

УДК 517.97:51-72:519.677:537.9

ОПТИМАЛЬНАЯ ГАУССОВА АППРОКСИМАЦИЯ В МОДЕЛИ ИЗИНГА**Н. Б. Мельников¹, Ю. А. Романенко²**

Исследуется влияние спиновых флуктуаций на магнитный фазовый переход в модели Изинга. Расчет основных характеристик сводится к интегрированию по конфигурациям случайного (флуктуирующего) поля. Для вычисления интегралов строится оптимальная гауссова аппроксимация флуктуирующего поля. Получен явный вид системы нелинейных уравнений, которая задает параметры оптимальной гауссовой аппроксимации при каждом значении температуры. Зависимость решения от температуры исследуется численно. Показано, что при слабом взаимодействии спинов температура фазового перехода меньше, чем в теории среднего поля, однако фазовый переход второго рода сохраняется. С ростом взаимодействия решение системы при высоких температурах становится неединственным, и возникает скачкообразный фазовый переход первого рода. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты 10-01-96003р и 11-01-00795) и Минобрнауки (программа № 1.1016.2011).

Ключевые слова: теория флуктуирующего поля, ферромагнетизм, преобразование Стратоновича-Хаббарда, принцип минимума свободной энергии, метод дифференцирования по параметру.

1. Введение. Модель Изинга описывает систему взаимодействующих спиновых моментов, принимающих два возможных значения: спин “вверх” и спин “вниз” (см., напр., [1–3]). Такая упрощенная модель удовлетворительно описывает некоторые вещества, однако ее главное достоинство состоит в том, что она является простейшей статистической моделью, которая дает фазовый переход второго рода из ферромагнитного в парамагнитное состояние (в случае двумерной или трехмерной кристаллической решетки).

Одномерная и двумерная модели Изинга допускают точное решение (см., напр., [1]). Для размерности три точные решения не найдены, поэтому вычисление физических характеристик, таких как намагниченность, непосредственно по определению не может быть выполнено из-за большого числа взаимодействующих спинов.

Метод функционального интегрирования [4, 5] заменяет парное взаимодействие спинов на их взаимодействие со случайным (флуктуирующим) внешним полем. В результате вычисление физических величин проводится в два этапа. Сначала вычисляется среднее по ансамблю для системы без взаимодействия при фиксированной конфигурации внешнего поля. Затем проводится усреднение по всем возможным конфигурациям поля (общая схема метода применительно к модели Изинга рассматривается, например, в [2]).

Практическое вычисление возникающих интегралов требует аппроксимаций. Аналитически могут быть вычислены только гауссовы интегралы. Простейшим гауссовым приближением является метод первала (см., напр., [6]), который заменяет флуктуирующее поле его средним значением. Однако приближение среднего поля оказывается недостаточным для количественного описания кооперативных явлений, таких как магнетизм.

Оптимальное гауссово приближение [7–10] учитывает влияние флуктуаций на среднее поле и наоборот. Оптимальность аппроксимации понимается в смысле принципа минимума свободной энергии [10, 11]. В работах [7, 8] оптимальная гауссова аппроксимация применена для описания магнетизма переходных металлов, а в работе [9] — для описания магнетизма диэлектриков. В работе [10] дано математическое обоснование метода оптимальной гауссовой аппроксимации в теории произвольного флуктуирующего поля.

Целью настоящей работы является реализация метода оптимальной гауссовой аппроксимации флуктуирующего поля в модели Изинга. Дальнейшее изложение строится следующим образом. Описывается модель Изинга (раздел 2), и выводятся выражения для статистической суммы и среднего спинового момента (намагниченности) в виде интегралов по флуктуирующему полю (раздел 3). Сначала обсуждается

¹ Центральный экономико-математический институт (ЦЭМИ) РАН, Нахимовский просп., д. 47, 117418, Москва; ст. науч. сотр., e-mail: melnikov@cs.msu.su

² Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, факультет вычислительной математики и кибернетики, Ленинские горы, д. 1, стр. 52, 119991, Москва; студент, e-mail: romanenko.julia@gmail.com

простейшая гауссова аппроксимация, приводящая к теории среднего поля (раздел 4). Затем выводится явный вид уравнений, которые позволяют вычислять параметры оптимальной гауссовой аппроксимации (среднее поле и величину среднеквадратичной флуктуации) самосогласованно при каждом значении температуры (раздел 5).

Поведение решений системы нелинейных уравнений, описывающей параметры гауссовой аппроксимации, исследуется численно (раздел 6). Зависимость решения от температуры строится при помощи метода дифференцирования по параметру (см., напр., [12, 13]). Дается подробное описание дифференциальных уравнений и начальных условий для соответствующих задач Коши в методе дифференцирования по параметру. Приводятся квадратурные формулы для несобственных интегралов, использованные для численного расчета среднего по ансамблю.

2. Модель Изинга. Будем рассматривать трехмерную кристаллическую решетку, имеющую узлы $\mathbf{R}_j = j_1 \mathbf{a}_1 + j_2 \mathbf{a}_2 + j_3 \mathbf{a}_3$, где $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ и \mathbf{a}_3 — основные векторы решетки, а j_1, j_2 и j_3 — произвольные целые числа (см., напр., [14]). Спиновый момент S_j на узле \mathbf{R}_j может принимать два значения: $S_j = -1/2$ (спин “вниз”) и $S_j = 1/2$ (спин “вверх”). Функция S_j , заданная на решетке, предполагается периодической с периодом N_j в направлении вектора \mathbf{a}_j , поэтому достаточно рассматривать конечный кристалл, состоящий из $N = N_1 N_2 N_3$ узлов.

Совокупность спиновых моментов $\mathbf{S} = (S_1, \dots, S_N)$ задает конфигурацию системы. Энергия конфигурации \mathbf{S} определяется гамильтонианом (см., напр., [2, 3])

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{jj'} J_{jj'} S_j S_{j'}, \tag{1}$$

где коэффициенты взаимодействия $J_{jj'}$ считаются известными величинами. Функция $J_{jj'}$ считается периодической по обоим аргументам. Рассматривается ферромагнитный случай: $J_{jj'} > 0$. Минимум энергии в этом случае достигается, когда все спины одинаково направлены.

Прямое и обратное преобразования Фурье для спинов задаются формулами

$$S_{\mathbf{q}} = \sum_j S_j e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j}, \quad S_j = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_j}, \tag{2}$$

где \mathbf{q} — вектор обратной решетки, а суммирование ведется по зоне Бриллюэна (см., напр., [14]). Аналогично для функции $J_{jj'}$ прямое и обратное преобразования Фурье определяются формулами

$$J_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = \frac{1}{N} \sum_{jj'} J_{jj'} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} e^{i\mathbf{q}'\mathbf{R}_{j'}}, \quad J_{jj'} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} J_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} e^{-i\mathbf{q}'\mathbf{R}_{j'}}. \tag{3}$$

Здесь и далее функцию и ее преобразование Фурье обозначаем одной и той же буквой и различаем аргументом (индексом), как это принято в математической физике. Аналогично любую физическую величину обозначаем одной и той же буквой вне зависимости от числа аргументов (индексов).

Взаимодействие предполагается однородным: $J_{jj'} = J_{j-j'}$. Непосредственно проверяется следующее утверждение (см., напр., [15]).

