СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р4 - 6998

И.Г. Бранков

ОБ ОЦЕНКЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ ФЕРРОМАГНЕТИКА СО ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ J/N

1973

ЛАБОРАТОРИЯ
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

P4 - 6998

И.Г. Бранков

ОБ ОЦЕНКЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ ФЕРРОМАГНЕТИКА СО ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ J/N

Возможность получить точное в термодинамическом пределе решение стимулировала ряд исследований ферромагнитных модельных систем с постоянным обменным взаимодействием J/N (J - константа взаимодействия, N - число частиц в системе) типа Гейзенберга /1,2/ :

$$\tilde{\mathcal{H}} = -\frac{J}{2N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\vec{\sigma}_i\vec{\sigma}_j - \mu h\sum_{i=1}^{N}\sigma_i^z, \qquad (1)$$

и Изинга /3/

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\sigma_i^z\sigma_j^z - \mu h\sum_{i=1}^{N}\sigma_i^z \quad , \qquad (2)$$

где σ^α $(\alpha = x, y, z)$ - матрицы Паули, μ - магнитный момент частиц, h - внешнее магнитное поле.

Известно, что удельная свободная энергия как для системы (1):

$$\tilde{f}_N(\theta,h) = -\frac{\theta}{N}\ln Sp\, e^{-\frac{\tilde{\mathcal{H}}}{\theta}} \quad , \qquad (3)$$

так и для системы (2):

$$f_N(\theta,h) = -\frac{\theta}{N}\ln Sp\, e^{-\frac{\mathcal{H}}{\theta}} , \qquad (4)$$

в пределе $N\to\infty$ (при постоянной плотности числа частиц), совпадает с удельной свободной энергией в теории молекулярного поля:

$$f^0(\theta,h) = \frac{1}{2}J\bar{C}^2 - \theta\ln 2\,ch\,\frac{J\bar{C}+\mu h}{\theta} \quad , \qquad (5)$$

где $\bar{C} = \bar{C}(\theta,h)$ есть решение уравнения самосогласования:

$$C = th\,\frac{JC+\mu h}{\theta} \quad , \qquad (6)$$

удовлетворяющее условию (см.[2,3]):

$$f^\circ(\bar{C}) = \min_{\{C\}} f^\circ(C) . \tag{7}$$

В работе[2] математически строгим методом была получена оценка сверху для разности удельных свободных энергий (3) и (5):

$$0 \le f^\circ(\theta,h) - \tilde{f}_N(\theta,h) \le \frac{(12J + 6J^{1/3}(\mu|h|))^{2/3}}{N^{2/5}} + \frac{3\theta}{N^{3/5}} , \tag{8}$$

справедливая при любом N и любых значениях температуры θ и внешнего поля h .

В настоящей работе рассмотрим систему типа Изинга (2) и получим оценку близости удельных свободных энергий $f_N(\theta,h)$ и $f^\circ(\theta,h)$. Далее, на основе этой оценки исследуем вопрос о близости двух других термодинамических функций: энтропии $S_N(\theta,h)$ и внутренней энергии $\epsilon_N(\theta,h)$ в расчете на одну частицу, определенных для системы (2) согласно равенствам:

$$S_N(\theta,h) = -\frac{\partial f_N(\theta,h)}{\partial\theta} , \tag{9}$$

$$\epsilon_N(\theta,h) \equiv \frac{1}{N}\langle \mathcal{H} \rangle = f_N(\theta,h) + \theta S_N(\theta,h) , \tag{10}$$

где $\langle\ldots\rangle$ означает усреднение с гамильтонианом (2), соответственно к удельной энтропии $S^\circ(\theta,h)$ и удельной внутренней энергии $\epsilon^\circ(\theta,h)$ в теории молекулярного поля:

$$S^\circ(\theta,h) = -\frac{\partial f^\circ(\theta,h)}{\partial\theta} , \tag{11}$$

$$\epsilon^\circ(\theta,h) = f^\circ(\theta,h) + \theta S^\circ(\theta,h) . \tag{12}$$

