05,11

# Приближенный учет спиновых корреляций в модели Изинга

© С.В. Сёмкин, В.П. Смагин

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса,
Владивосток, Россия

E-mail: Li15@rambler.ru

Поступила в Редакцию 3 марта 2021 г.
В окончательной редакции 6 апреля 2021 г.
Принята к публикации 10 апреля 2021 г.

Найдены выражения для средних значений произведений трех соседних спинов в модели Изинга на решетках с координационными числами 3 и 4 как функции температуры и спонтанной намагниченности. С помощью этих выражений сопоставляется точное решение для модели Изинга на квадратной решетке и решения, найденные приближенными методами. Предложен способ улучшения приближенных методов, применимый, в частности, к приближению Бете или к приближению среднего поля, и приводящий к более точным значениям критической температуры и к изменению критического показателя температурной зависимости спонтанной намагниченности.

**Ключевые слова:** модель Изинга, спиновые корреляции, критические показатели.

DOI: 10.21883/FTT.2021.08.51158.043

## 1. Введение

Эффективным инструментом анализа систем многих взаимодействующих частиц, таких как магнетики, являются простые решеточные модели, например, модель Изинга, модель Поттса или модель Гейзенберга [1]. Несмотря на то что эти модели используются в статистической физике фазовых переходов уже очень давно, многие связанные с ними задачи до сих пор остаются актуальными. В частности, модели Изинга (которая давно используется не только в теории магнетизма [3,4]) и в последнее время посвящено очень большое количество научных работ [5–9]. Подробный обзор [2] содержит обширную библиографию, включающую как ставшие классическими, так и современные научные работы, посвященные модели Изинга и моделям аналогичного типа. К сожалению, эффективность решеточных моделей ограничена, как правило, невозможностью получить точное решение в подавляющем большинстве нетривиальных случаев. Известное решение Онзагера для двумерной модели Изинга на квадратной решетке [1] в отсутствии внешнего поля является одним из редких исключений из этого правила. Однако точные решения имеют важное значение как для исследования самих фазовых переходов, так и для оценки точности приближенных методов решения. Точные результаты, полученные, например, для модели Изинга, могут быть использованы для оценки эффективности алгоритмов численного моделирования фазовых переходов в магнетиках [6,7]. Поэтому получение точных результатов для модели Изинга или для других решеточных моделей представляется вполне актуальной задачей.

Существует, конечно, и большое количество приближенных методов решения модели Изинга — метод среднего поля, приближение Бете и разного рода их обобщения [1–6,10]. Решения, полученные этими методами, дают различные (как правило завышенные) оценки для температуры Кюри и обладают рядом общих черт, объединяющих их между собой и отличающих от точного решения Онзагера. А именно, критические показатели решений, полученных приближенными методами имеют так называемые „классические“ значения, в частности критический показатель температурной зависимости спонтанной намагниченности вблизи температуры Кюри равен 1/2 [1], в то время как в решении Онзагера он равен 1/8 [1]. Одной из причин этого различия является то обстоятельство, что в любой реальной решетке с координационным числом $q > 2$ существует бесконечно много различных путей, соединяющих любые два узла решетки, а в приближенных методах используется, как правило, конечное (и небольшое) число таких путей [9]. Поэтому спиновые корреляции в реальных решетках имеют большее значение, чем это учитывается в приближенных методах. В настоящей работе мы нашли точные выражения, связывающие некоторые спиновые корреляции в модели Изинга для решетки с координационным числом $q = 4$ с величиной спонтанной намагниченности для этой решетки. Показано, что определенные допущения в отношении этих корреляций ведут к различным приближенным способам определения намагниченности, причем некоторые из них могут иметь не классический критический показатель температурной зависимости спонтанной намагниченности. С помощью выражений, связывающих намагниченность и корреляции, мы вычислили спиновые корреляции для квадратной решетки (используя решение Онзагера), для решетки Бете (используя приближения Бете), а также построили корреляции, используя выражения для намагниченности, найденные некоторыми приближенными методами.

Сравнение точных корреляций с приближенными подсказывает способ искусственной „коррекции“ приближенных спиновых корреляций, приводящий к модификации исходного приближенного решения. Оказывается, что модифицированные таким путем решения имеют не классический критический показатель температурной зависимости спонтанной намагниченности, а температуры Кюри становятся значительно ближе к известным точным значениям.

