

03,05

Метод плотности состояний для расчета магнитных свойств квантовой спиновой цепочки

© Н.А. Богословский, П.В. Петров, Н.С. Аверкиев

¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: nikitabogoslovskiy@gmail.com

Поступила в Редакцию 1 июля 2025 г.

В окончательной редакции 16 июля 2025 г.

Принята к публикации 17 июля 2025 г.

Описан и проанализирован метод решения многочастичных квантовомеханических задач, основанный на вычислении плотности состояний системы в зависимости от полной энергии и проекции магнитного момента. Метод применен для расчета свойств спиновой цепочки, описываемой гамильтонианом Гейзенберга. Полученные результаты сравниваются с точным решением для цепочки из $N = 16$ спинов, полученным методом точной диагонализации. Показано, что в области высоких температур, метод плотности состояний совпадает с точным решением. При температурах меньше, чем энергия обменного взаимодействия, система оказывается вблизи края плотности состояний и статистические методы работают плохо. Таким образом, показано, что метод плотности состояний позволяет эффективно вычислять характеристики даже для системы с небольшим количеством упорядоченно расположенных спинов.

Ключевые слова: плотность состояний, спиновая цепочка, магнитная восприимчивость, теплоемкость, гамильтониан Гейзенберга.

DOI: 10.61011/FTT.2025.09.61632.2-25

1. Введение

Как хорошо известно, точное решение большинства многочастичных квантовомеханических задач невозможно из-за их огромной вычислительной сложности. По этой причине широко используются различные приближенные методы вычислений [1,2]. Все эти методы сами по себе достаточно сложны, а так же обладают ограниченными точностью и областью применимости. Поэтому разработка новых приближенных подходов к решению многочастичных квантовомеханических задач представляется актуальной и по сей день. Одним из таких подходов является метод плотности состояний.

Идея метода плотности состояний заключается в том, чтобы вычислить, точно или приближенно, зависимость плотности состояний $g(E, M)$ от полной энергии системы и ее магнитного момента. После этого несложно найти статистическую сумму, и рассчитать магнитные свойства системы используя обычный термодинамический подход. Первоначально такой подход использовал Гейзенберг в пионерской работе о природе ферромагнетизма [3]. Вновь интерес к методу плотности состояний был привлечен сравнительно недавно, когда было показано, что плотность состояний для спиновых систем возможно достаточно точно рассчитать численно [4,5]. Также было показано, что плотность состояний для гамильтониана Изинга приближенно можно описать аналитически, используя центральную предельную теорему [6,7].

Метод плотности состояний привлекателен в силу своей сравнительной простоты. Однако, как и все приближенные методы, он применим только в огра-

ниченной области параметров исследуемой системы. Задачей настоящей работы было продемонстрировать работоспособность и установить пределы применимости метода на примере многочастичной системы в виде квантовой спиновой цепочки с циклическими граничными условиями (спинового кольца). Аналитически эта задача была решена Бете в 1931 году для изотропного гамильтониана Гейзенберга [8]. Решение Бете позволяет легко рассчитать волновые функции и энергии состояний близких к основному. Для остальных состояний этот метод сводится к решению достаточно сложной системы уравнений [9]. Поэтому при вычислениях вместо него часто используется метод численной диагонализации матрицы гамильтониана [10]. До сих пор спиновые цепочки активно используются в качестве удобного модельного объекта как в теоретических [11] так и в экспериментальных исследованиях [12].

Задача о нахождении функции распределения для собственных значений больших матриц в общем случае не решена. Для случая матрицы с нормальным распределением ее элементов известно, что ее собственные числа соответствуют полукруговому распределению Вигнера [13]. Как ниже будет показано, собственные значения гамильтониана Гейзенберга для спинового кольца, соответствующие определенной проекции магнитного момента, имеют распределение близкое к нормальному. Тогда для построения плотности состояний достаточно знать зависимости среднего и дисперсии этого нормального распределения от магнитного момента. То есть, в отличие от приближения среднего поля, в методе плот-

ности состояний мы рассматриваем не только среднее значение, но и дисперсию обменной энергии.

Статья устроена следующим образом. Вначале задача на собственные значения энергии для спинового кольца будет решена посредством численной диагонализации матрицы гамильтониана. Исходя из полученных значений энергий, будут рассчитаны численные значения первых четырех моментов функции распределения плотности состояний в зависимости от магнитного момента системы. Далее, среднее и дисперсия этого же распределения будут вычислены аналитически, а результаты обоих методов сопоставлены друг с другом. Используя полученные зависимости методом плотности состояний будут рассчитаны значения магнитной восприимчивости, магнитного момента, средней энергии и теплоемкости для последующего сравнения их с результатами точного решения. По результатам вычислений будут сделаны выводы об условиях применимости метода плотности состояний.

2. Точное численное решение задачи

В настоящей работе мы рассматриваем цепочку из N атомов со спином $1/2$ и циклическими граничными условиями (цепочка замкнутая в кольцо). Взаимодействие спинов описываем гамильтонианом Гейзенберга. Считаем, что взаимодействуют только соседние спины в цепочке, а само взаимодействие имеет антиферромагнитный характер.

$$\hat{H} = \sum_i J_0 \hat{S}_i \hat{S}_{i+1} - g\mu B \sum_i \hat{S}_{zi} \quad (1)$$

В этом выражении J_0 — константа обменного взаимодействия, B — магнитное поле, g — g -фактор электрона, μ — магнетон Бора.

