

УДК 517.97:51-72:519.677:537.9

ПЕРЕНОРМИРОВАННАЯ ГАУССОВА АППРОКСИМАЦИЯ В ТЕОРИИ СПИНОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ

Н. Б. Мельников¹, Г. В. Парадеженко²

Влияние спиновых флуктуаций на магнитный фазовый переход исследуется при помощи метода функционального интегрирования. Взаимодействие спиновых моментов при конечных температурах заменяется взаимодействием со случайным (флуктуирующим) полем. Расчет магнитных характеристик сводится к интегрированию по конфигурациям флуктуирующего поля в гауссовом приближении. Характерной особенностью гауссова приближения является скачкообразный фазовый переход первого рода. В настоящей работе предложен метод перенормировки гауссовой аппроксимации за счет членов четвертого порядка в разложении свободной энергии во флуктуирующем поле. На примере модели Изинга показано, что перенормировка приводит к непрерывному фазовому переходу второго рода, который наблюдается на эксперименте.

Ключевые слова: метод функционального интегрирования, преобразование Стратоновича–Хаббарда, гауссова аппроксимация, перенормировка, метод доверительных областей.

1. Введение. Теория спиновых флуктуаций (ТСФ) описывает магнитные свойства металлов при конечных температурах (см., напр., [1, 2]). В основе теории лежит метод функционального интегрирования, который заменяет парное взаимодействие спинов на взаимодействие со случайным (флуктуирующим) полем. В результате вычисление физических величин проводится в два этапа. Сначала вычисляется среднее по ансамблю для системы без взаимодействия при фиксированной конфигурации поля, а затем проводится усреднение по всем возможным конфигурациям поля.

На практике могут быть вычислены лишь гауссовы интегралы. Простейшим гауссовым приближением является метод перевала (см., напр., [3]), который заменяет флуктуирующее поле его средним значением. Однако метод перевала пригоден 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 оптимальная гауссова аппроксимация приводит к скачкообразному изменению температурной зависимости магнитных характеристик [5–7] вопреки эксперименту. Подобный фазовый переход первого рода наблюдался также в ряде работ (см., напр., [1, 8–10]), которые используют феноменологические теории типа теории Гинзбурга–Ландау (см., напр., [11–13]).

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

Применимость метода иллюстрируются на модели Изинга, в которой оптимальная гауссова аппроксимация имеет наиболее простой аналитический вид. (Спиновые флуктуации для магнетиков с локализованными спинами произвольной величины рассматриваются в работе [7].) Получена система уравнений, которая описывает параметры перенормированной гауссовой аппроксимации: среднее поле и среднеквадратичное отклонение. Для решения системы нелинейных уравнений используется метод доверительных областей, который обладает конструктивными преимуществами по сравнению с квазиньютоновскими методами (см., напр., [19–21]). Показано, что в окрестности точки фазового перехода система уравнений становится вырожденной. В этой связи для построения температурной зависимости намагниченности при

¹ Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, факультет вычислительной математики и кибернетики, Ленинские горы, д. 1, стр. 52, 119991, Москва; доцент, e-mail: melnikov@cs.msu.ru

² Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, факультет вычислительной математики и кибернетики, Ленинские горы, д. 1, стр. 52, 119991, Москва; студент, e-mail: par.george.v@hotmail.com

высоких температурах используется метод замены параметра, который позволяет добиться большей точности по сравнению с экстраполяцией.

Изложение построено следующим образом. В разделах 2 и 3 кратко изложены метод функционального интеграла и оптимальная гауссова аппроксимация применительно к модели Изинга (подробнее см. [18]). В разделе 4 выводится формула для гауссова расщепления. С помощью гауссова расщепления получен явный вид уравнений перенормированной гауссовой аппроксимации. В разделе 5 изложено локальное приближение [2, 5] применительно к модели Изинга. В разделе 6 описана схема метода доверительных областей решения системы нелинейных уравнений общего вида. В разделе 7 показано, что система уравнений локальной аппроксимации вырождается в точке фазового перехода, и изложен метод смены параметра. В разделе 8 обсуждаются результаты расчетов. Раздел 9 суммирует полученные результаты. В приложении выведены соотношения между средними и корреляторами спина и поля в модели Изинга. (Для модели Хаббарда эти соотношения были получены в работе [2].)

2. Теория спиновых флуктуаций в модели Изинга. Рассматривается система взаимодействующих спиновых моментов, принимающих два значения $S_j = \pm 1/2$, на конечной трехмерной кристаллической решетке с узлами $\mathbf{R}_j = j_1 \mathbf{a}_1 + j_2 \mathbf{a}_2 + j_3 \mathbf{a}_3$, где $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ — основные векторы решетки, а j_1, j_2, j_3 — целые числа. Гамильтониан модели Изинга имеет вид

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

где $J_{jj'} = J_{j-j'}$ — коэффициенты взаимодействия. Предполагается, что на решетке заданы периодические граничные условия. Тогда для любой функции f_j , периодической на решетке, дискретное преобразование Фурье определяется по формулам

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

где волновой вектор \mathbf{q} принимает значения в зоне Бриллюэна, а N — число узлов кристаллической решетки. (Как принято в физике, функцию и ее фурье-образ мы обозначаем одной и той же буквой и различаем аргументами. Аналогично любую физическую величину обозначаем одной и той же буквой вне зависимости от числа аргументов.) Гамильтониан (1) в фурье-представлении принимает вид

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

Преобразование Стратоновича–Хаббарда заменяет парное взаимодействие спинов взаимодействием спинов с флуктуирующим полем. В результате статистическая сумма Z системы взаимодействующих спинов 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 $\mathbf{V} = (V_{\mathbf{q}_1}, \dots, V_{\mathbf{q}_N})$ — флуктуирующее поле,

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

— энергия поля,

$$F_1(\mathbf{V}) = -T \ln \text{Tr} e^{-H_1(\mathbf{V})/T} \quad (4)$$

— свободная энергия системы *невзаимодействующих* спинов в поле \mathbf{V} и

$$H_1(\mathbf{V}) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}} V_{-\mathbf{q}} \quad (5)$$

— гамильтониан этой системы. Явное выражение для свободной энергии имеет вид

$$F_1(\mathbf{V}) = -T \sum_j \ln \left(2 \cosh \left(\frac{V_j}{2T} \right) \right). \quad (6)$$

Теория флуктуирующего поля позволяет вычислять произвольную характеристику системы (1), которая определяется функцией f спиновой конфигурации $\mathbf{S} = (S_1, \dots, S_N)$. Наблюдаемая функция $\langle f \rangle \equiv \text{Tr} (f e^{-H/T}) / \text{Tr} e^{-H/T}$ вычисляется по формуле

$$\langle f \rangle = \int f(\mathbf{V}) p(\mathbf{V}) d\mathbf{V}. \tag{7}$$

Здесь квантовомеханическое 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 имеет вид

$$p(\mathbf{V}) \propto \exp(-F(\mathbf{V})/T), \quad F(\mathbf{V}) = F_0(\mathbf{V}) + F_1(\mathbf{V}) \tag{8}$$

(символ \propto обозначает пропорциональность).

Одним из главных преимуществ метода флуктуирующего поля является возможность описывать средний спиновый момент и спиновые корреляторы в терминах среднего и корреляторов поля. В силу пространственной однородности системы, средний спиновый момент $\langle S_j \rangle \equiv Z^{-1} \text{Tr} (S_j e^{-H/T})$ и среднее поле

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

не зависят от узла решетки: $\langle S_j \rangle = \bar{S}$ и $\langle V_j \rangle = \bar{V}$ и связаны соотношением $\bar{V} = J_0 \bar{S}$, где J_0 — нулевой коэффициент Фурье. Корреляторы спина и поля связаны соотношением (подробнее см. приложение)

$$\langle |\Delta S_q|^2 \rangle = \frac{1}{J_q^2} \langle |\Delta V_q|^2 \rangle - \frac{NT}{J_q},$$

где $\Delta S_q = S_q - \langle S_q \rangle$ и $\Delta V_q = V_q - \langle V_q \rangle$.

Практическое вычисление статсуммы (3) и интегралов вида (7) требует приближения функции $F(\mathbf{V})$ квадратичной функцией.

