ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

4 - 7626

БРАНКОВ
Йордан Георгиев

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕКОТОРЫХ СПИНОВЫХ ГАМИЛЬТОНИАНОВ ДЛЯ ЗАДАЧ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Специальность 01.04.02 - теоретическая и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

(Диссертация написана на русском языке)

Дубна 1973

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук профессор

Н.Н.БОГОЛЮБОВ (мл.)

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук А.В.СВИДЗИНСКИЙ,

кандидат физико-математических наук Б.И.САДОВНИКОВ.

Ведущее научно-исследовательское учреждение:

Научно-исследовательский институт физической химии им. Л.Я.Карпова (Москва).

Автореферат разослан "14" янв. 1974 года.

Защита диссертации состоится " " 1974 года на заседании Ученого совета Лаборатории теоретической физики.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета

Р.А.АСАНОВ

4 - 7626

БРАНКОВ

Йордан Георгиев

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕКОТОРЫХ СПИНОВЫХ ГАМИЛЬТОНИАНОВ ДЛЯ ЗАДАЧ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Специальность 01.04.02 - теоретическая и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

(Диссертация написана на русском языке)

К наиболее актуальным проблемам статистической физики относится построение строгой, законченной теории критических явлений. При этом особое значение имеет разработка математических методов исследования модельных статистических систем, претерпевающих фазовые переходы.

Заметим, что в настоящее время существует весьма ограниченное число точно решенных модельных задач, описывающих указанный круг явлений. К ним в первую очередь относится двухмерная модель Изинга, решение которой было дано впервые Онсагером/1/. В качестве примера системы, допускающей точное решение в трехмерном случае, укажем на сферическую модель Берлина-Кэца/2/.

В методическом отношении следует особенно выделить достигнутый за последнее десятилетие значительный успех в изучении определенного класса модельных систем, описывающих фазовый переход в сверхпроводниках,- модели Бардина-Купера-Шриффера (БКШ) /3-5/ и ее обобщений/6,7/. Применявшийся здесь метод/5-7/ основывается на введении так называемого "аппроксимирующего гамильтониана", позволяющего получить точное решение для термодинамической задачи. Такой подход включает в себя доказательство термодинамической эквивалентности модельной и аппроксимирующей систем. В работах Н.Н.Боголюбова (мл.)/6,7/ был развит эффективный метод для математически строгого исследования систем, обобщающих модель БКШ, и, в частности, доказана важная теорема о совпадении в термодинамическом пределе плотностей удельных свободных энергий аппроксимирующей и модельной систем, справедливая для произвольных температур/6/.

Определенное сходство, существующее в математической формулировке задач сверхпроводимости и магнитных систем, содержащих инфинитезимально малое дальнодействующее взаимодействие между спинами (см., например, квазиспиновую формулировку модели БКШ, данную Тиррингом[8]), указывает на возможность распространения развитых в первом случае методов на этот класс спиновых гамильтонианов. Хотя получаемые при этом термодинамические свойства системы совпадают с известными в теории молекулярного поля, ценность представляет уже сам факт доказательства того, что результаты последней являются точными для некоторой микроскопической модели. Кроме того, использование упомянутых методов позволяет провести детальное исследование вопроса о сходимости физических величин модельной и аппроксимирующей систем друг к другу при переходе к термодинамическому пределу, что служит развитию представлений о математическом механизме фазовых переходов.

В настоящей диссертации рассматривается класс спиновых модельных гамильтонианов со взаимодействием вида J/N, где J – постоянная взаимодействия, N – число частиц в системе; приводятся методы исследования поведения ряда физических характеристик системы в процессе перехода к пределу $N\to\infty$.

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и приложения.

Во введении дан краткий обзор современного состояния изучаемых вопросов, а также представлен план изложения материала.