Утверждение 1. Пусть $J_{jj'} = J_{j-j'}$ — теплицева матрица. Тогда матрица фурье-образа диагональна: $J_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = J_{\mathbf{q}} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}$, где прямое и обратное преобразования Фурье функции J_j определены формулами

$$J_{\mathbf{q}} = \sum_j J_j e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j}, \quad J_j = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} J_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_j}. \tag{4}$$

Доказательство. Подставляя $J_{jj'} = J_{j-j'}$ в выражение (3) для $J_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}$ и используя формулу (4), имеем

$$J_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = \frac{1}{N} \sum_{jj'} J_{j-j'} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} e^{i\mathbf{q}'\mathbf{R}_{j'}} = \frac{1}{N^2} \sum_{jj'} \sum_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} e^{i\mathbf{q}'\mathbf{R}_{j'}}.$$

Меняя порядок суммирования, переписываем в виде

$$J_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}} \sum_j e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{q})\mathbf{R}_j} \sum_{j'} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{q}')\mathbf{R}_{j'}}.$$

С учетом равенства (см., напр., [14])

$$\sum_j e^{ikR_j} = N\delta_{k0} \quad (5)$$

получаем требуемое соотношение $J_{qq'} = \sum_k J_k \delta_{kq} \delta_{kq'} = J_q \delta_{qq'}$.

Следствие 1. Гамильтониан (1) в фурье-представлении имеет вид

$$H = -\frac{1}{2N} \sum_q J_q |S_q|^2, \quad (6)$$

где функция J_q вещественная и четная: $J_{-q} = J_q$.

Доказательство. Подставляя $J_{jj'} = J_{|j-j'|}$ в (1) и используя формулу (4), имеем для H следующее выражение:

$$H = -\frac{1}{2N} \sum_{jj'} \sum_q J_q e^{iq(R_j - R_{j'})} S_j S_{j'}.$$

Меняя порядок суммирования и учитывая (2), находим

$$H = -\frac{1}{2N} \sum_q J_q \sum_j S_j e^{iqR_j} \sum_{j'} S_{j'} e^{-iqR_{j'}} = -\frac{1}{2N} \sum_q J_q S_{-q} S_q.$$

Используя свойство $S_{-q} = S_q^*$, где звездочка обозначает комплексное сопряжение, получаем формулу (6).

В силу соотношения $J_{jj'} = J_{|j-j'|}$ имеем $J_j = J_{-j}$, поэтому фурье-образ (4) является четной функцией: $J_q = J_{-q}$. С другой стороны, в силу вещественности коэффициентов взаимодействия J_j имеем $J_q^* = J_{-q}$. В результате получаем $J_q^* = J_q$. Следствие доказано.

3. Теория флуктуирующего поля. Статистическая сумма Z системы с гамильтонианом H определяется соотношением

$$Z = \sum_S e^{-H/T} \equiv \text{Tr} e^{-H/T}, \quad (7)$$

где T — температура в энергетических единицах, а обозначение Tr для суммы по всевозможным 2^N состояниям системы связано с тем, что гамильтониан модели Изинга может быть записан в операторной форме (см., напр., [1, 3]). Представляем статсумму интегралом по вспомогательной переменной при помощи преобразования Стратоновича–Хаббарда [4, 5].

В основе преобразования Стратоновича–Хаббарда лежит тождество (бесконечные пределы интегрирования для краткости не пишем)

$$\exp\left(\frac{A^2}{a}\right) = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \int \exp(-ax^2 + 2Ax) dx, \quad (8)$$

верное для произвольных вещественных чисел A и $a > 0$. Это тождество непосредственно получается из равенства

$$\int \exp(-ax^2) dx = \int \exp\left(-a\left(x - \frac{A}{a}\right)^2\right) dx$$

после замены интеграла в левой части его значением $\sqrt{\pi/a}$ и приведения подобных в правой части. В комплексном случае используется гауссов интеграл

$$\frac{\pi}{a} = \int e^{-a(x^2+y^2)} dx dy = \int e^{-a|z|^2} d(z^*, z),$$

где $z = x + iy$ и $d(z^*, z) = dz^* dz / (2i) = dx dy$. Преобразуя равенство

$$\int e^{-a|z|^2} d(z^*, z) = \int \exp\left(-a\left|z - \frac{A}{a}\right|^2\right) d(z^*, z),$$

получаем комплексный аналог тождества (8):

$$e^{|A|^2/a} = \frac{a}{\pi} \int \exp(-a|z|^2 + z^* A + z A^*) d(z^*, z), \quad a > 0. \quad (9)$$

Далее используем представление (6) гамильтониана H в виде линейной комбинации квадратов. Подставляя (6) в (7), имеем

$$Z = \text{Tr} \exp\left(\frac{1}{2NT} \sum_{\mathbf{q}} J_{\mathbf{q}} |S_{\mathbf{q}}|^2\right) = \text{Tr} \prod_{\mathbf{q}} \exp\left(\frac{J_{\mathbf{q}}}{2NT} |S_{\mathbf{q}}|^2\right) = \text{Tr} \prod_{\mathbf{q}} \exp\left(2\left(\sqrt{\frac{J_{\mathbf{q}}}{NT}} \frac{|S_{\mathbf{q}}|}{2}\right)^2\right). \quad (10)$$

При $\mathbf{q} = 0$ применяем тождество (8) с $a = 1/2$ и $A = \frac{1}{2} S_0 \sqrt{J_0/NT}$:

$$\begin{aligned} \exp\left(2\left(\sqrt{\frac{J_0}{NT}} \frac{S_0}{2}\right)^2\right) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \exp\left(-\frac{x_0^2}{2} + \sqrt{\frac{J_0}{NT}} S_0 x_0\right) dx_0 = \\ &= \left(\int \exp\left(-\frac{x_0^2}{2}\right) dx_0\right)^{-1} \int \exp\left(-\frac{x_0^2}{2} + \sqrt{\frac{J_0}{NT}} S_0 x_0\right) dx_0. \end{aligned} \quad (11)$$

При $\mathbf{q} \neq 0$ применяем тождество (9) с $a = 1/2$ и $A = \frac{1}{2} S_{\mathbf{q}} \sqrt{J_{\mathbf{q}}/NT}$. Используя равенства $J_{\mathbf{q}} = J_{-\mathbf{q}}$ и $S_{\mathbf{q}}^* = S_{-\mathbf{q}}$, приходим к соотношению

$$\exp\left(2\left(\sqrt{\frac{J_{\mathbf{q}}}{NT}} \frac{|S_{\mathbf{q}}|}{2}\right)^2\right) = \frac{1}{2\pi} \int \exp\left(-\frac{|z_{\mathbf{q}}|^2}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{J_{\mathbf{q}}}{NT}} [S_{\mathbf{q}} z_{\mathbf{q}}^* + S_{-\mathbf{q}} z_{\mathbf{q}}]\right) d(z_{\mathbf{q}}^*, z_{\mathbf{q}}). \quad (12)$$

Заменяя \mathbf{q} на $-\mathbf{q}$, получаем

$$\exp\left(2\left(\sqrt{\frac{J_{-\mathbf{q}}}{NT}} \frac{|S_{-\mathbf{q}}|}{2}\right)^2\right) = \frac{1}{2\pi} \int \exp\left(-\frac{|z_{-\mathbf{q}}|^2}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{J_{\mathbf{q}}}{NT}} [S_{-\mathbf{q}} z_{-\mathbf{q}}^* + S_{\mathbf{q}} z_{-\mathbf{q}}]\right) d(z_{-\mathbf{q}}^*, z_{-\mathbf{q}}). \quad (13)$$

