СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р4 - 8508

С.С.Лапушкин

ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ СПИНОВОЙ МОДЕЛИ С ГАМИЛЬТОНИАНОМ КЛАСТЕРНОГО ТИПА

1974

ЛАБОРАТОРИЯ
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

P4 - 8508

С.С.Лапушкин

ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ СПИНОВОЙ МОДЕЛИ С ГАМИЛЬТОНИАНОМ КЛАСТЕРНОГО ТИПА

Впервые в квантовой статистической механике кластерные разложения были введены Каном и Уленбеком [I] и с успехом применяются до настоящего времени. Интересные результаты при изучении кластерных свойств корреляционных функций получены также и для классических газов [2] . В настоящей работе исследуется на основе строгого математического метода, разработанного в [3], спиновая модель с гамильтонианом кластерного типа, учитывающим наряду с парным взаимодействием следующие члены разложения электростатического взаимодействин электронов, ответственного за магнетизм [4] . В работе [5] показано, что члены высших порядков дают малый вклад при условии малости перекрывания волновых функций, описывающих состояния электронов в узлах кристаллической решетки. Однако учет этих членов может оказаться важным в области, где существенно кооперативное поведение системы: при фазовом переходе. Кроме того, возможны и другие случаи, когда представляют интерес члены кластерного типа.

Так, многоспиновое взаимодействие может возникнуть при учете связи спиновых и решеточных степеней свободы, т.е. спин-фононного взаимодействия. В работе[6] было показано, что если ограничиться первым порядком разложения обменного интеграла по смещениям, то возникающие в гамильтониане члены, описывающие взаимодействие спиновых и фононных подсистем, могут быть ликвидированы каноническим преобразованием, сходным с тем, которое было предложено в[7] для одномерных систем. Однако в двухмерном и трехмерном случаях это приводит уже к появлению в гамильтониане "четверного" взаимодействия между спинами – своеобразного кластерного взаимодействия.

Покажем математически строго, используя подход Н.Н.Боголюбова(мл.)[8], что спиновая модель с гамильтонианом кластерного типа имеет точное решение в смысле обычного предельного перехода статистической механики $V \to \infty$. Положим $V = \mathcal{N}$, и для того, чтобы акцентировать внимание на существенных моментах, детально разберем случай кластерной модели Изинга. Для аналогичной модели Гейзенберга исследование усложняется громоздкими алгебраическими выкладками, обусловленными коммутационными соотношениями.

Гамильтониан кластерной модели Изинга запишем в виде [4]

$$H = -\mu h \sum_{i=1}^{N} S_i^z - \sum_{n=1}^{\mathcal{K}} \frac{1}{(2n)!} \sum_{j_1,\dots,j_{2n}} G(j_1,j_2,\dots,j_{2n}) S_{j_1}^z S_{j_2}^z \dots S_{j_{2n}}^z, \quad (I)$$

где h - внешнее поле, μ - магнитный момент, S_i^z - z - компонента спина в i-ом узле. Гамильтониан инвариантен относительно отражений $S_i^z \to -S_i^z$ $(h=0)$, т.к. кластеры составлены из четного числа спинов. $\mathcal{K}$ - число кластеров, суммирование производится по комбинациям не равных друг другу индексов (см.[4]). Мы будем рассматривать случай дальнодействия с одинаковой интенсивностью для любой пары взаимодействующих спинов.

Обозначим

$$\mathcal{J}_{2n} = \frac{N^{2n-1}}{(2n-1)!} G(j_1,j_2,\dots,j_{2n}); \ |\mathcal{J}_{2n}| \le I < \infty. \quad (2)$$

Используя оператор $S = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} S_i^z$ и (2), гамильтониан (I) можно переписать в виде

$$H = -\mu h \mathcal{N} S - \mathcal{N} \sum_{n=1}^{\mathcal{K}} \frac{\mathcal{J}_{2n}}{2n} S^{2n}. \quad (3)$$