В главе I, в соответствии с методами работ[6,7], рассматривается классическая модель ферромагнетика типа Изинга, характеризуемая гамильтонианом

$$\mathcal{H}_N = -\frac{J}{2N}\sum_{i,j=1}^{N}\sigma_i^z\sigma_j^z - \mu h\sum_{i=1}^{N}\sigma_i^z \quad , \; J>0 \, , \qquad (I)$$

где μ – магнитный момент спина ($S = 1/2$), h – внешнее магнитное поле, σ_i^z – оператор z -компоненты i -го спина; суммирование производится по всем N узлам решетки.

В § I строится форма аппроксимирующего (термодинамически эквивалентного) гамильтониана для рассматриваемой модели (I):

$$\mathcal{H}_N^a(C) = -\sum_{i=1}^{N}(JC+\mu h)\sigma_i^z + \frac{1}{2}JNC^2 \, , \qquad (2)$$

где значение параметра C определяется из принципа минимальности удельной свободной энергии[x)] аппроксимирующей системы (2):

$$\min_{(C)} f_N[\mathcal{H}_N^a(C)] = f_N[\mathcal{H}_N^a(\bar{C})] \, .$$

§ 2 посвящен доказательству асимптотической близости плотностей свободных энергий $f_N[\mathcal{H}_N]$ и $f_N[\mathcal{H}_N^a(\bar{C})]$. Применяемая мажорационная техника позволяет получить равномерную по магнитному полю h и температуре θ, на любом ограниченном интервале температур, оценку[9]:

$$\left| f_N[\mathcal{H}_N] - f_N[\mathcal{H}_N^a(\bar{C})] \right| \leqslant 2\sqrt{\theta J}\, N^{-1/2} \, . \qquad (3)$$

Здесь функция

$$f_N[\mathcal{H}_N^a(\bar{C})] = \frac{1}{2}J\bar{C}^2 - \theta \ln 2\operatorname{ch}\frac{J\bar{C}+\mu h}{\theta}$$

совпадает с плотностью свободной энергии в теории молекулярного поля.

---

x) Удельная свободная энергия для N -частичной системы с гамильтонианом Γ_N определяется соотношением

$$f_N[\Gamma_N] = -\frac{\theta}{N}\ln Sp\, e^{-\Gamma_N/\theta} \, ,$$

где θ – температура системы.

Метод, позволяющий исследовать вопрос о равномерной сходимости (при $N\to\infty$) производных от плотности свободной энергии по термодинамическим параметрам θ и h в разных областях значений температуры и магнитного поля, развит в § 3. С помощью сформулированной здесь леммы I (доказательство приведено в Приложении) получены оценки для асимптотической близости энтропии $S_N(\theta,h)$ и внутренней энергии $\epsilon_N(\theta,h)$ (в расчете на одну частицу для системы (I)) к соответствующим функциям $S^a(\theta,h)$ и $\epsilon^a(\theta,h)$ в теории молекулярного поля/9/:

$$|S_N(\theta,h)-S^a(\theta,h)| \le L_1 N^{-1/4} ,$$

$$|\epsilon_N(\theta,h)-\epsilon^a(\theta,h)| \le L_2 N^{-1/4}\left(1+O\left(\frac{1}{N^{1/4}}\right)\right) ,$$

где L_1, L_2 – константы, справедливые при достаточно больших N и фиксированных значениях $\theta>0$.

Поведение удельной намагниченности модельной системы $m_N(\theta,h)$ при неограниченном увеличении числа частиц N исследуется в § 4. Здесь отмечен тот факт, что сходимость последовательности функций $\{m_N(\theta,h)\}$ к удельной намагниченности аппроксимирующей системы $m^a(\theta,h)$ имеет место всюду, за исключением области $\{\theta,h:\ 0\le\theta<J\ ,\ h=0\}$, в которой состояние статистического равновесия предельной (при $N\to\infty$) системы вырождено. Показано, что вне любой фиксированной δ-окрестности области вырождения указанная сходимость становится равномерной, и для нее получены мажорационные оценки вида/I0/

$$|m_N(\theta,h)-m^a(\theta,h)| \le \frac{const.}{\delta^{1/2}N^{1/4}} \quad ,|h|\ge\delta>0 . \qquad (4)$$

