НАМАГНІЧЕНІСТЬ СПІНОВОЇ СІТКИ В МОДЕЛІ ІЗИНҐА. ҐАУССОВЕ 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 ґаусових флюктуацій для параметра порядку. Наведено чисельні розрахунки для дво- і тривимірних сіток із різною довжиною ланок для гамільтоніяна моделі Ізинґа. Показано, що наближення досить добре описує температурні залежності параметрів фазового переходу. Проведено порівняння з наближенням середнього поля.
Ключові слова: спінова сітка, модель Ізинґа, ґауссове наближення.

PACS number(s): 75.10.Hk

ВСТУП

У цій праці продовжено вивчення магнетних властивостей спінових сіток у моделі Ізинґа 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 Ізинґа одновимірна задача розв'язується точно за допомогою методу трансфер-матриці, а вузлову підсистему вищої вимірности доводиться розраховувати в певному наближенні. У працях [1–4] вузлову підсистему вивчали в наближенні середнього поля. Гамільтоніян вузлової підсистеми [1] має структуру узагальненої моделі Ізинґа з ефективними взаємодіями, що є функціями параметрів мікроскопічного гамільтоніяна. У рамках звичайної моделі Ізинґа 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 сприйнятливости. Ця стаття присвячена вивченню названої моделі в рамках ґауссового наближення. Стосовно вибору методу дослідження зробимо декілька зауважень.

Як відомо, наближення середнього поля в теорії магнетизму пов'язане з уведенням однорідних параметрів для всієї просторової области. 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 спеціяльних діяграмних елементів були побудовані ряди для спін-спінових кореляційних функцій високих порядків і вільної енерґії. 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 інтеґрування [7, 8, 9]. Зокрема, у [10] з використанням методу, розвинутого в [7], вивчали ізинґівську модель спіну $S = 1$ в наближенні двох сум за хвильовим вектором для вільної енерґії (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 ґауссове наближення, у якому флюктуації параметра порядку описуються ґауссовим 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 енерґії як функції параметра порядку це викликане появою додаткових мінімумів, і таким чином, форма вільної енерґії не відповідає переходам другого роду. Різні способи усунення цього недоліку розглянуто в працях [11–14]. Як можна бачити в [14], де був запропонований спосіб послідовного врахування додаткового класу діяграм у ґауссовому наближенні, отримана система рівнянь досить складна, що, очевидно, змусило обмежитись аналізом лише околу критичної точки. У праці одного із співавторів [16] був запропонований варіянт ґауссового 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 інтеґрування, у якому отримано функціонал вільної енерґії, що приводить до відомих результатів наближення двохвосток, після чого застосовувано варіяційну процедуру. Варіяційні методи знаходять широке застосування до різноманітних задач (див., наприклад [9, 17–21]) і, як правило, певний результат завжди можна поліпшити, використовуючи відповідним чином варіяційний 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. ГАМІЛЬТОНІЯН МОДЕЛІ

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

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

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

$$\begin{aligned} H = \sum_i (zB - h)\sigma_i + \sum_i zD\sigma_i^2 + \sum_{<ij>} I\sigma_i\sigma_j \\ + \sum_{<ij>} K\sigma_i^2\sigma_j^2 + \sum_{<ij>} L\sigma_i\sigma_j^2, \end{aligned} \tag{1.2}$$

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

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

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 інваріянтности статсуми спінового ланцюжка щодо заміни: $Z_1(s, s') = Z_1(-s, -s')$. Отже, у нульовому полі обмежимось гамільтоніяном [3]

$$H = \sum_i zD\sigma_i^2 + \sum_{<ij>} I\sigma_i\sigma_j + \sum_{<ij>} K\sigma_i^2\sigma_j^2. \tag{1.4}$$

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

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

де введені позначення:

$$I_{\mathbf{k}} = zI\gamma_{\mathbf{k}}, \ \gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{z}\sum_{\boldsymbol{\delta}} e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\delta}},$$

$$\hat{\sigma}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{N}\sum_i \sigma_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i}, \quad \hat{q}_0 = \frac{1}{N}\sum_i \sigma_i^2;$$

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

II. ҐАУССОВЕ НАБЛИЖЕННЯ

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

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

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

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

Тут уведено такі позначення:

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

де h_{1M}, h_{2M} — мають зміст полів, що діють на σ і σ^2 відповідно, h'_i — флюктуаційне поле, що діє на спін 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 енерґію системи ідеальних спінів із анізотропією:

$$\beta F_{id}(x,\ y) = -\ln Z_{id}(x,\ y), \tag{2.3}$$
$$Z_{id}(x,\ y) = Sp\exp(-x\sigma - y\sigma^2).$$

