Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Н. Б. Мельников, Г. В. Парадеженко, Магнитный фазовый переход в теории спиновых флуктуаций, *ТМФ*, 2015, том 183, номер 3, 486–497

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf8789>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.208.226.222

26 апреля 2023 г., 11:57:33

© 2015 г.

Н. Б. Мельников*, Г. В. Парадеженко*

МАГНИТНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В ТЕОРИИ СПИНОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ

Фазовый переход первого рода является характерной особенностью гауссова приближения в теории спиновых флуктуаций. Предложен метод учета членов четвертого порядка в разложении свободной энергии при помощи частичного усреднения. На примере модели Изинга показано, что перенормировка магнитной восприимчивости приводит к непрерывному фазовому переходу второго рода, который наблюдается в эксперименте в металлах. Для построения температурных зависимостей при высоких температурах использован метод замены параметра.

Ключевые слова: метод функционального интегрирования, преобразование Стратоновича–Хаббарда, частичное усреднение, перенормировка.

DOI: 10.4213/tmf8789

1. ВВЕДЕНИЕ

Теория спиновых флуктуаций описывает магнитные свойства металлов при конечных температурах с помощью метода функционального интегрирования (см., например, [1], [2]). На практике могут быть вычислены лишь гауссовы интегралы. Простейшим гауссовым приближением является метод перевала, в котором флуктуирующее поле заменяется его средним значением (см., например, [3]). Однако метод перевала работает лишь при низких температурах, поскольку он не учитывает влияния флуктуаций на среднее поле. Оптимальное гауссово приближение [4] учитывает взаимное влияние флуктуаций и среднего поля друг на друга и применимо при конечных температурах. Однако при высоких температурах оптимальное гауссово приближение приводит к скачкообразному изменению температурной зависимости магнитных характеристик [5]–[7] вопреки эксперименту. Подобный фазовый переход первого рода наблюдался также в работах [1], [8]–[10], где использовались феноменологические теории типа теории Гинзбурга–Ландау (см., например, [11]–[13]).

*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия.
E-mail: melnikov@cs.msu.su

В настоящей работе изложен метод учета членов четвертого порядка в разложении свободной энергии во флуктуирующем поле¹⁾. Для перенормировки оптимального гауссова приближения нами предложен метод частичного усреднения (расщепления) гауссовых полей, основанный на теореме Вика. Предложенный метод отличается от метода частичного усреднения, используемого в теории среднего поля (см., например, [15]), и методов расщепления в цепочках уравнений для функций Грина [16], [17].

Применимость перенормированного гауссова приближения иллюстрируется на модели Изинга, в которой свободная энергия имеет простой аналитический вид. Получена система уравнений, которая описывает параметры перенормированного гауссова приближения – среднее поле и среднеквадратичное отклонение. Для построения температурных зависимостей при высоких температурах использован метод замены параметра. Указанный метод универсален и может быть применен для исследования флуктуационных эффектов и фазовых переходов различной природы.

Статья построена следующим образом. В разделе 2 кратко изложен метод функционального интегрирования применительно к модели Изинга. В разделе 3 приведены уравнения оптимального гауссова приближения. В разделе 4 выведена формула для гауссова расщепления и получен явный вид уравнений перенормированного гауссова приближения. В разделе 5 изложено локальное приближение [2] применительно к модели Изинга. В разделе 6 описан метод замены параметра и проанализированы результаты расчетов. В разделе 7 суммируются полученные результаты.

2. ТЕОРИЯ СПИНОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ

Гамильтониан модели Изинга имеет вид

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

где $S_j = \pm 1/2$ – спиновый момент на узле j трехмерной кристаллической решетки, а $J_{jj'} = J_{j-j'}$ – коэффициент взаимодействия. Используя периодические граничные условия, записываем гамильтониан (1) в фурье-представлении:

$$H = -\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} J_{\mathbf{q}} |S_{\mathbf{q}}|^2,$$

где волновой вектор $\mathbf{q}$ принимает значения в зоне Бриллюэна, N – число узлов кристаллической решетки, а дискретное преобразование Фурье произвольной функции f_j определено формулами

$$f_{\mathbf{q}} = \sum_j f_j e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j}, \quad f_j = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_j}. \quad (2)$$

¹⁾Учет членов четвертого порядка достаточен в широком интервале высоких температур, за исключением критической области, в которой необходимо рассматривать вклады всех степеней, например, методом ренормгруппы [14].

