

3-144

4 - 7370

ЗАГРЕБНОВ

Валентин Анатольевич

МОДЕЛЬ ИЗИНГА ДЛЯ ЖЕСТКОЙ  
И СЖИМАЕМОЙ РЕШЕТОК

Специальность 01.04.02 - теоретическая  
и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

(Диссертация написана на русском языке)

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики  
Объединенного института ядерных исследований

Научный руководитель:

старший научный сотрудник  
кандидат физико-математических наук В.К. ФЕДЯНИН.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук С.В. ПЕЛЕТМИНСКИЙ,  
доктор физико-математических наук Б.Н. ПРОВоторов.

Ведущее научно-исследовательское учреждение:

Математический институт им. В.А. Стеклова АН СССР.

Автореферат разослан " 16 " августа 1973 года

Защита диссертации состоится " " \_\_\_\_\_ 1973 года на  
заседании Ученого совета Лаборатории теоретической физики

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета

Р.А. АСАНОВ

4 - 7370

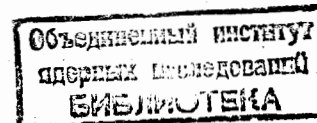
ЗАГРЕБНОВ  
Валентин Анатольевич

МОДЕЛЬ ИЗИНГА ДЛЯ ЖЕСТКОЙ  
И СЖИМАЕМОЙ РЕШЕТОК

Специальность 01.04.02 - теоретическая  
и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

(Диссертация написана на русском языке)



В теории фазовых переходов и критических явлений одно из главных мест занимает исследование различных модельных систем и, в частности, модели Изинга. Эта модель предназначена для описания спиновых систем с сильно анизотропным взаимодействием, бинарных сплавов и т.д., ее гамильтониан для спина  $S = \frac{1}{2}$  имеет вид:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{r, r'} V(r-r') \sigma_r \sigma_{r'} - \mu \mathcal{H} \sum_r \sigma_r ; \quad \sigma_r = \pm 1, \quad (I)$$

где  $V(r-r')$  - обменное взаимодействие,  $\mathcal{H}$  - внешнее магнитное поле,  $r$  - координаты узлов решетки, в которых сосредоточены спины, а  $\mu$  - магнитный момент узла.

Модель Изинга является одним из наиболее привлекательных и нетривиальных объектов статистической механики, который дает нам представление о фазовых переходах, в первую очередь, благодаря наличию в двухмерном случае со взаимодействием ближайших соседей и его обобщениях точного решения /1/. Особый интерес к модели Изинга связан с надеждой, что на основе исследований одного из простейших гамильтонианов (I) удастся построить общую теорию фазовых переходов. Несмотря на то, что для размерностей модели больше двух решение (I) не найдено даже для взаимодействия ближайших соседей, численный анализ высоко- и низкотемпературных разложений, которые для случая (I) являются наиболее простыми в сравнении с другими моделями, решения плоских моделей, а также различные приближенные теоретические методы исследования (I) во многом определяют современное состояние всей теории фазовых переходов и критических явлений.

Найти точное решение задачи о поведении системы (I) во всей области изменения температуры  $\theta$  и магнитного поля  $h = \mu \mathcal{H}$  в общем случае не удастся. Вместе с тем наибольший интерес представляет изучение окрестности точки фазового перехода:

$\theta = \theta_c$ ,  $h = 0$ , где сосредоточены все особенности термодинамического поведения. Поэтому теоретические исследования модели Изинга направлены, главным образом, на изучение асимптотического поведения наблюдаемых и связанных с ними величин в критической области:  $|\tau| \equiv \left| \frac{\theta - \theta_c}{\theta_c} \right| \ll 1$ ,  $|h| \ll 1$ . Эти асимптотики характеризуются критическими индексами (показателями)  $\alpha$ ,  $\alpha'$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\gamma'$  и др. /2,3/. Например, для восприимчивости системы  $\chi = \frac{\partial}{\partial h} \langle G \rangle$ , где  $\langle G \rangle$  - удельная намагниченность, и корреляционного радиуса  $\tau_c$  асимптотики имеют вид:

$$\chi \sim \begin{cases} \tau^{-\alpha} & \tau > 0, h = 0 \\ |\tau|^{-\alpha'} & \tau < 0, h = 0 \end{cases}; \tau_c \sim \begin{cases} \tau^{-\nu} & \tau > 0, h = 0 \\ |\tau|^{-\nu'} & \tau < 0, h = 0 \end{cases}. \quad (2)$$

Задачей теории является нахождение соотношений между критическими индексами и их численных значений. Существенный прогресс в решении первой ее части связан с феноменологической теорией подобия (скейлинг) Вайдома-Каданова-Покровского-Паташинского /3/, а второй - с анализом высоко- и низкотемпературных разложений /2/. Однако главной проблемой по-прежнему остается микроскопическое описание явлений в окрестности критической точки.