Далее на основе этих результатов доказана равномерная по полю h в области $|h|\ge\delta>0$ сходимость при $N\to\infty$ удельной магнитной восприимчивости $\chi_N(\theta,h)$ для системы (I) к удельной магнитной восприимчивости $\chi^a(\theta,h)$ в теории молекулярного поля и установлено мажорационное неравенство вида/I0/

$$|\chi_N(\theta,h)-\chi^a(\theta,h)| \le \frac{const.}{\delta^{5/4}N^{1/8}} , \qquad (5)$$

справедливое при $|h|\ge\delta>0$, фиксированных значениях $\theta>0$ и достаточно больших N.

В § 5 изучено поведение функции $\chi_N(\theta,h)$ при отсутствии магнитного поля ($h=0$) и доказано, что:

а) в критической точке предельной системы, $\theta=J$, $h=0$, она неограниченно возрастает:

$$\lim_{N\to\infty}\chi_N(\theta=J,h=0)=\infty , \qquad (6)$$

но не быстрее, чем $N^{3/4}$ /II/:

$$\chi_N(\theta=J,h=0)\le\frac{16\mu^2}{J}N^{3/4} . \qquad (7)$$

б) в области вырождения состояния статистического равновесия бесконечно большой системы, т.е. при $0\le\theta<J$, $h=0$, удельная магнитная восприимчивость возрастает пропорционально числу частиц:

$$\chi_N(0\le\theta<J,h=0)\sim N . \qquad (8)$$

Соотношения (5)-(8) выявляют важность понятия о квазисредних/I2/ при изучении механизма появления особенностей у физических характеристик системы в термодинамическом пределе. Так, например, согласно идее о квазисредних, в области вырождения состояния статистического равновесия плотность магнитной восприимчивости для бесконечно большой системы $\chi_\infty(\theta,h)$ должна быть определена как двойной предел:

$$\chi_\infty(\theta,0)=\lim_{h\to 0^+}\lim_{N\to\infty}\chi_N(\theta,h)\,, \tag{9}$$

причем порядок предельных переходов является существенным. Тогда, используя неравенство (5), получим

$$\chi_\infty(\theta,0)=\chi^a(\theta,0)<\infty\,,\quad 0\leqslant\theta<\mathcal{J}\,, \tag{I0}$$

т.е. конечную величину вместо бесконечности, получающейся в силу (8) при перестановке пределов $h\to 0$ и $N\to\infty$ в определении (9).

Оценки, полученные для удельной магнитной восприимчивости $\chi_N(\theta,h)$, позволили исследовать также поведение парной корреляционной функции $\langle\sigma_i^z\sigma_j^z\rangle$. В частности, показано, что в критической точке $\theta=\mathcal{J}\,,\,h=0$ среднее $\langle\sigma_i^z\sigma_j^z\rangle$ для случая несовпадающих узлов $(i\neq j)$ убывает при $N\to\infty$ не медленнее, чем $N^{-1/4}$ /II/:

$$\langle\sigma_1^z\sigma_2^z\rangle\Big|_{\substack{\theta=\mathcal{J}\\ h=0}}\leqslant 16N^{-1/4}\,. \tag{II}$$

С учетом результатов предыдущих параграфов в § 6 показано, что в области, где последовательность $\{\chi_N(\theta,h)\}$ ограничена, разность плотностей свободных энергий модельной и аппроксимирующей систем убывает при $N\to\infty$, как N^{-1}. Это обстоятельство было использовано далее для получения более сильных оценок для близости соответствующих производных по температуре и магнитному полю в указанной области.

В § 7 приведено сравнение теоретических результатов, полученных в §§2÷6, с численным расчетом на ЭВМ для ряда значений

числа частиц N = 50÷12800 при нескольких фиксированных величинах температуры и магнитного поля. Показано, что теоретические оценки являются справедливыми во всех рассмотренных случаях.

