Р-83

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

На правах рукописи

УДК 536.7; 530.145

548:537.611.44

РУДАВСКИЙ

ЮРИЙ КИРИЛЛОВИЧ

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ РЕГУЛЯРНЫХ И СТРУКТУРНО НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СПИНОВЫХ СИСТЕМ В МЕТОДЕ ФУНКЦИОНАЛЬНОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ

Специальность: 01.04.02 - теоретическая и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени доктора физико-математических наук

Дубна 1985

Работа выполнена в Институте теоретической физики АН УССР.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,
член-корреспондент АН СССР,
профессор — Н.Н.БОГОЛЮБОВ

доктор физико-математических наук,
профессор — В.Н.ПОПОВ

доктор физико-математических наук — А.С.ШУМОВСКИЙ

Ведущее научно-исследовательское учреждение - Харьковский физико-технический институт АН УССР.

Автореферат разослан "28" февраля 1986г.

Защита диссертации состоится "3" апреля 1986г. в 15⁰⁰ часов на заседании специализированного Совета Д047.01.01 Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований, г.Дубна, Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Объединенного института ядерных исследований.

Ученый секретарь Совета
кандидат физико-математических наук

В.И.ЖУРАВЛЕВ

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Среди фундаментальных проблем статистической физики центральное место занимает проблема описания свойств неупорядоченных конденсированных сред. Актуальность ее обусловлена возрастающей потребностью в новых материалах, что привело к стремительному развитию новой области - физики неупорядоченных систем, объектом которой являются аморфные металлы и полупроводники, жидкие металлы и неупорядоченные сплавы, стеклообразные состояния вещества.

Важное место в исследованиях таких систем занимает изучение их магнитных свойств. Открытие в шестидесятых годах явления ферромагнетизма в аморфных сплавах на основе переходных металлов послужило толчком к бурному росту экспериментальных и теоретических работ, посвященных различным аспектам магнетизма в структурно неупорядоченных системах. Интерес к таким объектам вызван, прежде всего, широким спектром их технических приложений. Это обусловлено сочетанием в них многих интересных свойств, часто невозможным в случае традиционных кристаллических материалов. Аморфные магнетики находят применение в радиотехнике и микроэлектронике, вычислительной технике и электротехнике, а также в других областях, где требуются магнитно-мягкие материалы с высокой магнитной проницаемостью, малыми потерями на перемагничивание, высокой коррозионной и структурной устойчивостью. С другой стороны, в ходе теоретического изучения структурно неупорядоченных магнетиков возникает круг сложных и интересных физических и математических проблем, стимулирующих развитие новых теоретических методов, концепций. Несмотря на прилагаемые усилия и достигнутые успехи в этом направлении, на сегодняшний день проблема построения последовательной теории структурно неупорядоченных магнитных систем - аморфных и жидких магнетиков - остается актуальной и до конца нерешенной проблемой современной статистической физики.

Основная трудность теории аморфных и жидких магнитных систем связана с отсутствием в них трансляционной симметрии решетки, что исключает непосредственное применение к этим объектам многих мощных методов теории твердого тела. При этом в аморфной фазе случайное распределение магнитных атомов образует метастабильную структуру с большими временами релаксации к равновесию, характеристики которой выступают в роли случайных внешних параметров по отношению к быстрорелаксирующей магнитной подсистеме. Таким образом, важной исходной проблемой теории аморфного магнетизма является выбор модели структурного беспорядка, существенно влияющего на магнитное поведение объекта.

Среди существующих подходов к этой проблеме, большинство которых основано на стохастической модели решетки, наиболее реалистичной представляется модель жидкоподобной структуры. Опираясь на представлении о случайным образом замороженной конфигурации атомов, она довольно полно передает особенности аморфной структуры, которая обычно получается сверхбыстрым охлаждением из жидкой фазы и характеризуется ближним порядком жидкостного типа. Достоинство этого подхода заключается в возможности описать эффекты структурных флуктуаций посредством экспериментально наблюдаемого структурного фактора аморфной системы. Практическая реализация такой программы является довольно сложной задачей, поскольку неупорядоченность и метастабильность стеклообразных магнетиков значительно осложняет непосредственное применение к их анализу стандартных квантовостатистических методов. Так, в силу независимости наблюдаемых величин от случайных структурных переменных, при теоретическом построении термодинамики и теории спиновых волн таких систем необходимо произвести нетривиальные операцию конфигурационного усреднения свободной энергии и функций Грина фиксированной случайной атомной конфигурации. В связи со сложностью проблемы, в большинстве случаев существующие расчеты термодинамических функций ограничены рамками различных модификаций метода молекулярного поля, а исследование динамических характеристик основано на простых приближениях спиновых волн, которые не всегда даже качественно описывают реальные свойства аморфного магнетизма. При этом построение спин-волновой теории дополнительно осложняется присутствием в уравнениях для конфигурационно-усредненной функции Грина слагаемых, описывающих корреляцию между структурными и спиновыми флуктуациями. Это обстоятельство сопряжено с необходимостью дополнительной операции расцепления структурного и термодинамического усреднений и влечет за собой появление дополнительной цепочки уравнений. Таким образом, принципиальной и сложной задачей является разработка эффективных квантовостатистических методов, позволяющих последовательно и согласованно учесть влияние как магнитных, так и структурных флуктуаций на термодинамику и спиновую динамику аморфных магнитных систем.

Наряду с аморфными и стеклообразными магнетиками значительный принципиальный интерес представляют исследования свойств магнитных материалов в равновесном жидком состоянии. Типичными примерами таких объектов являются парамагнитные расплавы переходных и редкоземельных металлов, находящиеся во внешнем магнитном поле, частным их случаем являются отожженные магнитные сплавы замещения. Однако особый интерес вызывают жидкие ферромагнетики, на принципиальную возможность существования которых указывают экспериментальные исследования расплава золото-кобальт (Г.Буш, Дж.Гюнтеродт, 1968 г.; Б.Крафт, Т. Александер, 1973 г.). Важная задача теории жидких магнетиков состоит в изучении взаимного влияния магнитных и жидкостных характеристик. При попытке микроскопического описания таких систем возникают все проблемы теории жидкого состояния, связанные с отсутствием малого параметра, необходимостью учета короткодействующих и дальнодействующих корреляций и т.д., которые усугубляются наличием в системе магнитных взаимодействий, влиянием внешнего магнитного поля. Теоретическому анализу жидких магнетиков на сегодняшний день посвящено сравнительно небольшое число работ, большинство которых использует довольно простые модели и приближения, недостаточные для полного освещения этой интересной проблемы.

Наконец сложной и представляющей самостоятельный интерес задачей является исследование ближайшей окрестности магнитного фазового перехода второго рода, которое в ряде случаев удобно проводить на основе классических спиновых моделей. Следует отметить, что фундаментальные проблемы теории критических явлений связаны с необходимостью корректного математического описания длинноволновых аномальных флуктуаций параметра порядка, возникающих в критической области, где неприменимы методы стандартной теории возмущений. Прогресс,достигнутый в последние годы в теории фазовых переходов, в значительной мере обусловлен использованием формализма континуального интегрирования, на основе которого был создан и развит ренорм-групповой подход в теории критических явлений.

Целью работы является разработка эффективных методов исследования решеточных и структурно неупорядоченных спиновых систем в рамках формализма континуального интегрирования, изучение на их основе магнитных свойств аморфных систем и влияния на них структурной неупорядоченности, построение микроскопической теории жидкого состояния системы магнитно-активных атомов, описывающей взаимное влияние жидкостных и магнитных характеристик жидких магнетиков, исследование методами функционального интегрирования магнитных критических явлений.

Научная новизна и практическая ценность

В диссертации впервые сделано успешное применение метода функционального интегрирования к описанию в рамках единого подхода термодинамики, динамических и корреляционных функций решеточных и структурно неупорядоченных спиновых система в широкой области изменения температуры и действующего на систему внешнего магнитного поля. В основе развиваемого подхода лежит построенное в работе представление континуальным интегралом свободной энергии и температурных функций Грина широкого класса квантовых и классических спиновых моделей. Новым вкладом является предложенная в работе цепочка уравнений для функций Грина в функциональных производных, решение которой позволяет избежать непосредственного вычисления континуальных интегралов при помощи теории возмущений.

В рамках указанного формализма в работе предложены и разработаны оригинальные методы исследования термодинамики и спиновой динамики аморфных магнетиков. На их основе впервые для аморфного гейзенберговского ферромагнетика с жидкоподобным типом структурного беспорядка найдены выражения для свободной энергии и конфигурационно-усредненной температурной функции Грина поперечных компонент спина в приближении, следующем за приближением хаотических фаз (ПХФ). Найденные выражения позволяют последовательно исследовать влияние топологического беспорядка на магнитные свойства аморфных систем.

