

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



С326
Л-246

8/x-75
P17 - 9106

С.С.Лапушкин

3319/2-75

ИССЛЕДОВАНИЕ ТОЧНОГО РЕШЕНИЯ
КЛАСТЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

1975

P17 - 9106

С.С.Лапушкин

ИССЛЕДОВАНИЕ ТОЧНОГО РЕШЕНИЯ
КЛАСТЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

На основе метода Н.Н.Боголюбова (мл.) [1] представляется возможным получать точные решения в термодинамическом пределе для спиновых модельных задач. Используя свойство аддитивности аппроксимирующего гамильтониана [2], в работе [3] мы получили асимптотически точное решение кластерной модели Изинга с взаимодействием типа "все-со-всеми". Следует отметить, что спиновые операторы S_j узлов кристаллической решетки действуют в гильбертовых пространствах \mathcal{H}_j , тензорное произведение которых задает пространство \mathcal{H} , на котором определен аддитивный гамильтониан [4].

Рассмотрим гамильтониан кластерной модели Изинга [3]:

$$H = -\mu h N S - N \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_{2n}}{2n} S^{2n}. \quad (1)$$

Здесь $S = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N S_j^z$ есть оператор полного нормированного спина, J_{2n} - обменные константы, ограниченные по модулю некоторой величиной $I < \infty$, h - внешнее магнитное поле.

Аппроксимирующий гамильтониан построен [3] в соответствии с принципами самосогласованного поля и имеет вид

$$H_0 = -h_s N S + N \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J'_{2n}}{2n} C^{2n}, \quad (2)$$

где $h_s = \mu h + \sum_{n=1}^{\infty} J'_{2n} C^{2n-1}$, $J'_{2n} = (2n-1) J_{2n}$, а $C = \langle S \rangle$ есть термодинамические средние от соответствующих спиновых операторов.

Оценки для разности плотностей свободных энергий модельной и

аппроксимирующей систем получаются на основе неравенства (см. [1] - [3]):

$$0 \leq f_N[H_0] - f_N[H] \leq a \langle (S - \langle S \rangle)^4 \rangle^{1/2}. \quad (3)$$

Константа a зависит от I и числа кластеров \mathcal{K} .

Заметим, что в частном случае изинговского ферромагнетика $\mathcal{K}=1, J_2 > 0$ удастся улучшить оценку в точке фазового перехода, применив метод перевала [5].

В настоящей работе мы исследуем асимптотические оценки плотности свободной энергии, используя неравенство (3), а также уравнение самосогласования $C = \langle S \rangle$ для данной модели. В случае изинговского ферромагнетика подробное исследование уравнений самосогласования проведено в работе [6], где рассматривается модифицированная модель из M изинговских ферромагнитных цепочек по n спинов в каждой ($N = Mn$), причем для ближайших цепочек имеет место взаимодействие типа "все-со-всеми".

I.

Как известно, метод построения аппроксимирующего гамильтониана путем замены операторов S_j на их средние значения $\langle S_j \rangle$ соответствует при полевом подходе переходу к квазичастицам. В результате мы приходим к самосогласованному полю за счет взаимодействия в каждом узле "голой" частицы с полем, создаваемым квазичастицами. Кроме того, известно, (см. [7]), что при отбрасывании несвязанных диаграмм рассмотрение приводит к кумулянтным средним, которые целесообразно использовать для исследования неравенства (3).

Обозначим $\Delta_{jk} = S_{jk} - \langle S_{jk} \rangle$. Тогда, очевидно, $\langle \Delta_{jk} \rangle = \langle \langle \Delta_{jk} \rangle \rangle = 0$, откуда следует, что во втором и третьем порядках кумулянтные средние $\langle \dots \rangle_c$ от введенных операторов совпадают с обычными термодинамическими средними $\langle \dots \rangle$:

$$\langle \Delta_{j_1} \Delta_{j_2} \rangle = \langle \langle \Delta_{j_1} \Delta_{j_2} \rangle \rangle, \quad \langle \Delta_{j_1} \Delta_{j_2} \Delta_{j_3} \rangle = \langle \langle \Delta_{j_1} \Delta_{j_2} \Delta_{j_3} \rangle \rangle.$$

