Національна академія наук України

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP–98–06U

М.А.Кориневський

ФУНКЦІОНАЛЬНЕ ЗОБРАЖЕННЯ СТАТИСТИЧНОЇ СУМИ КВАНТОВИХ КЛАСТЕРНИХ СИСТЕМ

ЛЬВІВ

УДК: 548:537.611.44
PACS: 05.60.+w, 05.70.Ln, 05.20.Dd, 52.25.Dg, 52.25.Fi

Функціональне зображення статистичної суми квантових кластерних систем.

М.А.Кориневський

Анотація. Одержано зображення статистичної суми квантової кластерної системи у вигляді функціонального інтеграла за колективними змінними. Досліджено статистичні і термодинамічні властивості системи відліку, яка складається з груп ізольованих кластерів. Внутрікластерні взаємодії описуються обмінним гамільтоніаном гайзенбергівського типу. Розвинуто методику розрахунку і отримано коефіцієнти негаусового базисного розподілу колективних змінних на узагальнених операторах переходу.

The Functional Representation of Partition Function of Quantum Cluster Systems

N.A.Korynevskii

Abstract. The partition function representation of quantum cluster system in a form of functional integral over collective variables is obtained. The statistic and thermodynamic properties of reference system which consists of isolated clusters groups are investigated. Intracluster interactions are described by exchange Haizenberg-type Hamiltonian. The method of calculation is developed and the coefficients of non-Gaussian basic distribution of collective variables on generalized transition operators are found.

Подається в Condensed Matter Physics
Submitted to Condensed Matter Physics

Вступ

Серед різноманітних класів фізичних об'єктів, в яких суттєву роль відіграють процеси впорядкування- розвпорядкування елементів структури, особливе місце посідають кластерні системи. Під кластерною системою звичайно розуміють кристалічну (або невпорядковану) сполуку, в якій, внаслідок кристалічної будови, чи особливостей міжчастинкової взаємодії, фізично існують окремі групи частинок такі, що зв'язок між частинками в групі є сильнішим порівняно зі зв'язком частинок, що відносяться до різних груп. Така особливість внутрішньої будови призводить до специфічної поведінки термодинамічних характеристик кластерних систем поблизу точок фазових перетворень типу порядок-безлад: розмиття піків сприйнятливості і тепломісткості, розширення температурної області переходу і т.ін.

Кластерні системи (їх ще часто називають системами з групами ізольованих атомів) можна поділити на два класи: ті, котрі зустрічаються природно в деяких чистих сполуках, і ті, які можна отримати шляхом штучного приготування. До першого класу відносяться складні ацетати хрому, або заліза $[Cr_3(CH_3COO)_6(OH)_2]$ $Cl \cdot 8H_2O, [Fe_3(CH_3COO)_6(OH)_2]NO_3 \cdot 6H_2O$, в яких три іони $Gr^{3+}(Fe^{3+})$ групуються разом, будучи значно віддалені від інших відповідних тріад в кристалі; моногідрату ацетату міді $Cu_2(CH_3COO)_2 {\cdot} H_2O$, в якому іони Cu^{2+} згруповані в окремі пари та інші. Серед представників другого класу варто вказати на твердий розчин магнітної сполуки MnO в діамагнітній матриці MgO. При випадковому розподілі магнітних іонів по гратці виникає кластерна система з відокремленими іонами, парами іонів, тріадами іонів і т.д. [1].

Теоретичний опис кластерних систем, відомий на даний час, зосереджений лише на вивченні статистики і термодинамічних функцій ізольованих груп з двох, трьох і чотирьох частинок на основі моделі Гайзенберга. Ефектами впливу міжкластерних взаємодій при цьому цілком нехтується, що, безумовно, невиправдано з точки зору опису фазових перетворень в таких системах.

Оскільки в вищенаведених сполуках основою кластерної структури є групи атомів, магнітний момент яких має, в основному, спінову природу, то використання моделі Гайзенберга для врахування міжспінових обмінних взаємодій є повністю виправданим. Звичайно, обмінна взаємодія, як дуже короткосяжна, суттєва лише для тих атомів, які є близькорозміщеними, тобто коли вони входять до

одного кластера.

Хоч обмінна взаємодія є найбільшою, проте не єдиною взаємодією у магнетику. Поруч з нею існує диполь-дипольна взаємодія між магнітними моментами атомів, а також їх взаємодія з електричним полем кристалічної гратки [2]. Обидві ці взаємодії мають релятивістське походження (зокрема за рахунок спін-орбітальної взаємодії), що й зумовлює їх абсолютне значення на 1-2 порядки меншим за величину обмінної взаємодії. Проте їх роль є суттєвою. Релятивістські взаємодії супроводжуються формуванням певного напрямку намагнічування, крім того вони мають далекосяжний характер (як це властиво дипольним взаємодіям). Це означає, що врахування міжкластерних магнітодипольних взаємодій є необхідним.

Слід зауважити, що в сильних кристалічних полях слабоанізотропний характер обмінної взаємодії має місце для d-електронів (іони Fe^{3+} та Cr^{3+}). В той же час сильно-анізотропними є обмінні взаємодії з участю рідкісноземельних іонів. Спільною причиною цього ефекту є зняття орбітального виродження кристалічним полем і ефект спін-орбітальної взаємодії. В другому випадку суттєвою є також власна анізотропія рідкісноземельного іона в низькосиметричному оточенні [3]. У загальному, пониження симетрії кристалічного поля (деформація, зовнішнє електричне поле) призводить до виникнення анізотропних доданків в гамільтоніані системи взаємодіючих спінів.

Метою нашої роботи є побудова функціонального зображення для статистичної суми системи взаємодіючих кластерів, що описуються квантовою моделлю Гайзенберга з ізотропною та анізотропною міжкластерною частиною. Отримане зображення буде використане при дослідженні термодинаміки феромагнітного фазового перетворення типу порядок-безлад. Загальна методика розрахунків грунтується на використанні узагальнених операторів переходу, які були запроваджені автором при дослідженні сегнетоелектричних кластерних систем [4,5]. Суттєво новим моментом є отримання коефіцієнтів базисного розподілу фаз флуктуації спінового моменту у вигляді кумулянтних середніх по системі відліку (обмінна гайзенбергівська взаємодія в кластері) від узагальнених операторів переходу.

1. Гамільтоніан. Система відліку

Розглядається тривимірна кристалічна гратка, в кожному з N вузлів якої знаходиться f_0 спінів (атомів з нескомпенсованим спіновим моментом, або електронів). Обмінна взаємодія між спінами відмінна від нуля лише коли вони відносяться до одного і того ж вузла. Міжвузлові взаємодії спінових моментів характеризуються диполь-дипольним потенціалом і тому є далекосяжними. Окремо можуть бути розглянуті випадки ізотропного (по трьох кристалографічних осях), а також анізотропного (типу "легка" вісь чи "легка" площина) кристала. В другому випадку не усі компоненти міжвузлової спін-спінової взаємодії є рівноправними. Така схема якісно правильно моделює ситуацію в кластерних системах, наприклад, типу моногідрату ацетату міді, або складних ацетатів хрому чи заліза.

Повний гамільтоніан кластерної системи спінів складається із суми трьох доданків:

$$H = -\sum_{q=1}^{N}\sum_{f=1}^{f_0} h_f(\vec{R}q)S_f^z(\vec{R}q) - 2\sum_{q=1}^{N}\sum_{f,f'=1}^{f_0} V_{ff'}\vec{S}_f(\vec{R}q)\vec{S}_{f'}(\vec{R}q) -$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}\sum_{q,q'=1}^{N}\sum_{f,f'=1}^{f_0} J_{ff'}^{\alpha\beta}(\vec{R}q,\vec{R}q')S_f^{\alpha}(\vec{R}q)S_{f'}^{\beta}(\vec{R}q'). \tag{1.1}$$

Тут $\vec{S}_f(\vec{R}q)$- оператор спіна f у вузлі q, $V_{ff'}$-обмінний інтеграл, $J_{ff'}^{\alpha\beta}(\vec{R}q,\vec{R}q)$ потенціал магнітодипольної взаємодії, $h_f(\vec{R}_q)$ - зовнішнє магнітне поле, $\alpha,\beta = x,y,z$ - компоненти спіна.

Перші два доданки в (1.1) відносяться до спінів, які знаходяться на одному вузлі (в одному кластері), причому $V_{ff'} >> J_{ff'}^{\alpha\beta}(\vec{R}q,\vec{R}q')$. Природно їх вибрати за систему відліку. Якщо покласти $V_{ff'} = V$ (це обмежує число атомів в групі значеннями 2,3 або 4) і розглянути випадок однорідного зовнішнього поля, то для гамільтоніана системи відліку маємо такий вираз:

$$H_0 = -h\sum_{q=1}^{N}\sum_{f=1}^{f_0} S_f^z(\vec{R}q) - 2V\sum_{q=1}^{N}\sum_{f,f'=1}^{f_0}\vec{S}_f(\vec{R}q)\vec{S}_{f'}(\vec{R}q). \tag{1.2}$$

Нагадаємо, що матриці S^{α} мають вигляд:

$$S^x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, S^y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, S^z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{1.3}$$

і задовольняють таким переставним співвідношенням:

$$[S_f^{\alpha}, S_{f'}^{\beta}] = i\delta_{ff'}S_f^{\gamma}. \tag{1.4}$$

Легко переконатись, що квадрат повного спіна системи комутує з кожною з проекцій спіна, а, отже, і з гамільтоніаном (1.1). Це означає, що вони є квантовомеханічними інтегралами руху і мають спільну систему власних функцій [2,6].