Левые части формул (12) и (13) равны. Для равенства правых частей полагаем $z_{-\mathbf{q}} = z_{\mathbf{q}}^*$. Тогда (12) записывается в виде

$$\begin{aligned} \exp\left(2\left(\sqrt{\frac{J_{\mathbf{q}}}{NT}} \frac{|S_{\mathbf{q}}|}{2}\right)^2\right) &= \frac{1}{2\pi} \int \exp\left(-\frac{|z_{\mathbf{q}}|^2}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{J_{\mathbf{q}}}{NT}} [S_{\mathbf{q}} z_{-\mathbf{q}} + S_{-\mathbf{q}} z_{\mathbf{q}}]\right) d(z_{\mathbf{q}}^*, z_{\mathbf{q}}) = \\ &= \left(\int \exp\left(-\frac{|z_{\mathbf{q}}|^2}{2}\right) d(z_{\mathbf{q}}^*, z_{\mathbf{q}})\right)^{-1} \int \exp\left(-\frac{|z_{\mathbf{q}}|^2}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{J_{\mathbf{q}}}{NT}} [S_{\mathbf{q}} z_{-\mathbf{q}} + S_{-\mathbf{q}} z_{\mathbf{q}}]\right) d(z_{\mathbf{q}}^*, z_{\mathbf{q}}). \end{aligned} \quad (14)$$

Полагая $z_0 = x_0$, имеем

$$\sum_{\mathbf{q}} (S_{\mathbf{q}} z_{-\mathbf{q}} + S_{-\mathbf{q}} z_{\mathbf{q}}) = 2 \sum_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}} z_{-\mathbf{q}}. \quad (15)$$

Подставляя (11) и (14) в (10), с учетом (15) получаем

$$\begin{aligned} Z &= \left(\int \exp\left(-\frac{z_0^2}{2}\right) dz_0\right)^{-1} \left(\prod_{\mathbf{q} \neq 0} \int \exp\left(-\frac{|z_{\mathbf{q}}|^2}{2}\right) d(z_{\mathbf{q}}^*, z_{\mathbf{q}})\right)^{-1} \times \\ &\times \text{Tr} \left(\int \exp\left(-\frac{z_0^2}{2} + \sqrt{\frac{J_0}{NT}} S_0 z_0\right) dz_0 \prod_{\mathbf{q} \neq 0} \int \exp\left(-\frac{|z_{\mathbf{q}}|^2}{2} + \sqrt{\frac{J_{\mathbf{q}}}{NT}} S_{\mathbf{q}} z_{-\mathbf{q}}\right) d(z_{\mathbf{q}}^*, z_{\mathbf{q}})\right) = \\ &= \left(\int \exp\left(-\sum_{\mathbf{q}} \frac{|z_{\mathbf{q}}|^2}{2}\right) dz\right)^{-1} \text{Tr} \left(\int \exp\left(-\sum_{\mathbf{q}} \frac{|z_{\mathbf{q}}|^2}{2} + \sqrt{\frac{J_{\mathbf{q}}}{NT}} \sum_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}} z_{-\mathbf{q}}\right) dz\right), \end{aligned}$$

где элемент объема $dz = dz_0 \prod_{\mathbf{q} \neq 0} d(z_{\mathbf{q}}^*, z_{\mathbf{q}}) = dx_0 \prod_{\mathbf{q} > 0} (dx_{\mathbf{q}})^2 (dy_{\mathbf{q}})^2$ корректно определен, поскольку \mathbf{q} принимает конечное число значений.

Вводим новую переменную $V_{\mathbf{q}} = z_{\mathbf{q}} \sqrt{NTJ_{\mathbf{q}}}$, имеющую размерность энергии. После замены переменной окончательно получаем следующее утверждение.

Теорема 1. *Статсумма (7) представима в виде интеграла:*

$$Z = \left(\int e^{-F_0(\mathbf{V})/T} d\mathbf{V} \right)^{-1} \int e^{-(F_0(\mathbf{V})+F_1(\mathbf{V}))/T} d\mathbf{V},$$

где $\mathbf{V} = (V_{\mathbf{q}_1}, \dots, V_{\mathbf{q}_N})$ – флуктуирующее поле,

$$F_0(\mathbf{V}) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{|V_{\mathbf{q}}|^2}{J_{\mathbf{q}}} - \text{энергия поля}, \quad (16)$$

$$F_1(\mathbf{V}) = -T \ln \text{Tr} \exp\left(-\frac{H_1(\mathbf{V})}{T}\right) - \text{свободная энергия системы невзаимодействующих спинов во внешнем поле}, \quad (17)$$

$$H_1(\mathbf{V}) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}} V_{-\mathbf{q}} - \text{гамильтониан этой системы}. \quad (18)$$

Средний спиновый момент определяется формулой

$$\langle S_j \rangle \equiv \frac{1}{Z} \text{Tr}(S_j e^{-H/T}) \quad (19)$$

и в однородном случае не зависит от узла: $\bar{S} = \langle S_j \rangle$. Переходим в этом выражении к интегралу аналогично тому, как это было сделано для статсуммы. Вводя обозначение $F(\mathbf{V}) = F_0(\mathbf{V}) + F_1(\mathbf{V})$, получаем

Следствие 2. *Средний спиновый момент (19) может быть вычислен при помощи усреднения по конфигурациям флуктуирующего поля:*

$$\langle S_j \rangle = \int S_j(\mathbf{V}) p(\mathbf{V}) d\mathbf{V}, \quad (20)$$

где среднее в системе независимых спинов в поле \mathbf{V} задается выражением

$$S_j(\mathbf{V}) = (\text{Tr} e^{-H_1(\mathbf{V})/T})^{-1} \text{Tr}(S_j e^{-H_1(\mathbf{V})/T}) \quad (21)$$

а плотность вероятности $p(\mathbf{V})$ пропорциональна функции $\exp(-F(\mathbf{V})/T)$.

Теорема 2. *Имеют место соотношения*

$$\left\langle \frac{\partial F(\mathbf{V})}{\partial V_j} \right\rangle = 0, \quad j = \overline{1, N}, \quad (22)$$

где $\langle \dots \rangle = \int \dots p(\mathbf{V}) d\mathbf{V}$, а прямое и обратное преобразования Фурье поля \mathbf{V} определены формулами

$$V_{\mathbf{q}} = \sum_j V_j e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j}, \quad V_j = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_j}. \quad (23)$$

Доказательство. Подставляя выражение (2) для фурье-образа спина $S_{\mathbf{q}}$ в выражение (18) и меняя порядок суммирования, получаем

$$H_1(\mathbf{V}) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left(\sum_i S_i e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} \right) V_{-\mathbf{q}} = -\sum_i S_i \left(\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} V_{-\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} \right).$$

Вводя индекс суммирования $\mathbf{q}' = -\mathbf{q}$, с учетом (23) записываем гамильтониан в виде

$$H_1(\mathbf{V}) = -\sum_i S_i V_i. \quad (24)$$

Дифференцируя свободную энергию (17) по V_j , с учетом (24) имеем

$$\frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j} = \left(\text{Tr} e^{-H_1(\mathbf{V})/T} \right)^{-1} \text{Tr} \left(\frac{\partial H_1(\mathbf{V})}{\partial V_j} e^{-H_1(\mathbf{V})/T} \right) = - \frac{\text{Tr}(S_j e^{-H_1(\mathbf{V})/T})}{\text{Tr}(e^{-H_1(\mathbf{V})/T})} = -S_j(\mathbf{V}).$$