Представим теперь среднее от произведения четырех операторов через кумулянтные средние:

$$\begin{aligned} \langle \Delta_{j_1} \Delta_{j_2} \Delta_{j_3} \Delta_{j_4} \rangle &= \\ &= \langle \langle \Delta_{j_1} \Delta_{j_2} \Delta_{j_3} \Delta_{j_4} \rangle \rangle + \langle \langle \Delta_{j_1} \Delta_{j_2} \rangle \rangle \langle \langle \Delta_{j_3} \Delta_{j_4} \rangle \rangle + \\ &+ \langle \langle \Delta_{j_1} \Delta_{j_3} \rangle \rangle \langle \langle \Delta_{j_2} \Delta_{j_4} \rangle \rangle + \langle \langle \Delta_{j_1} \Delta_{j_4} \rangle \rangle \langle \langle \Delta_{j_2} \Delta_{j_3} \rangle \rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

Вместе с тем, очевидно, (см. [3]), что

$$\frac{\partial^k f_N}{\partial h^k} = -(\beta N)^{k-1} \langle (S - \langle S \rangle)^k \rangle_c.$$

Здесь β - величина, обратная температуре θ , $k > 1$, а f_N определяется, как обычно:

$$f_N(h, \theta) = f_N[H] = -(\beta N)^{-1} \ln \text{Sp} e^{-\beta H}.$$

Таким образом, в правой части (3) имеем:

$$\begin{aligned} \langle (S - \langle S \rangle)^4 \rangle &= \\ &= -\frac{1}{(\beta N)^3} \frac{\partial^4 f_N}{\partial h^4} + 3 \left\{ -\frac{1}{\beta N} \frac{\partial^2 f_N}{\partial h^2} \right\}^2, \end{aligned} \quad (5)$$

где второе слагаемое соответствует трем различным комбинациям спариваний операторов Δ_{jk} в (4).

Подставляя (5) в неравенство (3) и проводя три раза интегрирование на отрезке произвольной длины ℓ в соответствии с методом работы [3], в результате последовательного применения теоремы о среднем получаем следующее неравенство:

$$\ell^3 \delta_N(\xi_3, \theta) \leq a I_N(\ell, \theta), \quad (6)$$

где обозначено $\delta_N(h, \theta) = f_N[H_0] - f_N[H]$, а

$$I_N(\ell, \theta) = \int_{h_3}^{h_3+\ell} dh_2 \int_{h_2}^{h_2+\ell} dh_1 \left\{ \frac{1}{(\beta N)^3} \frac{\partial^4 f_N}{\partial h^4} + \frac{3}{(\beta N)^2} \left[-\frac{\partial^2 f_N}{\partial h^2} \right]^2 \right\}^{1/2} dh. \quad (7)$$

Оценим теперь интеграл (7) в зависимости от произвольного параметра $\ell > 0$. Существенным является тот факт, что по теореме Гриффитса [8] третья производная функции свободной энергии по полю положительна для всех $h \in (0, +\infty)$ и отрицательна на $(-\infty, 0)$, а вторая производная отрицательна на всей числовой оси.

Из (6) и (7) видно, что на интервалах, где вторая производная выпукла вниз, неравенство (6) можно усилить, отбросив первый член, и получить известный результат (см. [9])

$$\delta_N(h, \theta) \leq \frac{2a\sqrt{3}}{\beta N \ell} + 6\ell, \quad (8)$$

хотя, вообще говоря, достаточно $\frac{\text{const}}{\beta N \ell}$.

Легко видеть, что из (8) после минимизации по ℓ следует оценка $\frac{1}{\sqrt{N}}$.

На интервалах (α, α') , где вторая производная выпукла вверх, к первому слагаемому в (7) следует трижды применить неравенство Гельдера и использовать ограниченность первой производной на всей оси $|\frac{\partial f_N}{\partial h}| \leq 1$. Тогда получим (см. [3]):

$$\delta_N(\xi_3, \theta) \leq \frac{2a\sqrt{3}}{\beta N \ell} + \frac{2a\sqrt{2}}{(\beta N \ell)^{3/2}}. \quad (9)$$

Однако в результате трехкратного интегрирования мы имеем оценку (9) лишь в интервале $(\alpha, \alpha' - 3\ell)$. Поэтому выберем интервал $L > 3\ell$ и применим на нем теорему Лагранжа:

$$\delta_N(h, \theta) \leq \frac{2a\sqrt{3}}{\beta N \ell} + \frac{2a\sqrt{2}}{(\beta N \ell)^{3/2}} + 12\ell. \quad (10)$$