Преобразование Стратоновича–Хаббарда заменяет парное взаимодействие спинов на взаимодействие спинов с флуктуирующим полем $\mathbf{V} = (V_{\mathbf{q}_1}, \dots, V_{\mathbf{q}_N})$. В результате статсумма записывается в виде

$$Z = \left(\int e^{-F_0(\mathbf{V})/T} d\mathbf{V} \right)^{-1} \int e^{-(F_0(\mathbf{V})+F_1(\mathbf{V}))/T} d\mathbf{V}. \quad (3)$$

Здесь

$$F_0(\mathbf{V}) = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{|V_{\mathbf{q}}|^2}{J_{\mathbf{q}}} \quad (4)$$

– энергия поля, а

$$F_1(\mathbf{V}) = -T \ln \text{Tr} e^{-H_1(\mathbf{V})/T} \quad (5)$$

– свободная энергия системы невзаимодействующих спинов в поле $\mathbf{V}$, где

$$H_1(\mathbf{V}) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}} V_{-\mathbf{q}} \quad (6)$$

– гамильтониан этой системы (T – температура в энергетических единицах). Явное выражение для свободной энергии (5) имеет вид

$$F_1(\mathbf{V}) = -T \sum_j \ln \left(2 \text{ch} \frac{V_j}{2T} \right). \quad (7)$$

В рамках теории спиновых флуктуаций наблюдаемая $\langle f \rangle \equiv \text{Tr}(f e^{-H/T}) / \text{Tr} e^{-H/T}$ вычисляется по формуле

$$\langle f \rangle = \int f(\mathbf{V}) p(\mathbf{V}) d\mathbf{V}, \quad (8)$$

где квантово-механическое среднее $f(\mathbf{V})$ в системе независимых спинов в поле $\mathbf{V}$ определяется соотношением

$$f(\mathbf{V}) = \text{Tr}(f e^{-H_1(\mathbf{V})/T}) / \text{Tr} e^{-H_1(\mathbf{V})/T},$$

а плотность вероятности $p(\mathbf{V})$ имеет вид

$$p(\mathbf{V}) \propto e^{-F(\mathbf{V})/T}, \quad F(\mathbf{V}) = F_0(\mathbf{V}) + F_1(\mathbf{V}). \quad (9)$$

Одним из главных преимуществ теории спиновых флуктуаций является возможность выразить средний спиновый момент и спиновые корреляторы через среднее и корреляторы поля. Средний спиновый момент

$$\bar{S} = Z^{-1} \text{Tr}(S_j e^{-H/T})$$

и среднее поле

$$\bar{V} = \left(\int e^{-F_0(\mathbf{V})/T} d\mathbf{V} \right)^{-1} \int V_j e^{-F(\mathbf{V})/T} d\mathbf{V}$$

связаны соотношением $\bar{V} = J_0 \bar{S}$, где J_0 – нулевой коэффициент Фурье. Корреляторы спина и поля связаны соотношением [18]

$$\langle |\Delta S_{\mathbf{q}}|^2 \rangle = \frac{1}{J_{\mathbf{q}}^2} \langle |\Delta V_{\mathbf{q}}|^2 \rangle - \frac{NT}{J_{\mathbf{q}}}, \quad (10)$$

где $\Delta S_{\mathbf{q}} = S_{\mathbf{q}} - \langle S_{\mathbf{q}} \rangle$ и $\Delta V_{\mathbf{q}} = V_{\mathbf{q}} - \langle V_{\mathbf{q}} \rangle$. Для практического вычисления статсуммы (3) и средних значений (8) необходимо гауссово приближение.

