

НАМАГНІЧЕНІСТЬ СПІНОВОЇ СІТКИ В МОДЕЛІ ІЗІНГґА. ГАУССОВЕ НАБЛИЖЕННЯ

В. С. Янішевський, В. М. Цмоць

*Дрогобицький державний педагогічний університет ім. І. Франка
вул. І. Франка, 24, Дрогобич, 82100, Україна*

(Отримано 25 грудня 1998 р.; в остаточному вигляді — 13 жовтня 1999 р.)

Розглянуто фазовий перехід на структурі типу спінової сітки. Використано наближення гаусових флюктуацій для параметра порядку. Наведено чисельні розрахунки для дво- і тривимірних сіток із різною довжиною ланок для гамільтоніана моделі Ізінґа. Показано, що наближення досить добре описує температурні залежності параметрів фазового переходу. Проведено порівняння з наближенням середнього поля.

Ключові слова: спінова сітка, модель Ізінґа, гауссове наближення.

PACS number(s): 75.10.Hk

ВСТУП

У цій праці продовжено вивчення магнетних властивостей спінових сіток у моделі Ізінґа для спіну $S=1$. Розгляд структур такого типу зумовлений їхнім застосуванням для опису дислокаційного феромагнетизму. Також згадану модель можна віднести до класу псевдоспінових моделей на декорованих ґратках, що знаходять застосування в різноманітних задачах статистичної фізики [1]. Модель спінової сітки, яку ми розглядаємо, являє собою певну ґратку, вузли якої з'єднані спіновими ланками. Метод статистичного розрахунку таких систем полягає в розв'язанні на першому етапі одновимірної задачі для спінових ланок і розгляді вузлової підсистеми з ефективними взаємодіями — на другому. Як відомо, у рамках моделі Ізінґа одновимірна задача розв'язується точно за допомогою методу трансфер-матриці, а вузлову підсистему вищої вимірності доводиться розраховувати в певному наближенні. У працях [1–4] вузлову підсистему вивчали в наближенні середнього поля. Гамільтоніан вузлової підсистеми [1] має структуру узагальненої моделі Ізінґа з ефективними взаємодіями, що є функціями параметрів мікроскопічного гамільтоніана. У рамках звичайної моделі Ізінґа показано [1], що для опису вузлової підсистеми достатньо розглядати модель однієї підґратки з використанням двох параметрів середнього поля. Один із них відіграє роль параметра порядку і визначає середній спін вузла $\langle\sigma\rangle$, другий — середнє значення квадрата спіну $\langle\sigma^2\rangle$. У [3, 4] досліджено основні термодинамічні функції системи в наближенні середнього поля, де показано, що критичними є лише флюктуації $\langle\sigma\rangle$, з якими, зокрема, пов'язана розбіжність магнетної сприйнятливості. Ця стаття присвячена вивченню названої моделі в рамках гауссового наближення. Стосовно вибору методу дослідження зробимо декілька зауважень.

Як відомо, наближення середнього поля в теорії магнетизму пов'язане з уведенням однорідних пара-

метрів для всієї просторової області. Наступним кроком будується ряд теорії збурень за відхиленням параметрів задачі від середнього поля, тобто враховуються просторові флюктуації. Один із перших регулярних способів отримання послідовних наближень до середнього поля був розвинутий у [5] з використанням методів діяграмної техніки. Пізніше методи діяграмної техніки були розроблені безпосередньо для спінових операторів [6]. За допомогою введення спеціальних діяграмних елементів були побудовані ряди для спін-спінових кореляційних функцій високих порядків і вільної енергії. Зокрема, наближення середнього поля пов'язане з урахуванням так званих діяграм типу однохвосток. Формальним параметром розкладу в цих теоріях виступає $1/r_0^d$ (або $1/z$), де r_0 — радіус взаємодії, d — вимірність системи, z — координаційне число ґратки. З цією метою досить ефективними виявилися методи функціонального інтегрування [7, 8, 9]. Зокрема, у [10] з використанням методу, розвинутого в [7], вивчали ізінґівську модель спіну $S = 1$ в наближенні двох сум за хвильовим вектором для вільної енергії (що відповідає другому порядку названих вище параметрів розкладу). Укажемо також на деякі результати, отримані підсумовуванням певного класу діяграм [6]. Так, підсумовуванням діяграм типу двохвосток, отримано замкнуту систему двох рівнянь, що описує поведінку параметра порядку при фазовому переході. Це наближення відоме також як гауссове наближення, у якому флюктуації параметра порядку описуються гауссовим розподілом навколо середнього поля з дисперсією, що визначається двохвосткою.

