ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

19/VI-78

P17 - 11369

A-424

В.Л.Аксенов, Г.Конвент, Ю.Шрайбер

2592/2-78

МЕТОД ДВУХВРЕМЕННЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА В МОДЕЛИ ИЗИНГА С ПОПЕРЕЧНЫМ ПОЛЕМ

1978

P17 - 11369

В.Л.Аксенов, Г.Конвент,[1] Ю.Шрайбер[2]

МЕТОД ДВУХВРЕМЕННЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА В МОДЕЛИ ИЗИНГА С ПОПЕРЕЧНЫМ ПОЛЕМ

Направлено в ТМФ

Объединенный институт ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

1 Вроцлавский политехнический институт, ПНР.
2 Технический университет, Дрезден, ГДР.

Аксенов В.Л., Конвент Г., Шрайбер Ю. P17 - 11369

Метод двухвременных функций Грина в модели Изинга с поперечным полем

На основе метода двухвременных функций Грина развит самосогласованный подход для вычисления спектра коллективных возбуждений и свободной энергии в модели Изинга с поперечным полем в приближении хаотических фаз. Вычислены также все парные корреляционные функции с учетом особенности их спектральной интенсивности при нулевой частоте. Точность приближения контролируется с помощью кинематических правил сумм. Показано, что использование последних для определения параметра порядка приводит к нефизическим результатам.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Aksionov V.L., Konvent H., Schreiber J. P17 - 11369

Method of Double-Time Green's Functions for the Ising Model with Transverse Field

On the basis of the method of double-time Green's functions a self-consistent RPA is developed to obtain the spectra of collective excitations and the free energy for the Ising model with transverse field. Taking into account the zero-frequency anomaly of the spectral intensity we are able to calculate all the correlation functions uniquely. The level of accuracy of the used RPA is estimated by the kinematic sum rules. It is also shown that the application of the last one to determine the order parameter yields unphysical results.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1978

© *1978 Объединенный институт ядерных исследований Дубна*

1. ВВЕДЕНИЕ

Метод двухвременных функций Грина, введенный в квантовую теорию магнетизма Н.Н.Боголюбовым и С.В.Тябликовым /1/, получил широкое развитие /2-4/ и в настоящее время является одним из эффективных в теории спиновых систем. Этот метод позволяет в рамках единого формализма рассматривать как динамические, так и термодинамические свойства системы. При практическом его применении приходится пользоваться некоторой процедурой последовательных приближений - расцеплением цепочки уравнений для функций Грина /ФГ/. Трудностью метода является отсутствие общего критерия точности сделанного приближения. Для этой цели можно было бы использовать точные соотношения типа кинематических правил сумм /4,5/. Последние же обычно используются для определения параметра порядка в системе. Такие решения, в общем, не удовлетворяют термодинамическому равновесию /минимуму свободной энергии в данном приближении/, поскольку правила сумм, как тождества, не содержат информации о термодинамике. К тому же при таком подходе трудно оценить точность принятых приближений.

В настоящей работе мы предлагаем более последовательную процедуру расчета: с помощью ФГ определяются спектр коллективных возбуждений, а также свободная энергия и корреляционные функции. Уравнение для параметра порядка находится из условия минимума термодинамического потенциала, а правила сумм используются для оценки точности приближения.

Отметим еще одну трудность в методе ФГ, на которую иногда не обращают должного внимания. Она связана с тем, что обычная техника спектральных представлений /2,3/ не является в общем случае достаточной для полного определения корреляционных функций /6/. Это обусловлено особенностью при $\omega = 0$ в спектральной интенсивности $J(\omega)$, которая в общем случае имеет вид $J(\omega) = C\delta(\omega) + J^{(-)}(\omega)$, где $J^{(-)}(\omega)$ определяется коммутаторной функцией Грина /КФГ/ и $J^{(-)}(0)=0$. Причиной возникновения такой особенности является наличие интегралов движения /или квазиинтегралов, которые могут появиться в результате сделанного приближения/, что приводит к неэргодичности физических величин /7/ или, другими словами, к нарушению принципа ослабления корреляций при бесконечно больших временах /7,8/. Формально наличие особенности обусловлено появлением полюса при $\omega = 0$ в антикоммутаторной функции Грина /АФГ/, а величина C определяется вычетом ее в этой точке /6/. Однако АФГ спиновых операторов обычно не удается вычислить полностью. Проблема константы C возникает и при использовании причинных ФГ. Знание свободной энергии позволяет разрешить и эту трудность, так как константы C могут быть найдены в виде разности изотермической и изолированной восприимчивостей /7,8/, которые вычисляются, соответственно, по свободной энергии и ФГ.

