MSC 82D40

ПРИБЛИЖЕНИЕ САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОЛЯ В ВЕКТОРНОЙ МОДЕЛИ ФЕРРОМАГНЕТИКА

Ю.П. Вирченко

Белгородский государственный университет,
ул. Студенческая, 14, Белгород, 308007, Россия, e-mail: virch@bsu.edu.ru

Аннотация. Анализируется фазовый переход из парамагнитного состояния в ферромагнитную магнитную структуру в рамках т.н. векторной модели в статистической механике решетчатых систем при ферромагнитном обменном взаимодействии. Анализ производится с применением т.н. приближения самосогласованного поля.

Ключевые слова: гамильтониан, обменный интеграл, самосогласованное поле, фазовый переход.

1. Введение. Последовательный математический анализ фазовых переходов при постановке задачи в рамках равновесной статистической механики является чрезвычайно сложной задачей математической физики, в решении которой в настоящее время не имеется сколько-нибудь заметного прогресса. Это относится даже к такой такому направлению в этой области исследований, относительно простому с точки зрения сложности привлекаемых математических объектов при постановке задачи, как статистическая механика классических решетчатых систем (см. [1]). При этом не имеется никаких сколько-нибудь общих подходов к анализу систем из какого-нибудь обширного их класса, за исключением, может быть классических решетчатых систем с конечным набором состояний в каждом из узлов кристаллической решетки, где имеется т.н. контурная техника. В связи с этим, в прикладных исследованиях в рамках подходов, принятых в теоретической физике, обычно, преследуя целью получение конкретных формул, описывающих измеряемые характеристики исследуемых физических систем, первоначальная постановка задачи видоизменяется таким образом, чтобы можно было вычислить температурные зависимости наблюдаемых величин используя только традиционные методы математической физики. Речь идет о т.н. *приближении среднего поля*, о математической точности которого по отношению к исходной постановки задачи в настоящее время почти ничего не известно. Однако, даже в рамках такого приближения, анализ конкретных моделей статической механики, сколько-нибудь реалистических с точки зрения приложения результатов их анализа к описанию экспериментальных данных относительно физических систем, которые они моделируют, может представлять задачу заметной математической сложности, при последовательном математическом анализе которой приходится преодолевать ряд математических трудностей. В настоящем сообщении с этой точки зрения анализируется так называемая векторная модель статистической механики классических решетчатых систем в приближении среднего поля.

Модели статистической механики решетчатых систем строятся на множестве

$$\Lambda_N = \left\{ \mathbf{x} = \frac{2\pi}{L} \sum_{i=1}^{3} n_i \mathbf{e}_i \, : \, n_i \in \mathbb{Z}; i = 1, 2, 3; n_i \in (-L/2, L/2] \right\},$$

который моделирует образец идеального кристалла с простой кубической структурой с числом узлов N, $N = |\Lambda_N|$. Здесь L – четное число, которое полагается очень большим (так как в последствии по этому параметру осуществляется переход к пределу $L \to \infty$). С каждым элементом этого множества – узлом решетки связывается фазовое пространство узла. Для классических систем, обычно, таким фазовым пространством служит компактное многообразие в конечномерном евклидовом пространстве. В нашем случае случае – двумерная сфера $\mathcal{S}_2$ радиуса $s > 0$. На множестве $\prod_{\mathbf{x} \in \Lambda_N} \mathcal{S}_2(\mathbf{x})$ – фазовом пространстве системы определяется функция – гамильтониан системы

$$\mathsf{H}_N[\mathbf{s}] = -\sum_{\mathbf{x} \in \Lambda_N} (\mathbf{h}, \mathbf{s}(\mathbf{x})) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Lambda_N} I(\mathbf{x} - \mathbf{y})(\mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{y})),$$

где $\mathbf{s}(\mathbf{x})$ – произвольное векторное поле на Λ_N, ограниченное условием $\mathbf{s}^2(\mathbf{x}) = s^2$; функция $I(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \Lambda_N$ называется *обменным интегралом.*

Определим конечное преобразование Фурье

$$\bar{I}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda_n I(\mathbf{x})} e^{-i(\mathbf{x}, \mathbf{k})} < 0$$

и будем считать, что

$$\bar{I}(0) = \min \bar{I}(\mathbf{k}) \equiv I_0 .$$

Этот случай соответствует физически т. н. ферромагнитному обменному взаимодействию.

