

УДК 537.611.44

© 1991

ПРИМЕНЕНИЕ РЕНОРМГРУППОВОГО ЭВОЛЮЦИОННОГО УРАВНЕНИЯ К ОПИСАНИЮ ЯДЕРНЫХ СПИНОВЫХ СИСТЕМ

И. А. Меркулов, В. В. Пономаренко

Развивается аналитический метод исследования термодинамического поведения трехмерной спиновой системы с усеченным дипольным взаимодействием в окрестности флуктуационного фазового перехода. Такая система моделирует ядерную спиновую систему твердого тела, охлажденную до сверхнизких температур адиабатическим размагничиванием в сильном поле. Для расчета термодинамических характеристик выводится ренормгрупповое эволюционное уравнение. Строится способ его решения в случае упорядочения продольных компонент (параллельно выделенной оси взаимодействия), позволяющий учитывать взаимодействие поперечных компонент в любом порядке возмущения. Приводится численное решение эволюционного уравнения для системы спинов ядер F^{19} кристалла CaF_2 при положительных температурах. Результаты расчета позволяют уточнить известные ранее из численного моделирования значения термодинамических характеристик фазового перехода, претерпеваемого этой системой.

1. Современная техника ядерного магнитного резонанса дает возможность охладить ядерную спиновую систему (ЯСС) кристалла до столь низких температур, что в ней происходит фазовый переход в магнитоупорядоченное состояние [1]. Для этого обычно используется метод адиабатического размагничивания во вращающейся системе координат [2]. Важной характеристикой спиновой системы в таких экспериментах являются критические температура T_c , энтропия S_c и критическая поляризация в сильном поле P_c , такие, что если $S < S_c$ или $P > P_c$, то после размагничивания в системе возникает спонтанное упорядочение спинов.

Теоретическая оценка этих величин для ЯСС затруднена из-за дальнедействующего характера магнитодипольного спин-спинового взаимодействия. При таком взаимодействии флуктуационная область велика, и при расчетах приходится учитывать большое число членов высоко- и низкотемпературных разложений [3]. Трудоемкими оказались и расчеты для классических аналогов ЯСС методом Монте-Карло [3]. Точность 1 % здесь требует колоссальных затрат машинного времени и объемов памяти. Отмеченных сложностей во многом удастся избежать, если использовать метод ренормгруппового (РГ) эволюционного уравнения [4, 5].

В настоящей работе для описания ЯСС развивается обобщение РГ-эволюционного уравнения, полученного в [5], на системы с многомерными спинами, в частности с трехмерными спинами и усеченным дипольным взаимодействием. Развивается техника приближенного решения уравнения для этого случая при упорядочении спинов вдоль выделенной оси усеченного взаимодействия (упорядочение продольных компонент). Идея состоит в том, чтобы рассматривать взаимодействие поперечных компонент как возмущение, что позволяет свести задачу к решению уравнения, описывающего систему с одномерными спинами.

В рамках развитого приближения проводится расчет классического аналога ЯСС CaF_2 при положительных температурах и оси вращения, совпадающей с одним из ортов кубической решетки ядер F^{19} . Такая спиновая система изучалась в ряде теоретических и экспериментальных ра-

бот. В частности, описание этого фазового перехода методами Монте-Карло приводятся в работах [6-8]. Хотя полученные в них результаты в целом согласуются друг с другом с точностью до погрешности вычислений, предсказываемые значения отдельных величин (прежде всего T_c) различаются значительно. Это связано с большой флуктуационностью системы, на фоне которой проявляются те или иные приближения, сделанные в ходе расчетов.

Поэтому применение метода РГ-эволюционного уравнения ставит перед собой двойную цель: с одной стороны, на основе сравнения с имеющимися данными оценить эффективность данного метода для определения T_c , S_c , P_c , с другой стороны, как мы надеемся, уточнить значения термодинамических величин — прежде всего в критической области.