Отмеченные трудности особенно отчетливо проявляются в модели Изинга с поперечным полем:

$$H = -\Gamma \sum_n S_n^x - \tfrac{1}{2} \sum_{nm} J_{nm} S_n^z S_m^z . \qquad /1/$$

Интерес к этой модели обусловлен тем, что она содержит в себе весьма разнообразные физические свойства. В отличие от простой модели Изинга, поперечное поле Γ в /1/ может приводить к появлению коллективных возбуждений. При этом $\langle S_n^x \rangle \neq 0$ при всех температурах; упорядочение же спинов по оси z, $\langle S^z \rangle \neq 0$, ниже некоторой температуры /фазовый переход за счет обменного взаимодействия J_{mn}/ возможно лишь при $\Gamma < \Gamma_c$. Критическое значение $\Gamma_c \approx \tfrac{1}{2} J_0 = \tfrac{1}{2} \sum J_{mn}$. Кроме методического интереса модель /1/ имеет также и практическое значение в связи с ее широким применением в теории твердого тела /9/.

Модель /1/ исследовалась различными теоретическими методами. Большое количество работ, например /5,10-12/, основано на методе двухвременных ФГ и приближении хаотических фаз /ПХФ/. В рамках данного метода свободная энергия не вычислялась, а уравнение для параметра порядка определялось из спиновых правил сумм. При этом до сих пор нет ясности в определении как этого уравнения /в различных работах получены различные уравнения/, так и точности ПХФ.

В данной работе развивается процедура самосогласованного описания динамических и термодинамических характеристик модели /1/ в ПХФ. Вычислены также все корреляционные функции с учетом особенности спектральной интенсивности. Для оценки точности ПХФ выполнены численные расчеты отклонения полученных корреляционных функций от точных соотношений для них. Проведен анализ уравнения для параметра порядка. Основные результаты сформулированы в Заключении.

2. КОММУТАТОРНЫЕ И АНТИКОММУТАТОРНЫЕ ФУНКЦИИ ГРИНА

Введем запаздывающие двухвременные ФГ /1,2/ для операторов флуктуаций спиновых компонент $\delta S_n^\alpha = S_n^\alpha - \langle S_n^\alpha \rangle$.

$$G_{nm}^{(\pm)\alpha\beta}(t-t') = -i\theta(t-t') \langle [\delta S_n^\alpha(t), \delta S_m^\beta(t')]_\pm \rangle = \langle\langle \delta S_n^\alpha(t); \delta S_m^\beta(t') \rangle\rangle^{(\pm)}, \qquad /2/$$

где $(-)$ - обозначение для КФГ, $(+)$ - для АФГ, $\alpha = x, y, z$.

Уравнение движения для фурье-образа ФГ /2/ с гамильтонианом /1/, по которому производится усреднение в /2/, имеет вид

$$\omega G_{nm}^{(\pm)\alpha\beta}(\omega) = i \sum_\gamma \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \langle S_n^\gamma \rangle \delta_{nm} + (1 \pm 1)\phi_{mn}^{\alpha\beta} +$$

$$+ i\sum_{\gamma} \epsilon_{x\alpha\gamma}\, \Gamma \langle\langle S_n^{\gamma};\delta S_m^{\beta}\rangle\rangle_{\omega}^{\pm} + i\sum_{\gamma} \epsilon_{z\alpha\gamma} \sum_{\ell} J_{n\ell} \langle\langle S_{\ell}^{z} S_n^{\gamma};\delta S_m^{\beta}\rangle\rangle_{\omega}^{\pm}, \qquad /3/$$

где $\phi_{nm}^{\alpha\beta} = \langle\delta S_n^{\alpha}\delta S_m^{\beta}\rangle = \langle S_n^{\alpha} S_m^{\beta}\rangle - \langle S_n^{\alpha}\rangle\langle S_m^{\beta}\rangle$, $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ - единичный антисимметричный тензор третьего ранга. При получении /3/ использованы коммутационные соотношения спиновых операторов:

$$[S_n^{\alpha} S_m^{\beta}] = i\sum_{\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_n^{\gamma}\delta_{nm}, \qquad /4/$$

которые в случае спина $S = ½$ могут быть представлены также в виде

$$S_n^{\alpha} S_n^{\beta} = ½ \sum_{\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma}\, S_n^{\gamma} + \frac{1}{4}\delta_{\alpha\beta}. \qquad /5/$$

Рассмотрим обычное ПХФ, тогда ФГ в последнем члене в /3/ расцепится следующим образом:

$$\langle\langle S_n^{\alpha}(t) S_m^{\beta}(t);\delta S_{\ell}^{\gamma}(t')\rangle\rangle \to$$

$$\to \langle S_n^{\alpha}\rangle\langle\langle\delta S_m^{\beta}(t);\delta S_{\ell}^{\gamma}(t')\rangle\rangle + \langle S_m^{\beta}\rangle\langle\langle\delta S_n^{\alpha}(t)\delta S_{\ell}^{\gamma}(t')\rangle\rangle \qquad /6/$$

Система уравнений /3/ в этом случае принимает замкнутый вид:

$$\sum_{\ell\gamma} \{[\omega\delta_{\alpha\gamma} - i(\epsilon_{x\alpha\gamma}\,\Gamma + \epsilon_{z\alpha\gamma} J_0 \langle S_n^{z}\rangle)]\delta_{n\ell} -$$
$$- i\delta_{z\gamma}\epsilon_{z\alpha\mu} \langle S_n^{\mu}\rangle J_{n\ell}\}\, G_{\ell m}^{(\pm)\gamma\beta}(\omega) =$$
$$= i\sum_{\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \langle S_n^{\gamma}\rangle\delta_{nm} + (1 \pm 1)\phi_{mn}^{\beta\alpha}. \qquad /7/$$