3. Оптимальная гауссова аппроксимация. Гауссова аппроксимация исходного флуктуирующего поля \mathbf{V} с плотностью вероятности (8) состоит в следующем. Функция $F(\mathbf{V})$ заменяется трансляционно-инвариантной квадратичной формой

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

которая задает гауссово флуктуирующее поле с плотностью вероятности

$$p_G(\mathbf{V}) = Z_G^{-1} \exp(-F_G(\mathbf{V})/T), \tag{9}$$

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

Простейшая гауссова аппроксимация флуктуирующего поля \mathbf{V} получается с помощью метода перевала. Среднее поле \bar{V} определяется из условия локального минимума:

$$\frac{\partial F(\bar{V})}{\partial V_j} = 0, \tag{10}$$

а величина A_q задается второй производной функции $F(\mathbf{V})$ в среднем поле:

$$A_q = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 F(\bar{V})}{\partial V_q \partial V_{-q}}.$$

В модели Изинга уравнение среднего поля (10) имеет вид

$$\bar{V} = \frac{J_0}{2} \tanh\left(\frac{\bar{V}}{2T}\right). \tag{11}$$

При малых T это уравнение имеет устойчивое ненулевое решение $\bar{V} > 0$, которое отвечает ферромагнитному состоянию. Нулевое (парамагнитное) решение существует всегда, и при больших T оно устойчиво.

В точке фазового перехода из ферро- в парамагнитное состояние происходит слияние двух решений уравнения (11). Иными словами, при температуре фазового перехода T_C в точке $\bar{V} = 0$ происходит касание функций, стоящих в левой и правой частях уравнения (11). Из этого условия определяется температура фазового перехода в теории среднего поля: $T_C^{MF} = J_0/4$. Метод перевала дает главный член асимптотики при $T \rightarrow 0$ для интегралов по флуктуирующему полю вида (7).

Оптимальная гауссова аппроксимация [4] флуктуирующего поля пригодна в более широком интервале температур. Параметры \bar{V} и A_q оптимальной гауссовой аппроксимации определяются из системы нелинейных уравнений

$$\left\langle \frac{\partial F(\mathbf{V})}{\partial V_q} \right\rangle_G = 0, \quad A_q = \frac{1}{2} \left\langle \frac{\partial^2 F(\mathbf{V})}{\partial V_q \partial V_{-q}} \right\rangle_G, \quad (12)$$

где среднее вычисляется по формуле

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

Система оптимальной гауссовой аппроксимации (12) может быть записана в виде

$$\bar{V} = -J_0 \left\langle \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j} \right\rangle_G, \quad (13)$$

$$A_q = \frac{1}{2N} \left(\frac{1}{J_q} + \left\langle \frac{\partial^2 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^2} \right\rangle_G \right), \quad (14)$$

где средние не зависят от индекса j . Параметры \bar{V} и A_q вычисляются самосогласованно из системы (13) и (14) при каждом значении температуры T .

4. Перенормированная гауссова аппроксимация. 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., напр., [11, 12]):

$$\begin{aligned} F(\mathbf{V}) \approx F(\tilde{\mathbf{V}}) + \sum_q \frac{\partial F(\tilde{\mathbf{V}})}{\partial V_q} \Delta V_q + \frac{1}{2!} \sum_{qq'} \frac{\partial^2 F(\tilde{\mathbf{V}})}{\partial V_q \partial V_{q'}} \Delta V_q \Delta V_{q'} + \\ + \frac{1}{4!} \sum_{pp'qq'} \frac{\partial^4 F(\tilde{\mathbf{V}})}{\partial V_p \partial V_{p'} \partial V_q \partial V_{q'}} \Delta V_p \Delta V_{p'} \Delta V_q \Delta V_{q'}, \end{aligned} \quad (15)$$

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

Теорема. Пусть \mathbf{V} — гауссово флуктуирующее поле, которое имеет плотность вероятности $p(\mathbf{V}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{ll'} \Delta V_l A_{ll'} \Delta V_{l'}\right)$. Тогда

$$\langle \Delta V_{l_1} \dots \Delta V_{l_{2n}} \rangle = \sum_P \langle \Delta V_{l_{P(1)}} \Delta V_{l_{P(2)}} \rangle \dots \langle \Delta V_{l_{P(2n-1)}} \Delta V_{l_{P(2n)}} \rangle, \quad (16)$$

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

Гауссово расщепление для четного числа сомножителей определяем следующим образом:

$$\begin{aligned} \Delta V_{l_1} \dots \Delta V_{l_{2n}} \approx \sum_P \frac{1}{n} \left(\Delta V_{l_{P(1)}} \Delta V_{l_{P(2)}} \langle \Delta V_{l_{P(3)}} \Delta V_{l_{P(4)}} \rangle \dots \langle \Delta V_{l_{P(2n-1)}} \Delta V_{l_{P(2n)}} \rangle \dots \right. \\ \left. \dots + \langle \Delta V_{l_{P(1)}} \Delta V_{l_{P(2)}} \rangle \dots \langle \Delta V_{l_{P(2n-3)}} \Delta V_{l_{P(2n-2)}} \rangle \Delta V_{l_{P(2n-1)}} \Delta V_{l_{P(2n)}} \right). \end{aligned} \quad (17)$$

В силу теоремы Вика средние от левой и правой частей формулы (17) равны.

При помощи расщепления (17) преобразуем члены четвертого порядка в разложении (15):

$$\begin{aligned} \Delta V_p \Delta V_{p'} \Delta V_q \Delta V_{q'} \approx \frac{1}{2} \left(\langle \Delta V_p \Delta V_{p'} \rangle \Delta V_q \Delta V_{q'} + \Delta V_p \Delta V_{p'} \langle \Delta V_q \Delta V_{q'} \rangle + \right. \\ \left. + \langle \Delta V_p \Delta V_q \rangle \Delta V_{p'} \Delta V_{q'} + \Delta V_p \Delta V_q \langle \Delta V_{p'} \Delta V_{q'} \rangle + \right. \\ \left. + \langle \Delta V_{p'} \Delta V_q \rangle \Delta V_p \Delta V_{q'} + \Delta V_{p'} \Delta V_q \langle \Delta V_p \Delta V_{q'} \rangle \right). \end{aligned} \quad (18)$$

Перенормированная гауссова аппроксимация, параметры которой нам нужно определить, обладает свойством трансляционной инвариантности. Отсюда следует соотношение

$$\langle \Delta V_k \Delta V_{k'} \rangle = \langle \Delta V_k \Delta V_{-k} \rangle \delta_{k', -k} \quad (19)$$

(индекс G, указывающий на гауссово среднее, для краткости опускаем). Кроме того, $F_0(\mathbf{V})$ — квадратичная функция, поэтому

$$\frac{\partial^4 F(\mathbf{V})}{\partial V_p \partial V_{p'} \partial V_q \partial V_{q'}} = \frac{\partial^4 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_p \partial V_{p'} \partial V_q \partial V_{q'}}. \quad (20)$$

С учетом (18)–(20) поправка за счет членов четвертого порядка принимает вид

$$\sum_{pp'qq'} \frac{\partial^4 F(\tilde{\mathbf{V}})}{\partial V_p \partial V_{p'} \partial V_q \partial V_{q'}} \Delta V_p \Delta V_{p'} \Delta V_q \Delta V_{q'} \approx 3 \sum_{pp'qq'} \frac{\partial^4 F_1(\tilde{\mathbf{V}})}{\partial V_p \partial V_{-p} \partial V_q \partial V_{q'}} \langle \Delta V_p \Delta V_{-p} \rangle \Delta V_q \Delta V_{q'}.$$

В результате разложение (15) записывается в виде (несущественный свободный член $F(\tilde{\mathbf{V}})$ опускаем)

$$F(\mathbf{V}) \approx \sum_q \frac{\partial F(\tilde{\mathbf{V}})}{\partial V_q} \Delta V_q + \frac{1}{2} \sum_{qq'} \frac{\partial^2 F(\tilde{\mathbf{V}})}{\partial V_q \partial V_{q'}} \Delta V_q \Delta V_{q'} + \frac{1}{8} \sum_{pp'qq'} \frac{\partial^4 F_1(\tilde{\mathbf{V}})}{\partial V_p \partial V_{-p} \partial V_q \partial V_{q'}} \langle \Delta V_p \Delta V_{-p} \rangle \Delta V_q \Delta V_{q'}.$$