При этом множество всех полей $\mathbf{s}(\mathbf{x})$, реализующих этот минимум, описывается обозримым образом. Это константы $\mathbf{s}(\mathbf{x}) = \mathbf{s}$, $\mathbf{x} \in \Lambda_N$, $\mathbf{s}$ – произвольный вектор, $\mathbf{s}^2 = s^2$. Описание множества этих полей очень важно, так как с физической точки зрения они реализуются при $T = 0$.

На основе гамильтониана $\mathsf{H}_N[\mathbf{s}]$ определяется распределение вероятностей Гиббса на фазовом пространстве $\prod_{\mathbf{x} \in \Lambda_N} \mathcal{S}_2(\mathbf{x})$ посредством плотности

$$G[\mathbf{s}(\mathbf{x}); \mathbf{x} \in \Lambda_N] = Z_N^{-1} \exp\Big(-\mathsf{H}_N[\mathbf{s}]/T \Big)$$

так что дифференциал распределения $d\Pr\{\mathbf{s}(\mathbf{x}); \mathbf{x} \in \Lambda_N\}$ равен в нашем случае

$$d\Pr\{\mathbf{s}(\mathbf{x}); \mathbf{x} \in \Lambda_N\} = G[\mathbf{s}(\mathbf{x}); \mathbf{x} \in \Lambda_N] \prod_{\mathbf{x} \in \Lambda_N} d\mathbf{s}(\mathbf{x})$$

и нормировочный множитель –

$$Z_N = \mathrm{Sp}\exp\left(-\frac{\mathsf{H}_N[\mathbf{s}]}{T}\right) = \left(\prod_{\mathbf{x}\in\Lambda_N}\int\limits_{\mathbf{s}^2(\mathbf{x})=s^2} d\mathbf{s}(\mathbf{x})\right)\exp\left(-\frac{\mathsf{H}_N[\mathbf{s}]}{T}\right),$$

который называется статистической суммой. Математическое ожидание $\langle\mathbf{s}(\mathbf{x})\rangle = \mathbf{m}(\mathbf{h},T)$ называется намагниченностью в рамках рассматриваемой модели. Реализация минимума энергии при $T=0$ означает, что при низких температурах $\mathbf{m}(\mathbf{h},T)\approx\mathbf{s}$.

2. Приближение среднего поля. Классический случай. Введем отклонение $\mathbf{s}(\mathbf{x}) - \mathbf{m}(\mathbf{h},T)\equiv\mathbf{\Delta}(\mathbf{x})$ и преобразуем гамильтониан

$$\mathsf{H}_N[\mathbf{s}] = \mathsf{H}_N[\mathbf{m}] + \mathsf{H}_N[\mathbf{\Delta}] + \sum_{\mathbf{x},\mathbf{y}\in\Lambda_N} I(\mathbf{x}-\mathbf{y})(\mathbf{m},\mathbf{\Delta}(\mathbf{y}))\,,$$

где введено обозначение $N\mathbf{m} = N\langle\mathbf{s}(\mathbf{x})\rangle$. Тогда

$$\left\langle\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda_N}\mathbf{s}(\mathbf{x})\right\rangle = \frac{1}{Z_N}\left(\prod_{\mathbf{x}\in\Lambda_N}\int\limits_{\mathbf{s}^2(\mathbf{x})=s^2} d\mathbf{s}(\mathbf{x})\right)\left(\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda_N}\mathbf{s}(\mathbf{x})\right)\exp\left(-\frac{\mathsf{H}_N[\mathbf{s}]}{T}\right) =$$

$$= \frac{1}{Z_N}\mathrm{Sp}\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda_N}\mathbf{s}(\mathbf{x})\exp\left(-\frac{\mathsf{H}_N[\mathbf{s}]}{T}\right) = T\frac{\partial}{\partial\mathbf{h}}\ln Z_N\,.$$