## 2. Усреднение по обменным полям и спиновые корреляции

Рассмотрим модель Изинга на некоторой решетке. Пусть в каждом узле решетки содержится изинговский „спин“ принимающий значения $+1$ и $-1$, а взаимодействуют только спины, находящиеся в связанных узлах. Обозначим $\Omega$ множество всех этих спинов, а гамильтониан системы $\mathscr{H}(\Omega)$. Тогда

$$\mathscr{H}(\Omega) = -J\sum_{(i,j)}\sigma_i\sigma_j - H_{ex}\sum_i \sigma_i. \tag{1}$$

суммирование в первой сумме проводится по всем парам связанных спинов, во второй — по всем узлам, $J$ — энергия обменного взаимодействия, $H_{ex}$ — внешнее поле.

Рассмотрим некоторый спин $\sigma_0$. Пусть $h = \sum_{i=1}^{q}\sigma_i$ — сумма значений спинов, непосредственно взаимодействующих с $\sigma_0$ (спинов первой координационной сферы). Будем называть эту сумму „полем взаимодействия“ и пусть $f(h)$ — некоторая функция этого поля. Тогда, как показано в работе [11], термодинамическое среднее значение произведения $f(h)\sigma_0$ равно

$$\langle f(h)\sigma_0\rangle = \sum_h f(h)\,\mathrm{th}(Kh + h_{ex})W(h), \tag{2}$$

где $K = J/kT$ и $h_{ex} = H_{ex}/kT$, $k$ — постоянная Больцмана, а усреднение производится по функции распределения поля взаимодействия $W(h)$.

Для модели Изинга на простой решетке с координационным числом $q$, поле взаимодействия $h$ может принимать только дискретные значения $h_i = q - 2i$, $i = 0,\dots q$. Среднее значение любого спина решетки одинаково и равно $M$ — средней намагниченности в системе. При отсутствии внешнего поля из (2) при $f(h) = h^n$ получим

$$\langle h^n\sigma_0\rangle = \sum_i h_i^n\,\mathrm{th}(Kh_i)W(h_i). \tag{3}$$

Пусть $n = 2p$ — четное целое число. Тогда из (3) получим

$$\langle h^{2p}\sigma_0\rangle = \sum_{i=0}^{n(q)} X_i(q-2i)^{2p}\,\mathrm{th}\big(K(q-2i)\big), \tag{4}$$

где $X_i = W(h_i) - W(-h_i)$, а $n(q) = \left[\frac{q-1}{2}\right]$ — целая часть $\frac{q-1}{2}$.

Кроме того, усреднив по функции распределения $W(h_i)$ значение $h^{2p+1}$, получим

$$\langle h^{2p+1}\rangle = \sum_{i=0}^{n(q)} X_i(q-2i)^{2p+1}. \tag{5}$$

Выражения (4)−(5) дают возможность определить некоторые спиновые корреляции в модели Изинга на простых решетках с координационными числами 3 и 4. Рассмотрим решетку с $q = 4$. В этом случае в (4)−(5) остаются слагаемые, содержащие только $X_0$ и $X_1$. Выражение (5) при $p = 0$ дает среднее значение $h$, равное $4M$:

$$4M = 4X_0 + 2X_1,$$

а выражение (4) при $p = 0$ дает среднее значение $\sigma_0$, равное $M$:

$$M = X_0\,\mathrm{th}(4K) + X_1\,\mathrm{th}(2K),$$

откуда

$$X_0 = \frac{2\,\mathrm{th}(2K) - 1}{2\,\mathrm{th}(2K) - \mathrm{th}(4K)}\,M$$

и

$$X_1 = \frac{2\big(1 - \mathrm{th}(2K)\big)}{2\,\mathrm{th}(2K) - \mathrm{th}(4K)}\,M. \tag{6}$$

Возьмем теперь в (5) $p = 1$. Возведем в третью степень поле взаимодействия $h = \sum_{i=1}^{4}\sigma_i$ и обозначим $S_3 = \langle\sigma_i\sigma_j\sigma_k\rangle$, где $i, j, k$ различны. (Мы полагаем, что $S_3$ не зависит от конкретного выбора $i, j, k$, что, в частности, верно для изотропной модели Изинга на квадратной или тетраэдрической решетках.) Тогда из (5) получим

$$S_3 = X_0 - \frac{1}{2}X_1 = \frac{\big(\mathrm{th}(4K) + 2\,\mathrm{th}(2K)\big) - 2}{2\,\mathrm{th}(2K) - \mathrm{th}(4K)}\,M. \tag{7}$$