Введем для удобства следующие обозначения:

$$I_z = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \sigma_i^z , \tag{13}$$

$$\Delta_N(\theta,h) \equiv f^\circ(\theta,h) - f_N(\theta,h) \tag{14}$$

и перепишем гамильтониан (2) в виде:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} J N I_z^2 - \mu h N I_z . \tag{15}$$

Используя метод работы[2], легко получить:

$$0 \le \Delta_N(\theta,h) \le \frac{1}{2} J \langle (I_z - \langle I_z \rangle)^2 \rangle = \frac{J\theta}{2\mu^2 N}\left(-\frac{\partial^2 f_N(\theta,h)}{\partial h^2}\right) , \tag{16}$$

откуда, интегрируя по h в пределах $h_1 \le h \le h_1 + \ell$ и учитывая, что:

$$-\frac{\partial^2 f_N(\theta,h)}{\partial h^2} \ge 0 , \tag{17}$$

$$-\frac{\partial f_N(\theta,h)}{\partial h} = \mu\langle I_z \rangle , \quad \left|\frac{\partial f_N(\theta,h)}{\partial h}\right| \le \mu ,$$

находим:

$$\begin{aligned} 0 \le \Delta_N(\theta,\xi) &= \frac{1}{\ell}\int_{h_1}^{h_1+\ell} \Delta_N(\theta,h)\,dh \le \\ &\le \frac{J\theta}{2\mu^2 N\ell}\left[-\frac{\partial f_N(\theta,h_1+\ell)}{\partial h} + \frac{\partial f_N(\theta,h_1)}{\partial h}\right] \le \frac{J\theta}{2\mu N\ell} , \end{aligned} \tag{18}$$

где:

$$h_1 < \xi < h_1 + \ell , \quad h_1 \text{ – любое.}$$

С другой стороны, имеем:

$$0 \le \Delta_N(\theta,h_1) \le \max\left|\frac{\partial \Delta_N}{\partial h}\right| \cdot |h_1 - \xi| + |\Delta_N(\theta,\xi)| \le$$

$$\leq 2\mu\ell + \frac{J\theta}{2\mu\ell N} \quad . \tag{19}$$

Минимизируя правую сторону неравенства (19) по ℓ, найдем, что в точке минимума:

$$\ell = \frac{1}{2\mu}\sqrt{\frac{\theta J}{N}} \quad , \tag{20}$$

и окончательная оценка принимает вид:

$$0 \leq \Delta_N(\theta,h) \leq \mathcal{E}_N(\theta) \equiv 2\sqrt{\theta J}\cdot N^{-1/2} \underset{N\to\infty}{\longrightarrow} 0 \quad . \tag{21}$$

Итак, согласно (21), последовательность удельных свободных энергий $\{f_N(\theta,h)\}$ сходится при $N\to\infty$ равномерно по θ и h в любой ограниченной области температур $0\leq\theta\leq\theta_0$.

Прежде чем приступить к исследованию близости производных $\partial f_N/\partial\theta$ и $\partial f^0/\partial\theta$, отметим некоторые необходимые для дальнейшего рассмотрения свойства функции $f_N(\theta,h)$.

1. Согласно определению (4), при любом (конечном) значении N свободная энергия на одну частицу $f_N(\theta,h)$ вещественно аналитична по θ и h во всей области определения [4]:

$$\mathcal{D} = \begin{cases} 0\leq\theta<\infty \\ -\infty<h<\infty \end{cases} . \tag{22}$$

В частности, все ее производные по θ и h непрерывны в $\mathcal{D}$.