При этом статистическая сумма преобразуется следующим образом:

$$Z_N = \exp\left(-\frac{\mathsf{H}_N[\mathbf{m}]}{T}\right)\cdot\left(\prod_{\mathbf{x}\in\Lambda_N}\int\limits_{\mathbf{s}^2(\mathbf{x})=s^2} d\mathbf{s}(\mathbf{x})\right)\exp\left(-T^{-1}[\mathsf{H}_N[\mathbf{\Delta}] + \sum_{\mathbf{x}\in\Lambda_N}\tilde{I}(0)(\mathbf{m},\mathbf{\Delta}(\mathbf{x}))]\right).$$

Приближение среднего поля получается формальным пренебрежением при вычислении математических ожиданий квадратичным по $\mathbf{\Delta}(\mathbf{x})$ слагаемым в выражении для плотности (в частности, в статистической сумме) Введем вектор $\mathbf{g} = T^{-1}(\mathbf{h} - \mathbf{m}\tilde{I}(0))$. Тогда в приближении среднего поля

$$Z_N = \exp\left(-\frac{\mathsf{H}_N[\mathbf{m}]}{T}\right)\cdot\left(\prod_{\mathbf{x}\in\Lambda_N}\int\limits_{\mathbf{s}^2(\mathbf{x})=s^2} d\mathbf{s}(\mathbf{x})\right)\exp\left(\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda_N}(\mathbf{g},\mathbf{\Delta}(\mathbf{x}))\right) =$$

$$= \exp\left(-\frac{\mathsf{H}_N[\mathbf{m}]}{T}\right)\cdot\prod_{\mathbf{x}\in\Lambda_N}\left[\int\limits_{\mathbf{s}^2(\mathbf{x})=s^2}\exp\left((\mathbf{g},\mathbf{\Delta}(\mathbf{x}))\right)d\mathbf{s}(\mathbf{x})\right] =$$

$$= \exp\left(\frac{N}{2T}\bar{I}(0)\mathbf{m}^2\right)\cdot\Big[\int\limits_{\mathbf{s}^2=s^2}\exp\left((\mathbf{g},\mathbf{s})\right)d\mathbf{s}\Big]^N,$$

то есть

$$\ln Z_N = \frac{N}{2T}\bar{I}(0)\mathbf{m}^2 + N\ln\int\limits_{\mathbf{s}^2=s^2}\exp\left((\mathbf{g},\mathbf{s})\right)d\mathbf{s},$$

$$T\frac{\partial}{\partial\mathbf{h}}\ln Z_N = N\frac{\partial}{\partial\mathbf{g}}\ln\int\limits_{\mathbf{s}^2=s^2}\exp\left((\mathbf{g},\mathbf{s})\right)d\mathbf{s},$$

Так как

$$\langle\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda_N}\mathbf{s}(\mathbf{x})\rangle = N\mathbf{m},$$

то

$$\mathbf{m} = \frac{\partial}{\partial\mathbf{g}}\ln\int\limits_{\mathbf{s}^2=s^2}\exp\left((\mathbf{g},\mathbf{s})\right)d\mathbf{s}. \qquad (1)$$

При этом

$$\int\limits_{\mathbf{s}^2=s^2}\exp\left((\mathbf{g},\mathbf{s})\right)d\mathbf{s} = 2\pi s^2\int\limits_0^\pi e^{|\mathbf{g}|s\cos\theta}\sin\theta d\theta = \frac{4\pi s}{|\mathbf{g}|}\mathrm{sh}(s|\mathbf{g}|).$$

$$\frac{\partial}{\partial\mathbf{g}}\ln\int\limits_{\mathbf{s}^2=s^2}\exp\left((\mathbf{g},\mathbf{s})\right)d\mathbf{s} = \frac{\partial}{\partial\mathbf{g}}\left(\ln\mathrm{sh}(s|\mathbf{g}|) - \ln|\mathbf{g}|\right) = s\frac{\mathbf{g}}{|\mathbf{g}|}L(s|\mathbf{g}|), \qquad (2)$$

где

$$L(x) = \mathrm{cth}\,x - \frac{1}{x}$$

– известная в теории магнетизма функция Ланжевена.