Отсюда с учетом (20) и (21) находим

$$\langle S_j \rangle = - \left\langle \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j} \right\rangle. \tag{25}$$

С другой стороны, среднее (25) можем записать в виде

$$\langle S_j \rangle = -M^{-1} \int \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j} e^{-(F_0(\mathbf{V})+F_1(\mathbf{V}))/T} d\mathbf{V} = TM^{-1} \int e^{-F_0(\mathbf{V})/T} \frac{\partial}{\partial V_j} (e^{-F_1(\mathbf{V})/T}) d\mathbf{V},$$

где $M = \int e^{-F_0(\mathbf{V})/T} d\mathbf{V}$ — нормирующий множитель. Интегрируя по частям, получаем

$$\langle S_j \rangle = -TM^{-1} \int \frac{\partial}{\partial V_j} (e^{-F_0(\mathbf{V})/T}) e^{-F_1(\mathbf{V})/T} d\mathbf{V} = M^{-1} \int \frac{\partial F_0(\mathbf{V})}{\partial V_j} e^{-(F_0(\mathbf{V})+F_1(\mathbf{V}))/T} d\mathbf{V}.$$

Таким образом,

$$\langle S_j \rangle = \left\langle \frac{\partial F_0(\mathbf{V})}{\partial V_j} \right\rangle. \tag{26}$$

Сравнивая (25) и (26), получаем соотношение (22). Что и требовалось доказать.

С помощью теоремы 2 получаем выражение для спинового момента в виде интеграла по флуктуирующему полю (аналогичное выражение для многополосного гамильтониана Хаббарда получено в [16]).

Следствие 3. Средний спиновый момент $\bar{S} = \langle S_j \rangle$ связан со средним полем

$$\langle V_j \rangle = \left(\int e^{-F_0(\mathbf{V})/T} d\mathbf{V} \right)^{-1} \int V_j e^{-(F_0(\mathbf{V})+F_1(\mathbf{V}))/T} d\mathbf{V} \tag{27}$$

следующим соотношением:

$$\bar{V} = J_0 \bar{S}, \tag{28}$$

где $J_0 = \sum_j J_j = \sum_j J_{jj'}$, а среднее поле $\bar{V} = \langle V_j \rangle$ не зависит от узла.

Доказательство. Используя свойство $V_{\mathbf{q}}^* = V_{-\mathbf{q}}$ и выражение (23) для $V_{\mathbf{q}}$, энергию поля (16) записываем в виде

$$F_0(\mathbf{V}) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{J_{\mathbf{q}}} V_{\mathbf{q}} V_{-\mathbf{q}} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{J_{\mathbf{q}}} \left(\sum_i V_i e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} \right) \left(\sum_{i'} V_{i'} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_{i'}} \right).$$

Дифференцируя по V_j , находим

$$\frac{\partial F_0(\mathbf{V})}{\partial V_j} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{J_{\mathbf{q}}} \left[e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} \left(\sum_{i'} V_{i'} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_{i'}} \right) + \left(\sum_i V_i e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} \right) e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} \right]. \tag{29}$$

Усредняя и используя равенство (5), приходим к соотношению $\left\langle \frac{\partial F_0(\mathbf{V})}{\partial V_j} \right\rangle = \frac{\bar{V}}{J_0}$. С учетом (26) отсюда следует требуемое равенство.

Для вычисления интеграла (27) необходимо получить явное выражение для свободной энергии $F_1(\mathbf{V})$.

Утверждение 2. Свободная энергия вычисляется по формуле

$$F_1(\mathbf{V}) = -T \sum_j \ln \left(2 \cosh \left(\frac{V_j}{2T} \right) \right). \tag{30}$$

Доказательство. Подставляя выражение (24) для гамильтониана $H_1(\mathbf{V})$ в формулу (17) для свободной энергии, имеем $F_1(\mathbf{V}) = -T \ln \text{Tr} \exp\left(\sum_j \frac{S_j V_j}{T}\right)$. Вычисляем статсумму системы невзаимодействующих спинов:

$$\exp\left(-\frac{F_1(\mathbf{V})}{T}\right) = \text{Tr} \exp\left(\sum_j \frac{S_j V_j}{T}\right) \equiv \sum_{\mathbf{S}} \exp\left(\sum_j \frac{S_j V_j}{T}\right) = \prod_j \sum_{S_j=\pm 1/2} \exp\left(\frac{S_j V_j}{T}\right).$$

С учетом $\exp\left(\frac{V_j}{2T}\right) + \exp\left(\frac{-V_j}{2T}\right) = 2 \cosh\left(\frac{V_j}{2T}\right)$ находим $F_1(\mathbf{V}) = -T \ln\left(\prod_j 2 \cosh\left(\frac{V_j}{2T}\right)\right)$. Отсюда следует требуемое выражение.

Аналитическое вычисление интеграла по флуктуирующему полю возможно лишь для гауссова распределения, поэтому полученное точное выражение для свободной энергии $F_1(\mathbf{V})$ требует аппроксимаций.

4. Теория среднего поля. Метод перевала дает простейшее гауссово приближение исходного флуктуирующего поля \mathbf{V} с плотностью вероятности, пропорциональной $\exp(-F(\mathbf{V})/T)$.

Суть метода состоит в следующем (см., напр., [6]). Среднее поле $\bar{\mathbf{V}}$ определяется из условия локального минимума:

$$\frac{\partial F(\bar{\mathbf{V}})}{\partial V_j} = 0. \quad (31)$$

Функция $F(\mathbf{V})$ заменяется своей квадратичной частью разложения в ряд Тейлора в среднем поле:

$$F_{\text{MF}}(\mathbf{V}) = \frac{1}{2} \sum_{jj'} \frac{\partial^2 F(\bar{\mathbf{V}})}{\partial V_j \partial V_{j'}} (V_j - \bar{V}_j)(V_{j'} - \bar{V}_{j'}) \quad (32)$$

(несущественный свободный член для краткости не пишем).

Квадратичное приближение $F_{\text{MF}}(\mathbf{V})$ задает гауссову случайную величину \mathbf{V} с плотностью вероятности $p_{\text{MF}}(\mathbf{V})$, пропорциональной функции $\exp(-F_{\text{MF}}(\mathbf{V})/T)$. В ферромагнитном случае среднее поле ищется в виде $\bar{V}_j = \bar{V}$ для всех j .