Важным вкладом в физику неупорядоченных систем является построенная в диссертации микроскопическая теория жидкого состояния системы магнитно-активных атомов. Получены новые результаты в исследовании влияния магнитного поля на структурные характеристики жидких магнетиков, имеющие характер предсказаний.

Построенное в работе функциональное представление статистической суммы ряда спиновых модельных систем является микроскопическим обоснованием эффективного флуктуационного гамильтониана, используемого в современной физике фазовых переходов при анализе критической области методом ренормализационной группы. На их основе в диссертации без применения теории возмущений построена и исследована дифференциальная форма приближенного преобразования ренормализационной группы.

Развитая в диссертации теория дает возможность объяснить наблюдаемые на эксперименте особенности магнитного поведения аморфных систем, в частности, низкотемпературной намагниченности, магнонного спектра, температуры Кюри и т.п. В теории жидких магнетиков предсказан ряд новых эффектов, связанных с взаимным влиянием их жидкостных

и магнитных характеристик. Эти результаты могут стимулировать постановку соответствующих экспериментов. Они также могут быть полезными в экспериментальных исследованиях магнитных и структурных свойств расплавов переходных и редкоземельных металлов, при поиске жидких ферромагнетиков.

Разработанный в диссертации подход применим для описания не рассмотренных в работе свойств и классов неупорядоченных систем. В частности, предложенные методы могут быть полезными при исследовании эффектов случайной одноионной анизотропии, фазы спинового стекла, неупорядоченных магнитных сплавов замещения и т.п. Многие результаты развитого в работе подхода уже нашли свое успешное применение в теории многокомпонентных аморфных и жидких магнетиков.

Для защиты выдвигаются следующие основные результаты, полученные в диссертации:

1. Построено представление континуальным интегралом свободной энергии и температурных функций Грина квантовой модели Гейзенберга, для которой в явном виде рассчитан функционал свободной энергии. Указана регулярная процедура расчета свободной энергии при помощи теории возмущений по негауссовой части функционального интеграла. Выполнено обобщение на широкий класс квантовых и классических спиновых моделей, систем взаимодействующих частиц, в исходном гамильтониане которых выделена система отсчета с известными свойствами.

2. Разработан метод вычисления функций Грина путем решения новой цепочки уравнений в функциональных производных, позволяющий избежать фактического расчета континуальных интегралов.

3. На основе формализма континуального интегрирования предложен метод расчета конфигурационно-усредненной свободной энергии аморфного гейзенберговского магнетика. Путем функционального интегрирования найдено выражение для статистической суммы случайной фиксированной конфигурации магнитных атомов в пространстве структурных коллективных переменных. Она имеет вид распределения Гиббса с эффективной потенциальной энергией, содержащей многочастичные конфигурационные взаимодействия посредством магнитной подсистемы.

4. В рамках указанного метода впервые вычислена свободная энергия аморфного гейзенберговского ферромагнетика с жидкоподобной моделью структурного беспорядка в приближении, следующем за ПХФ. Найдены новые уравнения для намагниченности и температуры Кюри, учитывающие влияние структурного беспорядка посредством парного структурного фактора системы.

5. Предложен и развит новый метод расчета конфигурационно-усредненных температурных спиновых функций Грина аморфного магнетика и разработана регулярная процедура расцепления термодинамического и конфигурационного усреднений.

6. В рамках указанного подхода выполнено исследование спиновой динамики аморфного ферромагнетика. Построено и решено новое уравнение для поперечной температурной функции Грина, для которой впервые получено выражение в приближении, следующем за ПХФ. В этом же приближении найдено уравнение для спектра спиновых волн, применимое в широкой области изменения температуры и внешнего поля. Показано, что за счет рассеяния магнонов на флуктуациях структуры затухание спектра не исчезает даже при нулевой температуре. Получены строгие результаты в длинноволновом пределе при низких температурах, подтверждающие существование в аморфном ферромагнетике хорошо определенных длинноволновых магнонных возбуждений.

7. Получено низкотемпературное разложение намагниченности аморфного ферромагнетика с учетом структурной перенормировки магнонного спектра, которое идет по полуцелым и целым степеням температуры и не содержит слагаемого, пропорционального кубу температуры.

8. Выполнено численное исследование влияния топологического беспорядка на магнитные характеристики аморфного ферромагнетика для различных моделей структуры и потенциала обменного взаимодействия. Результаты вычислений согласуются с экспериментально наблюдаемым при аморфизации магнитной системы понижением температуры Кюри, смягчением спин-волновой жесткости и увеличением коэффициента в законе Блоха для намагниченности. Доказано существование критической концентрации магнитно-активных атомов, ниже которой в системе исчезает ферромагнитное упорядочение. Изучены условия возможного изменения рода магнитного фазового перехода.

9. Построена микроскопическая теория жидких магнетиков на основе модели, равноправно описывающей как типично жидкостные свойства системы, так и гейзенберговское обменное взаимодействие, ответственное за ее магнитное поведение. Получено представление статистической суммы в виде континуального интеграла по магнитным полевым переменным. В приближении, следующем за ПХФ, вычислены парные спиновые функции Грина и свободная энергия жидкого магнетика. Найдена система магнитного и жидкостного уравнений состояний, связывающая намагниченность и давление с температурой, плотностью магнитных атомов и внешним магнитным полем. Указано на существование в жидком магнетике магнитострикционных эффектов за счет обменного взаимодействия.

10. Развит подход к исследованию влияния магнитного поля, характера обменного взаимодействия и других характеристик магнитной подсистемы на структурные свойства магнетиков в жидком состоянии, основанный на представлении статистической суммы континуальным интегралом в пространстве жидкостных полевых переменных. Вычислен эффективный функционал свободной энергии. Дана цепочка уравнений для структурных корреляционных функций, решением которой найден парный структурный фактор жидкого магнетика. Показано, что включение внешнего магнитного поля, а также возникновение ферромагнитного упорядочения, вызывают увеличение структурного фактора и изотермической восприимчивости, а также повышают критическую температуру "жидкость-пар".

11. Построено дифференциальное уравнение приближенного преобразования ренормализационной группы (РГ) с целью исследования критического поведения n -компонентной модели Стенли. Без применения теории возмущений получена система уравнений для неподвижных точек ренорм-группы и в общем случае доказана универсальность спектра линейного оператора РГ, определяющего критические показатели системы.

12. На основе предложенного дифференциального уравнения РГ выполнено аналитическое и численное исследование модели " φ^4 ". В явном виде найдена функция Гелл-Манна и Лоу, произведен анализ ее нулей и доказано, что лишь один из них связан с критическим поведением системы. Выполнен анализ спектра линейного оператора РГ и рассчитаны критические показатели для различных спиновых модельных систем. В этом же подходе исследовано критическое поведение модели " φ^6 " и указан оптимальный способ обрыва рядов теории возмущений по негауссовой части функционального интеграла в зависимости от используемой модели функционала свободной энергии.

<u>Апробация работы</u>. Основные результаты диссертации докладывались на семинарах в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований, отдела статистической механики Математического института им.В.А.Стеклова АН СССР, Ленинградского отделения Математического института им.В.А.Стеклова АН СССР, кафедры квантовой статистики и теории поля Московского государственного университета им.М.В.Ломоносова, Института теоретической физики АН УССР, Львовского отделения "Статистическая физика" Института теоретической физики АН УССР, а также на УШ Всесоюзной конференции "Проблемы исследования свойств сегнетоэлектриков" (Ужгород, 1974 г.), на У Республиканском совещании по статистической физике (Львов, 1975 г.), на П конференции

"Теория и структура жидкой фазы" (Росток, ГДР, 1976 г.), Международных симпозиумах по избранным проблемам статистической механики (Дубна, 1977, 1981, 1984 г.г.), на Международной школе по избранным вопросам теории твердого тела (Львов, 1978 г.), на Зимней школе по неупорядоченным системам и слоистым кристаллам (Львов, 1979 г.), на Школе-семинаре по математическим методам квантовой статистики (Баку, 1979 г.), на УI Республиканской конференции по статистической физике (Львов, 1982 г.), на II Всесоюзном совещании по избранным проблемам статистической физики (Москва, 1982 г.), на Международной школе по физике ионной сольватации (Львов, 1983 г.), на У Всесоюзной конференции по строению и свойствам металлических и шлаковых расплавов (Свердловск, 1983 г.), на II Всесоюзной конференции "Термодинамика необратимых процессов и ее применение (Черновцы, 1984 г.).