Застосовуючи звичайні правила додавання моментів кількості руху, можемо знайти сумарний спін пари частинок $\vec{S}'$, причому, як відомо з квантової механіки, його власні значення $S' = 0,1,2,...2S$ зустрічаються лише один раз. Власні значення z-компоненти спіна є наступними: $M' = S'$, $S'-1$, $S'-2, ...-S'$ [6]. Враховуючи також, що суму добутків операторів $\sum\limits_{f<f'=1}^{f_0}\vec{S}_f\vec{S}_{f'}$ можна подати таким чином:

$$-2\sum_{f<f'=1}^{f_0}\vec{S}_f\vec{S}_{f'} = \sum_{f=1}^{f_0}\vec{S}_f^2 - (\vec{S}')^2, \tag{1.5}$$

отримуємо формулу для знаходження рівнів енергії кластера f_0 спінів частинок, що описується гамільтоніаном (1.2).

$$E = V\left[f_0S(S+1) - S(S'+1)\right] - M'h, \tag{1.6}$$

причому, тут S-розмір спіна,

$$S' = 0,1,2,3,\ldots,f_0S - \qquad S - \text{ціле}, \tag{1.7}$$

$$S' = \frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2},\ldots,f_0S - \qquad S - \text{півціле},$$

$$M' = -S', -S'+1, -S'+2, \ldots, S'-2, S'-1, S'.$$

Для прикладу розглядатимемо тільки такі системи, в яких $S = \frac{1}{2}$. Це відповідає ситуації в згадуваних вище кластерних системах моногідрату ацетату міді та складних ацетатах хрому і заліза, в яких процеси впорядкування стосуються електронних спінів.

$$\underline{f_0 = 2:}$$
$$S' = 0,1,\ M' = -1,0,1; \tag{1.8}$$

$$E_1 = \frac{3}{2}V,$$
$$E_2 = -\frac{1}{2}V + h,\ E_3 = -\frac{1}{2}V,\ E_4 = -\frac{1}{2}V - h.$$

$\underline{f_0 = 3:}$

$S' = \frac{1}{2}, \frac{3}{2},\ M' = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2};$

$$E_1 = \frac{3}{2}V + \frac{1}{2}h,\ E_2 = \frac{3}{2}V - \frac{1}{2}h,$$
$$E_3 = -\frac{3}{2}V + \frac{3}{2}h,\ E_4 = -\frac{3}{2}V + \frac{1}{2}h, \tag{1.9}$$
$$E_5 = -\frac{3}{2}V - \frac{1}{2}h,\ E_6 = -\frac{3}{2}V - \frac{3}{2}h.$$

$\underline{f_0 = 4:}$

$S' = 0, 1, 2,\ M' = -2, -1, 0, 1, 2;$

$$E_1 = 3V, \tag{1.10}$$
$$E_2 = V + h,\ E_3 = V,\ E_4 = V - h.$$
$$E_5 = -3V + 2h,\ E_6 = -3V + h,$$
$$E_7 = -3V,\ E_8 = -3V - h,\ E_9 = -3V - 2h.$$

Формула (1.6) дає точні значення енергетичного спектра при довільному числі частинок в кластері. Проте, для розрахунку статистичної суми системи відліку цієї інформації недостатньо. Справа в тім, що, починаючи з $f_0 = 3$, отримані рівні (1.9), (1.10) і т.д. є частково виродженими, адже повне число станів n в кожному випадку визначається формулою:

$$n = 2^{f_0}. \tag{1.11}$$

Виникає проблема знаходження повного числа станів у кластері з їх відповідними енергетичними рівнями. Для цього зручно використати методику кластеризації з введенням узагальнених операторів переходу, розроблену і застосовану при дослідженні сегнетоелектричних кластерних систем [5,7].

2. Метод кластеризації гамільтоніана. Узагальнені оператори переходу

Розвинута в [4,5,7] методика кластеризації гамільтоніана короткосяжних взаємодій з використанням операторів Хаббарда-Стасюка $X^{ij}(\vec{R}_q)$ і узагальнених операторів переходу $Y^{\lambda}(\vec{R}_q)$ в своїй основі

мала завданням приведення до діагонального і симетризованого вигляду гамільтоніана де-Жена. Оператори $X^{ij}(\vec{R}_q)$ будувались на операторах z-проекцій спіна в розширеному просторі станів кластера:

$$\sigma_f^z(\vec{R}_q) = \sum_{ij} A_{ij}^{(f)} X^{ij}(\vec{R}_q), \tag{2.1}$$

де $A_{ij}^{(f)}$ - матричні елементи операторів σ_f^z в псевдоспінорному базисі:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \end{pmatrix}, \ldots \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{2.2}$$

При розгляді гамільтоніана Гайзенберга будемо вводити оператори Хаббарда-Стасюка на повних операторах спіна вузла-кластера. Почнемо зі звичайної моделі Гайзенберга, коли в кожному вузлі кристалічної гратки знаходиться один спін.

а) звичайна модель Гайзенберга

Гамільтоніан моделі має вигляд:

$$H = -h \sum_q S^z(\vec{R}_q) - 2J \sum_{q<q'} \vec{S}(\vec{R}_q)\vec{S}(\vec{R}_{q'}) \tag{2.3}$$

і діє в базисі спінорів:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{2.4}$$

Неважко переконатись, що при $q = q'$ із (1.3) випливають такі рівності:

$$S^x(R_q)S^x(\vec{R}_q) = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, S^y(R_q)S^y(\vec{R}_q) = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$
$$S^z(R_q)S^z(\vec{R}_q) = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{2.5}$$

Для одновузлового гамільтоніана "кластера" $(f_0 = 1)$

$$H = -h \sum_q S^z(\vec{R}_q) \tag{2.6}$$

в базисі (2.4) маємо матричне зображення:

$$H_0 = \begin{pmatrix} -\frac{h}{2} & 0 \\ 0 & \frac{h}{2} \end{pmatrix}. \tag{2.7}$$

Матрицею, яка "приводить" H_0 до діагонального вигляду, є одинична матриця

$$W = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{2.8}$$

Введемо оператори Хаббарда-Стасюка $X^{ij}(\vec{R}_q)$ за такими тотожностями:

$$\tilde{\sigma}^{\alpha}(\vec{R}_q) = \sum_{i,j} A_{ij}^{(\alpha)} X^{ij}(\vec{R}_q), \tag{2.9}$$

де

$$\tilde{\sigma}^{\alpha} = W^{-1}\sigma^{\alpha}W = S^{\alpha}, \tag{2.10}$$

оскільки $\sigma^{\alpha} \equiv S^{\alpha}$, а W- одинична матриця; $A_{ij}^{(\alpha)}$- матричні елементи α- компонент матриць спіна (1.3).

Зробивши перепозначення пар старих індексів ij на нові m

ij	11	12	21	22
m	1	2	3	4

,

для частини гамільтоніана (2.3), яка описує взаємодію, отримуємо:

$$-2J \sum_{q<q'} \sum_{\alpha=x,y,z} S^{\alpha}(\vec{R}_q)S^{\alpha}(\vec{R}_{q'}) = \sum_{q<q'} \sum_{m,m'} \Phi_{mm'} X^{m}(\vec{R}_q)X^{m'}(\vec{R}_{q'}). \tag{2.11}$$

Тут

$$\Phi_{mm'} = -2J\sum_{\alpha} A_m^{(\alpha)} A_{m'}^{(\alpha)} = -\frac{J}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{2.12}$$

Матриця U, яка діагоналізує $\Phi_{mm'}$, має вигляд:

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2.13}$$

Отже,

$$\Phi_{\lambda} = U^{-1}\Phi_{mm'}U = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -J & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -J \end{pmatrix}. \tag{2.14}$$

Ввівши узагальнені оператори переходу

$$Y^{\lambda}(\vec{R}_q) = \sum_m U_{m\lambda}X^m(\vec{R}_q), \tag{2.15}$$

отримуємо гамільтоніан моделі (2.3) у вигляді

$$\begin{aligned} H = -\frac{h}{\sqrt{2}}\sum_q Y^4(\vec{R}_q) - J\sum_{q,q'} \Big(& Y^2(\vec{R}_q)Y^2(\vec{R}_{q'}) - \\ & - Y^3(\vec{R}_q)Y^3(\vec{R}_{q'}) + Y^4(\vec{R}_q)Y^4(\vec{R}_{q'})\Big), \end{aligned} \tag{2.16}$$

який повністю тотожний вихідному, адже проблема "кластеризації" одночастинкового кластера в цьому випадку була тривіальною. Узагальнені оператори переходу $Y^{\lambda}(\vec{R}_q)$ фактично, з точністю до множника, співпадають з вихідними операторами проекцій спіна $S^{\alpha}(\vec{R}_q)$. Перевага зображення операторів $Y^{\lambda}(\vec{R}_q)$ проявиться лише при їх використанні в дослідженні кластерних систем з $f_0 \geq 2$.

Подамо зв'язок між усіма типами операторів, які використовувались в параграфі а):

$$S^x = \frac{1}{2}(X^{12} + X^{21}) = \frac{1}{\sqrt{2}}Y^2,$$

$$iS^y = \frac{1}{2}(X^{12} - X^{21}) = \frac{1}{\sqrt{2}}Y^3,$$

$$S^z = \frac{1}{2}(X^{11} - X^{22}) = \frac{1}{\sqrt{2}}Y^4;$$

$$Y^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(X^{11} + X^{22}) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad X^{11} = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y^1 + Y^4) = \frac{1}{2} + S^z,$$

$$Y^2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(X^{12} + X^{21}) = \sqrt{2}S^x, \quad X^{12} = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y^2 + Y^3) = S^x + iS^y,$$

$$Y^3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(X^{12} - X^{21}) = i\sqrt{2}S^y, \quad X^{21} = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y^2 - Y^3) = S^x - iS^y,$$

$$Y^4 = \frac{1}{\sqrt{2}}(X^{11} - X^{22}) = \sqrt{2}S^z, \quad X^{22} = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y^1 - Y^4) = \frac{1}{2} - S^z,$$

$$(S^x)^2+(S^y)^2+(S^z)^2=\frac{3}{4},$$

$$X^{11}+X^{22}=1,\quad (Y^1)^2+(Y^2)^2+(Y^3)^2+(Y^4)^2=1. \tag{2.17}$$

Спектр власних значень гамільтоніана базисної системи H_0 (2.6) складається з двох рівнів: $E_1=-\frac{h}{2}, E_2=\frac{h}{2}$. Відповідно, статистична сума Z_0^1 має добре відомий вигляд гіперболічного косинуса:

$$Z_0^1=2ch\beta\frac{h}{2}. \tag{2.18}$$

б) модель Гайзенберга, двочастинковий кластер

Гамільтоніан системи відліку в цьому випадку має вигляд (1.2) при $f_0=2$. Міжкластерна взаємодія повністю визначається симетрійними і асимптотичними властивостями функції $J_{ff'}^{\alpha\beta}(\vec{R}_q,\vec{R}_{q'})$. Для кожної фізичної системи ці властивості мають бути конкретно задані.

H_0 діє в базисі чотирикомпонентних спінорів:

$$\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}, \tag{2.19}$$

а відповідні матриці спіна σ_f^α будуємо таким чином:

$$\begin{aligned}&\sigma_1^\alpha=S^\alpha\times I,\\&\sigma_2^\alpha=I\times S^\alpha,\end{aligned} \tag{2.20}$$

де I - одинична матриця, $\times$ - символ прямого добутку. Переставні співвідношення для σ_f^α аналогічні до (1.4).