Теорема 3. Уравнение теории среднего поля (31) имеет вид

$$\bar{V} = \frac{J_0}{2} \tanh\left(\frac{\bar{V}}{2T}\right). \quad (33)$$

Доказательство. С учетом $F(\mathbf{V}) = F_0(\mathbf{V}) + F_1(\mathbf{V})$ соотношение (31) записываем в виде

$$\frac{\partial F_0(\bar{\mathbf{V}})}{\partial V_j} + \frac{\partial F_1(\bar{\mathbf{V}})}{\partial V_j} = 0. \quad (34)$$

Вычисляем первое слагаемое, действуя как при доказательстве следствия 3. Подставляя $V_i = \bar{V}$ в выражение (29) для частной производной функции $F_0(\mathbf{V})$, имеем

$$\frac{\partial F_0(\bar{\mathbf{V}})}{\partial V_j} = \frac{\bar{V}}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{J_{\mathbf{q}}} \left(e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} \sum_{i'} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_{i'}} + e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} \sum_i e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} \right).$$

Используя равенство (5), приходим к

$$\frac{\partial F_0(\bar{\mathbf{V}})}{\partial V_j} = \frac{\bar{V}}{J_0}. \quad (35)$$

Теперь вычисляем второе слагаемое (34). Дифференцируя выражение (30) для свободной энергии $F_1(\mathbf{V})$, имеем

$$\frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j} = -T \frac{\partial}{\partial V_j} \ln\left(2 \cosh\left(\frac{V_j}{2T}\right)\right) = -\frac{1}{2} \tanh\left(\frac{V_j}{2T}\right). \quad (36)$$

Подставляя $V_j = \bar{V}$, находим

$$\frac{\partial F_1(\bar{\mathbf{V}})}{\partial V_j} = -\frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\bar{V}}{2T}\right). \quad (37)$$

Подставляя формулы (35) и (37) в соотношение (34), получаем требуемое выражение для уравнения теории среднего поля. Что и требовалось доказать.

Отметим, что выражение (28), связывающее среднее поле со средним спиновым моментом, позволяет записать уравнение (33) в виде

$$\bar{S} = \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{J_0 \bar{S}}{2T}\right). \tag{38}$$

Именно в такой форме уравнение теории среднего поля обычно получают, не используя переход к флуктуирующему полю. В этом случае аппроксимируют исходный гамильтониан (1) и вычисляют средний спиновый момент исходя из определения (см., напр., [3]).

При малых T уравнение (38) имеет три решения: нулевое и два ненулевых, которые отличаются знаком. Устойчивым является ненулевое (ферромагнитное) решение \bar{S} . При больших T существует лишь нулевое (парамагнитное) решение, и оно устойчиво. Температура фазового перехода из ферро- в парамагнитное состояние — температура Кюри T_C — определяется из условия, что ненулевое решение \bar{S} исчезает при $T \rightarrow T_C - 0$. Иными словами, в пределе при $T \rightarrow T_C - 0$ происходит слияние двух решений в нуле. Поэтому при $T = T_C$ должно выполняться равенство производных обеих частей уравнения (33) по \bar{S} при $\bar{S} = 0$:

$$\frac{J_0}{4T} \frac{d \tanh(0)}{d\bar{S}} = 1. \tag{39}$$

Получаем значение температуры Кюри для модели Изинга в приближении среднего поля: $T_C^{MF} = J_0/4$. Метод перевала дает главный член асимптотики для интеграла по флуктуирующему полю при $T \rightarrow 0$ (см., напр., [6]). Наша цель — получить гауссово приближение, пригодное в более широком интервале температур.

5. Оптимальная гауссова аппроксимация. Для определения оптимальной аппроксимации флуктуирующего поля \mathbf{V} используется принцип минимума свободной энергии [11] в следующей форме.

Теорема [10]. Пусть “истинная” свободная энергия $F(\mathbf{V})$ и аппроксимирующая ее “модельная” функция $F_m(\mathbf{V})$ таковы, что существуют полные свободные энергии

$$\mathcal{F} = -T \ln \int \exp(-F(\mathbf{V})/T) d\mathbf{V}, \quad \mathcal{F}_m = -T \ln \int \exp(-F_m(\mathbf{V})/T) d\mathbf{V}.$$

Тогда верно неравенство

$$\mathcal{F} \leq \mathcal{F}_m + \langle F(\mathbf{V}) - F_m(\mathbf{V}) \rangle_m, \tag{40}$$

где среднее определено соотношением $\langle \dots \rangle_m = \int (\dots) \exp(-F_m(\mathbf{V})/T) d\mathbf{V}$.

Определение. Оптимальной на заданном классе функций называем аппроксимацию $F_m(\mathbf{V})$, которая доставляет минимум правой части неравенства (40).

Квадратичная функция вида $F_G(\mathbf{V}) = \sum_j A_j (V_j - \bar{V})^2$ задает аппроксимацию исходного флуктуирующего поля \mathbf{V} гауссовым полем с плотностью вероятности

$$p_G(\mathbf{V}) = \frac{1}{Z_G} \exp(-F_G(\mathbf{V})/T), \quad \text{где } Z_G = \int \exp(-F_G(\mathbf{V})/T) d\mathbf{V}.$$

Здесь V_j — независимые гауссовы случайные величины. Параметры \bar{V} и A_j связаны со средним и дисперсией случайной величины V_j известными соотношениями: $\langle V_j \rangle_G = \bar{V}$ и $\langle (V_j - \bar{V})^2 \rangle_G = T/(2A_j)$. Из результатов [10] следует

Утверждение 3. Параметры \bar{V} и A_j , $j = \overline{1, N}$, оптимальной гауссовой аппроксимации $F_G(\mathbf{V})$ определяются из системы нелинейных уравнений

$$\left\langle \frac{\partial F(\mathbf{V})}{\partial V_j} \right\rangle_G = 0, \quad A_j = \frac{1}{2} \left\langle \frac{\partial^2 F(\mathbf{V})}{\partial V_j^2} \right\rangle_G, \tag{41}$$

где $\langle \dots \rangle_G = \int \dots p_G(\mathbf{V}) d\mathbf{V}$.

Получим явный вид уравнений среднего поля и квадратичной формы (41) оптимальной гауссовой аппроксимации.

Теорема 4. В модели Изинга коэффициенты оптимальной гауссовой аппроксимации $A_j = T/(2D)$ одинаковы при всех j , а система уравнений, определяющая среднее \bar{V} и дисперсию D флуктуирующих полей $V_j = V$, имеет вид

$$\bar{V} = \frac{J_0}{2} \left\langle \tanh\left(\frac{V}{2T}\right) \right\rangle, \quad (42)$$

$$D = \frac{\tilde{J}T}{1 - \frac{\tilde{J}}{4T} \left\langle \cosh^{-2}\left(\frac{V}{2T}\right) \right\rangle}, \quad (43)$$

где среднее определяется гауссовой функцией плотности

$$p(V) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D}} \exp\left(-\frac{(V - \bar{V})^2}{2D}\right) dV, \quad (44)$$

а коэффициент взаимодействия \tilde{J} задается формулой

$$\tilde{J} \equiv \left(\frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{J_q} \right)^{-1}. \quad (45)$$

Доказательство. Подставляем $F(\mathbf{V}) = F_0(\mathbf{V}) + F_1(\mathbf{V})$ в первое из соотношений (41). Усредняя выражения (29) и (36) для частных производных функций $F_0(\mathbf{V})$ и $F_1(\mathbf{V})$, с учетом $\langle V_j \rangle_G = \bar{V}$ получаем $\left\langle \frac{\partial F_0}{\partial V_j} \right\rangle_G = \frac{\bar{V}}{J_0}$ и $\left\langle \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j} \right\rangle_G = -\frac{1}{2} \left\langle \tanh\left(\frac{V_j}{2T}\right) \right\rangle_G$. Отсюда следует

$$\bar{V} = \frac{J_0}{2} \left\langle \tanh\left(\frac{V_j}{2T}\right) \right\rangle_G. \quad (46)$$

