \\ \langle S_k^+(t) \{k\}(0) S_k^-(0) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega I_{\{k\}}(\omega) e^{\beta\omega} e^{i\omega t}, \end{aligned}$$

виразимо спектральну інтенсивність через $\rho_{\{k\}}(\omega)$:

$$I_{\{k\}}(\omega) = \frac{\rho_{\{k\}}(\omega)}{e^{\beta\omega} + 1}. \quad (2.6)$$

З допомогою комутаційного співвідношення $[S_k^+ S_k^-] = S_k^z$, знайдемо

$$\begin{aligned} \langle \{k\} S_k \rangle &= (\langle S_k^+ \{k\} S_k^- \rangle - \langle \{k\} S_k^- S_k^+ \rangle) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega I_{\{k\}}(\omega) (e^{\beta\omega} - 1) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{th}(\beta\omega/2) \rho_{\{k\}}(\omega). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Щоб отримати $\rho_{\{k\}}(\omega)$, потрібно скористатись оберненим до (2.5) фур'є-перетворенням та явною залежністю S_k^\pm від t . Незавжди переконатись, що $S_k^\pm(t) = e^{\mp it2h_k} S_k^\pm$ і, отже,

$$\rho_{\{k\}}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle \{k\} e^{-it2h_k} \rangle = \langle \{k\} \delta(\omega - 2h_k) \rangle. \quad (2.8)$$

Підстановка останнього виразу в рівняння (2.7) і приводить до тотожності Калена (2.4).

3. Операторне та інтегральне представлення

Тотожність Калена виписана в попередньому параграфі є швидше формальна і для здійснення реальних обчислень її потрібно якось перетворити.

Техніка експоненційних операторів запропонована в роботі [2]. Застосовуючи оператори зсуву $\exp(h \frac{\partial}{\partial x})$, тотожність (2.4) можна зобразити у наступному вигляді:

$$\langle \{k\} S_k \rangle = \left\langle \{k\} \exp \left[\sum_{j(j \neq k)} J(R_{kj}) S_j \frac{\partial}{\partial x} \right] \right\rangle \text{th}(\beta\Gamma_k + \beta x)|_{x=0}. \quad (3.1)$$

Остання процедура дозволяє винести $\text{th}(\beta h_k)$ з-під знаку термодинамічного усереднення, а скориставшись з тотожності для операторів $S_j = \pm 1$

$$\exp(\alpha S_j) = \text{ch}(\alpha) + S_j \text{sh}(\alpha), \quad (3.2)$$

отримаємо

$$\begin{aligned} \langle \{k\} S_k \rangle &= \\ \left\langle \{k\} \prod_{j(j \neq k)} \left[\text{ch} \left(J(R_{kj}) \frac{\partial}{\partial x} \right) + S_j \text{sh} \left(J(R_{kj}) \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \right\rangle \text{th}(\beta\Gamma_k + \beta x)|_{x=0}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

З останнього рівняння видно, що права частина міститиме доданки з середніми від добутоків різних операторів S_j . Наприклад, для випадку моделі Ізінга на квадратній гратці ($z = 4$) з взаємодією між найближчими сусідами ($J(R_{kj}) = J$), маємо

$$\begin{aligned} \langle \{k\} S_k \rangle &= \\ \left\langle \{k\} \prod_{j=1}^4 \left[\text{ch} \left(J \frac{\partial}{\partial x} \right) + S_j \text{sh} \left(J \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \right\rangle \text{th}(\beta\Gamma_k + \beta x)|_{x=0}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

$j = 1, \dots, 4$ – номерує найближчі сусіди вузла k . З (3.4) з точністю до доданків, лінійних по Γ , отримуємо

$$\langle \{k\} S_k \rangle = K_1 \sum_{j=1}^4 \langle \{k\} S_j \rangle + K_2 \sum_{j_1 > j_2 > j_3} \langle \{k\} S_{j_1} S_{j_2} S_{j_3} \rangle$$

$$+\beta\Gamma_k \left[L_1 \langle \{k\} \rangle + L_2 \sum_{j_1 > j_2} \langle \{k\} S_{j_1} S_{j_2} \rangle + L_3 \langle \{k\} S_{j_1} S_{j_2} S_{j_3} S_{j_4} \rangle \right], \quad (3.5)$$

$$K_1 = \text{sh}\left(J \frac{\partial}{\partial x}\right) \text{ch}^3\left(J \frac{\partial}{\partial x}\right) \text{th}(\beta x)|_{x=0} = \frac{1}{8} [\text{th}(4\beta J) + 2 \text{th}(2\beta J)],$$

$$K_2 = \text{sh}^3\left(J \frac{\partial}{\partial x}\right) \text{ch}\left(J \frac{\partial}{\partial x}\right) \text{th}(\beta x)|_{x=0} = \frac{1}{8} [\text{th}(4\beta J) - 2 \text{th}(2\beta J)],$$

$$L_1 = \text{ch}^4\left(J \frac{\partial}{\partial x}\right) \text{sech}^2(\beta x)|_{x=0} = \frac{1}{8} [\text{sech}^2(4\beta J) + 4 \text{sech}^2(2\beta J) + 3],$$

$$L_2 = \text{sh}^2\left(J \frac{\partial}{\partial x}\right) \text{ch}^2\left(J \frac{\partial}{\partial x}\right) \text{sech}^2(\beta x)|_{x=0} = \frac{1}{8} [\text{sech}^2(4\beta J) - 1],$$

$$L_3 = \text{sh}^4\left(J \frac{\partial}{\partial x}\right) \text{sech}^2(\beta x)|_{x=0} = \frac{1}{8} [\text{sech}^2(4\beta J) - 4 \text{sech}^2(2\beta J) + 3].$$

Отже, тотожність Калена перетворена у точне співвідношення для кореляційних функцій.

Інтегральне представлення тотожності Калена [3].

Для побудови інтегрального представлення вводять функцію розподілу локальних полів:

$$P_{\{k\}}(h) = \langle \{k\} \delta(h - h_k) \rangle. \quad (3.6)$$

В результаті тотожність Калена (2.4) можна переписати у вигляді інтегралу за випадковим полем h :

$$\langle \{k\} S_k \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dh P_{\{k\}}(h) \text{th}(\beta h). \quad (3.7)$$

Для обчислення $P_{\{k\}}(h)$ використовують інтегральне представлення δ -функції:

$$\begin{aligned} P_{\{k\}}(h) &= \left\langle \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta e^{i\zeta(h-h_k)} \{k\} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta e^{i\zeta(h-\Gamma_k)} \left\langle \{k\} \exp\left(-i\zeta \sum_{j(j \neq k)} J(R_{kj}) S_j\right) \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Застосовуючи співвідношення (3.2) отримуємо:

$$\begin{aligned} P_{\{k\}}(h) &= \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta e^{i\zeta(h-\Gamma_k)} \left\langle \{k\} \prod_{j(j \neq k)} [\cos(\zeta J(R_{kj})) - i S_j \sin(\zeta J(R_{kj}))] \right\rangle \end{aligned} \quad (3.9)$$

Якщо виконати інтегрування явно, то результат можна зобразити у вигляді суми добутоків кореляційних функцій на $\delta(h - \tilde{h})$, де \tilde{h} – деяка комбінація констант взаємодій між спіном на вузлі k та оточуючими спінами. Для моделі Ізінга із взаємодією між найближчими сусідами, заданій на квадратній ґратці:

$$P_{\{k\}}(h) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta e^{i\zeta(h-\Gamma_k)} \left\langle \{k\} \prod_{j=1}^4 [\cos(\zeta J) - i S_j \sin(\zeta J)] \right\rangle. \quad (3.10)$$

Обчислення даного інтегралу з точністю до доданків лінійних по Γ_k і підстановка $P_{\{k\}}(h)$ в інтегральне представлення (3.7) приводить до результатів, що співпадають із співвідношенням (3.5). Це і свідчить про еквівалентність операторного та інтегрального методів для тотожності Калена.