Учитывая, что $\rho[Vh, L] < 3\ell$, где L - множество, на котором неравенство уже доказано, окончательно получаем оценку вида (10) на всей числовой оси.

$$\text{Обозначим } \varphi_N(\ell, \theta) = \frac{2a\sqrt{3}}{\beta N \ell} + 12\ell.$$

Очевидно, что

$$\min_{\{\ell\}} \varphi_N(\ell, \theta) \leq \min_{\{\ell\}} \varphi_N(\ell, \theta) \leq \varphi_N\left(\frac{1}{\sqrt{N}}, \theta\right), \quad (11)$$

где $\varphi_N(\ell, \theta)$ - правая часть неравенства (10).

Таким образом, имеем равномерную оценку по h для разности удельных свободных энергий кластерной модели Изинга и аппроксимирующей модели:

$$0 \leq f_N[H_0] - f_N[H] \leq \frac{\text{const}}{\sqrt{N}}. \quad (12)$$

В частном случае $\mathcal{K}=1$ эта оценка получается из простых геометрических соображений.

Следует отметить, что ухудшение оценки до $\mathcal{N}^{-1/2}$ происходит за счет второго члена в неравенстве (6), в то время как первый член, соответствующий кумулянтному среднему и включающий лишь неприводимые диаграммы, дает оценку $\mathcal{N}^{-3/5}$ (см. [3]).

Вне критической точки, на интервалах $(-\infty, -\delta)$ и (δ, ∞) , $\delta > 0$, где вторая производная ограничена $|\frac{\partial^2 f_N}{\partial h^2}| \leq B_0$, оценку (12) можно улучшить до \mathcal{N}^{-1} .

Для этого достаточно интегрировать неравенство (3) два раза, в результате чего получим

$$\delta_N(\xi_2, \theta) \leq \frac{2a}{\rho N \epsilon} \left\{ \frac{3}{4} (B_0 \ell)^2 + \frac{B_0}{\rho N} \right\}^{1/2}. \quad (13)$$

Применяя далее теорему Лагранжа, будем использовать для оценки модуля первой производной $|\frac{\partial}{\partial h} \{ f_N[H_0] - f_N[H] \}| \leq \epsilon'_N$ известную формулу $\epsilon'_N \leq 2\sqrt{\epsilon_N M_2}$, где ϵ_N - оценка модуля самой функции, а $M_2 = 2B_0$ - то же самое для второй производной.

Наконец, переходя слева в неравенстве к верхней грани, имеем:

$$\delta_N(h, \theta) \leq \epsilon'_N \leq \frac{b\theta}{N} + c\ell^2 + \frac{d(2\theta)^2}{N^2 \rho^2}, \quad (14)$$

откуда после минимизации по ℓ (b, c, d - константы) приходим к оценке $\epsilon'_N \leq \frac{\text{const}}{N}$, которая верна везде вне области вырождения состояния статистического равновесия.

П.

Запишем теперь уравнение самосогласования $C = \langle S \rangle$ в явном виде [3], обозначив через σ среднюю удельную намагниченность на один узел кристаллической решетки:

$$\sigma = th \beta h_s = th \frac{1}{\theta} \left\{ \mu h + \sum_{n=1}^{\mathcal{K}} J_{2n} \sigma^{2n-1} \right\}. \quad (15)$$

Положим $h=0, \theta=1$ и вместо (15) рассмотрим эквивалентное ему уравнение

$$P_{2\mathcal{K}-1}(\sigma) = \sum_{n=1}^{\mathcal{K}} J_{2n} \sigma^{2n-1} = Arth \sigma. \quad (16)$$

Корни этого уравнения лежат на интервале $(-1, 1)$, но нас интересуют лишь значения $\sigma \geq 0$.

Принимая во внимание, что слева в (16) стоит многочлен $(2\mathcal{K}-1)$ степени над полем \mathbb{D} , несложно показать, что уравнение (16) может иметь на промежутке $[0, 1)$ любое число действительных корней до $(\mathcal{K}+1)$ включительно.