2. Удельная свободная энергия $f_N(\theta,h)$ есть выпуклая вверх функция температуры θ во всей области $\mathcal{D}$, поскольку:

$$\frac{\partial}{\partial\theta} f_N(\theta,h) \equiv -S_N(\theta,h) = -\frac{1}{\theta}\left[\frac{1}{N}\langle\mathcal{H}\rangle - f_N(\theta,h)\right] \quad ,$$

в точках X_0 непрерывности функции $\frac{\partial}{\partial X} f^0(X)$, они явно не позволяют провести равномерную оценку малости величин:

$$\left|\frac{\partial}{\partial X}\Delta_N(X_0)\right|$$

для всех $X_0 \in [a,b]$, не привлекая существование и ограниченность производных $\frac{\partial^2}{\partial X^2}\Delta_N(X_0)$. Заметим, однако, что в нашем случае предположение о существовании производной $\frac{\partial^2}{\partial X^2}\Delta_N(X)$ во всех точках X_0 является слишком жестким условием, так как оно исключает из рассмотрения точки излома функции $\frac{\partial}{\partial X} f^0(X)$ (например, критическую точку для функции $\frac{\partial}{\partial\theta} f^0(\theta,h)$), даже при наличии всюду в (a,b) ограниченных односторонних производных $\frac{\partial^2}{\partial X^2} f^0(X+0)$ и $\frac{\partial^2}{\partial X^2} f^0(X-0)$. Более того, до тех пор, пока сходимость последовательности $\{\frac{\partial^2}{\partial X^2} f_N(X)\}$ к конечному пределу не установлена, мы не располагаем сведениями об ее равностепенной ограниченности и тем самым об ограниченности функций $\frac{\partial^2}{\partial X^2}\Delta_N(X)$ при $N\to\infty$.

Учитывая все эти особенности, мы сформулируем следующую общую лемму, достаточную для наших целей.

<u>Лемма.</u> Пусть $\{a_N(X)\}$, $N = 1,2,\ldots$, последовательность непрерывно дифференцируемых на сегменте $a\leq X\leq b$ функций, имеющих в каждой точке интервала (a,b) производные справа второго порядка $a''_N(X+0)$, причем:

1. $|a_N(X)| \leq \mathcal{E}_N(a,b) \underset{N\to\infty}{\longrightarrow} 0$, $\forall X\in[a,b]$.
2. Последовательность вторых производных справа $\{a''_N(X+0)\}$

равностепенно ограничена на интервале (a, b) сверху:

а) $a''_N(x+0) \le L(a,b)$, $(L(a,b)>0)$,

или снизу:

б) $a''_N(x+0) \ge -L(a,b)$ $(L(a,b)>0)$.

Тогда справедливо неравенство:

$$|a'_N(x)| \le 2\sqrt{\varepsilon_N(a,b)L(a,b)}$$

для всех

$$a+\delta' \le x \le b-\delta' \quad , \delta'>0 \; ,$$

и всех $N \ge N'$, где N' и δ' удовлетворяют условию:

$$\varepsilon_{N'}(a,b) \le \frac{\delta'^2}{4} L(a,b).$$

Доказательство: Рассмотрим на сегменте $x \in [\xi, \xi+\ell] \subset [a,b]$ функцию

$$g_\ell(x) = a_N(\xi+\ell) - a_N(x) - (\xi+\ell-x)a'_N(x) -$$

$$-\frac{(\xi+\ell-x)^2}{\ell^2}\left[a_N(\xi+\ell) - a_N(\xi) - \ell a'_N(\xi)\right] ,$$

имеющую по условию леммы в каждой точке интервала $(\xi, \xi+\ell)$ производную справа:

$$g'_\ell(x+0) = -(\xi+\ell-x)a''_N(x+0) + 2\frac{\xi+\ell-x}{\ell^2}\left[a_N(\xi+\ell) - a_N(\xi) - \ell a'_N(\xi)\right]. \quad (\mathrm{I})$$