4. Різні типи наближень методу ефективного поля

Точне співвідношення (3.5) отримане в попередньому параграфі містить у правій стороні кореляційні функції вищих порядків, ніж у лівій. Даний параграф стосуватиметься розгляду різних наближень для пошуку розв'язків цих співвідношень.

4.1. Наближення ефективного поля

Для спрощення викладу розглядатимемо наближення на прикладі моделі із взаємодією між найближчими сусідами, визначеній на квадратній ґратці [2]. Згідно співвідношення (3.5) запишемо рівняння для середнього магнітного моменту ($m = \langle S_j \rangle$):

$$\begin{aligned} \langle S_k \rangle &= K_1 \sum_{j=1}^4 \langle S_j \rangle + K_2 \sum_{j_1 > j_2 > j_3} \langle S_{j_1} S_{j_2} S_{j_3} \rangle \\ &+ \beta \Gamma_k \left[L_1 + L_2 \sum_{j_1 > j_2} \langle S_{j_1} S_{j_2} \rangle + L_3 \langle S_{j_1} S_{j_2} S_{j_3} S_{j_4} \rangle \right], \end{aligned} \quad (4.1)$$

де K_i , L_i – визначаються формулами (3.5), а j_i нумерує спіни, які оточують вузол k . Наближення ефективного поля можна отримати, якщо припустити статистичну незалежність спінових операторів на різних вузлах:

$$\langle S_{j_1} \dots S_{j_n} \rangle = \langle S_{j_1} \rangle \dots \langle S_{j_n} \rangle = m^n. \quad (4.2)$$

В результаті співвідношення (4.1) перетворюється в самоузгоджене рівняння для визначення середньої намагніченості:

$$m = 4K_1 m + 4K_2 m^3 + \beta \Gamma [L_1 + 6L_2 m^2 + L_3 m^4] \quad (4.3)$$

У нульовому магнітному полі ($\Gamma = 0$) рівняння має два розв'язки: тривіальний $m = 0$ та $|m| = \sqrt{\frac{4K_1 - 1}{4K_2}}$. З умови, коли другий розв'язок зникає, знаходять температуру фазового переходу:

$$4K_1 = 1 \quad (4.4)$$

Розв'язок цього рівняння дає результат $T_c = 3.0898J$, тоді як точний $T_c = 2.2692J$. Результати обчислень намагніченості як функції температури зображено на рис.1. Похідна рівняння (4.3) за зовніш-

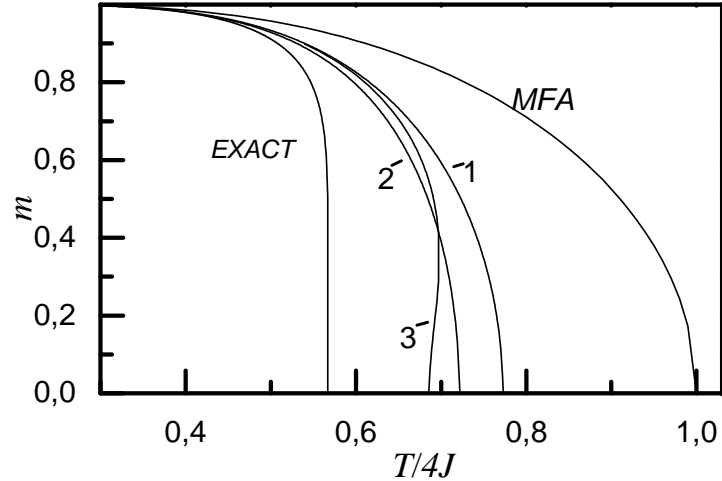


Рис. 1. Намагніченість як функція температури для моделі Ізінга на квадратній ґратці в різних наближеннях: *MFA* - наближення молекулярного поля, *exact* - точний розв'язок Онзагера [21], 1 - наближення ефективного поля [2], 2 - наближення кореляційного ефективного поля [4], 3 - наближення ефективного поля з кореляціями [8].

нім полем приводить до рівняння для статичної сприйнятливості:

$$\chi = \frac{dm}{d\Gamma} = \beta [L_1 + 6L_2 m^2 + L_3 m^4] + [4K_1 + 8K_2 m^2] \frac{dm}{d\Gamma}. \quad (4.5)$$

Його розв'язок:

$$\chi = \frac{\beta [L_1 + 6L_2 m^2 + L_3 m^4]}{1 - 4K_1 - 8K_2 m^2}. \quad (4.6)$$

Подивимось чим необхідно знехтувати, щоб отримати наближення ефективного поля безпосередньо з техніки експоненціальних операторів. Припустимо у формулі (3.3) (поклавши $\{k\} = 1$)

$$\begin{aligned} & \left\langle \prod_{j(j \neq k)} \left[\text{ch} \left(J(R_{kj}) \frac{\partial}{\partial x} \right) + S_j \text{sh} \left(J(R_{kj}) \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \right\rangle \\ & \approx \prod_{j(j \neq k)} \left[\text{ch} \left(J(R_{kj}) \frac{\partial}{\partial x} \right) + \langle S_j \rangle \text{sh} \left(J(R_{kj}) \frac{\partial}{\partial x} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Це відповідає першому порядку кластерного наближення для $\left\langle \exp \left[\sum_{j(j \neq k)} J(R_{kj}) S_j \frac{\partial}{\partial x} \right] \right\rangle$ [18]. Неважко переконатись, що безпосередня підстановка (4.7) у тотожність Калена (3.1) для моделі Ізінга на квадратній ґратці ($\{k\} = 1$) приведе до рівняння для намагніченості (4.3). Отже, перше кластерне наближення для оператора зсуву (4.7) та припущення статистичної незалежності операторів на різних вузлах для співвідношення (4.1) еквівалентні і відповідають одному наближенню ефективного поля. Аналогічно до цього можна виявити, що для випадку інтегрального представлення тотожності Калена (3.7), наближенню ефективного поля відповідатиме наступне наближення для функції розподілу локальних полів:

$$\begin{aligned} & \left\langle \prod_{j(j \neq k)} [\cos(\zeta J(R_{kj})) - i S_j \sin(\zeta J(R_{kj}))] \right\rangle \\ & \approx \prod_{j(j \neq k)} [\cos(\zeta J(R_{kj})) - i \langle S_j \rangle \sin(\zeta J(R_{kj}))]. \end{aligned} \quad (4.8)$$

4.2. Наближення кореляційного ефективного поля

В наближенні кореляційного ефективного поля [4] для того, щоб позбутись кореляційних функцій вищих порядків, у співвідношенні (4.1) зображають наближено спінові оператори на різних вузлах через оператор на виділеному вузлі k :

$$S_j \approx m + \lambda_j (S_k - m) = m(1 - \lambda_j) + \lambda_j S_k. \quad (4.9)$$