Величину $S_3 - M^3$ (или саму $S_3$) можно рассматривать как меру коррелированности любых трех спинов первой координационной сферы. Выражение (7) позволяет вычислить зависимость $S_3$ от температурного параметра $K$ если известна зависимость спонтанной намагниченности от этого параметра. В частности, для модели Изинга на квадратной решетке в отсутствии внешнего поля известно точное решение, полученное Онзагером и Янгом [12,13]:

$$M^8 = 1 - \frac{1}{\mathrm{sh}^4(2K)}. \tag{8}$$

Подставляя $M$, выраженное из (8) в (7) получим точное значение $S_3(K)$ для квадратной решетки

$$S_3(K) = \frac{\big(\mathrm{th}(4K) + 2\,\mathrm{th}(2K)\big) - 2}{2\,\mathrm{th}(2K) - \mathrm{th}(4K)}\left(1 - \frac{1}{\mathrm{sh}^4(2K)}\right)^{1/8}. \tag{9}$$

Если в (7) подставить выражение для спонтанной намагниченности $M(K)$ найденное в приближении Бете для

$q = 4$, то полученное выражение для $S_3(K)$ можно рассматривать как точное для решетки Бете [1], поскольку приближение Бете можно интерпретировать как точное решение для этой решетки [1].

С другой стороны, само выражение (7) можно рассматривать как основу для приближенной оценки спонтанной намагниченности $M(K)$. Если полностью пренебречь тройной корреляцией спинов и считать $S_3 = M^3$, получим приближенное выражение для $M(K)$

$$M^2 = \frac{\big(\mathrm{th}(4K) + 2\,\mathrm{th}(2K)\big) - 2}{2\,\mathrm{th}(2K) - \mathrm{th}(4K)}. \tag{10}$$

Как нетрудно показать, именно такое выражение для $M(K)$ получится при использовании приближенной биноминальной функции распределения по полям взаимодействия [14].

Из равенства (4) при $p = 1$ можно аналогичным образом определить величину $S_{03} = \langle \sigma_i \sigma_j \sigma_0 \rangle$ — среднее значение произведения центрального спина и двух различных спинов из первой координационной сферы. Для тетраэдрической решетки $S_{03}$ не зависит от выбора $i$ и $j$, а для плоской квадратной решетки $S_{03}$ определим как результат дополнительного усреднения по вариантам выбора двух спинов из первой координационной сферы. Тогда

$$S_{03} = X_0\,\mathrm{th}(4K) = \frac{\big(2\,\mathrm{th}(2K) - 1\big)\,\mathrm{th}(4K)}{2\,\mathrm{th}(2K) - \mathrm{th}(4K)}\,M. \tag{11}$$

Это выражение, как и (7), можно использовать как для нахождения точного значения $S_{03}$, так и для приближенной оценки $M(K)$, пренебрегая соответствующей тройной корреляцией, то есть приравнивая $S_{03}$ величине $M^3$.

Если подставить в формулу (4) $p = 2$, можно найти $S_5 = \langle \sigma_0 \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \rangle$ — среднее по ансамблю значение произведения центрального спина $\sigma_0$ и всех четырех его ближайших соседей.

$$\begin{aligned} S_5 &= X_4\,\mathrm{th}(4K) - X_2\,\mathrm{th}(2K) \\ &= \frac{4\,\mathrm{th}(2K)\,\mathrm{th}(4K) - \big(\mathrm{th}(4K) + 2\,\mathrm{th}(2K)\big)}{2\,\mathrm{th}(2K) - \mathrm{th}(4K)}\,M. \end{aligned} \tag{12}$$

Как и выражения (7) и (11), с помощью выражения (12) можно найти точное значение среднего $S_5$ если известно выражение для спонтанной намагниченности как функции температурного параметра $K$. Кроме того, можно аналогично предыдущим случаям, приближенно считать $S_5 = M^5$, откуда получим

$$M^4 = \frac{4\,\mathrm{th}(2K)\,\mathrm{th}(4K) - \big(\mathrm{th}(4K) + 2\,\mathrm{th}(2K)\big)}{2\,\mathrm{th}(2K) - \mathrm{th}(4K)}. \tag{13}$$