Вычисляем теперь вторую производную функции $F_0(\mathbf{V})$. Дифференцируя (29), находим

$$\frac{\partial^2 F_0(\mathbf{V})}{\partial V_j^2} = \frac{\partial}{\partial V_j} \left[\frac{1}{2N} \sum_q \frac{1}{J_q} \left(e^{-iqR_j} \sum_{i'} V_{i'} e^{iqR_{i'}} + e^{iqR_j} \sum_i V_i e^{-iqR_i} \right) \right] = \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{J_q}.$$

С учетом (45) получаем

$$\frac{\partial^2 F_0(\mathbf{V})}{\partial V_j^2} = \frac{1}{\tilde{J}}. \quad (47)$$

Для $F_1(\mathbf{V})$, используя (36), имеем $\frac{\partial^2 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^2} = \frac{\partial}{\partial V_j} \left[-\frac{1}{2} \tanh\left(\frac{V_j}{2T}\right) \right] = -\frac{1}{4T} \cosh^{-2}\left(\frac{V_j}{2T}\right)$. Усредняя, приходим к

$$\left\langle \frac{\partial^2 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^2} \right\rangle_G = -\frac{1}{4T} \left\langle \cosh^{-2}\left(\frac{V_j}{2T}\right) \right\rangle_G. \quad (48)$$

Подстановка выражений (47) и (48) во второе уравнение (41) дает $A_j = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\tilde{J}} - \frac{1}{4T} \left\langle \cosh^{-2}\left(\frac{V_j}{2T}\right) \right\rangle_G \right)$.

Полученное выражение зависит только от \bar{V} и A_j . Отсюда следует, что все V_j — одинаково распределенные гауссовы случайные величины. Учитывая связь $A_j = T/(2D)$ с дисперсией D поля V_j , приходим к уравнению (43). Уравнение среднего поля (46) принимает вид (42). Что и требовалось доказать.

Отметим, что в теории среднего поля квадратичная форма (32) полностью определяется величиной среднего поля \bar{V} при заданном значении температуры T и не влияет на среднее поле. В оптимальной

гауссовой аппроксимации величины \bar{V} и $A_j = T/(2D)$ вычисляются самосогласованно при каждом значении T .

6. Численные результаты. Решение уравнения теории среднего поля и системы уравнений оптимальной гауссовой аппроксимации, как функцию температуры, находим численно методом дифференцирования по параметру (см., напр., [12, 13]).

6.1. Теория среднего поля. Используем метод дифференцирования по параметру для решения уравнения теории среднего поля

$$\bar{V} = f(\bar{V}, T), \tag{49}$$

где через $f(\bar{V}, T)$ обозначена правая часть уравнения (33). Нас интересует зависимость среднего поля от температуры $\bar{V}(T)$. Дифференцируя обе части уравнения (49) по T , имеем $\frac{d\bar{V}}{dT} = \frac{\partial f}{\partial \bar{V}} \frac{d\bar{V}}{dT} + \frac{\partial f}{\partial T}$. Преобразуя, получаем дифференциальное уравнение первого порядка, разрешенное относительно производной:

$$\frac{d\bar{V}}{dT} = \left(1 - \frac{\partial f}{\partial \bar{V}}\right)^{-1} \frac{\partial f}{\partial T}. \tag{50}$$

Решая задачу Коши для этого уравнения с начальным значением $\bar{V}(T_0) = \bar{V}_0$, находим искомую функцию $\bar{V}(T)$.

Функция $f(\bar{V}, T)$ не определена при $T = 0$, поэтому в качестве начальной точки используется малое отличное от нуля значение $T_0 = 0.001$. Используя в правой части (33) асимптотическое выражение $\tanh x \asymp 1 - 2e^{-2x}$ при $x = \frac{\bar{V}}{2T} \rightarrow \infty$, получаем $\bar{V}(T) \asymp \frac{J_0}{2} \left[1 - 2 \exp\left(-\frac{J_0}{2T}\right)\right]$, $T \rightarrow 0$. С учетом этого выражения при $T_0 = 0.001$ полагаем $\bar{V}(T_0) = J_0/2$. Задача Коши для уравнения (50) с этим начальным условием решается на отрезке $[T_0, T_1]$, где T_1 — некоторое значение, меньшее температуры Кюри. Величина температуры Кюри $T_C^{MF} = J_0/4$ определена из условия (39). Значение $J_0 = 2$ выбрано так, чтобы выполнялось $\bar{V}(0) = 1$. В этом случае $T_C^{MF} = 1/2$.

При $T \rightarrow T_C^{MF} - 0$ среднее поле \bar{V} стремится к нулю. Используя разложение $\tanh x \asymp x - x^3/3$ при $x = \bar{V}/(2T) \rightarrow 0$, с точностью до малых более высокого порядка записываем уравнение (33) в виде

$$\bar{V} = \frac{J_0}{2} \left(\frac{\bar{V}}{2T} - \frac{1}{3} \left(\frac{\bar{V}}{2T} \right)^3 \right).$$

С учетом $T_C^{MF} = J_0/4$ отсюда находим асимптотику $\bar{V} \asymp 2T_C^{MF} \sqrt{3 \left(1 - \frac{T}{T_C^{MF}}\right)}$, $T \rightarrow T_C^{MF} - 0$.

Таким образом, при подходе к точке фазового перехода слева производная $d\bar{V}/dT$ обращается в бесконечность. Следовательно, нарушается условие невырожденности уравнения (49): $\frac{\partial f(\bar{V}, T)}{\partial \bar{V}} \neq 1$, и дифференциальное уравнение (50) перестает решаться.

Для построения кривой $\bar{V}(T)$ вблизи T_C^{MF} в качестве параметра используем среднее поле, взятое для удобства с обратным знаком: $w = -\bar{V}$. Переписываем уравнение (49) в виде $w = g(w, T)$ где $g(w, T) \equiv -f(-w, T)$. Дифференцируя обе части по w , имеем $1 = \frac{\partial g}{\partial w} + \frac{\partial g}{\partial T} \frac{dT}{dw}$. Преобразуя, получаем дифференциальное уравнение, разрешенное относительно производной:

$$\frac{dT}{dw} = \left(\frac{\partial g}{\partial T} \right)^{-1} \left(1 - \frac{\partial g}{\partial w} \right). \tag{51}$$

Задача Коши для уравнения (51) решается с начальным значением T_1 на отрезке $[-\bar{V}_1, 0]$, где $V_1 = \bar{V}(T_1)$ получено в результате решения дифференциального уравнения (50) с переменной T .

Результаты расчета приведены на рис. 1.