Оскільки ми розглядаємо ізотропну взаємодію, то можна припустити, що всі λ_j – однакові ($\lambda_j = \lambda$). Якщо обчислити парну кореляційну функцію $\langle S_k S_j \rangle$, враховуючи (4.9):

$$\langle S_k S_j \rangle \approx m^2 + \lambda(1 - m^2), \quad (4.10)$$

то видно, що λ пропорційне до кумулянту 2-го порядку. Кореляційні функції вищих порядків виражаються через m та λ наступним чином:

$$\begin{aligned} \langle S_1 S_2 \rangle &\approx \langle [m(1 - \lambda) + \lambda S_k]^2 \rangle = \lambda^2 + m^2(1 + \lambda), \\ \langle S_1 S_2 S_3 \rangle &\approx \langle [m(1 - \lambda) + \lambda S_k]^3 \rangle \\ &= (3\lambda^2 - 2\lambda^3)m + (1 - 3\lambda^2 + 2\lambda^3)m^3, \\ \langle S_1 S_2 S_3 S_4 \rangle &\approx \langle [m(1 - \lambda) + \lambda S_k]^4 \rangle = \lambda^4 + (6\lambda^2 - 8\lambda^3 + 2\lambda^4)m^2 \\ &+ (1 - 6\lambda^2 + 8\lambda^3 - 3\lambda^4)m^4. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Підставляючи отримані вирази для кореляційних функцій у (4.1) отримуємо у нульовому магнітному полі:

$$\begin{aligned} m &= Am + Bm^3, \\ A &= 4K_1 + 12K_2\lambda^2 - 8K_2\lambda^3, B = 4K_2(1 - 3\lambda^2 + 2\lambda^3). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Рівняння (4.12) має нетривіальний розв'язок $m = \sqrt{\frac{1-A}{B}}$. В усіх виразах присутній невідомий кореляційний параметр λ . Щоб його визначити записують тотожність для кореляційної функції $\langle S_k S_i \rangle$ (для цього потрібно визначити $\{k\} = S_j$ у тотожності (2.4), або співвідношенні (3.5)):

$$\begin{aligned} \langle S_k S_i \rangle &= K_1 \sum_{j=1}^4 \langle S_i S_j \rangle + K_2 \sum_{j_1 > j_2 > j_3} \langle S_i S_{j_1} S_{j_2} S_{j_3} \rangle \\ &+ \beta \Gamma_k \left[L_1 \langle S_i \rangle + L_2 \sum_{j_1 > j_2} \langle S_i S_{j_1} S_{j_2} \rangle + L_3 \langle S_i S_{j_1} S_{j_2} S_{j_3} S_{j_4} \rangle \right]. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Після заміни кореляційних функцій виразами (4.10), (4.11) отримуємо додаткове рівняння для λ :

$$\begin{aligned} m^2 + \lambda(1 - m^2) &= K_1 + 3(K_1 + K_2)m^2 \\ &+ K_2 m^4 + 3(K_1 + K_2 + 2K_2 m^2)(1 - m^2)\lambda^2 \\ &- 8K_2 m^2(1 - m^2)\lambda^3 + K_2(1 + 3m^2)(1 - m^2)\lambda^4. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Намагніченість m та кореляційний параметр λ визначаються з розв'язку рівнянь (4.12) та (4.14). Критичну температуру шукають з умови зникнення ненульового розв'язку для m . Це приводить до наступної системи рівнянь:

$$\begin{cases} 4K_1 + 12K_2\lambda^2 - 8K_2\lambda^3 = 1, \\ K_1 + 3(K_1 + K_2)\lambda^2 + K_2\lambda^4 = \lambda. \end{cases} \quad (4.15)$$

Розв'язок даних рівнянь для T_c співпадає з результатами наближення Бете-Пайєрлса [7]

$$\frac{T_c}{J} = \frac{2}{\ln 2}, \quad \lambda_c = \frac{1}{3} \quad (4.16)$$

В результаті розв'язку системи рівнянь (4.12), (4.14) отримуємо температурну залежність намагніченості та кореляційного параметру. Результати обчислень зображені а рис.1. Як видно з нього, наближення кореляційного ефективного поля дещо покращує попереднє наближення.

В роботі [19] в якості рівняння для невідомого параметра λ вибрано тотожність Калена для кореляційних функцій третього порядку. Система рівнянь, отримана в цьому випадку матиме ті ж самі розв'язки, що й (4.12), (4.14).

При безпосередньому розгляді співвідношення (3.3) наближенню кореляційного ефективного поля відповідає заміна там S_j на $m(1 + \lambda) + \lambda S_k$. Це приводить до наступного зображення оператора зсуву:

$$\begin{aligned} &\left\langle \prod_{j(j \neq k)} \left[\text{ch} \left(J(R_{kj}) \frac{\partial}{\partial x} \right) + S_j \text{sh} \left(J(R_{kj}) \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \right\rangle \\ &\approx \prod_{j(j \neq k)} \left[\text{ch} \left(J(R_{kj}) \frac{\partial}{\partial x} \right) + (m(1 + \lambda) + \lambda S_k) \text{sh} \left(J(R_{kj}) \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.17)$$

Для цього оператора на $\text{th}(\beta \Gamma_k + \beta x)$ приводить до рівняння (4.13). Аналогічне наближення необхідно здійснити і для фур'є-зображення функції розподілу локальних полів $P(h)$.

4.3. Визначення кореляційного параметру з оберненої тотожності Калена

Для визначення λ можна використати обернену тотожність Калена [5]. Її отримують, якщо в тотожності (2.4) покласти, що $\{k\}$ рівне $\text{cth}(\beta h_k)$. В результаті тотожність трансформується в

$$1 = \langle S_k \text{cth}(\beta h_k) \rangle. \quad (4.18)$$

Для моделі, розглянутої в попередніх пунктах, ця тотожність після застосування техніки експоненційних операторів запишеться у вигляді співвідношення:

$$1 = 4\langle S_0 S_1 \rangle \tilde{K}_1 + 4\langle S_0 S_1 S_2 S_3 \rangle \tilde{K}_2. \quad (4.19)$$

$\tilde{K}_{1,2}$ відповідає $K_{1,2}$ у формулах (3.5), де th замінено на cth . Підстановка наближеного зображення операторів (4.9) приводить до додаткового рівняння для визначення λ :

$$\begin{aligned} 1 &= \tilde{C}_0 + \tilde{C}_2 m^2 + \tilde{C}_4 m^4; \\ \tilde{C}_0 &= 4\tilde{K}_1 \lambda + 4\tilde{K}_2 \lambda^3, \\ \tilde{C}_2 &= 4\tilde{K}_1 (1 - \lambda) + 4\tilde{K}_2 (3\lambda - 3\lambda^2), \\ \tilde{C}_4 &= 4\tilde{K}_2 (1 - 3\lambda + 3\lambda^2 - \lambda^3). \end{aligned} \quad (4.20)$$

Температура фазового переходу визначається з системи рівнянь (4.13), (4.20) при умові $m \rightarrow 0$:

$$\begin{cases} 4\tilde{K}_1 + 12\tilde{K}_2 \lambda^2 - 8\tilde{K}_2 \lambda^3 = 1, \\ 4\tilde{K}_1 \lambda + 4\tilde{K}_2 \lambda^3 = 1. \end{cases} \quad (4.21)$$

Розв'язок цієї системи $T_c = 2.490J$. Незважаючи на найкращу з поміж усіх наближень типу ефективного поля збіжність з точним результатом для T_c даний підхід має один недолік. Він пов'язаний з тим, що $\text{cth}(x)$ невизначений в $x = 0$. У формулі (4.19) доданок пропорційний $\text{cth}(x = 0)$ взагалі опускається, це означає, що конфігурація зовнішніх полів $h_k = 0$ просто не враховується.