Состояние системы спинов можно охарактеризовать полным магнитным моментом и проекцией магнитного момента на некоторое направление. В качестве такого направления удобно выбрать ось z , сонаправленную с внешним магнитным полем. Так как проекции спина x , y и z одновременно не наблюдаемы, гамильтониан удобно преобразовать перейдя к лестничным операторам

$$\hat{S}^+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y, \quad \hat{S}^- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y. \quad (2)$$

В качестве базисных волновых функций удобно выбрать состояния вида $\Psi_i = |\uparrow\uparrow\ldots\downarrow\downarrow\rangle$, сгруппировав их по значению проекции магнитного момента на ось z . Далее, последовательно действуя оператором $\hat{H}$ на спиновые волновые функции несложно получить матрицу гамильтониана размером 2^N , [14] где каждый матричный элемент равен

$$H_{ij} = \langle \Psi_i | \hat{H} | \Psi_j \rangle. \quad (3)$$

Эта матрица имеет блочную структуру, каждый блок соответствует своему значению проекции магнитного

момента на ось z . Собственные значения энергии, соответствующие конкретному магнитному моменту, вычислялись поблочной диагонализацией матрицы гамильтониана. Для ускорения расчетов использовалась техника параллельных вычислений с использованием платформы CUDA и программного обеспечения на языке Julia. Наибольший размер системы, плотность состояний которой удалось вычислить составил $N = 16$. Ограничение на количество спинов связано с доступным объемом памяти: матрица гамильтониана имеет размер $(2^N)^2$. Точное решение задачи можно использовать для тестирования решения, полученного методом плотности состояний.

Для каждого фиксированного значения магнитного момента мы построили плотность числа состояний $g(E, m)$ в зависимости от энергии системы и безразмерного магнитного момента на один спин $m = 2M/g\mu N$, а так же вычислили моменты распределения. На рис. 1 показана гистограмма распределения состояний системы из $N = 16$ спинов по энергии для трех значений m . Можно заметить, что при фиксированном m распределение числа состояний по энергии близко к нормальному. Для сравнения реального распределения с нормальным мы вычислили первые 4 момента распределения. На рис. 2 точками показаны (1) — средняя энергия $\bar{E}$, (2) — дисперсия $\sigma^2 = \overline{(E - \bar{E})^2}$, (3) — коэффициент асимметрии $S = \overline{(E - \bar{E})^3}/\sigma^3$ и (4) — коэффициент эксцесса $K = \overline{(E - \bar{E})^4}/\sigma^4 - 3$.

Коэффициент асимметрии и коэффициент эксцесса близки к 0, как и должно быть для нормального распределения. Существенное отличие от 0 наблюдается только для m , близких к 1. Это значит, что даже для небольших N распределение полной обменной энергии близко к нормальному. При увеличении N будет увеличиваться количество слагаемых в полной энергии, поэтому, в силу

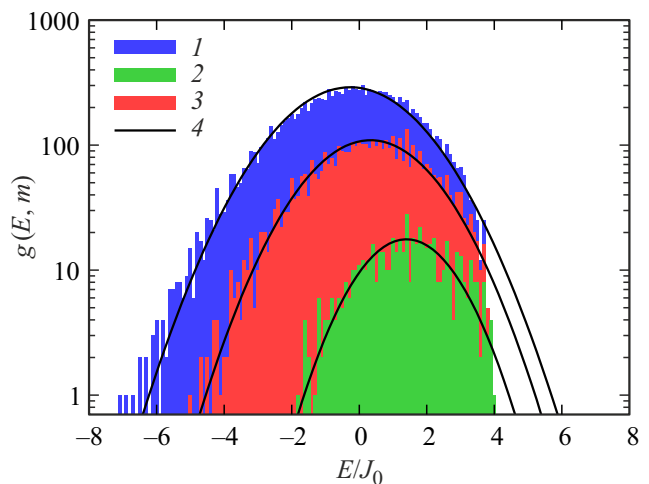


Рис. 1. Рассчитанная посредством численной диагонализации плотность состояний $g(E, m)$ для спинового кольца из $N = 16$ спинов, для различных значений магнитного момента: 1 — $m = 0$; 2 — $m = 3/8$; 3 — $m = 5/8$. Черная линия 4 соответствует уравнению (11).

центральной предельной теоремы, распределение числа состояний по энергии будет стремиться к нормальному распределению.

3. Метод плотности состояний для спиновой цепочки

Как было показано выше, при фиксированном значении магнитного момента плотность числа состояний по энергии $g(E, m)$ можно приближенно описать нормальным распределением. Это распределение характеризуется средней энергией $\bar{E}(m)$ и дисперсией $\sigma(m)$, которые можно вычислить аналитически.

Система из двух спинов может находиться в четырех состояниях. В состоянии $|\uparrow\uparrow\rangle$ проекция магнитного момента равна $+1$, а энергия равна $+1/4$, в состоянии $|\downarrow\downarrow\rangle$ проекция магнитного момента равна -1 , а энергия равна $+1/4$. Также есть два состояния с равной нулю проекцией магнитного момента. В симметричном состоянии $\frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$ система имеет энергию $+1/4$, а в антисимметричном состоянии $\frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$ энергия системы равна $-3/4$.