В дополнение к уравнениям для ФГ рассмотрим условия равновесия в системе с гамильтонианом /1/. Обычно [5,10,11] ограничиваются уравнением $id/dt\langle S_n^{\alpha}(t)\rangle = \langle[S_n^{\alpha}, H]\rangle = 0$, которое приводит к точным соотношениям

$$\langle S_n^{y}\rangle = 0, \qquad /8а/$$

$$\sum_{\ell} J_{n\ell} \langle S_n^{y} S_{\ell}^{z}\rangle = 0, \qquad /8б/$$

$$\Gamma\langle S_n^{z}\rangle - \sum_{\ell} J_{n\ell}\langle S_n^{x} S_{\ell}^{z}\rangle = 0. \qquad /8в/$$

В дальнейшем мы воспользуемся еще одним уравнением: $id/dt\langle S_n^{\alpha}(t) S_m^{\beta}(t)\rangle = 0$, которое при $\alpha = x$, $\beta = z$ в ПХФ дает полезное соотношение

$$\Gamma\langle S_n^{z}\rangle = h_z\langle S_n^{x}\rangle, \quad h_z = \sum_{m} J_{nm}\langle S_m^{z}\rangle. \qquad /9/$$

Заметим, что /9/ получено без дополнительного расцепления типа приближения молекулярного поля /ПМП/ в /8в/.

При отсутствии внешнего поля, в силу трансляционной симметрии $\langle S_{\ell}^{\alpha}\rangle$ не зависит от узла решетки. Учитывая это, а также /8а/, /9/ и переходя к пространственному фурье-преобразованию, систему уравнений представим в виде матричного уравнения для АФГ:

$$\hat{G}_q^{(+)}(\omega) = \hat{G}_q^{(-)}(\omega) + 2\hat{L}_q(\omega)\tilde{\hat{\phi}}_{-q}, \qquad /10/$$

где $\tilde{\hat{\phi}}$ - транспонированная относительно $\hat{\phi}$ матрица; матрица $\hat{L}_q(\omega)$ имеет вид

$$\hat{L}_q(\omega) = \frac{1}{\omega(\omega^2 - \epsilon_q^2)} \begin{pmatrix} \omega^2 - \Gamma(\Gamma - \langle S^x\rangle J_q) & i\omega h_z & -h_z(\Gamma - \langle S^x\rangle J_q) \\ -ih_z\omega & \omega^2 & i\omega(\Gamma - \langle S^x\rangle J_q) \\ -\Gamma h_z & -i\omega\Gamma & \omega^2 - h_z^2 \end{pmatrix}, \qquad /11/$$

$G_q^{(-)}(\omega)$ - КФГ, которая определяется как

$$\hat{G}_q^{(-)}(\omega) = \frac{1}{\omega^2 - \epsilon_q^2} \begin{pmatrix} h_z\langle S^z\rangle & i\omega\langle S^z\rangle & -h_z\langle S^z\rangle \\ -i\omega\langle S^z\rangle & \dfrac{\epsilon_q^2\langle S^x\rangle}{\Gamma} & i\omega\langle S^x\rangle \\ -h_z\langle S^z\rangle & -i\omega\langle S^x\rangle & \Gamma\langle S^x\rangle \end{pmatrix}, \qquad /12/$$

Функция

$$\epsilon_q^2 = h_z^2 + \Gamma(\Gamma - \langle S^x \rangle J_q) \, , \qquad /13/$$

где $J_q = \sum_{\ell - \ell'} J_{\ell\ell'} e^{iq(\ell-\ell')}$,определяет энергию коллективных возбуждений и, как видно, при некоторой температуре ϵ_q может обратиться в ноль, т.е. данная мода может быть мягкой.

Интересно отметить, что невыполнение условия /9/ приводит к нарушению свойства симметрии КФГ $G_q^{(-)\alpha\beta}(\omega) = G_{-q}^{(-)\beta\alpha}(-\omega)$ и появлению в ней нефизического полюса при $\omega = 0$. Для явного вычисления АФГ, как видно из уравнения /10/, необходимо знать корреляционные функции.

3. КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ

Для определения корреляционных функций воспользуемся теорией спектральных представлений [2,3]. Заметим, что в общем случае спектральную интенсивность

$$J_{AB}(\omega) = (2\pi/Z) \sum_{nm} \langle n|B|m\rangle\langle m|A|n\rangle \exp(-E_n/\theta)\delta(E_n - E_m - \omega)$$

функции $\langle B(t')A(t)\rangle$ можно представить в виде [6] : $J_{AB}(\omega) = C_{AB}\delta(\omega) + J_{AB}^{(-)}(\omega)$, где C_{AB} определяет диагональную часть $(E_n = E_m) J_{AB}(\omega)$, а $J_{AB}^{(-)}(\omega)$ - недиагональную $(E_n \neq E_m)$. Как легко показать [6] , спектральная интенсивность $J_{AB}(\omega)$ определяется АФГ, а $J_{AB}^{(-)}(\omega)$ $(J_{AB}^{(-)}(\omega=0)=0)$ определяется КФГ. Константа C_{AB} возникает, когда АФГ имеет полюс при $\omega=0$, и равна вычету:

$$C_{AB} = \pi \lim_{\omega\to 0} [\omega G_{AB}^{(+)}(\omega)] . \qquad /14/$$

Таким образом, если пользоваться КФГ, то общее выражение для корреляционных функций имеет вид:

$$\phi_{nm}^{\alpha\beta} = C_{nm}^{\alpha\beta} + i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{G_{mn}^{(-)\beta\alpha}(\omega + i\epsilon) - G_{mn}^{(-)\beta\alpha}(\omega - i\epsilon)}{\exp\omega\beta - 1} . \qquad /15/$$

Вычисляя $C_q^{\alpha\beta}$ на основе уравнений /10/-/12/, получаем следующие соотношения:

$$C^{\alpha y} = 0, \quad \alpha = x, y, z \qquad /16а/$$

$$(\Gamma - \langle S^x \rangle J_q) C_q^{xz} = h_z C_q^{xx} , \qquad /16б/$$

$$(\Gamma - \langle S^x \rangle J_q) C_q^{zz} = h_z C_q^{xz} . \qquad /16в/$$

Корреляционные функции $\phi_q^{(-)\alpha\beta}$ получаем, используя КФГ /12/, в виде

$$\hat{\phi}_q^{(-)\alpha\beta} = \begin{pmatrix} h_z \langle S^z \rangle A_q & \frac{i}{2}\langle S^z \rangle & -h_z \langle S^x \rangle A_q \\ -\frac{i}{2}\langle S^z \rangle & \frac{\epsilon_q^2 \langle S^x \rangle}{\Gamma} A_q & \frac{i}{2}\langle S^x \rangle \\ -h_z \langle S^x \rangle A_q & -\frac{i}{2}\langle S^x \rangle & \Gamma\langle S^x \rangle A_q \end{pmatrix} , \qquad /17/$$

где $A_q = (1/2\epsilon_q)\,\mathrm{cth}(\epsilon_q\beta/2)$. Подставляя /17/, /16/ в /15/, получаем систему независимых уравнений для корреляционных функций:

$$\phi_q^{xy} = \frac{i}{2}\langle S^z \rangle , \qquad /18а/$$

$$\phi_q^{yy} = \frac{\epsilon_q \langle S^x \rangle}{2\Gamma} \mathrm{cth} \frac{\beta\epsilon_q}{2} , \qquad /18б/$$

$$\phi_q^{zy} = -\frac{i}{2}\langle S^x\rangle, \qquad /18в/$$

$$\phi_q^{xx} - \frac{\Gamma - \langle S^x\rangle J_q}{h_z}\phi_q^{xz} = \frac{\epsilon_q\langle S^z\rangle}{2h_z}\,\mathrm{cth}\frac{\beta\epsilon_q}{2}, \qquad /18г/$$

$$\phi_q^{zx} - \frac{\Gamma - \langle S^x\rangle J_q}{h_z}\phi_q^{zz} = -\frac{\epsilon_q\langle S^x\rangle}{2h_z}\,\mathrm{cth}\frac{\beta\epsilon_q}{2}. \qquad /18д/$$

Из коммутационных соотношений и условия /8а/ следует, что $\phi_q^{xz} = \phi_q^{zx}$ и, следовательно, для полноты системы /18/ не хватает одного уравнения, например, для функции ϕ_q^{xz}. То же самое можно сказать и о системе уравнений /16/. Такой результат является следствием неоднозначности вычисления АФГ: уравнение для АФГ содержит корреляционные функции, которые, в свою очередь, определяются через сами ФГ. Действительно, т.к. спектральные представления для АФГ определяют корреляционные функции однозначно, то, используя /10/, получаем систему уравнений для корреляционных функций

$$\tilde{\hat{\phi}}_q = i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\,\frac{\hat{G}_q^{(+)}(\omega+i\epsilon) - \hat{G}_q^{(+)}(\omega-i\epsilon)}{\exp\beta\omega + 1} + 2\tilde{\hat{R}}_q\tilde{\hat{\phi}}_q, \qquad /19/$$

где $\tilde{\hat{R}}_q = i\int_{-\infty}^{\infty}(d\omega/2\pi)[\hat{L}_q(\omega+i\epsilon) - \hat{L}_q(\omega-i\epsilon)]/(e^{\beta\omega}+1)$. Вычисляя $\hat{R}_q$ с помощью /11/ и подставляя в /19/, получаем, что $\det(1 - 2\tilde{\hat{R}}_q) = 0$, т.е. система уравнений /19/ для корреляционных функций неполная. Эта система имеет вид /18/, что заранее не очевидно, поскольку точное выражение /14/ может быть нарушено процедурой расцепления. Можно заключить, что в рамках данной методики полностью определить корреляционные функции не удается.