Глава II посвящена изучению квантовой модели типа Гейзенберга с дальнодействием, гамильтониан которой для случая спина S =1/2 имеет вид /I3/:

$$\mathcal{H}_N^{\Gamma}=-\frac{\mathcal{J}}{2N}\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{i,j=1}^{N}\sigma_i^\alpha\sigma_j^\alpha-\mu\sum_{\alpha=1}^{3}h_\alpha\sum_{i=1}^{N}\sigma_i^\alpha\,, \tag{I2}$$

где $\sigma^1,\sigma^2,\sigma^3$ – матрицы Паули, h_1,h_2,h_3 – компоненты вектора внешнего магнитного поля.

В § I построен аппроксимирующий гамильтониан для модельной системы (I2):

$$\mathcal{H}_N^a(\bar C_1,\bar C_2,\bar C_3)=-\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{i=1}^{N}(\mathcal{J}\bar C_\alpha+\mu h_\alpha)\sigma_i^\alpha+\frac{1}{2}\mathcal{J}N\sum_{\alpha=1}^{3}\bar C_\alpha^2\,. \tag{I3}$$

Здесь значения параметров $C_\alpha=\bar C_\alpha$, α = 1,2,3 определяются из условия абсолютного минимума плотности свободной энергии, построенной на основе гамильтониана (I3):

$$\min_{(C_1,C_2,C_3)} f_N[\mathcal{H}_N^a(C_1,C_2,C_3)]=f_N[\mathcal{H}_N^a(\bar C_1,\bar C_2,\bar C_3)]\,.$$

Необходимое условие экстремума приводит к обычным уравнениям самосогласования в теории молекулярного поля:

$$C_\alpha=\frac{\mathcal{J}C_\alpha+\mu h_\alpha}{E}\,\mathrm{th}\frac{E}{\theta}\,,$$

где

$$E=\sqrt{\sum_{\alpha=1}^{3}(\mathcal{J}C_\alpha+\mu h_\alpha)^2}\,.$$

Асимптотическая близость удельных свободных энергий для модельной и аппроксимирующей систем доказана в § 2, где рассмотрен также вопрос о поведении разности удельных энтропий и намагниченностей при переходе к термодинамическому пределу. Показано, что наличие не коммутирующих между собой операторов в модельном гамильтониане (I2) приводит к усложнению мажорационной процедуры и, в результате, к несколько более слабой по сравнению с рассмотренным в главе I случаем оценке для асимптотической малости разности удельных свободных энергий систем (I2) и (I3)/I3/:

$$\left| f_N[\mathcal{H}_N^r] - f_N[\mathcal{H}_N^a(\bar{C}_1,\bar{C}_2,\bar{C}_3)] \right| \leq \frac{const.}{N^{2/5}}\left(1 + O\left(\frac{1}{N^{1/5}}\right)\right) . \qquad (I4)$$

В § 3, согласно развитому в гл. I, § 5 методу, неравенство (I4) используется для получения оценки сверху на рост диагональных компонент тензора удельной магнитной восприимчивости

$$\chi_N^{\alpha\alpha}(\theta,\vec{h}) = -\frac{\partial^2 f_N[\mathcal{H}_N^r]}{\partial h_\alpha^2} \quad , \ \alpha = 1,2,3,$$

в критической точке решения молекулярного поля $\theta = J, \vec{h} = 0$:

$$\chi_N^{\alpha\alpha}(\theta = J, \vec{h} = 0) \leq const.\, N^{4/5} \quad , \ \alpha = 1,2,3. \qquad (I5)$$

В силу соотношения (I5) парная корреляционная функция $\langle \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha \rangle_{i\neq j}$ в критической точке убывает с ростом числа частиц в системе не медленнее, чем $N^{-1/5}$:

$$\left| \langle \sigma_1^\alpha \sigma_2^\alpha \rangle_{\substack{\theta=J \\ \vec{h}=0}} \right| \leq \frac{const.}{N^{1/5}} \quad , \qquad \alpha = 1,2,3.$$

При исследовании статистической системы с точки зрения ее динамики (энергетического спектра и времени жизни элементарных возбуждений, отклика системы на внешнее воздействие и т.д.) широко применяется метод временных корреляционных функций и по-

