MSC 82B20

ОЦЕНКА ЭНЕРГИИ ВЕКТОРНОЙ РЕШЕТОЧНОЙ МОДЕЛИ С ПЕРИОДИЧЕСКИМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ

А.С. Клюев, Ю.П. Вирченко

Белгородский государственный университет,
ул. Победы, 85, Белгород, 308015, Россия, e-mail: virch@bsu.edu.ru

Аннотация. Изучается векторная модель с суммируемым парным обменным взаимодействием в статистической механике решеточных систем. В случае дальнодействующего обмена, получена априорная оценка близости энергии этой модели к энергии соответствующей модели с периодическими граничными условиями для каждого состояния конечного кристалла.

Ключевые слова: векторная модель, гамильтониан, парное взаимодействие, периодические условия.

Введение. В статистической механике решеточных систем часто применяется аппроксимация изучаемой системы, при которой ее гамильтониан H заменяется на гамильтониан $\tilde{\mathsf{H}}$ соответствующей ей системы с периодическими граничными условиями (см. [1]). Такая аппроксимация упрощает всевозможные конструкции в рамках статистической механики и доказательства утверждений о свойствах различных решеточных систем. Часто, она позволяет проводить вычисления некоторых характеристик до конечных аналитических формул в том случае, когда это вообще возможно. При этом существенно, что понятие аппроксимирующей системы с периодическими граничными условиями вводится в том случае, когда взаимодействие обладает конечным радиусом. Этого оказывается достаточно при вычислении статистических характеристик на основе соответствующего распределения Гиббса при конечных температурах, если гамильтониан системы принадлежит банахову пространству $\mathcal{B}$ суммируемых гамильтонианов [1]. Однако, в том случае, когда приходится давать оценки энергии конкретного состояния, в частности, в задаче о вычислении основного состояния конечной системы, совсем не очевидно, что аппроксимация исходного гамильтониана $\mathsf{H} \in \mathcal{B}$ системы, который физически не обладает конечным радиусом действия, некоторым гамильтонианом конечного радиуса действия, должна приводить к близости соответствующих состояний. В настоящем сообщении мы вводим понятие аппроксимирующей системы с периодическими граничными условиями в том случае, когда она не обладает конечным радиусом действия, и для этой системы даем оценку близости ее энергии к энергии аппроксимируемой системы в том же фазовом состоянии. Для простоты изложения мы ограничиваемся только классическими (не квантовыми) решеточными системами статистической механики и, более того, ограничиваемся только системами с парным взаимодействием, типичным представителем которых является так называемая векторная модель в физике магнетизма. Распространение предлагаемых в сообщении построений на самый широкий круг решеточных систем с гамильтонианами из $\mathcal{B}$ не представляет затруднений.

2. Векторная модель. Будем, далее, рассматривать системы статистической механики с пространством состояний $\mathfrak{S} = \bigotimes_{\mathbf{x}\in\Lambda}\{\mathbf{s}(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^n; \mathbf{s}^2(\mathbf{x}) = s^2\}$; $d, n \in \mathbb{N}$, где $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ – множество являющееся геометрической моделью конечного кристалла, $|\Lambda| = N < \infty$. Это множество мы, опять же для простоты рассмотрений, положим в виде $\Lambda = \{0, 1, ..., L\}^d$, $L \in \mathbb{N}$ – размер кристалла. Распространение дающихся ниже построений па случай множеств Λ, па основе которых возможно осуществлять переход к термодинамическому пределу по Ван Хову (см. [1]), не должен вызвать затруднений.

Положим, что гамильтониан системы для каждого векторного поля $\mathbf{s}(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \Lambda$ имеет вид

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

что соответствует при $n = 1, 2, 3$ моделям статистической механики, которые описывают системы взаимодействующих ионов, обладающих магнитным моментом $\mathbf{s}$, со сферически симметричным обменным взаимодействием между ними, которое определяется обменным интегралом $I(\cdot)$. В формуле (1) функция $I(\cdot) : \mathbb{Z}^d \mapsto \mathbb{R}$ обладает свойством $I(-\mathbf{x}) = I(\mathbf{x})$ и является суммируемой $\sum_{\mathbf{x}\in\mathbb{Z}^d}|I(\mathbf{x})| < \infty$. Последнее является необходимым и достаточным условием принадлежности гамильтониана $\mathsf{H}_\Lambda[\mathbf{s}]$ к пространству $\mathcal{B}$.

Сделаем небольшое отступление в область физики магнетизма. Обычно, в микроскопической теории магнетизма имеют дело с обменным взаимодействием, у которого $I(\cdot)$ очень быстро убывающая функция с ростом величины $|\mathbf{x}|$ (см., например, [2]). Для магнитного взаимодействия с таким обменом аппроксимация его финитной функцией, которая равна нулю при $|\mathbf{x}| > R$, $R < \infty$ оказывается очень точной но сути, и при конкретных вычислениях удается часто давать гарантированные оценки их точности в результате такой аппроксимации. В то же время, в теории магнетизма имеются и исключительные случаи, когда обменное взаимодействие является дальнодействующим (т.п. косвенный обмен). В частности, примером такого положения является т.п. РККИ-обменное взаимодействие, которое описывает косвенное обменное взаимодействие между магнитными ионами, осуществляемое через коллективизированные электроны проводимости (см., например, [3, 4]). Оно проявляется в металлах и полупроводниках, где коллективизированные электроны выступают посредниками обменного взаимодействия ионов, обладающих локализованными противоположно направленными спинами, частично заполненных d- и f-оболочек. В этом случае

$$I(\mathbf{x}) \sim \frac{1}{r^4}(r\cos r - \sin r)$$

при $r = 2k_F|\mathbf{x}| \to \infty$.

В случае дальнодействующего обмена аппроксимация гамильтониана H вида (1) посредством замены функции I па финитную функцию может стать неадекватной. В частности, такое положение приводит к значительным затруднениям при исследовании основного состояния системы (см., например, [5]). Это, в частности, проявляется в невозможности использования аппроксимации гамильтониана системы соответствующим гамильтонианом с периодическими условиями, которая обычно используется только для систем с конечным радиусом действия (см. [2]). Дадим теперь определение аппроксимации с периодическими граничными условиями для системы с гамильтонианом вида (1) в общем случае.

Зафиксируем множество Λ и на его основе определим для каждой точки $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d$ действие оператора P_Λ проектирования. Точка $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d$ однозначно представима в виде $\mathbf{x} = (L+1)(n_1\mathbf{e}_1 + ... n_d\mathbf{e}_d) + \mathbf{y}$, $\mathbf{y} \in \Lambda$, $\mathbf{e}_j$ – орты в $\mathbb{R}^d$, $(\mathbf{e}_j)_i = \delta_{ij}$. Тогда положим $\mathsf{P}_\Lambda \mathbf{x} = \mathbf{y}$.

Определение. *Гамильтониан* $\tilde{\mathsf{H}}_\Lambda[\mathbf{s}]$, *определяемый формулой*

$$\tilde{\mathsf{H}}_\Lambda[\mathbf{s}] = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda,\, \mathbf{y} \in \mathbb{Z}^d} I(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \Big(\mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathsf{P}_\Lambda \mathbf{y}) \Big)$$

назовем гамильтонианом с периодическими граничными условиями, аппроксимирующим гамильтониан $\mathsf{H}_\Lambda[\mathbf{s}]$.

Норма $\|\cdot\|$ в пространстве $\mathfrak{B}$ гамильтонианов в применении ее к гамильтонианам на пространстве состояний $\mathfrak{S}$ определяется как (см. [2])

$$\|\mathsf{H}_\Lambda[\mathbf{s}]\| = \max\{|\Lambda|^{-1}|\mathsf{H}_\Lambda[\mathbf{s}]| : \mathbf{s}(\mathbf{x}) \in \mathfrak{S}, \Lambda \subset \mathbb{Z}^d\}\,. \tag{2}$$

В случае гамильтониана с конечным радиусом действия, очевидно, что разность между энергиями $\mathsf{H}_\Lambda[\mathbf{s}]$ и $\tilde{\mathsf{H}}_\Lambda[\mathbf{s}]$ должна быть пропорциональна площади поверхности кристалла, то есть L^{d-1} при $L \to \infty$. Если же взаимодействие является дальнодействующим, то такая оценка должна быть слабее.

Для получения оценок близости по норме $\|\cdot\|$ гамильтонианов $\mathsf{H}_\Lambda[\mathbf{s}]$ и $\tilde{\mathsf{H}}_\Lambda[\mathbf{s}]$ установим предварительно следующую простую геометрическую оценку

Лемма. *Для любой точки* $\mathbf{z} \in \mathbb{Z}^d$ *имеет место следующее неравенство*

$$|\Lambda \cap (\mathbb{Z}^d \setminus \Lambda + \mathbf{z})| \le dL^{d-1} \max\{|z_j|; j = 1, ..., d\} \equiv dL^{d-1}\|\mathbf{z}\|_0 \tag{2}$$

и при $|z| > L$ *выполняется* $|\Lambda \cap (\mathbb{Z}^d \setminus \Lambda + \mathbf{z})| = 0$.

□ Последнее равенство в формулировке леммы очевидно. Доказательство неравенства (2) проведем индукцией по d. При $d = 1$ и $|\mathbf{z}| \le L$ имеем точное равенство, так как $\Lambda = \{0, 1, ..., L\}$ и $\Lambda + \mathbf{z} = \{z, z+1, ..., z+L\}$. Тогда $|\Lambda \cap (\mathbb{Z} \setminus \Lambda + \mathbf{z})| = L - (L - |z|) = |z|$.

Пусть неравенство (2) имеет место для значения d. Тогда, так как, в общем случае,

$$|\Lambda \cap (\mathbb{Z}^d \setminus \Lambda + \mathbf{z})| = L^d - \prod_{j=1}^{d} (L - |z_j|)\,,$$

то для значения $(d+1)$, для любой точки $\mathbf{z} = \langle z_1, ..., z_d, z_{d+1} \rangle$, имеем, согласно предположению индукции,

$$|\Lambda \cap (\mathbb{Z}^{d+1} \setminus \Lambda + \mathbf{z})| = L^{d+1} - \prod_{j=1}^{d+1} (L - |z_j|) =$$

$$= L\Big(L^d - \prod_{j=1}^{d}(L - |z_j|)\Big) + \Big(L\Big(\prod_{j=1}^{d}(L - |z_j|) - \prod_{j=1}^{d+1}(L - |z_j|)\Big) \le$$

$$\le dL^{d+1}\max\{|z_j|; j = 1, ..., d\} + \Big(\prod_{j=1}^{d}(L - |z_j|)\Big)(L - (L - |z_{d+1}|)) \le$$

$$\le dL^{d+1}\max\{|z_j|; j = 1, ..., d\} + L^d|z_{d+1}| \le (d+1)L^{d+1}\max\{|z_j|; j = 1, ..., d+1\}\,. \qquad \blacksquare$$

Сформулируем основной результат настоящего сообщения.

Теорема. *Имеет место следующая оценка*

$$\|\mathsf{H}_\Lambda[\mathbf{s}] - \tilde{\mathsf{H}}_\Lambda[\mathbf{s}]\| \le \frac{s^2 d}{2} L^{d-1} \sum_{\mathbf{x}\in 2\Lambda} |I(\mathbf{x})|\, \|\mathbf{x}\|_0\,. \tag{3}$$

□ Очевидны следующие неравенства

$$\|\mathsf{H}_\Lambda[\mathbf{s}] - \tilde{\mathsf{H}}_\Lambda[\mathbf{s}]\| \le \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{x}\in\Lambda,\\ \mathbf{y}\in\mathbb{Z}^d\setminus\Lambda}} |I(\mathbf{x}-\mathbf{y})| \Big|\Big(\mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathsf{P}_\Lambda\mathbf{y})\Big)\Big| \le \frac{s^2}{2} \sum_{\substack{\mathbf{x}\in\Lambda,\\ \mathbf{y}\in\mathbb{Z}^d\setminus\Lambda}} |I(\mathbf{x}-\mathbf{y})| =$$

$$= \frac{s^2}{2} \sum_{z\in\mathbb{Z}^d} |I(\mathbf{z})|\, |\Gamma(\mathbf{z};\Lambda)|\,, \tag{4}$$

где $\Gamma(\mathbf{z};\Lambda) = \{\langle\mathbf{x},\mathbf{y}\rangle : \mathbf{x}-\mathbf{y} = \mathbf{z}, \mathbf{x}\in\Lambda, \mathbf{y}\notin\Lambda\}$. Множество $\Gamma(\mathbf{z};\Lambda)$ пусто в том случае, когда $\mathbf{z}\notin 2\Lambda$. Если оно не пусто, то каждая пара, принадлежащая ему взаимно однозначно определяется точкой $\mathbf{x}\in\Lambda$ так, что $\mathbf{y} = \mathbf{x}-\mathbf{z}\in\Lambda$, то есть $\mathbf{x}\in(\mathbb{Z}^d\setminus\Lambda)+\mathbf{z}$. Следовательно, $\Gamma(\mathbf{z};\Lambda) = |\Lambda\cap(\mathbb{Z}^d\setminus\Lambda+\mathbf{z})|$. Теперь остается применить оценку (2). ■