В приближении (13) спонтанная намагниченность $M$ обращается в ноль при $K = K_c$, где, как нетрудно показать $\mathrm{th}(2K_c) = 2 - \sqrt{2}$, $K_c \approx 0.336$. Это значение $K_c$ несколько ближе к точным значениям для тетраэдрической (0.370) и квадратной (0.441) решеток, чем значения, полученные из приближений $S_3 = M^3$ (0.324) и $S_{03} = M^3$ (0.275). Но более интересной особенностью приближения (13) является то, что вблизи $K_c$, как видно из (13), $M \sim (K - K_c)^{1/4}$, т.е. критический показатель температурной зависимости спонтанной намагниченности равен 1/4, что отличается от классического значения 1/2.

Аналогичные выкладки можно проделать и для решеток с координационным числом $q = 3$, получив выражения средних значений спиновых произведений через температуру и спонтанную намагниченность

$$S_3 = \frac{3\big(\mathrm{th}(K) + \mathrm{th}(3K)\big) - 4}{3\,\mathrm{th}(K) - \mathrm{th}(3K)}\,M,$$

$$S_{03} = \frac{4\,\mathrm{th}(3K)\,\mathrm{th}(K) - \mathrm{th}(K) - \mathrm{th}(3K)}{3\,\mathrm{th}(K) - \mathrm{th}(3K)}\,M.$$

## 3. Модификация приближенных методов по спиновым корреляциям

Вычисленные в предыдущем пункте средние значения (7) и (11) можно, в частности, использовать для оценки эффективности приближенных методов решения модели Изинга. Введем функции $R(M)$ и $R_0(M)$ следующим образом:

$$R_0(M) = \frac{S_{03} - M^3}{M} \quad \text{и} \quad R(M) = \frac{S_3 - M^3}{M}.$$

Эти функции (которые в дальнейшем будем называть „коррелянты") можно рассматривать как меру коррелированности значений некоторого спина в решетке и двух его соседей $(R_0(M))$ или же трех спинов, соседних к одному узлу $(R(M))$. Для квадратной решетки $(q = 4)$ эти функции, согласно (7) и (11), равны

$$\begin{aligned} R_0(M) &= \frac{\big(2\,\mathrm{th}(2K) - 1\big)\,\mathrm{th}(4K)}{2\,\mathrm{th}(2K) - \mathrm{th}(4K)} - M^2 \\ &= 1 - \left(\frac{1 - x}{x}\right)^2 - M^2 \end{aligned} \tag{14}$$

и

$$\begin{aligned} R(M) &= \frac{\big(\mathrm{th}(4K) + 2\,\mathrm{th}(2K)\big) - 2}{2\,\mathrm{th}(2K) - \mathrm{th}(4K)} - M^2 \\ &= 1 - \frac{1}{x}\left(\frac{1 - x}{x}\right)^2 - M^2, \end{aligned} \tag{15}$$

где $x = \mathrm{th}(2K)$. Соотношения (14) и (15) позволяют найти $R_0(M)$ и $R(M)$ если известна спонтанная намагниченность как функция температуры $M = M(x)$ (точнее, обратная функция $x = x(M)$). Однако эти же соотношения можно использовать в „обратном направлении" — если из каких-либо соображений найдены выражения для коррелянтов $R_0(M)$ или $R(M)$ как функции спонтанной намагниченности $M$, то из (14) и (15) можно найти спонтанную намагниченность как функцию температуры.

Для точного решения модели Изинга на квадратной решетке (8)

$$M^8 = 1 - \frac{1}{\mathrm{sh}^4 2K} = 1 - \left(\frac{1-x^2}{x^2}\right)^2, \tag{16}$$

откуда $x = 1/\sqrt{1+\sqrt{1-M^8}}$.

Используя это решение, из (14) и (15) получим точные значения коррелянтов $R_0(M)$ и $R(M)$ для квадратной решетки в отсутствии внешнего поля.