Сгруппировав второе и третье слагаемые, получаем квадратичную форму

$$F(\mathbf{V}) \approx \sum_q \frac{\partial F(\tilde{\mathbf{V}})}{\partial V_q} \Delta V_q + \frac{1}{2} \sum_{qq'} \left(\frac{\partial^2 F(\tilde{\mathbf{V}})}{\partial V_q \partial V_{q'}} + \frac{1}{4} \sum_p \frac{\partial^4 F_1(\tilde{\mathbf{V}})}{\partial V_p \partial V_{-p} \partial V_q \partial V_{q'}} \langle \Delta V_p \Delta V_{-p} \rangle \right) \Delta V_q \Delta V_{q'}. \quad (21)$$

Для определения параметров перенормированной гауссовой аппроксимации используем формулы (12). Первое уравнение системы (12) остается без изменений. Для того, чтобы записать второе уравнение в (12), преобразуем коэффициент при флуктуации $\Delta V_q \Delta V_{-q} = |\Delta V_q|^2$. Используя выражение для свободной энергии (6) и формулу для обратного преобразования Фурье (2) компонент поля V_j , находим производную k -го порядка свободной энергии: $\frac{\partial^k F_1(\mathbf{V})}{\partial V_{q_1} \dots \partial V_{q_k}} = \frac{1}{N^k} \sum_j \frac{\partial^k F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^k} e^{j(q_1 + \dots + q_k) \mathbf{R}_j}$. При $q_1 = p, q_2 = -p, q_3 = q$ и $q_4 = -q$ отсюда следует

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

Подставляя полученное выражение в (21), для второго уравнения (12) окончательно получаем

$$A_q = \frac{1}{2N} \left(\frac{1}{J_q} + \left\langle \frac{\partial^2 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^2} \right\rangle_G + \frac{D}{4} \left\langle \frac{\partial^4 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^4} \right\rangle_G \right),$$

где средние в правой части не зависят от j , а локальная (одноузельная) флуктуация определяется формулой

$$D = \frac{1}{N^2} \sum_q \langle |\Delta V_q|^2 \rangle_G = \langle \Delta V_j^2 \rangle_G. \quad (22)$$

5. Локальное приближение. Гауссово поле \mathbf{V} с плотностью вероятности (9) определяется средним полем \bar{V} и среднеквадратичными флуктуациями

$$\langle |\Delta V_q|^2 \rangle_G = \frac{T}{2A_q}. \quad (23)$$

Однако вычисление $N + 1$ величин при каждом T избыточно для вычисления усредненных магнитных характеристик, таких как намагниченность и локальный магнитный момент. Поскольку эти величины зависят только от среднего поля и локальной флуктуации, среднее $\langle \dots \rangle_G$ в уравнениях оптимальной гауссовой аппроксимации (13) и (14) заменяется средним с плотностью вероятности

$$p(V_j) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D}} \exp\left(-\frac{(V_j - \bar{V})^2}{2D}\right). \quad (24)$$

Величина среднеквадратичного уклонения $D = \langle \Delta V_j^2 \rangle$ вычисляется по формуле (22). В результате флуктуирующие поля V_j становятся независимыми и одинаково распределенными, но параметры \bar{V} и D гауссова распределения (24) зависят от всех $\langle |\Delta V_q|^2 \rangle_G$. Подставляя выражения (14) и (23) в формулу (22), имеем

$$D = \frac{T}{N} \sum_q J_q \left(1 + J_q \left\langle \frac{\partial^2 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^2} \right\rangle \right)^{-1}. \quad (25)$$

Поскольку нас интересует качественный характер температурных зависимостей, разумным упрощением является замена коэффициентов взаимодействия J_q в уравнении (25) средней величиной J (это позволяет избежать суммирования по зоне Бриллюэна). Тогда величины \bar{V} и D определяются системой уравнений

$$\bar{V} = -J_0 \left\langle \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j} \right\rangle, \quad (26)$$

$$D = JT \left(1 + J \left\langle \frac{\partial^2 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^2} \right\rangle \right)^{-1}, \quad (27)$$

где среднее $\langle \dots \rangle$ берется с плотностью вероятности (24). Действуя аналогично, для перенормированной гауссовой аппроксимации вместо уравнения (27) получаем уравнение вида

$$D = JT \left(1 + J \left(\left\langle \frac{\partial^2 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^2} \right\rangle + \frac{D}{4} \left\langle \frac{\partial^4 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j^4} \right\rangle \right) \right)^{-1}, \quad (28)$$

где среднее $\langle \dots \rangle$ берется с той же плотностью вероятности (24).

6. Метод решения системы нелинейных уравнений. Для решения систем нелинейных уравнений оптимальной и перенормированной гауссовых аппроксимаций используется метод доверительных областей, который относится к числу “глобальных” методов (подробнее см., напр., [19–21]). Опишем основные идеи метода применительно к решению системы нелинейных уравнений

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{F} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \quad (29)$$

с начальным приближением $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$. Одновременно с системой уравнений рассматривается задача оптимизации

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} |\mathbf{F}(\mathbf{x})|^2 \rightarrow \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n}, \quad (30)$$

где $|\mathbf{F}(\mathbf{x})|^2 = \mathbf{F}(\mathbf{x})^T \mathbf{F}(\mathbf{x})$ (верхний индекс T обозначает транспонирование). В квазиньютоновских методах направление сдвига \mathbf{s}_k^N для решения системы нелинейных уравнений определяется из системы линейных уравнений

$$B_k \mathbf{s} = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_k), \quad (31)$$

где $B_k \approx \mathbf{F}'(\mathbf{x}_k)$ — приближение якобиана исходной системы. Это соотношение является условием первого порядка для оптимизационной задачи

$$q^{(k)}(\mathbf{s}) = \frac{1}{2} |\mathbf{F}(\mathbf{x}_k) + B_k \mathbf{s}|^2 \rightarrow \min_{\mathbf{s} \in \mathbb{R}^n}. \quad (32)$$

Она получается из задачи (30), если использовать линейную аппроксимацию $\mathbf{F}(\mathbf{x}) \approx \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) + B_k(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k)$. Однако выбранный таким образом шаг может оказаться слишком большим по сравнению с той окрестностью, где сходится квазиньютоновский метод. В методе доверительных областей поиск направлений сдвига ограничивается шаром малого радиуса (доверительная область). Таким образом, задача (32) решается при ограничении $|\mathbf{s}| \leq \delta_k$.

Решение задачи (32) с ограничением $|\mathbf{s}| \leq \delta_k$ ищется методом с двойным изломом. Шаг $\mathbf{s}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$ в методе с двойным изломом выбирается следующим образом. Пусть \mathbf{s}_k^N — квазиньютоновский шаг (31) для поиска следующего приближения к решению задачи (32) без ограничения. Если $|\mathbf{s}_k^N| \leq \delta_k$, то квазиньютоновский шаг считается шагом метода с двойным изломом:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_{k+1}^N = \mathbf{x}_k - B_k^{-1} \mathbf{g}_k,$$

где для краткости введено обозначение $\mathbf{g}_k = \mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$. Если $|\mathbf{s}_k^N| > \delta_k$, то необходимо определить точку Коши $\mathbf{x}_k + \mathbf{s}_k^C$, т.е. точку минимума функции $q^{(k)}(\mathbf{s})$ на направлении наискорейшего спуска для функции $f(\mathbf{x})$ из задачи (30):

$$q^{(k)}(\mathbf{x}_k - \alpha \nabla f(\mathbf{x}_k)) \rightarrow \min_{\alpha \in \mathbb{R}}. \tag{33}$$

Квадратичная функция $q^{(k)}(\mathbf{s})$ в задаче (32) записывается в виде

$$q^{(k)}(\mathbf{s}) = \frac{1}{2} \mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k + \mathbf{g}_k^T B_k \mathbf{s} + \frac{1}{2} \mathbf{s}^T B_k^T B_k \mathbf{s}. \tag{34}$$

Пусть $F_i(\mathbf{x})$ — компоненты вектор-функции $\mathbf{F}(\mathbf{x})$. Тогда градиент функции $f(\mathbf{x})$ определяется выражением

