СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р4 - 7205

И.Г. Бранков, А.С. Шумовский

О ТОЧНО РЕШАЕМОЙ МОДЕЛИ СО ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ЧАСТИЦ РАЗНЫХ СОРТОВ

1973

ЛАБОРАТОРИЯ
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

P4 - 7205

И.Г. Бранков, А.С. Шумовский

О ТОЧНО РЕШАЕМОЙ МОДЕЛИ СО ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ЧАСТИЦ РАЗНЫХ СОРТОВ

Бранков И.Г., Шумовский А.С. P4 - 7205

О точно решаемой модели со взаимодействием частиц разных сортов

На примере изинговского антиферромагнетика со взаимодействием J/N между подрешетками рассмотрено математически строгое доказательство существования точного в термодинамическом пределе решения для системы со взаимодействием частиц разных сортов.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований
Дубна, 1973

Brankov I.G., Shymovsky A.S. P4 - 7205

On the Exactly Solvable Model with Interaction of Particles of Different Kinds

Mathematically rigorous proof of existence of the exact (in the thermodynamical limit) solution for a system with interaction of particles of different kinds is given by the example of an Ising ahtiferromagnet with the interaction J/N between the sublattices.

Communications of the Joint Institute for Nuclear Research.
Dubna, 1973

В современной статистической физике особое внимание уделяется исследованию модельных задач, допускающих точное решение в термодинамическом пределе ($N \to \infty, V \to \infty$, $\frac{N}{V} = const.$, где N - число частиц и V - объем системы) и позволяющих определять асимптотическое поведение физических величин, таких как свободная энергия и ее производные, корреляционные функции и функции Грина. Особенно значительный успех в этом направлении был достигнут при изучении модельных гамильтонианов типа Н.Н.Боголюбова - Бардина в теории сверхпроводимости[1,2]. Применявшийся здесь метод основан на введении так называемого аппроксимирующего гамильтониана и математически строгом доказательстве совпадения свободных энергий модельной и аппроксимирующей систем в термодинамическом пределе. В дальнейшем в работах Н.Н.Боголюбова (мл.)[3-6] был изучен широкий класс модельных систем как с отрицательным, так и с положительным четырехфермионным парным взаимодействием. Оказалось также, что к числу точно решаемых в термодинамическом пределе модельных задач принадлежат системы, гамильтонианы которых содержат одновременно члены с положительным и отрицательным взаимодействием[5]:

$$H = T + 2V\sum_{\alpha=1}^{m} n_\alpha n_\alpha^+ - 2V\sum_{\alpha=1}^{n} J_\alpha J_\alpha^+. \tag{I}$$

Операторы T, n_α, J_α удовлетворяют здесь некоторым общим дополнительным условиям. Аппроксимирующий гамильтониан для таких систем строится в соответствии с принципом минимакса Н.Н.Боголюбова (мл.)[5].

В то же время представляет значительный интерес обобщение указанных методов для случая модельных гамильтонианов со взаимодействием частиц различных сортов, примером которых могут служить магнетики, состоящие из нескольких взаимодействующих между собой подрешеток.

Рассмотрим простейший случай двух изинговских эквивалентных подрешеток во внешнем магнитном поле h. Число узлов в каждой из подрешеток обозначим через N. Будем считать, что взаимодействие между подрешетками имеет бесконечный радиус (в пределе $N \to \infty$) и интенсивность J/N, где $J = const. > 0$.

Гамильтониан системы зададим в виде:

$$\mathcal{H} = -\mu h \left(\sum_f \sigma_f^{(1)} + \sum_g \sigma_g^{(2)} \right) + \frac{J}{N} \sum_{f,g} \sigma_f^{(1)} \sigma_g^{(2)}. \qquad (2)$$

Здесь μ - магнитный момент атома, $\sigma \equiv \sigma^z$ - z - компонента матриц Паули и верхний индекс указывает сорт частиц, соответствующих подрешеткам.