4.4. Наближення ефективного поля з кореляціями

В роботі [8] Канейоші виразив кореляційні функції у співвідношенні (3.5) через середні від операторів флуктуацій $\delta S_j = S_j - m$. Наприклад, для кореляційних функцій 2-го чи 3-го порядку можна встановити наступну відповідність:

$$\begin{aligned} \langle S_1 S_2 \rangle &= \langle (m + \delta S_1)(m + \delta S_2) \rangle = m^2 + \langle \delta S_1 \delta S_2 \rangle, \\ \langle S_1 S_2 S_3 \rangle &= m^3 + m(\langle \delta S_1 \delta S_2 \rangle + \langle \delta S_1 \delta S_3 \rangle + \langle \delta S_2 \delta S_3 \rangle) + \langle \delta S_1 \delta S_2 \delta S_3 \rangle. \end{aligned} \quad (4.22)$$

В останніх формулах враховано, що $\langle \delta S_i \rangle = 0$. Співвідношення для намагніченості (4.1), виражені через середні типу $\langle \delta S_1 \dots \delta S_n \rangle$ буде мати вигляд:

$$m = 4K_1 m + K_2 \sum_{j_1 > j_2 > j_3} (m^3 + m \langle \delta S_{j_1} \delta S_{j_2} \rangle) \quad (4.23)$$

$$\begin{aligned} &+ \langle \delta S_{j_1} \delta S_{j_3} \rangle + \langle \delta S_{j_2} \delta S_{j_3} \rangle + \langle \delta S_{j_1} \delta S_{j_2} \delta S_{j_3} \rangle \\ &+ \beta \Gamma_k \left[L_1 + L_2 \sum_{j_1 > j_2} (m^2 \langle \delta S_{j_1} \delta S_{j_2} \rangle) + L_3 \left(m^4 + m^2 \sum_{j_1 > j_2} \langle \delta S_{j_1} \delta S_{j_2} \rangle \right. \right. \\ &\left. \left. + m \sum_{j_1 > j_2 > j_3} \langle \delta S_{j_1} \delta S_{j_2} \delta S_{j_3} \rangle + \langle \delta S_{j_1} \delta S_{j_2} \delta S_{j_3} \delta S_{j_4} \rangle \right) \right]. \end{aligned}$$

В роботі [8] запропоновано наступне розщеплення для кореляційних функцій:

$$\begin{aligned} \langle \delta S_1 \dots \delta S_{2n} \rangle &= \langle S_k \delta S_1 \dots S_k \delta S_{2n} \rangle \approx \langle S_k \delta S_1 \rangle \dots \langle S_k \delta S_{2n} \rangle = g^{2n}, \\ \langle \delta S_1 \dots \delta S_{2n+1} \rangle &= \langle S_k S_k \delta S_1 \dots S_k \delta S_{2n+1} \rangle \\ &\approx \langle S_k \rangle \langle S_k \delta S_1 \rangle \dots \langle S_k \delta S_{2n+1} \rangle = m g^{2n+1}, \end{aligned} \quad (4.24)$$

де $g = \langle S_k \delta S_j \rangle$ (j – індекс сусіднього вузла). В останній формулі використано, те що $S_k^{2n} = 1$. Неважко переконатись, що g має зміст кумулянтної кореляційної функції між спінами на сусідніх вузлах:

$$\langle \delta S_k \delta S_j \rangle = \langle S_k \delta S_j \rangle = g. \quad (4.25)$$

В наближенні (4.24) рівняння для m буде мати такий вигляд:

$$\begin{aligned} m &= 4K_1 m + 4K_2 (m^3 + 3mg^2 + mg^3) \\ &+ \beta \Gamma_k [L_1 + 6L_2 (m^2 + g^2) + L_3 (m^4 + 6m^2 g^2 + 4mg^3 + g^4)]. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Щоб визначити g потрібно записати співвідношення для кореляційної функції $\langle S_k \delta S_j \rangle$ (для цього необхідно покласти $\{k\} = \delta S_j$ в (2.4)). Застосовувавши наближення (4.24), можна отримати додаткове рівняння для визначення g :

$$\begin{aligned} g &= K_1 (1 - m^2 + 3g^2) + K_2 [3(1 - m^2)m^2 + 3(1 - 2m^2)g^2 + g^4] \\ &+ \beta \Gamma [L_2 (3m(1 - m^2) + 3mg^2 + 3mg^3) \\ &+ L_3 (m^3(1 - m^2) + 3m(1 - 2m^2)g^2 + m(1 - 4m^2)g^3 - mg^4)]. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Рівняння (4.26), (4.27) при $\Gamma = 0$ і $m = 0$ приводить до системи рівнянь для визначення критичної температури:

$$\begin{cases} 1 = 4K_1 + 12K_2 g^2 + 4K_2 g^3, \\ g = K_1 + 3(K_1 + K_2)g^2 + K_2 g^4. \end{cases} \quad (4.28)$$

Розв'язок цієї системи $T_c = 2.744J$. Проте числовий розв'язок рівнянь (4.26), (4.27) показує, що в околі T_c виникають додаткові нефізичні розв'язки для намагніченості (рис.1). Це означає, що хоча дане наближення дає дещо кращі результати, в околі критичної температури воно незастосовне.

5. Обчислення термодинамічних функцій за допомогою функції розподілу локальних полів

Тотожність Калена [1] і наближення типу ефективного поля, які слідують з неї, дозволяють отримати співвідношення між кореляційними функціями. З іншого боку, отримані результати дозволяють дослідити і термодинамічні функції моделі Ізінга. Розглянемо механізм їх обчислення за допомогою інтегрального представлення (3.7) та функції розподілу (3.8) [3]. Вже саме інтегральне представлення (3.7) є формулою, яка виражає середню намагніченість через функцію розподілу локальних полів. Для того, щоб знайти середню енергію системи потрібно умовно розбити гамільтоніан на суму "одночастинкових" вкладів:

$$H = \sum_k H_k = -\frac{1}{2} \sum_k (h_k + \Gamma_k) S_k. \quad (5.1)$$

Тоді, середня енергія, яка припадає на один вузол, після використання тотожності Калена запишеться:

$$E = \langle H_k \rangle = -\frac{1}{2} \langle (h_k + \Gamma_k) S_k \rangle = -\frac{1}{2} \langle h_k \text{th}(\beta h_k) \rangle - \frac{1}{2} \Gamma_k \langle S_k \rangle. \quad (5.2)$$

Використавши означення (3.6) виразимо внутрішню енергію через функцію розподілу локальних полів:

$$E = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dh P(h) (h + \Gamma_k) \text{th}(\beta h). \quad (5.3)$$

Використавши термодинамічне співвідношення $c = \frac{dE}{dT} = -\beta^2 \frac{dE}{d\beta}$ можна знайти теплоємність при постійному полі:

$$c = \frac{\beta^2}{2} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dh \frac{dP(h)}{d\beta} (h + \Gamma_k) \text{th}(\beta h) + \int_{-\infty}^{\infty} dh P(h) (h + \Gamma_k) \frac{h}{\text{ch}^2(\beta h)} \right]. \quad (5.4)$$

На жаль, вільну енергію F , яка є твірним функціоналом для даної системи, аналітично знайти не вдається. Оскільки $E = \frac{d\beta F}{d\beta}$, де $F = -\frac{1}{N\beta} \ln \text{Sp} e^{-\beta H}$, то вільну енергію можна отримати, як інтеграл від внутрішньої енергії:

$$\beta F = \int_0^{\beta} E(\beta') d\beta' = -\frac{1}{2} \int_0^{\beta} d\beta' \int_{-\infty}^{\infty} dh P(h) (h + \Gamma_k) \text{th}(\beta' h). \quad (5.5)$$