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \frac{d}{d\mathbf{x}} \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} (F_i(\mathbf{x}))^2 = \sum_{i=1}^n \nabla F_i(\mathbf{x}) F_i(\mathbf{x}) = \mathbf{F}'(\mathbf{x})^T \mathbf{F}(\mathbf{x}).$$

Значение градиента в точке \mathbf{x}_k заменяется приближенным значением: $\nabla f(\mathbf{x}_k) \approx B_k^T \mathbf{g}_k$. С учетом формулы (34) условие (33) для определения точки Коши записывается в виде

$$q^{(k)}(\mathbf{x}_k - \alpha \nabla f(\mathbf{x}_k)) \approx \frac{1}{2} |\mathbf{g}_k|^2 - \alpha |B_k^T \mathbf{g}_k|^2 + \frac{1}{2} \alpha^2 |B_k B_k^T \mathbf{g}_k|^2 \rightarrow \min_{\alpha \in \mathbb{R}}.$$

Из необходимого условия минимума получается

$$\alpha_k = \frac{|B_k^T \mathbf{g}_k|^2}{|B_k B_k^T \mathbf{g}_k|^2},$$

и $\mathbf{s}_k^C = -\alpha_k B_k^T \mathbf{g}_k$ — шаг в направлении наискорейшего спуска.

Если $|\mathbf{s}_k^C| \geq \delta_k$ и $|\mathbf{s}_k^N| > \delta_k$, то в качестве шага метода с двойным изломом выбирается шаг в направлении наискорейшего спуска длины δ_k :

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \frac{\delta_k}{|B_k^T \mathbf{g}_k|} B_k^T \mathbf{g}_k.$$

Наконец, если $|\mathbf{s}_k^C| < \delta_k$ и $|\mathbf{s}_k^N| > \delta_k$, то в качестве шага метода с двойным изломом берется $\mathbf{s}_k(\lambda) = \mathbf{s}_k^C + \lambda(\eta \mathbf{s}_k^N - \mathbf{s}_k^C)$, где $0 < \lambda < 1$ определяется из условия $|\mathbf{s}_k(\lambda)| = \delta_k$. Здесь $\gamma < \eta < 1$ — параметр, а величина γ возникает из условия $|\mathbf{s}_k^C| \leq \gamma |\mathbf{s}_k^N|$ (подробнее см. [19]). Тогда

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{s}_k(\lambda).$$

В зависимости от значения функции $f(\mathbf{x})$ в точке $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{s}_k$ определяют, подходит ли эта точка в качестве нового приближения. Если значение $f(\mathbf{x}_{k+1})$ превышает $f(\mathbf{x}_k)$, то радиус δ_k уменьшают и снова решают оптимизационную задачу (32) с ограничением $|\mathbf{s}| \leq \delta_k$. Этот процесс продолжается до тех пор, пока не найдется подходящий вектор сдвига \mathbf{s}_k .

7. Метод продолжения по параметру. Система уравнений гауссовой аппроксимации (оптимальной или перенормированной)

$$f(\bar{V}, D, T) = 0, \quad g(\bar{V}, D, T) = 0 \tag{35}$$

решается описанным выше методом при каждом значении температуры $T > 0$. Для построения температурных зависимостей $\bar{V}(T)$ и $D(T)$ используется метод продолжения по параметру: T меняется слева направо и в качестве начального приближения берется решение с предыдущего шага по температуре. Однако при приближении по T слева к точке фазового перехода система перестает решаться. Например, метод минимизации функции $f^2 + g^2$, описанный в предыдущем разделе, может сходиться к локальному минимуму, который не является решением системы (35). Причиной является вырождение системы (35) в точке фазового перехода: якобиан системы относительно \bar{V} и D обращается в нуль, в результате чего производные по T функций $\bar{V}(T)$ и $D(T)$ обращаются в бесконечность. Сказанное можно показать следующим образом. В предположении

$$\text{rank} \begin{pmatrix} f_{\bar{V}} & f_D & f_T \\ g_{\bar{V}} & g_D & g_T \end{pmatrix} = 2 \tag{36}$$

система (35) задает гладкую кривую $\gamma = \{(\bar{V}(s), D(s), T(s)) \mid s \in I \subset \mathbb{R}\}$ в пространстве $\mathbb{R}^3(\bar{V}, D, T)$. Это по определению означает, что в каждой точке кривой γ определен ненулевой касательный вектор $(\dot{\bar{V}}, \dot{D}, \dot{T})$ (здесь и далее точка означает производную по s). Дифференцируя систему (35) по параметру s , получаем

$$f_{\bar{V}}\dot{\bar{V}} + f_D\dot{D} + f_T\dot{T} = 0, \quad g_{\bar{V}}\dot{\bar{V}} + g_D\dot{D} + g_T\dot{T} = 0. \tag{37}$$

Точка (\bar{V}, D, T) называется регулярной точкой системы (35), если $f_{\bar{V}}g_D - f_Dg_{\bar{V}} \neq 0$ (т.е. ее якобиан не равен нулю). В регулярной точке имеем $\dot{T} \neq 0$. Действительно, если $\dot{T} = 0$, то однородная система (37) имеет только нулевое решение $\dot{\bar{V}} = 0$ и $\dot{D} = 0$. Это противоречит тому, что есть ненулевой касательный вектор $(\dot{\bar{V}}, \dot{D}, \dot{T})$. Следовательно, в регулярной точке система (37) может быть записана в виде

$$f_{\bar{V}}\bar{V}' + f_D D' = -f_T, \quad g_{\bar{V}}\bar{V}' + g_D D' = -g_T,$$

где штрих означает производную по T . Решение этой системы можно определить по правилу Крамера:

$$\bar{V}' = \frac{f_D g_T - f_T g_D}{f_{\bar{V}} g_D - f_D g_{\bar{V}}}, \quad D' = \frac{f_{\bar{V}} g_T - f_T g_{\bar{V}}}{f_{\bar{V}} g_D - f_D g_{\bar{V}}}. \tag{38}$$

Тогда по теореме о неявной функции в окрестности регулярной точки кривая γ может быть параметризована про помощи T , т.е. $\bar{V} = \bar{V}(T)$, $D = D(T)$, причем производные этих функций определяются по формулам (38).

Пусть теперь точка (\bar{V}, D, T) — особая точка системы (35): $f_{\bar{V}}g_D - f_Dg_{\bar{V}} = 0$. Тогда в силу условия (36) должен быть ненулевым по крайней мере один из двух оставшихся миноров матрицы Якоби: $f_Dg_T - f_Tg_D \neq 0$ или $f_{\bar{V}}g_T - f_Tg_{\bar{V}} \neq 0$. В этом случае аналогично предыдущему можно показать, что одна из переменных \bar{V} или D может быть выбрана за параметр на кривой γ . При этом производная соответствующей функции $T(\bar{V})$ или $T(D)$ в точке (\bar{V}, D, T) будет равна нулю:

$$\frac{dT}{d\bar{V}} = \frac{f_{\bar{V}}g_D - f_Dg_{\bar{V}}}{f_Dg_T - f_Tg_D} = 0 \quad \text{или} \quad \frac{dT}{dD} = \frac{f_{\bar{V}}g_T - f_Tg_{\bar{V}}}{f_{\bar{V}}g_D - f_Dg_{\bar{V}}} = 0.$$

Отсюда нетрудно видеть, что $\dot{T} = 0$. Следовательно, касательный вектор в особой точке $(\dot{\bar{V}}, \dot{D}, 0)$ параллелен плоскости $T = \text{const}$. Это означает, что проекция кривой γ на соответствующую плоскость $\mathbb{R}^2(\bar{V}, T)$ или $\mathbb{R}^2(D, T)$ имеет вертикальную касательную. Поэтому для построения кривой γ в окрестности особой точки необходимо сделать смену параметра.