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

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

де параметр h після дії диференціяльного оператора слід покласти рівним нулеві. Згідно з [16], редукція (2.4) для звичайної моделі Ізинґа приводить до ґауссового наближення, що в діяграмному методі отримується підсумовуванням діяграм 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 варіяційний 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 варіяційних параметрів при застосуванні варіяційного принципу для вільної енерґії системи. Варіяційний метод ґрунтується на відомій нерівності Боголюбова для вільної енерґії [9, 17-22]:

$$F(\rho_0) \le F_0(\rho_0) + \langle H(\rho) - H_0(\rho)\rangle_0\,. \tag{2.5}$$

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 гамільтоніяни, які є функціоналами змінних функціонального інтеґрування.

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

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

де $\hat{D}_1(\rho) = \frac{1}{2N}\sum\limits_{\mathbf{k}\neq 0}\beta\alpha_{\mathbf{k}}\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}}\cdot\partial^2/\partial h^2$. Тобто пробний гамільтоніян залежить від варіяційних 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. Диференціяльну операцію у (2.7) можна замінити тотожною інтеґральною

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

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

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

де введено позначення

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

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

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

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

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

де введено також позначення

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

Тут відповідні оператори можна подати у вигляді

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

увівши функції, що складають два самоузгоджені рівняння

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

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

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

куди входять дві функції, що складають ще два самоузгоджені рівняння

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

Рівняння (2.12) (з урахуванням (2.14)) є по суті інтеґральним 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 енерґії (2.9) за ρ_0, у результаті одержимо

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

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

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

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 ґауссове наближення на випадок моделі (1.5). Функція $\bar{S}_2$ визначає дисперсію ґауссівського розподілу параметра порядку. Система рівнянь є замкнутою і дозволяє знайти температурні залежності параметрів порядку і параметра q, а також функцій $\bar{S}_1,\ \bar{S}_2,\ \bar{S}_3,\ \bar{S}_4$.

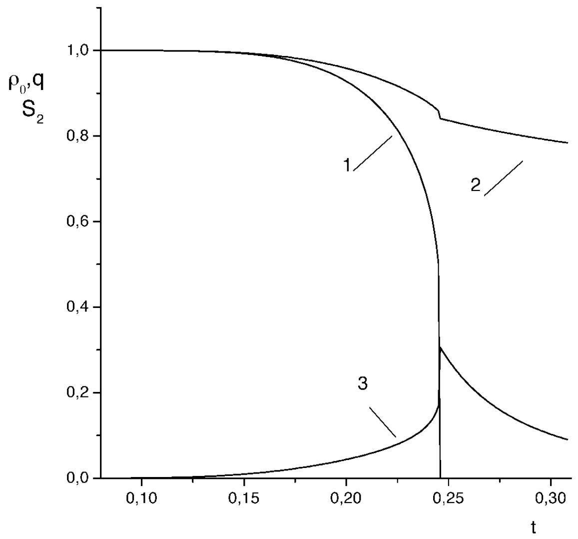

Рис. 1. Температурні залежності параметра порядку ρ_0, параметра q і дисперсії $\bar{S}_2$ (відповідно криві 1, 2, 3) для кубічної спінової сітки (довжина ланки $n = 1$) в наближенні двохвосток.

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 зупинятись 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 оси абсцис відкладена температура в безрозмірних одиницях $t = k_BT/z\epsilon$, 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.

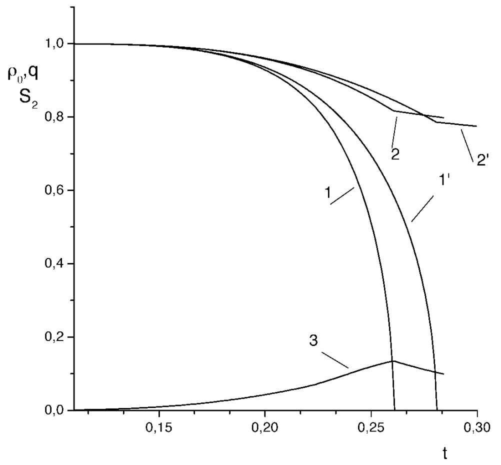

Рис. 2. Температурні залежності параметра порядку ρ_0, параметра q і дисперсії $\bar{S}_2$ (криві 1, 2, 3) для кубічної спінової сітки (довжина ланки $n = 1$) в ґауссовому наближенні; середнє поле — криві $1'$, $2'$.