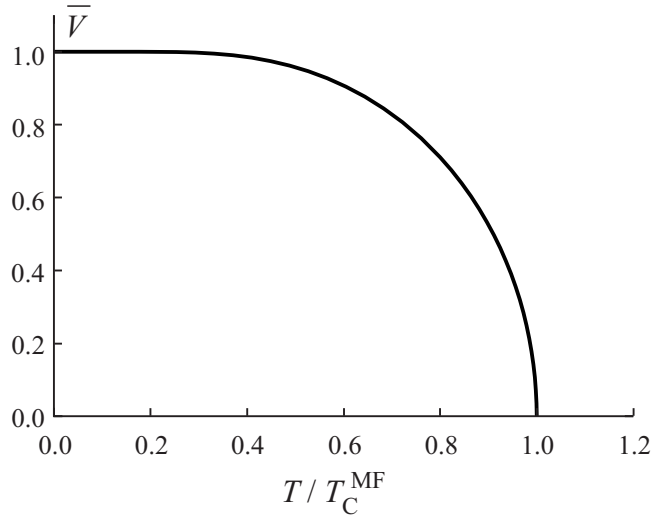


Рис. 1. Теория среднего поля: величина \bar{V} как функция приведенной температуры T

6.2. Теория флуктуирующего поля. Метод дифференцирования по параметру применим и к системам уравнений. С его помощью решаем уравнения среднего поля и квадратичной формы оптимальной гауссовой аппроксимации:

$$\bar{V} = f_1(\bar{V}, D, T), \quad D = f_2(\bar{V}, D, T), \quad (52)$$

где через $f_1(\bar{V}, D, T)$ и $f_2(\bar{V}, D, T)$ обозначены правые части системы (42)–(43). В результате дифференцирования по T имеем

$$\frac{d\bar{V}}{dT} = \frac{\partial f_1}{\partial \bar{V}} \frac{d\bar{V}}{dT} + \frac{\partial f_1}{\partial D} \frac{dD}{dT} + \frac{\partial f_1}{\partial T}, \quad \frac{dD}{dT} = \frac{\partial f_2}{\partial \bar{V}} \frac{d\bar{V}}{dT} + \frac{\partial f_2}{\partial D} \frac{dD}{dT} + \frac{\partial f_2}{\partial T}.$$

Отсюда получаем систему дифференциальных уравнений, разрешенную относительно производных:

$$\begin{pmatrix} \frac{d\bar{V}}{dT} \\ \frac{dD}{dT} \end{pmatrix} = (I - J)^{-1} \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial T} \\ \frac{\partial f_2}{\partial T} \end{pmatrix}, \quad J = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial \bar{V}} & \frac{\partial f_1}{\partial D} \\ \frac{\partial f_2}{\partial \bar{V}} & \frac{\partial f_2}{\partial D} \end{pmatrix}, \quad (53)$$

где I — единичная матрица 2×2 , а J — матрица Якоби исходной системы.

При решении задачи Коши для системы (53) в качестве начальной температуры берется малое отличное от нуля значение $T_0 = 0.001$. Поскольку при $T \rightarrow 0$ флуктуации стремятся к нулю, выбираем $\bar{V}(T_0) = 1$ в качестве начального значения. Подстановка этих значений в (43) дает начальное значение дисперсии $D(T_0)$.

Задача Коши для системы (53) корректна, если матрица $(I - J)$ имеет ненулевой определитель. При температуре, близкой к температуре Кюри T_C , этот определитель становится малым. В этом случае, как и при решении уравнения в теории среднего поля, вместо T в качестве параметра используем $w = -\bar{V}$. Система уравнений (52) записывается в виде

$$w = g_1(w, D, T), \quad D = g_2(w, D, T),$$

где $g_1(w, D, T) \equiv -f_1(-w, D, T)$ и $g_2(w, D, T) \equiv f_2(-w, D, T)$. Дифференцируя по w , имеем

$$1 = \frac{\partial g_1}{\partial w} + \frac{\partial g_1}{\partial D} \frac{dD}{dw} + \frac{\partial g_1}{\partial T} \frac{dT}{dw}, \quad \frac{dD}{dw} = \frac{\partial g_2}{\partial w} + \frac{\partial g_2}{\partial D} \frac{dD}{dw} + \frac{\partial g_2}{\partial T} \frac{dT}{dw}.$$

Преобразуя, получаем систему дифференциальных уравнений, разрешенную относительно производных:

$$\begin{pmatrix} \frac{dD}{dw} \\ \frac{dT}{dw} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial D} & \frac{\partial g_1}{\partial T} \\ \frac{\partial g_2}{\partial D} & -1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 - \frac{\partial g_1}{\partial w} \\ -\frac{\partial g_2}{\partial w} \end{pmatrix}. \quad (54)$$

В качестве начальных данных для решения задачи Коши (54) используются значения T_1 , $\bar{V}_1 = \bar{V}(T_1)$ и $D_1 = D(T_1)$, где T_1 — значение температуры, при котором перестает решаться задача Коши для уравнений (52) с переменной T . Задачу Коши для системы (54) решаем на отрезке $[-\bar{V}_1, 0]$.

В парамагнитной области, при $T > T_C$, имеем устойчивое решение $\bar{V}(T) \equiv 0$. Для того чтобы найти зависимость $D(T)$, решаем одно из уравнений (52), для определенности второе уравнение: $f_2(0, D, T) = 0$.

Дифференцируя по T , приходим к $\frac{\partial f_2}{\partial D} \frac{dD}{dT} + \frac{\partial f_2}{\partial T} = 0$. Преобразуя, получаем дифференциальное уравнение

$$\frac{dD}{dT} = \left(-\frac{\partial f_2}{\partial D} \right)^{-1} \frac{\partial f_2}{\partial T}. \quad \text{В качестве начального значения используется } D(T_C).$$

В модели Изинга уравнения теории среднего поля и уравнения оптимальной гауссовой аппроксимации заданы явными аналитическими выражениями. Это позволяет генерировать соответствующие дифференциальные уравнения средствами аналитических вычислений в среде Maple. Окончательный вид этих уравнений достаточно громоздкий и зависит от порядка квадратуры, поэтому мы их не приводим. Задача Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка решается при помощи метода Рунге–Кутты–Фельберга (см., напр., [17]).

Интеграл в выражении для гауссова среднего вычисляется при помощи квадратурной формулы (см., напр., [18])

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) dx \approx \sum_{k=1}^n c_k f(x_k), \quad (55)$$

где x_k — корень ортогонального полинома Чебышева–Эрмита n -го порядка: $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$, а коэффициенты c_k вычисляются по формуле $c_k = \frac{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}}{(H'_n(x_k))^2}$. Используя (55), для среднего с плотностью (44) получаем выражение $\langle f(V) \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^n c_k f(\sqrt{2D}x_k + \bar{V})$. В расчетах было использовано $n = 4$ (при увеличении порядка квадратуры результаты меняются незначительно).