Решение системы (35) на конечном интервале температур проводится в три этапа. На первом этапе в качестве параметра выступает температура T , которая меняется от нуля вправо. Решая систему (35) при фиксированном T , получаем среднее поле \bar{V} и локальную флуктуацию D . На втором этапе, при достижении некоторой температуры T^* , близкой к температуре фазового перехода, параметром становится среднее поле \bar{V} . При каждом значении среднего поля от \bar{V}^* до нуля значения локальной флуктуации D и температуры T определяем из системы (35). Наконец, на третьем этапе в парамагнитной области $\bar{V} \equiv 0$ снова переходим к параметру T . Значение D определяем, решая второе уравнение системы (35) при $\bar{V} = 0$ и заданном T .

8. Численные результаты. Запишем систему уравнений (26) и (27) оптимальной гауссовой аппроксимации (ОГА) и систему уравнений (26) и (28) перенормированной гауссовой аппроксимации (ПГА) в явном виде. Для этого дифференцируем свободную энергию (6) и подставляем выражения для производных. Тогда система ОГА записывается в форме

$$\bar{V} = \frac{J_0}{2} \left\langle \tanh\left(\frac{V}{2T}\right) \right\rangle, \tag{39}$$

$$D = JT \left(1 - \frac{J}{4T} \left\langle \cosh^{-2}\left(\frac{V}{2T}\right) \right\rangle \right)^{-1}, \tag{40}$$

а в ПГА второе уравнение принимает вид

$$D = JT \left(1 - \frac{J}{4T} \left(\left\langle \cosh^{-2}\left(\frac{V}{2T}\right) \right\rangle - \frac{D}{8T^2} \left(1 - 4 \left\langle \tanh^2\left(\frac{V}{2T}\right) \right\rangle + 3 \left\langle \tanh^4\left(\frac{V}{2T}\right) \right\rangle \right) \right) \right)^{-1} \tag{41}$$

(здесь и далее индекс j для краткости опускаем). В уравнениях (39)–(41) среднее $\langle \dots \rangle$ вычисляется с плотностью вероятности

$$p(V) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D}} \exp\left(-\frac{(V - \bar{V})^2}{2D}\right). \tag{42}$$

Для приближенного вычисления гауссовых средних используется следующая квадратурная формула (см., напр., [22]):

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) dx \approx \sum_{k=1}^n c_k f(x_k), \tag{43}$$

где x_k — корни полиномов Чебышева–Эрмита n -го порядка

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2},$$

а коэффициенты c_k задаются выражением

$$c_k = \frac{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}}{(H'_n(x_k))^2}.$$

Тогда гауссово среднее с плотностью вероятности (42) вычисляется по формуле

$$\langle f(V) \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=1}^n c_k f\left(\sqrt{2D}x_k + \bar{V}\right).$$

Для вычисления параметров квадратуры x_k и c_k используется функция GQRUL из библиотеки IMSL.

Тестирование приближенного вычисления интегралов по формуле (43) проведено на гауссовых моментах четных степеней, которые находятся при помощи формулы

$$J_{2m} = \int x^{2m} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \frac{(2m-1)!!}{2^m}$$

(соответствующие интегралы от полиномов нечетных степеней равны нулю). По построению гауссова квадратура (43) точна на полиномах степени не выше $(2n-1)$ (см., напр., [22]), т.е. при $2m < 2n-1$ величины

$$a_{2m} = \frac{1}{J_{2m}} \sum_{k=1}^n c_k x_k^{2m}$$

равны единице. Численные расчеты величин a_{2m} на языке Fortran с двойной точностью подтверждают этот результат.

Порядок квадратуры, необходимый для вычисления средних вида $\langle h(V/(2T)) \rangle$ в уравнениях (39)–(41), зависит от температуры. Действительно, выполняя замену переменной $y = V/(2T)$ в интеграле с плотностью вероятности (42), получаем

$$\left\langle h\left(\frac{V}{2T}\right)\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi \tilde{D}}} \int h(y) \exp\left(-\frac{(y - \bar{y})^2}{2\tilde{D}}\right) dy, \tag{44}$$

где $\bar{y} = \bar{V}/(2T)$ и $\tilde{D} = D/(2T)^2$. С ростом \tilde{D} расширяется график экспоненты, стоящей под интегралом (44), и для его приближенного вычисления по формуле (43) требуется больше точек разбиения x_k . Следовательно, чем больше отношение $D(T)/T^2$, тем больший порядок квадратуры n необходимо брать для вычисления среднего (44).

Для решения системы нелинейных уравнений методом доверительных областей используется процедура NEQBF библиотеки IMSL, в которой приближение якобиана системы уравнений (29) на k -ом шаге пересчитывается по формуле Бройдена

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(\mathbf{y}_k - B_k \mathbf{s}_k) \mathbf{s}_k^T}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{s}_k},$$

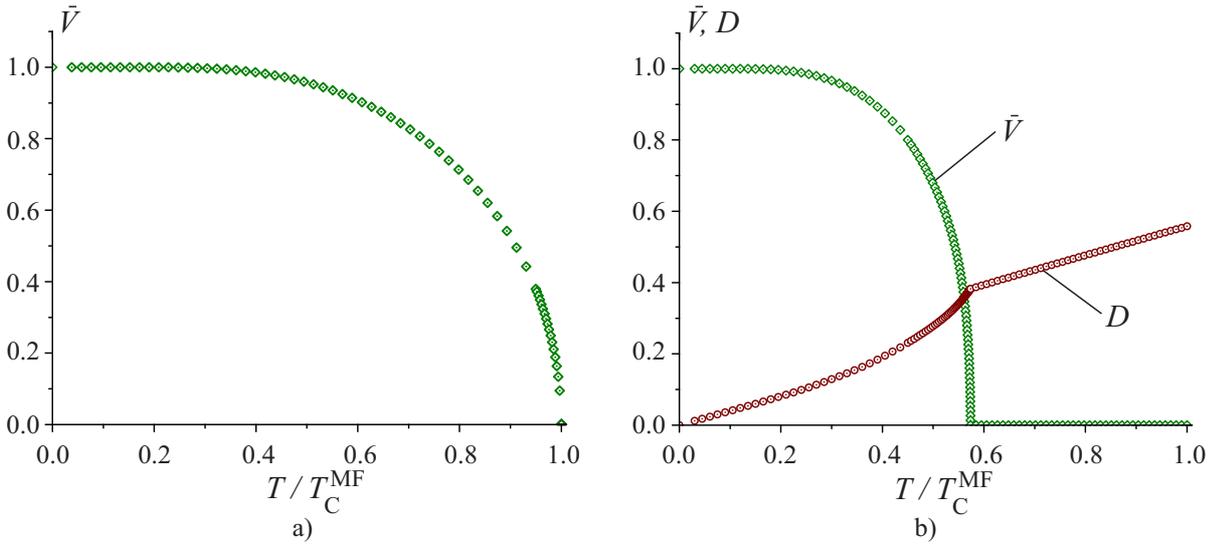


Рис. 1. Среднее поле \bar{V} и локальная флуктуация D как функции приведенной температуры T/T_C^{MF} в ОГА при а) $J/J_0 = 0$ (теория среднего поля) и б) $J/J_0 = 0.4$ (слабые флуктуации)

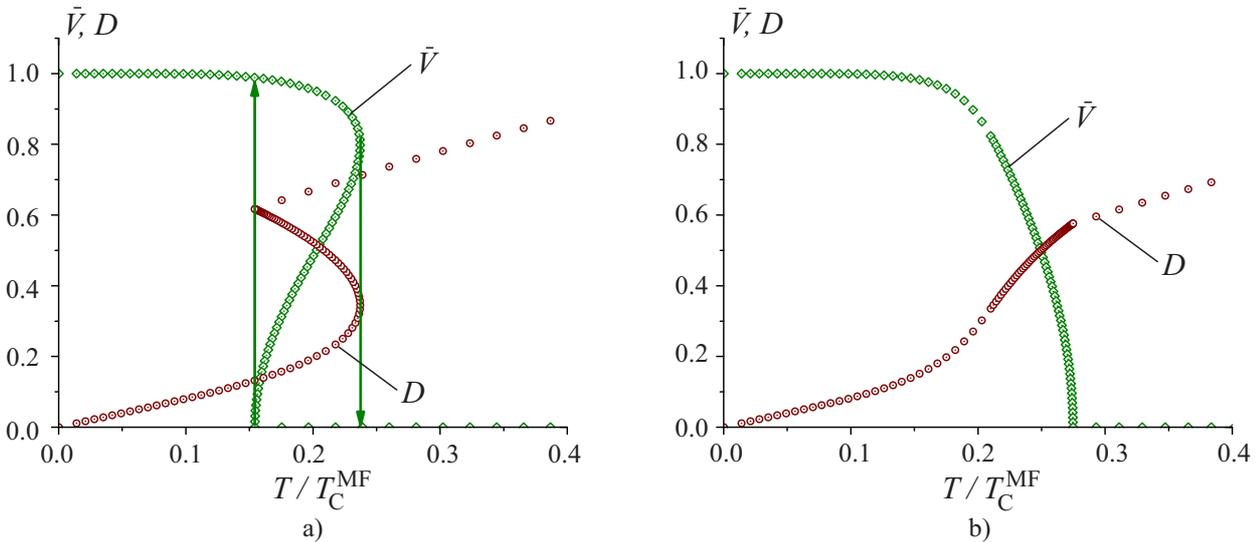


Рис. 2. Среднее поле \bar{V} и локальная флуктуация D как функции приведенной температуры T/T_C^{MF} в ОГА (а) и ПГА (б) при $J/J_0 = 0.8$ (сильные флуктуации)