Подстановка вычисленного выражения (2) в (1) приводит к так называемому уравнению согласования теории среднего поля. Его решение позволяет определить зависимость $\mathbf{m}(T,\mathbf{h})$, которая носит название уравнения состояния При $\mathbf{h}=0$ уравнение состояния имеет вид

$$\mathbf{m} = s\frac{\mathbf{m}}{|\mathbf{m}|}L(s|\bar{I}(0)||\mathbf{m}|/T). \qquad (3)$$

Проанализируем решения этого уравнения. Из (3) имеем

$$\frac{m}{s} = L(s|\bar{I}_0||\mathbf{m}|/T).$$

Положив $x = \frac{s}{T}|\bar{I}_0||\mathbf{m}|$ и $\Theta = s^2|\bar{I}_0|$, представим его в виде

$$\frac{T}{\Theta}x = L(x).$$

Исследуем свойства функции $L(x)$. Ее производная равна $L'(x) = \dfrac{1}{x^2} - \dfrac{1}{\mathrm{sh}^2 x}$. Так как

$$\mathrm{sh}\,x = x + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \ldots,$$

то $\operatorname{sh} x > x$ при $x > 0$ и поэтому $x^{-1} > \operatorname{sh}^{-1} x$. Следовательно, $L'(x) > 0$ и функция $L(x)$ возрастает. (Точно также $\operatorname{sh} x$ нечетная функция, то при $x < 0$ выполняется $\operatorname{sh} x < x$, но $\operatorname{sh}^2 x > x^2$ и поэтому функция $L(x)$ возрастает всюду.) С другой стороны, $\lim\limits_{x\to\infty} \operatorname{cth} x = 1$ и поэтому $\lim\limits_{x\to\infty} L(x) = 1$. В окрестности нуля функция $\operatorname{cth} x$ имеет вид

$$\operatorname{cth} x = x^{-1}\frac{1 + x^2/2 + O(x^4)}{1 + x^2/6 + O(x^4)} = x^{-1}\left(1 + \frac{x^2}{2} + O(x^4)\right)\left(1 - \frac{x^2}{6} + O(x^4)\right) =$$

$$= x^{-1}\left(1 + \frac{x^2}{3} + O(x^4)\right) = \frac{x}{3} + O(x^4)\,.$$

Тогда, из уравнения согласования получаем, что при $\dfrac{T}{\Theta} > \dfrac{1}{3}$ имеется единственное нулевое решение $x = 0$, то есть $T > \Theta/3 = s^2|\bar{I}_0|/3 \equiv T_c$, то есть решение $\mathbf{m} = 0$. Если же $T < T_c$, то существует три решения. Причем то решение, которое выживает при $T \to 0$, то есть стремится к $\mathbf{s}$ $(x \to 1)$, соответствует наибольшему решению.

3. Приближение среднего поля. Квантовый случай. Для квантовых решетчатых систем фазовое пространства в каждом узле кристаллической решетки является гильбертовым пространством и распределение вероятностей задается некоммутативным образом – на основе статистического оператора. Математические ожидания даются следами от произведений статистического оператора с операторами наблюдаемых величин. Статистический оператор $\hat{G}$ Гиббса определяется гамильтонианом $\hat{\mathsf{H}}_N$ точно таким же образом как плотность распределения Гиббса определяется функционалом $\mathsf{H}_N[\cdot]$.

Рассмотрим решеточную систему с гамильтонианом

$$\hat{\mathsf{H}}_\Lambda[\hat{\mathbf{s}}] = -\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda}(\mathbf{h}, \hat{\mathbf{s}}(\mathbf{x})) + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{x},\mathbf{y}\in\Lambda} I(\mathbf{x}-\mathbf{y})(\hat{\mathbf{s}}(\mathbf{x}), \hat{\mathbf{s}}(\mathbf{y}))\,,$$

которая является аналогом рассмотренной выше классической векторной модели. Статистическая сумма Z_Λ этой системы определяется в виде следом

$$Z_\Lambda = \operatorname{Sp}\exp\left(-\frac{\hat{\mathsf{H}}_\Lambda[\hat{\mathbf{s}}]}{T}\right).$$

При этом намагниченность дается математическим ожиданием

$$\mathbf{M} = \frac{1}{Z_\Lambda}\operatorname{Sp}\Big(\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda}\hat{\mathbf{s}}(\mathbf{x})\Big)\exp\left(-\frac{\hat{\mathsf{H}}_\Lambda[\hat{\mathbf{s}}]}{T}\right) = T\frac{\partial}{\partial\mathbf{h}}\ln Z_\Lambda\,,$$

где $\mathbf{M} = N\mathbf{m}$.