строенных с их помощью функций Грина. Поэтому значительный интерес вызывает вопрос об асимптотической близости временных корреляционных функций, определенных соответственно для исходной (I2) и аппроксимирующей (I3) систем/I3/. Этому вопросу посвящен § 4, гл. II настоящей диссертации, где, для простоты, рассмотрен случай парных корреляционных функций

$$\mathcal{F}_N^{\mp}(t-t') = \langle \sigma_j^{\mp}(t)\, \sigma_j^{\pm}(t') \rangle$$

и

$$\mathcal{F}_a^{\mp}(t-t') = \langle \tilde{\sigma}_j^{\mp}(t)\, \tilde{\sigma}_j^{\pm}(t') \rangle_a ,$$

где $\langle \cdots \rangle_a$ обозначает среднее по аппроксимирующему гамильтониану (I3). Здесь для операторов $\sigma_j^{\pm} = \frac{1}{2}(\sigma_j^x \pm i\sigma_j^y)$ введено представление Гейзенберга по модельному гамильтониану:

$$\sigma_j^{\pm}(t) = e^{i\mathcal{H}_N^r t}\, \sigma_j^{\pm}\, e^{-i\mathcal{H}_N^r t},$$

и по аппроксимирующему:

$$\tilde{\sigma}_j^{\pm}(t) = e^{i\mathcal{H}_N^a t}\, \sigma_j^{\pm}\, e^{-i\mathcal{H}_N^a t} .$$

Существенно опираясь на полученные нами результаты для асимптотической малости производных от разности свободных энергий $f_N[\mathcal{H}_N^r]$ и $f_N[\mathcal{H}_N^a(\bar{C}_1,\bar{C}_2,\bar{C}_3)]$ по внешнему магнитному полю и параметру взаимодействия J, удалось распространить метод работ/6,7/ на случай спиновой системы (I2) и строго показать, что/I3/:

$$\left| \mathcal{F}_N^{\mp}(t) - \mathcal{F}_a^{\mp}(t) \right| \underset{N\to\infty}{\longrightarrow} 0$$

при $|\vec{h}| \neq 0$ и любом конечном t. Заметим, что парные корреляционные функции аппроксимирующей системы $\mathcal{F}_a^{\mp}(t)$ вычисляются точно, и для них получены выражения:

$$\mathcal{F}_a^{\mp}(t) = \frac{e^{\pm 2i\varepsilon t}}{1 + e^{\pm 2\varepsilon/\theta}} .$$

В последнее время возник значительный интерес к изучению модельных систем, включающих наряду с короткодействующим обменным взаимодействием ферромагнитное дальнодействие. При этом, исходя из физических соображений, дальнодействующая часть взаимодействия рассматривалась в рамках теории эффективного поля, хотя строгое доказательство этого положения не приводилось/I4/. В связи с этим в § I гл. Ш настоящей диссертации рассматривается класс спиновых систем, гамильтониан которых представим в виде суммы/I5/:

$$\mathcal{H}_N^{SL} = \mathcal{H}_N^{S} + \mathcal{H}_N^{L} - \mu \sum_{\alpha=1}^{3} h_\alpha \sum_{i=1}^{N} \sigma_i^\alpha , \tag{I6}$$

где $\mathcal{H}_N^L$ описывает (анизотропное) ферромагнитное дальнодействие:

$$\mathcal{H}_N^L = -\frac{1}{2N} \sum_{\alpha=1}^{3} g_\alpha \sum_{i,j=1}^{N} \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha \quad ; \quad g_\alpha \geq 0 , \tag{I7}$$

а $\mathcal{H}_N^S$ удовлетворяет условиям

$$\left| \frac{\theta}{N} \ln Sp\, e^{-\mathcal{H}_N^S/\theta} \right| \leq M , \tag{I8}$$

$$\left\| \left[\mathcal{H}_N^S , \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \sigma_i^\alpha \right]_- \right\| \leq K , \qquad \alpha = 1,2,3 .$$

в которых M, K – некоторые постоянные, и является в остальном произвольным. Здесь $\|\ldots\|$ обозначает норму оператора.