где $\mathbf{y}_k = \mathbf{F}(\mathbf{x}_{k+1}) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_k)$.

Единицы измерения величин J_q выбираем так, чтобы $J_0 = 2$. Тогда $\bar{V} \rightarrow 1$ при $T \rightarrow 0$. В точке $T = 0$ решение систем ОГА и ПГА не определено, поэтому в качестве начальной температуры в методе продолжения по параметру берем достаточно малое отличное от нуля значение $T_0 = 10^{-3} T_C^{MF}$, такое, чтобы можно было положить $\bar{V}_0 = 1$. Значение D_0 определяется из второго уравнения системы.

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 $J_q = J_0 \delta_{q0}$ 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 $J_q \approx J$, следовательно, $J/J_0 \approx 1$ (сильные флуктуации).

Как видно из рис. 1, учет флуктуаций в ОГА (рис. 1b) приводит к уменьшению температуры фазового перехода по сравнению с теорией среднего поля (рис. 1a). 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. Поскольку флуктуация $D(T)$ растет линейно, для расчета достаточно квадратуры порядка $n = 10$; увеличение n на порядок приводит к изменению результатов в пределах 1%. (В работе [4] на рис. 2б показан фазовый переход первого рода при $J/J_0 = 0.4$ из-за слишком малого

порядка квадратуры, $n = 4$.)

В случае сильных флуктуаций $J/J_0 = 0.8$ решение в ОГА становится неединственным (рис. 2а): кроме ферромагнитного $\bar{V} \neq 0$ и парамагнитного $\bar{V} = 0$ решений при высоких температурах возникает промежуточное решение. В результате с ростом температуры от нуля возникает скачкообразный фазовый переход первого рода из ферро- в парамагнитное состояние. При обратном уменьшении температуры скачок из пара- в ферромагнитное состояние происходит при меньшем значении температуры, т.е. имеет место температурный гистерезис. На отрезке от нуля до примерно $0.15 T_C$ флуктуация $D(T)$ растет линейно, и для достижения точности в пределах 1% достаточно использовать квадратуру порядка $n = 20$. При дальнейшем увеличении T флуктуация $D(T)$ начинает расти нелинейно, и для достижения точности вычислений на отрезке от $T \approx 0.15 T_C$ до точки срыва (стрелка вниз) порядок квадратуры необходимо увеличивать до $n = 100$. Для вычисления нижней ветви кривой $D(T)$ необходимо дальнейшее увеличение порядка квадратуры до $n = 300$. В связи с небольшим временем счета мы использовали $n = 300$ при всех T . (Численные результаты, полученные нами в ОГА (рис. 1b и 2а), уточняют результаты расчетов [7].)

На рис. 3 показано, что якобиан Δ системы уравнений ОГА действительно вырождается при подходе к точке срыва. Для численного расчета якобиана использована процедура FDJAC из библиотеки IMSL.

Наконец, учет члена четвертого порядка в ПГА устраняет гистерезис в случае сильных флуктуаций $J/J_0 = 0.8$ и дает фазовый переход второго рода (рис. 2b). Как и в случае ОГА, использована квадратура порядка $n = 300$.

9. Заключение. Предложен метод перенормировки оптимальной гауссовой аппроксимации в теории спиновых флуктуаций за счет членов четвертого порядка в разложении свободной энергии во флуктуирующем поле. Учет членов четвертого порядка использует расщепление, основанное на теореме Вика. Для решения системы нелинейных уравнений использован метод доверительных областей, обладающий рядом преимуществ по сравнению с квазиньютоновскими методами. Изложен и обоснован метод смены параметра для построения температурных зависимостей магнитных характеристик вблизи точки фазового перехода, позволяющий получить большую точность, чем метод экстраполяции. На примере модели Изинга показано, что оптимальная гауссова аппроксимация в системах с локализованными спинами может приводить к скачкообразному фазовому переходу первого рода, как и в магнетиках с коллективизированными электронами [6]. Показано, что перенормировка оптимальной гауссовой аппроксимации приводит к непрерывному фазовому переходу второго рода, который наблюдается на эксперименте.

Авторы благодарны Б. И. Резеру за полезное обсуждение результатов.

Приложение. Корреляторы спина и поля в модели Изинга. Получим соотношение между средними спинового момента и поля. Для этого рассмотрим среднее

$$\left\langle \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j} \right\rangle = Q^{-1} \int \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j} e^{-(F_0(\mathbf{V})+F_1(\mathbf{V}))/T} d\mathbf{V},$$

где $Q = \int e^{-F_0(\mathbf{V})/T} d\mathbf{V}$ — нормировочный множитель. Переписывая равенство

$$\left\langle \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j} \right\rangle = -TQ^{-1} \int e^{-F_0(\mathbf{V})/T} \frac{\partial}{\partial V_j} (e^{-F_1(\mathbf{V})/T}) d\mathbf{V}$$

и интегрируя его по частям, получаем

$$\left\langle \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j} \right\rangle = -Q^{-1} \int \frac{\partial F_0(\mathbf{V})}{\partial V_j} e^{-(F_0(\mathbf{V})+F_1(\mathbf{V}))/T} d\mathbf{V}.$$

Отсюда имеем

$$\left\langle \frac{\partial F_0(\mathbf{V})}{\partial V_j} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j} \right\rangle = 0. \tag{45}$$

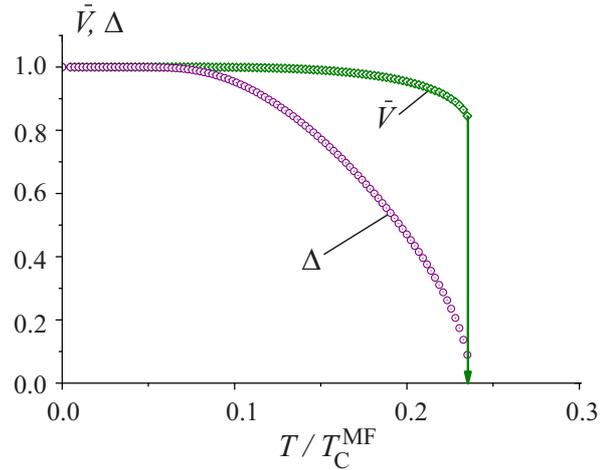


Рис. 3. Якобиан системы уравнений Δ и среднее поле \bar{V} как функции приведенной температуры T/T_C^{MF} в ОГА при $J/J_0 = 0.8$

Получим соотношение, которое связывает среднее квадрата спинового момента

$$\langle S_q S_{-q} \rangle \equiv Z^{-1} \text{Tr} (S_q S_{-q} e^{-H/T})$$

и среднее квадрата поля

$$\langle V_q V_{-q} \rangle \equiv Q^{-1} \int V_q V_{-q} e^{-(F_0(\mathbf{V})+F_1(\mathbf{V}))/T} d\mathbf{V}.$$

Интегрируя по частям выражение

$$\left\langle \frac{\partial^2 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_q \partial V_{-q}} \right\rangle = Q^{-1} \int \frac{\partial^2 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_q \partial V_{-q}} e^{-(F_0(\mathbf{V})+F_1(\mathbf{V}))/T} d\mathbf{V},$$