Гамильтониан аппроксимирующей модели H_0 построим в соответствии с основными принципами самосогласованного (молекулярного) поля, рассматривая взаимодействие одного спина со всем остальным коллективом спинов в каждом члене кластерного взаимодействия путем введения некоторого эффективного поля $h_{эфф.}$, зависящего от числа кластеров. При этом в гамильтониане H вместо члена, описывающего взаимодействие между спинами, произведем следующую замену: фиксируем спин $\hat{S}_{j_k}$, а все остальные $(2n-1)$ спинов в каждом кластере заменяем на C - числа, т.е. $C_{j_1} \dots C_{j_{k-1}} C_{j_{k+1}} \dots C_{j_{2n}} \cdot \hat{S}_{j_k}$, и добавляем член $\sum_{i \ne j_k} C_{j_1} \dots C_{j_{i-1}} C_{j_{i+1}} \dots C_{j_{2n}} \cdot (\hat{S}_{j_i} - C_{j_i})$, содержащий оставшиеся $(2n-1)$ спинов, который, как будет показано ниже, дает нулевой вклад в энергию аппроксимирующей системы. Иными словами, гамильтониан H_0 построен таким образом, что каждый из спинов кластера взаимодействует с остальными, как с C - числами, но вклад в энергию получается не равным нулю лишь от одного спина.

В результате, с учетом полной идентичности всех спинов, аппроксимирующий гамильтониан имеет вид

$$H_0 = -h_{эфф.} \mathcal{N} S - \mathcal{N} \sum_{n=1}^{\mathcal{K}} \frac{\mathcal{J}'_{2n}}{2n} C^{2n}, \quad (4)$$

где $\frac{\mathcal{J}'_{2n}}{2n} = \frac{\mathcal{J}_{2n}}{2n} - \mathcal{J}_{2n}$, а $h_{эфф.} = \mu h + \sum_{n=1}^{\mathcal{K}} \mathcal{J}_{2n} C^{2n-1}$. (5)

Как известно[3], два гамильтониана термодинамически эквивалентны, если в пределе $V = \mathcal{N} \to \infty$ определяемые ими плотности свободных энергий совпадают. В этом случае можно асимптотически точно (при $\mathcal{N} \to \infty$) построить свободную энергию системы.

Покажем, что при данном выборе аппроксимирующего гамильтониана (4) он асимптотически эквивалентен исходному гамильтониану (3).

Представим (3) в виде суммы H_o и "остаточного" гамильтониана H_1 :

$$H = H_o + H_1 ,$$

$$H_1 = -\mathcal{N}\sum_{n=1}^{\mathcal{K}} \frac{\mathcal{J}_{2n}}{2n}\{S^{2n} - 2nSC^{2n-1} + (2n-1)C^{2n}\} = -\mathcal{N}(S-C)^2\sum_{n=1}^{\mathcal{K}} a_{2n}(S,C) , \qquad (6)$$

где

$$a_{2n}(S,C) = \frac{\mathcal{J}_{2n}}{2n}\{S^{2n-2} + 2CS^{2n-3} + 3C^2S^{2n-4} + \ldots + (2n-1)C^{2n-2}\}. \qquad (7)$$

Для дальнейшего нам потребуется неравенство Н.Н.Боголюбова (док.-во см. [3]), относящееся к произвольным эрмитовым гамильтонианам H_o и H_1 :

$$-\frac{1}{\mathcal{N}}\langle H_1\rangle_o \leq f[\mathcal{H}_o] - f[\mathcal{H}] \leq -\frac{1}{\mathcal{N}}\langle H_1\rangle . \qquad (8)$$

Здесь $f[\mathcal{H}_o]$ и $f[\mathcal{H}]$ - плотности свободных энергий, соответствующие гамильтонианам H_o и H , а $\langle\ldots\rangle_o$ и $\langle\ldots\rangle$ обозначают термодинамические средние соответственно по каждому из этих гамильтонианов.