Пусть коэффициенты J_{2n} произвольны. Тогда уравнение (16) можно представить в виде

$$\mathcal{F}(\sigma) = \lambda_1 \sigma + \lambda_2 \sigma^3 + \dots + \lambda_{\mathcal{K}} \sigma^{2\mathcal{K}-1} + \frac{\sigma^{2\mathcal{K}+1}}{2\mathcal{K}+1} + \dots = 0, \quad (17)$$

где коэффициенты $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{2\mathcal{K}}$ также произвольны. Все члены с этими коэффициентами пропадают после $2\mathcal{K}$ -кратного дифференцирования ряда (17):

$$\mathcal{F}^{(2\mathcal{K})}(\sigma) = \alpha_1 \sigma + \alpha_2 \sigma^3 + \dots + \alpha_n \sigma^{2n-1} + \dots = 0, \quad (18)$$

при этом все α_n положительны. Ясно, что $\mathcal{F}^{(2\mathcal{K})}(\sigma)$ имеет единственный нуль-начало координат, $\mathcal{F}^{(2\mathcal{K}-1)}(\sigma)$ имеет не более 2 нулей, $\mathcal{F}^{(2\mathcal{K}-2)}(\sigma)$ - не более трех, и т.д., а $\mathcal{F}(\sigma)$ - не более $(2\mathcal{K}+1)$ нулей. Значит, число действительных корней уравнения (16) на промежутке $[0, 1)$ не превышает $(\mathcal{K}+1)$.

Покажем, наконец, что коэффициенты J_{2n} можно подобрать таким образом, чтобы реализовать \mathcal{K} корней на интервале $(0, 1)$. Для этого рассмотрим конечную последовательность точек

$$0 < \sigma_1 < \sigma_2 < \dots < \sigma_i < \dots < \sigma_{\mathcal{K}} < 1,$$

каждая из которых удовлетворяет уравнению (16). Введем обозначение $\sigma_i^2 = z_i$.

Тогда на интервале $(0, 1)$ имеем систему линейных уравнений относительно коэффициентов J_{2n} :

$$J_2 + J_4 z_i + J_6 z_i^2 + \dots + J_{2\mathcal{K}} z_i^{\mathcal{K}-1} = \frac{\text{Arth } \sigma_i}{\sigma_i}. \quad (19)$$

Определитель этой системы есть определитель Вандермонда

$$V = \prod_{1 \leq j < i \leq \mathcal{K}} (z_i - z_j),$$

который отличен от нуля, т.к. $z_i \neq z_j$ при $i \neq j$. Итак, коэффициенты $J_2, J_4, \dots, J_{2\mathcal{K}}$ однозначно определяются из системы (19) и реализуют \mathcal{K} корней на $(0, 1)$. Аналогично доказывается возможность реализации $(\mathcal{K}-1), (\mathcal{K}-2)$ корней и т.д.

Введем теперь в уравнение (16) температуру θ :

$$\frac{1}{\theta} P_{2\mathcal{K}-1}(\sigma) = \text{Arth } \sigma \quad (20)$$

или

$$\theta(\sigma) = \frac{J_2 + J_4 \sigma^2 + \dots + J_{2\mathcal{K}} \sigma^{2\mathcal{K}-2}}{1 + \sigma^2/3 + \sigma^4/5 + \dots}. \quad (21)$$

Функция (21) бесконечно гладкая на $(0, 1)$ и совпадает с (20) при $\sigma \neq 0$.

Число корней уравнения (20) при данном $\theta = \theta_0 > 0$ равно числу точек пересечения прямой $\theta = \theta_0$ с графиком функции (21). Оно меняется при переходе θ_0 через экстремальные значения функции (21). На каждом из интервалов, где функция положительна, она имеет по крайней мере одну точку максимума.

При $\sigma = 0$ функция всегда имеет экстремум, вид которого определяется знаком $\theta'(0)$:

$$\begin{aligned} \theta(\sigma) &= (J_2 + J_4 \sigma^2 + \dots + J_{2\mathcal{K}} \sigma^{2\mathcal{K}-2}) (1 - \sigma^2/3 + \dots) = \\ &= J_2 + (J_4 - J_2/3) \sigma^2 + \dots; \quad \theta'(0) = 2(J_4 - J_2/3). \end{aligned} \quad (22)$$

Число экстремальных положительных значений θ на $[0, 1)$ может быть различным в зависимости от выбора обменных констант J_{2n} , но не превышает \mathcal{K} , причем число несовпадающих по величине максимумов не может быть больше, чем $\frac{\mathcal{K}}{2}$ для четных \mathcal{K} , и $\frac{\mathcal{K}+1}{2}$

для нечетных \mathcal{K} . Этот случай представляет интерес, т.к. соответствует разрушению упорядоченного состояния магнитной системы путем последовательных фазовых переходов, которые могут быть как первого, так и второго рода в зависимости от \mathcal{K} .