Введем как и в классической векторной модели отклонения спинов от среднего значения $\mathbf{m}$

$$\hat{\boldsymbol{\Delta}}(\mathbf{x}) = \hat{\mathbf{s}}(\mathbf{x}) - \mathbf{m}$$

и запишем гамильтониан $\hat{\mathsf{H}}_\Lambda[\hat{\mathbf{s}}]$ в виде

$$\hat{\mathsf{H}}_\Lambda[\hat{\mathbf{s}}] = \hat{\mathsf{H}}_\Lambda[\hat{\mathbf{\Delta}}] + \hat{\mathsf{H}}_\Lambda[\hat{\mathbf{m}}] + \sum_{\mathbf{x},\mathbf{y}} I(\mathbf{x}-\mathbf{y})(\mathbf{m}, \hat{\mathbf{\Delta}}(\mathbf{y}))\,. \tag{4}$$

В операторе

$$\hat{\mathsf{H}}_\Lambda[\hat{\mathbf{\Delta}}] = -\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda}(\mathbf{h}, \hat{\mathbf{\Delta}}(\mathbf{x})) + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{x},\mathbf{y}\in\Lambda} I(\mathbf{x}-\mathbf{y})(\hat{\mathbf{\Delta}}(\mathbf{x}), \hat{\mathbf{\Delta}}(\mathbf{y}))$$

пренебрежем квадратичным слагаемым

$$\hat{\mathsf{H}}_\Lambda[\hat{\mathbf{\Delta}}] = -\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda}(\mathbf{h}, \hat{\mathbf{\Delta}}(\mathbf{x})) + o(|\mathbf{\Delta}|)$$

и преобразуем последнее слагаемое в (4)

$$\sum_{\mathbf{x},\mathbf{y}} I(\mathbf{x}-\mathbf{y})(\mathbf{m}, \hat{\mathbf{\Delta}}(\mathbf{y})) = \bar{I}(0)\sum_{\mathbf{y}\in\Lambda}(\mathbf{m}, \hat{\mathbf{\Delta}}(\mathbf{y}))\,,$$

воспользовавшись периодичностью гамильтониана. Сумму этих двух слагаемых представим в виде

$$-\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda}(\mathbf{h}, \hat{\mathbf{\Delta}}(\mathbf{x})) + \bar{I}(0)\sum_{\mathbf{y}\in\Lambda}(\mathbf{m}, \hat{\mathbf{\Delta}}(\mathbf{y})) = -\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda}(\mathbf{h}, \hat{\mathbf{\Delta}}(\mathbf{x})) + \bar{I}(0)\sum_{\mathbf{y}\in\Lambda}(\mathbf{m}, \hat{\mathbf{\Delta}}(\mathbf{y})) =$$

$$= -\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda}(\mathbf{h}, \hat{\mathbf{s}}(\mathbf{x})) + \bar{I}(0)\sum_{\mathbf{y}\in\Lambda}(\mathbf{m}, \hat{\mathbf{s}}(\mathbf{y})) + N(\mathbf{h}, \hat{\mathbf{m}}) - \bar{I}(0)N\mathbf{m}^2\,,$$

где последние два слагаемых представляют собой $\Big(-\hat{\mathsf{H}}_\Lambda[\hat{\mathbf{m}}] - \frac{1}{2}\bar{I}(0)N\mathbf{m}^2\Big)$. Подставляя эти выражения в (4), получим формулу для гамильтониана в приближении среднего поля

$$\hat{\mathsf{H}}'_\Lambda[\hat{\mathbf{s}}] = -\frac{1}{2}\bar{I}(0)N\mathbf{m}^2 - \sum_{\mathbf{x}\in\Lambda}(\tilde{\mathbf{h}}, \hat{\mathbf{s}}(\mathbf{x}))\,,$$