Публикации. Основное содержание диссертации опубликовано в работах [I-28].

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, приложений; изложена на 414 страницах машинописного текста, основная часть содержит 281 страницу. Работа иллюстрирована 41 рисунком, II таблицами. Библиографический список литературы включает 310 названий.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность проблемы, кратко изложено содержание диссертации и приведены основные положения, которые выносятся на защиту.

В первых двух главах развивается метод функционального интегрирования, позволяющий в рамках единого подхода исследовать термодинамику, динамические и корреляционные функции широкого класса классических и квантовых спиновых систем.

В первой главе изложена методика построения удобного для конкретных расчетов функционального представления континуальными интегралами статистической суммы и функций Грина системы многих тел с исходным гамильтонианом $H = H_0 + H_{int}$, где выделена т.н. система отсчета с известными термодинамическими и корреляционными функциями, описываемая гамильтонианом H_0. В общем случае H_0 не коммутирует с гамильтонианом H_{int}, содержащим ответственные за исследуемые коллективные эффекты взаимодействия. Для многих систем H_{int} может быть записан в виде разложения по характерным для изучаемого объекта коллективным переменным, в роли которых, например, выступают фурье-образы плотности частиц, оператора спина и т.п. В первых двух

параграфах приведены примеры таких систем и получено представление их статистической суммы и функций Грина в пространстве соответствующих функциональных переменных, сопряженных к коллективным переменным системы.

В п.2.3 эта методика применена к квантовой модели Гейзенберга, используемой в диссертации для описания магнитного поведения изучаемых объектов. Гамильтониан модели

$$H = -\sum_{1\le i<j\le N} J(|r_i - r_j|)\vec{S}_i\vec{S}_j - \mu h \sum_{1\le j\le N} S_j^z \quad , \qquad (1)$$

где $J(|r_i - r_j|)$ – потенциал обменного взаимодействия между спинами атомов, локализованными в N узлах кристаллической решетки с координатами r_j, $j=1,\dots,N$; $\vec{S}_j = (S_j^x, S_j^y, S_j^z)$ – оператор спина величины S; μS – магнитный момент атома; h – магнитное поле, направленное вдоль оси z.

Далее обменное взаимодействие записывается в представлении спиновых операторных коллективных переменных

$$\vec{S}_k = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}\vec{S}_j e^{-ikr_j} \quad , \qquad (2)$$

где k – волновой вектор, который в случае трансляционно-инвариантной решеточной системы изменяется в пределах первой зоны Бриллюэна. Используя для статистического оператора представление взаимодействия и известные свойства гаусовых интегралов, построено точное представление статистической суммы решеточного гейзенберговского магнетика континуальным интегралом по магнитным функциональным переменным, сопряженным к спиновым флуктуациям в частотно-импульсном пространстве:

$$Z = \exp(-\beta F_0)\int (d\varphi)\exp F[\varphi] \quad . \qquad (3)$$

Интегрирование здесь идет в бесконечных пределах по действительной и мнимой частям комплексной переменной $\varphi_q^\alpha = \varphi_q^{\alpha,c} - i\varphi_q^{\alpha,s}$, $\alpha = x,y,z$; q – вектор $q=(k,\omega)$, частота $\omega = 2\pi n/\beta$, $n=0,\pm1,\pm2,\dots$; $\beta^{-1} = T$ – температура. При помощи кумулянтного разложения функционал свободной энергии $F[\varphi]$ представляется в виде бесконечного функционального ряда

$$F[\varphi]=-\frac{1}{2}\sum_{q}|\vec{\varphi}_q|^2+\sum_{l\geq 1}\frac{\sqrt{N}^{2-l}}{l!}\sum_{q_1\alpha_1}\dots\sum_{q_l\alpha_l}\sqrt{\alpha_{k_1}}\times\dots$$

$$\times\sqrt{\alpha_{k_l}}\,\mathcal{M}_{\alpha_1\dots\alpha_l}(q_1,\dots,q_l)\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}e^{i(k_1+\dots+k_l)z_j}\varphi^{\alpha_1}_{q_1}\dots\varphi^{\alpha_l}_{q_l},$$

(4)

где $\sum_{q}=\sum_{k}\sum_{\omega}$ и функция $\alpha_k=\beta J_k$, J_k – фурье-образ потенциала обменного взаимодействия. Коэффициентные функции $\mathcal{M}_{\alpha_1,\dots,\alpha_l}(q_1,\dots,q_l)$ являются неприводимыми спиновыми функциями Грина системы отсчета с гамильтонианом $H_0=-\mu h\sum_j S^z_j$ и свободной энергией $F_0(x)$, $x=\beta\mu h$. Они приведены в явном виде в приложении I диссертации для $l\leq 4$.

На основе выражения (3) в п.I.3 получено функциональное представление для s -частичных спиновых функций Грина в частотно-импульсном пространстве:

$$K_{\alpha_1,\dots,\alpha_s}(q_1,\dots,q_s)=\sqrt{N}^{s-2}\langle T\tilde{S}^{\alpha_1}_{q_1}\dots\tilde{S}^{\alpha_L}_{q_s}\rangle, \qquad (5)$$

где угловые скобки означают термодинамическое усреднение с полным гамильтонианом (I), $\tilde{S}^{\alpha}_q=\beta^{-1}\int_0^{\beta}d\beta'\,\tilde{S}^{\alpha}_k(\beta')\exp(i\beta'\omega)$ – фурье-образ спиновой коллективной переменной (2), взятой в представлении Гейзенберга, T – оператор упорядочения "времен" β. При помощи функционального дифференцирования и интегрирования по частям, функция (5) выражается через континуальные интегралы

$$K_{\alpha_1,\dots,\alpha_L}(q_1,\dots,q_s)=\frac{\sqrt{N}^{s-2}}{\prod_{j=1}^{s}\sqrt{\alpha_{k_j}}}\overline{\prod_{j=1}^{s}\left(\varphi^{\alpha_j}_{-q_j}-\frac{d}{d\varphi^{\alpha_j}_{q_j}}\right)}, \qquad (6)$$

где чертой обозначено функциональное усреднение по распределению Гиббса с полным функционалом свободной энергии (4); функциональные производные в (6) действуют направо.

Для исследования ферромагнитной фазы удобно выделить самосогласованное поле. Нетрудно показать, что среднее значение функциональной переменной $\varphi^z_{q=0}$, вычисленное с полным функционалом (4), пропорционально магнитному моменту системы. В связи с тем, что $\varphi^z_{q=0}$ является величиной макроскопической порядка $\sqrt{N}$, интегрирование по ней производится методом перевала. Свободная энергия зависит от экстремального значения $\varphi^z_{q=0}$ как от параметра, который исключается из условия $dF/d\varphi^z_{q=0}=0$. Это уравнение, по-существу, является уравнением состояния, определяющим намагниченность как функцию температуры, внешнего поля и плотности. Таким образом, в магнитоупорядоченной фазе выделение самосогласованного поля эквивалентно перенормировке внешнего поля $x=\beta\mu h \longrightarrow y=\beta\mu h+(\alpha_0/N)^{1/2}\varphi^z_{q=0}$ и замене свободной энергии невзаимодействующих спинов $F_0(x)$ свободной энергией $F_{mol}(y)$ в приближении молекулярного поля.

В п.I.3 при помощи теории возмущений по негауссовой части функционального интеграла (3) предложена регулярная процедура расчета свободной энергии гейзенберговского магнетика в виде разложения по гауссовым моментам с перенормированным в приближении хаотических фаз (ПХФ) взаимодействием. Простое функциональное интегрирование дает в наинизшем приближении результат ПХФ. Высшие флуктуационные поправки собираются в виде ряда по числу сумм по волновым векторам. Такое разложение соответствует известной в магнетизме теории возмущений по обратному объему эффективного взаимодействия, то есть по параметру z_0^{-3}, где z_0 – эффективный радиус обменного взаимодействия. Показано, что в формализме функционального интегрирования для расчета свободной энергии в приближении двух сумм по волновым векторам, следующем за ПХФ и пропорциональном z_0^{-6}, достаточно ограничиться средним значением слагаемого с $l=4$ функционала (4), взятым по гауссовому распределению, и средним от квадрата слагаемого с $l=3$.