Целесообразно также обратить внимание на случай $\sum_{n=1}^{\mathcal{K}} J_{2n} = 0$.

Здесь функция $\theta(\sigma)$ в точке $\sigma=1$ имеет горизонтальную касательную, т.к. $P_{2\mathcal{K}-1}(1)=0$, $P_{2\mathcal{K}-1}(\sigma)=(1-\sigma)P_{2\mathcal{K}-2}(\sigma)$, и выражение $\frac{\theta(1)-\theta(\sigma)}{1-\sigma}$ стремится к нулю, если $\sigma \rightarrow 1$. При $\sum_{n=1}^{\mathcal{K}} J_{2n} \neq 0$ это выражение стремится к бесконечности, что видно непосредственно из (20), и функция имеет в точке $\sigma=1$ вертикальную касательную.

Рассмотрим несколько подробнее уравнение (16) при $\mathcal{K}=2$ (см. [10] и [11]), используя для наглядности фазовую плоскость обменных параметров J_2, J_4 (рис.1).

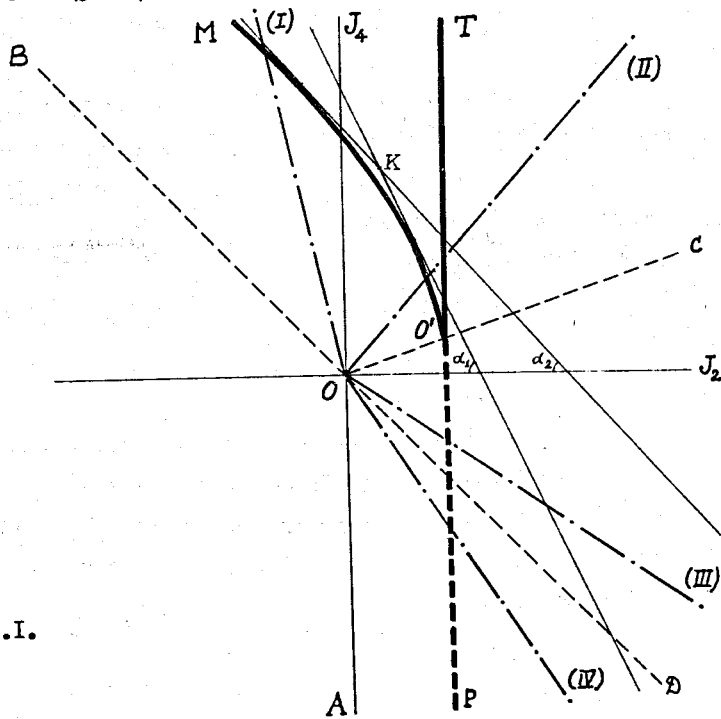


Рис.1.

Согласно доказанному выше общему предложению, уравнение (16) имеет на этой плоскости одно, два или три решения.

Запишем (16) при $\mathcal{K}=2$ в следующем виде:

$$\begin{aligned} \Phi(\sigma) &= \frac{1}{2} \{ \ln(1+\sigma) - \ln(1-\sigma) - 2P_3(\sigma) \} = \\ &= (1-J_2)\sigma + \left(\frac{1}{3}-J_4\right)\sigma^3 + \frac{\sigma^5}{5} + \frac{\sigma^7}{7} + \dots = 0. \end{aligned} \quad (23)$$