В базисі (2.19) для H_0 маємо:

$$\begin{pmatrix}-\frac{V}{2}-h & 0 & 0 & 0\\ 0 & \frac{V}{2} & -V & 0\\ 0 & -V & \frac{V}{2} & 0\\ 0 & 0 & 0 & -\frac{V}{2}+h\end{pmatrix}. \tag{2.21}$$

Діагоналізація гамільтоніана H_0 досягається за допомогою унітарного перетворення над операторами σ_f^α, матриця якого має

вигляд:

$$W=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}. \tag{2.22}$$

Відповідно,

$$\tilde{\sigma}_1^x=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\end{pmatrix},\quad \tilde{\sigma}_2^x=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\end{pmatrix};$$

$$\tilde{\sigma}_1^y=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0\\ -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}}\\ \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}}\\ 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0\end{pmatrix},\quad \tilde{\sigma}_2^y=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0\\ \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}}\\ \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}}\\ 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0\end{pmatrix};$$

$$\tilde{\sigma}_1^z=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1\end{pmatrix},\quad \tilde{\sigma}_2^z=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1\end{pmatrix}. \tag{2.23}$$

В зображенні операторів $\tilde{\sigma}_f^\alpha$ (2.23) матриця гамільтоніана базисної системи (2.21) набирає форми:

$$H_0=\begin{pmatrix}-\frac{V}{2}-h & 0 & 0 & 0\\ 0 & \frac{3}{2}V & 0 & 0\\ 0 & 0 & -\frac{V}{2} & 0\\ 0 & 0 & 0 & -\frac{V}{2}+h\end{pmatrix}. \tag{2.24}$$

Ввівши оператори Хаббарда-Стасюка згідно співвідношення аналогічного (2.9), для (2.24) маємо:

$$H_0=\sum_{q=1}^{N}\sum_i \lambda_i X^{ii}(\vec{R}_q), \tag{2.25}$$

де λ_i є діагональні матричні елементи (2.24).

Міжкластерна частина взаємодії при цьому трансформується таким чином:

$$-\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}\sum_{q,q'=1}^{N}\sum_{f,f'=1}^{2} J_{ff'}^{\alpha\beta}(\vec{R}_q,\vec{R}_{q'})S_f^{\alpha}(\vec{R}_q)S_{f'}^{\beta}(\vec{R}_{q'}) =$$
$$= -\frac{1}{2}\sum_{q,q'=1}^{N}\sum_{mm'}\Phi_{mm'}(\vec{R}_q,\vec{R}_{q'})X^m(\vec{R}_q)X^{m'}(\vec{R}_{q'}), \tag{2.26}$$

де

$$\Phi_{mm'}(\vec{R}_q,\vec{R}_{q'}) = \sum_{\alpha,\beta}\sum_{f,f'=1}^{2} J_{ff'}^{\alpha\beta}(\vec{R}_q,\vec{R}_{q'})A_m^{(f\alpha)}A_{m'}^{(f'\beta)}, \tag{2.27}$$

$A_m^{(f\alpha)}$ - матричні елементи виразів (2.23),

$$m = 4(i-1)+j, \quad i,j = 1,...4, \quad m = 1,...16.$$

Ввівши узагальнені оператори переходу за схемою (2.15)

$$Y^{\lambda}(\vec{R}_q) = \sum_{m=1}^{16} U_{m\lambda}X^m(\vec{R}_q), \tag{2.28}$$

отримуємо:

$$H = \sum_{q=1}^{N}\sum_{\lambda=1}^{16}\Lambda_\lambda Y^{\lambda}(\vec{R}_q) - \frac{1}{2}\sum_{q,q'=1}^{N}\sum_{\lambda=1}^{16}\Phi_\lambda(\vec{R}_q,\vec{R}_{q'})Y^{\lambda}(\vec{R}_q)Y^{\lambda}(\vec{R}_{q'}). \tag{2.29}$$

Тут:

$$\sum_{m=1}^{16}\lambda_m U_{m\lambda} = \Lambda_\lambda,$$

$$\sum_{m,m'=1}^{16}\Phi_{mm'}(\vec{R}_q,\vec{R}_{q'})U_{m\lambda}U_{m'\lambda'} = \Phi_\lambda(\vec{R}_q,\vec{R}_{q'})\sigma_{\lambda\lambda'}. \tag{2.30}$$

Матрицю міжкластерної взаємодії для випадків:

$$J_{ff'}^{\alpha\beta}(\vec{R}_q,\vec{R}_{q'}) = \delta_{\alpha\beta}J_{ff'}^{\alpha\beta}(\vec{R}_q,\vec{R}_{q'}) \qquad \alpha = x,y,z \tag{2.31}$$

-гайзенбергівська далекосяжна вазємодія, та

$$J_{ff'}^{\alpha\beta}(\vec{R}_q,\vec{R}_{q'}) = \begin{cases} \delta_{\alpha\beta}J_{ff'}^{\alpha\alpha}(\vec{R}_q,\vec{R}_{q'}), & \alpha = z \\ 0, & \alpha = x,y \end{cases} \tag{2.32}$$

- ізінгівська далекосяжна взаємодія, подано в додатку I.

Матрицю U для цих типів взаємодій подано в додатку II.

При розгляді міжкластерної взаємодії гайзенбергівського типу для параметрів гамільтоніана (2.29) маємо:

$$\begin{aligned} &\Lambda_1 = -\frac{V}{\sqrt{2}}, \quad \Lambda_2 = -\sqrt{2}h, \quad \Lambda_{14} = \frac{3}{2}V, \quad \Lambda_{15} = -\frac{V}{2}; \\ &\Phi_2 = \Phi_5 = -\Phi_{11} = J_{11} + J_{12}, \\ &\Phi_4 = \Phi_7 = -\Phi_{10} = J_{11} - J_{12}. \end{aligned} \tag{2.33}$$

Усі решта Λ_λ та Φ_λ дорівнюють нулеві.

При ізінгівському типі міжкластерних взаємодій (одновісна анізотропія) відмінними від нуля параметрами гамільтоніана (2.29) є:

$$\begin{aligned} &\Lambda_1 = -\frac{V}{\sqrt{2}}, \quad \Lambda_6 = \frac{3V}{2}, \quad \Lambda_{11} = -\frac{V}{2}, \quad \Lambda_{16} = -\sqrt{2}h; \\ &\Phi_7 = J_{11} - J_{12}, \quad \Phi_{16} = J_{11} + J_{12}. \end{aligned} \tag{2.34}$$

Зауважимо, що сукупність рівнів гамільтоніана базисної системи Λ_λ є незмінною в обох випадках, як це і повинно бути, оскільки матриця унітарного перетворення U залежить тільки від міжкластерних взаємодій.

в) модель Гайзенберга, тричастинковий кластер

Гамільтоніан системи відліку в формі (1.2) при $f_0 = 3$ діє в базисі 2^3 станів

$$\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\\0\\0\\0\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\\0\\0\\0\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\\0\\0\\0\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\\0\\0\\0\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\0\\0\\0\\1\\0\\0\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\0\\0\\0\\0\\1\\0\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\0\\0\\0\\0\\0\\1\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\0\\0\\0\\0\\0\\0\\1\end{pmatrix}, \tag{2.35}$$

а відповідні матриці спіна σ_f^α мають такий вигляд:

$$\begin{aligned} \sigma_1^\alpha &= S^\alpha \times I \times I, \\ \sigma_2^\alpha &= I \times S^\alpha \times I, \\ \sigma_3^\alpha &= I \times I \times S^\alpha. \end{aligned} \tag{2.36}$$

Для H_0 маємо:

$$\begin{pmatrix} -\frac{3}{2}V-\frac{3}{2}h & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}V-\frac{1}{2}h & -V & 0 & -V & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -V & \frac{1}{2}V-\frac{1}{2}h & 0 & -V & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}V+\frac{1}{2}h & 0 & -V & -V & 0 \\ 0 & -V & -V & 0 & \frac{1}{2}V-\frac{1}{2}h & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -V & 0 & \frac{1}{2}V+\frac{1}{2}h & -V & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -V & 0 & -V & \frac{1}{2}V+\frac{1}{2}h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{3}{2}V+\frac{3}{2}h \end{pmatrix}. \tag{2.37}$$

(2.37) діагоналізується унітарним перетворенням

$$W = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & -\sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & -\sqrt{\frac{2}{3}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{2.38}$$

В результаті, для спектра тричастинкового кластера, який описується гамільтоніаном Гайзенберга в магнітному полі, отримуємо такі значення:

$$\begin{aligned} E_1 &= -\frac{3}{2}V - \frac{3}{2}h, \quad E_5 = E_7 = \frac{3}{2}V + \frac{h}{2} \\ E_2 &= E_4 = \frac{3}{2}V - \frac{h}{2}, \quad E_6 = -\frac{3}{2}V + \frac{h}{2} \\ E_3 &= -\frac{3}{2}V - \frac{h}{2}, \quad E_8 = -\frac{3}{2}V + \frac{3}{2}h \end{aligned} \tag{2.39}$$

Як бачимо, (2.39) співпадає з тим, який дає спектроскопічна формула (1.9), проте, явне врахування виродження дозволяє одразу правильно записати статистичну суму системи відліку.

Перехід до операторів Хаббарда-Стасюка а далі до узагальнених операторів переходу у системі тричастинкових кластерів здійснюється за приведеною вище схемою. В результаті отримується діагональна форма гамільтоніана, повністю адекватна (2.29), лише із тою різницею, що індекс стану кластера λ пробігає значення від

1 до 64. Явних виразів для $\tilde{\sigma}_f^\alpha$, параметрів гамільтоніана Λ_λ та $\Phi_\lambda(\vec{R}_q, \vec{R}_{q'})$ не приводимо, бо це вимагає, хоч і не складних, але достатньо громіздких розрахунків. Зауважимо тільки, що параметри тричастинкового кластерного гамільтоніана Λ_λ з точністю до нумерації співпадають з (2.39).

Таким чином, ми запропонували спосіб отримання гамільтоніана системи взаємодіючих кластерів із базисним врахуванням обмінних внутрікластерних взаємодій у зручній для подальших розрахунків гайзенбергоподібній формі (2.29). Алгоритм розрахунку не обмежує розміри кластера, проте, практичні обчислення зручно проводити для кластерів із мінімальною кількістю частинок. В подальшому, при розгляді кластерної системи типу моногідрату ацетату міді, розглянемо кластери із $f_0 = 2$. Нашим завданням є дослідження термодинаміки базисної системи і побудова функціонала статистичної суми повної системи для розрахунку термодинамічних функцій в околі точки феромагнітного фазового перетворення.

3. Термодинаміка базисної двочастинкової кластерної системи

Як ми бачили, при отриманні повного гамільтоніана системи в зображенні узагальнених операторів переходу (2.29) суттєву роль відіграє матриця унітарного перетворення U, вигляд якої визначається розмірами кластера і симетрійними властивостями потенціала міжкластерних взаємодій $J_{ff'}^{\alpha\beta}(\vec{R}_q, \vec{R}_{q'})$. Спектр гамільтоніана кластера H_0 при різних перетвореннях U залишається незмінним, може змінюватись лише нумерація його рівнів. Щоб уникнути неоднозначності, далі в цьому розділі вважатимемо, що використовується одне конкретне перетворення U, наприклад, для міжкластерних взаємодій ізінгівського типу.

Оскільки при відмінному від нуля зовнішньому полі h є співпадання станів, для яких одночасно $\Lambda_\lambda \neq 0$ і $\Phi_\lambda \neq 0$ (при розгляді моделі де-Жена таке співпадання відсутнє [4,5]), то не усі Λ_λ є рівнями гамільтоніана H_0. Це означає, що гамільтоніан кластера

$$H_0 = \sum_{q=1}^{N} \sum_{\lambda=1}^{16} \Lambda_\lambda Y^\lambda(\vec{R}_q) \tag{3.1}$$

формально не є діагональним.