Если средний магнитный момент системы равен m , то каждый отдельный спин с вероятностью $(1+m)/2$ направлен вверх, и с вероятностью $(1-m)/2$ направлен вниз. Тогда среди всех N пар соседних спинов в цепочке будет в среднем $N(1+m)^2/4$ пар в состоянии $|\uparrow\uparrow\rangle$, $N(1-m)^2/4$ пар в состоянии $|\downarrow\downarrow\rangle$, а остальные $2N(1-m)(1+m)/4$ пар спинов будут поровну распределены между двумя состояниями с нулевой проекцией магнитного момента. Средняя энергия таких состояний равна $-1/4$. С учетом этих соображений среднюю обменную энергию системы из $N \gg 1$ спинов можно представить в виде

$$\begin{aligned}\bar{E} &= NJ_0 \bar{S}_i \bar{S}_{i+1} \\ &= NJ_0 \frac{1}{4} \left(\frac{(1+m)^2}{4} + \frac{(1-m)^2}{4} - 2 \frac{(1-m)(1+m)}{4} \right) \\ &= \frac{1}{4} NJ_0 m^2.\end{aligned}\quad (4)$$

Для систем из небольшого числа спинов появляются еще поправки порядка $1/N$. Вероятность появления в цепочке случайно ориентированных спинов состояний $|\uparrow\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\downarrow\rangle$ с сонаправленными спинами оказывается несколько меньше, а вероятность появления состояний с противонаправленными спинами — больше

$$\bar{E} = \frac{1}{4} NJ_0 \left(m^2 + \frac{m^2}{N} - \frac{1}{N} + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \right). \quad (5)$$

Аналогичными рассуждениями, рассматривая из комбинаторных соображений возможные состояния для $4x$ спинов вычисляем дисперсию обменной энергии. Для

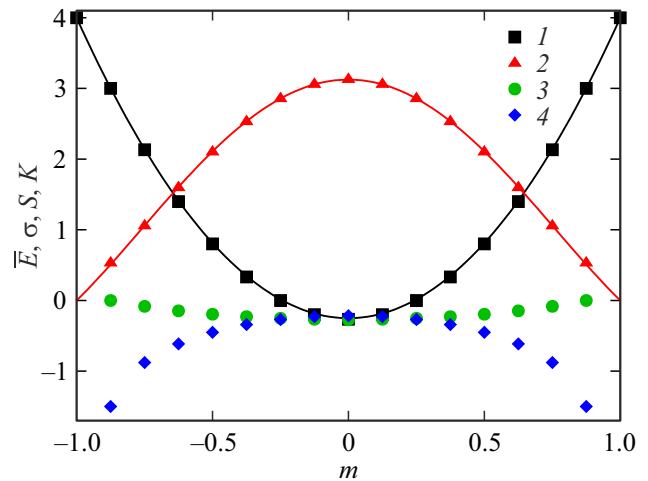


Рис. 2. Зависимость средней энергии $\bar{E}$ (1), дисперсии σ^2 (2), коэффициента асимметрии S (3) и коэффициента эксцесса K (4) от магнитного момента m . Сплошными линиями показаны зависимости средней энергии и дисперсии, рассчитанные по формулам (5) и (6).

краткости не будем приводить здесь сами вычисления, напомним лишь ответ

$$\begin{aligned}\sigma^2 = \overline{E^2} - \bar{E}^2 &= \frac{1}{16} NJ_0^2 \left(3 - 4m^2 + m^4 \right. \\ &\quad \left. + \frac{2 - 6m^2 + 4m^4}{N} + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \right).\end{aligned}\quad (6)$$

При вычислении плотности состояний мы учитываем все состояния с равным весом, что эквивалентно просто вычислению спектра квантовой системы с учетом кратности вырождения уровней. Корреляции между спинами будут учтены ниже, когда для каждого состояния будет вычислен статистический вес в соответствии с распределением Гиббса.

Полученные выражения для средней энергии и дисперсии в зависимости от m интересно сравнить с результатами точного численного расчета. На рис. 2 сплошными линиями показаны зависимости, рассчитанные по формулам (5) и (6) для $N = 16$ спинов. Видно хорошее соответствие между аналитическими выражениями и точными результатами, которые показаны точками.

Таким образом, плотность состояний можно представить в виде

$$\begin{aligned}g(E, m) &= \binom{N}{\frac{N(1+m)}{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(m)} \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{(E - \bar{E}(m))^2}{2\sigma^2(m)}\right).\end{aligned}\quad (7)$$

В этом выражении $N(1+m)/2$ — число спинов, направленных вверх, поэтому m принимает дискретные значения, так чтобы число спинов было целым. Но для

больших N можно перейти к непрерывному распределению по m .