Так как $g_\ell(\xi) = g_\ell(\xi+\ell) = 0$, то по обобщенной теореме Ролля (см. /6/):

$$\exists\, \xi_1 \in (\xi, \xi+\ell) \;:\; g'_\ell(\xi_1+0) \le 0 ,$$

$$\exists\, \xi_2 \in (\xi, \xi+\ell) \;:\; g'_\ell(\xi_2+0) \ge 0 ,$$

откуда, используя выражение (I), получаем неравенства:

$$\frac{a_N(\xi+\ell) - a_N(\xi)}{\ell} - \frac{\ell}{2}a''_N(\xi_1+0) \le a'_N(\xi) \le \qquad (\mathrm{II})$$

$$\le \frac{a_N(\xi+\ell) - a_N(\xi)}{\ell} - \frac{\ell}{2}a''_N(\xi_2+0). \quad (a \le \xi \le b-\ell).$$

Рассмотрев аналогично функцию $g_{-\ell}(x)$ на сегменте $x \in [\xi-\ell, \xi] \subset [a,b]$, найдем:

$$\exists\, \eta_1 \in (\xi-\ell, \xi) \;:\; g'_{-\ell}(\eta_1+0) \le 0 ,$$

$$\exists\, \eta_2 \in (\xi-\ell, \xi) \;:\; g'_{-\ell}(\eta_2+0) \ge 0 ,$$

откуда:

$$\frac{a_N(\xi) - a_N(\xi-\ell)}{\ell} + \frac{\ell}{2}a''_N(\eta_1+0) \le a'_N(\xi) \le \qquad (\mathrm{III})$$

$$\le \frac{a_N(\xi) - a_N(\xi-\ell)}{\ell} + \frac{\ell}{2}a''_N(\eta_2+0). \quad (a+\ell \le \xi \le b).$$

Допустим, что вторая производная справа $a''_N(x+0)$ ограничена сверху (условие 2а) . Так как по условиям леммы:

$$\pm a_N(x) \ge -\varepsilon_N(a,b), \qquad x \in [a,b] ,$$

$$-a''_N(x+0) \ge -L(a,b), \qquad x \in (a,b) ,$$

то из первого неравенства (II) получаем:

$$-\frac{2\varepsilon_N(a,b)}{\ell} - \frac{\ell}{2}L(a,b) \le a_N'(\xi), \quad a \le \xi \le b-\ell .$$

С другой стороны, подставляя соотношения

$$\pm a_N(x) \le \varepsilon_N(a,b), \qquad x \in [a,b],$$

$$a_N''(x+0) \le L(a,b), \qquad x \in (a,b)$$

во второе неравенство (Ш), имеем:

$$a_N'(\xi) \le \frac{2\varepsilon_N(a,b)}{\ell} + \frac{\ell}{2}L(a,b), \quad a+\ell \le \xi \le b .$$

Итак, мы показали, что в случае (2а) справедлива оценка:

$$|a_N'(\xi)| \le \frac{2}{\ell}\varepsilon_N(a,b) + \frac{\ell}{2}L(a,b) \tag{IУ}$$

для всех ξ и ℓ, удовлетворяющих условию:

$$a+\ell \le \xi \le b-\ell, \quad \ell > 0. \tag{У}$$

Аналогично, с помощью второго неравенства (П) и первого неравенства (Ш) показывается, что оценка (IУ) при условии (У) справедлива и в случае 2б) ограниченной снизу второй производной $a_N''(x+0)$.