Исследуя возможные случаи поведения графика $\Phi(\sigma)$, получаем при $J_2 > 1$ два корня, при $J_2 = 1$ и $J_4 > \frac{1}{3}$ снова 2 корня, а при $J_2 \leq 1, J_4 \leq \frac{1}{3}$ - один корень. При $J_2 < 1, J_4 > \frac{1}{3}$ зафиксируем J_2 и будем увеличивать J_4 . Тогда имеем сначала область с одним решением, затем с двумя и, наконец, с тремя решениями. Граница, разделяющая области с одним и тремя решениями, может быть легко построена, т.к. она является огибающей семейства прямых (16), где σ играет роль параметра. Из уравнения огибающей можно получить асимптотики кривой OM при $\sigma \rightarrow 1$ и $\sigma \rightarrow 0$. Так, в случае $\sigma \rightarrow 1$ кривая не имеет асимптот, но не пересекает прямую OB ($J_2 = -J_4$), а в случае $\sigma \rightarrow 0$ ведет себя как парабола $1 - J_2 \approx 5\left(\frac{1}{3} - J_4\right)^2$ при приближении к угловой точке $O' \left(1, \frac{1}{3}\right)$.

В результате мы имеем в области $MO'P$ и на границе $O'P$, включая точку O' , один корень $\sigma=0$, во всей области правее $TO'P$ и на границах $O'T$ и $O'M$ - два корня, а в области $MO'T$ - три корня уравнения (16).

Построим теперь две произвольные касательные к огибающей под углами α_1 и α_2 . В области $MO'T$, где имеет место три решения ($\sigma=0, \sigma_1$ и σ_2), они пересекаются в некоторой точке $K(\bar{J}_2, \bar{J}_4)$.

Значит, для конкретных значений обменных констант \bar{J}_2, \bar{J}_4 мы можем вычислить намагниченности σ_1 и σ_2 , которые являются решениями уравнения (16), по формуле $\sigma_i = (\text{ctg } \alpha_i)^{1/2}$, $i=1,2$. Таким способом определяются нетривиальные решения уравнения самосогласования в любой точке фазовой плоскости, где они существуют.

Заметим далее, что введение температуры θ в уравнение (16) соответствует гомотетии плоскости (J_2, J_4) с коэффициентом $1/\theta$. Отсюда следует, что вид графиков зависимости намагниченности от температуры можно установить при движении вдоль лучей, выходящих из начала координат. Так, двигаясь по лучу (I) от точки O в направлении уменьшения θ , мы сначала пересекаем область тривиального решения, затем огибающую O'M, и попадаем в область, где уравнение (16) имеет три решения. Вдоль луча (II) получаем последовательно одно, два, три, а затем снова два решения. Лучи (III) и (IV) пересекают лишь области с одним и двумя решениями.

Формула (20) в случае $\mathcal{K}=2$ принимает вид

$$J_2 + J_4 \sigma^2 = \theta \frac{\text{Arth } \sigma}{\sigma} \quad (24)$$

Точки стационарности для функции (24) определяются из уравнения

$$\frac{J_2 + J_4 \sigma^2}{J_2 + 3J_4 \sigma^2} = \frac{1 - \sigma^2}{2\sigma} \ln \frac{1 + \sigma}{1 - \sigma} \quad (25)$$

Исследуем теперь графики зависимости намагниченности от температуры (рис.2). На рис.2а показаны графики $\sigma(\theta)$ при фиксированном $J_2 > 0$ и произвольно изменяющемся J_4 , на рис. 2б - при фиксированном $J_4 > 0$ и меняющемся J_2 .

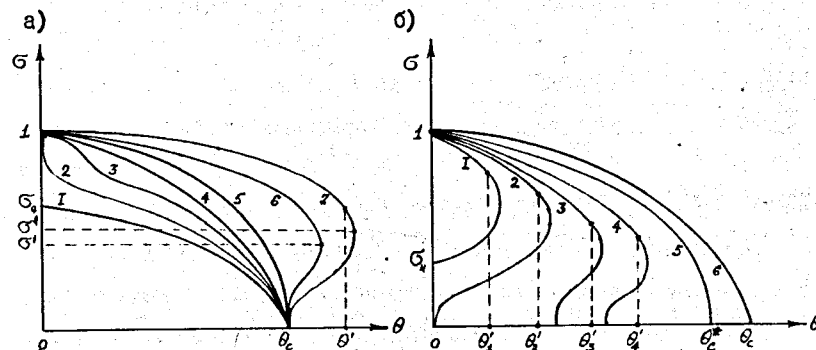


Рис.2.