Для больших N можно использовать формулу Стирлинга и разложить факториалы в биномиальном коэффициенте

$$\left(\frac{N}{N(1+m)/2}\right) = \frac{\sqrt{2\pi N}}{\pi N \sqrt{1-m^2}} \frac{2^N}{(1-m)^{(1-m)N/2} (1+m)^{(1+m)N/2}}. \quad (8)$$

для краткости записи введем обозначение

$$p(m) = \ln 2 - \frac{1-m}{2} \ln(1-m) - \frac{1+m}{2} \ln(1+m) \quad (9)$$

тогда биномиальный коэффициент можно представить в виде

$$\left(\frac{N}{N(1+m)/2}\right) = \sqrt{\frac{2}{\pi N}} \frac{1}{\sqrt{1-m^2}} \exp(Np(m)). \quad (10)$$

В дальнейшем будет удобно обезразмерить энергию на J_0 и перейти от полной энергии системы к обезразмеренной энергии на один спин $e = E/NJ_0$. Для краткости записи также введем обезразмеренное среднеквадратичное отклонение $s = \sigma/\sqrt{NJ_0}$. В этих обозначениях плотность состояний запишется в виде

$$g(e, m) = \frac{N}{2\pi s(m)(1-m^2)} \exp\left(Np(m) - \frac{N(e - \bar{e}(m))^2}{2s^2(m)}\right). \quad (11)$$

Ниже, для краткости, мы часто не будем явно указывать в формулах, что средняя энергия и дисперсия являются функциями m . Теперь рассмотрим спиновую цепочку, в которой плотность состояний описывается выражением (11). Пусть система имеет температуру T и находится во внешнем магнитном поле B . Вероятность системе оказаться в некотором состоянии будет описываться распределением Гиббса с энергией $E - g\mu B N m/2$. Здесь, как и выше, через E обозначена только обменная энергия системы. Для удобства введем безразмерную температуру $t = kT/J_0$ и безразмерное магнитное поле $\beta = g\mu B/2J_0$. В этих обозначениях можем написать выражение для плотности вероятности системе иметь энергию e и магнитный момент m при температуре t и во внешнем магнитном поле β

$$f(e, m, t, \beta) = \frac{1}{Z(t, \beta)} \frac{N}{2\pi s(1-m^2)} \times \exp\left(Np(m) - \frac{N(e - \bar{e})^2}{2s^2} - \frac{N(e - \beta m)}{t}\right). \quad (12)$$

Здесь Z — статсумма, которая может быть вычислена как

$$Z(t, \beta) = \int_{-\infty}^{\infty} de \int_{-1}^1 dm \frac{N}{2\pi s(1-m^2)} \times \exp\left(N\left(p(m) - \frac{(e - \bar{e})^2}{2s^2} - \frac{(e - \beta m)}{t}\right)\right). \quad (13)$$

Интеграл по энергии считается аналитически

$$Z(t, \beta) = \int_{-1}^1 \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \frac{1}{1-m^2} \times \exp\left(N\left(p(m) + \frac{\beta m}{t} + \frac{s^2}{2t^2} - \frac{\bar{e}}{t}\right)\right) dm. \quad (14)$$

Интеграл по магнитному моменту может быть посчитан численно, а при больших N можно применить метод перевала (метод Лапласа).

Зная выражение для плотности вероятности $f(e, m, t, \beta)$ и статсуммы можно рассчитать параметры системы, такие как средний магнитный момент, магнитная восприимчивость, средняя энергия и теплоемкость в зависимости от магнитного поля и температуры. Формула (12) также полезна для прояснения вопроса о влиянии спиновых корреляций на плотность состояний. Из нее непосредственно следует, что плотность состояний соответствует плотности вероятности при бесконечно большой температуре. Поэтому спиновые корреляции при расчете плотности состояний учитывать не нужно.

В случае малых m , то есть в случае слабых магнитных полей, можно получить аналитическое выражение для статсуммы без интегралов. Для этого используем приближенное выражение для биномиального коэффициента, справедливое при условии $m \ll 1$

$$\left(\frac{N}{N(1+m)/2}\right) \approx 2^N \sqrt{\frac{2}{\pi N}} \exp\left(-\frac{Nm^2}{2}\right). \quad (15)$$

Для плотности состояний получаем выражение

$$\tilde{g}(e, m) = \frac{2^N}{\pi s} \exp\left(-\frac{Nm^2}{2} - \frac{N(e - \bar{e})^2}{2s^2}\right). \quad (16)$$

Здесь тильда над плотностью состояний показывает, что выражение справедливо только для $m \ll 1$. Далее, по аналогии с тем, как было сделано выше, вводим плотность вероятности $\tilde{f}(e, m, t, \beta)$ и статсумму

$$\tilde{Z}(t, \beta) = \int_{-\infty}^{\infty} de \int_{-1}^1 dm \frac{2^N}{\pi s} \times \exp\left(-N\left(\frac{m^2}{2} + \frac{(e - \bar{e})^2}{2s^2} + \frac{(e - \beta m)}{t}\right)\right). \quad (17)$$

В выражении для статсуммы сначала считаем интеграл по энергии

$$\tilde{Z}(t, \beta) = 2^N \sqrt{\frac{2}{\pi N}} \int_{-1}^1 dm \times \exp \left(N \left(-\frac{m^2}{2} + \frac{\beta m}{t} - \frac{\bar{e}}{t} + \frac{s^2}{2t^2} \right) \right). \quad (18)$$