Для описания критических явлений и, в частности, фазового перехода в модели Изинга кроме традиционных методов теории

многих тел в настоящее время существенно используются идеи квантовой теории поля: ренормализационная группа, аналитическая  $S$ -матрица, метод инфракрасной асимптотики и т.д. /4-8/. Методы теории поля привели не только к определенному успеху в обосновании феноменологической теории подобия /4/, но и позволили разработать методики расчетов непосредственно критических индексов /5-8/.

Необходимо отметить, что при более реалистической постановке задачи о магнитных фазовых переходах следует учитывать наличие примесей, колебаний узлов решетки, в которых локализованы спины и так далее, т.е. скрытые степени свободы /9-13/. Их влияние на характер фазового превращения весьма существенно. Дополнительные степени свободы могут приводить не только к перенормировке критических индексов идеальной системы /9,13/, для которой эти степени "заморожены", но и к изменению типа перехода: например, превращение фазового перехода второго рода в переход первого рода со скачкообразным изменением спонтанной намагниченности и других характеристик системы /10-12,16,18/.

Настоящая диссертация посвящена применению некоторых методов теории поля для исследования модели Изинга на жесткой решетке и изучению влияния магнитоупругого взаимодействия на фазовый переход в спиновой подсистеме для модели Изинга на сжимаемой решетке.

Диссертация состоит из четырех глав и трех приложений. В первой главе, которая является введением, даны краткий обзор литературы по рассматриваемому в работе кругу вопросов и постановка исследуемых в диссертации проблем.

Вторая глава посвящена применению методов теории поля в модели Изинга на жесткой решетке, т.е. случай, когда дополнительные степени свободы (колебания решетки) "заморожены".

В §1 используется  $S$ -матричная формулировка модели Изинга (Поляков /4/), в которой статистическая сумма для гамильтониана (1) играет роль  $S$ -матрицы некоторой теории поля. Для этой  $S$ -матрицы, с помощью которой можно найти все интересные нас величины: плотность свободной энергии, корреляционные функции и т.д., получено уравнение, аналогичное уравнению Намбу /14/. Получено также уравнение типа Янга-Фельдмана /6/ для эффективного внутреннего поля  $\tilde{\varphi}_z$  ( $\varphi_z$  - внешнее поле):

$$\tilde{\varphi}_z = \varphi_z + \sum_{z'} D_0(z-z') \left[ \frac{\partial S}{\partial \varphi_{z'}} \right] [S]^{-1}; \quad (3)$$

$$D_0(z-z') = \beta V(z-z'); \quad \varphi_z = \beta h_z; \quad \beta = \theta^{-1},$$

с помощью которого определяется намагниченность  $\langle \sigma_z \rangle$ . Показано, что возникновение спонтанной намагниченности в полевой формулировке соответствует появлению связанных состояний, т.е. наличие нетривиальных трансляционноинвариантных решений уравнения (3) при выключенном внешнем поле  $\varphi_z = 0$  и  $\theta < \theta_c$ . Установлено, что для взаимодействия  $V(z-z')$  с "бесконечным радиусом"  $R_N \sim (\omega_N)^{1/d}$ :  $V(z-z') = \frac{J(z-z')}{\omega_N}$ , где величина  $J(z-z')$  конечна и отлична от нуля в области  $|z-z'| \leq (\omega_N)^{1/d}$ ,  $d$  - размерность модели,  $N$  - число узлов в решетке и  $\omega_N \Big|_{N \rightarrow \infty} = \infty$ , уравнение для  $S$ -матрицы решается асимптотически (при  $N \rightarrow \infty$ ) точно. При этом плотность свободной энергии и другие величины в пределе  $\omega_N \rightarrow \infty$  совпадают с известным решением Вейсса,

а первая поправка по  $(\omega_N)^{-1}$  с приближением Орнштейна-Цернике /6/. Построена соответствующая диаграммная техника и для  $\omega_N \gg 1$  выявлен главный класс диаграмм, которыми оказались полюсные диаграммы (деревья). Установлена связь с квазиклассическим приближением в теории поля /14/ и выявлено их общее физическое содержание /6/.