Рассмотрим рис.2а. Легко убедиться, что для $-1 < J_2/J_4 < 0$, т.е. в секторе AOD, где лежит луч (IV), имеем график I, соответствующий ненасыщенному состоянию ферромагнетика. Максимальный момент при $\theta=0$ определяется соотношением $\sigma_0 = (-J_2/J_4)^{1/2}$. При $J_2 = -J_4$ на границе OD ферромагнетик достигает насыщенного состояния, однако, как отмечалось выше для общего случая $\sum_{n=1}^{\infty} J_{2n} = 0$, в точке $\theta=0$ имеется особенность, характеризующаяся резким переходом с вертикальной касательной из обычного ферромагнитного состояния в состояние с ненасыщенным моментом (см. график 2). На всех остальных графиках 3-7 касательная в этой точке горизонтальна, т.е. намагниченность при температурах, близких к нулю, уменьшается очень незначительно.

Из формулы (24) видно, что случай 3 соответствует лучу (III), а случаи 4,5 - сектору $J_2 < 0$. Таким образом, для $-1 \leq J_4/J_2 \leq 1/3$

модель соответствует обычному ферромагнетику, причем в точке Кюри $\theta = \theta_c = J_2$, не зависящей от J_4 , имеет место фазовый переход II рода.

Затем в области $J_4 OC$ мы получаем графики вида 6,7, где кривая $\sigma(\theta)$ имеет две ветви, одна из которых лежит ниже другой и соответствует неустойчивому состоянию. В этом случае при некоторой температуре $\theta' > \theta_c$ происходит фазовый переход I рода. Нетрудно видеть, что точки σ' , фиксирующие на графиках 6,7 высоту горбов над осью абсцисс, определяются пересечением лучей, лежащих в секторе $J_4 OC$, например (П), с огибающей $O'M$. Кроме того, из уравнения (25) можно показать, что множество этих точек имеет точку сгущения, меньшую единицы, т.е. при любых J_4 фазовый переход I рода имеет место при значениях $\sigma < 1$. Это говорит о том, что разрушение ферромагнитного упорядочения даже при очень больших температурах происходит не сразу, а после некоторого уменьшения удельной намагниченности.

Следует отметить, что возможность описания фазовых переходов I рода в некоторых веществах, например MnO , с помощью гамильтонианов, содержащих спиновые операторы в четвертой степени, впервые обсуждалась в работе [12].

Рис. 2б отвечает случаю, когда мы, находясь в верхней полуплоскости, меняем значение J_2 . Однако при $J_2 \leq -J_4$ лучи, выходящие из точки O, не пересекают области, где существуют нетривиальные решения, и эти значения J_2 мы не рассматриваем.

Будем увеличивать J_2 . Очевидно, что график I соответствует лучу (1), граф. 2 - оси OJ_4 , а графики 3,4 - сектору $J_4 OC$, т.е.

фазовый переход I рода имеет место для $-1 < J_2/J_4 < 3$. Пересекая границу OC (граф.5), попадаем в сектор $J_2 OC$ (граф.6), где вид кривой уже известен (см. 4 на рис.2а).

При уменьшении J_2 как ферромагнитная точка Кюри ($\theta_c^* < \theta_c$), так и точка фазового перехода I рода ($\theta_1' < \theta_2' < \theta_3' < \theta_4'$) сдвигаются в область меньших температур. Для отрицательных J_2 (граф.1) значение σ_n , соответствующее неустойчивому состоянию при нулевой температуре, определяется той же формулой, что и σ_c на рис.2а.

Заметим, что графики, аналогичные рис.2б, получены в работе [11].

Представляет интерес подчеркнуть роль границы OC ($J_4 = J_2/3$), которая разделяет области с фазовыми переходами I и II рода. Кроме того, учитывая (22), получаем, что на OC меняется критический показатель γ в точке Кюри: $\sigma = \mathcal{B}(-\varepsilon) = \mathcal{B}(1 - \frac{\theta}{\theta_c})^{1/4}$, где ε - приведенное "температурное расстояние" до критической точки, а коэффициент $\mathcal{B} = 5^{1/4} \approx 1,495$. Это соответствует случаям 5 на рис.2а и 2б.

Рассмотрим, наконец, область AOB на рис.1. Здесь при любых $\theta \geq 0$ существует лишь тривиальное решение $\sigma = 0$. При нулевой температуре имеется вырождение, а для конечных температур эта область соответствует парамагнитному состоянию, т.к. у него наибольшая энтропия из всех состояний с нулевой средней проекцией момента.