2. Рассмотрим d -мерную решетку, на N узлах которой расположены n -мерные спины $s = \{s_i\}_{i=1}^N$. Энергия этой системы задается в виде

$$H(s) = (1/2)[s\hat{\Phi}s] - hs, \quad (1)$$

где $\hat{\Phi} = \{\Phi_{ij}^{\alpha\beta}\}_{i,j=1,\dots,N}^{\alpha,\beta=1,\dots,n}$ — матрица взаимодействия, $h = \{h_i\}_{i=1}^N$ — внешнее поле. Термодинамика системы описывается статистической суммой

$$Z(h) = \int \left(\prod_{j=1}^N ds_j A_0(s_j) \right) \exp\{-H(s)\}, \quad (2)$$

где $A_0(s_j)$ — локализованная функция, задающая распределение n -мерных спинов, (Например для модели Изинга $A_0(s) = (\delta(s+1) + \delta(s-1))$, δ — дельта-функция). В (2) энергия измерена в температурных единицах $k_B T$, T — температура спиновой системы. Ниже будем считать, что матрица взаимодействия Φ может быть представлена в виде

$$\Phi_i^\alpha = \Phi_{ij} p^{i\alpha}, \quad (3)$$

где \hat{p} — симметричная матрица $n \times n$, определяющая взаимодействие между компонентами спинов и не зависящая от их расположения в узлах кристаллической решетки; $\hat{\Phi}$ — симметричная матрица $N \times N$, определяющая зависимость взаимодействия от относительного расположения спинов. Такое представление справедливо для спиновой системы ядер в достаточно сильном магнитном поле, спин-спиновые взаимодействия в которой описываются усеченным диполь-дипольным гамильтонианом.

Пространственную часть матрицы взаимодействия удобно представить в виде ряда Фурье

$$\Phi(\mathbf{k}) = \sum_j \Phi_{ij} \exp\{i(\mathbf{k}\mathbf{R}_j)\}. \quad (4)$$

Будем считать, что минимальное собственное число матрицы $\Phi(\mathbf{k}) \hat{p}$ достигается в единственной точке \mathbf{k}_0 , отвечающей ферромагнитному ($\mathbf{k}_0=0$) или антиферромагнитному ($\mathbf{k}_0=0$) упорядочению. Соответствующее собственное число матрицы \hat{p} положительно, а $\Phi(\mathbf{k})$ имеет в этой точке единственный невырожденный минимум. Ниже мы будем считать, что \mathbf{k}_0 расположено в центре зоны Бриллюэна (ЗБ) и сходимость ряда в формуле (4) позволяет дважды дифференцировать $\Phi(\mathbf{k})$ при $\mathbf{k}=\mathbf{k}_0$.

Поскольку выражение (2) для статистической суммы инвариантно относительно сдвига $\hat{\Phi}(\mathbf{k})$ на постоянную величину при соответствующем изменении $A_0(\mathbf{s})$, положим $\max_{\mathbf{k} \in \text{ЗБ}} \Phi(\mathbf{k}) = 0$, а модуль минимального значения $\Phi(\mathbf{k})$ обозначим β_R . С точностью до множителя β_R совпадает с обратной температурой β . Будем также считать, что на систему наложено внешнее поле, изменяющееся по закону $\mathbf{h}_j = \mathbf{h} \exp\{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j\}$.

Принцип вычисления статистической суммы в РГ-подходе основан на замене s_i на $s_k = \sum_{j=1}^N s_j \exp\{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j\} / \sqrt{N}$ и последовательном интегрировании по слоям \mathbf{k} начиная с наиболее удаленных от \mathbf{k}_0 [9]. При этом про-

исходит сокращение объема ЗБ и переход от A_0 и $H(s)$ к новому распределению $A_1(s)$ и взаимодействию $H'(s)$. Рассмотрим этот переход в случае, когда область интегрирования заключена между двумя близко расположенными эквипотенциалами функции $\Phi(\mathbf{k})$, так что для всех k из этой области можно считать $\Phi(\mathbf{k}) = \Phi_0$. Введем параметры $\varepsilon = 4 - d$ и $1/n$, на языке которых известно описание критических свойств спиновых систем [10]. Тогда интегрирование с точностью $O(\varepsilon^2, 1/n, \beta_k^4, \beta_R^2)$ сохраняет информацию как о высоко- и низкотемпературных, так и о критических свойствах исходной системы. Оно приводит к рекуррентной формуле [5]

$$[\exp\{-\Phi_0(s\hat{p}s)/2\} A_1(s)]_{\mathcal{L}}(\sqrt{l} \mathbf{w}) = ([\exp\{-\Phi_0(s\hat{p}s)/2\} A_0(s)]_{\mathcal{L}}(\mathbf{w}))^l, \quad (5)$$

где $[f(s)]_{\mathcal{L}}(\mathbf{w}) = \int ds \exp\{\mathbf{w} : s\} f(s)$ обозначает n -мерное преобразование Лапласа функции $f(s)$; l — относительное уменьшение объема. Вектор \mathbf{w} произвольный, поэтому (5) задает новый закон спинового распределения $A_1(s)$; $H'(s)$ сохраняет вид (1), где \mathbf{h} заменяется на $\mathbf{h}' = \mathbf{h} \sqrt{l}$, а $\hat{\Phi}'$ определяется той же функцией $\Phi(\mathbf{k})$, но заданной на меньшей ЗБ.