В §2 с помощью техники, развитой в §1, исследована двухточечная корреляционная функция  $R(z-z') = \langle \sigma_z \sigma_{z'} \rangle = \langle \sigma_z \rangle \langle \sigma_{z'} \rangle$ , и путем суммирования некоторого класса диаграмм (кольцевых) построено приближение, обобщающее RPA (приближение хаотических фаз), для случая внешнего поля  $\varphi$  и возникновения спонтанной намагниченности. Для последней с помощью диаграммной техники получено уравнение, сходное с уравнением (3). Показано, что точка Кюри в новом приближении ниже, чем в RPA, и совпадает с температурой возникновения спонтанной намагниченности. Факт совпадения этих температур, определяемых независимо: по особенностям фурье-образа двухточечной корреляционной функции и по точкам ветвления решений уравнения для намагниченности, указывает на самосогласованность нового приближения. В критической области получена асимптотика решения уравнения Дайсона для пропагатора, определяющего  $R(z-z', \theta)$ , из которого определены критические индексы ( $d=3$ ):  $\alpha = -1(0)$ ,  $\delta = 2$ ,  $\beta = 1/2$ ,  $\delta = 3$ , проведено их сравнение с индексами RPA и численными расчетами для  $d=3$ .

В §3 с помощью функционального представления для двухточечной корреляционной функции  $R_d$  рассмотрено ее поведение в парамагнитной критической области, когда расстояние между

спинами гораздо больше радиуса взаимодействия. Для исследования корреляционной функции в макроскопической и микроскопической критических подобластях используется метод инфракрасной асимптотики /7,8/. Показано, что в первом случае функция  $\tilde{R}_d$  близка к классической асимптотике RPA, перенормированной температурным фактором  $\varkappa^{\eta'_d}$ , где  $\varkappa \sim \tau^\nu$ :

$$\tilde{R}_d(p, \varkappa) \Big|_{\substack{\lambda p \ll 1 \\ \lambda p / \varkappa \ll 1}} = \frac{I_d \varkappa^{\eta'_d}}{(\lambda^2 p^2 + \varkappa^2)} ; \eta'_d \Big|_{2 < d < 4} > 0. \quad (4)$$

Это подтверждается экспериментами, численными расчетами и точным решением плоской модели /15/. Во второй подобласти имеется отклонение от классического поведения, характеризуемое критическим индексом  $\eta_d$ . Найдено значение  $\eta_d$ , как функции непрерывно изменяющейся размерности модели  $d > 2$ , и показано, что оно совпадает с  $\eta'_d$  в (4). Последнее подтверждает скейлинг Фишера-Барфорда в его слабой форме /2,15/. Установлено также, что  $\eta_{d=4} = 0$  и  $\eta_{d>4} = 0$ , но у Фурье-образа корреляционной функции при  $d=4$  имеется логарифмическое ветвление: \*)

$$\tilde{R}_{d=4}(p, \varkappa) \Big|_{\substack{\lambda p \ll 1 \\ \lambda p / \varkappa \gg 1}} = \frac{J_{d=4}}{(\lambda^2 p^2 + \varkappa^2) |\ln(\lambda^2 p^2 + \varkappa^2)|}. \quad (5)$$

При  $2 < d < 4$ :  $\eta_d > 0$  и ветвление в микроскопической области имеет вид:

$$\tilde{R}_d(p, \varkappa) \Big|_{\substack{\lambda p \ll 1 \\ \lambda p / \varkappa \gg 1}} \approx \frac{J_d}{(\lambda^2 p^2 + \varkappa^2)^{1-\eta_d/2}}, \quad (6)$$

\*) В макроскопической области получено:  $\eta'_{d>4} = 0$ , но

$$\tilde{R}_{d=4}(p, \varkappa) \Big|_{\lambda p / \varkappa \ll 1} \approx \frac{I_{d=4} |\ln \varkappa|^4}{(\lambda^2 p^2 + \varkappa^2)}.$$

где

$$\eta_d = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(\frac{d-1}{2})}{\Gamma(d/2) Y_d} ; Y_d = \int_0^\infty dx x^{d-3} \int_0^\pi \frac{(\sin \theta)^{d-2} d\theta}{1+x^2+2x \cos \theta} \quad (7)$$