Однак суттєвим недоліком згаданих наближень є те, що на температурній залежності параметра порядку [11–15] виникають розриви, які формально можна трактувати як фазовий перехід першого роду. У випадку вільної енергії як функції параметра порядку це викликане появою додаткових мінімумів, і таким чином, форма вільної енергії не відповідає переходам другого роду. Різні способи усунення цього недоліку розглянуто в працях [11–14]. Як можна ба-

чити в [14], де був запропонований спосіб послідовного врахування додаткового класу діаграм у гауссовому наближенні, отримана система рівнянь досить складна, що, очевидно, змусило обмежитись аналізом лише околу критичної точки. У праці одного із співавторів [16] був запропонований варіант гауссового наближення (для звичайної моделі Ізинґа спіну $S = 1/2$), у якому показано, що температурна залежність параметра порядку не містить розривів у всій температурній області фазового переходу. Він базується на методі функціонального інтегрування, у якому отримано функціонал вільної енергії, що приводить до відомих результатів наближення двохвосток, після чого застосовувано варіаційну процедуру. Варіаційні методи знаходять широке застосування до різноманітних задач (див., наприклад [9, 17–21]) і, як правило, певний результат завжди можна поліпшити, використовуючи відповідним чином варіаційний принцип.

Таким чином, результати праці [16] узагальнено на випадок моделі Ізинґа спіну із двома параметрами середнього поля. Отримано самоузгоджену систему рівнянь, що описує параметр порядку при фазовому переході, проаналізовано результати чисельного розв'язку системи рівнянь моделі спінової сітки.

I. ГАМІЛЬТОНІАН МОДЕЛІ

Статсуму регулярної спінової сітки в моделі Ізинґа $S = 1$ можна подати [1] у вигляді

$$Z = Z_1(0, 0)^{Nz/2} S p_\sigma \exp(-\beta H). \quad (1.1)$$

Перший співмножник в (1.1) визначає факторизований внесок у статсуму спінових ланок сітки, другий — описує вузлову підсистему з ефективним гамільтоніаном. Ефективний гамільтоніан має структуру узагальненої моделі Ізинґа для $S = 1$:

$$H = \sum_i (zB - h)\sigma_i + \sum_i zD\sigma_i^2 + \sum_{\langle ij \rangle} I\sigma_i\sigma_j + \sum_{\langle ij \rangle} K\sigma_i^2\sigma_j^2 + \sum_{\langle ij \rangle} L\sigma_i\sigma_j^2, \quad (1.2)$$

де h — зовнішнє поле, N — кількість вузлових спінів, z — координаційне число вузлової ґратки, інші ефективні поля і взаємодії гамільтоніяна визначено в результаті розв'язку одновимірної задачі і задано формулами

$$\begin{aligned} B &= \frac{1}{2\beta} \ln \left(\frac{Z_1(-1, 0)}{Z_1(1, 0)} \right), \\ D &= -\frac{1}{2\beta} \ln \left(\frac{Z_1(-1, 0) \cdot Z_1(1, 0)}{Z_1^2(0, 0)} \right), \\ I &= -\frac{1}{4\beta} \ln \left(\frac{Z_1(1, 1) \cdot Z_1(-1, -1)}{Z_1^2(-1, 1)} \right), \\ K &= I - 2D - \frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{Z_1(-1, 1)}{Z_1(0, 0)} \right), \\ L &= -2B + \frac{1}{2\beta} \ln \left(\frac{Z_1(-1, -1)}{Z_1(1, 1)} \right), \end{aligned} \quad (1.3)$$

де $Z_1(s, s')$ — статсума одновимірного спінового ланцюжка, у якому крайні спіни фіксовані в станах s і s' ; s — набуває значень 1, 0, -1. У нульовому полі ($h = 0$) $B, L = 0$, що безпосередньо видно з інваріантності статсуми спінового ланцюжка щодо заміни: $Z_1(s, s') = Z_1(-s, -s')$. Отже, у нульовому полі обмежимося гамільтоніаном [3]

$$H = \sum_i zD\sigma_i^2 + \sum_{\langle ij \rangle} I\sigma_i\sigma_j + \sum_{\langle ij \rangle} K\sigma_i^2\sigma_j^2. \quad (1.4)$$