Описанная методика применима в широком температурном диапазоне, за исключением ближайшей окрестности критической точки T_c, где теория возмущений непригодна. Однако вид полученного представления (3) для статистической суммы позволяет применить его к исследованию критических явлений методом ренормализационной группы, которое рассматривается в главе 5. В связи с этим в п.I.4 построено функциональное представление статистической суммы n -компонентной модели Стенли и показано, что функционал (4) в классическом пределе является частным случаем ($n=3$) функционала свободной энергии этой модели.

Во второй главе предложен и развит метод вычисления функций Грина и корреляционных функций в рамках формализма континуального интегрирования. Полученное в главе I представление (6) для функций

Грина позволяет выразить их через средние от произведения функциональных переменных типа $\varphi^{\alpha_1}_{q_1} \dots \varphi^{\alpha_s}_{q_s}$. Однако возможности непосредственного вычисления таких континуальных интегралов ограничены тем, что точному расчету поддаются лишь гауссовые интегралы. Негауссовая часть функционала свободной энергии обычно трактуется как малое возмущение. Такой подход, как известно, не всегда применим. В частности, он малоэффективен при вычислении спектра коллективных возбуждений посредством нахождения полюсов соответствующих функций Грина. В этом случае разложение по гауссовым моментам не изменяет полюсов функции Грина, совпадающих, как показано в Приложении 2 диссертации, с полюсом главного приближения, соответствующего обычно ПХФ. Для последующей перенормировки спектра и нахождения его затухания необходимо произвести выборочное суммирование определенного класса диаграмм. Во избежание этой сложной и громоздкой процедуры в п.2.I, используя выражения (3) и (6) построена цепочка уравнений в функциональных производных для нахождения средних, определяющих функции Грина (5). Как показано в п.2.2, оно является частным случаем широкого класса уравнений

$$\overline{\prod_{j=1}^{s}\left(-\frac{dF_L[\varphi]}{d\varphi^{\alpha_j}_{q_j}}-\frac{d}{d\varphi^{\alpha_j}_{q_j}}\right)}=\overline{\prod_{j=1}^{s}\left(\frac{dF_R[\varphi]}{d\varphi^{\alpha_j}_{q_j}}+\frac{d}{d\varphi^{\alpha_j}_{q_j}}\right)}, \quad (7)$$

$$s=1,2,\dots ,$$

соответствующих некоторому разбиению функционала свободной энергии $F[\varphi]=F_L[\varphi]+F_R[\varphi]$. Явный вид уравнений находится простым функциональным дифференцированием и зависит от структуры функционала свободной энергии, способа его разбиения, который, в свою очередь, диктуется искомым приближением для функции Грина.

В диссертации для вычисления функций Грина используется цепочка, которая получается из (7) при $F_R[\varphi]=F[\varphi]$, $F_L[\varphi]=0$. В п.2.3 на примере квантовой системы взаимодействующих частиц со скалярной функциональной переменной φ_q развита методика расцепления и обрыва такой системы уравнений, при помощи которой рассчитана парная функция Грина в приближении, следующем за ПХФ. В этом случае для функционала свободной энергии, входящего в цепочку, достаточно ограничиться моделью " φ^4 " и рассмотреть первые четыре уравнения цепочки. Среднее от произведения двух функциональных переменных, определяющих согласно (6) двухчастичную функцию Грина, находится из второго уравнения цепочки и в рассматриваемом приближении зависит от среднего трех и четырех полевых переменных. Эти средние, в свою очередь, определяются решениями, соответственно, третьего и четвертого уравнений цепочки в главном приближении. Подстановка их во второе уравнение позволяет найти функцию Грина с перенормированным в искомом приближении полюсом. В связи с последующими применениями в теории структурно неупорядоченных магнетиков, в п.2.4 решена цепочка уравнений для корреляционных функций классической жидкости, потенциальная энергия которых содержит как короткодействующие силы, формирующие ближний порядок, так и дальнодействующие, в том числе многочастичные взаимодействия. В п.2.5-2.6 эффективность предложенного метода проверена вычислением температурных парных спиновых функций Грина квантовой решеточной модели Гейзенберга, корреляционной функции модели Изинга. Используя в качестве системы отсчета полный фононный гамильтониан, в п.2.7 построено функциональное представление для статистической суммы системы со спин-фононным взаимодействием.

В третьей и четвертой главах диссертации развитый формализм континуального интегрирования применен к теоретическому описанию свойств структурно неупорядоченных магнетиков.

<u>В третьей главе</u> исследуются термодинамические и динамические характеристики аморфного ферромагнетика. В качестве модели используется пространственно-однородная "замороженная жидкость" N магнитно-активных атомов со спином S каждый, случайным образом распределенных и зафиксированных в точках $(z_1,\dots,z_N)=[z^N]$ объема V. Магнитные взаимодействия в системе описываются гейзенберговским обменным гамильтонианом $H_S[z^N]$ в форме (I), который теперь зависит от координат случайной конфигурации магнитных атомов. Предполагается, что потенциал обменного взаимодействия $J(z)$ допускает разложение в ряд Фурье.

Согласно Р.Брауту (1959 г.), свободная энергия структурно метастабильного аморфного ферромагнетика

$$F_S^{am}=-\beta^{-1}\langle \ln Z[z^N]\rangle_{av} \quad (8)$$

Конфигурационное усреднение по всем возможным реализациям случайной конфигурации атомов производится с некоторой нормированной функцией распределения вероятности $D[z^N]$ случайных переменных, которыми являются координаты магнитных атомов. Вид ее, в принципе, определяется условиями синтеза аморфного образца. В п.3.I при помощи развитой в главе I методики статистическая сумма $Z[r^N]$ заданной случайной атомной конфигурации представляется континуальным интегралом

$$Z[r^N] = \exp(-\beta F_0)\int(d\varphi)\exp F[\varphi;\rho[r^N]]. \qquad (9)$$

В отличие от решеточных систем, в данном случае функционал $F[\varphi;\rho]$ зависит от координат магнитных атомов посредством структурной (жидкостной) коллективной переменной

$$\rho_k = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N} e^{-ikr_j}, \qquad k \neq 0, \qquad (10)$$

являющейся фурье-образом флуктуации плотности. Для нахождения явного вида функционала $Z[r^N]$ в представлении коллективных переменных ρ_k в п.3.I выполнено термодинамическое усреднение по магнитной подсистеме, которое производится путем функционального интегрирования выражения (9). В результате конфигурационно-зависимая статистическая сумма $Z[r^N]$ представляется в виде

$$Z[r^N] = \exp(-\beta F_H + U[\rho]), \qquad (11)$$

где функционал

$$U[\rho] = \sum_{l\geq 2}\ \sum_{k_1\neq 0}\cdots\sum_{k_l\neq 0}\frac{a_l(k_1,\dots,k_l)}{\sqrt{N}^{\,l-2}\ l!}\rho_{k_1}\cdots\rho_{k_l} \qquad (12)$$

имеет смысл безразмерной эффективной энергии конфигурационного межатомного взаимодействия, формируемой магнитной подсистемой. Коэффициентные функции $a_l(k_1,\dots,k_l)$ и независимый от ρ_k вклад F_H в свободную энергию выражаются через функциональные средние магнитных полевых переменных φ_q^α, определенных на распределении Гиббса с структурно-независимой частью функционала свободной энергии $F[\varphi] = F[\varphi;\rho=0]$. Конфигурационное усреднение функционала $U[\rho]$ завершает построение свободной энергии аморфного ферромагнетика, которая учитывает влияние структурного беспорядка посредством структурных корреляционных функций аморфной системы $S_l^{am}(k_1,\dots,k_l) = \sqrt{N}^{\,l-2}\langle\rho_{k_1}\cdots\rho_{k_l}\rangle_{av}^{c}$ где " с " - означает неприводимое среднее. Эти функции, среди которых особое место занимает экспериментально наблюдаемый структурный фактор $S^{am}(k) = \langle\rho_k\rho_{-k}\rangle_{av}$, выступают наряду с потенциалом обменного взаимодействия в качестве пара-

метров теории и, как известно, хорошо моделируются структурными функциями системы твердых сфер.