Пусть теперь есть некоторое приближенное решение для модели Изинга на квадратной решетке, определяющее приближенное значение спонтанной намагниченности как функцию температурного параметра $x$. Представ это решение в виде обратной функции $x = \chi(M^2)$ и используя его в (14) и (15) можно получить приближенные значения спиновых коррелянтов $\tilde{R}_0(M)$ и $\tilde{R}(M)$ соответствующих данному решению. (Мы полагаем, что $x$ является функцией $M^2$, поскольку при отсутствии внешнего поля гамильтониан модели Изинга симметричен относительно одновременного изменения знаков всех спинов. Поэтому, если в приближенном решении учитывается это обстоятельство, каждому значению параметра $x$ соответствует два значения спонтанной намагниченности: $+M$ и $-M$, а значит $x$ является четной функцией $M$.) Как уже было сказано во Введении, в приближенных методах обычно недооценивается влияние корреляций и поэтому мы ожидаем, что значения $\tilde{R}_0(M)$ и $\tilde{R}(M)$ будут меньше точных значений, вычисленных по (16). В частности, значения этих функций при $M = 0$ должны быть меньше соответствующих точных значений. Как видно из (14) и (15), $R_0(0)$ и $R(0)$ являются монотонно возрастающими функциями $x$. Поэтому, чем меньше значения $R_0(0)$ и $R(0)$, тем меньше критическое значение температурного параметра $K_c$, т.е. оценка температуры Кюри $T_c = 1/K_c$ в приближенных решениях оказывается завышенной именно по причине недооценки спиновых корреляций.

Значение функции $x = \chi(M^2)$ при $M = 0$ определяет критическое значение температурного параметра $x = \mathrm{th}(2K)$ то есть температуру Кюри, а критический показатель температурной зависимости спонтанной намагниченности определяется разложением этой функции в ряд по степеням $M^2$ — если первый ненулевой член такого разложения имеет порядок $M^{2n}$, то критический показатель равен $1/2n$.

Рассмотрим в качестве примера приближение Бете [1] и его обобщение на некоторый класс рекурсивных решеток [15]. Как показано в работе [14], приближение Бете можно рассматривать как своего рода ренормгрупповое преобразование от единичного узла решетки с координационным числом к димеру на той же решетке, т.е. рассмотрим кластер, состоящий из одного атома, находящегося в кристаллическом поле $h_1$. Средняя намагниченность этого атома равна

$$m_1(h_1) = \mathrm{th}(Kh_1). \tag{17}$$

Кроме того, рассмотрим кластер из двух соседних атомов (димер), находящихся в кристаллическом поле $h_2$. Средняя намагниченность атома такого кластера

$$m_2(h_2) = \frac{\mathrm{sh}(2Kh_2)}{\mathrm{ch}(2Kh_2) + e^{-2K}}. \tag{18}$$

Спонтанная намагниченность в приближении Бете находится приравниванием правых частей (21) и (22)

$$M = m_1(h_1) = m_2(h_2) \tag{19}$$

при дополнительном условии $\frac{h_2}{h_1} = \frac{q-1}{1}$ [14]. Такая „ренормгрупповая“ трактовка приближения Бете подсказывает естественное обобщение [15]: помимо димера можно рассмотреть более сложный кластер на решетке, например, циклический кластер, состоящий из $N$ атомов, находящихся в кристаллическом поле $h_N$. Величину $N$ можно взять равной количеству узлов, содержащемся в кратчайшем замкнутом пути на данной решетке, например, для квадратной решетки $N = 4$, для шестиугольной $N = 6$ и т.д. Средняя намагниченность атома такого кластера

$$m_N(h_N) = \frac{\lambda_1^N - \lambda_2^N}{\lambda_1^N + \lambda_2^N} \frac{e^K \,\mathrm{sh}(Kh_N)}{\sqrt{e^{2K}\,\mathrm{sh}^2(Kh_N) + e^{-2K}}}, \tag{20}$$

где $\lambda_{1,2} = e^K \,\mathrm{ch}(Kh_N) \pm \sqrt{e^{2K}\,\mathrm{sh}^2(Kh_N) + e^{-2K}}$. Приравнивая теперь правые части (17) и (20) при дополнительном условии $\frac{h_N}{h_1} = \frac{q-2}{q}$ и правые части (18) и (20) при условии $\frac{h_N}{h_2} = \frac{q-2}{q-1}$, получим, аналогично (19), два приближения, улучшающие приближение Бете и которые будем называть „кластерными приближениями $1-N$ и $2-N$“. (В работе [15] показано, что для некоторых значений $q$, эти приближения можно понимать как точные решения для определенным образом построенных рекурсивных решеток.) Нетрудно показать, что и приближение Бете, и его кластерные улучшения имеют критический показатель температурной зависимости спонтанной намагниченности равный 1/2.