3. ОПТИМАЛЬНОЕ ГАУССОВО ПРИБЛИЖЕНИЕ

Гауссово приближение исходного флуктуирующего поля $\mathbf{V}$ с плотностью вероятности (9) состоит в следующем. Функция $F(\mathbf{V})$ заменится трансляционно-инвариантной квадратичной формой

$$F_G(\mathbf{V}) = \sum_{j,j'} \Delta V_j A_{j-j'} \Delta V_{j'} = \sum_{\mathbf{q}} \Delta V_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{q}} \Delta V_{-\mathbf{q}},$$

которая задает гауссово флуктуирующее поле с плотностью вероятности

$$p_G(\mathbf{V}) = Z_G^{-1} e^{-F_G(\mathbf{V})/T},$$

где

$$Z_G = \int e^{-F_G(\mathbf{V})/T} d\mathbf{V}.$$

Простейшее гауссово приближение получается с помощью метода перевала. Среднее поле $\bar{\mathbf{V}}$ определяется из условия локального минимума, а величина $A_{\mathbf{q}}$ задается второй производной функции $F(\mathbf{V})$ в среднем поле:

$$\frac{\partial F(\bar{\mathbf{V}})}{\partial V_j} = 0, \quad A_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 F(\bar{\mathbf{V}})}{\partial V_{\mathbf{q}} \partial V_{-\mathbf{q}}}.$$

В модели Изинга уравнение среднего поля имеет вид

$$\bar{V} = \frac{J_0}{2} \operatorname{th} \left(\frac{\bar{V}}{2T} \right).$$

Из условия, что это уравнение имеет кратный корень, определяется температура фазового перехода в теории среднего поля: $T_G^{\text{MF}} = J_0/4$. Метод перевала дает главный член асимптотики при $T \rightarrow 0$ для интегралов по флуктуирующему полю вида (8).

Оптимальное гауссово приближение [4] флуктуирующего поля пригодно в более широком интервале температур. Параметры $\bar{V}$ и $A_{\mathbf{q}}$ оптимального гауссова приближения определяются системой нелинейных уравнений

$$\left\langle \frac{\partial F(\mathbf{V})}{\partial V_{\mathbf{q}}} \right\rangle_G = 0, \quad A_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2} \left\langle \frac{\partial^2 F(\mathbf{V})}{\partial V_{\mathbf{q}} \partial V_{-\mathbf{q}}} \right\rangle_G, \quad (11)$$

где средние вычисляются по формуле

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

В модели Изинга система уравнений (11) может быть записана в виде

$$\bar{V} = -J_0 \left\langle \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j} \right\rangle_G, \quad A_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2N} \left(\frac{1}{J_{\mathbf{q}}} + \left\langle \frac{\partial^2 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^2} \right\rangle_G \right), \quad (12)$$

где средние не зависят от индекса j .

4. ПЕРЕНОРМИРОВАННОЕ ГАУССОВО ПРИБЛИЖЕНИЕ

При высоких температурах необходимо учесть члены четвертого порядка в разложении функции $F(\mathbf{V})$ подобно тому, как это делается в теории фазовых переходов Ландау (см., например, [11], [12]):

$$\begin{aligned} F(\mathbf{V}) \approx F(\tilde{\mathbf{V}}) + \sum_{\mathbf{q}} \frac{\partial F(\tilde{\mathbf{V}})}{\partial V_{\mathbf{q}}} \Delta V_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2!} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \frac{\partial^2 F(\tilde{\mathbf{V}})}{\partial V_{\mathbf{q}} \partial V_{\mathbf{q}'}} \Delta V_{\mathbf{q}} \Delta V_{\mathbf{q}'} + \\ + \frac{1}{4!} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q}, \mathbf{q}'} \frac{\partial^4 F(\tilde{\mathbf{V}})}{\partial V_{\mathbf{p}} \partial V_{\mathbf{p}'} \partial V_{\mathbf{q}} \partial V_{\mathbf{q}'}} \Delta V_{\mathbf{p}} \Delta V_{\mathbf{p}'} \Delta V_{\mathbf{q}} \Delta V_{\mathbf{q}'}, \end{aligned} \quad (13)$$

где $\Delta V_{\mathbf{q}} = V_{\mathbf{q}} - \tilde{V}_{\mathbf{q}}$. Для учета членов четвертого порядка используется гауссово расщепление, которое основано на теореме Вика (см., например, [3]). В наших обозначениях теорема Вика формулируется следующим образом.