Вспомним, что при построении аппроксимирующего гамильтониана (4) мы ввели произвольные параметры - C - числа, которые затем лишили индексов, т.к. все узлы в нашей модели идентичны. Поэтому будем считать $H_o = \mathcal{H}_o(C)$ функцией некоторого параметра C ,

значение которого выбираем из условия минимума разности $\delta_\mathcal{N} = f[\mathcal{H}_o(C)] - f[\mathcal{H}]$ в неравенстве (8). Нетрудно видеть, что это условие аналогично условию $\langle\frac{\partial}{\partial C}\mathcal{H}_o(C)\rangle_o = 0$ и приводит к уравнению для определения параметра C ,т.е. к уравнению самосогласования:

$$C = \langle S\rangle_o . \qquad (9)$$

При учете аддитивности гамильтониана $H_o = \sum_{i=1}^{N_T} H_o(i)$ (см. работу [10]) очевидно, что при любом значении C из (9) левая часть неравенства (8) обращается в нуль. Тогда

$$0 \leq \delta_\mathcal{N}(h,\theta) \leq \langle a_\mathcal{K}(S,C)(S-C)^2\rangle , \qquad (10)$$

где $a_\mathcal{K}(S,C) = \sum_{n=1}^{\mathcal{K}} a_{2n}(S,C)$,а $\delta_\mathcal{N} = \delta_\mathcal{N}(h,\theta)$, т.к. термодинамический потенциал есть функция внешнего поля h и температуры θ .

Преобразуем (10) с помощью неравенства Боголюбова-Шварца:

$$0 \leq \delta_\mathcal{N}(h,\theta) \leq a\langle(S-C)^4\rangle^{1/2} . \qquad (11)$$

При оценке нормы $\|a_\mathcal{K}\| \leq a$ используем тот факт, что $|C| \leq \|S\| \leq 1$ и обменные константы ограничены по модулю (2) числом I, причем $I/2 = a/\mathcal{K}^2$. Параметр C здесь можно положить равным $\langle S\rangle$, не нарушая неравенства.

Вместе с тем нетрудно показать, что

$$\frac{\partial^k f}{\partial h^k} = -(\beta\mathcal{N})^{k-1}\langle(S - \langle S\rangle)^k\rangle \quad ,\text{где}$$

β - величина, обратная температуре θ .

Затем, принимая во внимание, что при фиксированном $\mathcal{N}$ термодинамический потенциал является аналитической функцией магнитного поля h, дальнейшее доказательство проведем с неравенством (II), представив его в следующем виде:

$$0 \leq \delta_{\mathcal{N}}(h,\theta) \leq a\,(\beta\mathcal{N})^{-3/2}\left(-\frac{\partial^4 f}{\partial h^4}\right)^{1/2}. \qquad (12)$$

Интегрируем (I2) по h на произвольном отрезке от h_1 до $h_1+\ell$ и для оценки справа используем неравенство Гельдера [9] :

$$\frac{1}{\ell}\int_{h_1}^{h_1+\ell}\left(-\frac{\partial^k f}{\partial h^k}\right)^{1/n} dh \leq \left\{\frac{1}{\ell}\int_{h_1}^{h_1+\ell}\left(-\frac{\partial^k f}{\partial h^k}\right)dh\right\}^{1/n}. \qquad (13)$$

Повторяя указанную операцию три раза и применяя теорему о среднем сначала к интегралу по h_2, затем к интегралам по h_1 и h, получаем

$$\delta_{\mathcal{N}}(\xi_3,\theta) \leq a\varphi_{\mathcal{N}}(\ell,\theta) \leq a\left(\frac{\mathcal{N}\ell}{2\theta}\right)^{-3/2}, \qquad (14)$$

для простоты положив, что $\left|\frac{\partial f}{\partial h}\right| \leq 1$. Здесь ℓ - длина промежутка интегрирования - играет роль произвольного положительного параметра.

С другой стороны, имеем

$$\delta_{\mathcal{N}}(h,\theta) \leq 3\ell + a\varphi_{\mathcal{N}}(\ell,\theta), \qquad (15)$$

если учесть, что $\left|\frac{\partial}{\partial h}\delta_{\mathcal{N}}(h,\theta)\right| \leq 2$.