В п.3.2, выделив предварительно самосогласованное поле, найдено явное выражение для свободной энергии в виде ряда флуктуационных поправок с возрастающим числом сумм по волновым векторам. В диссертации получено приближение двух сумм по волновым векторам, соответствующее второму порядку теории возмущений по кубу обратного радиуса эффективного взаимодействия r_0^{-3}. При этом достаточно ограничиться в разложении (I2) первыми тремя слагаемыми с коэффициентами $a_l(k_1,\dots,k_l)$, $l\leq 4$. Эти величины, вычисленные с требуемой точностью в п.3.2 при помощи функционального интегрирования, имеют смысл фурье-образов эффективных многочастичных взаимодействий и совместно с F_H описывают вклад спиновых корреляционных эффектов в термодинамику аморфного магнетика. Найденное выражение для свободной энергии позволяет исследовать термодинамику аморфного ферромагнетика в широкой области изменения температуры, внешнего поля, плотности. На его основе рассчитана намагниченность и получено новое уравнение для температуры Кюри, зависящее от структурного фактора системы

$$T_c^* = 1 + \frac{1}{N}\sum_k \frac{\tilde{J}_k/T_c^*}{1-\tilde{J}_k/T_c^*}\,[S^{am}(k)-1] - \frac{1}{2S(S+1)N}\sum_k\left(\frac{\tilde{J}_k}{T_c^*}\right)^2\left(\frac{1}{1-\tilde{J}_k/T_c^*}+\frac{1}{2}\right). \qquad (13)$$

Здесь $\tilde{J}_k = J_k/J_0$ - коэффициент Фурье обменного взаимодействия, $T_c^* = T_c/T_c^0$, $T_c^0 = S(S+1)J_0N/3V$ - температура Кюри в приближении молекулярного поля. В линейном по обменному взаимодействию приближении это уравнение сводится к известному выражению А.Губанова (I960 г.), теоретически предсказавшего явление аморфного ферромагнетизма.

П.п.3.3-3.5 третьей главы посвящены анализу спиновой динамики аморфного ферромагнетика. С этой целью в п.п.3.3-3.4 разработана методика вычисления конфигурационно-усредненных спиновых температурных функций Грина в рамках формализма континуального интегрирования и произведен расчет поперечной функции Грина $K_{-+}^{am}(q) = \{\langle\overline{\varphi_q\varphi_{-q}}\rangle_{av} - 2\}/(2\alpha_k)$; $\varphi_q^{\pm} = \varphi_q^x \pm i\varphi_q^y$. Двойная черта обозначает термодинамическое усреднение по распределению Гиббса с конфигурационно-зависимым функционалом $F[\varphi;\rho]$ свободной энергии. Среднее $\langle \varphi^-_q \varphi^+_{-q} \rangle_{av}$ находится из цепочки уравнений в функциональных производных, являющейся обобщением предложенных в I-ой главе уравнений (7) для функций Грина:

$$\left\langle \prod_{j=1}^{s} \left(\frac{dF\,\varphi;\rho}{d\varphi^{\alpha_j}_{q_j}} + \frac{d}{d\varphi^{\alpha_j}_{q_j}} \right) \right\rangle_{av} = 0, \quad s = 1, 2, \ldots \qquad (I4)$$

В отличие от регулярных решеточных систем при анализе этой цепочки появляется нетривиальная и характерная для неупорядоченных систем проблема расцепления термодинамического и конфигурационного усреднений в выражениях типа $\langle \varphi^{\alpha_1}_{q_1} \ldots \varphi^{\alpha_s}_{q_s}\ \rho_{k'_1} \ldots \rho_{k'_m} \rangle_{av}$. В п.3.4 разработана регулярная процедура такого расцепления, при помощи которой найдено явное выражение для конфигурационно-усредненной поперечной функции Грина $K^{am}_{-+}(k,\omega) = \Sigma^{am}_{-+}(k,\omega)/[1-\alpha_k \Sigma^{am}_{-+}(k,\omega)]$. Величина $\Sigma^{am}_{-+}(k,\omega)$ рассчитана в приближении, следующем за ПХФ, что согласуется с точностью расчета свободной энергии. Полюс поперечной функции Грина определяет уравнение для магнонного спектра аморфного ферромагнетика и его затухание, учитывающие взаимодействие структурных и магнитных флуктуаций.

$$E(k) = \mu h + \langle\langle S^z \rangle\rangle_{av} \beta^{-1} (\alpha_0 - \alpha_k) + \frac{1}{\beta N} \sum_p \Big\{ n_p (\alpha_p - \alpha_{p-k}) +$$

$$+ \frac{M_2(y)(\alpha_p - \alpha_{p-k})}{M_1(y)(1 - \alpha_p M_2(y))} + \frac{M_2(y)(\alpha_p - \alpha_{p-k})^2}{\beta(1 - \alpha_{p-k} M_2(y))} \times$$

$$\times \frac{1}{E(k) - \varepsilon_p} + \frac{M_1(y)(\alpha_p - \alpha_{p-k}) S^{am}(p)}{(1 - \alpha_{p-k} M_2(y))^2} + \qquad (I5)$$

$$+ \frac{M_1^2(y)(\alpha_p - \alpha_{p-k})^2}{\beta(1 - \alpha_p M_2(y))^2} \cdot \frac{S^{am}(p)}{E(k) - \varepsilon_{p-k}} \Big\};$$

$$\gamma_k(\omega) = \frac{\pi}{N\beta^2} \sum_p \frac{M_2(y)(\alpha_p - \alpha_{p-k})^2}{1 - \alpha_{p-k} M_2(y)} \delta(\varepsilon_p - \omega) +$$

$$+ \frac{\pi}{N\beta^2} \sum_p \frac{M_1^2(y)(\alpha_p - \alpha_{p-k})^2}{(1 - \alpha_p M_2(y))^2} \delta(\varepsilon_{p-k} - \omega) S^{am}(p) \qquad (I6)$$

где $\langle\langle S^z \rangle\rangle_{av}$ – средний магнитный момент, $n_p = (e^{\beta\varepsilon_p} - 1)^{-1}$, ε_p – спектр в спин-волновом приближении, $\alpha_p = \beta J_p N/V$; $M_{l+1}(y) = \left(\frac{d}{dy}\right)^l SB(Sy)$ и $B(Sy)$ – функция Бриллюэна. Найденные выражения содержат парный структурный фактор аморфной системы и справедливы в широком диапазоне температур. В частности, при нулевой температуре спектр спиновых волн близок к выражению, полученному впервые Т.Канейоши (1972 г.). Из-за рассеяния магнонов на флуктуациях структуры затухание спектра отлично от нуля даже при $T = 0$, что, естественно, ставит вопрос о стабильности магнонных возбуждений в аморфном ферромагнетике. В связи с этим в п.3.5 предпринят анализ длинноволновой области спектра при низких температурах. Показано, что при малых значениях волнового вектора имеет место квадратичный закон дисперсии $E(k) \simeq Dk^2$, а затухание в этой области пропорционально пятой степени волнового вектора, $\gamma_k \sim k^5$. Это подтверждает существование хорошо определенных спин-волновых возбуждений в длинноволновом пределе, где сглаживаются эффекты мелкомасштабных структурных неоднородностей. Тем не менее неупорядоченность системы заметно влияет на величину константы спин-волновой жесткости D, которая, как показывают вычисления, зависит от структурного фактора системы. В этом же параграфе выполнен численный расчет магнонного спектра в различных приближениях с использованием твердосферной модели аморфной структуры.

В п.3.6 проанализировано поведение спонтанной намагниченности аморфного ферромагнетика в области низких температур. Используя приближение двух сумм по волновым векторам для свободной энергии, найдено выражение для низкотемпературной намагниченности, в котором произведена перенормировка спин-волнового приближения за счет слагаемых, учитывающих рассеяние магнонов на структурных флуктуациях. В результате получено низкотемпературное разложение намагниченности по полуцелым и целым степеням свободы, которое согласуется с данными эксперимента и может быть использовано для оценки параметров модельного обменного взаимодействия. В явном виде найдены коэффициенты этого разложения и доказано, что в рассматриваемом приближении неупорядоченность системы влияет на величину коэффициента $B_{3/2}$ в законе Блоха $M(T)/M(0) = 1 - B_{3/2}(T/T_c)^{3/2}$.

В п.3.7 выполнены численные расчеты полученных выражений с целью исследования влияния структурного беспорядка на магнитные свойства аморфного ферромагнетика. Вычисления проводились для различных моделей аморфной структуры и обменного взаимодействия. Произведен численный анализ различных приближений уравнения (13) для температуры Кюри, в ходе которого доказана нелинейная концентрационная зависимость T_c . Показано, что корректный учет магнонных и структурных флуктуаций позволяет обнаружить критическую концентрацию магнитных атомов, ниже которой в системе исчезает ферромагнитное упорядочение. Получено и численно исследовано уравнение, определяющее условие изменения рода магнитного фазового перехода при определенном соотношении между плотностью системы и радиусом обменного взаимодействия. Выполнены машинные расчеты зависимости спин-волновой жесткости, коэффициента в законе Блоха для намагниченности и температуры Кюри от параметра, характеризующего степень разупорядоченности системы. Результаты вычислений качественно согласуются с выводами экспериментальных исследований о смягчении спин-волновой жесткости, более быстром падении намагниченности с ростом температуры и понижении критической температуры T_c в аморфных ферромагнетиках по сравнению с соответствующими кристаллическими системами.