Далее подставим явные выражения для зависимости средней энергии и дисперсии от m , отбросим малое слагаемое, пропорциональное m^4 , и перейдем к интегрированию по всей вещественной оси. Тогда интеграл по m также вычислится аналитически

$$\tilde{Z}(t, \beta) = \frac{2^{N+2}t}{N\sqrt{4t^2 + 2t + 1}} \exp \left(\frac{2N\beta^2}{4t^2 + 2t + 1} + \frac{3N}{32t^2} \right). \quad (19)$$

4. Расчет магнитных свойств спиновой цепочки

Используя формулу для плотности вероятности (12) можем найти средний магнитный момент системы в зависимости от магнитного поля и температуры. Вычисления будем проводить численно в силу того, что выражения для средней энергии и дисперсии с учетом малых поправок порядка $1/N$ имеют достаточно громоздкий вид

$$\bar{m}(t, \beta) = \frac{1}{Z} \int_{-\infty}^{\infty} de \int_{-1}^1 dm \frac{Nm}{2\pi s(1-m^2)} \times \exp \left(N \left(p(m) - \frac{(e - \bar{e})^2}{2s^2} - \frac{(e - \beta m)}{t} \right) \right). \quad (20)$$

Интеграл по энергии считаем аналитически

$$\bar{m}(t, \beta) = \frac{1}{Z} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \int_{-1}^1 \frac{m}{1-m^2} \times \exp \left(N \left(p(m) + \frac{\beta m}{t} + \frac{s^2}{2t^2} - \frac{\bar{e}}{t} \right) \right) dm. \quad (21)$$

В общем случае полученный интеграл считаем численно. Но в слабых магнитных полях, когда справедливо разложение (15), можно получить явное выражение для среднего магнитного момента

$$\bar{m}(t, \beta) = \frac{4\beta t}{4t^2 + 2t + 1}. \quad (22)$$

Для сравнения с результатами, полученными методом плотности состояний, магнитный момент был найден

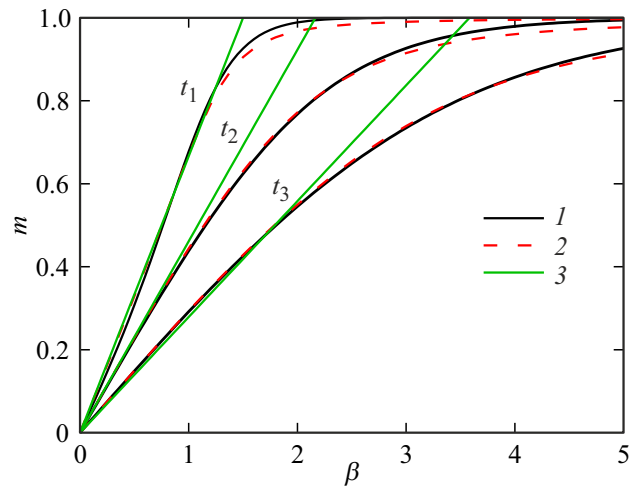


Рис. 3. Зависимость среднего магнитного момента от магнитного поля, посчитанная для трех различных значений температуры $t_1 = 0.5$, $t_2 = 1.5$ и $t_3 = 3.0$. Черная линия (кривая 1) посчитана по точному решению, красный пунктир (кривая 2) — формула (21), зеленая линия (кривая 3) — формула (22).

посредством точной диагонализации по следующей формуле:

$$\bar{m}(t, \beta) = \frac{\sum_j m_j \exp(-\frac{e_j - m_j \beta}{t})}{\sum_j \exp(-\frac{e_j - m_j \beta}{t})}. \quad (23)$$

Здесь суммирование ведется по всем 2^N состояниям системы.

На рис. 3 показано сравнение зависимости среднего магнитного момента от магнитного поля, посчитанного по точному решению для $N = 16$ спинов (сплошная линия), по формуле (21) (красный пунктир), а также по приближенной формуле (22), справедливой для малых m (тонкая зеленая линия). Расчеты сделаны для трех значений безразмерной температуры, $t_1 = 0.5$, $t_2 = 1.5$ и $t_3 = 3.0$. Видно хорошее совпадение формулы (21) с точным расчетом, а небольшое отклонение при m , близких к единице связано с тем, что формула Стирлинга, использованная при выводе формулы (8), справедлива только для относительно больших чисел. При приближении к $m = 1$ величина $N(1 - m)/2$ стремится к нулю, поэтому разложение (8) становится неприменимо. Приближенная формула (22) хорошо совпадает с точным решением при малых m , но при $m \geq 0.4$ начинает расходиться с точным результатом.