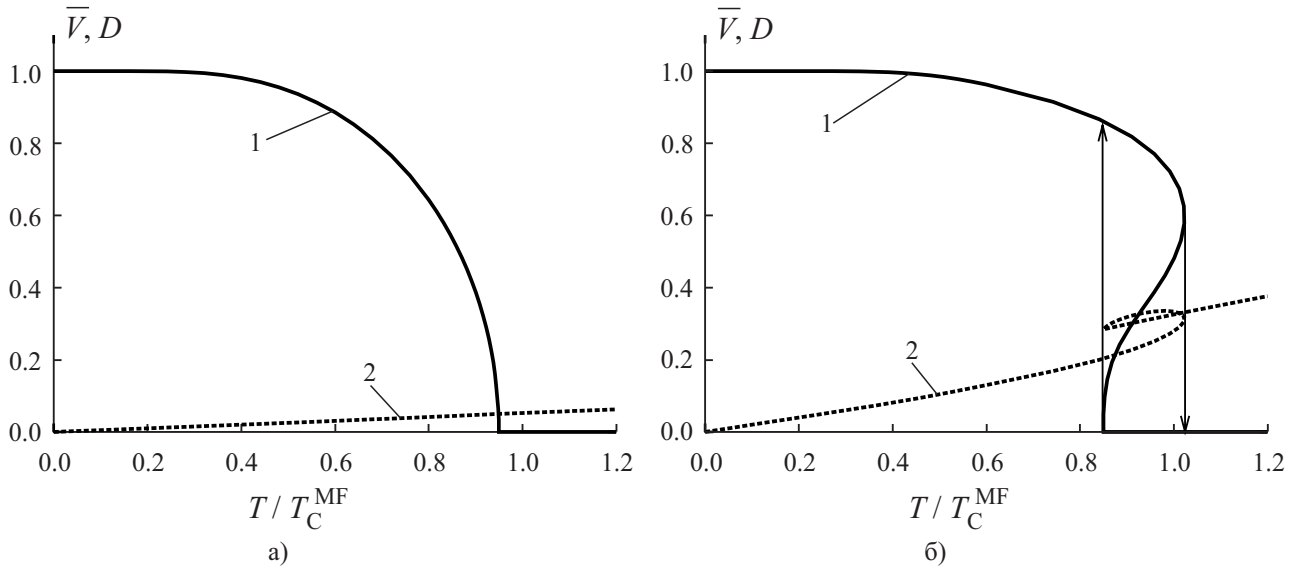


Рис. 2. Оптимальное гауссово приближение: среднее \bar{V} (кривая 1) и дисперсия D (кривая 2), как функции приведенной температуры T , при $\tilde{J} = 0.1$ (а) и $\tilde{J} = 0.8$ (б)

Полученные результаты для $\bar{V}(T)$ и $D(T)$ при различных значениях параметра \tilde{J} изображены на рис. 2. Как и ранее, значение $J_0 = 2$ выбрано так, чтобы выполнялось условие $\bar{V}(0) = 1$. Невязка по каждому из уравнений системы (52) не превышает 10^{-5} .

Как видно из рис. 2, наличие флуктуаций в оптимальном гауссовом приближении приводит к уменьшению температуры фазового перехода по сравнению с теорией среднего поля. При малых значениях параметра взаимодействия (рис. 2а) качественный характер температурной зависимости $\bar{V}(T)$ сохраняется: наблюдается фазовый переход второго рода. При дальнейшем увеличении параметра взаимодействия (рис. 2б) решение системы становится неединственным: кроме ферромагнитного и парамагнитного (нулевого) решений при высоких температурах возникает промежуточное неустойчивое решение. В результате с ростом температуры возникает скачкообразный фазовый переход первого рода (стрелка вниз), а при обратном уменьшении температуры скачок происходит при меньшем значении температуры (стрелка вверх). Тем самым имеет место гистерезис (как и в гауссовом приближении теории спиновых флуктуаций магнетизма металлов [8, 19, 20]).

7. Заключение. В модели Изинга выведены основные соотношения теории флуктуирующего поля. Получен явный вид системы нелинейных уравнений, которая позволяет самосогласованно вычислять параметры оптимальной гауссовой аппроксимации флуктуирующего поля при каждом значении температуры (в более общей модели Гейзенберга вывод основных уравнений оптимальной гауссовой аппроксимации требует дополнительных приближений [9]). Зависимость решения от температуры исследована численно при помощи метода дифференцирования по параметру. Это позволило получить более точные, чем в работе [9], количественные результаты и подтвердить сделанные там качественные выводы, касающиеся поведения решения как функции температуры, в зависимости от коэффициента взаимодействия.

Показано, что при малых значениях параметра взаимодействия температура фазового перехода становится меньше, чем в теории среднего поля, но качественно характер температурной зависимости намагниченности сохраняется: наблюдается фазовый переход второго рода. При увеличении параметра взаимодействия решение системы становится неединственным. В результате с ростом температуры возникает характерный для гауссова приближения скачкообразный фазовый переход первого рода, а при обратном уменьшении температуры имеет место гистерезис.

Таким образом, при температурах близких к T_C необходим выход за пределы гауссовой аппрокси-

мации. Метод учета членов высокого порядка в свободной энергии применительно к теории спиновых флуктуаций металлов развит в [16, 21].

Авторы благодарны Б. И. Резеру за полезные предложения, позволившие улучшить текст статьи, С. Н. Аввакумову — за полезные предложения, касающиеся численного интегрирования, и А. И. Смирнову — за помощь при работе с пакетом Maple.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хуанг К. Статистическая механика. М.: Мир, 1966.
2. Amit D.J. Field theory, the renormalization group, and critical phenomena. London: McGraw-Hill, 1978.
3. Schwabl F. Statistical Mechanics. Berlin: Springer, 2006.
4. Стратонович Р.Л. Об одном методе вычисления квантовых функций распределения // Докл. АН СССР. 1957. **115**, № 6. 1097–1100.
5. Hubbard J. Calculation of partition functions // Phys. Rev. Lett. 1959. **3**, N 2. 77–78.
6. Зинн-Жюстен Ж. Континуальный интеграл в квантовой механике. М.: Физматлит, 2006.
7. Hertz J.A., Klenin M.A. Fluctuations in itinerant-electron paramagnets // Phys. Rev. B. 1974. **10**, N 3. 1084–1096.
8. Резер Б.И., Гребенников В.И. Температурная зависимость магнитных свойств ферромагнитных металлов с учетом динамики и нелокальности спиновых флуктуаций // Физика металлов и металловедение. 1998. **85**, вып. 1. 30–42.
9. Grebennikov V.I. A fluctuating field theory for systems of localized magnetic moments // Solid State Phenom. 2009. **152**, **153**. 563–566.
10. Мельников Н.Б., Резер Б.И. Оптимальное гауссово приближение в теории флуктуирующего поля // Тр. Математич. института им. В. А. Стеклова РАН. 2010. **271**. 159–180.
11. Feynman R.P. Slow electrons in a polar crystal // Phys. Rev. 1955. **97**. 660–665.
12. Ортега Дж., Рейнболдт В. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. М.: Мир, 1975.
13. Шалашин В.И., Кузнецов Е.Б. Метод продолжения по параметру и наилучшая параметризация (в прикладной математике и механике). М.: Эдиториал, 1999.
14. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. Т. 1. М.: Мир, 1979.
15. Хорн Р., Джонсон Ч. Матричный анализ. М.: Мир, 1989.
16. Melnikov N.B., Reser B.I., Grebennikov V.I. Extended dynamic spin-fluctuation theory of metallic magnetism // J. Phys.: Condens. Matter. 2011. **23**. 276003.
17. Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений. М.: Мир, 1980.
18. Крылов В.И. Приближенное вычисление интегралов. М.: Наука, 1967.
19. Reser B.I., Melnikov N.B. Problem of temperature dependence in the dynamic spin-fluctuation theory for strong ferromagnets // J. Phys.: Condens. Matter. 2008. **20**. 285205.
20. Melnikov N.B., Reser B.I. Instability analysis for the system of nonlinear equations of the dynamic spin-fluctuation theory // Proc. of the Fifth Int. Conf. on Dynamic Systems and Applications. Vol. 5. Atlanta: Dynamic Publishers, 2008. 312–316.
21. Melnikov N.B., Reser B.I., Grebennikov V.I. Spin-fluctuation theory beyond Gaussian approximation // J. Phys. A: Math. Theor. 2010. **43**. 195004.

Поступила в редакцию
13.08.2012