имеем

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial^2 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_q \partial V_{-q}} \right\rangle &= (TQ)^{-1} \int \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_{-q}} e^{-(F_0(\mathbf{V})+F_1(\mathbf{V}))/T} \frac{\partial F_0(\mathbf{V})}{\partial V_q} d\mathbf{V} + \\ &+ (TQ)^{-1} \int \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_{-q}} e^{-(F_0(\mathbf{V})+F_1(\mathbf{V}))/T} \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_q} d\mathbf{V} \equiv I_1 + I_2. \end{aligned} \quad (46)$$

Первое слагаемое может быть переписано в форме

$$I_1 = -Q^{-1} \int \frac{\partial}{\partial V_{-q}} (e^{-F_1(\mathbf{V})/T}) e^{-F_0(\mathbf{V})/T} \frac{\partial F_0(\mathbf{V})}{\partial V_q} d\mathbf{V}.$$

Интегрируя по частям, получаем

$$I_1 = -(TQ)^{-1} \int \frac{\partial F_0(\mathbf{V})}{\partial V_{-q}} e^{-(F_0(\mathbf{V})+F_1(\mathbf{V}))/T} \frac{\partial F_0(\mathbf{V})}{\partial V_q} d\mathbf{V} + Q^{-1} \int e^{-(F_0(\mathbf{V})+F_1(\mathbf{V}))/T} \frac{\partial^2 F_0(\mathbf{V})}{\partial V_q \partial V_{-q}} d\mathbf{V}.$$

Это эквивалентно выражению

$$I_1 = -\frac{1}{T} \left\langle \frac{\partial F_0(\mathbf{V})}{\partial V_q} \frac{\partial F_0(\mathbf{V})}{\partial V_{-q}} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial^2 F_0(\mathbf{V})}{\partial V_q \partial V_{-q}} \right\rangle. \quad (47)$$

Второе слагаемое в (46) может быть переписано в виде

$$I_2 = \frac{1}{T} \left\langle \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_q} \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_{-q}} \right\rangle. \quad (48)$$

Подставляя (47) и (48) в (46), приходим к соотношению

$$\left\langle \frac{\partial^2 F_0(\mathbf{V})}{\partial V_q \partial V_{-q}} \right\rangle - \frac{1}{T} \left\langle \frac{\partial F_0(\mathbf{V})}{\partial V_q} \frac{\partial F_0(\mathbf{V})}{\partial V_{-q}} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial^2 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_q \partial V_{-q}} \right\rangle - \frac{1}{T} \left\langle \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_q} \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_{-q}} \right\rangle. \quad (49)$$

В модели Изинга соотношения (45) и (49) могут быть записаны в явном виде. Вычисляем первое слагаемое в уравнении (45). Подставляя формулу (2) для фурье-образа V_q в выражение для энергии поля

$$F_0(\mathbf{V}) = \frac{1}{2N} \sum_q \frac{|V_q|^2}{J_q} = \frac{1}{2N} \sum_q \frac{1}{J_q} V_q V_{-q} \quad (50)$$

и дифференцируя полученное выражение, находим

$$\frac{\partial F_0(\mathbf{V})}{\partial V_j} = \frac{1}{2N} \sum_q \frac{1}{J_q} \left(e^{-iqR_j} \sum_i V_i e^{iqR_i} + e^{iqR_j} \sum_i V_i e^{-iqR_i} \right).$$

Усредняя и используя тождество $\sum_j e^{iqR_j} = N\delta_{q0}$, имеем

$$\left\langle \frac{\partial F_0(\mathbf{V})}{\partial V_j} \right\rangle = \frac{\langle V_j \rangle}{J_0}, \quad (51)$$

где J_0 — нулевой коэффициент Фурье.

Вычисляем второе слагаемое в уравнении (45). Выполняя обратное преобразование Фурье по формуле (2) и используя тождество $\sum_q e^{iqR_j} = N\delta_{j0}$, записываем гамильтониан (5) в виде $H_1(\mathbf{V}) = -\sum_j S_j V_j$.

Дифференцируя свободную энергию (4), имеем

$$\frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j} = -\frac{\text{Tr}(S_j e^{-H_1(\mathbf{V})/T})}{\text{Tr}(e^{-H_1(\mathbf{V})/T})} = -S_j(\mathbf{V}).$$

Усредняя, приходим к тождеству

$$\left\langle \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_j} \right\rangle = -\langle S_j \rangle. \tag{52}$$

В итоге, подстановка (51) и (52) в (45) приводит к соотношению между средним спиновым моментом и средним полем:

$$\langle V_j \rangle = J_0 \langle S_j \rangle. \tag{53}$$

Теперь получим явный вид соотношения (49) в модели Изинга. Первая производная свободной энергии (4) имеет вид

$$\frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_{-q}} = -\frac{1}{N} \frac{\text{Tr}(S_q e^{-H_1(\mathbf{V})/T})}{\text{Tr} e^{-H_1(\mathbf{V})/T}} = -\frac{1}{N} S_q(\mathbf{V}). \tag{54}$$

Отсюда, вычисляя выражение для второй производной и усредняя по \mathbf{V} , находим

$$\left\langle \frac{\partial^2 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_q \partial V_{-q}} \right\rangle = -\frac{1}{N^2 T} \left(\langle S_q S_{-q} \rangle - \langle S_q(\mathbf{V}) S_{-q}(\mathbf{V}) \rangle \right). \tag{55}$$

Используя (54), записываем соотношение (55) в виде

$$\left\langle \frac{\partial^2 F_1(\mathbf{V})}{\partial V_q \partial V_{-q}} \right\rangle - \frac{1}{T} \left\langle \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_q} \frac{\partial F_1(\mathbf{V})}{\partial V_{-q}} \right\rangle = -\frac{1}{N^2 T} \langle S_q S_{-q} \rangle. \tag{56}$$

Дифференцируя энергию поля (50), имеем

$$\frac{\partial F_0(\mathbf{V})}{\partial V_q} = \frac{V_{-q}}{NJ_q}, \quad \frac{\partial^2 F_0(\mathbf{V})}{\partial V_q \partial V_{-q}} = \frac{1}{NJ_q}. \tag{57}$$

Подставляя (56) и (57) в (49), приходим к соотношению для средних от квадрата спинового момента и квадрата поля:

$$\langle S_q S_{-q} \rangle = \frac{1}{J_q^2} \langle V_q V_{-q} \rangle - \frac{NT}{J_q}. \tag{58}$$

Наконец, записываем соотношение (53) между средними значениями спина и поля в фурье-представлении:

$$\langle S_q \rangle = J_q^{-1} \langle V_q \rangle \delta_{q0}. \tag{59}$$

Используя формулы (58), (59) и $\langle \Delta a \Delta b \rangle = \langle ab \rangle - \langle a \rangle \langle b \rangle$, где $\Delta a = a - \langle a \rangle$, получим соотношение между корреляторами спина и поля:

$$\langle \Delta S_q \Delta S_{-q} \rangle = \frac{1}{J_q^2} \langle \Delta V_q \Delta V_{-q} \rangle - \frac{NT}{J_q},$$

или в краткой форме $\langle |\Delta S_q|^2 \rangle = \frac{1}{J_q^2} \langle |\Delta V_q|^2 \rangle - \frac{NT}{J_q}$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Moriya T.* Spin fluctuations in itinerant electron magnetism. Berlin: Springer, 1985.
2. *Melnikov N.B., Reser B.I., Grebennikov V.I.* Extended dynamic spin-fluctuation theory of metallic magnetism // J. Phys.: Condens. Matter. 2011. **23** (doi:10.1088/0953-8984/23/27/276003).
3. *Зинн-Жюстен Ж.* Континуальный интеграл в квантовой механике. М.: Физматлит, 2006.
4. *Мельников Н.Б., Резер Б.И.* Оптимальное гауссово приближение в теории флуктуирующего поля // Тр. Математич. института им. В.А. Стеклова РАН. 2010. **271**. 159–180.