На рис. 1 приведены графики коррелянта $R_0(M)$ (кривая *1*) и его приближенных значений $\tilde{R}_0(M)$ в приближении Бете (кривая *2*) и в кластерных приближениях $1-N$ и $2-N$ (кривые *3* и *4* соответственно) вычисленные для $q = 4$. Видно, что для всех приближений значения коррелянтов при любом $M$ меньше точных значений, найденных по (16) (кривые *1*), что подтверждает высказанное выше предположение. Аналогично ведет себя коррелянт $R(M)$ и его приближенные значения $\tilde{R}(M)$.

Поведение этих функций наводит на мысль о возможности улучшения приближенных методов расчета спонтанной намагниченности путем модификации соответствующих коррелянтов. А именно, задавшись некоторым приближенным решением $x = \chi(M^2)$, вычислим для

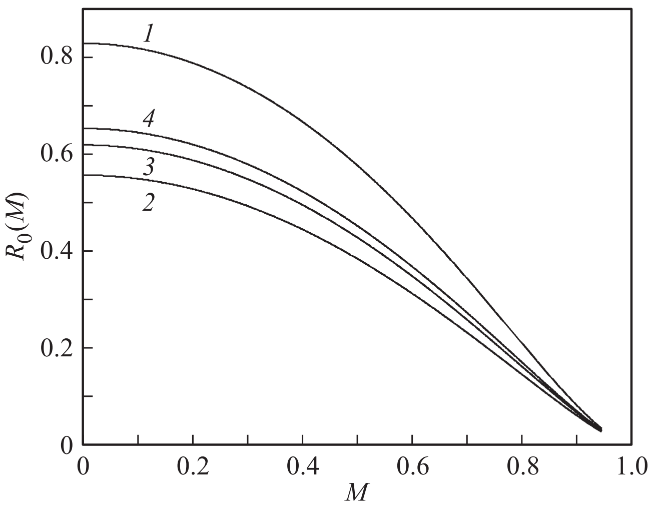


**Рис. 1.** Коррелянт $R_0(M)$ как функция спонтанной намагниченности $M$ для квадратной решетки. Кривая *1* — точное значение, кривая *2* — приближение Бете, кривые *3* и *4* — кластерные приближения $1-N$ и $2-N$ соответственно.

него, например, коррелянт $\tilde{R}_0(M)$ (14), а затем умножим его на „модифицирующий полином" $P(M^2)$, зависящий только от четных степеней $M$ и имеющий максимальную степень $2n$

$$P(M^2) = A_0 + A_1M^2 + A_1M^4 + \dots + A_nM^{2n}. \qquad (21)$$

Полученный таким образом коррелянт будем называть „модифицированным". Подставим теперь модифицированный коррелянт в левую часть формулы (14) и решим полученное уравнение относительно $M$. Это решение и есть модифицированная спонтанная намагниченность как функция температуры, т.е. модифицированная спонтанная намагниченность как функция температурного параметра $x = \mathrm{th}(2K)$ находится, согласно (14), из условия

$$F_0(x) = P(M^2)F_0\big(\chi(M^2)\big) - \big(P(M^2) - 1\big)M^2, \qquad (22)$$

где

$$F_0(x) = 1 - \left(\frac{1-x}{x}\right)^2.$$

Найденное таким путем решение будет, конечно, зависеть от максимальной степени и коэффициентов модифицирующего полинома (21). Поэтому, окончательный расчет модифицированной намагниченности зависит от способа, которым определяются коэффициенты (21).