Аналогичная формула для РГ-преобразования была предложена в [11, 12], где она использовалась для анализа критических свойств спиновых систем. С другой стороны, формулы такого же вида появляются при описании иерархических моделей Дайсона [13–15].

Последовательное применение рекуррентной формулы для РГ-преобразования (5) с бесконечно малым шагом можно рассматривать как эволюцию спиновой системы. Ее удобно описывать переменной φ , меняющейся от единицы до нуля. Связь φ с изменением масштаба системы дается функцией $\psi(\varphi)$, равной объемному коэффициенту сжатия. Функция $\psi(\varphi)$ вычисляется по известной функции $\hat{\Phi}(\mathbf{k})$ следующим образом. Построим эквипотенциаль $\Phi(\mathbf{k})$ со значением $-\beta_R(1-\varphi)$. Тогда $\psi(\varphi)$ равна отношению объема внутренности этой эквипотенциали ко всему объему ЗБ.

Изменения характеристик системы при эволюции позволяют для определения удельного логарифма статистической суммы написать уравнение

$$u_{\varphi}(\mathbf{h}, \varphi) = -\beta_R/2 [(\partial_{\mathbf{h}} u \cdot \hat{p} \partial_{\mathbf{h}} u) + \psi(\varphi)(\partial_{\mathbf{h}} \hat{p} \partial_{\mathbf{h}}) u(\mathbf{h}, \varphi)]. \quad (6)$$

Начальным условием для него служит удельный логарифм статистической суммы исходной системы с выключенным взаимодействием

$$u(\mathbf{h}, 1) = \ln([A_0(s)]_{\mathcal{L}}(\mathbf{h})), \quad (7)$$

а определяемая в результате решения функция $u(\mathbf{h}, 0)$ совпадает с $\ln Z(\mathbf{h})/N$ ($N \rightarrow \infty$). Дифференцируя уравнение (6) по \mathbf{h} , находим эволюционное уравнение для намагниченности $\mathbf{m}(\mathbf{h}, \varphi)$

$$\mathbf{m}_{\varphi}(\mathbf{h}, \varphi) + \beta_R(\mathbf{m}(\mathbf{h}, \varphi) \hat{p} \partial_{\mathbf{h}}) \mathbf{m}(\mathbf{h}, \varphi) = -\beta_R/2 \psi(\varphi)(\partial_{\mathbf{h}} \hat{p} \partial_{\mathbf{h}}) \mathbf{m}(\mathbf{h}, \varphi) \quad (8)$$

с начальным условием

$$\mathbf{m}(\mathbf{h}, \varphi) = \partial_{\mathbf{h}} \ln([A_0(s)]_{\mathcal{L}}(\mathbf{h})). \quad (9)$$

Решения уравнений (6)–(9) адекватно передают поведение термодинамических функций в пределах заложенной в них точности $O(\varepsilon^2, 1/n, \beta_k^4, \beta_R^2)$. При $\psi(\varphi) \sim \varphi^{d/2}$ они обладают масштабно-инвариантными решениями с каноническими размерностями [5, 16]. Получаемая из них критическая размерность $d_c(n)$ для спиновых систем с симметрией $O(n)$, $n > 1$ равна двум. При больших n можно показать, что уравнения становятся точными и переходят в сферическую модель.

При $d > 2$, $n=1$, пользуясь асимптотическими методами, развитыми в [17], удастся при малых φ построить разрывные решения, удовлетворяющие граничным условиям $m(\mathbf{h}, \varphi) \rightarrow \pm 1$. На основе этих решений в [5]

проведено численное исследование моделей Изинга. Оно показало, что рас-

хождение между полученными решениями и точными значениями термодинамических величин определяется малостью аномальной размерности η и для трехмерных систем ($\eta \approx 0.2$) составляет $< 2\%$. Это дает основание предположить, что применение РГ-эволюционного уравнения к трехмерным спиновым системам с усеченным дипольным взаимодействием, моделирующим ЯСС твердых тел в условиях ЯМР, позволит рассчитать значения их неуниверсальных критических характеристик (термодинамических величин в точке фазового перехода) с такой же точностью.