В нулевом магнитном поле можем получить явное выражение для зависимости магнитной восприимчивости от температуры. В этом случае используем для среднего магнитного момента выражение (22)

$$\chi = \frac{\partial \bar{M}}{\partial B} = \frac{g^2 \mu^2 N}{4J_0} \frac{\partial \bar{m}}{\partial \beta}. \quad (24)$$

В выражении для среднего магнитного момента магнитное поле входит в экспоненту в выражении для плотности вероятности (12) и в статсумму (13). Если явно

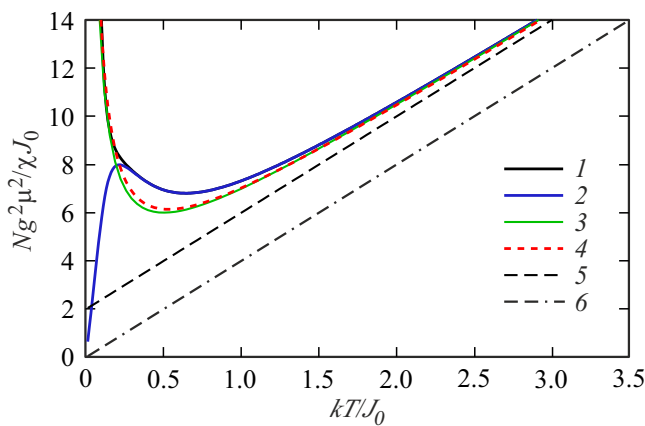


Рис. 4. Обратная безразмерная магнитная восприимчивость в зависимости от безразмерной температуры. 1 — результат точного численного расчета для $N = 16$ спинов; 2 — результат точного численного расчета для $N = 15$ спинов; 3 — метод плотности состояний, разложение при малых m , формула (27); 4 — метод плотности состояний, производная от магнитного момента (21) по магнитному полю; 5 — закон Кюри-Вейсса; 6 — закон Кюри.

посчитать производную от формулы (21) по магнитному полю получаем полезное соотношение

$$\chi = \frac{g^2 \mu^2 N^2}{4J_0 t} (\overline{m^2} - \overline{m}^2) = \frac{\overline{M^2} - \overline{M}^2}{kT}. \quad (25)$$

В нулевом магнитном поле средний магнитный момент равен нулю, тогда получаем $\chi = \overline{M^2}/kT$ — известный результат для восприимчивости в слабом магнитном поле. Кроме того, магнитную восприимчивость в нулевом магнитном поле можем посчитать явно продифференцировав выражение для среднего магнитного момента (22) по магнитному полю

$$\chi = \frac{g^2 \mu^2 N}{4J_0} \frac{\partial \overline{m}}{\partial \beta} = \frac{g^2 \mu^2 N}{4J_0} \frac{4t}{4t^2 + 2t + 1}. \quad (26)$$

Удобно анализировать не саму восприимчивость, а обратную магнитную восприимчивость потому что в случае свободных спинов, который описывается законом Кюри, обратная магнитная восприимчивость линейно зависит от температуры. В выражении для обратной восприимчивости перейдем к размерной температуре T

$$\frac{1}{\chi} = \frac{4kT + 2J_0}{g^2 \mu^2 N} + \frac{J_0^2}{g^2 \mu^2 N kT}. \quad (27)$$

Полученная зависимость обратной восприимчивости от температуры показана на рис. 4. Также на рисунке показаны зависимости, полученные путем точного численного расчета для спиновых колец из 15 и 16 спинов. Магнитная восприимчивость вычислялась методом численного дифференцирования среднего магнитного момента по полю. Видно, что при высоких температурах

обе зависимости ведут себя одинаково, а при низких температурах наблюдается существенное различие между зависимостями для четных и нечетных N . Для четных N спины образуют пары, в результате чего суммарный магнитный момент и магнитная восприимчивость стремятся к нулю. Для нечетных N магнитный момент всегда ненулевой, поэтому магнитная восприимчивость велика. Существенно, что формула (27) при высоких температурах значительно лучше описывает результаты точного численного расчета, чем просто закон Кюри для восприимчивости свободных электронов ($1/\chi = 4kT/g^2 \mu^2 N$), или закон Кюри-Вейсса ($1/\chi = (4kT + 2J_0)/g^2 \mu^2 N$), которые показаны на графике пунктиром. Зависимость обратной восприимчивости для спиновой цепочки от температуры в нулевом магнитном поле была численно посчитана в работе [10]. Наши результаты, полученные методом точной диагонализации гамильтониана очень хорошо сходятся с результатами, полученными в работе [10].

5. Средняя энергия системы и теплоемкость

Вычислим среднюю энергию спиновой цепочки в магнитном поле. Полная энергия рассматриваемой системы состоит из обменной энергии и энергии взаимодействия с внешним магнитным полем. Вначале найдем среднее только обменной части энергии E .

$$\begin{aligned} \overline{E}(t, \beta) &= \frac{N^2 J_0}{Z(t, \beta) 2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} de \int_{-1}^1 dm \frac{e}{s(1-m^2)} \\ &\times \exp \left(N \left(p(m) - \frac{(e - \overline{e})^2}{2s^2} - \frac{(e - \beta m)}{t} \right) \right). \end{aligned} \quad (28)$$

Интеграл по энергии считаем аналитически

$$\begin{aligned} \overline{E}(t, \beta) &= \frac{N J_0}{Z(t, \beta)} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \int_{-1}^1 \frac{\overline{e} - \frac{s^2}{t}}{1-m^2} \\ &\times \exp \left(N \left(p(m) + \frac{\beta m}{t} + \frac{s^2}{2t^2} - \frac{\overline{e}}{t} \right) \right) dm. \end{aligned} \quad (29)$$