ТЕОРЕМА 1. Пусть $\mathbf{V}$ – гауссово флуктуирующее поле с плотностью вероятности

$$p(\mathbf{V}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{l, l'} \Delta V_l A_{ll'} \Delta V_{l'}\right).$$

Тогда

$$\langle \Delta V_{l_1} \dots \Delta V_{l_{2n}} \rangle = \sum_P \langle \Delta V_{l_{P(1)}} \Delta V_{l_{P(2)}} \rangle \dots \langle \Delta V_{l_{P(2n-1)}} \Delta V_{l_{P(2n)}} \rangle, \quad (14)$$

где суммирование ведется по всем разбиениям множества индексов $l_1, \dots, l_{2n}$ на пары.

Гауссово расщепление для четного числа сомножителей определяем по формуле

$$\begin{aligned} \Delta V_{l_1} \dots \Delta V_{l_{2n}} \approx \sum_P \frac{1}{n} (\Delta V_{l_{P(1)}} \Delta V_{l_{P(2)}} \langle \Delta V_{l_{P(3)}} \Delta V_{l_{P(4)}} \rangle \dots \langle \Delta V_{l_{P(2n-1)}} \Delta V_{l_{P(2n)}} \rangle + \dots \\ \dots + \langle \Delta V_{l_{P(1)}} \Delta V_{l_{P(2)}} \rangle \dots \langle \Delta V_{l_{P(2n-3)}} \Delta V_{l_{P(2n-2)}} \rangle \Delta V_{l_{P(2n-1)}} \Delta V_{l_{P(2n)}}). \end{aligned} \quad (15)$$

В силу теоремы Вика (14) средние левой и правой частей соотношения (15) равны.

При помощи расщепления (15) преобразуем члены четвертого порядка в разложении (13):

$$\begin{aligned} \Delta V_{\mathbf{p}} \Delta V_{\mathbf{p}'} \Delta V_{\mathbf{q}} \Delta V_{\mathbf{q}'} \approx \frac{1}{2} (\langle \Delta V_{\mathbf{p}} \Delta V_{\mathbf{p}'} \rangle \Delta V_{\mathbf{q}} \Delta V_{\mathbf{q}'} + \Delta V_{\mathbf{p}} \Delta V_{\mathbf{p}'} \langle \Delta V_{\mathbf{q}} \Delta V_{\mathbf{q}'} \rangle + \\ + \langle \Delta V_{\mathbf{p}} \Delta V_{\mathbf{q}} \rangle \Delta V_{\mathbf{p}'} \Delta V_{\mathbf{q}'} + \Delta V_{\mathbf{p}} \Delta V_{\mathbf{q}} \langle \Delta V_{\mathbf{p}'} \Delta V_{\mathbf{q}'} \rangle + \\ + \langle \Delta V_{\mathbf{p}'} \Delta V_{\mathbf{q}} \rangle \Delta V_{\mathbf{p}} \Delta V_{\mathbf{q}'} + \Delta V_{\mathbf{p}'} \Delta V_{\mathbf{q}} \langle \Delta V_{\mathbf{p}} \Delta V_{\mathbf{q}'} \rangle). \end{aligned} \quad (16)$$

Перенормированное гауссово приближение, параметры которого нам нужно определить, обладает свойством трансляционной инвариантности. Отсюда следует

$$\langle \Delta V_{\mathbf{k}} \Delta V_{\mathbf{k}'} \rangle = \langle \Delta V_{\mathbf{k}} \Delta V_{-\mathbf{k}} \rangle \delta_{\mathbf{k}', -\mathbf{k}}$$

(индекс G, указывающий на гауссово среднее, для краткости опускаем). С учетом того, что $F_0(\mathbf{V})$ – квадратичная функция, поправка за счет членов четвертого порядка задается выражением

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q}, \mathbf{q}'} \frac{\partial^4 F(\tilde{\mathbf{V}})}{\partial V_{\mathbf{p}} \partial V_{\mathbf{p}'} \partial V_{\mathbf{q}} \partial V_{\mathbf{q}'}} \Delta V_{\mathbf{p}} \Delta V_{\mathbf{p}'} \Delta V_{\mathbf{q}} \Delta V_{\mathbf{q}'} &\approx \\ &\approx 3 \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{q}'} \frac{\partial^4 F_1(\tilde{\mathbf{V}})}{\partial V_{\mathbf{p}} \partial V_{-\mathbf{p}} \partial V_{\mathbf{q}} \partial V_{\mathbf{q}'}} \langle \Delta V_{\mathbf{p}} \Delta V_{-\mathbf{p}} \rangle \Delta V_{\mathbf{q}} \Delta V_{\mathbf{q}'} . \end{aligned}$$