3. Применим развитый подход к описанию фазового перехода в спиновой системе ядер фтора в кристаллах CaF_2 , исследовавшихся в экспериментах [2]. Упорядочение ядерных спинов в этих работах наблюдалось при адиабатическом размагничивании во вращающейся системе координат, когда спин-спиновые взаимодействия описываются усеченным магнитодипольным гамильтонианом

$$H(s) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} (2s_{xi}s_{xj} - s_{xi}s_{yj} - s_{yi}s_{xj}) I_{ij},$$

$$I_{ij} = (1 - 3 \cos^2 \theta_{ij}) \mu^2 / (2 |\mathbf{r}_{ij}|^3), \quad (10)$$

где θ_{ij} — угол между осью Z (совпадающей с осью вращения); μ — магнитный момент ядра; $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ — радиус-вектор, характеризующий относительное расположение ядер с номерами i и j . Отсюда для матриц $\hat{\rho}$ и $\hat{\Phi}$ имеем

$$P_{xx} = P_{yy} = -P_{zz}/2 = -1, \quad P_{km}, k \neq m = 0, \quad \Phi_{ij} = -\beta I_{ij} + \beta I_M, \quad (11)$$

где β — обратная спиновая температура, βI_M — минимальная Фурье-компонента матрицы $\beta \hat{I}$. Начальное спиновое распределение имеет вид

$$A_0(\mathbf{s}) = \delta(|\mathbf{s}| - 1) \exp\{\beta I_M (s\hat{p}\mathbf{s})/2\}. \quad (12)$$

Симметрия спиновой системы относительно вращения вокруг оси Z позволяет свести уравнение для удельного логарифма статистической суммы к двумерному

$$u_\varphi(h_z, h_\perp, \varphi) = -\beta R/2 [2u_{h_z}^2 - u_{h_\perp}^2 + \psi(\varphi)(2u_{h_z h_z} - u_{h_\perp h_\perp} - u_{h_\perp/h_\perp})]. \quad (13)$$

Здесь h_\perp обозначает компоненту внешнего поля, ортогональную оси Z . Начальное условие получается из (7) с учетом (12)

$$u(h_z, h_\perp, 1) = -\beta I_M/2 +$$

$$+ \ln \left\{ \int_{-1}^1 d \cos \theta \int_0^{2\pi} d\varphi \exp[3\beta I_M \cos^2 \theta/2 + h_z \cos \theta + h_\perp \cos \varphi \sin \theta] \right\}. \quad (14)$$

Обсудим возможность применения уравнений (13), (14) для описания ЯСС CaF_2 . Эта система образуется спинами ядер F^{19} , расположенными в узлах простой кубической решетки. Расстояние между ближайшими узлами будем считать единичным, а температуру мерять в единицах $\mu^2/(k_B a^3) = 0.67 \cdot 10^{-7}$ К, где a — истинная постоянная решетки. Рассмотрим случай, когда решетка ориентирована таким образом, что одно из ребер элементарной кубической ячейки смотрит вдоль оси Z . Тогда значения Фурье-преобразования матрицы I_{ij} могут быть взяты из [16]. Оказывается, максимум функция $I(\mathbf{k})$ достигает при $\mathbf{k}_0 = (\pi, \pi, 0)$, и он равен 2.6767. Максимум невырожден, и функция $I(\mathbf{k})$ ведет себя в его окрестности гладко. Аналогичными свойствами обладает и минимум функции, который достигается при $\mathbf{k} = (0, 0, \pi)$ и равен -4.8392 . Таким образом, как при положительных, так и при отрицательных температурах для описания этой системы можно воспользоваться уравнениями (13), (14). Нас прежде всего интересует случай $T > 0$, для него $\beta_R = 7.521$, $I_M = -4.8437$. Тогда флуктуационность системы велика и при расчетах

с помощью метода Монте-Карло возникают серьезные технические трудности [6, 8].