В четвертой главе построена статистическая теория жидких магнетиков, под которыми подразумевается равновесное жидкое состояние системы магнитно-активных атомов. Объектами ее являются магнитные жидкости, представляющие собой расплавы переходных и редкоземельных металлов, сплавы замещения, примесные магнитные атомы которых пребывают в состоянии термодинамического равновесия с матрицей основных атомов. Предложенная теория также применима к описанию ферромагнитных жидкостей, в которых точка магнитного фазового перехода находится в жидкой фазе. Последний пример в определенной мере выходит за рамки укоренившихся представлений, связывающих ферромагнетизм с твердым телом и отражающих тот факт, что в большинстве известных случаев из-за малости обменных сил по сравнению с конфигурационными взаимодействиями температура Кюри обычно меньше температуры плавления соответствующего вещества. Однако в принципе не исключена ситуа-

ция, когда в многокомпонентных расплавах конкуренция между конфигурационными и обменными взаимодействиями в результате их перенормировки нарушится в пользу последних, и температура Кюри превысит точку плавления. Экспериментально такая возможность подтверждена исследованиями расплава золото-кобальт (Г.Буш, Дж.Гюндеродт, 1968 г.; Б.Крафт, Т.Александер, 1973 г.).

В п.4.1 обсуждается модель жидкого магнетика, в качестве которой рассматривается классическая жидкость N магнитных атомов со спином S каждый, описываемая гамильтонианом

$$H = H_{conf}[r^N] + H_s[r^N] \qquad (17)$$

Конфигурационный гамильтониан $H_{conf}[r^N]$ состоит из кинетической энергии магнитных атомов и потенциальной энергии $\Phi[r^N]$ взаимодействий между ними. Магнитное поведение системы, как и в случае аморфных магнетиков, описывается гейзенберговским обменным гамильтонианом $H_s[r^N]$. Поскольку наиболее вероятной реализацией жидких магнетиков является равновесный раствор магнитных и немагнитных атомов, предложенный гамильтониан следует рассматривать в качестве эффективного гамильтониана системы магнитных атомов, возникающего в результате усреднения по состояниям немагнитной подсистемы. В силу этого все взаимодействия, присутствующие в нем, могут содержать как исходные, так и эффективные взаимодействия посредством немагнитной подсистемы. При этом потенциальная энергия $\Phi[r^N]$ содержит вклады от короткодействующих сил отталкивания, дальнодействующие хвосты парного потенциала, а также многочастичные межатомные взаимодействия. В диссертации предполагаются известными термодинамические и структурные функции чисто жидкостной подсистемы с гамильтонианом $H_{conf}[r^N]$, рассматриваемой в роли системы отсчета. В частности, для ее описания можно использовать результаты п.2.4 для корреляционных функций классических жидкостей.

Термодинамика жидкого магнетика полностью определяется свободной энергией $F = F_{liq} + F_s^{liq}$, где свободная энергия F_{liq} жидкостной подсистемы без учета магнитных взаимодействий представляется суммой свободной энергии идеального газа, вкладов от короткодействующей и дальнодействующей частей потенциала взаимодействий. Второе слагаемое представляет собой магнитную часть свободной энергии

$$F_s^{liq} = -\beta^{-1} \ln \langle Z[r^N] \rangle_{conf} , \qquad (18)$$

где величина $Z[\xi^N]$ определена в (9). В отличие от аморфного случая (8), теперь усреднение по конфигурациям означает обычное термодинамическое усреднение по распределению Гиббса с потенциальной энергией $\Phi[\xi^N]$ и производится под знаком логарифма. С учетом (9) исходное выражение имеет вид

$$F_s^{liq} = F_{mol}(y) - \beta^{-1} \ln \left\langle \int (d\varphi)\, e^{F[\varphi;\rho]} \right\rangle_{conf} , \qquad (19)$$

где, как обычно, выделено самосогласованное поле y, минимизирующее свободную энергию.

В п.4.2 предложены два взаимодополняющие себя подходы к исследованию жидких магнетиков. В первом из них с целью изучения магнитных характеристик объекта в выражении (19) сначала выполняется конфигурационное усреднение и исключается чисто жидкостная подсистема с H_{conf}. В результате в п.4.2 получено представление F_s^{liq} в виде континуального интеграла типа (3) по магнитным функциональным переменным φ_q^α с эффективным функционалом свободной энергии $\tilde{F}[\varphi] = \ln \langle \exp F[\varphi;\rho] \rangle_{conf}$. Последний представляется в форме функционального ряда (4) с перенормированными коэффициентами $\tilde{\mathfrak{M}}_{\alpha_1,\dots,\alpha_l}(q_1,\dots,q_l)$, в которые входят как спиновые функции Грина идеальной системы спинов, так и жидкостные структурные функции $S_l^0(k_1,\dots,k_l)$ системы отсчета с H_{conf}. В п.4.2 приведены явные выражения для коэффициентных функций $\tilde{\mathfrak{M}}_{\alpha_1,\dots,\alpha_l}(q_1,\dots,q_l)$, $l \le 4$, определяющие функционал свободной энергии в приближении модели "φ^4".

Для исследования жидкостных свойств рассматриваемой системы более удобным является другое, построенное в п.4.2 представление свободной энергии, которое получается из (19) исключением спиновой подсистемы путем функционального интегрирования по магнитным полевым переменным φ_q^α. Используя далее выражение (11) для статистической суммы $Z[\xi^N]$ заданной атомной конфигурации, получено выражение для свободной энергии в представлении жидкостных функциональных переменных

$$F_s^{liq} = F_H - \beta^{-1} \ln \int (d\xi) \exp V[\xi] . \qquad (20)$$

Интегрирование здесь ведется в бесконечных пределах по действительной и мнимой частям скалярной функциональной переменной ξ_k, сопряженной к коллективной переменной ρ_k. Построено разложение функционала свободной энергии $V[\xi]$ по степеням ξ_k с

коэффициентами $U_l(k_1,\dots,k_l)$, которые определены для $l \le 4$ и выражаются через эффективные многочастичные взаимодействия $a_l(k_1,\dots,k_l)$ функционала (12) и структурные функции жидкостной системы отсчета $S_l^0(k_1,\dots,k_l)$.

В п.4.3 в результате функционального интегрирования исходных выражений рассчитана свободная энергия жидкого магнетика в приближении двух сумм по волновым векторам, следующем за ПХФ. Она, как показывает прямое сравнение, всегда ниже свободной энергии метастабильного аморфного ферромагнетика. Минимизируя свободную энергию по параметру самосогласованного поля, получено уравнение для намагниченности. Для полного описания термодинамического состояния оно дополнено жидкостным уравнением состояния, связывающим давление P с температурой, плотностью и внешним магнитным полем. Эти уравнения, приведенные в явном виде в диссертации, зависят как от магнитных параметров системы (обменного взаимодействия, величины спина), так и от структурных функций системы отсчета с давлением P_{liq}. Анализ полученных выражений показывает, что знак магнитного вклада $P - P_{liq}$ в давление жидкого магнетика определяется, в основном, знаком обменного потенциала в области первого максимума парной функции распределения чисто жидкостной подсистемы с гамильтонианом H_{conf}. Квадратичная зависимость давления от внешнего поля и спонтанной намагниченности указывает на наличие в системе магнитострикционных эффектов, обусловленных обменным взаимодействием.

В п.4.4 на основе представления свободной энергии континуальным интегралом по магнитным полевым переменным, выполнен расчет парных температурных спиновых функций Грина жидкого ферромагнетика

$$K_{+-}^{liq}(q) = \frac{1}{2\alpha_k}\left\{ \widetilde{\varphi_q^+ \varphi_{-q}^-} - 2 \right\}; \quad K_{zz}^{liq}(q) = \frac{1}{\alpha_k}\left\{ \widetilde{\varphi_q^z \varphi_{-q}^z} - 1 \right\}, \qquad (21)$$

где волнистой чертой обозначено функциональное усреднение по гиббсовскому распределению с перенормированным функционалом свободной энергии $\tilde{F}[\varphi]$. При помощи развитой в главе 2 методики решена цепочка уравнений для функциональных средних $\widetilde{\varphi_{q_1}^{\sigma_1} \varphi_{q_2}^{\sigma_2}}$ и найдены выражения для функций Грина (21) в приближении, следующем за ПХФ. Они учитывают влияние жидкостных характеристик посредством перенормированных спиновых кумулянтов, которые содержат структурные функции жидкостной подсистемы. Найденные выражения при температурах, ниже температуры кристаллизации, переходят в соответствующие функции Грина для кристаллических магнетиков (Вако В.Г., Даркин А.И., Пикин С.А.