где введено обозначение

$$\tilde{\mathbf{h}} = \mathbf{h} - \bar{I}(0)\mathbf{m}\,.$$

Вычислим теперь приближенную статистическую сумму

$$Z'_\Lambda = \mathrm{Sp}\exp\left(-\frac{\hat{\mathsf{H}}'_\Lambda[\hat{\mathbf{s}}]}{T}\right)$$

и, на ее основе, выражение для намагниченности $\mathbf{M}$:

$$\mathbf{M} = T\frac{\partial}{\partial\mathbf{h}}\ln Z'_\Lambda\,.$$

Эта статистическая сумма равна

$$Z'_\Lambda = \exp\left(\frac{\mathbf{m}^2 N I_0}{2T}\right)\mathrm{Sp}\exp\left(\frac{\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda}(\tilde{\mathbf{h}},\hat{\mathbf{s}}(\mathbf{x}))}{T}\right),$$

$$\mathrm{Sp}\exp\left(\frac{\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda}(\tilde{\mathbf{h}},\hat{\mathbf{s}}(\mathbf{x}))}{T}\right) = \prod_{\mathbf{x}\in\Lambda}\mathrm{Sp}\exp\left(\frac{(\tilde{\mathbf{h}},\hat{\mathbf{s}}(\mathbf{x}))}{T}\right) = \left[\mathrm{Sp}\exp\left(\frac{(\tilde{\mathbf{h}},\hat{\mathbf{s}})}{T}\right)\right]^N.$$

Таким образом,

$$\mathbf{M} = TN\frac{\partial}{\partial\mathbf{h}}\left(\frac{\mathbf{m}^2 I_0}{2T} + \ln\mathrm{Sp}\exp\left(\frac{(\tilde{\mathbf{h}},\hat{\mathbf{s}})}{T}\right)\right) = TN\frac{\partial}{\partial\tilde{\mathbf{h}}}\ln\mathrm{Sp}\exp\left(\frac{(\tilde{\mathbf{h}},\hat{\mathbf{s}})}{T}\right),$$

где производная по $\mathbf{h}$ заменена на производную по $\tilde{\mathbf{h}}$, так как эти переменные отличаются только сдвигом.

Итак, для решения задачи необходимо вычислить след от $(2s+1)\times(2s+1)$-матрицы $\exp\left(\frac{(\tilde{\mathbf{h}},\hat{\mathbf{s}})}{T}\right)$. Выбирая базисные волновые функции так, чтобы они были собственными для оператора $\hat{s}_z$, где ось z направлена по по вектору $\tilde{\mathbf{h}}$, находим

$$\mathrm{Sp}\exp\left(\frac{(\tilde{\mathbf{h}},\hat{\mathbf{s}})}{T}\right) = \mathrm{Sp}\exp\left(\beta\hat{s}_z\right),$$

$\beta = |\tilde{\mathbf{h}}|/T$. Тогда

$$\mathrm{Sp}\exp\left(\beta\hat{s}_z\right) = e^{-\beta s}\sum_{l=0}^{2s} s^{\beta l} = e^{-\beta s}\frac{e^{(2+1)\beta}-1}{e^{\beta}-1} = \frac{\mathrm{sh}(s+1/2)\beta}{\mathrm{sh}(\beta/2)}.$$

Подставляя это выражение в формулу для $\mathbf{M}$, имеем

$$\mathbf{m} = T\frac{\partial}{\partial\tilde{\mathbf{h}}}\left[\ln\mathrm{sh}(s+1/2)\beta - \ln\mathrm{sh}(\beta/2)\right] = T\frac{\partial}{\partial\beta}\left[\ln\mathrm{sh}(s+1/2)\beta - \ln\mathrm{sh}(\beta/2)\right]\frac{\partial\beta}{\partial\tilde{\mathbf{h}}} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial\beta}\left[\ln\mathrm{sh}(s+1/2)\beta - \ln\mathrm{sh}(\beta/2)\right]\frac{\tilde{\mathbf{h}}}{|\tilde{\mathbf{h}}|} = \left[(s+1/2)\mathrm{cth}(s+1/2)\beta - (1/2)\mathrm{cth}(\beta/2)\right]\frac{\tilde{\mathbf{h}}}{|\tilde{\mathbf{h}}|}.$$