С помощью ранее развитой техникой доказано, что вклад от ферромагнитного дальнодействия типа (I7) в удельную свободную энергию системы (I6) можно асимптотически точно учесть, вводя эффективное магнитное поле $\vec{h}^{eff}$:

$$h_\alpha^{eff}(\theta, \vec{h}) = h_\alpha + \frac{g_\alpha}{\mu} \bar{C}_\alpha(\theta, \vec{h}) , \quad \alpha = 1,2,3,$$

и строя термодинамически эквивалентный гамильтониан :

$$\tilde{\mathcal{H}}_N^a = \mathcal{H}_N^s - \mu \sum_{\alpha=1}^{3} h_\alpha^{eff} \sum_{i=1}^{N} \sigma_i^\alpha + \frac{1}{2} N \sum_{\alpha=1}^{3} g_\alpha \bar{C}_\alpha^2(\theta, \vec{h}) ,$$

где параметры $\bar{C}_\alpha$ определяются из условия

$$\min_{(C_1, C_2, C_3)} f_N[\tilde{\mathcal{H}}_N^a(C_1, C_2, C_3)] = f_N[\tilde{\mathcal{H}}_N^a(\bar{C}_1, \bar{C}_2, \bar{C}_3)] .$$

Таким образом, имеем/I5/:

$$\left| f_N[\tilde{\mathcal{H}}_N^a(\bar{C}_1, \bar{C}_2, \bar{C}_3)] - f_N[\mathcal{H}_N^{SL}] \right| \leq \tilde{\varepsilon}_N \xrightarrow[N \to \infty]{} 0 , \quad \tilde{\varepsilon}_N = O\left(\frac{1}{N^{2/5}}\right) ,$$

причем сходимость является равномерной по температуре и полю на любом ограниченном множестве $\{\theta, \vec{h} : 0 < \theta \leq \theta_0 , |\vec{h}| \leq h_0\}$, где θ_0 и h_0 – произвольные конечные величины.

В § 2 гл. Ш рассматривается модельная система, принадлежащая к классу гамильтонианов вида

$$\mathcal{H} = T + 2V \sum_{\alpha,\beta=1}^{n} \lambda_{\alpha\beta} \mathcal{J}_\alpha \mathcal{J}_\beta^+ , \quad \lambda_{\alpha\beta} = \lambda_{\beta\alpha}^* , \tag{I9}$$

где T является одночастичным оператором, V – объем системы. Кроме того, операторы T, $\mathcal{J}_\alpha$ $(1 \leq \alpha \leq n)$ удовлетворяют дополнительным условиям:

$$\begin{aligned} & T = T^+ , \quad \left| \frac{\theta}{V} \ln Sp\, e^{-T/\theta} \right| \leq K_0 , \\ & \| \mathcal{J}_\alpha \| \leq K_1 , \quad \| T \mathcal{J}_\alpha - \mathcal{J}_\alpha T \| \leq K_2 , \\ & \| \mathcal{J}_\alpha \mathcal{J}_\beta - \mathcal{J}_\beta \mathcal{J}_\alpha \| \leq \frac{K_3}{V} , \quad \| \mathcal{J}_\alpha^+ \mathcal{J}_\beta - \mathcal{J}_\beta \mathcal{J}_\alpha^+ \| \leq \frac{K_3}{V} , \quad 1 \leq \alpha, \beta \leq n , \end{aligned} \tag{20}$$

где K_0, K_1, K_2, K_3 – некоторые постоянные.

Заметим, что гамильтонианы вида (I9) позволяют описывать модельные системы со взаимодействием частиц различных сортов, например, многокомпонентных сплавов или магнитных систем, состоящих из нескольких взаимодействующих между собой подрешеток.