Діагональним є тотожний до (3.1) гамільтоніан

$$H_0 = \sum_{q=1}^{N} \left\{ \frac{\Lambda_1 + \Lambda_{16}}{2} \left(Y^1(\vec{R}_q) + Y^{16}(\vec{R}_q) \right) + \Lambda_6 Y^6(\vec{R}_q) + \Lambda_{11} Y^{11}(\vec{R}_q) + \right.$$

$$\left. + \frac{\Lambda_1 - \Lambda_{16}}{2} \left(Y^1(\vec{R}_q) - Y^{16}(\vec{R}_q) \right) \right\}, \qquad (3.2)$$

де Λ_λ визначаються формулами (2.34). Статистична сума $Z_0 = Spe^{-\beta H_0}$ дорівнює:

$$Z_0 = 2e^{-\beta \frac{\Lambda_1}{\sqrt{2}}} ch \frac{\beta \Lambda_{16}}{\sqrt{2}} + e^{-\beta \Lambda_6} + e^{-\beta \Lambda_{11}} =$$

$$= 2e^{\beta \frac{V}{2}} ch\beta h + e^{-\frac{3}{2}\beta V} + e^{\frac{\beta V}{2}}. \qquad (3.3)$$

На основі (3.3) легко розрахувати середні значення від операторів Y^1, Y^6, Y^{11}, Y^{16} по розподілу з гамільтоніаном кластера.

$$< Y^\lambda >_0 = -\frac{\partial}{\partial \beta \Lambda_\lambda} ln Z_0.$$

$$< Y^1 >_0 = \frac{\sqrt{2} e^{-\frac{\beta \Lambda_1}{\sqrt{2}}} ch \frac{\beta \Lambda_{16}}{\sqrt{2}}}{Z_0}, \quad < Y^6 >_0 = \frac{e^{-\beta \Lambda_6}}{Z_0},$$

$$< Y^{11} >_0 = \frac{e^{-\beta \Lambda_{11}}}{Z_0}, \quad < Y^{16} >_0 = -\frac{\sqrt{2} e^{-\frac{\beta \Lambda_1}{\sqrt{2}}} sh \frac{\beta \Lambda_{16}}{\sqrt{2}}}{Z_0}. \qquad (3.4)$$

Термодинамічні функції базисної системи одержуються на основі вільної енергії

$$F_0 = -\frac{1}{\beta} ln Z_0 = -\frac{1}{\beta} ln \left\{ e^{-\frac{3\beta V}{2}} + e^{\frac{\beta V}{2}} (1 + 2ch\beta h) \right\}. \qquad (3.5)$$

Для ентропії (S), внутрішньої енергії (u), питомої тепломісткості (C_v), магнітного моменту (M) та магнітної сприйнятливості (χ) маємо такі формули:

$$S = -\left(\frac{\partial F_0}{\partial T} \right)_h = kln \left\{ e^{-\frac{-3\beta V}{2}} + e^{\frac{\beta V}{2}} (1 + 2ch\beta h) \right\} +$$

$$+ \frac{3\beta V - \beta V e^{2\beta V} (1 + 2ch\beta h) - 4\beta h e^{2\beta V} sh\beta h}{2[1 + e^{2\beta V}(1 + 2ch\beta h)]};$$

$$u = F_0 + TS = \frac{3V - Ve^{2\beta V}(1 + 2ch\beta h) - 4hsh\beta h}{2[1 + e^{2\beta V}(1 + 2ch\beta h)]};$$

$$C_v = \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_v = ke^{2\beta V} \left\{ \frac{\beta^2 V^2 (1 + 2ch\beta h) + 5\beta h \beta V sh\beta h + 2\beta^2 h^2 sh\beta h}{1 + e^{2\beta V}(1 + 2ch\beta h)} + \right.$$

$$\left. + \frac{[3\beta V - \beta V (1 + 2ch\beta h) e^{2\beta V} - 4\beta h e^{2\beta V} sh\beta h][\beta V (1 + 2ch\beta h) - \beta h sh\beta h]}{[1 + e^{2\beta h}(1 + 2ch\beta V)]^2} \right\};$$

$$M = -\left(\frac{\partial F_0}{\partial h} \right)_T = \frac{2e^{2\beta V} sh\beta h}{1 + e^{2\beta V}(1 + 2ch\beta h)};$$

$$\chi = \left(\frac{\partial^2 F_0}{\partial h^2} \right)_T = \beta \left\{ \frac{2e^{2\beta V} ch\beta h}{1 + e^{2\beta V}(1 + 2ch\beta h)} - \left[\frac{2e^{2\beta V} sh\beta h}{1 + e^{2\beta V}(1 + 2ch\beta h)} \right]^2 \right\}. \qquad (3.6)$$

Повний магнітний момент кластера визначається, з іншого боку, статистичним середнім від суми z- проекцій обох спінів, які входять в цей кластер.

$$M(\vec{R}_q) = < \sigma_1^z(\vec{R}_q) + \sigma_2^z(\vec{R}_q) > . \qquad (3.7)$$

Згідно співвідношень (2.9), (2.10), (2.22), (2.23), (2.28) та вигляду матриці U (додаток 2б) отримуємо:

$$M(\vec{R}_q) = < \sigma_1^z(\vec{R}_q) + \sigma_2^z(\vec{R}_q) > = \sqrt{2} < Y^{16}(\vec{R}_q) > . \qquad (3.8)$$

Таким чином, магнітний момент кластера повністю визначається статистичним середнім від лише однієї компоненти $< Y^{16}(\vec{R}_q) >$, яку можна вважати "активною" в фазовому перетворенні (див. відповідну класифікацію в [7]). Якщо $< Y^{16}(\vec{R}_q) >$ не залежить від q, то отримуємо однорідний по кристалу порядок - феромагнітний стан. Усі інші можливі впорядкування (антиферомагнітне, феримагнітне, різноманітне модульоване і т.п.) однозначно визначаються просторовим розподілом $< Y^{16}(\vec{R}_q) >$.

Легко переконатись, що при усередненні в (3.8) по розподілу із H_0 M співпадає з відповідним виразом у (3.6).

У відсутності зовнішнього поля $(h = 0)$ із (3.6) отримуються такі прості вирази:

$$F_0 = -\frac{1}{\beta} ln \left\{ e^{-\frac{3}{2}\beta V} + 3e^{\frac{\beta V}{2}} \right\},$$

$$S = kln \left\{ e^{-\frac{3}{2}\beta V} + 3e^{\frac{\beta V}{2}} \right\} + \frac{3}{2}\beta V \frac{1 - e^{2\beta V}}{1 + 3e^{2\beta V}},$$

$$u = \frac{3V(1 - e^{2\beta V})}{2(1 + 3e^{2\beta V})},$$

$$C_v = \frac{12k\beta^2 V^2 e^{2\beta V}}{(1+3e^{2\beta V})^2},$$

$$M = 0, \quad \chi = \beta \frac{2e^{2\beta V}}{1+3e^{2\beta V}}. \tag{3.9}$$

Цікавою є поведінка отриманих величин при низьких температурах. При $V < 0$ (відштовхування частинок-спінів у кластері):

$$\lim_{T\to 0} S = 0, \quad \lim_{T\to 0} C_v = 0, \quad \lim_{T\to 0} \chi = 0, \tag{3.10}$$

як це і повинно бути в термодинамічно стійкій системі. При $V > 0$ (притягання частинок-спінів у кластері):

$$\lim_{T\to 0} S = kln3, \quad \lim_{T\to 0} C_v = 0, \quad \lim_{T\to 0} \chi = \infty. \tag{3.11}$$

Подібна асимптотика може свідчити про нестійкість системи відліку при $T \to 0$ і про можливість фазового перетворення другого роду з $T_c = 0$.

4. Функціонал статистичної суми

Загальна методика отримання функціонального зображення для статистичної суми кластерної системи, що описується гамільтоніаном типу (2.29) з некомутуючими операторами переходу $Y^\lambda(\vec{R}_q)$, була розроблена в [4,5]. Квантовий характер системи зумовив необхідність застосування зображення взаємодії і, відповідно, появу залежності колективних змінних та коефіцієнтів функціонала від мацубарівських частот [7]. Використовуючи отримані в [4] загальні формули, зосередимо увагу на розрахунку кластерних кумулянтних середніх від добутку операторів $Y^\lambda(\vec{R}_q)$ для конкретних систем, які розглядаються в даній роботі.

Повний функціонал статистичної суми системи взємодіючих кластерів в зображенні колективних змінних має вигляд [7]:

$$Z = Z_0 \int (d\rho_\lambda(\vec{k},\nu))^N \prod_\lambda \prod_{k\le B} \prod_\nu J(\rho_\lambda,(\vec{k},\nu)) \times$$

$$\times exp\left\{ \frac{\beta}{2} \sum_\lambda \sum_{k\le B} \sum_\nu \Phi_\lambda(\vec{k}) \rho_\lambda(\vec{k},\nu) \rho_\lambda(-\vec{k},-\nu) \right\}. \tag{4.1}$$

Тут

$$\rho_\lambda(\vec{k},\nu) = \frac{1}{\sqrt{N\beta}} \int_0^\beta d\beta' e^{-i\beta'\nu} Sp\left[\sum_{q=1}^N e^{-\beta' H_0} Y^\lambda(\vec{R}_q) e^{\beta' H_0} e^{i\vec{k}\vec{R}_q} J(\rho_\lambda, Y^\lambda) \right] \times$$

$$\times \left\{ Sp\left[J(\rho_\lambda, Y^\lambda) \right] \right\}^{-1} - \tag{4.2}$$

- колективна змінна в частотно-імпульсному зображенні; $\omega_\lambda(\vec{k},\nu)$- величина, спряжена до $\rho_\lambda(\vec{k},\nu)$, $\Phi_\lambda(\vec{k})$- фур'є-зображення λ-го власного значення матриці далекосяжних міжкластерних взаємодій;

$$\nu = \frac{2\pi}{\beta} n, \qquad \nu = \frac{\pi}{\beta}(2n+1), \qquad (n = 0, \pm 1, \pm 2, ...) \tag{4.3}$$

- мацубарівські частоти (бозевські і ферміївські).

$$J(\rho_\lambda,(\vec{k},\nu)) =< J(\rho_\lambda, Y^\lambda) >_0 = \int (d\omega_\lambda(\vec{k},\nu))^N exp\left\{ i2\pi \sum_\lambda \sum_{k\le B} \sum_\nu \times \right.$$

$$\left. \times\, \omega_\lambda(\vec{k},\nu)\rho_\lambda(\vec{k},\nu) \right\} exp\left\{ \sum_{n=1}^\infty \frac{(-i2\pi)^n}{n!} \sum_{\lambda_1,k_1,\nu} ... \sum_{\lambda_n,k_n,\nu_n} \times \right.$$

$$\left. \mathcal{M}_{\lambda_1...\lambda_n}(\vec{k}_1,\nu_1,...,\vec{k}_n,\nu_n)\omega_{\lambda_1}(\vec{k}_1,\nu_1)...\omega_{\lambda_n}(\vec{k}_n,\nu_n) \right\} \tag{4.4}$$

- якобіан переходу до колективних змінних;

$$\mathcal{M}_{\lambda_1...\lambda_n}(\vec{k}_1,\nu_1,...,\vec{k}_n,\nu_n) = \frac{\partial^4}{\partial\omega_{\lambda_1}(\vec{k}_1,\nu_1)...\partial\omega_{\lambda_n}(\vec{k}_n,\nu_n)}$$

$$ln < Texp\left\{ \sum_\lambda \sum_{k,\nu} \omega_\lambda(\vec{k},\nu)\hat{\rho}_\lambda(\vec{k},\nu) \right\} >_{0|\omega} = 0 \tag{4.5}$$

- кластерні кумулянти;

$$\hat{\rho}_\lambda(\vec{k},\nu) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \int_0^\beta d\beta' e^{-i\beta'\nu} \sum_{q=1}^N e^{-\beta' H_0} Y^\lambda(\vec{R}_q) e^{\beta' H_0} e^{i\vec{k}\vec{R}_q}; \tag{4.6}$$

T- символ "часового" впорядкування відносно оберненої температури $\beta = \frac{1}{kT}$.