В результате разложение (13) записывается в виде

$$\begin{aligned} F(\mathbf{V}) &\approx \sum_{\mathbf{q}} \frac{\partial F(\tilde{\mathbf{V}})}{\partial V_{\mathbf{q}}} \Delta V_{\mathbf{q}} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \left(\frac{\partial^2 F(\tilde{\mathbf{V}})}{\partial V_{\mathbf{q}} \partial V_{\mathbf{q}'}} + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\partial^4 F_1(\tilde{\mathbf{V}})}{\partial V_{\mathbf{p}} \partial V_{-\mathbf{p}} \partial V_{\mathbf{q}} \partial V_{\mathbf{q}'}} \langle \Delta V_{\mathbf{p}} \Delta V_{-\mathbf{p}} \rangle \right) \Delta V_{\mathbf{q}} \Delta V_{\mathbf{q}'} . \end{aligned} \quad (17)$$

Для определения параметров перенормированного гауссова приближения используем уравнения (11). Первое уравнение системы (11) остается без изменений. Для того чтобы записать второе уравнение, преобразуем коэффициент при флуктуации $\Delta V_{\mathbf{q}} \Delta V_{-\mathbf{q}} = |\Delta V_{\mathbf{q}}|^2$. Используя выражение для свободной энергии (7) и формулу для обратного преобразования Фурье (2) компонент поля V_j , находим производную k -го порядка свободной энергии:

$$\frac{\partial^k F_1(\mathbf{V})}{\partial V_{\mathbf{q}_1} \dots \partial V_{\mathbf{q}_k}} = \frac{1}{N^k} \sum_j \frac{\partial^k F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^k} e^{i(\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_k) \mathbf{R}_j} .$$

При $\mathbf{q}_1 = \mathbf{p}$, $\mathbf{q}_2 = -\mathbf{p}$, $\mathbf{q}_3 = \mathbf{q}$ и $\mathbf{q}_4 = -\mathbf{q}$ отсюда следует

$$\frac{\partial^4 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_{\mathbf{p}} \partial V_{-\mathbf{p}} \partial V_{\mathbf{q}} \partial V_{-\mathbf{q}}} = \frac{1}{N^4} \sum_j \frac{\partial^4 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^4} .$$

Подставляя полученное выражение в (17), для уравнений (11) окончательно получаем

$$\bar{V} = -J_0 \left\langle \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j} \right\rangle_{\mathbf{G}} , \quad A_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2N} \left(\frac{1}{J_{\mathbf{q}}} + \left\langle \frac{\partial^2 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^2} \right\rangle_{\mathbf{G}} + \frac{D}{4} \left\langle \frac{\partial^4 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^4} \right\rangle_{\mathbf{G}} \right) , \quad (18)$$

где средние в правой части не зависят от j , а локальная (одноузельная) флуктуация $D = \langle \Delta V_j^2 \rangle$ задается формулой

$$D = \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{q}} \langle |\Delta V_{\mathbf{q}}|^2 \rangle_{\mathbf{G}} . \quad (19)$$

5. ЛОКАЛЬНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Гауссово поле $\mathbf{V}$ полностью определяется средним полем $\bar{V}$ и среднеквадратичными флуктуациями $\langle |\Delta V_{\mathbf{q}}|^2 \rangle_{\text{Г}} = T/2A_{\mathbf{q}}$. Однако расчет $N+1$ величин при каждом T избыточен для вычисления усредненных магнитных характеристик, таких как намагниченность и локальный магнитный момент. Поскольку эти величины зависят только от среднего поля и локальной флуктуации, среднее $\langle \cdot \rangle_{\text{Г}}$ в уравнениях оптимального гауссова приближения (12) заменяется средним с плотностью вероятности

$$p(V_j) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D}} e^{-(V_j - \bar{V})^2/2D}. \quad (20)$$

В результате флуктуирующие поля V_j становятся независимыми и одинаково распределенными, но параметры $\bar{V}$ и D являются функциями всех $\langle |\Delta V_{\mathbf{q}}|^2 \rangle_{\text{Г}}$. С учетом (12) и (19) имеем

$$D = \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}} J_{\mathbf{q}} \left(1 + J_{\mathbf{q}} \left\langle \frac{\partial^2 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^2} \right\rangle \right)^{-1}. \quad (21)$$

Поскольку нас интересует качественный характер температурных зависимостей, разумным упрощением является замена коэффициентов взаимодействия $J_{\mathbf{q}}$ в уравнении (21) средней величиной J (это позволяет избежать суммирования по зоне Бриллюэна). Тогда величины $\bar{V}$ и D определяются системой уравнений

$$\bar{V} = -J_0 \left\langle \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j} \right\rangle, \quad D = JT \left(1 + J \left\langle \frac{\partial^2 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^2} \right\rangle \right)^{-1}, \quad (22)$$

где среднее $\langle \cdot \rangle$ вычисляется с плотностью вероятности (20). Действуя аналогично, получаем второе уравнение в системе уравнений (18) для перенормированного гауссова приближения:

$$D = JT \left[1 + J \left(\left\langle \frac{\partial^2 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^2} \right\rangle + \frac{D}{4} \left\langle \frac{\partial^4 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^4} \right\rangle \right) \right]^{-1}. \quad (23)$$

6. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Уравнения оптимального и перенормированного гауссовых приближений записываем в явном виде, используя выражение для свободной энергии (7). Система уравнений (22) принимает вид

$$\bar{V} = \frac{J_0}{2} \left\langle \text{th} \left(\frac{V}{2T} \right) \right\rangle, \quad D = JT \left(1 - \frac{J}{4T} \left\langle \text{ch}^{-2} \left(\frac{V}{2T} \right) \right\rangle \right)^{-1}, \quad (24)$$

а для уравнения (23) имеем

$$D = JT \left\{ 1 - \frac{J}{4T} \left[\left\langle \text{ch}^{-2} \frac{V}{2T} \right\rangle - \frac{D}{8T^2} \left(1 - 4 \left\langle \text{th}^2 \left(\frac{V}{2T} \right) \right\rangle + 3 \left\langle \text{th}^4 \left(\frac{V}{2T} \right) \right\rangle \right) \right] \right\}^{-1}$$

(здесь и далее индекс j для краткости опускаем).

Рис. 1. Среднее поле $\bar{V}$ и локальная флуктуация D как функции приведенной температуры T/T_C^{MF} в теории среднего поля (а) и в оптимальном гауссовом приближении (б) в случае слабых флуктуаций, $J/J_0 = 0.4$.

Отношение $0 \leq J/J_0 \leq 1$ определяет характер флуктуаций. В случае, когда взаимодействие не зависит от расстояния между спинами: $J_{j-j'} = J_0/N$, по формуле (2) находим $J_{\mathbf{q}} = J_0 \delta_{\mathbf{q}0}$ и $J = J_0/N$ (слабые флуктуации). При $N \rightarrow \infty$ имеем $J/J_0 \rightarrow 0$, и предельный случай $J = 0$ отвечает теории среднего поля. Наоборот, в ситуации, когда взаимодействуют только спины на ближайших узлах, имеем $J_{j-j'} \approx J_0 \delta_{j,j'}$. Тогда по формуле (2) находим $J_{\mathbf{q}} \approx J$ и, следовательно, $J/J_0 \approx 1$ (сильные флуктуации).

Как видно из рис. 1, учет флуктуаций в оптимальном гауссовом приближении приводит к уменьшению температуры фазового перехода по сравнению с теорией среднего поля. При этом качественный характер температурной зависимости $\bar{V}(T)$ в случае слабых флуктуаций $J/J_0 = 0.4$ сохраняется: наблюдается непрерывный фазовый переход второго рода.

Рис. 2. Среднее поле $\bar{V}$ и локальная флуктуация D как функции приведенной температуры T/T_C^{MF} в оптимальном (а) и в перенормированном (б) гауссовых приближениях в случае сильных флуктуаций, $J/J_0 = 0.8$.

В случае сильных флуктуаций $J/J_0 = 0.8$ решение в оптимальном гауссовом приближении становится неединственным (рис. 2а): кроме ферромагнитного и парамагнитного решений при высоких температурах возникает промежуточное решение. В результате с ростом температуры от нуля возникает скачкообразный фазовый переход первого рода из ферромагнитного в парамагнитное состояние²⁾. При обратном уменьшении температуры скачок из парамагнитного в ферромагнитное состояние происходит при меньшем значении температуры, т. е. имеет место температурный гистерезис. В этом температурном интервале в качестве параметра используется локальная флуктуация D , а система уравнений (24) решается относительно пере-

²⁾ Численные результаты, полученные нами в оптимальном гауссовом приближении, уточняют результаты расчетов [7].

менных $\bar{V}$ и T . При каждом D получаем единственное решение $(\bar{V}, T)$ (подробнее о численных методах см. [18]).

Наконец, учет членов четвертого порядка в перенормированном гауссовом приближении устраняет гистерезис в случае сильных флуктуаций $J/J_0 = 0.8$ и дает фазовый переход второго рода (рис. 26).

Качественный анализ уравнений (22) и (23) позволяет объяснить механизм возникновения фазового перехода первого рода в гауссовом приближении и его устранения в перенормированном гауссовом приближении³⁾. Действительно, при наличии однородного магнитного поля h (в энергетических единицах) среднее поле $\bar{V} = J_0 \bar{S}$ ориентировано в направлении, противоположном направлению поля h . Поэтому $\bar{S}$ зависит от $h - \bar{V}(h)$, и уравнение среднего поля принимает вид

$$\bar{V}(h) = J_0 \bar{S}(h - \bar{V}(h)).$$

Дифференцируя по h , для усиленной однородной восприимчивости находим

$$-\left. \frac{d\bar{S}}{dh} \right|_{h=0} = \frac{\chi_0}{1 - J_0 \chi_0}, \quad (25)$$

где

$$\chi_0 = -\left. \frac{\partial \bar{S}}{\partial h} \right|_{h=0} = -\left\langle \frac{\partial^2 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^2} \right\rangle \quad (26)$$

– неусиленная (при постоянном $\bar{V}$) восприимчивость невзаимодействующих спинов. При температуре T_C усиленная восприимчивость (25) обращается в бесконечность, и условие фазового перехода из ферромагнитного в парамагнитное состояние имеет вид

$$1 - J_0 \chi_0 = 0. \quad (27)$$

Для того чтобы определить тип фазового перехода, исследуем производную $d\bar{V}/dD$. Дифференцируя уравнение среднего поля (22) по D , с учетом (20) и (26) получаем

$$\frac{d\bar{V}}{dD} = -\frac{J_0}{2(1 - J_0 \chi_0)} \left\langle \frac{\partial^3 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^3} \right\rangle. \quad (28)$$

Вычисляем среднее третьей производной свободной энергии. Для этого записываем флуктуацию (23) в виде

$$D = \frac{JT}{1 - J(1 + \eta)\chi_0}.$$

Дифференцируя это соотношение по $\bar{V}$ с учетом (20) и (26), находим

$$\frac{dD}{d\bar{V}} = -\frac{J^2(1 + \eta)T}{(1 - J(1 + \eta)\chi_0)^2} \left\langle \frac{\partial^3 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^3} \right\rangle. \quad (29)$$

Приравнявая (28) и обратную величину к (29), окончательно получаем

$$\frac{d\bar{V}}{dD} = -\sqrt{\frac{J_0}{2(1 - J_0 \chi_0)}} \frac{1 - J(1 + \eta)\chi_0}{J\sqrt{(1 + \eta)T}}. \quad (30)$$

³⁾В магнетиках с коллективизированными электронами (см. [19]).

В случае слабых флуктуаций, $J \ll J_0$, в точке фазового перехода (27) имеем

$$\frac{d\bar{V}}{dD} \propto -\sqrt{\frac{J_0}{2(1-J_0\chi_0)}} \rightarrow -\infty.$$

Поэтому $\bar{V}$ непрерывно убывает до нуля при подходе к T_C слева, и возникает фазовый переход второго рода. В случае сильных флуктуаций, $J \approx J_0$, ситуации в гауссовом приближении и перенормированном гауссовом приближении разные. А именно, в гауссовом приближении ($\eta = 0$) выражение (30) в точке фазового перехода принимает вид

$$\frac{d\bar{V}}{dD} \approx -\sqrt{\frac{1-J_0\chi_0}{2J_0T_C}} = 0.$$

В результате среднее поле остается на ненулевом уровне при подходе к T_C слева, а в самой точке $T = T_C$ происходит скачок среднего поля до $\bar{V} = 0$ (фазовый переход первого рода). В перенормированном гауссовом приближении происходит ослабление J за счет членов четвертого порядка ($\eta < 0$) при температурах, близких к T_C . Ослабление флуктуаций приводит к фазовому переходу второго рода.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложен метод перенормировки магнитной восприимчивости в теории спиновых флуктуаций за счет членов четвертого порядка в разложении свободной энергии во флуктуирующем поле. При учете членов четвертого порядка используется расцепление, основанное на теореме Вика. На примере модели Изинга показано, что оптимальное гауссово приближение в системах с локализованными спинами может приводить к скачкообразному фазовому переходу первого рода, как и в магнетиках с коллективизированными электронами [6]. Перенормировка оптимального гауссова приближения дает правильный качественный характер зависимости намагниченности от температуры. Получен непрерывный фазовый переход второго рода, который наблюдается в эксперименте в металлах.

Благодарности. Авторы благодарны Б. И. Резеру за полезное обсуждение результатов и рецензенту за ценные предложения, позволившие улучшить изложение. Работа выполнена в рамках программы Президиума РАН (проект № 12-П-2-1041) и Министерства образования и науки РФ (программа № 1.1016.2011).

Список литературы

- [1] Т. Мория, *Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами*, Мир, М., 1988.
- [2] N. B. Melnikov, B. I. Reser, V. I. Grebennikov, *J. Phys.: Condens. Matter*, **23**:27 (2011), 276003, 11 pp.
- [3] Ж. Зинн-Жюстен, *Континуальный интеграл в квантовой механике*, Физматлит, М., 2006.
- [4] Н. Б. Мельников, Б. И. Резер, *Тр. МИАН*, **271** (2010), 159–180.
- [5] Б. И. Резер, В. И. Гребенников, *ФММ*, **85**:1 (1998), 30–42.
- [6] B. I. Reser, N. B. Melnikov, *J. Phys.: Condens. Matter*, **20**:28 (2008), 285205, 10 pp.

- [7] V. I. Grebennikov, *Solid State Phenom.*, **152–153** (2009), 563–566.
- [8] K. Murata, S. Doniach, *Phys. Rev. Lett.*, **29**:5 (1972), 285–288.
- [9] G. G. Lonzarich, L. Taillefer, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **18**:22 (1985), 4339–4371.
- [10] Y. Takahashi, *J. Phys.: Condens. Matter*, **13**:29 (2001), 6323–6358.
- [11] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Курс теоретической физики*, т. 5: *Статистическая физика. Часть 1*, Физматлит, М., 1995.
- [12] А. З. Паташинский, В. Л. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов*, Наука, М., 1982.
- [13] A. Larkin, A. Varlamov, *Theory of Fluctuations in Superconductors*, Oxford Univ. Press, Oxford, 2009; Перевод 1-го издания: А. И. Ларкин, А. А. Варламов, *Теория флуктуаций в сверхпроводниках*, Добросвет; КДУ, М., 2007.
- [14] J. A. Hertz, *Internat. J. Magnetism*, **1** (1971), 253–306.
- [15] H. Bruus, K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics*, Oxford Univ. Press, Oxford, 2004.
- [16] Д. Н. Зубарев, Ю. А. Церковников, *Тр. МИАН*, **175** (1986), 134–177.
- [17] Н. М. Плакида, *ТМФ*, **168**:3 (2011), 518–535.
- [18] Н. Б. Мельников, Г. В. Парадеженко, *Выч. мет. программирование*, **15**:3 (2014), 461–475.
- [19] N. B. Melnikov, B. I. Reser, V. I. Grebennikov, *J. Phys. A: Math. Theor.*, **43**:19 (2010), 195004, 19 pp.

Поступила в редакцию 8.09.2014,
после доработки 2.01.2015