В принципе константы $C_q^{\alpha\beta}$ можно было бы определить с помощью интегралов движения /7/. Именно последние и являются истинной причиной появления особенности в спектральной интенсивности. Однако вопрос о виде этих интегралов остается открытым. Кроме аддитивных интегралов движения, а таковым в модели /1/ является, например, оператор $K = \sum_{nm} J_{nm}\vec{S}_n\vec{S}_m$ в случае, если суммирование проводится по ближайшим соседям, могут существовать локальные интегралы движения, как, например, оператор S_i^z в модели Изинга. При приближенном решении задачи могут появиться и так называемые квазиинтегралы движения, например, в модели Гайзенберга в ПХФ оператор S_i^z.

4. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МОДЕЛИ

Для вычисления свободной энергии выделим в /1/ взаимодействие со средним спином $\sigma = \langle S_i^z\rangle$:

$$H_0 = -\Gamma\sum_n S_n^x + \frac{J_0}{2}\sigma^2 - J_0\sigma\sum_n S_n^z,$$

тогда, вводя формальный параметр связи λ, гамильтониан /1/ можно представить в виде

$$H(\lambda) = H_0 + H_1(\lambda), \quad H_1(\lambda) = \lambda(H - H_0).$$

Параметр связи λ меняется от 0 до 1, что соответствует переходу от гамильтониана H_0 к полному гамильтониану H. Определяя свободную энергию, зависящую от λ, и дифференцируя ее по λ, получаем точное соотношение /13/

$$F = F_0 + \int_0^1 d\lambda\left\langle\frac{\partial H_1(\lambda)}{\partial\lambda}\right\rangle_\lambda, \qquad /20/$$

где F_0 - свободная энергия системы с гамильтонианом H_0.

Для получения $\langle H_1(\lambda)\rangle$ воспользуемся следующим формальным приемом /см. [3] §34/. Используя /5/ и уравнение движения для оператора S_n^y с гамильтонианом /1/, получаем строгое равенство

$$\langle S_n^y(t)\frac{id}{dt}S_n^y(t)\rangle = -\frac{\Gamma}{2}\langle S_n^x\rangle - \frac{1}{2}\sum_m J_{nm}\langle S_n^z S_m^z\rangle, \qquad /21/$$

из которого сразу получаем выражение для внутренней энергии

$$\langle H\rangle = \sum_n \langle S_n^y(t)\frac{id}{dt}S_n^y(t)\rangle - \frac{\Gamma N}{2}\langle S^x\rangle, \qquad /22/$$

а также выражение

$$\left\langle\frac{\partial H_1(\lambda)}{\partial\lambda}\right\rangle_\lambda = \langle S_n^y(t)\frac{id}{dt}S_n^y(t)\rangle_\lambda + \frac{\Gamma\langle S^x\rangle_\lambda + J_0\sigma^2}{2}. \qquad /23/$$

С другой стороны, используя спектральные представления, получаем

$$\langle S_n^y(t)\frac{id}{dt}S_n^y(t)\rangle_\lambda = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\,\frac{i\omega[G_{nn(\lambda)}^{(-)yy}(\omega+i\epsilon) - G_{nn(\lambda)}^{(-)yy}(\omega-i\epsilon)]}{e^{\beta\omega}-1}. \qquad /24/$$

Подставляя в /24/ ФГ $G_{nn}^{(-)yy}$ из /12/, получаем в ПХФ

$$\langle S_n^y(t)id/dtS_n^y(t)\rangle_\lambda = -(\Gamma\langle S^x\rangle_\lambda + J_0\sigma^2)/2$$

и, следовательно, внутреннюю энергию /22/ и свободную энергию /20/ в таком же виде, как и в ПМП. Отсюда следует, что уравнения для $\langle S^z\rangle$ и $\langle S^x\rangle$, вычисленные по свободной энергии в ПХФ, имеют тот же вид, что и в ПМП:

$$\langle S^z\rangle = \frac{h_z}{2h}\,\mathrm{th}\frac{h\beta}{2}, \qquad /25/$$

$$\langle S^x\rangle = \frac{\Gamma}{2h}\,\mathrm{th}\frac{h\beta}{2}, \qquad /26/$$

где $h^2 = h_z^2 + \Gamma^2$.

Такая ситуация объясняется, по-видимому, тем, что в гамильтониане /1/, в отличие от модели Гайзенберга, отсутствует взаимодействие поперечных компонент, и, следовательно, коллективные возбуждения, которые в ПХФ не приводят к перенормировке среднего поля, не дают вклада в термодинамические величины.