Форма (4.1), (4.4) містить усі степені колективних змінних $\rho_\lambda(\vec{k},\nu)$ і тому не може бути проінтегрована в явному вигляді. Звичайно в (4.4) обмежуються другою або четвертою степінню змінних з тим, щоб отримані вирази були нерозбіжними при усіх значеннях температури і параметрів гамільтоніана. Відповідний розподіл колективних змінних називається базисним. В даній роботі обмежимось четвертим базисним розподілом, який широко використовується в теорії фазових перетворень другого роду. Зауважимо, що внаслідок існування зовнішнього магнітного поля базисний розподіл міститиме доданки з парними і непарними степенями змінних до четвертого включно. Основою розподілу є кумулянти $\mathcal{M}_{\lambda_1 \dots \lambda_n}$ $(\vec{k}_1, \nu_1, ..., \vec{k}_n, \nu_n)$.

а) міжкластерні взаємодії ізінгівського типу

При розрахунку кумулянтних середніх від добутку узагальнених операторів переходу в цьому випадку виходитимемо із рівності (2.28), додатка 2б і формули (4.5). Оскільки в колективних змінних описується лише далекосяжна частина взаємодії (короткосяжний кластерний потенціал враховується точно гамільтоніаном H_0), то з усіх кумулянтних середніх, можливих в даній системі, нас цікавлять лише такі, в які входять оператори $Y^\lambda(\vec{R}_q)$ з $\lambda = 7, 16$ (див.(2.34)):

$$\begin{aligned} Y^7 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(X^{23} + X^{32}), \\ Y^{16} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(X^{11} - X^{44}) \end{aligned} \tag{4.7}$$

(індекси ij в операторах Хаббарда-Стасюка є звичайними).

Нагадаємо переставні співвідношення для операторів $X^{ij}(R_q)$:

$$\begin{aligned} \left[X^{i_1 j_1}(\vec{R}_{q_1}), X^{i_2 j_2}(\vec{R}_{q_2})\right]_{\pm} = \Big(X^{i_1 j_2}(\vec{R}_{q_1})\delta_{j_1, i_2} \pm \\ \pm X^{i_2 j_1}(\vec{R}_{q_1})\delta_{j_2, i_1}\Big)\, \delta_{q_1, q_2}. \end{aligned} \tag{4.8}$$

В (4.8) береться комутатор у випадку хоча б одного з операторів бозе-типу, антикомутатор - якщо обидва оператори фермі-типу.

Можна показати (детально про це див. [4]), що усі оператори X^{ij} в (4.7) є операторами бозе-типу.

Відзначимо одну цікаву властивість середніх від операторів Хаббарда-Стасюка, яка випливає з умови інваріантності шпура щодо циклічної перестановки операторів під його знаком і співвідношення:

$$\rho_0 X^{ij}(\vec{R}_q, \beta') = e^{-\beta \lambda_{ij}} X^{ij}(\vec{R}_q, \beta')\rho_0, \tag{4.9}$$

тут

$$X^{ij}(\vec{R}_q, \beta') = e^{-\beta' H_0} X^{ij}(\vec{R}_q) e^{\beta' H_0}. \tag{4.10}$$

(Принагідно зауважимо, що внаслідок кумутування діагональних операторів Хаббарда-Стасюка з гамільтоніаном H_0 $X^{ii}(\vec{R}_q, \beta') = X^{ii}(\vec{R}_q)$.

Виконуючи циклічну перестановку операторів під знаком середнього, аж до повернення їх у початкове положення, та враховуючи рівність (4.9), бачимо, що

$$< X^{i_1 j_1}(\vec{R}_{q_1}, \beta_1) X^{i_2 j_2}(\vec{R}_{q_2}, \beta_2) X^{i_3 j_3}(\vec{R}_{q_3}, \beta_3) ... >= 0 \tag{4.11}$$

при $\lambda_{i_1 j_1} + \lambda_{i_2 j_2} + \lambda_{i_3 j_3} + ... \neq 0$.

Ця властивість дозволяє суттєво скоротити число розглядуваних середніх за рахунок відкидання тих, які завідомо дорівнюють нулеві.

На основі виразів (2.28), (4.5) і зображення (4.6) отримуємо робочу формулу для розрахунку кумулянтів n-го порядку:

$$\begin{aligned} &\mathcal{M}_{\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n}(\vec{k}_1, \nu_1, \vec{k}_2, \nu_2, ... \vec{k}_n, \nu_n) = \\ &\frac{1}{N^{n/2}} \sum_{q_1, q_2, \dots q_n = 1} exp\left\{-i\left[\vec{k}_1 \vec{R}_{q_1} + \vec{k}_2 \vec{R}_{q_2} + ... + \vec{k}_n \vec{R}_{q_n}\right]\right\} \times \\ &\times \frac{1}{\beta^n} \int_0^\beta d\beta_1 \int_0^\beta d\beta_2 ... \int_0^\beta d\beta_n exp\left\{i\left[\beta_1 \nu_1 + \beta_2 \nu_2 + ... + \beta_n \nu_n\right]\right\} \times \\ &\sum_{i_1, j_1, i_2, j_2, \dots i_n, j_n} U_{i_1 j_1 \lambda_1} U_{i_2 j_2 \lambda_2} ... U_{i_n j_n \lambda_n} \\ &< T X^{i_1 j_1}(\vec{R}_{q_1} \beta_1) X^{i_2 j_2}(\vec{R}_{q_2} \beta_2) ... X^{i_n j_n}(\vec{R}_{q_n} \beta_n) >_0^c \end{aligned} \tag{4.12}$$

Серед кумулянтів першого порядку єдиним відмінним від нуля є кумулянт із $\lambda = 16$

$$\mathcal{M}_{16}(\vec{k}, \nu) = \frac{\sqrt{2} sh\beta h}{1 + 2ch\beta h + e^{-2\beta V}} \delta(\vec{k})\delta(\nu). \tag{4.13}$$

Для кумулянтів другого порядку з (4.12) отримуємо такий загальний вираз:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{\lambda\lambda'}(\vec{k}_1, \nu_1, \vec{k}_2, \nu_2) = \sum_{i,j} U_{ij\lambda} U_{ji\lambda'} K_{\pm}^{\lambda_{ji}}(\nu) \\ < X^{ii} - X^{jj} >_0 \delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2)\delta(\nu_1 + \nu_2), \end{aligned} \tag{4.14}$$

в якому

$$K_{\pm}^{\lambda_{ji}}(\nu) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\beta' e^{-i\beta'\nu} \frac{e^{-\beta'\lambda_{ji}}}{1 \mp e^{-\beta\lambda_{ji}}} = \frac{1}{\beta(\lambda_{ji} + i\nu)} \tag{4.15}$$

верхній знак відповідає статистиці бозе, а нижній – фермі для операторів X^{ij}).

Підставляючи в (4.14) необхідні вирази, отримуємо:

$$\mathcal{M}_{77}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2)=\frac{4Ve^{-\beta V}sh\beta V}{\beta(4V^2+\nu^2)(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})}\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2)\delta(\nu_1+\nu_2),$$

$$\begin{aligned}
&\mathcal{M}_{16\ 16}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2)=\left(\frac{ch\beta h}{1+2ch\beta h+e^{-2\beta V}}-\right.\\
&\left.-\frac{2sh^2\beta h}{(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})^2}\right)\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2),\qquad \text{при}\quad \nu=0,\\
&\mathcal{M}_{16\ 16}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2)=0\qquad\qquad \text{при}\quad \nu\neq 0,\\
&\mathcal{M}_{7\ 16}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2)=0. \qquad (4.16)
\end{aligned}$$

Шляхом перестановки операторів $X^{ij}(\vec{R}_\rho,\beta')$ під знаком T- добутку неважко отримати вираз для середнього значення добутку трьох операторів Хаббарда-Стасюка у вигляді суми усіх можливих спарювань:

$$\begin{aligned}
&<TX^{i_1j_1}(\vec{R}_{q_1}\beta_1)X^{i_2j_2}(\vec{R}_{q_2}\beta_2)X^{i_3j_3}(\vec{R}_{q_3}\beta_3)>_0=\\
&=\big\{K^{\lambda i_3i_2}(\beta_1-\beta_3)K^{\lambda i_2i_1}(\beta_1-\beta_2)<X^{i_1i_1}-X^{i_2i_2}>_0\ \delta_{i_1j_2}\delta_{i_2j_3}\delta_{i_3j_1}-\\
&-K^{\lambda i_3i_1}(\beta_1-\beta_3)K^{\lambda i_2i_3}(\beta_1-\beta_2)<X^{i_3i_3}-X^{i_2i_2}>_0\ \delta_{i_1j_3}\delta_{i_2j_1}\delta_{i_3j_2}+\\
&+K^{\lambda i_3i_1}(\beta_1-\beta_3)K^{\lambda i_2i_1}(\beta_1-\beta_2)<X^{i_1i_1}-X^{i_2i_2}>_0\ \delta_{i_1j_3}\delta_{i_2j_1}\delta_{i_3j_2}-\\
&-K^{\lambda i_3i_2}(\beta_1-\beta_3)K^{\lambda i_3i_1}(\beta_1-\beta_2)<X^{i_1i_1}-X^{i_3i_3}>_0\ \delta_{i_1j_2}\delta_{i_2j_3}\delta_{i_3j_1}\big\}\times\\
&\times\delta_{q_1q_2}\delta_{q_2q_3}. \qquad (4.17)
\end{aligned}$$