5. Резер В.И., Гребенников В.И. Температурная зависимость магнитных свойств ферромагнитных металлов с учетом динамики и нелокальности спиновых флуктуаций // Физика металлов и металловедение. 1998. **85**, вып. 1. 30–42.
6. Reser V.I., Melnikov N.B. Problem of temperature dependence in the dynamic spin-fluctuation theory for strong ferromagnets // J. Phys.: Condens. Matter. 2008. **20** (doi:10.1088/0953-8984/20/28/285205).
7. Grebennikov V.I. A fluctuating field theory for systems of localized magnetic moments // Solid State Phenom. 2009. **152–153**. 563–566.
8. Murata K.K., Doniach S. Theory of magnetic fluctuations in itinerant ferromagnets // Phys. Rev. Lett. 1972. **29**, N 5. 285–288.
9. Lonzarich G.G., Taillefer L. Effect of spin fluctuations on the magnetic equation of state of ferromagnetic or nearly ferromagnetic metals // J. Phys. C: Solid State Phys. 1985. **18**, N 22. 4339–4371.
10. Takahashi Y. Quantum spin fluctuation theory of the magnetic equation of state of weak itinerant-electron ferromagnets // J. Phys.: Condens. Matter. 2001. **13**, N 29. 6323–6358.
11. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. V. Статистическая физика. Часть 1. М.: Наука, 1976.
12. Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. М.: Наука, 1975.
13. Larkin A., Varlamov A. Theory of fluctuations in superconductors. Oxford: Oxford Univ. Press, 2009.
14. Hertz J.A. Critical spin fluctuations in itinerant electron ferromagnets // Int. J. Magnetism. 1971. **1**. 253–306.
15. Bruus H., Flensberg K. Many-body quantum theory in condensed matter physics. Oxford: Oxford Univ. Press, 2004.
16. Плажида Н.М. Двухвременные функции Грина и диаграммная техника // Теоретическая и математическая физика. 2011. **168**, вып. 3. 518–535.
17. Зубарев Д.Н., Церковников Ю.А. Метод двухвременных температурных функций Грина в равновесной и неравновесной статистической механике // Тр. Математич. института им. В.А. Стеклова АН СССР. 1986. **175**. 134–177.
18. Мельников Н.Б., Романенко Ю.А. Оптимальная гауссова аппроксимация в модели Изинга // Вычислительные методы и программирование. 2012. **13**. 452–464.
19. Дэвис Дж., Шнабель Р. Численные методы безусловной оптимизации и решения нелинейных уравнений. М.: Мир, 1988.
20. Conn A.R., Gould N.I.M., Toint Ph.L. Trust-region methods. Philadelphia: SIAM, 2000.
21. Sun W., Yuan Y. Optimization theory and methods: Nonlinear programming. New York: Springer, 2006.
22. Крылов В.И. Приближенное вычисление интегралов. М.: Физматлит, 1959.

Поступила в редакцию
06.07.2014

A Renormalized Gaussian Approximation in the Spin-Fluctuation Theory

N. B. Melnikov¹ and G. V. Paradezhenko²

¹ Lomonosov Moscow State University, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics;
Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia; Dr. Sci., Associate Professor, e-mail: melnikov@cs.msu.su

² Lomonosov Moscow State University, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics;
Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia; Student, e-mail: par.george.v@hotmail.com

Received July 6, 2014

Abstract: The effect of spin fluctuations on the magnetic phase transition is studied by the functional integral method. The interaction between spin moments at finite temperatures is replaced by the interaction with a stochastic (fluctuating) field. Calculation of magnetic characteristics is reduced to the integration over the fluctuating field configurations in the Gaussian approximation. A characteristic feature of the Gaussian approximation is the first-order phase transition. In this paper a method is proposed for renormalizing the Gaussian approximation by taking into account the fourth-order terms of the free energy expansion in the fluctuating field. By the example of the Ising model, it is shown that the renormalization leads to the second-order phase transition, which is observed in experiments.

Keywords: functional integral method, Stratonovich–Hubbard transformation, Gaussian approximation, renormalization, trust-region method.

References

1. T. Moriya, *Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism* (Springer, Berlin, 1985).
2. N. B. Melnikov, B. I. Reser, and V. I. Grebennikov, "Extended Dynamic Spin-Fluctuation Theory of Metallic Magnetism," *J. Phys.: Condens. Matter* **23** (2011). doi:10.1088/0953-8984/23/27/276003
3. J. Zinn-Justin, *Path Integrals in Quantum Mechanics* (Oxford Univ. Press, 2004; Fizmatlit, Moscow, 2006).
4. N. B. Melnikov and B. I. Reser, "Optimal Gaussian Approximation in the Fluctuating Field Theory," *Tr. Mat. Inst. im. V.A. Steklova, Akad. Nauk* **271**, 159–180 (2010) [*Proc. Steklov Inst. Math.* **271** (1), 149–170 (2010)].
5. B. I. Rezer and V. I. Grebennikov, "Effect of Dynamic Nonlocal Spin Fluctuations on the Temperature Dependence of Magnetic Properties of Ferromagnetic Metals," *Fiz. Metal. Metalloved.* **85** (1), 30–42 (1998) [*Phys. Metals Metallogr.* **85** (1), 20–27 (1998)].
6. B. I. Reser and N. B. Melnikov, "Problem of Temperature Dependence in the Dynamic Spin-Fluctuation Theory for Strong Ferromagnets," *J. Phys.: Condens. Matter* **20** (2008). doi:10.1088/0953-8984/20/28/285205
7. V. I. Grebennikov, "A Fluctuating Field Theory for Systems of Localized Magnetic Moments," *Solid State Phenom.* **152-153**, 563–566 (2009).
8. K. K. Murata and S. Doniach, "Theory of Magnetic Fluctuations in Itinerant Ferromagnets," *Phys. Rev. Lett.* **29** (5), 285–288 (1972).
9. G.G. Lonzarich and L. Taillefer, "Effect of Spin Fluctuations on the Magnetic Equation of State of Ferromagnetic or Nearly Ferromagnetic Metals," *J. Phys. C: Solid State Phys.* **18** (22), 4339–4371 (1985).
10. Y. Takahashi, "Quantum Spin Fluctuation Theory of the Magnetic Equation of State of Weak Itinerant-Electron Ferromagnets," *J. Phys.: Condens. Matter* **13** (29), 6323–6358 (2001).
11. L. D. Landau and E. M. Lifshits, *Statistical Physics* (Nauka, Moscow, 1976; Pergamon, New York, 1970).
12. A. Z. Patashinskii and V. L. Pokrovskii, *Fluctuation Theory of Phase Transitions* (Nauka, Moscow, 1975; Pergamon, Oxford, 1979).
13. A. Larkin and A. Varlamov, *Theory of Fluctuations in Superconductors* (Oxford Univ. Press, Oxford, 2009).
14. J. A. Hertz, "Critical Spin Fluctuations in Itinerant Electron Ferromagnets," *Int. J. Magnetism* **1**, 253–306 (1971).
15. H. Bruus and K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics* (Oxford Univ. Press, Oxford, 2004).
16. N. M. Plakida, "The Two-Time Green's Function and the Diagram Technique," *Teor. Mat. Fiz.* **168** (3), 518–535 (2011) [*Theor. Math. Phys.* **168** (3), 1303–1317 (2011)].
17. D. N. Zubarev and Yu. A. Tserkovnikov, "The Method of Green's Two-Time Temperature Functions in Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics," *Tr. Mat. Inst. im. V.A. Steklova, Akad. Nauk SSSR* **175**, 134–177 (1986) [*Proc. Steklov Inst. Math.* No. 2, 65–105 (1988)].
18. N. B. Melnikov and Yu. A. Romanenko, "Optimal Gaussian Approximation in the Ising Model," *Vychisl. Metody Programm.* **13**, 452–464 (2012).
19. J. E. Dennis and R. B. Schnabel, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations* (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1983; Mir, Moscow, 1988).
20. A. R. Conn, N. I. M. Gould, and Ph. L. Toint, *Trust-Region Methods* (SIAM, Philadelphia, 2000).
21. W. Sun and Y. Yuan, *Optimization Theory and Methods: Nonlinear Programming* (Springer, New York, 2006).
22. V. I. Krylov, *Approximate Calculation of Integrals* (Fizmatlit, Moscow, 1959; Wiley, New York, 1964).