Из соображений удобства введем следующие обозначения

$$S_1 = \frac{1}{N} \sum_f \sigma_f^{(1)}, \quad S_2 = \frac{1}{N} \sum_g \sigma_g^{(2)}$$

и представим гамильтониан (2) в виде:

$$\mathcal{H} = -\mu h N (S_1 + S_2) + J N S_1 S_2. \qquad (3)$$

Далее перепишем гамильтониан (3) тождественным образом:

$$\mathcal{H} = -\mu h N S + \frac{1}{2} J N S^2 - \frac{1}{2} J N (S_1^2 + S_2^2), \qquad (4)$$

где $S = S_1 + S_2$. Таким образом, мы пришли к модельной системе типа (I), и дальнейшее исследование будет проводиться в соответствии с принципом минимакса Н.Н.Боголюбова (мл.)[5], рассмотренного для случая квазиспиновых систем в работе[7]. Аппроксимирующий гамильтониан для системы (4) выберем в виде

$$\mathcal{H}_0(C, C_1, C_2) = N \sum_{\alpha=1}^{2} (JC - JC_\alpha - \mu h) S_\alpha - $$
$$- \frac{1}{2} J N \left(C^2 - \sum_{\alpha=1}^{2} C_\alpha^2\right). \qquad (5)$$

Тогда, очевидно,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0(C, C_1, C_2) + \tilde{\mathcal{H}}(C, C_1, C_2), \qquad (6)$$

где

$$\tilde{\mathcal{H}}(C, C_1, C_2) = -\frac{1}{2} J N \sum_{\alpha=1}^{2} (S_\alpha - C_\alpha)^2 + \frac{1}{2} J N (S - C)^2.$$

Определим удельную свободную энергию для произвольной N -частичной системы $\mathfrak{H}$ посредством соотношения

$$f[\mathfrak{H}] = -\frac{\theta}{N} \ln Sp\, e^{-\frac{1}{\theta}\mathfrak{H}}$$

и покажем, что в термодинамическом пределе плотности свободных энергий для гамильтонианов $\mathcal{H}$ и $\mathcal{H}_0(C, C_1, C_2)$ совпадают, а также определим числа C, C_1, C_2.

Перепишем исходный модельный гамильтониан (2) в виде:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_+ - \frac{1}{2} J N \sum_{\alpha=1}^{2} S_\alpha^2, \qquad (7)$$

где

$$\mathcal{H}_+ = -\mu h S + \frac{1}{2} J N S^2. \qquad (8)$$

Очевидно,

$$\mathcal{H}_{+} = \mathcal{H}_{+}(C) + \tilde{\mathcal{H}}_{+}(C), \tag{9}$$

где

$$\mathcal{H}_{+}(C) = N(\Im C - \mu h) S - \frac{1}{2}\Im N C^2$$

$$\tilde{\mathcal{H}}_{+}(C) = \frac{1}{2}\Im N(S - C)^2.$$

В ходе дальнейшего доказательства нам понадобится следующая теорема[x].

<u>Теорема Н.Н.Боголюбова.</u> Пусть гамильтониан системы можно представить в виде

$$\mathfrak{H} = \mathfrak{H}_0 + \tilde{\mathfrak{H}}.$$

Тогда имеют место неравенства

$$\frac{1}{N}\langle\tilde{\mathfrak{H}}\rangle_{\mathfrak{H}} \le f[\mathfrak{H}] - f[\mathfrak{H}_0] \le \frac{1}{N}\langle\tilde{\mathfrak{H}}\rangle_{\mathfrak{H}_0}, \tag{10}$$

где $\langle\cdots\rangle$ обозначает среднее значение.

В силу теоремы Н.Н.Боголюбова для системы (9) имеем:

$$\frac{1}{N}\langle\tilde{\mathcal{H}}_{+}(C)\rangle_{\mathcal{H}_{+}} \le f[\mathcal{H}_{+}] - f[\mathcal{H}_{+}(C)] \le \frac{1}{N}\langle\tilde{\mathcal{H}}_{+}(C)\rangle_{\mathcal{H}_{+}(C)}.$$

Заметим, что $\langle\tilde{\mathcal{H}}_{+}(C)\rangle = \frac{1}{2}\Im N\langle(S-C)^2\rangle \ge 0.$

Далее, минимальное значение разности плотностей свободных энергий в этом неравенстве реализуется при выборе наибольшего значения $f[\mathcal{H}_{+}(C)]$, рассматриваемой как функция параметра C. Условие максимума приводит к соотношениям

$$\left.\frac{\partial f[\mathcal{H}_{+}(C)]}{\partial C}\right|_{C=C_0} = 0, \qquad \left.\frac{\partial^2 f[\mathcal{H}_{+}(C)]}{\partial C^2}\right|_{C=C_0} \le 0,$$

[x] Эта теорема была предложена Н.Н.Боголюбовым в 1956 г. в связи с минимальным принципом для свободной энергии. Ее доказательство дано в работе /6/

откуда

$$C_0 = -2\,\mathrm{th}\,\frac{\Im C_0 - \mu h}{\theta}.$$

Заметим, что в отсутствие поля $C_0 = 0$ и $f[\mathcal{H}_{+}(0)] = -\theta\ln 2$; при любых фиксированных значениях h и θ плотность свободной энергии $f[\mathcal{H}_{+}(C)]$ также является ограниченной величиной. Это является условием применения к системе (7) общего метода исследования спиновых задач с отрицательным взаимодействием типа $\Im/N$ /8/. В соответствии с методом работы /6/ имеем неравенство

$$0 \le \min_{(C_1,C_2)} f[\mathcal{H}_0(C_1,C_2)] - f[\mathcal{H}] \le \varepsilon_N, \tag{II}$$

где $\varepsilon_N \sim N^{-1/2}$ /9/ и

$$\mathcal{H}_0(C_1,C_2) = \mathcal{H}_{+} - \Im N\sum_{\alpha=1}^{2} C_\alpha S_\alpha + \frac{1}{2}\Im N\sum_{\alpha=1}^{2} C_\alpha^2.$$

Далее, нетрудно видеть, что

$$\mathcal{H}_0(C_1,C_2) = \mathcal{H}_0(C,C_1,C_2) + \tilde{\mathcal{H}}_{+}(C), \tag{I2}$$

где гамильтониан $\mathcal{H}_0(C,C_1,C_2)$ определяется соотношением (5). Вновь воспользуемся теоремой Н.Н.Боголюбова. Имеем

$$0 \le f[\mathcal{H}_0(C_1,C_2)] - f[\mathcal{H}_0(C,C_1,C_2)] \le \frac{1}{N}\langle\tilde{\mathcal{H}}_{+}(C)\rangle_{\mathcal{H}_0(C,C_1,C_2)}.$$

Фиксируем здесь параметры C_α; тогда наилучшая аппроксимация в этом неравенстве реализуется при выборе наибольшего значения функции $f[\mathcal{H}_0(C,C_1,C_2)]$ по параметру C. Среднее в правой части может быть оценено при помощи теоремы Вика-Блоха-де Доминициса, обобщенной на случай операторов Паули в работе /10/. Получаем

$$0 \leq f[\mathcal{H}_0(C_1,C_2)] - \max_{(C)} f[\mathcal{H}_0(C,C_1,C_2)] \leq \xi_N, \tag{13}$$

где $\xi_N \sim N^{-1}$. Явное выражение для свободной энергии аппроксимирующей системы (5) имеет вид:

$$f[\mathcal{H}_0(C,C_1,C_2)] = -\frac{1}{4} JC^2 + \frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{2}\left\{\frac{1}{2}JC_\alpha^2 - \theta \ln 2ch\frac{J(C-C_\alpha)-\mu h}{\theta}\right\}.$$

Нетрудно видеть, что функция $f[\mathcal{H}_0(C,C_1,C_2)]$ является непрерывной и дифференцируемой по параметру C и достигает своего максимума при некотором конечном значении $\bar{C}$:

$$\max_{(C)} f[\mathcal{H}_0(C,C_1,C_2)] = f[\mathcal{H}_0(\bar{C},C_1,C_2)] .$$

Поэтому необходимое условие максимума приводит к следующему уравнению для определения $\bar{C}$:

$$C = -\sum_{\alpha=1}^{2} th\frac{J(C-C_\alpha)-\mu h}{\theta}, \tag{14}$$

имеющему единственное решение и определяющему $\bar{C}$ неявным образом через параметры C_1 , C_2 . Функция $f[\mathcal{H}_0(\bar{C},C_1,C_2)]$ зависит только от параметров C_α и является непрерывной и дифференцируемой по C_1 , C_2 . Минимизируем теперь неравенство (13) по параметрам C_1 и C_2 . Имеем:

$$0 \leq \min_{(C_1,C_2)} f[\mathcal{H}_0(C_1,C_2)] - \min_{(C_1,C_2)}\max_{(C)} f[\mathcal{H}_0(C,C_1,C_2)] \leq \xi_N .$$

Комбинируя это неравенство с (11), получаем окончательно оценку

$$\left|\min_{(C_1,C_2)} f[\mathcal{H}_0(\bar{C},C_1,C_2)] - f[\mathcal{H}]\right| \leq \xi_N + \varepsilon_N \xrightarrow[N\to\infty]{} 0 . \tag{15}$$

Рассмотрим вопрос о существовании минимума функции $f[\mathcal{H}_0(\bar{C},C_1,C_2)]$ по параметрам C_α . Принимая во внимание выражения (5), (8) и (9), с помощью теоремы Н.Н.Боголюбова находим

$$f[\mathcal{H}_+(\bar{C})] - \frac{1}{2}J + \frac{1}{4}J\sum_{\alpha=1}^{2}(|C_\alpha|-1)^2 \leq f[\mathcal{H}_0(\bar{C},C_1,C_2)] \leq$$

$$\leq f[\mathcal{H}_+(\bar{C})] - \frac{1}{2}J + \frac{1}{4}J\sum_{\alpha=1}^{2}(|C_\alpha|+1)^2,$$