Интегрирование по магнитному моменту можно провести численно. Теперь вернемся к полной энергии спиновой цепочки $\overline{E} - B\overline{M}$. С учетом выражения для среднего магнитного момента (21) получаем

$$\begin{aligned} \overline{E} - B\overline{M} &= \frac{N J_0}{Z(t, \beta)} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \int_{-1}^1 \frac{\overline{e} - \frac{s^2}{t} - m\beta}{1-m^2} \\ &\times \exp \left(N \left(p(m) + \frac{\beta m}{t} + \frac{s^2}{2t^2} - \frac{\overline{e}}{t} \right) \right) dm. \end{aligned} \quad (30)$$

Для случая $m \ll 1$ используем приближенное разложение биномиального коэффициента (15), которое позволяет вычислить среднюю обменную энергию аналитически.

$$\begin{aligned} \tilde{E}(t, \beta) = & \frac{2^N N J_0}{Z(t, \beta)} \sqrt{\frac{2}{\pi N}} \int_{-1}^1 \left(\bar{e} - \frac{s^2}{t} \right) \\ & \times \exp \left(N \left(-\frac{m^2}{2} + \frac{\beta m}{t} - \frac{\bar{e}}{t} + \frac{s^2}{2t^2} \right) \right) dm. \end{aligned} \quad (31)$$

С учетом малости m отбросим слагаемое порядка m^4 в выражении для дисперсии и перейдем к интегрированию по всей вещественной оси. Также подставим явные выражения для зависимости средней энергии и дисперсии от m

$$\begin{aligned} \tilde{E}(t, \beta) = & \frac{2^N N J_0}{Z(t, \beta)} \sqrt{\frac{2}{\pi N}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{m^2}{4} - \frac{3-4m^2}{16t} \right) \\ & \times \exp \left(N \left(-\frac{m^2}{2} + \frac{\beta m}{t} - \frac{m^2}{4t} + \frac{3-4m^2}{32t^2} \right) \right) dm. \end{aligned} \quad (32)$$

После интегрирования по m получаем

$$\tilde{E}(t, \beta) = \frac{J_0(t^2 + t)}{4t^2 + 2t + 1} \left(1 + \frac{32\beta^2 t^2}{(4t^2 + 2t + 1)^2} \right) - \frac{3NJ_0}{16t}. \quad (33)$$

Для больших N оставим только последнее слагаемое и выражение сильно упростится. Кроме того, в магнитном поле учтем еще энергию взаимодействия магнитного момента цепочки с полем

$$\tilde{E} - B\bar{M} \approx -\frac{3NJ_0}{16t} - \frac{4J_0 N \beta^2 t}{4t^2 + 2t + 1}. \quad (34)$$

Аналогично среднему магнитному моменту, средняя обменная энергия для метода точной диагонализации вычислялась по формуле:

$$\bar{E}(t, \beta) = NJ_0 \frac{\sum_j e_j \exp(-\frac{e_j - m_j \beta}{t})}{\sum_j \exp(-\frac{e_j - m_j \beta}{t})}. \quad (35)$$

Зависимость полной энергии спиновой цепочки $\bar{E} - B\bar{M}$ от температуры показана на рис. 5 для трех значений магнитного поля. Сплошными черными линиями показан результат точного расчета, красным пунктиром — вычисления по методу плотности состояний, а зеленой линией — приближенная зависимость, посчитанная с учетом разложения в слабом магнитном поле. Видно хорошее совпадение теоретической зависимости с точным расчетом в области температур $t \geq 1$. При меньших температурах метод плотности состояний дает существенное расхождение с точным результатом вследствие того, что система оказывается вблизи края плотности состояний. Приближенная формула хорошо совпадает с теоретической зависимостью для $\beta = 0$, а для сильных полей наблюдается существенное расхождение.

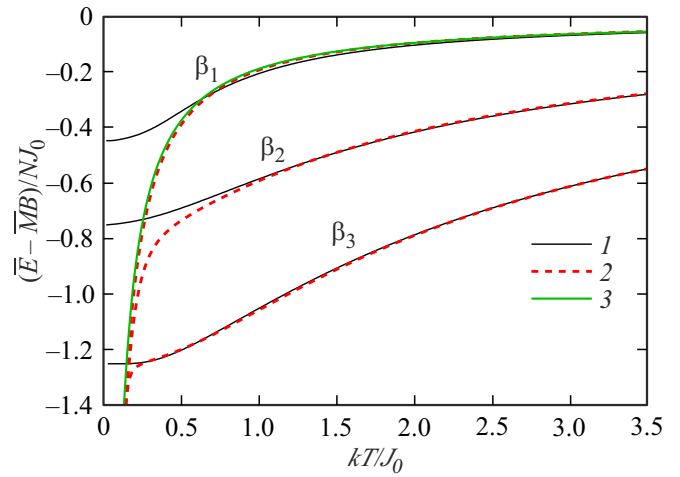


Рис. 5. Зависимость средней энергии спиновой цепочки от температуры в магнитных полях $\beta_1 = 0, \beta_2 = 1, \beta_3 = 1.5$. 1 — точное решение, 2 формула (30), 3 приближенное аналитическое выражение (34).