Стандартним чином після переходу до фур'є-зображень і виділення складової гамільтоніяна, пов'язаної зі середнім полем, отримуємо

$$\begin{aligned} H &= NzD\hat{q}_0 + \frac{NzI}{2}(\hat{\sigma}_0)^2 \\ &+ \frac{NzK}{2}(\hat{q}_0)^2 + \frac{N}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} I_{\mathbf{k}} \hat{\sigma}_{\mathbf{k}} \hat{\sigma}_{-\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (1.5)$$

де введені позначення:

$$\begin{aligned} I_{\mathbf{k}} &= zI\gamma_{\mathbf{k}}, \quad \gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\delta}, \\ \hat{\sigma}_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i e^{i\mathbf{k}r_i}, \quad \hat{q}_0 = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^2; \end{aligned}$$

підсумовування за \mathbf{k} здійснюється в межах 1-ої зони Бріллюена, а вектор δ пробігає найближчих сусідів у спіновій ґратці. Перші три доданки (1.5) відповідають гамільтоніанові середнього поля, що вивчався в [1, 3, 4], а останній доданок ураховує просторові флуктуації параметра порядку. Для спрощення розгляду просторові флуктуації середнього значення оператора \hat{q}_0 не враховуються, оскільки він не є параметром порядку.

II. ГАУССОВЕ НАБЛИЖЕННЯ

Як уже згадувалось, в основу модифікованого методу гауссових флуктуацій [16] покладено метод функціонального інтегрування. Тому аналогічним чином статистичну суму для моделі (1.2) запишемо у такому вигляді:

$$Z = Z_0 \int (d\rho)' e^{-\beta H'(\rho)} / \int (d\rho)' e^{-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}}, \quad (2.1)$$

де Z_0 — статистична сума в наближенні середнього поля [1–4], $H'(\rho)$ — визначає флуктуаційну складову гамільтоніяна (функціонала вільної енергії) і означена виразом

$$\begin{aligned} H'(\rho) &= \frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \\ &+ \sum_i (F_{id}(h_{1M} + h'_i, h_{2M}) - F_{id}(h_{1M}, h_{2M})). \end{aligned} \quad (2.2)$$

Тут уведено такі позначення:

$$\begin{aligned} h_{2M} &= \beta z K q + \beta D, \\ h_{1M} &= \beta z I \rho_0, \\ h'_i &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \sqrt{\beta I_{\mathbf{k}}} \rho_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \end{aligned}$$

де h_{1M} , h_{2M} — мають зміст полів, що діють на σ і σ^2 відповідно, h'_i — флюктуаційне поле, що діє на спіні σ_i . Параметри середнього поля ρ_0 , q , як зазначено вище, визначають середнє значення спінового

моменту вузла і його квадрата відповідно. Як видно з (2.2), флюктуації параметра порядку визначаються флюктуаційним полем h'_i через вільну енергію системи ідеальних спінів із анізотропією:

$$\begin{aligned} \beta F_{id}(x, y) &= -\ln Z_{id}(x, y), \\ Z_{id}(x, y) &= Sp \exp(-x\sigma - y\sigma^2). \end{aligned} \quad (2.3)$$

При наближеному обчисленні функціонального інтеграла (2.1), як і в [16], здійснимо редукцію

$$\sum_i F_{id}(h_{1M} + h'_i, h_{2M}) \rightarrow \exp \left(\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \beta I_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \partial^2 / \partial h^2 \right) \cdot F_{id}(h_{1M} + h, h_{2M}), \quad (2.4)$$

де параметр h після дії диференціального оператора слід покласти рівним нулеві. Згідно з [16], редукція (2.4) для звичайної моделі Ізінґа приводить до гауссового наближення, що в діаграмному методі отримується підсумовуванням діаграм типу двохвосток [6]. Очевидно, що відповідний зміст наближення (2.4) матиме і для цієї моделі. Як уже вказувалось, його суттєвий недолік — це поява розривів на температурній залежності параметра порядку, що формально трактується як фазовий перехід першого роду. Чисельні розрахунки показують, що така ситуація має місце і у випадку цієї моделі (див. далі в розділі 3). У зв'язку з цим додатково застосовуємо варіаційний метод, що дозволяє усунути цей недолік. Суть подальших перетворень полягає в тому, що в (2.4), замість фур'є-компонент реальних взаємодій, використано ефективні — $\alpha_{\mathbf{k}}$, які відіграють одночасно роль варіаційних параметрів при застосуванні варіаційного принципу для вільної енергії системи. Варіаційний метод ґрунтується на відомій нерівності Боголюбова для вільної енергії [9, 17-22]:

$$F(\rho_0) \leq F_0(\rho_0) + \langle H(\rho) - H_0(\rho) \rangle_0. \quad (2.5)$$

Тут $F(\rho_0)$ і $F_0(\rho_0)$ відповідно точна і пробна вільні енергії, а $H(\rho)$ і $H_0(\rho)$ позначають відповідно точний і пробний гамільтоніани, які є функціоналами змінних функціонального інтегрування.

$$H(\rho) = \frac{Nz|I|}{2} \rho_0^2 - \frac{NzK}{2} q^2 + \frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + \sum_i F_{id}(h_{1M} + h'_i, h_{2M}), \quad (2.6)$$

$$H_0(\rho) = NC(\rho_0)/\beta + \frac{Nz|I|}{2} \rho_0^2 - \frac{NzK}{2} q^2 + \frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + Ne^{\hat{D}_1(\rho)} F_{id}(h_{1M} + h, h_{2M}), \quad (2.7)$$

де $\hat{D}_1(\rho) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \beta \alpha_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \cdot \partial^2 / \partial h^2$. Тобто пробний гамільтоніан залежить від варіаційних параметрів $\alpha_{\mathbf{k}}$, які містяться в операторі $\hat{D}_1(\rho)$, а точний залежить від реальних фур'є-компонент $I_{\mathbf{k}}$, що входять у флюктуаційне поле h'_i . Величина $C(\rho_0)$ у (2.7) вибирається з умови, щоб середнє в (2.5) дорівнювало нулеві. Диференціальну операцію у (2.7) можна замінити тотожною інтегральною

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} F_{id} \left(h_{1M} + 2 \left(\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \beta \alpha_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right)^{1/2} \cdot \xi, h_{2M} \right). \quad (2.8)$$

Оскільки залежність від змінних $\rho_{\mathbf{k}}$ є квадратичною, то функціональний інтеграл з гамільтоніаном можна звести до гауссівського, використовуючи стандартні методи [9, 23]. У термодинамічній границі для вільної енергії одержимо

$$F(\rho_0) = \frac{z|I|}{2} \rho_0^2 - \frac{zK}{2} q^2 + e^{\hat{D}_2} F_{id}(h_{1M} + h, h_{2M}) - \frac{1}{\beta} \bar{\omega} \bar{S}_1 + \frac{1}{2\beta N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \ln(1 + \bar{\omega} \beta \alpha_{\mathbf{k}}), \quad (2.9)$$

де введено позначення

$$\begin{aligned}\hat{D}_1 &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \beta \alpha_{\mathbf{k}} / (1 + \beta \bar{\omega} \alpha_{\mathbf{k}}) \cdot \partial^2 / \partial h^2, \\ \hat{D}_2 &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \beta I_{\mathbf{k}} / (1 + \beta \bar{\omega} \alpha_{\mathbf{k}}) \cdot \partial^2 / \partial h^2, \\ \bar{\omega} &= -e^{\hat{D}_1} b^{(1)}(h_{1M} + h, h_{2M}).\end{aligned}\quad (2.10)$$

Величини $b^{(n)}$ позначають похідні від вільної енергії ідеальної системи спінів, де нижній індекс указує, що похідні взято за першою змінною в $F_{id}(x, y)$ (2.3)

$$\begin{aligned}b^{(n-1)}(h_{1M} + h, h_{2M}) \\ = -\partial^n / \partial h^n \beta F_{id}(h_{1M} + h, h_{2M}).\end{aligned}\quad (2.11)$$

З умови екстремуму $\partial F_0(\bar{\rho}_0) / \partial \alpha_{\mathbf{k}} = 0$ знаходимо фур'є-компоненти $\alpha_{\mathbf{k}}$

$$\bar{\omega} \alpha_{\mathbf{k}} = -\bar{b}_1^{(1)} I_{\mathbf{k}} - \tilde{b}_1^{(1)} \alpha(0),\quad (2.12)$$

де введено також позначення

$$\begin{aligned}\bar{b}_1^{(1)} &= e^{\hat{D}_2} b_1^{(1)}(h_{1M} + h, h_{2M}), \\ \tilde{b}_1^{(1)} &= e^{\hat{D}_1} b_1^{(1)}(h_{1M} + h, h_{2M}).\end{aligned}$$

Тут відповідні оператори можна подати у вигляді

$$\hat{D}_1 = \bar{S}_1 \cdot \partial^2 / \partial h^2, \quad \hat{D}_2 = \bar{S}_2 \cdot \partial^2 / \partial h^2,$$

увівши функції, що складають два самоузгоджені рівняння

$$\begin{aligned}\bar{S}_1 &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \beta \alpha_{\mathbf{k}} / (1 + \bar{\omega} \beta \alpha_{\mathbf{k}}), \\ \bar{S}_2 &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \beta I_{\mathbf{k}} / (1 + \bar{\omega} \beta \alpha_{\mathbf{k}}).\end{aligned}\quad (2.13)$$

Для вільного члена у (2.12) (не містить залежності від хвильового вектора) отримуємо таке співвідношення:

$$\beta \tilde{b}_1^{(1)} \alpha(0) = \tilde{b}_1^{(3)} \cdot \frac{\bar{S}_3 \cdot \bar{b}_1^{(1)} / \bar{b}_1^{(1)} - \bar{S}_4}{1 - \bar{S}_4 \cdot \bar{b}_1^{(3)}},\quad (2.14)$$

куди входять дві функції, що складають ще два самоузгоджені рівняння

$$\begin{aligned}\bar{S}_3 &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \beta I_{\mathbf{k}} \beta \alpha_{\mathbf{k}} / (1 + \bar{\omega} \beta \alpha_{\mathbf{k}})^2, \\ \bar{S}_4 &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} (\beta \alpha_{\mathbf{k}})^2 / (1 + \bar{\omega} \beta \alpha_{\mathbf{k}})^2.\end{aligned}\quad (2.15)$$

Рівняння (2.12) (з урахуванням (2.14)) є по суті інтегральним рівнянням для визначення ефективної взаємодії $\alpha_{\mathbf{k}}$. Однак для опису термодинаміки достатньо накласти умови самоузгодженості, що зводяться до системи рівнянь (2.13), (2.15). Рівняння для параметра порядку отримуємо, беручи частинну похідну від вільної енергії (2.9) за ρ_0 , у результаті одержимо

$$\rho_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} b_1(h_{1M} + 2\bar{S}_2^{1/2} \xi, h_{2M}) \cdot d\xi.\quad (2.16)$$

Аналогічно, беручи похідну за q , отримуємо рівняння для визначення q

$$q = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} b_2(h_{1M} + 2\bar{S}_2^{1/2} \xi, h_{2M}) \cdot d\xi,\quad (2.17)$$

де введено позначення $b_2(x, y) = -\partial / \partial y \beta F_{id}(x, y)$.

Таким чином, система рівнянь (2.13), (2.15), (2.16), (2.17) узагальнює гауссове наближення на випадок моделі (1.5). Функція \bar{S}_2 визначає дисперсію гауссівського розподілу параметра порядку. Система рівнянь є замкнутою і дозволяє знайти температурні залежності параметрів порядку і параметра q , а також функцій $\bar{S}_1, \bar{S}_2, \bar{S}_3, \bar{S}_4$.

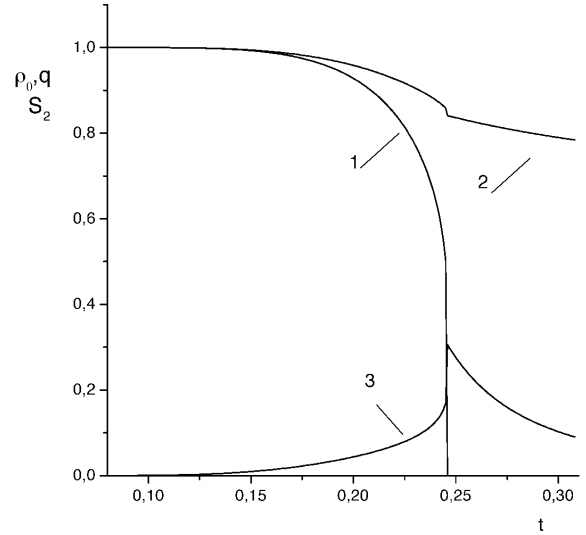


Рис. 1. Температурні залежності параметра порядку ρ_0 , параметра q і дисперсії \bar{S}_2 (відповідно криві 1, 2, 3) для кубічної спінової сітки (довжина ланки $n = 1$) в наближенні двохвосток.

III. ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ

Проаналізуємо результати чисельного розв'язку отриманої системи рівнянь. Розрахунки проведемо для спінової сітки в рамках звичайної моделі Ізинґа спіну $S = 1$ із взаємодією між найближчими сусідами. Розрахунок ефективних взаємодій D, I, K детально описаний у [1], а тому зупиняться на них не будемо. На рис. 1 наведено температурні залежності для параметрів ρ_0, q і \bar{S}_2 в наближенні двохвосток для кубічної ґратки ($z=6$, число спінів у ланці $n=1$, уздовж осі абсцис відкладена температура в безрозмірних одиницях $t = k_B T / z\epsilon$, ϵ — обмінна взаємодія

між найближчими сусідами). Як видно, мають місце розриви на температурній залежності параметра порядку, тобто наближення двохвосток неправильно описує систему, про що вже згадувалось вище.

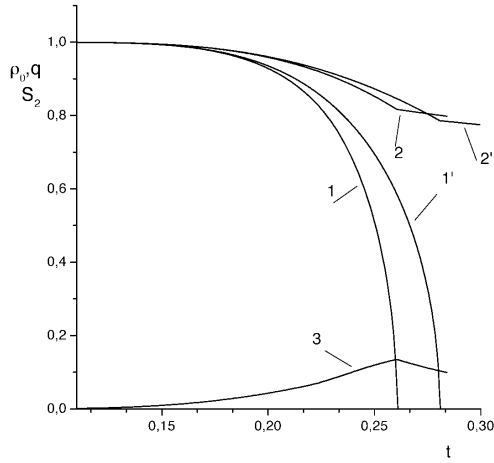


Рис. 2. Температурні залежності параметра порядку ρ_0 , параметра q і дисперсії \bar{S}_2 (криві 1, 2, 3) для кубічної спінової сітки (довжина ланки $n = 1$) в гауссовому наближенні; середнє поле — криві 1', 2'.

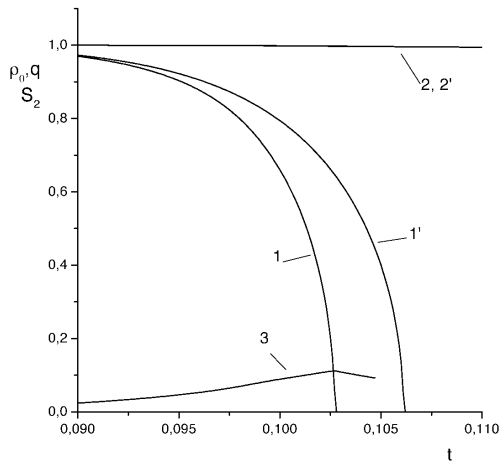


Рис. 3. Температурні залежності параметра порядку ρ_0 , параметра q і дисперсії \bar{S}_2 (криві 1, 2, 3) для кубічної спінової сітки (довжина ланки $n = 10$) в гауссовому наближенні; середнє поле — криві 1', 2'.

На рис. 2, 3 наведені результати чисельного розв'язку отриманої системи рівнянь для кубічної спінової сітки з довжинами спінових ланок $n = 1, 10$ відповідно. Поряд для порівняння наведені також результати для середнього поля. Видно, що запропоноване наближення дає задовільний опис системи. Звичайно, має місце зниження критичної температури порівняно з випадком середнього поля. Звернемо увагу також на поведінку залежності дисперсії \bar{S}_2 гауссового розподілу параметра порядку. Як видно, дисперсія монотонно зростає з підвищенням температури і

досягає максимуму в точці фазового переходу. Тобто запропоноване наближення для спінової сітки дає дещо ліпший опис, ніж для випадку ґратки рис. 4, де відповідний максимум зміщений в область низьких температур. Очевидно, таку поведінку можна пояснити наявністю анізотропії в ефективному гамільтоніані сітки, що сприяє феромагнетному впорядкуванню (детально в [1, 2]), яка дещо послаблює флюктуації параметра порядку. З рис. 2, 3 можна спостерігати також, що роль анізотропії для сіток з більшою кількістю спінів у ланці зростає. Як видно, для $n = 10$ параметр $q = 1$ і практично не змінюється в наведеній температурній області. У свою чергу температурна залежність параметра q визначається, в основному, ефективною анізотропією D [1, 2].

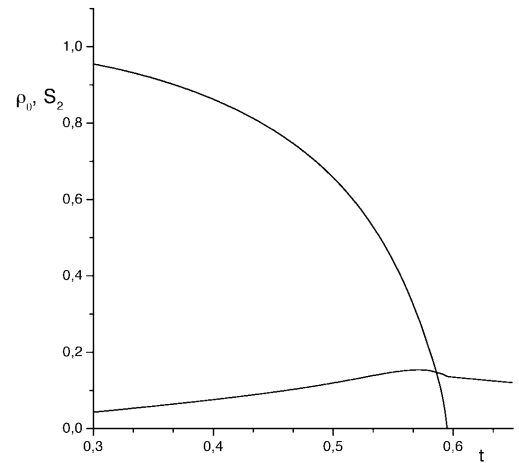


Рис. 4. Температурні залежності параметра порядку і дисперсії для кубічної ґратки в гауссовому наближенні.

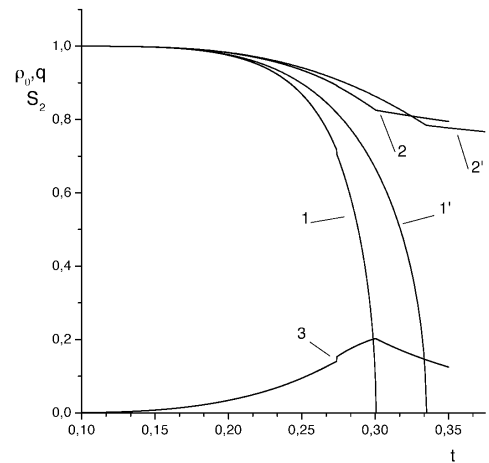


Рис. 5. Температурні залежності параметра порядку ρ_0 , параметра q і дисперсії \bar{S}_2 (криві 1, 2, 3) для квадратної спінової сітки (довжина ланки $n = 1$) в гауссовому наближенні; середнє поле — криві 1', 2'.

На рис. 5, 6 наведено відповідні результати для квадратної спінової сітки ($z = 4$). Таким чином, запропоноване наближення якісно описує і двовимірну систему, тоді як у наближенні двохвосток розв'язки для параметра порядку взагалі відсутні.

Спонтанний момент спінової сітки в цьому наближенні визначатиметься тією ж формулою, що й в наближенні середнього поля [1]. Спонтанний момент, віднесений до кількості спінів у сітці, дорівнює:

$$m = \rho_0 \cdot \left(1 - (\partial \tilde{B} / \partial \alpha)_0 - \frac{1}{2} (\partial \tilde{L} / \partial \alpha)_0 \cdot q \right) / (1 + zn/2), \quad (3.1)$$

де $\tilde{B} = z\beta V$, $\tilde{L} = z\beta L$.

У формулу (3.1) входять похідні від величин \tilde{B} , \tilde{L} у нульовому зовнішньому полі. Із структури формули видно, як параметр порядку ρ_0 домножується на величину, що має зміст ефективного спінового моменту вузла сітки і є функцією параметрів мікроскопічного гамільтоніяна. Не зупиняючись детально на температурній залежності спонтанного моменту, зауважимо, що завжди $m < \rho_0$, тобто крива m розміщена під кривою ρ_0 і обидві зливаються при $T \rightarrow 0$ та в околі критичної точки.

ВИСНОВКИ

Підсумовуючи, відзначимо, що мета роботи полягала у вивченні фазових переходів у моделі спінової сітки, яку вивчали в наближенні середнього поля в [1, 3, 4]. Розрахунки проведено в нульовому зовнішньому полі з використанням запропонованого варіанта самоузгодженого гауссового наближення, що дає задовільний опис у широкій області температур. За результатами числових розрахунків можна простежити, що температурні залежності параметрів моделі мають вигляд, характерний для моделі Ізинґа $S=1$ зі значною анізотропією. Для повнішого аналізу необхідно дослідити поведінку в зовнішньому магнетному полі, що буде предметом окремої праці.

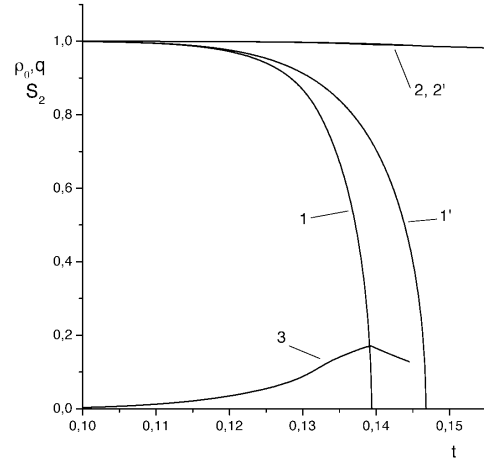


Рис. 6. Температурні залежності параметра порядку ρ_0 , параметра q і дисперсії S_2 (криві 1, 2, 3) для квадратної спінової сітки (довжина ланки $n = 10$) в гауссовому наближенні; середнє поле — криві 1', 2'.

ПОДЯКИ

Автори виражають подяку І. В. Стасюкові і співробітникам відділу квантової статистики ІФКС НАН України за критичні зауваження та стимулюючі поради.

- [1] В. М. Цмоць, В. С. Янішевський, Я. Л. Заяць, Укр. фіз. журн. **7–8**, 41 (1996).
 [2] В. С. Янішевський, Укр. фіз. журн. **5**, 42 (1997).
 [3] В. С. Янішевський, препринт ICMP-97-O5U, Львів (1997).
 [4] В. С. Янішевський, Укр. фіз. журн. **4**, 44 (1999).
 [5] В. Г. Вакс, А. Н. Ларкін, С. А. Пікін, Журн. експ. теор. фіз. **53**, 281 (1967).
 [6] Ю. А. Изюмов, Ф. А. Кассан-оглы, Ю. Н. Скрябин, *Полевые методы в теории ферромагнетизма* (Наука, Москва, 1974).
 [7] И. А. Вакарчук, Ю. К. Рудавский, Теор. мат. физ. **2**, 49 (1981).
 [8] И. Р. Юхновский, *Фазовые переходы второго рода. Метод коллективных переменных* (Наукова думка, Київ, 1985).
 [9] Т. Мория, *Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами* (Мир, Москва, 1988).
 [10] Yu. K. Rudavsky, O. Z. Vatamaniuk, V. P. Savenko, Cond. Matt. Phys. (Lviv) iss. 5, 143 (1995).
 [11] Д. А. Гаранин, В. С. Лутовинов, Теор. мат. физ. **2**, 62 (1985).
 [12] Z. Onyszkiewicz, A. Wierzbicki, Phys. Lett. A **7**, 116 (1986).
 [13] Z. Onyszkiewicz, A. Wierzbicki, Physica B **151**, 6 (1986).
 [14] М. А. Попов, Теор. мат. физ. **3**, 83 (1990).
 [15] І. Р. Юхновський, Р. Р. Левицький, С. І. Сороков, Cond. Matt. Phys. (Lviv) iss. 1, 43 (1993).
 [16] V. S. Yanishevsky, in *Intas-Ukraine Workshop on Condensed Matter Physics. Abstracts* (Lviv, 1998), p. 103.
 [17] С. Н. Горшков, А. В. Забродин, К. Родригес, В. К. Фе-

- дянин, Теор. мат. физ. **2**, 62 (1985).
- [18] А. Н. Ермилов, А. Н. Киреев, А. М. Курбатов, Теор. мат. физ. **3**, 49 (1982).
- [19] S. Frischat, R. Kuhn, J. Phys. A **10**, 28 (1995).
- [20] T. L. Chen, R. J. Loiu, Commun. Theor. Phys. **4**, 22 (1994).
- [21] Q. Wang, T. L. Chen, Commun. Theor. Phys. **1**, 31 (1999).
- [22] М. А. Осипов, А. С. Шумовский, Теор. мат. физ. **1**, 46 (1981).
- [23] Ю. М. Иванченко, А. Э. Филиппов, А. В. Радиевский, Укр. физ. журн. **4**, 38 (1993).

MAGNETIZATION OF SPIN NET FOR ISING MODEL. GAUSSIAN APPROXIMATION

V. S. Yanishevsky, V. M. Tsmots
Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University,
24 I. Franko Str., Drohobych, UA-82100, Lviv Region, Ukraine

The phase transition on the structure of spin net is considered. The Gaussian fluctuation of order parameters is used. The numerical calculation for 2- and 3-dimensional nets with different longitude of links for the Hamiltonian of an Ising model are given. It is demonstrated that such an approximation describes the temperature dependences of phase transition parameters rather well and the comparison with the mean field approximation is performed.