В частности, при $\mathbf{h}=0$ имеем уравнение согласования относительно $\mathbf{m}$:

$$\mathbf{m} = \left[(s+1/2)\mathrm{cth}(s+1/2)\beta - (1/2)\mathrm{cth}(\beta/2)\right]\frac{\mathbf{m}}{|\mathbf{m}|}$$

с $\beta = |I_0|m/N$, либо для его ненулевых решений эквивалентное уравнение

$$m = (s+1/2)\mathrm{cth}(s+1/2)\beta - (1/2)\mathrm{cth}(\beta/2),$$

которое представим в форме

$$\frac{T}{|I_0|}\beta = (s+1/2)\mathrm{cth}(s+1/2)\beta - (1/2)\mathrm{cth}(\beta/2) \equiv F(\beta).$$

Функция $F(\beta)$ возрастающая, так как

$$\frac{dF}{d\beta} = (1/4)\mathrm{sh}^{-2}(\beta/2) - (s+1/2)^2\mathrm{sh}^{-2}(s+1/2)\beta > 0\,,$$

ввиду убывания функции $x\mathrm{sh}^{-1}x$,

$$\frac{d}{dx}\frac{x}{\mathrm{sh}\,x} = (\mathrm{th}\,x - x)\frac{\mathrm{ch}\,x}{\mathrm{sh}^2 x} < 0, \qquad \mathrm{th}\,x < x\,,$$

и поэтому

$$\frac{\beta/2}{\mathrm{sh}(\beta/2)} > \frac{\beta(s+1/2)}{\mathrm{sh}(s+1/2)\beta}\,.$$

Производная функции $F(\beta)$ в нуле равна $s(s+1)/3$, так как

$$\mathrm{ch}\,x = 1 + \frac{x^2}{2} + O(x^4)\,, \qquad \mathrm{sh}\,x = x + \frac{x^3}{6} + O(x^5)\,,$$

$$\mathrm{cth}\,x = x^{-1} + \frac{x}{3} + O(x^3)\,,$$

и поэтому

$$F(\beta) = \beta^{-1} + \frac{(s+1/2)^2}{3}\beta - \beta^{-1} - \frac{1}{4}\beta + O(\beta^3) = \frac{(s+1)s}{3}\beta + O(\beta^3)\,.$$

Следовательно, для существования ненулевого решения уравнения, необходимо и достаточно, чтобы $T/|I_0| < s(s+1)/3$.

Ненулевое положительное решение уравнения согласования единственно. Это следует из свойства вогнутости функции $F(\beta)$, которое доказывается ниже.

Лемма. *Для функции Ланжевена $L(x) = \mathrm{cth}\,x - x^{-1}$ при $x > 0$ имеет место неравенство*

$$3L(x) > \mathrm{th}\,x\,.$$

□ Так как

$$\mathrm{ch}\,x = 1 + \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} + O(x^6)\,, \qquad \mathrm{sh}\,x = x + \frac{x^3}{6} + \frac{x^5}{120} + O(x^7)$$

и, следовательно, $\mathrm{cth}\,x = x^{-1} + \dfrac{x}{3} - \dfrac{7x^3}{90} + O(x^5)$. Сравнивая теперь первые члены разложений

$$L(x) = \frac{x}{3} - \frac{7x^3}{90} + O(x^5)\,, \qquad \mathrm{th}\,x = x - \frac{x^3}{3} + O(x^5)\,,$$

находим $3L(x) - \mathrm{th}\,x = \dfrac{x^3}{10} + O(x^5)$, то есть при достаточно малых значениях x неравенство имеет место.

