ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р4 - 7918

И.Г.Бранков, В.А.Загребнов, А.С.Шумовский

О МОДЕЛЬНЫХ СПИНОВЫХ ГАМИЛЬТОНИАНАХ, СОДЕРЖАЩИХ ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩЕЕ ФЕРРОМАГНИТНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

1974

ЛАБОРАТОРИЯ
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Р4 - 7918

И.Г.Бранков, В.А.Загребнов, А.С.Шумовский

О МОДЕЛЬНЫХ СПИНОВЫХ ГАМИЛЬТОНИАНАХ, СОДЕРЖАЩИХ ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩЕЕ ФЕРРОМАГНИТНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Направлено в Physica

В последнее время возник значительный интерес к изучению модельных гамильтонианов, содержащих, наряду с короткодействующим, дальнодействующее взаимодействие бесконечного радиуса /1,2/. При этом из физических соображений предполагалось, что дальнодействующая часть гамильтониана может быть рассмотрена в рамках теории эффективного поля. Это послужило толчком для настоящего строгого изучения спиновых систем (со спином 1/2), описываемых гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_S - N\sum_{\alpha=1}^{3} h_\alpha I_\alpha . \tag{1}$$

Здесь $\mathcal{H}_S$ представляет собой общий N - частичный гамильтониан, удовлетворяющий условию $\|[\mathcal{H}_S, I_\alpha]\| \leq K$ ($\alpha = 1,2,3$), где $\| \dots \|$ обозначает норму коммутатора, $K < \infty$ не зависит от N и $I_\alpha = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \sigma_i^\alpha$, причем σ_i^α - матрицы Паули в i-ом узле, так что I_α удовлетворяют условиям: $\|I_\alpha\| \leq 1$, $\|[I_\alpha, I_\beta]\| \leq \frac{2}{N}$. Мы полагаем, что дальнодействующая часть $\mathcal{H}_L$ гамильтониана (1) описывает ферромагнитное взаимодействие вида

$$\mathcal{H}_L = -\frac{1}{2} N \sum_{\alpha=1}^{3} J_\alpha I_\alpha^2 , \tag{2}$$

где J_α - положительные параметры взаимодействия. Последний член в правой части (1) описывает магнитную энергию системы, помещенной в магнитное поле $\{h_\alpha\}$.

Покажем, каким образом можно строго применить метод "термодинамически эквивалентного гамильтониана"/3-5/ в настоящем случае x).

Введем набор вариационных параметров $\{C_\alpha\}$ и перепишем гамильтониан (I) в форме $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0(C_\alpha)+\mathcal{H}_I(C_\alpha)$, где

$$\mathcal{H}_0(C_\alpha) \equiv \mathcal{H}_S - N\sum_{\alpha=1}^{3} (h_\alpha + J_\alpha C_\alpha) I_\alpha + \tfrac{1}{2} N \sum_{\alpha=1}^{3} J_\alpha C_\alpha^2 \;, \tag{3}$$

$$\mathcal{H}_I(C_\alpha) \equiv -\tfrac{1}{2} N \sum_{\alpha=1}^{3} J_\alpha (I_\alpha - C_\alpha)^2 \,. \tag{4}$$

Для того, чтобы исследовать вклад от остаточного гамильтониана $\mathcal{H}_I$ в свободную энергию системы $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I$ мы воспользуемся теоремой Н.Н.Боголюбова (см.доказательство в работе /6/) которая дает

$$-\frac{1}{N}\langle \mathcal{H}_I\rangle_0 \le f_N[\mathcal{H}_0] - f_N[\mathcal{H}] \le -\frac{1}{N}\langle\mathcal{H}_I\rangle \;. \tag{5}$$

Здесь f_N - плотность свободной энергии, а $\langle\ldots\rangle_0$, $\langle\ldots\rangle$ означают статистические средние с гамильтонианами $\mathcal{H}_0$ и $\mathcal{H}$, соответственно. Учитывая явное выражение для $\mathcal{H}_I$ (4), имеем

$$0 \le f_N[\mathcal{H}_0] - f_N[\mathcal{H}] \le \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{3} J_\alpha \langle (I_\alpha - C_\alpha)^2\rangle \;. \tag{6}$$

Как видно из (6), наилучшая аппроксимация к точному термодинамическому потенциалу $f_N[\mathcal{H}]$ получается, когда вариационные параметры $\{C_\alpha\}$ удовлетворяют условию абсолютного минимума для $f_N[\mathcal{H}_0(C_\alpha)]$ по $\{C_\alpha\}$: $f_N[\mathcal{H}_0(\bar C_\alpha)] = \min_{\{C_\alpha\}} f_N[\mathcal{H}_0(C_\alpha)]$. Это приводит к следующим уравнениям самосогласованного поля:

x) Следует отметить, что система, описываемая гамильтонианом $\mathcal{H}_L - N\sum_{\alpha=1}^{3} h_\alpha I_\alpha$, рассмотрена строго в работе /6/.

$\bar C_\alpha = \langle I_\alpha\rangle_0$, $\alpha = 1,2,3$, в правой части которых усреднение проводится по $\mathcal{H}_0(\bar C_\alpha)$.