1967 г.). Путем выделения действительной и мнимой частей полюса поперечной функции Грина $K^{liq}_{+-}(k,\omega)$ жидкого магнетика найдено уравнение для спектра спиновых волн и его затухание. Полюс продольной функции Грина $K^{liq}_{zz}(k,\omega)$ при $(k,\omega) \to 0$ и $h=0$ дает уравнение для критической температуры T_c магнитного фазового перехода, которое, в подтверждение согласованности проводимых расчетов, совпадает с уравнением для T_c, полученным из термодинамического анализа свободной энергии. В рассматриваемом в работе приближении оно по своей форме аналогично уравнению (I3) для аморфного ферромагнетика, в котором функцию $S^{am}(k)$ следует заменить структурным фактором $S^{\circ}(k)$ равновесной жидкости.

В п.п.4.5–4.6 исследовано влияние магнитной подсистемы на жидкостные свойства жидкого магнетика. С этой целью в п.4.5 произведен расчет жидкостного структурного фактора $S(k) = \langle \rho_k \rho_{-k} \rangle$, где угловые скобки обозначают усреднение по распределению Гиббса с полным гамильтонианом (I7). Структурный фактор выражается через среднее от жидкостных функциональных переменных $S(k) = a_2^{-1}(k)\{\langle \xi_k \xi_{-k} \rangle_\xi - 1\}$ вычисленное с функционалом свободной энергии $V[\xi]$ в выражении (20); функция $a_2(k)$ –фурье-образ эффективного парного взаимодействия посредством магнитной подсистемы. Используя развитую в п.2.4 методику решения цепочки уравнений для корреляционных функций жидкости с учетом многочастичных взаимодействий, найден парный структурный фактор в приближении, следующем за ПХФ. В ПХФ структурный фактор

$$S(k) = S^{\circ}(k) \Big/ \left\{ 1 - \frac{M_1^2(y)\, S^{\circ}(k)\, \beta \frac{N}{V} J_k}{1 - \beta \frac{N}{V} J_k M_2(y)} \right\} \qquad (22)$$

В этом приближении в парамагнитной фазе в нулевом внешнем поле $h=0$ $S(k) = S^{\circ}(k)$. Включение магнитного поля приводит к тому, что $S(k) > S^{\circ}(k)$ для $J_k > 0$ и $S(k) < S^{\circ}(k)$ для $J_k < 0$. Поскольку для ферромагнитного обменного взаимодействия $J_0 > 0$, первое из приведенных неравенств должно выполняться во всяком случае при малых значениях волнового вектора, где ПХФ хорошо работает. Результаты остаются в силе и при учете следующего приближения. Эти выводы, как и само выражение для структурного фактора можно непосредственно проверить в экспериментах по рассеянию рентгеновских лучей в соответствующих материалах.

С учетом хорошо известного соотношения между изотермической

сжимаемостью χ_T и структурным фактором $S(k)$ из (22) следует вывод о том, что в ферромагнитной фазе, а также в парамагнитной фазе при наличии внешнего поля имеет место неравенство $\chi_T > \chi^{\circ}_T$ где χ°_T – сжимаемость жидкости без учета магнитных взаимодействий. Этот факт также можно проверить в опытах по измерению скорости звука в жидком магнетике, которая при включении магнитного поля или при $T < T_c$ должна понижаться.

Наконец, используя явное выражение в ПХФ для структурного фактора $S^{\circ}(k)$ системы отсчета, в п.4.5 из (22) получено уравнение для критической температуры "жидкость-пар". Показано, что включение магнитного поля усиливает парное конфигурационное взаимодействие притягивающего характера и в конечном итоге приводит к повышению критической точки.

В п.4.6 эти выводы подтверждены численными расчетами полученных выражений для структурного фактора сжимаемости, скорости звука и критической точки для модели магнитно-активных твердых сфер с гейзенберговским обменным взаимодействием.

<u>Пятая глава</u> диссертации посвящена исследованию фазового перехода второго рода в классических спиновых системах с гамильтонианом n -компонентной модели Стенли. В п.5.I при помощи метода спиновых коллективных переменных построено интегральное представление статистической суммы модели Изинга (n =I) и получено разложение по гауссовым моментам для свободной энергии и парной корреляционной функции. Выполненный в работе анализ критического поведения гауссовых моментов корреляционной функции позволил выделить часть полного функционала свободной энергии, учет которой необходим для правильного описания распределения критических флуктуаций параметра порядка. Исследована зависимость от размерности d физического пространства формы базисного распределения, в роли которого в трехмерном случае выступает негауссовое четверное распределение (модель "φ^4").

В п.п.5.2–5.7 исследовано критическое поведение d -мерной системы с вырожденным n -компонентным параметром порядка на основе метода ренормализационной группы (РГ). В качестве исходного используется полученное в п.I.4 представление статистической суммы модели Стенли континуальным интегралом типа (3) по флуктуациям параметра порядка $\vec{\varphi}_k$, где $\vec{\varphi} = (\varphi^{(1)},\dots,\varphi^{(n)})$-$n$ -компонентный вектор. Исследование фазового перехода методом РГ сводится к интегрированию статистической суммы по коротковолновым переменным (процедура сглаживания) и масштабному преобразованию непроинтегрированных функциональных переменных $\vec{\varphi}_k$ и соответствующих волновых векторов.

В результате путем функционального интегрирования без применения теории возмущений построено дифференциальное уравнение приближенного преобразования РГ

$$\frac{d\bar{F}[\varphi]}{d\ln s} = \left(1+\frac{d}{2}\right)\frac{\delta\bar{F}[\varphi]}{\delta\varphi} - d(R[\varphi] - R[0]) + \qquad (23)$$
$$+ (r - d_2(k_0))\varphi^2$$

Функционалы

$$R[\varphi] = e^{\bar{F}[\varphi]}\int d\vec{x}\, e^{-2\pi i\vec{\varphi}\vec{x}}\, I[x]\ln I[x] \qquad (24)$$

$$I[x] = \int d\vec{y}\, e^{2\pi i\vec{x}\vec{y}}\, e^{-\bar{F}[y]} \qquad (25)$$

Плотность функционала свободной энергии

$$\bar{F}[\varphi] = \frac{1}{2}d_2(k_0)\varphi^2 + \sum_{l\geq 2} u_{2l}\varphi^{2l}/(2l)! \ , \qquad (26)$$

где коэффициенты u_{2l} зависят от размерности n поля $\vec{\varphi}$, функция $d_2(k) \simeq r + ck^2$ содержит параметры, зависящие от температуры и обменного взаимодействия; $s \geq 1$ – непрерывный параметр РГ, характеризующий изменение масштаба длины, k_0 – импульс обрезания. В силу приближений, используемых в процедуре сглаживания (И.Р.Юхновский, 1976 г.) при выводе уравнения (23), критический показатель η корреляционной функции равен нулю. В связи с этим достаточно рассчитать критический показатель ν корреляционной длины, определяющий в соответствии с законами скейлинга остальные критические индексы.

В п.5.3 уравнение (23) представляется в виде системы уравнений для коэффициентных функций функционала свободной энергии (26). Используя кумулянтное разложение функционала (25), их правые части записываются в виде разложения по негауссовым семиинвариантам $\rho_{2l}(\vec{q})$ (т.н. ρ-разложение). "Вектор" $\vec{q} = (q_4, q_6, \dots)$, q_{2l} – перенормированные константы связи u_{2l}. Для расчета критических показателей в п.5.3, согласно стандартной схеме метода РГ, произведена линеаризация уравнений для u_{2l} в окрестности неподвижной точки $\vec{q}^*$ преобразования РГ (23). В явном виде рассчитана матрица

линейного оператора РГ, который также представлен в форме ρ-разложения. Анализ полученных выражений показывает, что в общем случае неподвижная точка $\vec{q}^*$ и определяемый в ней линейный оператор РГ зависят лишь от размерности d физического пространства и числа n компонент поля $\vec{\varphi}$. Это доказывает универсальность спектра линейного оператора РГ, максимальное значение которого определяет критический показатель корреляционной длины $\nu = \nu(n,d)$.