Проте залежність функції розподілу локальних полів від температури є складною, і явно проінтегрувати (5.5) по β неможливо. Диференціюючи формулу для середньої намагніченості (3.7) за зовнішнім полем, можна отримати статичну сприйнятливості χ , як це зроблено в (4.5). Якщо шукати функцію розподілу локальних полів у наближенні ефективного поля, то вона буде функцією лишень одного параметра: намагніченості. Результат диференціювання приводить до лінійного рівняння для χ :

$$\chi = \frac{dm}{d\Gamma} = \int_{-\infty}^{\infty} dh \frac{dP(h)}{d\Gamma} \text{th}(\beta h) + \int_{-\infty}^{\infty} dh \frac{dP(h)}{dm} \text{th}(\beta h) \times \frac{dm}{d\Gamma}. \quad (5.6)$$

Якщо ж шукати функцію розподілу $P(h)$ у вищих наближеннях (наближення кореляційного ефективного поля п.4.2., наближення ефективного поля з кореляціями п.4.4.), то рівняння типу (5.6) для χ міститиме похідні за зовнішнім полем від параметрів λ , g , відповідно. І для знаходження статичної сприйнятливості необхідно буде розв'язати систему двох лінійних рівнянь.

Використовуючи функцію розподілу $P(h)$ можна отримати поперечний динамічний структурний фактор [3]:

$$S(k, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \sum_{i,j} \exp[ik R_{ij}] \langle S_i^x S_j^x(t) \rangle. \quad (5.7)$$

Замінивши оператори S_j^x на оператори $S_j^{\pm} = S_j^x \pm iS_j^y$, знайдемо:

$$S(k, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \sum_{i,j} \exp[ik R_{ij}] \langle S_i^+ S_j^-(t) + S_i^- S_j^+(t) \rangle. \quad (5.8)$$

Отриману в параграфі 2 часову залежність операторів $S_k^{\pm}(t) = S_k^{\pm} \exp(\mp it2h_k)$, можна перетворити до вигляду:

$$S_k^{\pm}(t) = S_k^{\pm} \exp(it2h_k S_k). \quad (5.9)$$

В результаті одержимо, що

$$S(k, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \sum_i \langle \exp(it2h_i S_i) \rangle. \quad (5.10)$$

Використавши (3.2) та тотожність Калена, отримаємо:

$$\begin{aligned} S(k, \omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \sum_i \langle [\cos(2th_i) + i \operatorname{th}(\beta h_i) \sin(2th_i)] \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dh \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \sum_i [\cos(2th) + i \operatorname{th}(\beta h) \sin(2th)] P(h) \\ &= \frac{N}{2} \frac{P(\omega/2) + P(-\omega/2)}{1 + \exp(-\beta\omega)}. \end{aligned} \quad (5.11)$$

6. Узагальнення наближень на моделі із взаємодією довільного радіуса

У цьому параграфі деякі з наближень, описаних вище, узагальнюються на модель Ізінга із взаємодією, яка не обмежується найближчими сусідами.

6.1. Наближення ефективного поля

Для того, щоб отримати наближення ефективного поля для моделі із взаємодією довільного радіуса [15], використаємо інтегральне представлення тотожності Калена (3.7). При $\{k\} = 1$ отримаємо співвідношення для середнього магнітного моменту:

$$\langle S_k \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dh P(h) \operatorname{th}(\beta h), \quad (6.1)$$

$$P(h) = \langle \delta(h - h_k) \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta e^{i\zeta(h - \Gamma_k)} M(\zeta),$$

$$\text{де } M(\zeta) = \left\langle \prod_{j(j \neq k)} [\cos(\zeta J(R_{kj})) - i S_j \sin(\zeta J(R_{kj}))] \right\rangle \quad (6.2)$$

– характеристична функція, що є фур'є-зображенням функції розподілу локальних полів $P(h)$ при $\Gamma_k = 0$. Як виявлено в п.4.2., наближенню ефективного поля відповідає перший порядок кластерного розвинення для $M(\zeta)$ (4.8):

$$M(\zeta) \approx \prod_{j(j \neq k)} [\cos(\zeta J(R_{kj})) - i \langle S_j \rangle \sin(\zeta J(R_{kj}))]. \quad (6.3)$$

У випадку ізотропної взаємодії можна скористатися "сумуванням" за координаційними сферами:

$$M(\zeta) \approx \prod_n [\cos(\zeta J(R_{kj})) - i \langle S_j \rangle \sin(\zeta J(R_{kj}))]^{z_n}, \quad (6.4)$$

де z_n – число вулів у n -ій координаційній сфері, а R_n – її радіус. Знайти безмежний добуток (6.3) чи (6.4) в аналітичній формі неможливо, тому множення на вклади, що дають далекі вузли здійснюватиметься числовим методом доти, поки $J(R_{kj})$ не стане достатньо малим, щоб $[\cos(\zeta J(R_{kj})) - m \sin(\zeta J(R_{kj}))]$ не відрізнявся від одиниці.

Аналітичний вираз для $M(\zeta)$ і функції розподілу для далекосяжних взаємодій можна знайти лишень для одновимірної моделі [20]. Якщо вибрати взаємодію у вигляді $J(R_n) = J2^{-n}$, то в наближенні ефективного поля при $T > T_c$ отримаємо

$$M(\zeta) = \left[\frac{\sin(\zeta J)}{\zeta J} \right]^2. \quad (6.5)$$

Тут використана формула для безмежного добутку [20]

$$\prod_{n=1}^{\infty} \cos(\zeta J2^{-n}) = \left[\frac{\sin(\zeta J)}{\zeta J} \right]. \quad (6.6)$$

Після зворотнього перетворення Фур'є отримаємо, що функція розподілу має трикутну форму:

$$P(h) = \frac{1}{2J} \begin{cases} 1 - \frac{|h|}{2J} & , \quad |h| \leq 2J; \\ 0 & , \quad |h| > 2J. \end{cases} \quad (6.7)$$

Характеристична функція $M(\zeta)$ залежить в наближенні ефективного поля від намагніченості m . Таким чином, інтегральне співвідношення (6.1) перетворюється в самоузгоджене рівняння для визначення намагніченості. Щоб уникнути подвійного числового інтегрування в рівнянні, перепишемо його у вигляді:

$$m = \int_{-\infty}^{+\infty} d\zeta e^{-i\zeta \Gamma} M(\zeta) \phi(\zeta), \quad (6.8)$$

де $\phi(\zeta)$ фур'є-зображення $\operatorname{th}(\beta h)$,

$$\phi(\zeta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dh \operatorname{th}(\beta h) e^{i\zeta h} = \frac{iT}{2 \operatorname{sh} \frac{\pi \zeta T}{2}}. \quad (6.9)$$

Внутрішню енергію можна переписати через характеристичну функцію $M(\zeta)$. За відсутності зовнішнього поля $\Gamma = 0$

$$E = \frac{i}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \frac{\partial \phi(\zeta)}{\partial \zeta} [M(\zeta) - M(0)]. \quad (6.10)$$

Продиференціювавши рівняння (6.8) за зовнішнім полем Γ , отримаємо лінійне рівняння для статичної сприйнятливості χ . Його розв'язок матиме вигляд

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial \Gamma} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} d\zeta (-i\zeta) \phi(\zeta) M(\zeta)}{1 - \int_{-\infty}^{+\infty} d\zeta \phi(\zeta) \frac{\partial M(\zeta)}{\partial m}}, \quad (6.11)$$

де $\frac{\partial M(\zeta)}{\partial m} = iM(\zeta) \sum_j \frac{\sin(\zeta J(R_{kj}))}{\cos(\zeta J(R_{kj})) - im \sin(\zeta J(R_{kj}))}$. Температуру фазового переходу можна знайти з умови розбіжності статичної сприйнятливості:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\zeta \phi(\zeta) \frac{\partial M(\zeta)}{\partial m} = 1. \quad (6.12)$$

На рис.2,3 зображені результати обчислення функції розподілу локальних полів для випадку експоненційно спадної міжвузлової взаємодії $J(R) = \exp(-\frac{R}{r_0})$. З рисунків видно, що зміна радіуса взаємодії r_0 змінює характер частотної залежності функції розподілу локальних полів. При великих радіусах взаємодії вона має форму розподілу Гауса, а при малих у неї з'являється тонка структура. Слід зауважити, що у даному наближенні функція розподілу локальних полів залежить від температури неявно через залежність від намагніченості, а тому, коли $T > T_c$ залежність від температури зникає. На рис.4 зображено намагніченість, як функцію температури для моделі на квадратній ґратці; на рис.5 наведені результати для статичної сприйнятливості.