Один из таких способов заключается в следующем. Разложим правую часть (22) в ряд по степеням $\mu = M^2$:

$$F_0(x) = a_0 + a_1\mu + a_2\mu^2 \dots \qquad (23)$$

Члены этого разложения зависят от коэффициентов модифицирующего полинома (21) и исходного приближенного решения $\chi(M^2)$. Предположим, что критический показатель температурной зависимости спонтанной намагниченности для этого решения равен 1/2, т.е. $\chi'(0) \neq 0$. Если теперь потребовать, чтобы в разложении (23) коэффициент $a_1$ обращался бы в ноль, то в модифицированном решении критический показатель температурной зависимости станет равным 1/4. Одновременное обращение в ноль коэффициентов $a_1$ и $a_2$ даст модифицированное решение с критическим показателем 1/6 и т.д. Коэффициент $a_0$ определяет значение $x$, при котором $M$ обращается в ноль, т.е. температуру Кюри модифицированного решения. Самый простой вариант этого способа получится если в полиноме (21) оставить только константу $A_0$. Тогда в разложении (23)

$$a_0 = A_0F_0\big(\chi(0)\big) \quad \text{и} \quad a_1 = 1 - A_0\Big(1 - F_0'\big(\chi(0)\big)\chi'(0)\Big).$$

Приравнивая теперь, в соответствии с вышесказанным, значение $a_1$ к нулю, получим

$$A_0 = 1/\Big(1 - F_0'\big(\chi(0)\big)\chi'(0)\Big). \qquad (24)$$

т.е. связь между $x = \mathrm{th}(2K)$ и спонтанной намагниченностью $M$ для модифицированного решения определяется условием

$$1 - \left(\frac{1-x}{x}\right)^2 = A_0\left(1 - \left(\frac{1-\chi(M^2)}{\chi(M^2)}\right)^2\right) - (A_0 - 1)M^2, \qquad (25)$$

где, согласно (24)

$$A_0 = \frac{\chi^3(0)}{\chi^3(0) - 2\big(1 - \chi(0)\big)\chi'(0)}. \qquad (26)$$

Критическое значение температурного параметра $K_c$ находится из условия $\mathrm{th}(2K_c) = (1 + \sqrt{1 - a_0})^{-1}$.

Для приближения Бете при $q = 4$ из (17)–(18) нетрудно вычислить $\chi(0) = 3/5$, $\chi'(0) = 2/25$. Используя эти значения, найдем модифицированное значение $K_c \approx 0.420$, что ближе к получаемому из (21) точному значению 0.441, чем значение 0.347, которое дает не модифицированный метод Бете. На рис. 2 показаны графики спонтанной намагниченности как функции $K$ найденные в приближении Бете (кривая *2*) и в приближении Бете, модифицированном по коррелянту $R_0(M)$ в соответствии с (25)–(26). Кривая *1* на этом рисунке — точное значение $M(K)$ вычисленное по (16).

В выражениях (25)–(26) в качестве исходного можно взять и более простое приближение, чем приближение Бете, а именно — приближение среднего поля [1]. Для этого приближения при $q = 4$

$$\chi(M^2) = \mathrm{th}\left(\frac{1}{2M}\,\mathrm{arcth}\,(M)\right). \qquad (27)$$

Отсюда

$$\chi(0) = \frac{e-1}{e+1}, \quad \chi'(0) = \frac{2e}{3(e+1)^2}$$

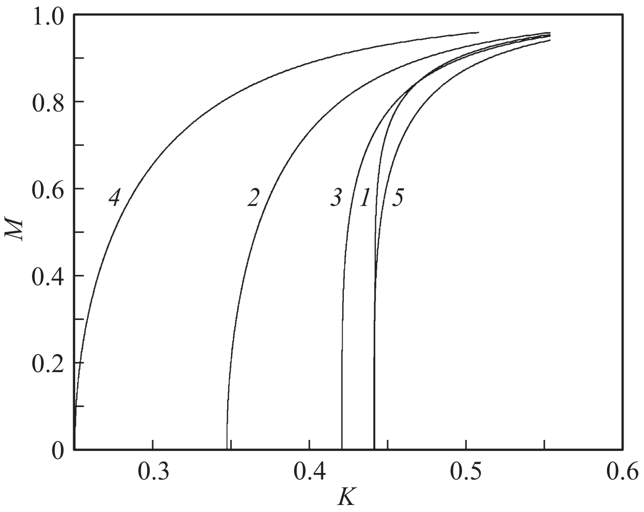


**Рис. 2.** Спонтанная намагниченность $M$ как функция температурного параметра $K = \frac{J}{kT}$ для модели Изинга на квадратной решетке. Кривая *1* — точное значение, кривая *2* — приближение Бете, кривая *4* — приближение среднего поля. Кривые *3* и *5* — модифицированные приближения Бете и среднего поля соответственно.