На данном этапе мы получаем возможность полностью определить корреляционные функции, используя определение констант $C_{nm}^{\alpha\beta}$ в виде [7,8]:

$$C_{nm}^{\alpha\beta} = \frac{1}{\beta}[\chi_{nm}^{T\alpha\beta} - \chi_{nm}^{(-)\alpha\beta}], \qquad /27/$$

где изолированная /Кубовская/ восприимчивость $\chi_{nm}^{(-)\alpha\beta} = -G_{nm}^{(-)\alpha\beta}$ $(\omega = 0)$. Изотермическая восприимчивость вычисляется по определению: $\chi_{nm}^{T\alpha\beta} = \partial\langle S_n^\alpha\rangle/\partial H_m^\beta$, где H_m^β - неоднородное внешнее поле, приводящее к отклонению средних значений проекций спиновых операторов на узле от однородных. В линейном приближении по этим отклонениям уравнения /25/, /26/ сохраняют свой вид. Выполняя вычисления /см. также /14//, получаем выражения для изотермических восприимчивостей в ПХФ:

$$\chi_q^{T\,zz} = \frac{A_{zz}}{1 - J_q A_{zz}}, \qquad /28а/$$

$$\chi_q^{T\,xz} = \frac{\Gamma\langle S^z\rangle(\beta b J_0 - 1)/h^2}{1 - J_q A_{zz}}, \qquad /28б/$$

$$\chi_q^{T\,xx} = \frac{\langle S^z\rangle}{h_z} + \frac{\Gamma - J_q\langle S^x\rangle}{h_z}\chi_q^{T\,xz}, \qquad /28в/$$

где $A_{zz} = (\Gamma\langle S^x\rangle + h_z^2\beta b)/h^2$, $4b = 1 - \mathrm{th}^2(\beta h/2)$

и $\chi_q^{T\,\alpha y} = \chi_q^{(-)\alpha y}$ $(\alpha = x, y, z)$.

Используя КФГ в виде /12/ и выражения /27/, /28/, можем получить все необходимые константы $C_q^{\alpha\beta}$. Например,

$$C_q^{zz} = h_z^2 b/\epsilon_q^2 (1 - A_{zz} J_q). \qquad /29/$$

Вычисление остальных констант показывает, что они удовлетворяют уравнениям /16/.

Заметим, что вычисленные нами константы $C_q^{\alpha\beta}$ совпадают с таковыми, полученными в работе /11/ из результатов диаграммной техники /9,15/ в ПХФ.

5. ПРАВИЛА СУММ

Поскольку в методе двухвременных ФГ нет общего критерия точности расцеплений, для этого можно использовать правила сумм. Рассмотрим кинематические правила сумм, которые следуют из коммутационных соотношений в виде /5/:

$$\langle S_m^\alpha S_m^\beta \rangle = \frac{1}{4}\delta_{\alpha\beta} + \sum_\gamma \frac{i}{2}\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \langle S_m^\gamma \rangle \qquad /30/$$

Это условие совместно с условиями равновесия $i d/dt \langle S_n^\alpha(t) S_m^\beta(t)\rangle = 0$ при $\alpha = \beta = 0$ и $\alpha = z, \beta = x$ позволяет получить более общие точные соотношения, соответственно:

$$\langle S_n^y S_m^z \rangle = \frac{i}{2}\langle S_n^x \rangle \delta_{nm} = -\langle S_m^z S_n^y \rangle, \qquad /31а/$$

$$\langle S_n^x S_m^y \rangle = \frac{i}{2}\langle S_n^z \rangle \delta_{nm} = -\langle S_m^y S_n^x \rangle. \qquad /31б/$$

Используя /16/, /17/, /29/, видим, что корреляционные функции $\langle S_n^y S_m^\beta \rangle$ при $\beta = x, z$ удовлетворяют точным соотношениям /30/, /31/. Для корреляционных же функций при $\alpha = \beta$ и $\alpha = x$, $\beta = z$ спиновые правила сумм /30/, с учетом /25/, /26/, не выполняются.

На *рис. 1* приведены результаты численного расчета величины относительного отклонения

$$\Delta_{\alpha\beta} = 4[\langle S_m^\alpha S_m^\beta \rangle - (1/4)\delta_{\alpha\beta} - (i/2)\sum_\gamma \epsilon_{\alpha\beta\gamma}\langle S_m^\gamma \rangle],$$

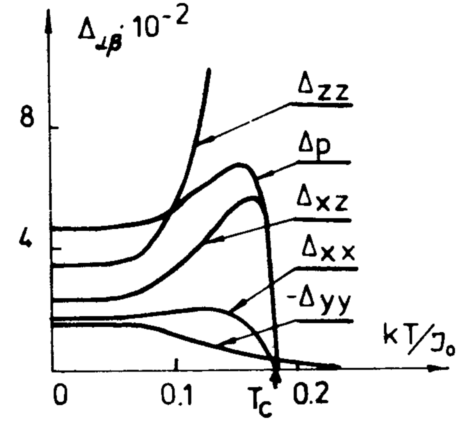

Рис. 1. Зависимость величины отклонений $\Delta_{\alpha\beta} = 4[\langle S_n^\alpha S_n^\beta \rangle - \delta_{\alpha\beta}/4 - (i/2)\sum_\gamma \epsilon_{\alpha\beta\gamma}\langle S_n^\gamma \rangle]$ и отклонения Δ_p от соотношения /8в/ от температуры.