6.2. Наближення кореляційного ефективного поля

Для отримання наближення кореляційного ефективного поля потрібно застосувати до характеристичної функції $M(\zeta)$ наближене зображення (4.9). У цьому випадку

$$M(\zeta) = \left\langle \prod_{j(j \neq k)} [A_j + B_j S_k] \right\rangle, \quad (6.13)$$

$$\begin{aligned} A_j &= \cos(\zeta J(R_{kj})) - im(1 - \lambda_j) \sin(\zeta J(R_{kj})), \\ B_j &= -i\lambda_j \sin(\zeta J(R_{kj})). \end{aligned} \quad (6.14)$$

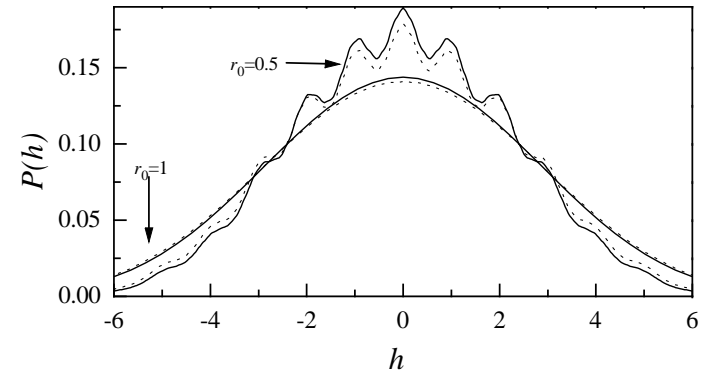


Рис. 2. Функція розподілу локальних полів $P(h)$ для квадратної ґратки та взаємодії $J(R) = \exp(-\frac{R}{r_0})$ для різних r_0 : наближення ефективного поля - суцільна лінія, кореляційного ефективного поля - штрихована.

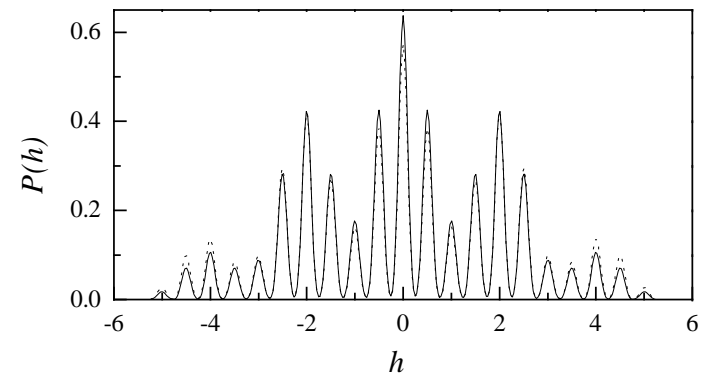


Рис. 3. Функція розподілу локальних полів $P(h)$ для квадратної ґратки та взаємодії $J(R) = \exp(-\frac{R}{r_0})$ для $r_0 = 0.3$: наближення ефективного поля - суцільна лінія, кореляційного ефективного поля - штрихована.

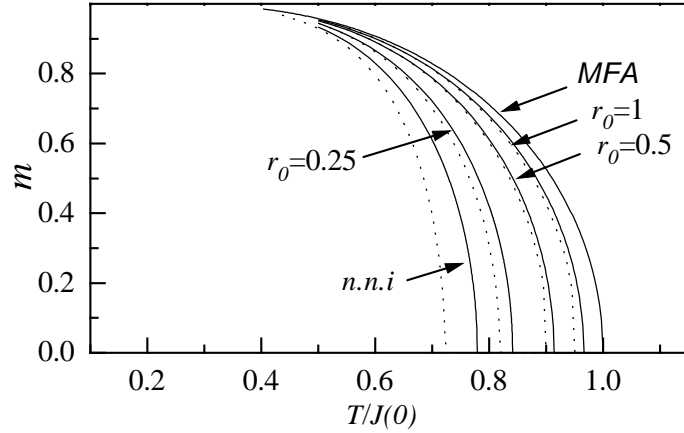


Рис. 4. Температурна залежність намагніченості m моделі на квадратній ґратці для обмінної взаємодії $J(R) = \exp(-\frac{R-1}{r_0})$: наближення ефективного поля - суцільна лінія, кореляційного ефективного поля - штрихована; п.п.і означає модель із взаємодією між найближчими сусідами.

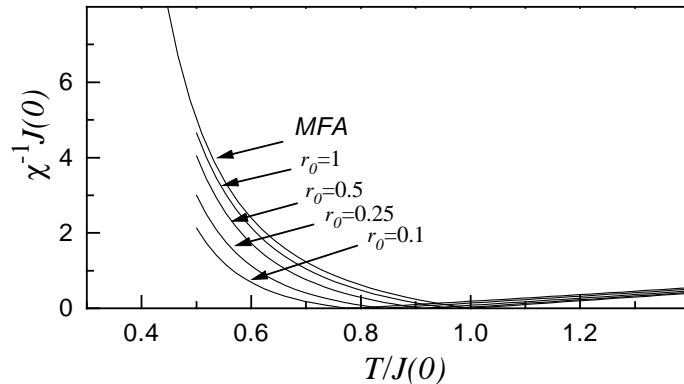


Рис. 5. Температурна залежність оберненої статичної сприйнятливості моделі Ізінґа на квадратній ґратці для взаємодії $J(R) = \exp(\frac{R-1}{r_0})$ при різних r_0 .