и  $\eta_{d=3} \approx 0.40$ . Проведено сравнение с численными расчетами и результатами, с результатами других теоретических методов. Поскольку  $\eta'_d = \eta_d \Big|_{d>4} = 0$ , то модель Изинга с размерностью  $d > 4$  обнаруживает классическое поведение:

$$\tilde{R}_{d>4}(p, \varkappa) \Big|_{\substack{\lambda p \ll 1 \\ \varkappa \ll 1}} \sim \frac{1}{(\lambda^2 p^2 + \varkappa^2)} \quad (8)$$

во всей критической области. Отмечено, что теплоемкость  $C_d(\theta)$  в парамагнитной критической области для  $d > 4$  отлична от нуля и конечна, в отличие от решения Вейсса. Причем, при  $d \rightarrow \infty$   $C_d(\theta) \rightarrow 0$  всюду при температуре, выше критической  $\theta_c$ , т.е., как и следовало ожидать, получаем вейссовский предел /2/.

В третьей главе рассмотрена модель Изинга со взаимодействием ближайших соседей и с учетом упругих степеней свободы решетки, в узлах которой локализованы спины /10,11/.

В §1 с помощью вариационного принципа Н.Н.Боголюбова сформулирован модельный гамильтониан, в рамках которого изучается магнитоупругое взаимодействие спиновой подсистемы с решеткой. Рассматривается общий случай ангармонической решетки в псевдогармоническом приближении.

В §2 рассматриваются условия равновесия, которые для случая линейного спин-фононного взаимодействия, т.е. линейной зависимости обменного интеграла от смещения узлов решетки, приводят к перенормировке обменного взаимодействия  $J(\tau)$ . Перенормировка определяется двухточечной корреляционной функцией спинов ближайших соседей  $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \Psi$  и внешним давлением  $P$ :

$$J_{\text{рен}} \equiv J(\ell) = J(\tau_0) - \frac{2v_0 d p}{w \tau_0 K} \eta_0 + \eta_0^2 / K \Psi \equiv J(\tau_0, p) [1 + \lambda \Psi]; \quad (9)$$

$$J(\tau_0, p) \equiv J(\tau_0) - \frac{2v_0 d p}{w \tau_0 K} \eta_0,$$

где  $\tau_0$  - равновесное значение параметра решетки при  $p=0$  и выключенном магнитоупругом взаимодействии:  $\eta_0 = \left. \frac{d}{d\tau} J(\tau) \right|_{\tau_0} = 0$ ,  $v_0$  - объем элементарной ячейки,  $w$  - число ближайших соседей,  $K$  - упругая постоянная решетки,  $d$  - размерность модели.

В §3 рассмотрена эволюция характера магнитного фазового превращения на гармонической решетке с линейным магнитоупругим взаимодействием:  $\left. \frac{d}{d\tau} J(\tau) \right|_{\tau_0} = \eta_0$ ,  $\left. \frac{d^n}{d\tau^n} J(\tau) \right|_{\tau_0} = 0, n \geq 2$ . Показано, что имеют место два существенно различных случая: либо теплоемкость модели Изинга на жесткой решетке ограничена, либо имеется бесконечный пик в критической точке. В первом случае существует область значений константы магнитоупругого взаимодействия:  $0 < \lambda < \lambda_0$ , когда характер фазового перехода не изменяется. При  $\lambda_0 < \lambda$  имеет место срыв в фазовый переход первого рода с потерей термодинамической устойчивости решетки. Во втором случае термодинамическая неустойчивость имеет место всегда в критической области, соответствующей жесткой решетке, что приводит к фазовому превращению первого рода, близкому ко второму. Вычислены значения  $\lambda_0$  в различных приближениях. Их сравнение с экспериментальными данными о  $MnAs$  и других веществах, испытывающих переход, ферро-парамагнетизм указывает на удовлетворительное согласие первого случая с реальной ситуацией /16, 18/.

В §4 показано, что учет ангармонизма решетки, который ведет к существенному усложнению задачи, не изменяет качественно выводов §3. В частности, ангармонизм не устраняет неустойчивости при наличии пика теплоемкости на жесткой решетке. Таким образом,

случай конечных теплоемкостей более точно соответствует гипотезе изоморфизма фазовых переходов /9/ (при наличии дополнительных степеней свободы и при их "замораживании"), которая также ведет к сглаживанию пика теплоемкости /12, 17/. Это означает, что развитый в гл. III микроскопический подход к магнитоупругому взаимодействию в модели Изинга приводит к полуфеноменологической теории, которая хорошо согласуется с экспериментальными данными /16, 18/.