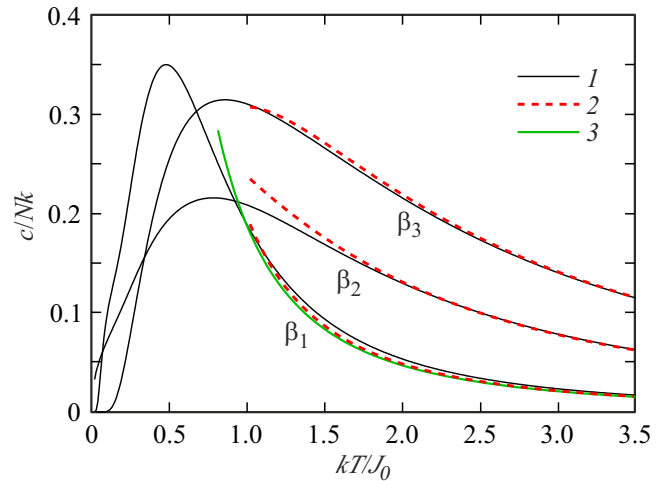


Рис. 6. Зависимость теплоемкости спиновой цепочки от температуры в магнитных полях $\beta_1 = 0, \beta_2 = 1, \beta_3 = 1.5$. 1 — точное решение, 2 — метод плотности состояний, формула (36), 3 — приближенное аналитическое решение по формуле (38).

Теплоемкость спинового кольца в магнитном поле можно посчитать как производную от полной энергии по температуре:

$$c(t, \beta) = \frac{\partial(\bar{E} - B\bar{M})}{\partial T}. \quad (36)$$

В частном случае малых m и больших N получаем

$$c(t, \beta) = \frac{\partial \left(-\frac{3NJ_0}{16t} - J_0 N \beta \frac{4\beta t}{4t^2 + 2t + 1} \right)}{\partial t} \frac{k}{J_0}, \quad (37)$$

$$c(t, \beta) = Nk \left(\frac{3}{16t^2} + \frac{4\beta^2(4t^2 - 1)}{(4t^2 + 2t + 1)^2} \right). \quad (38)$$

Еще раз подчеркнем, что последнее выражение справедливо только при малых m , то есть в слабых магнитных полях, и для $N \gg 1$.

Зависимость теплоемкости спиновой цепочки от температуры показана на рис. 6 для трех значений магнитного поля. Сплошными черными линиями показан результат точного расчета, полученный численным дифференцированием средней энергии по температуре, красным пунктиром — вычисления по методу плотности состояний (36), а зеленой линией — приближенная зависимость (38), посчитанная с учетом разложения в слабом магнитном поле. Из рисунка видно, что при высоких температурах $t \geq 1$ метод плотности состояний достаточно хорошо описывает зависимость теплоемкости от температуры. Но при меньших температурах зависимость сильно отличается от точного решения, поэтому не показана на графике.

6. Заключение

В заключение отметим, что метод плотности состояний может быть успешно использован для описания свойств даже небольших ($N = 16$) систем без пространственного беспорядка, таких как спиновые цепочки. Существенные отличия от точного решения появляются при низких температурах ($kT < J_0$), когда максимум плотности вероятности смещается к границе плотности состояний по энергии. В этой области распределение состояний по энергии уже нельзя считать нормальным. Также отклонение от точного расчета может проявляться в сильном магнитном поле, когда средний магнитный момент m близок к 1. В этом случае число состояний системы с данным магнитным моментом становится мало, в частном случае $m = 1$ у системы всего одно состояние, поэтому использование законов статистики невозможно. В остальных случаях, то есть при сравнительно высокой температуре и не слишком сильном магнитном поле, метод плотности состояний позволяет найти характеристики системы либо численным интегрированием, либо, в приближении $m \ll 1$ — аналитически.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Л.Д. Ландау, Е.М. Лившиц. Статистическая физика. Наука, М. (1989).
- [2] D.J. Thouless. The quantum mechanics of many-body systems. Courier Corporation (2013).
- [3] W. Heisenberg. Zeitschrift für Physik, **49**, 9, 619–636 (1928).
- [4] C. Zhou, T.C. Schulthess, S. Torbrügge, D.P. Landau. Phys. Rev. Lett., **96**, 120201 (2006).
- [5] В.И. Егоров, Б.В. Крыжановский. Успехи кибернетики, **5**, 2, 46–52 (2024).
- [6] B. Kryzhanovskiy, L. Litinskii, V. Egorov. Entropy, **23**, 12 (2021).
- [7] N.A. Bogoslovskiy, P.V. Petrov, N.S. Averkiev. Phys. Rev. B, **109**, 024436 (2024).
- [8] H. Bethe. Zeitschrift für Physik, **71**, 205–226 (1931).
- [9] F. Franchini. An introduction to integrable techniques for one-dimensional quantum systems. Springer (2017).
- [10] J.C. Bonner, M.E. Fisher. Phys. Rev., **135**, A640–A658 (1964).
- [11] Д.Н. Ясинская, Ю.Д. Панов. ФТТ, **66**, 7, 1106–14 (2024).
- [12] В.И. Петинов, А.Б. Кулаков. ФТТ, **65**, 5, 797–801 (2023).
- [13] E.P. Wigner. Annals of Mathematics, **67**, 2, 325–327 (1958).
- [14] В.А. Кашурников, А.В. Красавин. Вычислительные методы в квантовой физике: учебное пособие. НИЯУ МИФИ, М. (2005).

Редактор А.Н. Смирнов