Нами подробно рассмотрен простейший случай двух изинговских подрешеток из N спинов, помещенных во внешнем магнитном поле h. В предположении, что взаимодействуют между собой только спины, относящиеся к разным подрешеткам, причем взаимодействие не зависит от расстояния и антиферромагнитно по своему характеру, гамильтониан системы задается в виде/16/:

$$\mathcal{H}_{2N}^{AF} = -\mu h N(\mathcal{S}_1+\mathcal{S}_2) + JN\mathcal{S}_1\cdot\mathcal{S}_2 \quad , \quad J>0 \ . \tag{21}$$

Здесь введены обозначения:

$$\mathcal{S}_1 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i^{(1)} \quad , \quad \mathcal{S}_2 = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\sigma_j^{(2)} \quad ,$$

где $\sigma_i^{(n)}$ – z – матрицы Паули; верхний индекс указывает номер подрешетки, а нижний – номер узла в ней.

Показано, что в термодинамическом пределе ($N\to\infty, V\to\infty$, $N/V=const.$) удельная свободная энергия системы (21) совпадает с соответствующим термодинамическим потенциалом в теории молекулярного поля:

$$f_a^{AF}(\theta,h) = -\frac{\theta}{2}\sum_{n=1}^{2}\ln 2ch\,\frac{J\bar{C}_n-\mu h}{\theta} - \frac{1}{2}J\bar{C}_1\bar{C}_2 \quad ,$$

где $\bar{C}_1, \bar{C}_2$ являются решениями системы уравнений:

$$C_n = -th\,\frac{JC_m-\mu h}{\theta} \quad , \quad m\neq n \quad , \quad m,n=1,2 .$$

Величины $\bar{C}_1$ и $\bar{C}_2$ имеют смысл средней намагниченности в соответствующих подрешетках.

В главе IУ получены некоторые общие результаты, относящиеся к статистическим системам, описываемым гамильтонианом вида

$$\mathcal{H} = T - 2V\sum_{\alpha=1}^{n} g_\alpha \mathcal{S}_\alpha \mathcal{S}_\alpha^+ \quad , \quad g_\alpha \geq 0 \tag{22}$$

при наличии дополнительных условий (20).

Как было показано Н.Н.Боголюбовым (мл.)/6,7/, в этом случае для разности плотностей свободных энергий

$$f_V[\mathcal{H}] = -\frac{\theta}{V}\ln Sp\, e^{-\mathcal{H}/\theta}$$

и

$$f_V[\mathcal{H}_a(C)] = -\frac{\theta}{V}\ln Sp\, e^{-\mathcal{H}_a(C)} \quad ,$$

построенных соответственно для исходного (22) и аппроксимирующего:

$$\mathcal{H}_a(C) = T - 2V\sum_{\alpha=1}^{n} g_\alpha(C_\alpha\mathcal{S}_\alpha^+ + C_\alpha^*\mathcal{S}_\alpha) + 2V\sum_{\alpha=1}^{n} g_\alpha C_\alpha C_\alpha^* \ , \tag{23}$$

гамильтонианов, справедлива оценка вида

$$0 \leq \min_{(C)} f_V[\mathcal{H}_a(C)] - f_V[\mathcal{H}] \leq \varepsilon_V \quad ,$$

причем $\varepsilon_V \to 0$ при $V\to\infty$ равномерно по θ в интервале $0\leq\theta\leq\theta_0$, $\theta_0 = const.$.

В § I, гл. IУ, рассматриваются некоторые особенности перехода к термодинамическому пределу для модельных систем типа (22). Полученные результаты сформулированы в виде четырех лемм. В частности, здесь дано достаточное условие (лемма 4) для существования термодинамического предела для плотности свободной энергии.

В § 2 доказана следующая теорема/17/.