В четвертой, заключительной главе сформулированы результаты, полученные в работе, сделаны некоторые замечания и выводы.

Некоторые громоздкие математические выкладки и доказательства вспомогательных утверждений вынесены в Приложения.

Основные результаты диссертации опубликованы в /6-8, 10, 11/, докладывались на Всесоюзной конференции по магнетизму (г. Красноярск, 1971) и IV Рабочем совещании по статистической физике (г. Львов, 1972).

#### Литература

1. L. Onsager. Phys. Rev. 65, 117 (1944),  
R. Baxter. Ann. Phys. (N.Y.) 70, 198 (1972).
2. M. Fisher. Rep. Progr. Phys. 80, 731 (1967),  
М. Фишер. Природа критического состояния, "Мир", 1968;  
Г. Стенли. Фазовые переходы и критические явления, "Мир", 1973.
3. B. Widom. Journ. Chem. Phys. 43, 3892, 3898 (1965),  
L. Kadanoff et al. Rev. Mod. Phys. 39, 395 (1967),  
В. Л. Покровский. УФН 94, 127 (1968),  
А. З. Паташинский. Работы по физике твердого тела, т. I, Новосибирск, 1967.

4. А.М.Поляков. ЖЭТФ 55, 1026 (1968),  
А.А.Мигдал. ЖЭТФ 55, 1964 (1968),  
С. Di Castro, G. Jona-Lasinio. Phys. Lett. 29A, 322 (1969).  
А.М.Поляков. ЖЭТФ 57, 271 (1969).
5. К. Wilson. Phys. Rev. B4, 3174, 3184 (1971),  
К. Wilson, M. Fisher. Phys. Rev. Lett. 28, 240 (1972),  
К. Wilson. Phys. Rev. Lett. 28, 548 (1972),  
А.А.Мигдал. ЖЭТФ 59, 1015 (1970),  
С. Di Castro. Lett. Nuovo Cimento 5, 69 (1972).
6. И.В.Волович, Е.А.Дынин, В.А.Загребнов, В.П.Фролов. ТМФ 14,  
272 (1973). В.А.Загребнов, И.Г.Бранков. ОИЯИ Р4-7097, Дубна 1973.
7. В.А.Загребнов. ОИЯИ Р4-7001, Дубна, 1973.  
В.А.Загребнов. ОИЯИ Р4-7143, Дубна 1973.
8. И.В.Волович, Е.А.Дынин, В.А.Загребнов, В.П.Фролов, ТМФ 15,  
417 (1973).
9. M. Fisher. Phys. Rev. 176, 257 (1967).
10. В.А.Загребнов, В.К.Федянин. ТМФ 10, 127 (1972).
11. В.А.Загребнов, В.К.Федянин. Изв. АН СССР (сер. физ) 36,  
1390 (1972).
12. L. Gunter, D. Bergman, Y. Imry. Phys. Rev. Lett. 27, 558 (1971),  
D. Jasnow, H. Wagner. Z. fur Physik 249, 101 (1971),  
В.Л.Покровский. ФТТ 10, 3594 (1968),  
А.И.Ларкин, С.А.Пикин. ЖЭТФ 56, 1664 (1969).
13. G. Baker, J. Essam. Phys. Rev. Lett. 24, 447 (1970).
14. Y. Nambu. Phys. Lett. 26B, 626 (1968),  
D. Boulware, L. Brown. Phys. Rev. 172, 1628 (1968),  
V. Ya. Fainberg, R. E. Kallosh. Preprint No. 170, P. Lebedev,  
Physical Inst. 1970.

15. С. Di. Castro. Rivista del Nuovo Cimento 1, 139 (1971),  
M. Ferer, M. Moore, M. Wortis. Phys. Rev. Lett., 22, 1382 (1969),  
G. Stell. Phys. Rev. Lett., 24, 1343 (1970).
16. Н.П.Гражданкина. УФН 96, 291 (1968).
17. H. Wagner. Phys. Rev. Lett. 25, 31 (1970).
18. H. Horner. Z. fur. Physik 251, 202 (1972).

Рукопись поступила в издательский отдел  
27 июля 1973 года.