Действительно, оценивая флуктуационную область с помощью критерия Гинзбурга [17], находим, что при $\beta > 0$ флуктуации намагниченности существенны, если $|\beta - \beta_{cw}| < 1.38$, а обратная критическая температура $\beta_{cw} = 0.56$. Для сравнения приведем аналогичную оценку в случае $\beta < 0$: $|\beta - \beta_{cw}| < 0.07$, где $\beta_{cw} = 0.31$. Из этих результатов следует, что при отрицательных температурах флуктуационная область мала по сравнению с β_{cw} и для оценки неуниверсальных критических характеристик можно пользоваться моделью среднего поля, а при положительных температурах не только приближение Вейсса, но и использование ограниченного числа высокотемпературных поправок к нему для учета флуктуаций не смогут привести к разумному результату. Этот вывод согласуется с работами [8, 18].

4. Применим развитый подход к расчету термодинамических характеристик спиновой системы ядер фтора в кристалле CaF_2 . Уравнение (13) является дифференциальным уравнением в частных производных второго порядка относительно двух переменных h_x и h_z , что усложняет его решение по сравнению с расчетами для модели Изинга [5]. Этих трудностей можно избежать, воспользовавшись известными физическими свойствами исследуемой спиновой системы.

Дело в том, что спиновые системы с усеченным магнитодипольным взаимодействием имеют такое же критическое поведение, что и модели Изинга [3, 4]. Это значит, что по мере нарастания флуктуаций в них происходит скоррелированное выстраивание спинов вдоль оси Z . Взаимодействие между возникающими спиновыми кластерами обусловлено в основном продольными составляющими спинов, а взаимодействие поперечных составляющих s приводит лишь к усилению флуктуаций спинов внутри кластеров. Поэтому, несмотря на небольшую разницу между продольным и поперечным взаимодействиями, последнее играет второстепенную роль и может быть учтено как возмущение. Реализация такого представления ведет к замене двумерной системы на одномерную.

Тогда, считая, что в нулевом приближении матрица \hat{p} имеет единственную отличную от нуля компоненту $p_{zz}^{(0)} = 2$, из (13), (14) имеем

$$u_\varphi(h_x, \varphi) = -\beta_R/2 [u_{h_x}^2 + \psi(\varphi) u_{h_x h_x}], \quad (15)$$

$$u(h_x, 1) = \ln(2\pi) + \ln \left[\int_{-1}^1 dx \exp(\beta I_M x^2 + h_x x) \right]. \quad (16)$$

Эти уравнения описывают систему одномерных спинов, значения которых распределены по закону $\exp(\beta I_M s^2) \bar{A}_0(s)$, где $\bar{A}_0(s)$ — функция, равная единице на отрезке $[-1, 1]$ и нулю вне его. Взаимодействие между спинами дается продольной частью исходного взаимодействия.

Учет поперечного взаимодействия ($I_{1j} = -I_{ij}$) при $h_z = 0$ осуществим путем перехода к такому новому начальному распределению продольных компонент спинов, которое ведет к тому же изменению термодинамических величин, что и включение \hat{I}_1 . Для этого воспользуемся стандартным диаграммным разложением статистической суммы [19]. Уравнения (15), (16) позволяют приближенно суммировать часть этого разложения, содержащую только продольное взаимодействие. При суммировании этой части диаграмм перейдем к новым вершинам, включив в них фрагменты диаграмм, содержащие поперечное взаимодействие. Поскольку производящая вершина исходного ряда совпадает с $\ln \{z_0(h)\}$, где $z_0(h)$ — статистическая сумма свободного спина во внешнем поле ($h = h_x$)

$$z_0(h) = 2\pi \int ds \exp\{hs\} \bar{A}_0(s) = 2\pi \int_{-1}^1 ds \exp\{hs\}, \quad (17)$$

перенормировку вершин можно трактовать как переход к новому распределению \bar{A}'_0 .

Определим $\bar{A}'_0(s)$ таким образом, чтобы учесть основную поправку к $\ln \{z_0(h)\}$ в высоко- и низкотемпературных пределах. Для этого найдем вклад от \hat{I}_\perp в намагниченность i -го узла с точностью до β^2 :

$$\Delta m(h_i) = \beta^2 \sum_j I_{\perp i j}^2 \sigma_{3\perp}(h_i) \sigma_{2\perp}(h_j), \quad (18)$$

где $\sigma_{2\perp}(x) = 1/2 (1 - \partial_x^2 \ln \{z_0(x)\} - [\partial_x \ln \{z_0(x)\}]^2)$, $\sigma_{3\perp}(x) = \partial_x \sigma_{2\perp}(x)$. Такое изменение намагниченности можно учесть, заменив $z_0(x)$ на $z'_0(x)$, так чтобы

$$m'_0(x) = \partial_x \ln \{z'_0(x)\} = \partial_x \ln \{z_0(x)\} + \Delta m(x). \quad (19)$$