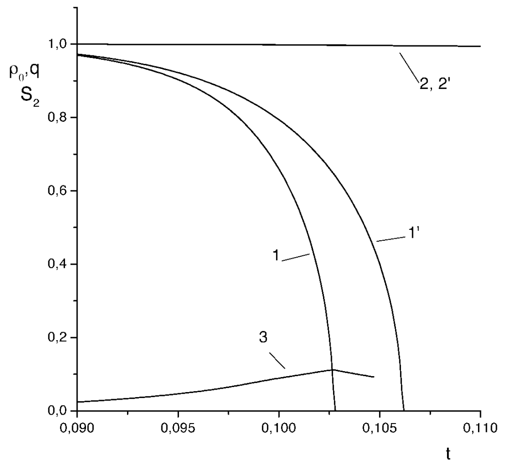

Рис. 3. Температурні залежності параметра порядку ρ_0, параметра q і дисперсії $\bar{S}_2$ (криві 1, 2, 3) для кубічної спінової сітки (довжина ланки $n = 10$) в ґауссовому наближенні; середнє поле — криві $1'$, $2'$.

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 залежности дисперсії $\bar{S}_2$ ґауссового розподілу параметра порядку. Як видно, дисперсія монотонно зростає з підвищенням температури і досягає максимуму в точці фазового переходу. Тобто пропоноване 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 гамільтоніяні 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].

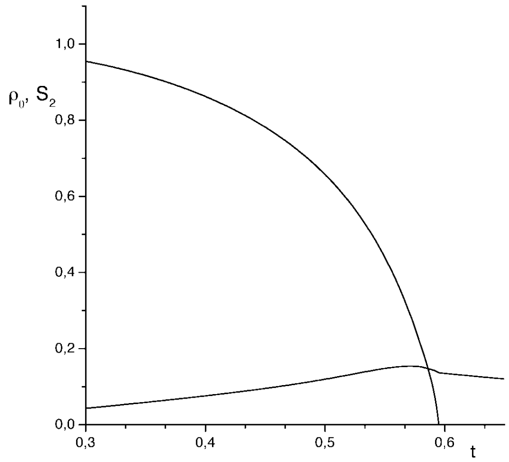

Рис. 4. Температурні залежності параметра порядку і дисперсії для кубічної ґратки в ґауссовому наближенні.

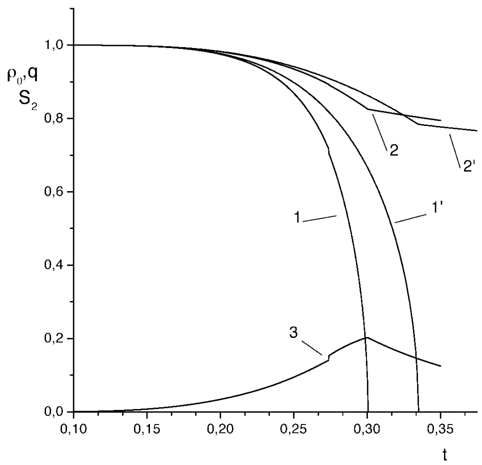

Рис. 5. Температурні залежності параметра порядку ρ_0, параметра q і дисперсії $\bar{S}_2$ (криві 1, 2, 3) для квадратної спінової сітки (довжина ланки $n = 1$) в ґауссовому наближенні; середнє поле — криві $1'$, $2'$.

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 кількости спінів у сітці, дорівнює:

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

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

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 $T \to 0$ та в околі критичної точки.

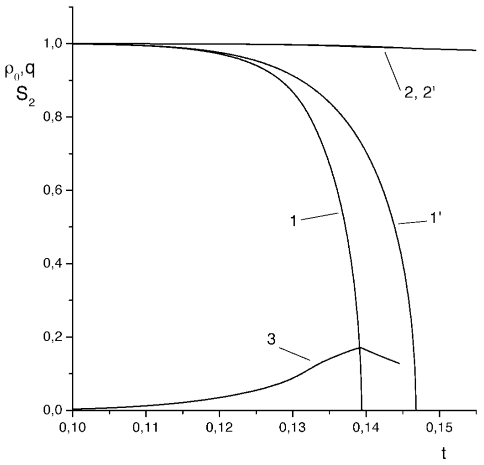

Рис. 6. Температурні залежності параметра порядку ρ_0, параметра q і дисперсії $\bar{S}_2$ (криві 1, 2, 3) для квадратної спінової сітки (довжина ланки $n = 10$) в ґауссовому наближенні; середнє поле — криві $1'$, $2'$.

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 варіянта самоузгодженого ґауссового 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.

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. Ларкин, С. А. Пикин, Журн. експ. теор. физ. **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., Drogobych, 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.