В результате можно сделать вывод, что вся плоскость (J_2, J_4) делится на области, которые отвечают пара- и ферромагнитным состояниям рассматриваемой модельной системы. При этом в области AOC имеют место непрерывные фазовые переходы как для ненасыщенного,

так и для насыщенного ферромагнетика, а в области СОВ, внутри которой целиком лежит огибающая $O'M$, разрушение ферромагнитного упорядочения сопровождается скачком первой производной свободной энергии $\sigma = -\partial f/\partial h$.

Заслуживает внимания поведение вторых производных свободной энергии $\chi = -\partial^2 f/\partial h^2$ при фазовом переходе I рода (рис.3).

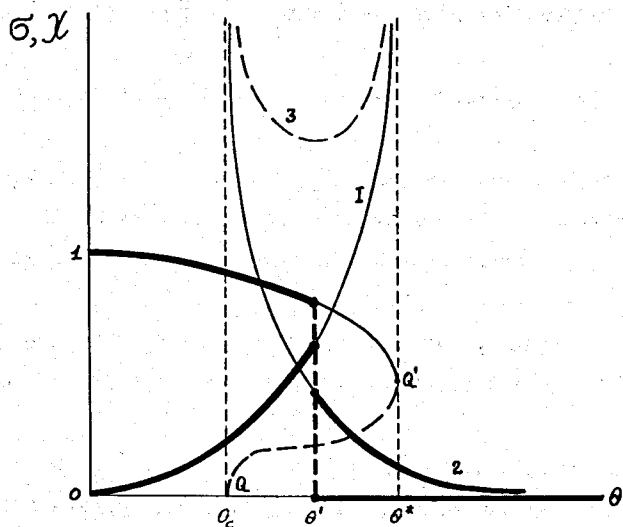


Рис. 3.

Так, двигаясь по лучу (П), мы сначала пересекаем огибающую $O'M$ в точке θ^* , затем границу $O'T$ в точке θ_c . На огибающей обращается в бесконечность восприимчивость χ_1 (граф.1), соответствующая ферромагнитному состоянию. Парамагнитная восприимчивость χ_2 (граф.2) стремится к бесконечности при $\theta_c = T_c$, т.е. на всей прямой $PO'T$. Случай 3 отвечает неустойчивому состоянию, т.е. участку

QQ' на графике первой производной $\sigma(\theta)$. Фазовый переход происходит при температуре $\theta_c < \theta' < \theta^*$, когда совпадают минимумы свободной энергии, соответствующие пара- и ферромагнитным состояниям.

Следовательно, при фазовом переходе I рода имеется скачок, конечный по величине, как у первой, так и у второй производной свободной энергии.

В заключение автор пользуется приятной возможностью выразить благодарность за внимание к работе проф.Н.Н.Боголюбову(мл.).

ЛИТЕРАТУРА

- I Н.Н.Боголибов(мл.). Метод исследования модельных гамильтонианов, "Наука", М., 1974.
- 2 С.С.Лапушкин.Сообщения ОИЯИ, Р4-7738, Дубна, 1974.
- 3 С.С.Лапушкин. Сообщения ОИЯИ, Р4-8508,Дубна, 1974.
- 4 С.С.Лапушкин. Сообщения ОИЯИ, Р17-8820, Дубна, 1975.
- 5 S.S.Lapushkin, B.V.Moshchinsky,V.K.Fedyanin.
Preprint JINR, E4-8816, Dubna, 1975.
- 6 H.Falk, Th.W.Ruijgrok. Physica, 78, 1, 73,1974.
- 7 R.Kubo. Journ.Phys.Soc.Jap.,17,7,1100, 1962.
- 8 R.V.Griffiths, C.A.Hurst, S.Sherman.Journ.Math.Phys.,11,790,1970
- 9 И.Г.Бранков. Сообщения ОИЯИ, Р4-6998, Дубна, 1973.
- 10 В.А.Загребнов. Вестник МГУ (физ.,астр.), 4,461,1973.
- 11 В.М.Матвеев, Э.Л.Нараев. ФТТ, 14, 492,1972.
- 12 D.S.Reedbell, I.S.Jacobs, J.Owen, E.A.Harris,
Phys.Rev.Lett., 11, 10, 1963.

Рукопись поступила в издательский отдел
4 августа 1975 г.