Отсюда получаем уравнение на $z'_0(x)$ и $\bar{A}'_0(s)$

$$\int ds \exp(hs) \bar{A}'_0(s) = z'_0(h) = z_0(h) \exp\{g(h) - C\}, \quad (20)$$

где

$$g(h) = \beta^2 \sigma_{2\perp}'(h) \sum_j \sigma_{2\perp}(h_j) I_{\perp i j}^2, \quad (21)$$

а константа C определяется таким образом, чтобы $\ln \{z'_0(h)\}$ правильно учитывал вклад от \hat{I}_\perp в свободную энергию (с точностью до β^2)

$$C = (\beta^2/2) \sigma_{2\perp}(h_i) \sum_j \sigma_{2\perp}(h_j) I_{\perp i j}^2. \quad (22)$$

Для того чтобы используемое приближение было применимо и при низких температурах, поле h_j , от которого зависят $g(h)$ и C , нужно приравнять макроскопическому локальному полю на j -м узле $h_j = \exp\{i(\mathbf{k}_0 \mathbf{R}_j)\} h_L$, где h_L определяется самосогласованно по внешнему полю h и намагниченности, возникшей в системе

$$h_L = h + 2\beta I(k_0) m(h, 0). \quad (23)$$

Функция $g(h)$ не зависит от номера узла j , поскольку $|h_j|$ одинаков для всех j .

Более полный учет поперечного взаимодействия также можно провести на основе (19), если вычислить фигурирующую в ней функцию с большей точностью. Это можно сделать на основе сравнительного анализа диаграммных разложений для статистической суммы в случаях включенного и выключенного поперечного взаимодействия.

Мы не будем его приводить здесь, поскольку в дальнейшем ограничимся приближением (21), (22), однако сформулируем некоторые результаты, следующие из этого анализа и определяющие точность используемого приближения.

Выражение для $\ln \{z'_0\}$ можно представить в виде ряда однопериодических диаграмм с линиями, соответствующими поперечному и продольному взаимодействиям. Выше точки фазового перехода ($T > T_c$), когда $h_L = 0$, этот ряд определяет симметричную по h функцию и может быть с любой точностью по степеням β описан соответствующим распределением $\bar{A}'_0(s)$ посредством (20).

Если представить

$$\bar{A}'_0(s) = D_0 \exp\left\{-\frac{\beta^2}{2!} D_2 s^2 + \frac{\beta^4}{4!} D_4 s^4 + \dots\right\} \quad (24)$$

и задать D_0 и D_2 согласно (21)

$$D_0 = 2\pi \exp\{D_2/2\}, \quad D_2 = \sigma_{2\perp}(h_L) \sum_j I_{\perp i j}^2 = \frac{12.685}{4} \sigma_{2\perp}(h_L), \quad (25)$$

по поправке в двух следующих порядках по β меняя значение эффективного спинового распределения $\bar{A}'_0(s) \exp\{-|\beta I_M|s^2\}$, используемого при определении начального условия (16) менее чем на 5 %.

В общем случае $h_i \neq 0$ также можно ввести функцию $\ln z'_0(h)$, но она, а следовательно, и $\bar{A}'_0(s)$ вместе с начальным условием к (15) перестает быть симметричной функцией внешнего поля h . Однако в получаемом с таким начальным условием решении симметрия от внешнего поля сохраняется в виду условия самосогласования (23). Учет несимметричных поправок не меняет указанной выше точности приближения (24).

Таким образом, используя начальное условие (16) с исправленным спиновым распределением (24), (25) для уравнения (15) (и соответствующее начальное условие для уравнения на намагниченность) с последующим самосогласованием (23), мы можем определить значения термодинамических величин при включенном поперечном взаимодействии с точностью в 5 % от их значений.