Пригадуючи значення матричних елементів $U_{ij\lambda}$ (додаток 2б), а також властивості середніх від добутку діагональних операторів $X^{ii}(\vec{R}_q,\beta')$:

$$\begin{aligned}
&<X^{i_1j_1}(\vec{R}_{q_1},\beta_1)X^{i_2j_2}(\vec{R}_{q_2},\beta_2)<X^{i_3j_3}(\vec{R}_{q_3},\beta_3)...>_0=\\
&X^{i_1j_1}(\vec{R}_{q_1})>_0\ \delta_{i_1i_2}\delta_{i_2i_3}...\delta_{q_1q_2}\delta_{q_2q_3}...=\frac{e^{-\beta\lambda_{i_1}}}{Z_0}, \qquad (4.18)
\end{aligned}$$

для потрійних кумулянтів отримаємо:

$$\begin{aligned}
&\mathcal{M}_{777}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3)=0,\\
&\mathcal{M}_{16\ 16\ 16}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3)=\frac{sh\beta h}{\sqrt{2}(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})}\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3)\delta(\nu)-
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&-\frac{3\sqrt{2}sh\beta hch\beta h}{(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})^2}\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2)\delta(\vec{k}_3)\delta(\nu)+\frac{4\sqrt{2}sh^3\beta h}{(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})^3}\delta(\vec{k})\delta(\nu),\\
&\mathcal{M}_{7\ 7\ 16}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3)=-\frac{4\sqrt{2}Ve^{-\beta V}sh\beta V}{\beta(4V^2+\nu^2)}\times\\
&\times\frac{sh\beta h}{(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})^2}\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2)\delta(\vec{k}_3)\delta(\nu_1+\nu_2)\delta(\nu_3),\\
&\mathcal{M}_{7\ 16\ 16}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3)=0. \qquad (4.19)
\end{aligned}$$

Для розрахунку кумулянтів четвертого порядку за формулою (4.12) необхідно мати вираз для кумулянтних середніх добутку чотирьох операторів Хаббарда-Стасюка. Діючи як і при отриманні формули (4.17), а також передбачаючи застосування в подальшому отриманих загальних виразів для операторів $X^{ij}(\vec{R}_\rho,\beta)$ із змішаною бозе-ферміївською статистикою, отримуємо:

$$\begin{aligned}
&\{\pm K^{\lambda_{i_4i_3}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_3i_2}}(\nu_3)K^{\lambda_{i_2i_1}}(\nu_2)<X^{i_1i_1}\mp X^{i_2i_2}>_0\ \delta_{i_1j_2}\delta_{i_2j_3}\delta_{i_3j_4}\delta_{i_4j_1}\mp\\
&\mp K^{\lambda_{i_4i_2}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_3i_1}}(\nu_3)K^{\lambda_{i_2i_3}}(\nu_2)<X^{i_3i_3}\mp X^{i_2i_2}>_0\ \delta_{i_1j_3}\delta_{i_2j_4}\delta_{i_3j_2}\delta_{i_4j_1}-\\
&-K^{\lambda_{i_4i_1}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_3i_2}}(\nu_3)K^{\lambda_{i_2i_4}}(\nu_2)<X^{i_4i_4}\mp X^{i_2i_2}>_0\ \delta_{i_1j_4}\delta_{i_2j_3}\delta_{i_3j_1}\delta_{i_4j_2}+\\
&+K^{\lambda_{i_4i_1}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_3i_4}}(\nu_3)K^{\lambda_{i_2i_3}}(\nu_2)<X^{i_3i_3}\mp X^{i_2i_2}>_0\ \delta_{i_1j_4}\delta_{i_2j_1}\delta_{i_3j_2}\delta_{i_4j_3}+\\
&+K^{\lambda_{i_4i_2}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_3i_1}}(\nu_3)K^{\lambda_{i_2i_1}}(\nu_2+\nu_3)<X^{i_1i_1}-X^{i_2i_2}>_0\ \delta_{i_1j_3}\delta_{i_2j_4}\delta_{i_3j_2}\delta_{i_4j_1}\mp\\
&\mp K^{\lambda_{i_4i_3}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_3i_2}}(\nu_2)K^{\lambda_{i_3i_1}}(\nu_2+\nu_3)<X^{i_1i_1}-X^{i_3i_3}>_0\ \delta_{i_1j_2}\delta_{i_2j_3}\delta_{i_3j_4}\delta_{i_4j_1}\mp\\
&\mp K^{\lambda_{i_4i_1}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_3i_4}}(\nu_2)K^{\lambda_{i_2i_4}}(\nu_2+\nu_3)<X^{i_4i_4}-X^{i_2i_2}>_0\ \delta_{i_1j_4}\delta_{i_2j_1}\delta_{i_3j_2}\delta_{i_4j_3}+\\
&+K^{\lambda_{i_4i_1}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_3i_2}}(\nu_2)K^{\lambda_{i_3i_4}}(\nu_2+\nu_3)<X^{i_4i_4}-X^{i_3i_3}>_0\ \delta_{i_1j_4}\delta_{i_2j_3}\delta_{i_3j_1}\delta_{i_4j_2}\pm\\
&\pm K^{\lambda_{i_4i_1}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_3i_2}}(\nu_3)K^{\lambda_{i_2i_1}}(\nu_2+\nu_3)<X^{i_1i_1}-X^{i_2i_2}>_0\ \delta_{i_1j_4}\delta_{i_2j_3}\delta_{i_3j_1}\delta_{i_4j_2}-\\
&-K^{\lambda_{i_4i_3}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_3i_1}}(\nu_3)K^{\lambda_{i_2i_3}}(\nu_2+\nu_4)<X^{i_3i_3}-X^{i_2i_2}>_0\ \delta_{i_1j_3}\delta_{i_2j_1}\delta_{i_3j_4}\delta_{i_4j_2}-\\
&-K^{\lambda_{i_4i_2}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_3i_4}}(\nu_3)K^{\lambda_{i_4i_1}}(\nu_2+\nu_4)<X^{i_1i_1}-X^{i_4i_4}>_0\ \delta_{i_1j_2}\delta_{i_2j_4}\delta_{i_3j_1}\delta_{i_4j_3}\pm\\
&\pm K^{\lambda_{i_4i_2}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_3i_1}}(\nu_3)K^{\lambda_{i_4i_3}}(\nu_2+\nu_4)<X^{i_3i_3}-X^{i_4i_4}>_0\ \delta_{i_1j_3}\delta_{i_2j_4}\delta_{i_3j_2}\delta_{i_4j_1}\pm\\
&\pm K^{\lambda_{i_4i_3}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_3i_1}}(\nu_3)K^{\lambda_{i_2i_1}}(-\nu_1)<X^{i_1i_1}\mp X^{i_2i_2}>_0\ \delta_{i_1j_3}\delta_{i_2j_1}\delta_{i_3j_4}\delta_{i_4j_2}\mp\\
&\mp K^{\lambda_{i_4i_1}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_3i_2}}(\nu_3)K^{\lambda_{i_3i_1}}(-\nu_1)<X^{i_1i_1}\mp X^{i_3i_3}>_0\ \delta_{i_1j_4}\delta_{i_2j_3}\delta_{i_3j_1}\delta_{i_4j_2}-\\
&-K^{\lambda_{i_4i_2}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_3i_1}}(\nu_3)K^{\lambda_{i_4i_1}}(-\nu_1)<X^{i_1i_1}\mp X^{i_4i_4}>_0\ \delta_{i_1j_3}\delta_{i_2j_4}\delta_{i_3j_2}\delta_{i_4j_1}+\\
&+K^{\lambda_{i_4i_2}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_3i_4}}(\nu_2)K^{\lambda_{i_3i_1}}(-\nu_1)<X^{i_1i_1}\mp X^{i_3i_3}>_0\ \delta_{i_1j_2}\delta_{i_2j_4}\delta_{i_3j_1}\delta_{i_4j_3}+\\
&+K^{\lambda_{i_4i_2}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_3i_2}}(\nu_3+\nu_4)K^{\lambda_{i_2i_1}}(\nu_2)<X^{i_1i_1}\mp X^{i_2i_2}>_0\ \delta_{i_1j_2}\delta_{i_2j_4}\delta_{i_3j_1}\delta_{i_4j_3}-
\end{aligned}$$

$$-K^{\lambda_{i_4 i_1}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_3 i_1}}(\nu_3{+}\nu_4)K^{\lambda_{i_2 i_3}}(\nu_2) < X^{i_3 i_3} \mp X^{i_2 i_2} >_0 \delta_{i_1 j_4}\delta_{i_2 j_1}\delta_{i_3 j_2}\delta_{i_4 j_3} \mp$$
$$\mp K^{\lambda_{i_4 i_3}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_4 i_2}}(\nu_3{+}\nu_4)K^{\lambda_{i_2 i_1}}(\nu_2) < X^{i_1 i_1} \mp X^{i_2 i_2} >_0 \delta_{i_1 j_2}\delta_{i_2 j_3}\delta_{i_3 j_4}\delta_{i_4 j_1} \pm$$
$$\pm K^{\lambda_{i_4 i_3}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_4 i_1}}(\nu_3{+}\nu_4)K^{\lambda_{i_2 i_4}}(\nu_2) < X^{i_4 i_4} \mp X^{i_2 i_2} >_0 \delta_{i_1 j_3}\delta_{i_2 j_1}\delta_{i_3 j_4}\delta_{i_4 j_2} +$$
$$+K^{\lambda_{i_4 i_1}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_3 i_1}}(\nu_3{+}\nu_4)K^{\lambda_{i_2 i_1}}(-\nu_1) < X^{i_1 i_1} \mp X^{i_2 i_2} >_0 \delta_{i_1 j_4}\delta_{i_2 j_1}\delta_{i_3 j_2}\delta_{i_4 j_3} -$$
$$-K^{\lambda_{i_4 i_2}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_3 i_2}}(\nu_3{+}\nu_4)K^{\lambda_{i_3 i_1}}(-\nu_1) < X^{i_1 i_1} \mp X^{i_3 i_3} >_0 \delta_{i_1 j_2}\delta_{i_2 j_4}\delta_{i_3 j_1}\delta_{i_4 j_3} \mp$$
$$\mp K^{\lambda_{i_4 i_3}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_4 i_1}}(\nu_3{+}\nu_4)K^{\lambda_{i_2 i_1}}(-\nu_1) < X^{i_1 i_1} \mp X^{i_2 i_2} >_0 \delta_{i_1 j_3}\delta_{i_2 j_1}\delta_{i_3 j_4}\delta_{i_4 j_2} \pm$$
$$\pm K^{\lambda_{i_4 i_3}}(\nu_4)K^{\lambda_{i_4 i_2}}(\nu_3+\nu_4)K^{\lambda_{i_4 i_1}}(-\nu_1) < X^{i_1 i_1} \mp X^{i_4 i_4} >_0 \delta_{i_1 j_2}\delta_{i_2 j_3}\delta_{i_3 j_4}\delta_{i_4 j_1} \Big\} \times$$
$$\times \delta_{12}\delta_{23}\delta_{34}, \tag{4.20}$$

де верхній знак відповідає статистиці бозе, а нижній - фермі. Тут слід зауважити, що в результаті антикомутації двох операторів Хаббарда-Стасюка фермі-типу отримується оператор бозе-типу, а в результаті комутації двох операторів бозе-типу або оператора бозе-типу з оператором фермі-типу отримуються оператори бозе- і фермі-типу відповідно [4]. Це й враховано при виведенні формули (4.20).