Теорема. Пусть гамильтониан системы $\mathcal{H}$ имеет вид (22), где операторы T , $\mathcal{S}_\alpha$ $(1\leq\alpha\leq n)$ удовлетворяют условиям (20). Если при любых конечных $C = \{C_1,\dots,C_n\}$ плотность свободной энергии для гамильтониана $\mathcal{H}_a(C)$, определяемого равенством (23), сходится при $V \to \infty$ и функция $f_\infty[\mathcal{H}_\alpha(C)]$ достигает абсолютного минимума в единственной точке $C = \bar{C}$; тогда:

$$\langle (\mathcal{J}_\alpha - \bar{C}_\alpha)(\mathcal{J}_\alpha^+ - \bar{C}_\alpha^*)\rangle_{\mathcal{H}} \xrightarrow[V\to\infty]{} 0 \quad , \quad 1 \le \alpha \le n .$$

Здесь величины $\bar{C} \equiv \{\bar{C}_1, \dots, \bar{C}_n\}$ определяются из условия

$$\min_{(C)} f_\infty[\mathcal{H}_\alpha(C)] = f_\infty[\mathcal{H}_\alpha(\bar{C})]$$

и поэтому удовлетворяют уравнениям самосогласования:

$$\bar{C}_\alpha = \langle \mathcal{J}_\alpha \rangle_{\mathcal{H}_\alpha(\bar{C})}\Big|_{V\to\infty} \quad , \quad 1 \le \alpha \le n .$$

Таким образом, эта теорема устанавливает асимптотическую близость средних от операторов $\mathcal{J}_\alpha$ по исходному $\mathcal{H}$ и аппроксимирующему $\mathcal{H}_\alpha(\bar{C})$ гамильтонианам для систем вида (22) в случае отсутствия вырождения состояния статистического равновесия, т.е. в смысле квазисредних.

Отметим, что примененный метод доказательства не использует явное включение в гамильтониан системы членов с источниками, снимающими вырождение. Это обстоятельство значительно облегчает технику математического исследования, избавляя нас от необходимости рассматривать производные от термодинамического потенциала.

В заключении перечислены основные результаты, полученные в работе, сделаны некоторые замечания и выводы.

Доказательства вспомогательных лемм вынесены в приложение.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах /9-II, I3, I5-I7/ и докладывались на семинарах по статистической физике Лаборатории теоретической физики ОИЯИ и физического факультета МГУ.

Л И Т Е Р А Т У Р А

I. L.Onsager. Phys.Rev., 65, 117 (1944).

2. T.H.Berlin, M.Kac. Phys.Rev., 86, 821 (1952).

3. J.Bardeen, L.N.Cooper, J.R.Schriffer. Phys. Rev., 108, 1175 (1957).

4. Н.Н.Боголюбов, Д.Н.Зубарев, Ю.А.Церковников. ДАН СССР, II7, 788 (I957).

5. Н.Н.Боголюбов. Препринт ОИЯИ, P-5II, Дубна, I960; Physica, 26, 1 (1960).

6. N.N.Bogolubov (Jr.). Physica, 32, 933 (1966); Preprint ITP-67-1, Kiev, 1967.

7. N.N.Bogolubov (Jr.). A Method for Studying Model Hamiltonians, Pergamon Press, 1972.

8. W.Thirring. Comm. Math. Phys., 7, 181, 1968.

9. Й.Г.Бранков. Сообщение ОИЯИ, P4-6998, Дубна, I973.

I0. Й.Г.Бранков. Сообщение ОИЯИ, P4-7000, Дубна, I973.

II. В.А.Загребнов, Й.Г.Бранков. Сообщение ОИЯИ, P4-7097, Дубна, I973.

I2. Н.Н.Боголюбов. Препринт ОИЯИ,Д-78I, Дубна, I96I.

I3. Й.Г.Бранков, А.С.Шумовский. Сообщение ОИЯИ, P4-6899, Дубна, I973.

I4. J.F.Nagle. Phys. Rev., A2, 2124 (1970); J.S.Høye. Phys. Rev., B6, 4261 (1972).

I5. J.G.Brankov, A.S.Shumovsky, V.A.Zagrebnov. Preprint JINR, E4-7150, Dubna, 1973.

I6. Й.Г.Бранков, А.С.Шумовский. Сообщение ОИЯИ, P4-7205, Дубна, I973.

I7. Н.Н.Боголюбов (мл.), Й.Г.Бранков. Сообщение ОИЯИ, P4-7426, Дубна, I973.

Рукопись поступила в издательский отдел
2I декабря I973 года.