У випадку довільної взаємодії кореляційний параметр λ_j залежатиме від номера вузла. Зобразимо $\ln(A_j + B_j S_k)$ у вигляді $\tilde{A}_j + \tilde{B}_j S_k$, де \tilde{A}_j та \tilde{B}_j , поки що невідомі. З умови, що остання функція дорівнює $\ln(A_j + B_j)$, якщо $S_k = 1$, та $\ln(A_j - B_j)$, якщо $S_k = -1$, отримаємо

$$\begin{aligned}\tilde{A}_j &= \frac{1}{2} \ln(A_j^2 - B_j^2), \\ \tilde{B}_j &= \frac{1}{2} \ln \frac{A_j + B_j}{A_j - B_j}.\end{aligned}\quad (6.15)$$

Запишемо тепер характеристичну функцію $M(\zeta)$ через \tilde{A}_j , \tilde{B}_j :

$$\begin{aligned}M(\zeta) &= \left\langle \prod_{j(j \neq k)} e^{\ln(A_j + B_j S_k)} \right\rangle = \left\langle \prod_{j(j \neq k)} e^{\tilde{A}_j + \tilde{B}_j S_k} \right\rangle \\ &= e^{\sum_{j(j \neq k)} \tilde{A}_j} \left[\text{ch} \left(\sum_{j(j \neq k)} \tilde{B}_j \right) + \langle S_k \rangle \text{sh} \left(\sum_{j(j \neq k)} \tilde{B}_j \right) \right].\end{aligned}\quad (6.16)$$

Використавши явні вирази (6.15) для \tilde{A}_j та \tilde{B}_j отримаємо $M(\zeta)$ у вигляді наступного добутку:

$$\begin{aligned}M(\zeta) &= \frac{1}{2} \left[\prod_{j(j \neq k)} (A_j + B_j) + \prod_{j(j \neq k)} (A_j - B_j) \right. \\ &\quad \left. + m \left\{ \prod_{j(j \neq k)} (A_j + B_j) - \prod_{j(j \neq k)} (A_j - B_j) \right\} \right].\end{aligned}\quad (6.17)$$

Здійснивши фур'є-перетворення для даної функції ми і отримаємо функцію розподілу локальних полів. Оскільки λ_k відрізняються на різних вузлах, то для їх визначення необхідно записати сукупність рівнянь для кореляційних функцій $\langle S_i S_k \rangle$. В інтегральному представленні

$$\langle S_i S_k \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dh P_{\{S_i\}}(h) \text{th}(\beta h),\quad (6.18)$$

де $P_{\{S_i\}}(h) = \langle S_i \delta(h - h_k) \rangle$. А характеристична функція $M_{\{S_i\}}(\zeta)$ для неї буде мати вигляд:

$$M_{\{S_i\}}(\zeta) = \left\langle S_i \exp \left(-i\zeta \sum_{j(j \neq k)} J(R_{kj}) S_j \right) \right\rangle.\quad (6.19)$$

Використавши тотожність (3.3) отримаємо:

$$M_{\{S_i\}}(\zeta) = \left\langle [S_i \cos(\zeta J(R_{ki})) - i \sin(\zeta J(R_{ki}))] \times \prod_{j(j \neq k, i)} [\cos(\zeta J(R_{kj})) - i S_j \sin(\zeta J(R_{kj}))] \right\rangle. \quad (6.20)$$

Застосуємо наближення (4.9):

$$M_{\{S_i\}}(\zeta) = \left\langle [\check{A}_i + S_k \check{B}_i] \prod_{j(j \neq k, i)} [A_j + S_k B_j] \right\rangle, \quad (6.21)$$

$$\begin{aligned} \check{A}_i &= -i \sin(\zeta J(R_{ki})) + m(1 - \lambda_i) \cos(\zeta J(R_{ki})), \\ \check{B}_i &= \lambda_i \cos(\zeta J(R_{ki})). \end{aligned} \quad (6.22)$$

Як і раніше запишемо

$$\ln(\check{A}_i + S_k \check{B}_i) = \check{\check{A}}_i + S_k \check{\check{B}}_i, \quad (6.23)$$

де, як можна виявити, $\check{\check{A}}_j = \frac{1}{2} \ln(\check{A}_j^2 - \check{B}_j^2)$, $\check{\check{B}}_j = \frac{1}{2} \ln \frac{\check{A}_j + \check{B}_j}{\check{A}_j - \check{B}_j}$. За аналогією до формул (6.16), (6.17) отримаємо:

$$\begin{aligned} M(\zeta) &= \exp \left(\check{\check{A}}_i + \sum_{j(j \neq k, i)} \check{\check{A}}_j \right) \\ &\times \left[\text{ch} \left(\check{\check{B}}_i + \sum_{j(j \neq k, i)} \check{\check{B}}_j \right) + \langle S_k \rangle \text{sh} \left(\check{\check{B}}_i + \sum_{j(j \neq k, i)} \check{\check{B}}_j \right) \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[(\check{A}_i + \check{B}_i) \prod_{j(j \neq k, i)} (A_j + B_j) + (\check{A}_i - \check{B}_i) \prod_{j(j \neq k, i)} (A_j - B_j) \right. \\ &\left. + \langle S_k \rangle \left\{ (\check{A}_i + \check{B}_i) \prod_{j(j \neq k, i)} (A_j + B_j) - (\check{A}_i - \check{B}_i) \prod_{j(j \neq k, i)} (A_j - B_j) \right\} \right]. \end{aligned} \quad (6.24)$$

Рівняння для кореляційної функції можна зобразити у вигляді інтегралу від характеристичної функції $M_{\{S_i\}}(\zeta)$:

$$\langle S_i S_k \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta M_{\{S_i\}}(\zeta) \phi(\zeta), \quad (6.25)$$

де $\phi(\zeta)$ – фур'є-зображення $\text{th}(\beta h)$ (6.9). Врахувавши, що $\lambda_i = \langle S_i S_k \rangle / (1 - m^2)$, отримаємо наступну систему рівнянь для невідомих параметрів даного наближення (m, λ_i):

$$\begin{cases} m = \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta M(\zeta) \phi(\zeta), \\ \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta M_{\{S_i\}}(\zeta) \phi(\zeta) - m^2 \\ \lambda_i = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\zeta M_{\{S_i\}}(\zeta) \phi(\zeta) - m^2}{1 - m^2}. \end{cases} \quad (6.26)$$

В роботі [4] ця система рівнянь була зведена для моделі Ізінґа з взаємодією найближчих сусідів до двох алгебричних рівнянь та розв'язана аналітично. Оскільки ми не обмежуємось цією взаємодією, то результат можна знайти лише чисельно. Ми намагалися розв'язати рівняння для λ_j окремо, використовуючи ітераційний метод, та розглядаючи в них m як параметр. Як нульове наближення ми вибрали $\lambda_j^{(0)} = 0$ (що відповідає наближенню ефективного поля). Після трьох ітерацій отримали $\lambda^{(3)} = 0.332\dots$ для моделі Ізінґа на квадратній ґратці з взаємодією найближчих сусідів при $T_c = 0.72125 J(q = 0)$, що є задовільним результатом, оскільки аналітично отриманий в [4] кореляційний параметр $\lambda = \frac{1}{3}$.

Знайдемо статичну сприйнятливості системи:

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{\partial m}{\partial \Gamma} = \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta (-i\zeta) M(\zeta) \phi(\zeta) + \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \frac{\partial M(\zeta)}{\partial m} \phi(\zeta) \frac{\partial m}{\partial \Gamma} \\ &+ \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \frac{\partial M(\zeta)}{\partial \lambda_j} \phi(\zeta) \frac{\partial \lambda_j}{\partial \Gamma}. \end{aligned} \quad (6.27)$$

З останнього рівняння очевидно, що для обчислення статичної сприйнятливості необхідно знайти $\frac{\partial \lambda_j}{\partial \Gamma}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \lambda_i}{\partial \Gamma} &= \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta (-i\zeta) M_{\{S_i\}}(\zeta) \phi(\zeta) + \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \frac{\partial M_{\{S_i\}}(\zeta)}{\partial m} \phi(\zeta) \frac{\partial m}{\partial \Gamma} \\ &+ \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \frac{\partial M_{\{S_i\}}(\zeta)}{\partial \lambda_j} \phi(\zeta) \frac{\partial \lambda_j}{\partial \Gamma}. \end{aligned} \quad (6.28)$$