откуда следует существование абсолютного минимума функции $f[\mathcal{H}_0(\bar{C},C_1,C_2)]$ в некоторой точке $(\bar{C}_1,\bar{C}_2)$. Оценка (15) устанавливает совпадение в термодинамическом пределе удельных свободных энергий $f[\mathcal{H}_0(\bar{C},\bar{C}_1,\bar{C}_2)]$ и $f[\mathcal{H}]$. Необходимое условие экстремума приводит к следующим уравнениям для параметров $\bar{C}_\alpha$:

$$C_\alpha = -th\frac{J(\bar{C}-C_\alpha)-\mu h}{\theta} \qquad \alpha = 1,2. \tag{16}$$

Из системы (16) с учетом (14) получаем систему уравнений для определения параметров $\bar{C}_\alpha$:

$$C_\alpha = -th\frac{JC_\beta-\mu h}{\theta} \qquad \alpha \neq \beta \quad , \alpha,\beta = 1,2. \tag{17}$$

Уравнения (17) являются уравнениями молекулярного поля для двухподрешеточного изотропного антиферромагнетика Изинга. Их решения $\bar{C}_\alpha$ представляют собой относительную намагниченность на один спин в соответствующих подрешетках.

Следует отметить, что установленные в работе результаты без труда обобщаются на случай произвольного числа подрешёток. Подобное рассмотрение может быть также проведено в случае, когда учитывается взаимодействие в подрешётках. Такое обобщение ведёт к изменению параметра J в выражениях (4), (5). Заметим, наконец, что предложенный здесь метод исследования задач со взаимодействием частиц различных сортов оказывается справедливым и в гораздо более сложном случае системы гейзенберговского типа.

Полная программа доказательства термодинамической эквивалентности модельной и аппроксимирующей систем предполагает также установление близости всех производных свободных энергий в термодинамическом пределе. Такое доказательство может быть осуществлено на основе следующей леммы /9/.

Лемма. Пусть $\{a_N(x)\}$, $N = 1,2,\dots$, – последовательность непрерывно дифференцируемых на сегменте $a \le x \le b$ функций, имеющих в каждой точке интервала (a, b) производные справа второго порядка $a''_N(x+0)$, причём:

I. $|a_N(x)| \le \varepsilon_N(a,b) \underset{N\to\infty}{\longrightarrow} 0$, $\forall x \in [a,b]$.

II. Последовательность вторых производных справа $\{a''_N(x+0)\}$ равностепенно ограничена на (a, b) сверху

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

или снизу

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

Тогда справедливо неравенство:

$$|a'_N(x+0)| \le 2\sqrt{\varepsilon_N(a,b)\cdot L(a,b)}$$

для всех

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

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

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

Обозначая через a_N разность модельной и аппроксимирующей свободных энергий и устанавливая путём непосредственных вычислений ограниченность соответствующих производных, при помощи леммы легко можно получить близость производных свободных энергий по полю и температуре.

В заключение авторы считают приятным долгом поблагодарить профессора Н.Н.Боголюбова (мл.) за внимание к работе и ценные замечания, а также В.А.Загребнова за полезные обсуждения.

Литература:

1. Н.Н. Боголюбов. ЖЭТФ, 34, 58, 1958.
2. Н.Н. Боголюбов. ОИЯИ Р – 511, Дубна, 1960.
3. Н.Н. Боголюбов (мл.) Препринт ИТФ –67-1, Киев, 1967.
4. Н.Н. Боголюбов (мл.) Препринт ИТФ –68-65, Киев, 1968.
5. Н.Н. Боголюбов (мл.) Ядерная физика, 10, 425, 1969.
6. N.N. Bogolyubov (Jr.) A Method for Studying Model Hamiltonians, Pergamon Press, 1972.
7. Н.Н. Боголюбов (мл.), А.Г. Шумовская, А.С. Шумовский. ИТФ-73-57 Е, Киев , 1973 г.
8. И.Г. Бранков, А.С. Шумовский, В.А. Загребнов. ОИЯИ, Е4-7150, 1973.
9. И.Г. Бранков. ОИЯИ Р4-6998, Дубна, 1973.
10. С.В. Тябликов, В.А. Москаленко. ДАН СССР, 158, 839, 1964.

Рукопись поступила в издательский отдел
28 мая 1973 года.