Як уже відзначалось вище, оператори $X^{11}(\vec{R}_q)$, $X^{44}(\vec{R}_q)$, $X^{23}(\vec{R}_q)$, $X^{32}(\vec{R}_q)$ відносяться до операторів Хаббарда-Стасюка бозе-типу.

У припущенні, що усі мацубарівські частоти ν_i в (4.20) рівні ($|\nu_i| = \nu$), приходимо до таких виразів для кумулянтів четвертого порядку:

$$\mathcal{M}_{7777}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3,\vec{k}_4,\nu_4) = \frac{3e^{-\beta V}\left[\delta(\nu)ch\beta V - \frac{4V sh\beta V}{\beta(4V^2+\nu^2)}\right]}{2\beta^2(4V^2+\nu^2)(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V}}\times$$
$$\times\delta(\vec{k}_1{+}\vec{k}_2{+}\vec{k}_3{+}\vec{k}_4)\delta(\nu_1{+}\nu_2{+}\nu_3{+}\nu_4) - \frac{48V^2e^{-2\beta V}sh^2\beta V}{\beta^2(4V^2+\nu^2)^2(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})^2}\times$$
$$\times\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2)\delta(\vec{k}_3+\vec{k}_4)\delta(\nu_1+\nu_2)\delta(\nu_3+\nu_4),$$

$$\mathcal{M}_{16\ 16\ 16\ 16}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3,\vec{k}_4,\nu_4) = \frac{ch\beta h}{2(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})}\times$$
$$\times\delta(\vec{k}_1{+}\vec{k}_2{+}\vec{k}_3{+}\vec{k}_4)\delta(\nu_i) - \frac{4sh^2\beta h}{(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})^2}\delta(\vec{k}_1{+}\vec{k}_2{+}\vec{k}_3)\delta(\vec{k}_4)\delta(\nu_i) -$$
$$-\frac{3ch^2\beta h}{(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})^2}\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2)\delta(\vec{k}_3+\vec{k}_4)\delta(\nu_i) +$$

$$+\frac{24ch\beta h sh^2\beta h}{(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})^3}\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2)\delta(\vec{k}_3)\delta(\vec{k}_4)\delta(\nu_i) -$$
$$-\frac{24sh^4\beta h}{(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})^4}\delta(\vec{k})\delta(\nu_i),$$

$$\mathcal{M}_{16\ 16\ 7\ 7}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3,\vec{k}_4,\nu_4) =$$
$$-\frac{4Ve^{-\beta V}sh\beta V ch\beta h}{\beta(4V^2+\nu^2)(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})^2}\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2)\delta(\vec{k}_3+\vec{k}_4)\delta(\nu_1)\delta(\nu_2)\times$$
$$\times\delta(\nu_3+\nu_4) + \frac{8Ve^{-\beta V}sh\beta V sh^2\beta h}{\beta(4V^2+\nu^2)(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})^3}\times$$
$$\times\delta(\vec{k}_1)\delta(\vec{k}_2)\delta(\vec{k}_3+\vec{k}_4)\delta(\nu_1)\delta(\nu_2)\delta(\nu_3+\nu_4), \tag{4.21}$$

усі інші кумулянти цього порядку дорівнюють нулеві.

Підставивши отримані кумулянти в якобіан переходу до колективних змінних (4.4), можемо в явному вигляді записати функціонал статистичної суми кластерної магнітної системи (двочастинкові кластери) з далекосяжною взаємодією ізингівського типу:

$$Z = Z_0 \int \left(d\rho_\lambda(\vec{k},\nu)\right)^N exp\left\{\sum_{\lambda=7,16}\sum_{k,\nu}\frac{\beta}{2}\Phi_\lambda(\vec{k})\rho_\lambda(\vec{k},\nu)\rho_\lambda(-\vec{k},-\nu)\right\}\times$$
$$\times\int\left(d\omega_\lambda(\vec{k},\nu)\right)^N exp\Bigg\{ i2\pi\sum_{\lambda=7,16}\sum_{k,\nu}(\rho_\lambda(\vec{k},\nu) - \mathcal{M}_\lambda(\vec{k},\nu)\delta_{\lambda\ 16})\omega_\lambda(\vec{k},\nu) -$$
$$-\frac{(2\pi)^2}{2}\sum_{\lambda=7,16}\sum_{k,\nu}\mathcal{M}_{\lambda\lambda}(\vec{k},\nu,-\vec{k},-\nu)\omega_\lambda(\vec{k},\nu)\omega_\lambda(-\vec{k},-\nu) +$$
$$+\frac{i(2\pi)^3}{3!}\sum_{\lambda_1,\lambda_2=7,16}\sum_{\substack{k_1,k_2,k_3\\ \nu_1,\nu_2,\nu_3}}\mathcal{M}_{\lambda_1\lambda_1\lambda_2}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3)\times$$
$$\times\left(\delta_{\lambda_1 16}\delta_{\lambda_2 16}+\delta_{\lambda_1 7}\delta_{\lambda_2 16}\right)\omega_{\lambda_1}(\vec{k}_1,\nu_1)\omega_{\lambda_1}(\vec{k}_2,\nu_2)\omega_{\lambda_2}(\vec{k}_3,\nu_3) +$$
$$+\frac{(2\pi)^4}{4!}\sum_{\lambda_1\lambda_2=7,16}\sum_{\substack{k_1,k_2,k_3,k_4\\ \nu_1,\nu_2,\nu_3,\nu_4}}\mathcal{M}_{\lambda_1\lambda_1\lambda_2\lambda_2}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3,\vec{k}_4,\nu_4)\left(\delta_{\lambda_1 7}\delta_{\lambda_2 7}+\right.$$
$$\left.+\delta_{\lambda_1 16}\delta_{\lambda_2 16}+\delta_{\lambda_1 16}\delta_{\lambda_2 7}\right)\omega_{\lambda_1}(\vec{k}_1,\nu_1)\omega_{\lambda_1}(\vec{k}_2,\nu_2)\omega_{\lambda_2}(\vec{k}_3,\nu_3)\omega_{\lambda_2}(\vec{k}_4,\nu_4)\Bigg\}. \tag{4.22}$$

Можна переконатись, що при відсутності зовнішнього поля ($h = 0$) функціональна форма (4.22) містить кумулянти лише парних порядків.

В лінійному наближенні по h (малі поля) вирази для кумулянтів є наступними:

$$\mathcal{M}_{16}(\vec{k},\nu) = \frac{\sqrt{2}\beta h}{3+e^{-2\beta V}}\delta(\vec{k})\delta(\nu),$$

$$\mathcal{M}_{77}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2) = \frac{4Ve^{-\beta V}sh\beta V}{\beta(4V^2+\nu^2)(3+e^{-2\beta V})}\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2)\delta(\nu_1+\nu_2),$$

$$\mathcal{M}_{16\ 16}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2) = \frac{1}{3+e^{-2\beta V}}\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2)\delta(\nu),$$

$$\mathcal{M}_{7\ 7\ 16}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3) = -\frac{4\sqrt{2}Ve^{-\beta V}sh\beta V}{\beta^2(4V^2+\nu^2)}\frac{\beta h}{(3+e^{-2\beta V})}\times$$
$$\times\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2)\delta(\vec{k}_3)\delta(\nu_1+\nu_2)\delta(\nu_3),$$

$$\mathcal{M}_{16\ 16\ 16}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3) = \frac{\beta h}{\sqrt{2}(3+e^{-2\beta V})}\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3)\delta(\nu_i)-$$
$$-\frac{3\beta h}{2(3+e^{-2\beta V})^2}\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2)\delta(\vec{k}_3)\delta(\nu_i),$$

$$\mathcal{M}_{7\ 7\ 7\ 7}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3,\vec{k}_4,\nu_4) = \frac{3e^{-\beta V}\left[\delta(\nu)ch\beta V - -\frac{4Vsh\beta V}{\beta(4V^2+\nu^2)}\right]}{2\beta^2(4V^2+\nu^2)(3+e^{-2\beta V})}\times$$
$$\times\delta(\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4)\delta(\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4)-$$
$$-\frac{48V^2e^{-2\beta V}sh^2\beta V}{\beta^2(4V^2+\nu^2)(3+e^{-2\beta V})^2}\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2)\delta(\vec{k}_3+\vec{k}_4)\delta(\nu_1+\nu_2)\delta(\nu_3+\nu_4)-$$
$$-\frac{3}{(3+e^{-2\beta V})^2}\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2)\delta(\vec{k}_3+\vec{k}_4)\delta(\nu_i),$$

$$\mathcal{M}_{16\ 16\ 16\ 16}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3,\vec{k}_4,\nu_4) = \frac{1}{2(3+e^{-2\beta V})}\times$$
$$\times\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3+\vec{k}_4)\delta(\nu_i) - \frac{3}{(3+e^{-2\beta V})^2}\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2)\delta(\vec{k}_3+\vec{k}_4)\delta(\nu_i),$$

$$\mathcal{M}_{16\ 16\ 7\ 7}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3,\vec{k}_4,\nu_4) = -\frac{4Ve^{-\beta V}sh\beta V}{\beta(4V^2+\nu^2)(3+e^{-2\beta V})^2}\times$$
$$\times\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2)\delta(\vec{k}_3+\vec{k}_4)\delta(\nu_1)\delta(\nu_2)\delta(\nu_3+\nu_4). \qquad (4.23)$$

Відзначимо цікаву особливість отриманих кумулянтів (4.21), або (4.23). А саме, залежність від мацубарівської частоти містять лише кумулянти, пов'язані з операторами $\hat{\rho}_7$, в той час як кумулянти побудовані виключно на операторах $\hat{\rho}_{16}$, такої залежності не містять. Згідно (3.8), колективні змінні ρ_{16} відповідальні за існування дальнього порядку в системі (відповідні середні визначають повний спін кластера і пропорційні зовнішньому полю). Можна переконатись (використавши зображення (2.23), (4.7)), що колективні змінні ρ_7 пов'язані із антипаралельним впорядкуванням спінів у кластері, внутрікластерна взаємодія V тут грає роль аналогічну до зовнішнього поля в першому випадку. Приходимо до висновку, що феромагнітне впорядкування в кластерній системі є, по-суті, класичним явищем. В той же час уся система має квантові властивості і проявляє їх при низьких температурах, коли суттєвими є ефекти поблизу основного стану.

Для отримання асимптотичних значень кумулянтів (4.21) при $h \to 0$ і $V \to 0$ розглянемо два випадки:

$$\nu = 0 \qquad \mathcal{M}_{77} = \frac{1}{4},\ \mathcal{M}_{16\ 16} = \frac{1}{4};\ \mathcal{M}_{7777} = -\frac{1}{16};\ \mathcal{M}_{16161616} = -\frac{1}{16}$$

$$\nu \neq 0 \quad \text{усі} \quad \text{кумулянти} \quad \text{дорівнюють} \quad \text{нулеві.} \qquad (4.24)$$

Тобто усі компоненти колективних змінних p_7 та p_{16} при $V = 0, h = 0$ є рівноправними.