В результаті, обчислення статичної сприйнятливості зводиться до

розв'язку наступної системи лінійних рівнянь:

$$\begin{cases} (1 - C_{mm}) \frac{\partial m}{\partial \Gamma} + \sum_j C_{m\lambda_j} \frac{\partial \lambda_j}{\partial \Gamma} = D_m, \\ C_{\lambda_j m} \frac{\partial m}{\partial \Gamma} + \sum_j (\delta_{ij} - C_{\lambda_i, \lambda_j}) \frac{\partial \lambda_j}{\partial \Gamma} = D_{\lambda_i}; \end{cases} \quad (6.29)$$

$$C_{mm} = \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \frac{\partial M(\zeta)}{\partial m} \phi(\zeta), \quad C_{m\lambda_j} = \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \frac{\partial M(\zeta)}{\partial \lambda_j} \phi(\zeta),$$

$$C_{\lambda_i m} = \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \frac{\partial M_{\{s_i\}}(\zeta)}{\partial m} \phi(\zeta), \quad C_{\lambda_i, \lambda_j} = \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \frac{\partial M_{\{s_i\}}(\zeta)}{\partial \lambda_j} \phi(\zeta),$$

$$D_m = \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta (-i\zeta) M(\zeta) \phi(\zeta), \quad D_{\lambda_i} = \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta (-i\zeta) M_{\{s_i\}}(\zeta) \phi(\zeta).$$

На рис.2,3 результати обчислень функції розподілу локальних полів $P(h)$ в наближенні кореляційного ефективного поля порівнюються з результатами наближення ефективного поля. З рисунків видно, що наближене врахування парних кореляцій приводить до деяких незначних змін, які якісно не змінюють частотної залежності $P(h)$. Намагніченість для квадратної ґратки обчислена в наближенні кореляційного ефективного поля порівнюється з простішими наближеннями на рис.3. На рис.6 наведено залежність кореляційних параметрів λ_j від температури при різних j . Вона має злам в точці фазового переходу.

7. Висновки

В даній роботі розглянуто ряд наближень методу ефективного поля та поширено їх на випадок моделі Ізінґа з довільною взаємодією. Цей метод ґрунтується на наближеному розв'язку точного співвідношення для кореляційних функцій, яке слідує з інтегрального чи операторного представлення тотожності Калена. Результати для намагніченості, отримані в різних наближеннях порівнюються між собою. Виявлено, що наближення ефективного поля з кореляціями [8], приводить до зайвих розв'язків у околі T_c і, тому незастосовне в цій області.

Наближення кореляційного ефективного поля [4] узагальнено на випадок моделі Ізінґа з довільною взаємодією. Результати цих досліджень покращують отримані нами раніше результати в набли-

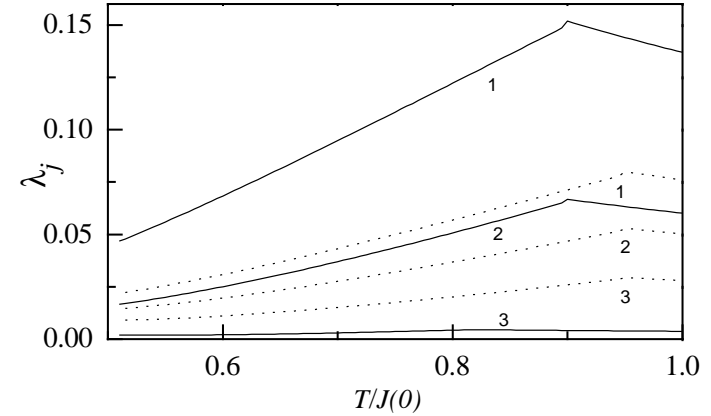


Рис. 6. Температурна залежність кореляційного параметра λ_j для різних координаційних сфер j : $r_0 = 0.5$ - суцільна лінія, $r_0 = 1$ - штрихована.

женні ефективного поля [15]. Виявлено, що результати вищого наближення для функції розподілу локальних полів якісно не змінюються в порівнянні з наближенням ефективного поля.

На жаль, інші підходи методу ефективного поля не вдається поширити на випадок довільних взаємодій.

Література

1. Callen H.B. A note on Green functions and the Ising model. // Phys. Lett. B, 1963, vol.4, № 3, p.161.
2. Honmura R., Kaneyoshi T. Contribution to the new type of effective-field theory of the Ising model. // J. Phys. C, 1979, vol.12, p.3979-3992.
3. Thomsen M., Thorpe M.F., Choy T.C. and Sherrington D. Local magnetic field distributions: Two-dimensional Ising models. // Phys. Rev. B, 1984, vol. 30, № 1, p.250-258.
4. Kaneyoshi T., Fittipaldi I.P., Honmura R. and Manabe T. New correlated -effective-field theory in the Ising model. // Phys. Rev. B, 1981, vol.24, p.481-484.
5. Taggart G.B. Correlated effective field approximation for the Ising model. // Physica A, 1982, vol.10, p.535-545.

6. Lines M.E. Many body theory of magnetism for ions with complicated level structure. // *Phys. Rev. B*, 1974, vol. 9, p.3927-3931.
7. Bethe H. A. // *Proc. Roy. Soc. (London) A*, 1935, vol. 150, p.552.
8. Kaneyoshi T. New effective field theory with correlations; Application to disordered magnets. // *Z. Phys. B*, 1985, vol. 60, p.35-47.
9. Zheng S.M. An improved correlated effective field theory for the $S = \frac{1}{2}$ pure Ising model. // *phys.stat.sol.(b)*, 1993, vol. 180, p.463-477.
10. Bobák A., Jašzur M. Correlated effective-field theory of the site-diluted Ising model. // *JMMM*, 1994, vol. 136, p.105-117.
11. Zheng S.M. Magnetic properties of disordered square Ising ferromagnets. // *phys.stat.sol.(b)*, 1994, vol. 185, № 1, p.K37-K42.
12. Balcerzak T., Cong B.T., Mielnicki J. and Wiatrowski G. Some magnetic properties of the diluted square Ising lattice with fluctuating exchange integral ($S=1/2$). // *JMMM*, 1990, vol. 87, p.229-234.
13. Vugmeister B.E., Huber D.L. and Rabitz H. Freezing temperature in dilute Ising spin glasses with long-range interaction. // *J.Stat.Phys.*, 1998, vol. 90, № 3-4, p.873-887.
14. Глинчук М.Д., Стефанович В.А. Влияние случайных полей дефектов на дальний порядок в неупорядоченных дипольных системах. // *Физика твердого тела*, 1995, т. 37, № 1, с.137-149.
15. Sorokov S., Levitskii R., Verkholyak T. Effective field method for Ising model with arbitrary ferromagnetic interaction. // *phys.stat.sol.(b)*, 1999, vol.211, 2, p.759-769.
16. Стасюк И.В. Уравнения для спиновых корреляторов в модели Изинга с дальнодействием. // *ФММ*, 1971, т.11, № 1, с.669-704.
17. Зубарев Д.Н. Двухвременные функции Грина в статистической физике. // *УФН*, 1960, т.71, № 1, с.71-116.
18. Kubo R. Generalized cumulant expansion method. // *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1962, vol. 17, № 7, p.1100-1120.
19. Nonmura R. Correlated-effective-field treatment of the anisotropic Ising ferromagnet: Thermodynamical properties. // *Phys.Rev. B*, 1984, vol. 30, p.348-358.
20. Кессель А.Р., Берим А.О. Магнитный резонанс Изинговских магнетиков, М.: Наука, 1982, 147с.
21. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике, М.: Мир, 1985, 486с.

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/>)

Сергій Іванович Сороков
Роман Романович Левицький
Тарас Михайлович Верхоляк

Дослідження моделі Ізінґа методом ефективного поля

Роботу отримано 27 квітня 1999 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії модельних спінових систем

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені