

Я.Г. Грода, ассистент

## САМОСОГЛАСОВАННОЕ ДИАГРАММНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЛЯ МАГНИТНЫХ СИСТЕМ

The self-consistent diagram approximation is generalized for description the Ising's ferromagnetic model.

### 1. Введение

Решеточная модель ферромагнетика – модель Изинга – представляет собой правильную одно-, двух- либо трехмерную решетку, в каждом узле которой находится частица, обладающая внутренним магнитным моментом – спином  $s_i$ , причем  $|s_i|=1/2$ , и спин может быть ориентирован в двух противоположных направлениях – по и против внешнего магнитного поля. Принимается, что спины частиц взаимодействуют друг с другом и энергия их взаимодействия равна  $J_s s_i s_j$ , если узлы  $i$  и  $j$  являются ближайшими соседями, и 0 – в любом другом случае.

Такая модель была впервые предложена Ленцем в 20-х годах прошлого века в качестве простейшей модели ферромагнетика и детально исследована в одномерном случае Изингом [1]. Несмотря на свой "солидный" возраст, она остается актуальной до сегодняшнего дня. В теоретическом плане ее актуальность обусловлена тем, что в рамках этой модели в случае одно- и двухмерных решеточных систем может быть дано точное аналитическое решение задачи о фазовом переходе 2-го рода [2-5], а в практическом плане значение модели Изинга выросло в связи с последними разработками в области квантового компьютеринга, создании энергонезависимой оперативной памяти для ЭВМ и жестких дисков сверхвысоких емкостей.

Как известно, модель решеточного газа с взаимодействием ближайших соседей полностью эквивалентна модели магнетика Изинга [6,7]. При этом рассмотрению решеточного газа с притяжением между частицами отвечает рассмотрение ферромагнетика Изинга, а решеточного газа с отталкиванием – антиферромагнетика. Подобные аналогии могут быть также проведены между решеточным газом и моделью бинарного сплава, и, частично, двухкомпонентным решеточным газом и моделью Гейзенберга.

Эквивалентность моделей означает, что информация о равновесных свойствах, например, ферромагнетика Изинга может быть получена путем замены соответствующих переменных в выражениях для решеточного газа. Вместе с тем необходимо отметить, что такая замена переменных применима лишь для окончательных выражений, в то время как детали их получения для различных типов решеточных систем могут существенно различаться. В связи с этим представляет интерес обобщение диаграммных приближений, ранее развитых для случая однокомпонентного решеточного газа [8-10], на случай, например, ферромагнетика Изинга.

### 2. ОКХП и ССДП для модели Изинга

Рассмотрение решеточного газа в формализме канонического ансамбля эквивалентно рассмотрению модели Изинга в изотермически-изобарическом ансамбле [11], где роль давления играет намагниченность, а объема – внешнее магнитное поле. Статистическая сумма системы спинов в этом ансамбле записывается как

$$Z_N^I = \text{Sp}_{\{\sigma_1, \dots, \sigma_N\}} \{ \exp(-\beta U_N + \beta I N) \}, \quad (1)$$

где  $\text{Sp}_{\{\sigma_1, \dots, \sigma_N\}}$  обозначает суммирование по всем возможным спиновым конфигурациям на  $N$  – узловой решетке при удержании фиксированного значения намагниченности;  $U_N$  – потенциальная энергия модели во внешнем магнитном поле  $H$ :

$$U_N = -\frac{J}{4} \sum_{\langle mn \rangle} \sigma_i \sigma_j - \frac{mH}{2} \sum_i \sigma_i, \quad (2)$$

$$I = m \sum_{i=1}^N \sigma_i; \quad (3)$$

$m$  и  $I$  – магнитный момент одиночного атома и полный магнитный момент системы (намагниченность) соответственно;  $\sigma_i$  – спиновые переменные ( $\sigma_i = -1$  спин направлен "вниз",  $\sigma_i = 1$  спин направлен "вверх",  $\sigma_i = 2s_i$ ).

Первое суммирование в соотношении (2) проводится по всем парам ближайших соседей, а второе – по всем решеточным узлам.

Как и в случае решеточного газа, статистическая сумма модели может быть записана в следующем виде [8]:

$$Z_N^I = Z_N^{I(0)} \left\langle \prod_{i=1}^N \prod_{j=i+1}^N (1 + f_{ij}) \right\rangle_0, \quad (4)$$

где  $Z_N^{I(0)}$  – статистическая сумма базисной системы, задаваемой одночастичными средними потенциалами  $\varphi_j(\sigma_i)$ :

$$Z_N^{I(0)} = \left[ \prod_{\sigma_i = -1}^1 \left( \exp \left\{ -\beta \sum_{j=1}^N \varphi_j(\sigma_i) \right\} / \theta_{\sigma_i} \right)^{\theta_{\sigma_i}} \right]^N, \quad (5)$$

$$\theta_{+1} = \frac{n}{N}, \quad \theta_{-1} = \frac{N-n}{N}, \quad \theta_{+1} + \theta_{-1} = 1, \quad (6)$$

где  $n$  – полное число спинов, направленных "вверх", а перенормированные функции Майера определяются как

$$f_{ij}(\sigma_i, \sigma_j) = \exp \left[ -\beta (J \sigma_i \sigma_j - \varphi_j(\sigma_i) - \varphi_i(\sigma_j)) \right] - 1. \quad (7)$$

По аналогии со свободной энергией решеточного газа в расчете на один решеточный узел в рассмотрение может быть введен термодинамический потенциал  $\Phi_I$ :

$$\Phi_I = -\frac{k_B T}{N} \ln Z_N^{(I)} = -k_B T \left( \theta_{-1} \ln \frac{Q_{-1}}{\theta_{-1}} + \theta_{+1} \ln \frac{Q_{+1}}{\theta_{+1}} \right) + \Phi_I^{(d)}, \quad (8)$$

где

$$\Phi_I^{(d)} = -\frac{k_B T}{N} \ln \left\langle \prod_{i=1}^N \prod_{j=i+1}^N (1 + f_{ij}) \right\rangle \quad (9)$$

представляет собой диаграммную часть термодинамического потенциала  $\Phi_I$ , для которой, как и для диаграммной части свободной энергии, может быть проведено диаграммное разложение:

$$Q_{\sigma_i} = \exp \left[ -\beta \left( \sum_{j=1}^N \phi_j(\sigma_i) \right) \right]. \quad (10)$$

Поскольку выражение для термодинамического потенциала (8) является формально точным, для определения средних потенциалов может быть использован принцип минимальной восприимчивости потенциала к их вариации [12].

Как было показано [8,13], учет в разложении (8) только двухвершинных диаграмм приводит к ОКХП. В этом случае средние потенциалы базисной системы определяются из решения системы уравнений следующего вида:

$$X_i^{(k)} = \sum_{j=-1}^1 \frac{W_{ij}^{(k)} \theta_j}{X_j^{(k)}}, \quad i = -1, 1; \quad k = 1, 2, \dots, \quad (11)$$

где

$$W_{ij}^{(k)} = \exp(-\beta J_{ij}^{(k)} \sigma_i \sigma_j), \quad W_{1,1}^{(k)} = W_{-1,-1}^{(k)} = W_k, \quad W_{1,-1}^{(k)} = W_{-1,1}^{(k)} = W_k^{-1},$$

$$X_i^{(k)} = \exp(-\beta \phi^{(k)}(\sigma_i)). \quad (12)$$

Решение данной системы уравнений может быть без труда получено в явном виде:

$$X_i^{(k)} = \sqrt{\eta_k^{i+1} \left( \theta_{-1} + \frac{\theta_{+1}}{\eta_k} \right)}, \quad \eta_k = -\frac{\theta_{+1} - \theta_{-1}}{2\theta_{-1}W_k^2} + \sqrt{\left( \frac{\theta_{+1} - \theta_{-1}}{2\theta_{-1}W_k^2} \right)^2 + \frac{\theta_{+1}}{\theta_{-1}}}. \quad (13)$$

Для построения ССДП при определении средних потенциалов вторых соседей следует рассмотреть большее число диаграмм. Например, для модели Изинга с взаимодействием ближайших соседей на плоской квадратной решетке минимальный диаграммный ряд, необходимый для построения ССДП, состоит из 2-, 3- и 4-вершинных неприводимо связанных диаграмм, содержащих не более одной связи между вторыми соседями [14]:

$$\frac{F^{(d)}}{k_B T} = -2 \begin{array}{c} \bullet \\ \diagup \\ \bullet \end{array} - 4 \begin{array}{c} \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \quad \bullet \end{array} - 2 \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \quad \bullet \end{array} - \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \quad \bullet \quad \bullet \end{array}. \quad (14)$$

Использование принципа минимальной восприимчивости приводит к следующей системе уравнений для определения средних потенциалов вторых соседей [8,9]:

$$X_i^{(2)} = \sum_{j=-1}^1 \frac{W_{ij}^{(2)}}{X_j^{(2)}} (B_{ij} + 1)^2 \theta_j, \quad (15)$$

где

$$B_{ij} = \sum_{k=-1}^1 \frac{\theta_k W_{ik}^{(1)} W_{kj}^{(1)}}{X_i^{(1)} X_j^{(1)} (X_k^{(1)})^2} - 1. \quad (16)$$

Ее решение аналогично решению системы уравнений (11):

$$X_i^{(2)} = \sqrt{\eta_2^{i+1} \left( \theta_{-1} J_{-1,-1} + \frac{\theta_1}{\eta_2} J_{-1,1} \right)}, \quad (17)$$

$$\eta_2 = -\frac{\theta_1 - \theta_{-1}}{2\theta_{-1}} \frac{J_{-1,1}}{J_{-1,-1}} + \sqrt{\left( \frac{\theta_1 - \theta_{-1}}{2\theta_{-1}} \frac{J_{-1,1}}{J_{-1,-1}} \right)^2 + \frac{\theta_1}{\theta_{-1}} \frac{J_{1,1}}{J_{-1,-1}}}, \quad (18)$$

$$J_{ij} = W_{ij}^{(2)} (B_{ij} + 1)^2, \quad J_{ij} = J_{ji}. \quad (19)$$

При этом выражение для термодинамического потенциала принимает вид

$$\frac{\Phi_I}{k_B T} = \sum_{i=-1}^1 \theta_i \left( \ln \theta_i - \sum_{k=1}^2 z_k \ln X_i^{(k)} \right) + \sum_{j=-1}^1 \sum_{i=-1}^1 B_{ij}^2 \theta_i \theta_j. \quad (20)$$

Знание термодинамического потенциала позволяет определять любые равновесные характеристики системы. Так, например, величина внешнего магнитного поля может быть определена с помощью производной термодинамического потенциала по намагниченности:

$$H(I, T) = \left( \frac{\partial \Phi}{\partial I} \right)_T. \quad (21)$$

### 3. Результаты и их обсуждение

В таблице представлены значения критического параметра  $k_B T_c / J$  в приближении Брэгга – Вильямса (БВП), квазихимическом приближении (КХП) [15], приближениях корреляционного (КМПП) и самосогласованного корреляционного молекулярных полей (СКМПП) [16] и ССДП для двух- и трехмерных решеток различных типов. Результаты всех этих приближений могут быть сравнены с известными точными значениями этого параметра для 2D-систем либо с наилучшими его оценками для 3D-систем, полученными с помощью высокотемпературных разложений.

Таблица

Критический параметр  $k_B T_c / J$  для двух- и трехмерных решеток различных типов

Тип решетки	БВП	КМПП	КХП	ССКМПП	ССДП	Точное значение / его оценка
6-угольная	3	2.220	1.820	-----	1.673	1.51865
квадратная	4	3.312	2.885	2.595	2.624	2.26918
3-угольная	6	5.384	4.933	4.788	4.174	3.64095
кубическая	6	5.384	4.933	4.788	4.761	4.5103
оцк	8	7.416	6.952	6.853	6.679	6.3508
гцк	12	11.44	10.97	10.91	10.438	9.794

Как не трудно видеть из сопоставления результатов, использование ССДП позволяет значительно улучшить точность получаемых результатов. При этом получаемые с его помощью соотношения оказываются лишь незначительно сложнее аналогичных выражений, получаемых в КХП.

Для дальнейшего повышения точности получаемых результатов необходим учет дополнительных диаграмм. Эта стратегия может быть реализована с помощью коэффи-

циента  $\lambda$ , вводимого в диаграммную часть термодинамического потенциала (20) следующим образом [13]:

$$\frac{\Phi_I}{k_B T} = \sum_{i=-1}^1 \theta_i \left( \ln \theta_i - \sum_{k=1}^2 z_k \ln X_i^{(k)} \right) + \lambda \sum_{j=-1}^1 \sum_{i=-1}^1 B_{ij}^2 \theta_i \theta_j \quad (22)$$

и определяемого из условия равенства температуры Кюри ее точному значению или наилучшей ее оценке, т.е. из решения уравнения

$$H(0, T_c) = 0, \quad (23)$$

которое имеет смысл условия равенства нулю спонтанной намагниченности системы, находящейся в нулевом магнитном поле при критической температуре. В случае плоской квадратной решетки найденный таким образом коэффициент  $\lambda$  оказывается равным 0.2606.

На рисунке проведено сравнение фазовых диаграмм ферромагнетика Изинга в нулевом магнитном поле, полученных с помощью КХП, приближения Кикучи [17], ССДП с точным решением Янга [3]. Это сравнение показывает, что результаты ССДП отличаются от точного решения незначительно, что свидетельствует о высокой точности данного приближения.

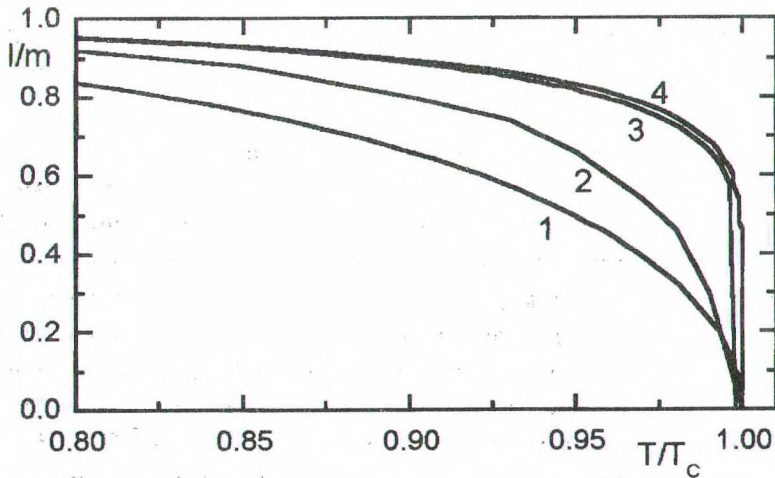


Рис. Фазовая диаграмма ферромагнетика Изинга на квадратной решетке: 1 – КХП [15]; 2 – приближение Кикучи [17]; 3 – ССДП и 4 – точное решение Янга [3]

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Ising E. // Zs. f. Phys. 1925. Vol. 31. – P. 253.
2. Osager L. // Phys. Rev. 1944. Vol. 65. – P. 117.
3. Yang C.N. // Phys. Rev. 1952. Vol. 85. – P. 808.
4. Potts R.B. // Phys. Rev. 1952. Vol. 88. – P. 352.
5. Naya S. // Prog. Theor. Phys. 1954. Vol. 11. – P. 53.
6. Хилл Т. Статистическая механика. – М.: ИЛ, 1960. – 486 с.
7. Хуанг К. Статистическая механика. – М.: Мир, 1966. – 520 с.
8. Bokun G.S., Groda Y.G., Belov V.V., Uebing C., Vikhrenko V.S. // Eur. Phys. J. B. 2000. Vol. 15. – P. 297.

9. Argyrakis P., Groda Ya.G., Bokun G.S., Vikhrenko V.S. // Phys. Rev. E. 2001. Vol. 64. – P. 066108-1.
10. Vikhrenko V.S., Groda Ya.G., Bokun G.S. // Phys. Let. A. 2001. Vol. 286. – P. 127.
11. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. – М.: Наука, 1971. – 416 с.
12. Ротт Л.А. Статистическая теория молекулярных систем. – М.: Наука, 1979. – 280 с.
13. Бокун Г.С., Вихренко В.С., Убинг К. // Труды БГТУ. 1998. Вып. 6, сер. IV. – С. 28.
14. Грода Я.Г. // Труды БГТУ. 1999. Вып. 7, сер. IV. – С. 41.
15. Domb C. // Adv. Phys. 1960. Vol. 9. – P. 149.
16. Wysin G.M., Kaplan J. // Phys. Rev. E. 2000. Vol. 61. – P. 6399.
17. Kikuchi R. // Progr. Theor. Phys. Suppl. 1994. № 115 – P. 1.

УДК 536.758

В.В. Белов, доцент; В.Б. Немцов, профессор

### ВЛИЯНИЕ КУЛОНОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ОРИЕНТАЦИОННУЮ УПРУГОСТЬ МОЛЕКУЛЫ ДНК

In the framework of the liquid crystalline model of DNA molecule the calculation of the orientational elasticity is carried out with accounting the Coulomb interaction between the structural elements of this molecule.

Объединение микроскопического описания жидкокристаллической модели ДНК с электростатической связано с чрезвычайно большими трудностями, определяемыми дальнедействующим характером кулоновского взаимодействия и большим числом степеней свободы структурных элементов. Для изотропной среды с проблемой дальнедействия удастся справиться, как это было, например, показано в работах [1,2], в не-изотропном же случае даже вид уравнений для кулоновской части неизвестен. Поэтому в данной работе предлагается некоторый упрощенный вариант описания такой системы, позволяющий хоть в какой-то степени учесть влияние электростатического взаимодействия на жидкокристаллические свойства молекулы ДНК, в частности на ориентационную упругость, характеризуемую соответствующими модулями. При этом используются идеи разработанной ранее статистической теории и расчетные формулы для упомянутых модулей [3,7]. Развитый в указанной работе подход ориентирован на чистые системы, поэтому заряженные объекты молекулы ДНК будем рассматривать как однокомпонентную систему на компенсирующем фоне, а растворитель будем учитывать лишь с помощью диэлектрической проницаемости  $\epsilon_d$ . Тогда уравнение для одночастичного потенциала средних сил, определяющего унарную функцию распределения, будет иметь вид (см. [1])

$$\beta\varphi(1) = -\frac{\rho}{Q} \int d2 \left\{ \exp\left[-\beta\left(\Phi^s(1,2) + \Phi^c(1,2) + \omega(1,2)\right)\right] - 1 \right\} \exp[-\beta\varphi(2)], \quad (1)$$

где  $\Phi^s$ ,  $\Phi^c$  – короткодействующая и кулоновская составляющие межчастичного взаимодействия,  $\omega$  – неприводимая часть двухчастичного потенциала средних сил,  $\rho$  – плотность,  $\beta = 1/k_B T$ ,