В п.п.5.4-5.6 развитая теория применима к модели "φ^4", когда $\vec{q} = (q_4, 0, \dots, 0)$. Неподвижная точка q_4^* определяется нулем функции Гелл-Манна и Лоу. В п.5.4 выполнено аналитическое исследование модели "φ^4" при помощи теории возмущений по q_4 (т.н. q-разложение). Найдены неподвижные точки и значения критического показателя ν.

В п.5.5 произведен численный анализ трехмерной модели "φ^4" на основе ρ-разложения путем машинного расчета негауссовых кумулянтов $\rho_{2l}(q_4)$. В результате без применения теории возмущений в широких пределах изменения величины двухчастичной константы связи q_4 получен явный вид функции Гелл-Манна и Лоу, которая обнаруживает осциллирующий характер. Выполнен расчет и классификация ее нулей, определяющих неподвижные точки РГ. Доказано, что лишь первый нетривиальный нуль этой функции является неподвижной точкой седлового типа, связанной с критическим поведением системы. Произведен численный анализ спектра и критических показателей. Результаты расчетов доказывают хорошую сходимость используемого ρ-разложения.

В п.5.6 в рамках предложенного подхода исследовано критическое поведение модели "φ^6", когда $\vec{q} = (q_4, q_6, 0, \dots, 0)$. При помощи теории возмущений по $\vec{q}$ решена система уравнений для координат q_4^*, q_6^* неподвижной точки. В различных приближениях найдены значения критического показателя корреляционной длины и доказано, что по сравнению с моделью "φ^4" использование приближения "φ^6" для функционала свободной энергии значительно улучшает третий порядок q-разложения. Предложен оптимальный способ обрыва рядов теории возмущений в зависимости от рассматриваемой модели "φ^{2l}" для функционала свободной энергии. В заключение этой главы в п.5.7 проанализированы разностные рекуррентные соотношения для ренормированного функционала свободной энергии.

В приложения вынесен некоторый вспомогательный материал, а также результаты численных расчетов в виде графиков и таблиц.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Юхновский И.Р.,Рудавский Ю.К. Применение метода коллективных переменных к модели Изинга.: I Статистическая сумма. -Препринт ИТФ-74-171Р, Киев, 37 с.
2. Юхновский И.Р.,Рудавский Ю.К.Применение метода коллективных переменных к модели Изинга.: П Исследование поведения парной корреляционной функции в окрестности точки фазового перехода. -Препринт ИТФ-75-13Р, Киев, 1975, 18 с.
3. Юхновский И.Р.,Рудавский Ю.К. Представление коллективных переменных для модели Изинга. -Укр.физ.журн.,1977, т.22, № 1, с.50-59.
4. Юхновский И.Р.,Рудавский Ю.К. Поведение моментов гауссового базисного распределения флуктуаций плотности спинового момента в парной корреляционной функции модели Изинга в окрестности критической точки. -Укр.физ.журн.,1977, т.22, № 2, с.186-205.
5. Юхновский И.Р.,Рудавский Ю.К. Обоснование формы базисного распределения вблизи фазового перехода. -Докл.АН СССР, 1977, т.233, № 4, с.579-582.
6. Vakarchuk I.A., Rudavsky Yu.K. Free energy representation of quantum Heisenberg model as the functional integral. - Preprint ITP-79-62E, Kiev, 1979, 61 p.
7. Yukhnovsky I.R., Vakarchuk I.A., Rudavsky Yu.K. N-component model. Functional representation and differential form of equations of the renormalization group. - Preprint ITP-79-20E, Kiev, 1979, 37 p.
8. Vakarchuk I.A., Rudavsky Yu.K. N-component model. The renormalization group equations and their linearization in the fixed point region. - Preprint ITP-79-47E, Kiev, 1979, 23 p.
9. Vakarchuk I.A., Rudavsky Yu.K. N-component model. The case of " φ^4 " model. - Preprint ITP-79-91E, Kiev, 1979, 17 p.
10. Vakarchuk I.A., Rudavsky Yu.K., Kolomiets V.A., Golovach Yu.V. N-component model. Investigation of " φ^4 " model on the basis of P-expansion. - Preprint ITP-80-34E, Kiev, 1980, 46 p.
11. Вакарчук И.А.,Рудавский Ю.К.,Понедилок Г.В. Микроскопическая теория жидкого состояния системы магнитных атомов. -Препринт ИТФ-80-135Р, Киев, 1980, 40 с.
12. Вакарчук И.А.,Рудавский Ю.К.,Головач Ю.В.Исследование модели " φ^6 " в рамках приближенного преобразования ренормализационной группы. -Препринт ИТФ-81-87Р, Киев, 1981, 20 с.
13. Вакарчук И.А.,Рудавский Ю.К.Метод функционального интегрирования в теории спиновых систем. -Теор.и мат.физ.,1981, т.49, № 2, с.234-247.
14. Вакарчук И.А.,Рудавский Ю.К.,Понедилок Г.В.Свободная энергия аморфного ферромагнетика с гейзенберговским обменным взаимодействием. -Препринт ИТФ-81-45Р, Киев, 1981, 40 с.
15. Вакарчук И.А.,Рудавский Ю.К.,Понедилок Г.В. Новые уравнения для корреляционных функций и функций Грина в методе континуального интегрирования. Функции Грина. -Препринт ИТФ-81-34Р, Киев,1981, 23 с.
16. Вакарчук И.А.,Рудавский Ю.К.,Головач Ю.В.,Коломиец В.А.Исследование фазового перехода в трехмерной модели " φ^4 ". -Укр.физ.журн.,1982, т.27, № 11, с.1711-1717.
17. Вакарчук И.А.,Рудавский Ю.К.,Понедилок Г.В.Новые уравнения для корреляционных функций и функций Грина в методе континуального интегрирования. Квантовая модель Гейзенберга. -Препринт ИТФ-81-448, Киев, 1981, 31 с.
18. Вакарчук И.А.,Рудавский Ю.К., Головач Ю.В.,Коломиец В.А. n -компонентная модель. Исследование двумерной модели " φ^4 " -Препринт ИТФ-81-86Р, Киев, 1981, 27 с.
19. Юхновский И.Р.,Вакарчук И.А.,Рудавский Ю.К.~~Приближенное~~ преобразование ренормализационной группы в теории фазовых переходов. I. Дифференциальное уравнение ренормгруппы. -Теор.и мат.физ., 1982, т.50, № 2, с.313-320.
20. Вакарчук И.А.,Рудавский Ю.К. Приближенное преобразование ренормализационной группы в теории фазовых переходов. П. Уравнение для неподвижных точек и линейный оператор ренормализационной группы. -Теор.и мат.физ.,1982, т.51, № 1, с.102-109.
21. Юхновский И.Р.,Рудавский Ю.К.,Головач Ю.В.Представление коллективных переменных для n -компонентной модели Стенли. -Препринт ИТФ-82-129Р, Киев, 1982, 24 с.
22. Вакарчук И.А., Рудавский Ю.К.,Понедилок Г.В.Новые уравнения для корреляционных функций и функций Грина в методе континуального интегрирования. -В сб.: П Международный симпозиум по избранным проблемам статистической механики. ОИЯИ, Д-17-81-758, Дубна, с.449-458.
23. Юхновский И.Р.,Рудавский Ю.К.,Головач Ю.В. Исследование разностных уравнений приближенного преобразования ренормализационной группы для n -компонентной модели. -Препринт ИТФ-82-130Р, Киев, 1982, 23 с.
24. Вакарчук И.А.,Рудавский Ю.К.,Понедилок Г.В.Микроскопическая тео-

рия аморфных и жидких ферромагнетиков. -В сб.: П Международный симпозиум по избранным проблемам статистической механики. ОИЯИ, Д-17-81-758, Дубна, 1982, с.307-317.

25. Вакарчук И.А.,Рудавский Ю.К.,Головач Ю.В. Исследование критических свойств n -компонентной модели на основе приближенного преобразования ренормализационной группы. -В сб.: "Физика многочастичных систем", Киев.: Наукова думка, 1983, вып.4, с.44-59.

26. Вакарчук И.А.,Рудавский Ю.К.,Понедилок Г.В. К проблеме жидкого ферромагнетика. -Укр.физ.журн.,1982, т.27, № 9, с.1414-1415.

27. Вакарчук И.А.,Понедилок Г.В.,Рудавский Ю.К. Теория жидких магнетиков. -Теор.и мат.физ., 1984, т.58, № 3, с.445-460.

28. Vakarchuk I.A., Rudavsky Yu.K., Ponedilok G.V. Free Energy of the Amorphous Ferromagnets with Heisenberg Exchange Interaction and Liquid-Like Disorder. - Phys. Stat. Sol.(b), 1985, v.128, p.p. 231-242.