Для получения наиболее точной оценки величины $|a_N'(\xi)|$ сверху, минимизируем правую сторону неравенства (Ш) по ℓ. В точке минимума:

$$\ell \equiv \ell_N \equiv \sqrt{\frac{4\varepsilon_N(a,b)}{L(a,b)}},$$

и, следовательно:

$$\frac{\partial}{\partial\theta} S^\circ(\theta,h) \le \frac{3}{2J} \; ; \; (\theta,h) \ne (\theta_c,0). \tag{33}$$

Поскольку в самой критической точке $(\theta_c, 0)$ производная справа равна нулю (см. (25)), то оценка (33) справедлива для правой производной $\frac{\partial}{\partial\theta}S^\circ(\theta+0,h)$ при любых θ и h. Следовательно, возвращаясь к (27), имеем:

$$\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\Delta_N(\theta+0,h) \ge -\frac{3}{2J}, \qquad \begin{matrix} 0 \le \theta < \infty \\ -\infty < h < \infty, \end{matrix} \tag{34}$$

откуда с помощью леммы находим оценку близости удельных энтропий:

$$|S^\circ(\theta,h) - S_N(\theta,h)| \le 2\sqrt{3}\left(\frac{\theta_2}{J}\right)^{1/4} \cdot N^{-1/4}, \tag{35}$$

при

$$N > \frac{256}{9}\left(\frac{J}{\theta_1}\right)^3\left(\frac{\theta_2}{\theta_1}\right) \tag{36}$$

и для всех

$$0 < \theta_1 \le \theta \le \theta_2 - \theta_1, \tag{37}$$

где θ_1 и θ_2 – любые положительные константы $(0 < 2\theta_1 \le \theta_2)$.

Неравенство (35) совместно с (2I) дает оценку близости удельных внутренних энергий:

$$\begin{aligned} &|\epsilon^\circ(\theta,h) - \epsilon_N(\theta,h)| \le \\ &\le |f^\circ(\theta,h) - f_N(\theta,h)| + \theta\,|S^\circ(\theta,h) - S_N(\theta,h)| \le \\ &\le 2\sqrt{\theta_2 J}\cdot N^{-1/2} + 2\sqrt{3}\,\theta_2\left(\frac{\theta_2}{J}\right)^{1/4}\cdot N^{-1/4}, \end{aligned} \tag{38}$$

справедливую при условии (36) и в области температур (37).

Отметим, что аналогичное рассмотрение, основанное на оценке (8), можно провести и для модели (I) типа Гейзенберга. Определив соответственно энтропию и внутреннюю энергию на одну частицу для системы (I), согласно равенствам:

$$\tilde{S}_N(\theta,h) = -\frac{\partial \tilde{f}_N(\theta,h)}{\partial \theta},$$

$$\tilde{\varepsilon}_N(\theta,h) \equiv \frac{1}{N}\langle \tilde{\mathcal{H}} \rangle_{\tilde{\mathcal{H}}} = \tilde{f}_N(\theta,h) + \theta \tilde{S}_N(\theta,h),$$

получим следующее асимптотическое поведение рассматриваемых термодинамических функций:

$$|f^{\circ}(\theta,h) - \tilde{f}_N(\theta,h)| \sim N^{-2/5}, \tag{39}$$

$$|s^{\circ}(\theta,h) - \tilde{S}_N(\theta,h)| \sim N^{-1/5}, \tag{40}$$

$$|\varepsilon^{\circ}(\theta,h) - \tilde{\varepsilon}_N(\theta,h)| \sim N^{-1/5}. \tag{41}$$

Автор считает своим приятным долгом поблагодарить профессора Н.Н.Боголюбова (мл.) за внимание к работе и ценные замечания, а также В.А.Загребнова за многократные полезные обсуждения.

Литература:

I. W.Thirring. in The Many-Body Problems, Mallorca Int. School of Phys., 1969.

2. И.Г. Бранков, А.С. Шумовский. ОИЯИ, Р4-6899, Дубна, 1973.

3. G.Emch, H.Knops. Journ.Math.Phys., II, 3008, 1970.

4. Д. Рюэль. Статистическая механика, "Мир", 1971.

5. R.B.Griffiths. Journ.Math.Phys., 5, 1215, 1964.

6. Л. Шварц. Анализ. т. I, стр. 201, "Мир", 1972 .

Рукопись поступила в издательский отдел
19 марта 1973 года.