Зауважимо, що при врахуванні множників нормування в (4.7), а також факту:

$Z_0^{\text{кл}}(V=0,h=0) = 2Z_0^1(h=0)$ ($Z_0^{\text{кл}}$- визначається формулою (3.3), а Z_0^1 - формулою (2.18)), приходимо від (4.23) до класичних значень для спінових кумулянтів (див. напр. [8]).

$$\mathcal{M}_{77} = \mathcal{M}_{1616} = \frac{1}{4}\cdot 2\cdot(\sqrt{2})^2 = 1;$$

$$\mathcal{M}_{7777} = \mathcal{M}_{16161616} = \frac{1}{8}\cdot 2\cdot(\sqrt{2})^4 - \frac{3}{16}\cdot 2^2\cdot(\sqrt{2})^4 = -2 \qquad (4.25)$$

б) міжкластерні взаємодії гайзенбергівського типу

Приймаючи до уваги вирази для параметрів гамільтоніана у цьому випадку (2.33), бачимо, що кумулянтні середні, які входять в коефіцієнти розподілу (4.4), треба визначати лише від узагальнених операторів переходу $Y^\lambda(\vec{R}_q)$ з індексами $\lambda = 2,5,11,4,7,10$. Згідно формули (2.28) та матриці U (додаток 2а):

$$Y^2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(X^{11} - X^{44}), \quad Y^4 = \frac{1}{2}(X^{12} + X^{21} - X^{24} - X^{42}),$$
$$Y^5 = \frac{1}{2}(X^{13} + X^{31} + X^{34} + X^{43}), \quad Y^7 = \frac{1}{\sqrt{2}}(X^{23} + X^{32}), \tag{4.26}$$
$$Y^{11} = \frac{1}{2}(-X^{13}+X^{31}-X^{34}+X^{43}); \quad Y^{10} = \frac{1}{2}(-X^{12}+X^{21}+X^{24}-X^{42}).$$

Зауважимо, що усі оператори в (4.26) розглядаються як оператори бозе-типу, оскільки вони побудовані на "спінових" операторах (2.9), для яких справедливими є комутаційні співвідношення типу (1.4).

З усіх кумулянтних середніх першого порядку на операторах (4.26) відмінним від нуля є лише

$$\mathcal{M}_2(\vec{k},\nu) = \frac{\sqrt{2}sh\beta h}{1+2ch\beta h + e^{-2\beta V}}\delta(\vec{k})\delta(\nu). \tag{4.27}$$

Для кумулянтних середніх другого порядку згідно формули (4.14) отримуємо:

$$\mathcal{M}_{22}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2)=\left(\frac{ch\beta h}{1+2ch\beta h+e^{-2\beta V}}-\frac{2sh^2\beta h}{(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})^2}\right)\times$$
$$\times\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2), \qquad \text{при } \nu=0,$$
$$\mathcal{M}_{22}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2)=0, \qquad \text{при } \nu\neq 0,$$
$$\mathcal{M}_{55}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2) = \frac{hsh\beta h}{\beta(h^2+\nu^2)(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})}\delta(\vec{k}_1+k_2)\delta(\nu_1+\nu_2),$$
$$\mathcal{M}_{11\ 11}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2)=-\frac{hsh\beta h}{\beta(h^2+\nu^2)(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})}\delta(\vec{k}_1+k_1)\delta(\nu_1+\nu_2);$$
$$\mathcal{M}_{44}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2) = \left[\frac{(2V+h)(e^{-\beta h}-e^{-2\beta V})}{2\beta((2V+h)^2+\nu^2)(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})}+\right.$$
$$\left.+\frac{(2V-h)(e^{\beta h}-e^{-2\beta V})}{2\beta((2V-h)^2+\nu^2)(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})}\right]\delta(\vec{k}_1+k_1)\delta(\nu_1+\nu_2),$$
$$\mathcal{M}_{77}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2) = \frac{4Ve^{-\beta V}sh\beta V}{\beta(4V^2+\nu^2)(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})}\times$$
$$\times\delta(\vec{k}_1+k_2)\delta(\nu_1+\nu_2), \tag{4.28}$$

$$\mathcal{M}_{10\ 10}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2) = -\left[\frac{(2V+h)(e^{-\beta h}-e^{-2\beta V})}{2\beta((2V+h)^2+\nu^2)(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})}+\right.$$
$$\left.+\frac{(2V-h)(e^{\beta h}-e^{-2\beta V})}{2\beta((2V-h)^2+\nu^2)(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})}\right]\delta(\vec{k}_1+k_1)\delta(\nu_1+\nu_2).$$

Усі змішані кумулянти другого порядку дорівнюють нулеві.

Серед кумулянтів третього порядку відмінними від нуля є лише такі:

$$\mathcal{M}_{222}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3) = \frac{sh\beta h}{\sqrt{2}(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})}\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2+\vec{k}_3)\delta(\nu_i)-$$
$$-\frac{3\sqrt{2}ch\beta hsh\beta h}{(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})^2}\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2)\delta(\vec{k}_3)\delta(\nu)+\frac{4\sqrt{2}sh^3\beta h}{(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})^3}\delta(\vec{k}_i)\delta(\nu_i),$$
$$\mathcal{M}_{255}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3) = -\frac{\sqrt{2}hsh^2\beta h}{\beta(h^2+\nu^2)(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})^2}\times$$
$$\times\delta(\vec{k}_1)\delta(\vec{k}_2+\vec{k}_3)\delta(\nu_1)\delta(\nu_2+\nu_3),$$
$$\mathcal{M}_{2\ 11\ 11}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3) = -\mathcal{M}_{2\ 55}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3),$$
$$\mathcal{M}_{277}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3) = -\frac{4\sqrt{2}Ve^{-\beta V}sh\beta hsh\beta V}{\beta(4V^2+\nu^2)(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})^2}\times$$
$$\times\delta(\vec{k}_1)\delta(\vec{k}_2+\vec{k}_3)\delta(\nu_1)\delta(\nu_2+\nu_3),$$
$$\mathcal{M}_{244}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3)=-\left[\frac{(2V+h)(e^{\beta h}-e^{-2\beta V})sh\beta h}{\beta\sqrt{2}((2V+h)^2+\nu^2)(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})^2}+\right.$$
$$\left.+\frac{(2V-h)(e^{-\beta h}-e^{-2\beta V})sh\beta h}{\beta\sqrt{2}((2V-h)^2+\nu^2)(1+2ch\beta h+e^{-2\beta V})^2}\right]\delta(\vec{k}_1)\delta(\vec{k}_2+\vec{k}_3)\delta(\nu_1)\delta(\nu_2+\nu_3),$$
$$\mathcal{M}_{2\ 10\ 10}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3) = -\mathcal{M}_{244}(\vec{k}_1,\nu_1,\vec{k}_2,\nu_2,\vec{k}_3,\nu_3). \tag{4.29}$$

Розрахунок повного набору кумулянтів четвертого порядку для випадку гайзенбергівського типу міжкластерних взаємодій є досить громіздким. Його плануємо подати в іншій нашій роботі.

Література

1. Смарт Дж. Эффективное поле в теории магнетизма. - М.: Мир, 1968. - 271с.
2. Ахиезер А.И., Барьяхтар В.Г., Пелетминский С.В. Спиновые волны. - М.: Наука, 1967. - 368с.
3. Звездин А.К., Матвеев В.М., Мухин А.А., Попов А.И. Редкоземельные ионы в магнитоупорядоченных кристаллах. - М.: Наука, 1985. - 294с.
4. Кориневский Н.А. Функционал свободной энергии системы двухчастичных кластеров. – Киев, 1982. – 36 с. (Препринт / АН УССР. Ин-т теор. физ.: ИТФ-82-4Р).
5. Кориневский Н.А. О вычислении свободной энергии системы двухчастичных кластеров // ТМФ.– 1983.– т.55, с.291–304.
6. Давыдов А.С. Квантовая механика. - М.: ГИФ-МЛ, 1963. - 748с.
7. Yukhnovskii I.R., Korynevskii N.A. The investigation of the ferroelectric phase transition in cluster systems of order-disorder type. I Partition function functional // Phys. Stat. Sol. (b).– 1989.– v.153, p.583–593.
8. Юхновский И.Р. Фазовые переходы второго рода. Метод коллективных переменных. - К.: Наук. думка, 1985. - 223с.

Додаток 1

Матриця міжкластерної взаємодії в системі двочастинкових кластерів

а) взаємодія гайзенбергівського типу

Φ_+															$-\Phi_+$
				Φ_-									$-\Phi_-$		
								Φ_+						Φ_+	
	Φ_-						$-\Phi_-$								
						Φ_-			Φ_-						
				-Φ_-									Φ_-		
		Φ_+									Φ_+				
						Φ_-			Φ_-						
								Φ_+						Φ_+	
	$-\Phi_-$						Φ_-								
		Φ_+									Φ_+				
$-\Phi_+$															Φ_+

а) взаємодія ізінгівського типу

Φ_+															$-\Phi_+$
						Φ_-			Φ_-						
						Φ_-			Φ_-						
$-\Phi_+$															Φ_+

$$\Phi_+ = \frac{1}{2}\Big(J_{11}(\vec{R}_q,\vec{R}_{q'}) + J_{12}(\vec{R}_q,\vec{R}_{q'})\Big) \quad \Phi_- = \frac{1}{2}\Big(J_{11}(\vec{R}_q,\vec{R}_{q'}) - J_{12}(\vec{R}_q,\vec{R}_{q'})\Big)$$

Додаток 2

Матриця унітарного перетворення U в системі двочастинкових кластерів

а) взаємодія гайзенбергівського типу

$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$														
		$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$					$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$						
				$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$					$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$				
												1			
		$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$					$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$						
													1		
						$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$								
		$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$					$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$						
				$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$					$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$				
						$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$								
														1	
				$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$					$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$				
															1
		$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$					$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$						
				$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$					$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$				
$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$														

а) взаємодія ізінгівського типу

$\frac{1}{\sqrt{2}}$															$\frac{1}{\sqrt{2}}$
	1														
		1													
			1												
				1											
					1										
						$\frac{1}{\sqrt{2}}$			$\frac{1}{\sqrt{2}}$						
							1								
								1							
						$\frac{1}{\sqrt{2}}$			$-\frac{1}{\sqrt{2}}$						
										1					
											1				
												1			
													1		
														1	
$\frac{1}{\sqrt{2}}$															$-\frac{1}{\sqrt{2}}$

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою http://www.icmp.lviv.ua/

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (http://www.icmp.lviv.ua/)

Микола Антонович Кориневський

Функціональне зображення статистичної суми квантових кластерних систем

Роботу отримано 16 березня 1998 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу статистичної теорії конденсованих систем

Виготовлено при ІФКС НАН України