Основная проблема теперь состоит в строгом доказательстве термодинамической эквивалентности $\mathcal{H}_0(\bar C_\alpha)$ и $\mathcal{H}$. С этой целью воспользуемся мажорационной техникой Н.Н.Боголюбова (мл.)/3/. Из работы /6/ видно, что

$$0 \le f_N[\mathcal{H}_0(\bar C)] - f_N[\mathcal{H}] \equiv \Delta_N(\theta,h_\alpha) \le f_N[\mathcal{H}_0(\langle I_\alpha\rangle)] - f_N[\mathcal{H}] \le \frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{3} J_\alpha \langle (I_\alpha - \langle I_\alpha\rangle)^2\rangle \;. \tag{7}$$

Отсюда, следуя /3/, находим, что разность удельных свободных энергий $\Delta_N(\theta,h_\alpha)$ мажорируется выражением

$$\frac{\theta}{2N}\sum_{\alpha=1}^{3} J_\alpha \left(-\frac{\partial^2 f_N[\mathcal{H}]}{\partial h_\alpha^2}\right) + \left(\frac{1}{2N}\right)^{2/3}\sum_{\alpha=1}^{3} J_\alpha \|[\mathcal{H},I_\alpha]\|^{2/3}\left(-\frac{\partial^2 f_N[\mathcal{H}]}{\partial h_\alpha^2}\right)^{2/3}, \tag{8}$$

где θ - температура системы.

Верхняя грань для среднего от $\Delta_N(\theta,h_\alpha)$ по малой области Ω_ℓ в пространстве $\{h_1,h_2,h_3\}$: $\Omega_\ell = \bigotimes_{\alpha=1}^{3} [h_\alpha, h_\alpha+\ell]$, окружающей точку $\{\xi_\alpha\} \in \Omega_\ell$, определяется выражением

$$\Delta_N(\theta,\xi_\alpha) = \frac{1}{\ell^3}\iiint_{\Omega_\ell}\prod_{\alpha=1}^{3} dt_\alpha \Delta_N(\theta,t_\alpha) \le 3J_{max}\left\{\frac{\theta}{N\ell} + \left[\frac{L(h+\ell)}{\ell N}\right]^{2/3}\right\}, \tag{9}$$

при выводе которого мы воспользовались соотношением

$$0 \le \frac{1}{\ell^3}\iiint_{\Omega_\ell}\prod_{\alpha=1}^{3} dt_\alpha\left(-\frac{\partial^2 f_N[\mathcal{H}]}{\partial h_\beta^2}\right) = \frac{1}{\ell^3}\iint \prod_{\alpha\ne\beta} dt_\alpha \left[\langle I_\beta\rangle\big|_{\ell+h_\beta} - \langle I_\beta\rangle\big|_{h_\beta}\right] \le \frac{2}{\ell} \;,$$

$$\|[\mathcal{H},I_\alpha]\| \le K + 2(J_{max}-J_{min}) + 4|h| \equiv L(h) \;,$$

$(J_{max}\,(J_{min})$ обозначают максимальную (минимальную) из величин $\{J_\alpha\})$, а к последнему члену применили интегральное неравенство Гёльдера. В соответствии с оценкой

$$\Delta_N(\theta,h_\alpha) \leqslant \sum_{\alpha=1}^{3} \max\left|\frac{\partial\Delta_N}{\partial h_\alpha}\right| |h_\alpha-\xi_\alpha| + \Delta_N(\theta,\xi_\alpha) \leqslant 6\ell + \Delta_N(\theta,\xi_\alpha) \qquad (10)$$

находим ,с учетом (9) ,

$$|\Delta_N(\theta,h_\alpha)| \leqslant 6\ell + 3J_{max}\left\{\frac{\theta}{\ell N} + \left[\frac{L(h)}{\ell N} + \frac{4}{N}\right]^{2/3}\right\} . \qquad (11)$$

Так как последнее неравенство справедливо для всех $\ell > 0$ а левая часть не зависит от ℓ , то оценку можно улучшить выбором ℓ . Тогда для ℓ получаем $(N \gg 1)$ $\ell = J_{max} N^{-2/5}$, а для $|\Delta_N(\theta,h_\alpha)|$ оценку

$$|\Delta_N(\theta,h_\alpha)| \leqslant \frac{3J_{max}}{N^{2/5}}\left\{2 + \left[\frac{L(h)}{J_{max}} + \frac{4}{N^{2/5}}\right]^{2/3}\right\} + \frac{3\theta}{N^{3/5}} , \qquad (12)$$

которая доказывает равномерную сходимость $f_N[\mathcal{H}]$ к $f_N[\mathcal{H}_0]$ при $N \to \infty$ на любом компактном множестве в пространстве $\mathfrak{H} = \{\theta, h_1, h_2, h_3\}$.

Авторы выражают свою искреннюю благодарность проф. Н.Н.Боголюбову (мл.) за ценные замечания и полезные обсуждения.

Литература:

1. J.F.Nagle. Phys.Rev. A2(1970) 2124.
2. J.S.Hoye, Phys.Rev. B6, (1972) 4261.
3. N.N.Bogolubov (Jr.), A Method for Studying Model Hamiltonians (Pergamon Press, 1972).
4. G.Wentzel, Phys.Rev., 120 (1960) 1572.
5. M.Girardeau, J.Math.Phys. 3 (1962) 131.
6. J.G.Brankov, A.S.Shumovsky , JINR P4-6899, Dubna, 1973.
7. S.V.Tyablikov, Methods in the Quantum Theory of Magnetism. (Plenum Press, New York, 1967).

Рукопись поступила в издательский отдел
6 мая 1974 года.