а также отклонения Λ_p, от точного соотношения /8в/, в зависимости от температуры при $\Gamma = 0{,}4$. Вычисления проводились в приближении ближайших соседей, плотность состояний для J_q бралась в модельном виде:

$$(1/N)\sum_q f(J_q) = \int_{-1}^{1} d\omega \rho_0(\omega) f(J_0\omega), \quad \rho_0(\omega) = (2/\pi)\sqrt{1-\omega^2}.$$

Как видно из *рис.1*, корреляционные функции различных компонент спинов дают различные отклонения. Они не превышают 7%, кроме отклонения для функции продольных компонент спина $\langle S_n^z S_n^z \rangle$, которое резко возрастает при стремлении T к T_c. Остальные $\Delta_{\alpha\beta} \to 0$ при $T \to T_c$, т.к. они пропорциональны $\langle S^z \rangle$. Очевидно, что в области T_c все результаты можно рассматривать только как интерполяционные. Аналогичные расчеты при разных Γ показывают, что при уменьшении Γ величина отклонений уменьшается.

Можно сделать вывод о том, что ПХФ с относительно хорошей точностью описывает интерполяционным образом во всей области температур /исключая окрестность фазового перехода/ спектр невзаимодействующих коллективных возбуждений в модели /1/.

6. АНАЛИЗ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА

Обычно в теории спиновых систем с целью получения уравнения для параметра порядка используются спиновые правила сумм. В настоящем разделе мы рассмотрим этот способ, в связи с тем, что в предыдущих работах /5,10-12/ он приводил к различным уравнениям, что явилось причиной критики метода двухвременных ФГ /15/. Покажем, что при последовательном вычислении констант $C_q^{\alpha\beta}$ такого рода неоднозначности не возникает. Используя /8в/ и /9/, получаем, что $\sum_\ell J_{n\ell}\phi^{xz}_{n\ell} = 0$. Из /21/ получаем,

что $\sum_\ell J_{n\ell}\ \phi^{zz}_{\ell n} = 0$, а подставляя /8а/ в /30/, видим, что

$\phi^{xz}_{nn} = -\langle S^x\rangle\langle S^z\rangle$. Учитывая все это вместе с /9/, из уравнений /18г/, /18д/ получаем корреляционные функции /при $T \le T_c$ /

$$\phi^{xx}_{nn} = (1/N)\sum_q (\epsilon_q/2J_0)\mathrm{cth}(\beta\epsilon_q/2) - \langle S^x\rangle^2$$

$$\phi^{zz}_{nn} = (1/N)\sum_q (\epsilon_q/2J_0)\mathrm{cth}(\beta\epsilon_q/2) - \langle S^z\rangle^2 .$$

Подставляя эти функции, а также функцию ϕ^{yy}_{nn} /18б/ в условие /30/, получаем одинаковое во всех трех случаях уравнение

$$\frac{1}{2} = \frac{1}{N}\sum_q \frac{\epsilon_q}{J_0}\,\mathrm{cth}\frac{\beta\epsilon_q}{2} . \qquad /32/$$

Заметим, что это уравнение получено только на основе правил сумм. Уравнение /32/ было получено также в работе /11/ из условия $\langle (S^y)^2\rangle = 1/4$.

Обсудим уравнение /32/. Рассмотрим случай дальнодействующих сил в гамильтониане /1/. Тогда фурье-образ взаимодействия отличен от нуля лишь в окрестности точки $q = 0$, и можно предположить модельный вид взаимодействия $J_q = J_0 e^{-q^2 r_0^2}$, где r_0 - радиус взаимодействия. В этом случае суммы типа $(1/N)\sum_q J_q f_q \approx 0(v/r_0^3)$, где f_q - регулярная функция от q, v - объем элементарной ячейки. Проводя разложение по $1/r_0^3$ в /32/, получаем, что $\langle S^z\rangle$ во всей области температур лежит выше $\langle S^z\rangle$ в ПМП /25/. При этом для T_c получаем оценку $T_c \approx T_c^{\text{ПМП}}\ [1 + (4\Gamma^2/J_0^2)(v/r_0^3)]$. Этот результат находится в противоречии с результатами высоко- /16/ и низкотемпературного разложения /17/, а также диаграммной техники /9/, где показано, что учет флуктуаций приводит к понижению $\langle S^z\rangle$ во всей области температур.

На *рис. 2* приведено температурное поведение $\langle S^z\rangle$ в двух случаях $\Gamma = 0,4$ и $\Gamma = 0,25$, найденное численным решением уравнений /25/ /сплошная линия/, /32/ /штрихпунктирная линия/, а также уравнения /2.4/ из работы /15/ /пунктирная линия/, полученного диаграммной