5. Найденные решения эволюционных уравнений приведены на рис. 1, 2. Расхождения между кривыми 1 и 2 (рис. 2), а также между значениями

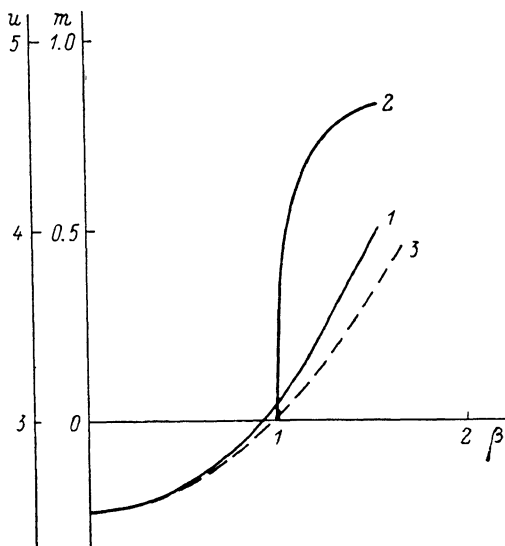


Рис. 1. Зависимость удельного логарифма статистической суммы u намагниченности подрешеток m ядер F кристалла CaF_2 от обратной температуры β .

1 — решение эволюционных уравнений (15), (24), (25) для $u(\beta)$; 2 — $m(\beta)$; 3 — высокотемпературное приближение для $u(\beta)$.

обратных критических температур, соответствующих этим кривым $\beta_c = 0.93$ и 0.99 , согласуются с исходным качественным представлением о роли поперечного взаимодействия. Так, учет его оказался существенным только для высокотемпературной области, пока выстраивание спинов системы вдоль оси Z невелико, а начиная с $\beta > 0.9$ он меняет величину энергии незначительно.

Исходя из приведенных результатов вычислений определяем неуниверсальные критические характеристики: критические энергии $|E(\beta_c)| = 1.33 + 0.03$; энтропию (в постоянных Больцмана) $S_c = u(\beta_c) - \beta_c |E(\beta_c)| = 1.75$; начальную поляризацию в сильном поле при адиабатическом размагничивании $P_c = 0.67$, которая связана с S_c системой уравнений $S_c = -\ln\{4\pi \text{sh}(x)/x\} - xP_c$, $P_c = \text{cth}(x) - 1/x$.

Сравним результаты решения эволюционного уравнения с данными численного моделирования. Для этого мы можем воспользоваться результатами трех работ. Значение $\beta_c = 0.555$ [6], вероятно, ошибочно из-за обрезания дипольного взаимодействия по границе ячейки Монте-Карло. Величины энергий [7] неплохо согласуются с результатами [8]. Поэтому на рис. 2 приведены только последние. Однако, как ни странно, разница в полученных в них значениях обратных критических температур значительна (0.7 и 1.1 соответственно). Возможно, это объясняется использованием в [7] при построении марковской цепи форсированной процедуры, которая несколько обрезает флуктуации. Расчет [8] представляется наиболее последовательным. Найденное в результате его значение β_c по оценкам авторов этой работы завышено на 0.05—0.10 из-за малости использованной ячейки Монте-Карло. Это в точности согласуется с нашими результатами. Из рис. 2 видно, что найденная в этой работе зависимость E от β

тоже в пределах погрешности совпадает с результатами приближенного решения эволюционного уравнения.

Найденную величину критической поляризации в сильном поле интересно сравнить со значением поляризации P_x , из которой система адиабатически размагничивается в точку максимума поперечной восприимчивости, поскольку иногда экспериментаторы используют ее в качестве характеристики фазового перехода. Пользуясь результатами расчета поперечной восприимчивости из [8], находим $P_x = 0.46$, что значительно меньше P_c . Поэтому к способу обнаружения фазового перехода в ЯСС по излому поперечной восприимчивости следует относиться с некоторой осторожностью.