Минимизируя правую часть (I5) по параметру ℓ, см. [II], найдем окончательную оценку:

$$0 \leq f_0(h,\theta) - f_{\mathcal{N}}(h,\theta) \leq \mathcal{E}_{\mathcal{N}}. \qquad (16)$$

В этой формуле $\mathcal{E}_{\mathcal{N}} = \mathcal{E}\left(\frac{1}{\mathcal{N}}\right) = \frac{\alpha(\theta)}{\mathcal{N}^{3/5}}$, (I7)

где

$$\alpha(\theta) = 5\,(2\theta)^{3/5}\left(\frac{a}{2}\right)^{2/5}$$

зависит только от температуры и определяет равномерную сходимость функции $f_{\mathcal{N}}(h,\theta)$ к $f_0(h,\theta)$ по θ в интервале $(0 \leq \theta \leq \theta_0)$, где θ_0 -любая фиксированная температура.

Таким образом, из (I6) и (I7) следует, что в термодинамическом пределе плотности свободных энергий модельной и аппроксимирующей систем совпадают. Легко видеть, что оценка (I7) несколько улучшает оценку $\mathcal{N}^{-1/2}$, полученную в работе [II].

Запишем теперь в явном виде уравнение самосогласования. Учитывая трансляционную инвариантность $\langle S\rangle_0 = \langle S_i^z\rangle_0$, можно сказать, что параметр C в уравнении (9) есть средняя намагниченность на один узел кристаллической решетки. С другой стороны, аддитивность гамильтониана $H_o=\sum_{i=1}^{N_T} H_o(i)$ [10] приводит к тому, что совпадают средние по полному гамильтониану H_o и одночастичному $H_o(i)$. Отсюда

$$C=\langle S_i^z \rangle_{H_o}=\langle S_i^z \rangle_{H_o(i)}, \tag{18}$$

где

$$H_o(i)=-h_{эфф.}S_i^z-\sum_{n=1}^{\mathcal{K}}\frac{\mathcal{I}_{2n}}{2n}C^{2n}. \tag{19}$$

Окончательно, из (18) и (19) получаем

$$C=th\,\beta h_{эфф.}=th\left\{\frac{\mu h+\sum_{n=1}^{\mathcal{K}}\mathcal{I}_{2n}C^{2n-1}}{\Theta}\right\}. \tag{20}$$

Для того, чтобы выяснить термодинамические свойства системы (I), надо провести алгебраическое исследование уравнения(20). Попытка исследовать уравнение типа (20) сделана в ряде работ, например, для случая $\mathcal{K}=2$ в работе [12], однако дальнейшее подробное исследование уравнения самосогласования представляет несомненный интерес.

В заключение автор считает своим приятным долгом выразить благодарность Н.Н.Боголюбову (мл.) за внимание к работе и В.К. Федянину за ценные обсуждения.

Литература

I. B.Kahn, G.E.Uhlenbeck. Physica, 5, 399,1938.
2. D.Ruelle. Cluster Property of the Correlation Functions of Classical Gases,Rev.Mod.Phys.,36,1964.
3 N.N.Bogolubov (Jr.). A Method for Studying Model Hamiltonians, Pergamon Press, 1972.
4. С.В.Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма,М.,Наука, 1965.
5. T.Arai.Phys.Rev.,126,471,1962.
6. H.Bolton, S.Lee. Journ. Phys.(C), 3, 1433,1970.
7. D.C.Mattis, T.D.Schultz.Phys.Rev.,129,175,1963.
8. Н.Н.Боголюбов(мл.). Препринт ИТФ-67-I, Киев, 1967.
9. А.Н.Колмогоров, С.В.Фомин. Элементы теории функций и функционального анализа, М., Наука, 1972.
10. С.С.Лапушкин. Сообщения ОИЯИ, Р4-7738, Дубна, 1974.
11. И.Г.Бранков. Сообщения ОИЯИ, Р4-6998, Дубна, 1973.
12. В.А.Загребнов.Вестник МГУ (физ.астр.), 4,461,1973.

Рукопись поступила в издательский отдел
31 декабря 1974 года.