и

$$\mathrm{th}(2K_c) = (1 + 2/\sqrt{2e^2+1})^{-1}.$$

Численно $K_c \approx 0.440$. На рис. 2 показаны графики спонтанной намагниченности как функции $K$ в приближении среднего поля (кривая *4*) и модифицированном приближении среднего поля (кривая *5*).

Подобным образом можно произвести модификацию кластерных приближений $1 - N$ и $2 - N$ по коррелянту $R_0(M)$, а также модификацию всех приближений по коррелянту $R(M)$.

## 4. Заключение

Таким образом, в настоящей работе получены следующие результаты. С помощью метода усреднения по обменным полям [11] было показано, что для модели Изинга на решетках с координационными числами 3 и 4 средние значения произведений трех соседних спинов в отсутствии внешнего поля прямо пропорциональны спонтанной намагниченности и вычислены коэффициенты этой пропорциональности, зависящие только от температуры. Для квадратной решетки эти выражения позволяют найти точные значения спиновых средних, используя известное точное решение Онзагера.

По полученным выражениям можно также построить приближенные значения спиновых средних (или связанных с этими средними коррелянтов $R_0(M)$ и $R(M)$) если для температурной зависимости спонтанной намагниченности использовать значения, найденные приближенными методами. Показано, что приближение Бете и некоторые его обобщения дают заниженные по сравнению с точным значения спиновых коррелянтов (рис. 1).

Предложен способ модификации приближенных методов решения модели Изинга, основанный на искусственной коррекции приближенных коррелянтов. Показано, что применительно к приближению Бете и к приближению среднего поля такая модификация дает более точное значение критической температуры и меняет значение критического показателя температурной зависимости спонтанной намагниченности с 1/2 до 1/4.

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы


[1] Р. Бэкстер. Точно решаемые модели в статистической механике. Мир, М. (1985). 351 с. [R.J. Baxter. Exactly solved models in statistical mechanics. Academic Press, N.Y. (1982).].
[2] J. Strecka, M. Jšcur. Acta Phys. Slovaca **65**, *4*, 235 (2015).
[3] A. Perez, C.H. Van Thieng, S. Charbouillot, H. Aziza. Applied Cryptography and Network Security / Ed. Jaydip Sen (2012). P. 321.
[4] О.Е. Сидоренко, Е.К. Иванова, Б.Л. Оксенгендлер, Н.Н. Тураева. Конденсированные среды и межфазные границы **13**, *3*, 341 (2011).
[5] Е.С. Цуварев, Ф.А. Кассан-Оглы, А.И. Прошкин. ЖЭТФ **158**, *3*, 504 (2020).
[6] Н.А. Богословский, П.В. Петров, Н.С. Аверкиев. ФТТ **61**, *11*, 2036 (2019).
[7] Ф.А. Кассан-Оглы, А.И. Прошкин, А.К. Муртазаев, В.А. Мутайламов. ФТТ **62**, *5*, 683 (2020).
[8] Ю.Д. Панов, А.С. Москвин, В.А. Улитко, А.А. Чиков. ФТТ **61**, *9*, 1676 (2019).
[9] J. Coey. Magnetism and Magnetic Materials. Cambridge University Press, N.Y. (2010). 633 p.
[10] С.В. Сёмкин, В.П. Смагин, П.В. Юдин. ТМФ 205, **1**, 138 (2020).
[11] С.В. Сёмкин, В.П. Смагин, В.И. Люлько. ФТТ **62**, *8*, 1209, (2020).
[12] L. Onsager. Nuovo Cimento (Supll.) **6**, 261 (1949).
[13] C.N. Yang. Phys. Rev. **85**, 808 (1952).
[14] С.В. Сёмкин, В.П. Смагин. Изв. вузов. Физика **60**, 140 (2017).
[15] С.В. Сёмкин, В.П. Смагин, Е.Г. Гусев. ТМФ **202**, *2*, 304 (2020).


*Редактор Т.Н. Василевская*