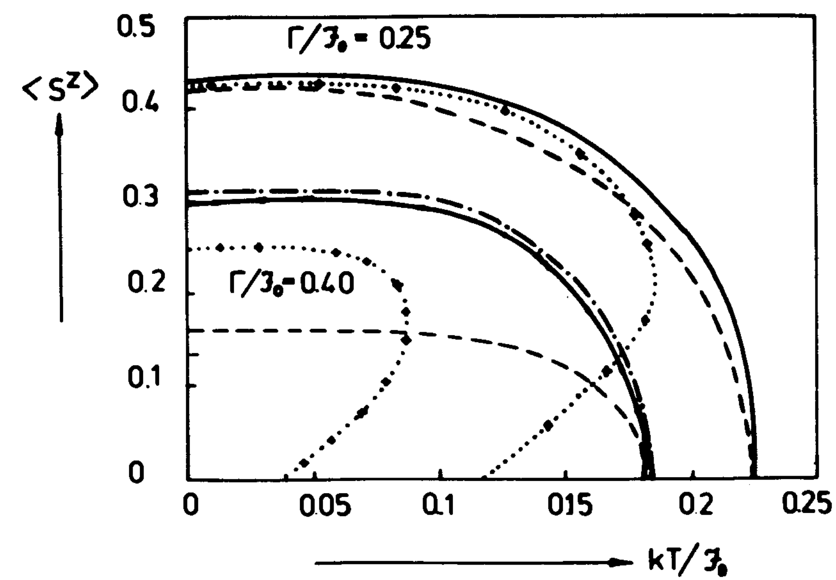

Рис. 2. Зависимость параметра порядка $\langle S^z\rangle$ от температуры.

техникой. Расчеты проводились в тех же приближениях, что и в предыдущем разделе. Точечной линией на *рис. 2* показано решение уравнения из работы /5/, которое получается из уравнения /32/, если в нем отбросить член

$\Sigma_2 = (1/N) \sum_q (\Gamma \langle S^x \rangle J_q / \epsilon_q) \, \mathrm{cth} \beta \epsilon_q / 2$. Однако никаких оснований для этого нет, а разложение по параметру $1/r_0^3$ /см. также /11/ показывает, что Σ_2 имеет тот же порядок, что и остальные члены. При $\Gamma = 0{,}25$ уравнение /32/ практически совпадает с ПМП. При увеличении Γ это уравнеиие, вычисленное корректно в методе уравнений движения в ПХФ, приводит к нефизическим результатам: повышению относительно ПМП во всей области температур, что является следствием неправильного учета флуктуаций параметра порядка в данном подходе. Поэтому в качестве уравнения для $\langle S^z \rangle$ следует использовать уравнение /25/, удовлетворяющее условию термодинамического равновесия.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Коротко сформулируем основные результаты работы. Развит последовательный подход к самосогласованному описанию динамических и термодинамических характеристик модели Изинга с поперечным полем в ПХФ. В системе имеются незатухающие коллективные возбуждения, которые не дают вклада в термодинамические величины, имеющие в результате такой же вид, как и в ПМП.

Для оценки точности приближения использованы кинематические правила сумм. Расчеты наглядно демонстрируют степень отклонения от них. ПХФ особенно плохо учитывает продольные спиновые корреляции в области T_c. Тем не менее ПХФ предпочтительнее ПМП, поскольку оно позволяет просто учесть коллективные возбуждения в модели.

При правильном использовании спектральных представлений в обычном подходе вычисления уравнения для параметра порядка $\langle S^z \rangle$ на основе правил сумм получается единственное уравнение, но $\langle S^z \rangle$ показывает физически неправильное поведение.

Авторы признательны Н.М.Плакиде за стимулирующие обсуждения и замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В. ДАН СССР, 1959, 126, с. 53.*
2. *Зубарев Д.Н. УФН, 1960, 71, с. 71; Неравновесная статистическая термодинамика", Наука, М., 1971.*
3. *Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма" 2-е издание, Наука, М., 1975.*
4. *Статистическая физика и квантовая теория поля. ред. Н.Н.Боголюбова, Наука, М., 1973.*
5. *Konvent H., Weller W. Acta Phys.Polonica, 1972, A41, p. 717.*
6. *Ramos J.G., Gomes A.A. Nuovo Cim., 1971, 3A, p. 441.*
7. *Suzuki M. Physika, 1971, 51, p. 271.*
8. *Kwok P.C., Schultz T.D. J. of Phys., 1969, C2, p. 1196.*
9. *Stinchcombe R.B. J.of Phys., 1973, C6, p. 2459-524.*
10. *Стасюк И.В., Левицкий Р.Р. УФЖ, 1969, 14, с.2097.*
11. *Козицкий Ю.В., Левицкий Р.Р. Препринт ИТФ-76-76Р, /1976/.*
12. *Ramakrisham V., Tanaka T. Phys.Rev., 1977, B16, p. 422.*
13. *Вакс В.Г., Ларкин А.И., Пикин С.А. ЖЭТФ, 1966, 51, с. 361.*
14. *Pytte E., Thomas H. Phys.Rev., 1968, 175, p. 610.*
15. *Левицкий Р.Р., Стасюк И.В. УФЖ, 1974, 19, с. 1331.*
16. *Elliot R.J., Wood C. J.Phys., 1971, C4, p. 2359.*
17. *Pfeuty P., Elliot R.J. J.Phys., 1971, C4, p. 2370.*

Рукопись поступила в издательский отдел
6 марта 1978 года.