Допустим теперь, что неравенство нарушается при некоторых значениях x. Тогда существует точка x_* – первая из всех положительных точек, где имеет место пересечение, то есть $3L(x_*) = \mathrm{th}\,x_*$ и при этом $3L'(x_*) < \mathrm{th}'x_*$. Так как $\mathrm{th}'x = \mathrm{ch}^{-2}x = 1 - \mathrm{th}^2 x$

и $\mathrm{cth}'x = -\mathrm{sh}^{-2}x = -1 + \mathrm{cth}^2 x$, $L'(x) = x^{-2} - \mathrm{sh}^{-2}x = 1 - 2L(x)/x - L^2(x)$, то в точке x_* из неравенства $\mathrm{th}'(x_*) > 3L'(x_*)$ следует

$$1 - 9L^2(x_*) > 3(1 - L^2(x_*) - 2L(x_*)/x_*)\,, \qquad L^2(x_*) - L(x_*)/x_* + \frac{1}{3} < 0\,,$$

что, в частности, приводит к ограничению $(2x_*)^{-1} - \sqrt{(2x_*)^{-2} - 1/3} < L(x_*)$ при $x_* < \dfrac{\sqrt{3}}{2}$ и, как следствие,

$$3/2x_* - \sqrt{(2x_*)^{-2} - 1/3} < \mathrm{cth}\, x_*\,, \qquad \mathrm{th}\, x_* < 2x_*\left(3 - \sqrt{1 - 4x_*^2/3}\right)^{-1}.$$

Покажем, что последнее неравенство при указанных условиях невозможно.

Во-первых, $\mathrm{th}\, x > x - x^3/3$ при $x > 0$, так как при $x = 0$ это неравенство превращается в равенство, имеет место неравенство для производных $\mathrm{th}'x = \mathrm{ch}^{-2}x > 1 - x^2$, ввиду

$$(1 - x^2)^{-1} = \sum_{l=0}^{\infty} x^{2l} \ge 1 + \frac{1}{2}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{(2x)^{2l}}{(2l)!} = \frac{1}{2}(1 + \mathrm{ch} 2x) = \mathrm{ch}^2 x\,, \qquad (2l)! \ge 2^{2l-1}\,, l \in \mathbb{N}\,.$$

Во-вторых,

$$\frac{2x}{3 - \sqrt{1 - 4x^2/3}} < x - x^3/3\,,$$

так как при $x > 0$ это неравенство эквивалентно $2(3 - y)^{-1} < (3 + y^2)/4$ при $y = \sqrt{1 - 4x^2/3}$, что сводится к очевидному неравенству $8 < (1 - y)^3 + 8$ с $y < 1$.

Из указанных двух фактов следует $\mathrm{th}\, x > x - x^3/3 > 2x(3 - \sqrt{1 - 4x^2/3})^{-1}$. ■

Следствие. *Функция $F(\beta)$ вогнута.*

□ В самом деле,

$$F''(\beta) = \beta^{-3}[G\left(\frac{(}{s} + 1/2)\beta\right) - G(\beta/2)]\,, \qquad G(x) = \frac{x^3 \mathrm{ch}\, x}{\mathrm{sh}\, x}\,.$$

Но в силу доказанной леммы функция $G(x)$ убывающая, так как неравенство $\dfrac{d}{dx}\left(\dfrac{\mathrm{ch}\, x}{(x^{-1}\mathrm{sh}\, x)^3}\right) < 0$ эквивалентно $\dfrac{d}{dx}\ln \mathrm{ch}\, x < 3\dfrac{d}{dx}\ln\, x^{-1}\mathrm{sh}\, x$, $\mathrm{th}\, x < 3L(x)$. ■

Литература

1. Рюэль Д. Статистическая механика. Строгие результаты / М.: Мир, 1971. – 368 с.

SELF-CONSISTENT FIELD APPROXIMATION IN VECTOR FERROMAGNETIC MODEL

Yu.P. Virchenko

Belgorod State University,
Studencheskaya St., 14, Belgorod, 308007, Russia, e-mail:virch@bsu.edu.ru

Abstract. The phase transition from paramagnetic state into ferromagnetic structure in frameworks of so-called vector model in statistical mechanics of lattice systems is analized when exchange integral in hamiltonian is ferromagnetic. The analysis is done on the basis of the self-consistent field approximation.

Key words: hamiltonian, exchange integral, selfconsistent field, phase transition.