Из полученной оценки (3) разности энергий следует, что для дальнодействующих взаимодействий таких, что $\mathsf{H}_\Lambda[\mathbf{s}]\in\mathcal{B}$, но для которых

$$\sum_{\mathbf{x}\in\mathbb{Z}^d} |I(\mathbf{x})|\, \|\mathbf{x}\|_0 = \infty\,,$$

эта разность возрастает быстрее, чем площадь поверхности кристалла, что и затрудняет использование в этом случае аппроксимации исходной системы соответствующей ей системой с периодическими граничными условиями. Тем не менее, справедливо

Следствие. *Если* $\mathsf{H}_\Lambda[\mathbf{s}]\in\mathcal{B}$, *то при термодинамическом предельном переходе имеет место*

$$\lim_{|\Lambda|\to\infty} \frac{1}{|\Lambda|} \|\mathsf{H}_\Lambda[\mathbf{s}] - \tilde{\mathsf{H}}_\Lambda[\mathbf{s}]\| = 0\,.$$

□ Так как $\mathsf{H}_\Lambda[\mathbf{s}] \in \mathcal{B}$, то $\sum_{\mathbf{x}\in\mathbb{Z}^d} |I(\mathbf{x})| < \infty$. Для функций $I(\cdot)$ такого типа имеет место

$$\lim_{L\to\infty} \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{x}\in\Lambda} I(\mathbf{x})\|\mathbf{x}\|_0 = 0\,.$$

В самом деле, выберем произвольное число $\varepsilon > 0$ и найдем такой размер L_ε, для которого

$$\sum_{\mathbf{x}\,:|\mathbf{x}|>L_\varepsilon} |I(\mathbf{x})| < \varepsilon\,.$$

Тогда

$$\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda} I(\mathbf{x})\|\mathbf{x}\|_0 = \sum_{\mathbf{x}\in\Lambda\,:|\mathbf{x}|>L_\varepsilon} |I(\mathbf{x})|\,\|\mathbf{x}\|_0 + \sum_{\mathbf{x}\in\Lambda\,:|\mathbf{x}|\le L_\varepsilon} |I(\mathbf{x})|\,\|\mathbf{x}\|_0\,.$$

Для оценки первой суммы используем неравенство $\|\mathbf{x}\|_0 < L$ и зафиксировав L_ε и поделив на L, перейдем к пределу $L \to \infty$. В результате, получим, что

$$\lim_{L\to\infty} \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{x}\in\Lambda} I(\mathbf{x})\|\mathbf{x}\|_0 \le \varepsilon\,.$$

Ввиду произвольности числа ε, получим требуемое. ■

Литература

1. Ruelle D. Statistical Mechanics, Rigorous Results / Ney York-Amsterdam: W.A.Benjamin, Inc., 1969. (Рюэль Д. Статистическая механика. Строгие результаты / М.: Мир, 1971.)
2. Ахиезер А.И., Барьяхтар В.Г., Пелетминский С.В. Спиновые волны / М.: Наука, 1967. – 368 с.
3. Stohr J., Siegmann H.C. Magnetism: From Fundamentals to Nanoscale Dynamics / Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2006. – P.290–293. – 821 p. – ISBN 978-3540302827.
4. de Lacheisserie E., Gignoux D., Schlenker M. Magnetism: Fundamentals, Vol. 1 / Springer, 2005. – P.315-317. – 507 p. – ISBN 9780387229676.
5. Вирченко Ю.П. К теории основного состояния обменной модели Гейзенберга // Проблемы теоретической физики / Киев: Наукова думка, 1991. – С.80-96.

ENERGY ESTIMATE OF VECTOR LATTICE MODEL WITH PERIODICAL BOUNDARY CONDITIONS

A.S. Klyuyev, Yu.P. Virchenko

Belgorod State University,
Pobedy St., 85, Belgorod, 308015, Russia, e-mail: virch@bsu.edu.ru

Abstract. Vector model with integrable pair exchange interaction in statistical mechanics of lattice systems is studied. For each phase state of finite crystal it is obtained an priori estimate of the model energy closeness to the energy of correspondent model with periodical boundary conditions in the case of long-range action.

Key words: vector model, hamiltonian, pair interaction, periodical boundary conditions.