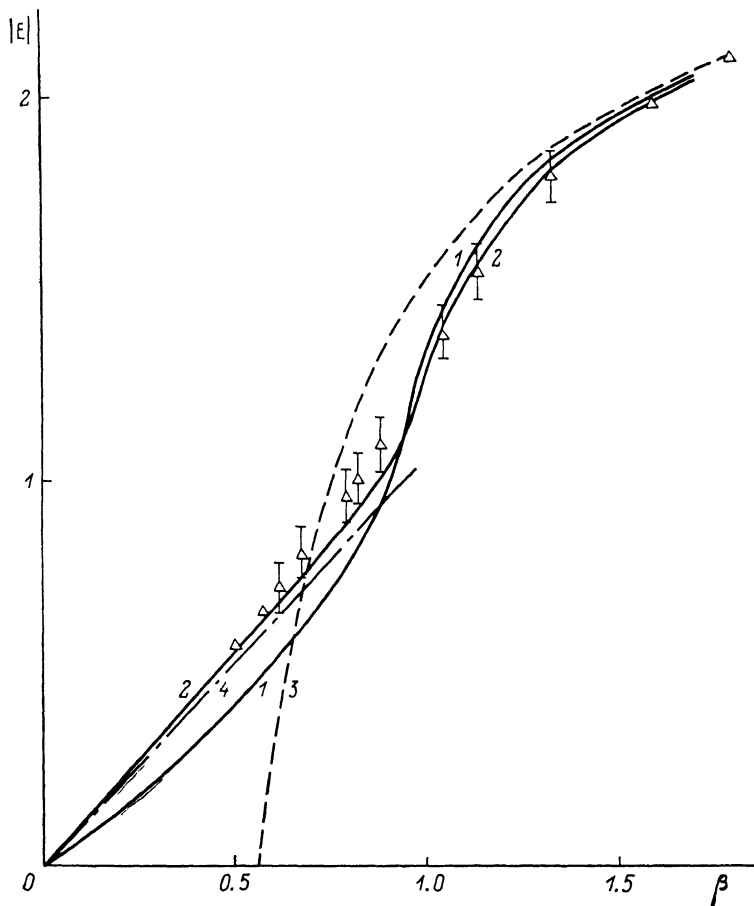


Рис. 2. Зависимость энергии E от обратной температуры β .

1 — решение эволюционных уравнений (15), (16) без учета взаимодействия поперечных компонент спинов; 2 — решение (15), (24), (25); 3 — приближение среднего поля; 4 — высокотемпературное приближение; точки — результаты численного моделирования [8].

Таким образом, проведенные вычисления демонстрируют эффективность использования РГ-эволюционного уравнения (6)–(9) для определения критических значений термодинамических величин классических спиновых систем, моделирующих ЯСС кристаллов.

Авторы благодарны Б. П. Захарчене за интерес к исследованиям, С. И. Васильеву и В. Г. Флейшеру за полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] Абрагам А., Гольдман М. Ядерный магнетизм: порядок и беспорядок. М., 1984. 360 с.
- [2] Jacquinot J. F., Chapellier M., Goldman M. // Phys. Lett. 1984. V. A48. N 5. P. 303–308.

- [3] Mouritsen O. G. Computer studies of phase transitions and critical phenomena. Berlin, 1984. P. 103.
- [4] Вильсон К., Когут Дж. Ренормализационная группа и ϵ -разложение. М., 1975. 163 с.
- [5] Пономаренко В. В. // Вестник ЛГУ, сер. 4. 1989. № 1. С. 63—66.
- [6] Mouritsen O. G., Knak Jensen S. J. // Phys. Rev. B. 1978. V. 18. N 1. P. 465—479.
- [7] Васильев С. И., Меркулов И. А., Папава Ю. И. // Тр. ТГУ (Тбилиси). Физика. 1986. Т. 22. С. 48—58.
- [8] Фаворский И. А., Громова Н. Б. // ФТТ. 1979. Т. 21. № 11. С. 3365—3369.
- [9] Wilson K. G. // Phys. Rev. B. 1971. V. 4. N 9. P. 3174—3183.
- [10] Bresin E., Le Guillou J. C., Zin-Justin J. // Phase transition and critical phenomena // Ed. C. Domb, M. S. Green. London, 1971. V. 6. P. 127—249.
- [11] Юхновский И. П. Фазовые переходы второго рода. Киев, 1985. 214 с.
- [12] Юхновский И. П., Рудавской Ю. К., Головач Ю. В. // Термодинамика необратимых процессов. М., 1987. С. 49—55.
- [13] Dyson F. J. // Comm. Math. Phys. 1969. V. 12. N 1. P. 91—101.
- [14] Bleher P. M., Sinai Ja. G. // Comm. Math. Phys. 1975. V. 45. N 3. P. 247—263.
- [15] Синай Я. Г. Теория фазовых переходов. М., 1980. 133 с.
- [16] Иванченко Ю. М., Лисянский А. Н., Филиппов А. Э. Флуктуационные эффекты в системах с конкурирующими взаимодействиями. Киев, 1989. 265 с.
- [17] Ильин А. М. Согласование асимптотических разложений решений краевых задач. М., 1989. 258 с.
- [18] Васильев С. И., Меркулов И. А., Пономаренко В. В. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 10. С. 2970—2977.
- [19] Васильев А. Н. Функциональные методы в квантовой теории поля и статистике. Л., 1976. 294 с.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
12 июля 1990 г.