

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-99-09U

М.А.Кориневський

ПРО МАКСИМАЛЬНЕ ЗНАЧЕННЯ ПОПЕРЕЧНОГО ПОЛЯ В
КВАНТОВІЙ КЛАСТЕРНІЙ МОДЕЛІ

УДК: 548; 537.611.44

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

Про максимальне значення поперечного поля в квантовій кластерній моделі

М.А.Кориневський

Анотація. Знайдено загальний вираз для коефіцієнтів повного функціонала вільної енергії кластерної моделі де-Жена у вигляді кумулянтних середніх довільного порядку від добутку узагальнених операторів переходу. Показано, що зростання поперечного поля призводить до зміни знака усіх коефіцієнтів вищих від гаусового порядків. Отримано рівняння, яке пов'язує максимальне значення поперечного поля, величину короткосяжних взаємодій і температуру, при яких функціонал вільної енергії є незрозумілим.

On the Maximum Transverse Field Magnitude in the Quantum Cluster Model

М.А.Кориневський

Abstract. The general expression for coefficients of the total functional of the cluster de-Jennes model free energy is found. They are expressed by an arbitrary order cumulant averages of the generalized transition operators products. It is shown that the transverse field increase leads to the sign change of all higher Gaussian order coefficients. An equation for maximum transverse field magnitude, short-range interaction and temperature providing the finite expression for the free energy functional is found.

Вступ

У статистичній фізиці останніх десятиліть значна увага дослідників звернена на розробку методів адекватного опису систем багатьох взаємодіючих частинок, які характеризуються кількома потенціалами взаємодії. Це зумовлено не тільки загальнотеоретичним інтересом, але й тим фактом, що реальні фізичні системи: густі гази, рідини, плазма, тверді тіла тощо, як правило, не можна розглядати на основі простих однопараметричних моделей.

В класичному підході при дослідженні густих газів, рідин та розчинів електролітів успішним є прийом розбиття повного потенціалу міжчастинкової взаємодії на кілька ділянок, кожна з яких відповідає за формування певних фізичних ефектів. Такий спосіб розрахунку дозволяє якісно і кількісно описати явища дисоціації, сольватації, утворення димерів, мікроколоїдів, а також врахувати скінчені розміри частинок [1-3].

В квантовій статистичній фізиці розгляд різних типів взаємодій між частинками передбачає врахування не тільки різної асимптотичної поведінки відповідних доданків на малих та великих відстанях, але й їх симетричних властивостей. Принциповими в цьому плані і такими, що мали суттєвий вплив на розвиток теорії твердого тіла, можна вважати роботи [4,5]. Короткосяжні взаємодії в інтерпретації Слетера - це якісно і кількісно інші додаткові параметри системи, порівняно із звичайними далекосяжними взаємодіями між частинками. Поперечне поле де-Жена дало можливість якісно правильно описати ряд фізичних явищ, зокрема ефект ізотопічного заміщення водню на дейтерій в сегнетоелектриках з водневими зв'язками [6-8]. Подальший розвиток цього напрямку [9-12] пов'язаний із застосуванням моделі де-Жена до опису систем із сильними короткосяжними взаємодіями в околі точки сегнетоелектричного фазового перетворення T_c . В результаті, було встановлено, що поперечне поле (тунелювання протонів на водневих зв'язках в кристалах групи KDP) спричиняє значний вплив на термодинаміку системи і, навіть, приводить до зникнення впорядкованого стану, змінюючи T_c .

Суттєві проблеми виникають при врахуванні поперечного поля в кластерному наближенні [6,7], яке, по-суті, є поглибленням моделі Слетера. Головна із них - поява т.зв. анти-Кюрі точок, тобто обертання в нуль поляризації системи при низьких температурах у впорядкованій фазі [8,9,13]. Слід відзначити, що вивчення звичайної, або кластерної моделі де-Жена мали місце лише в невисоких наближеннях теорії збурень. Тому принципово важливим є з'ясу-

вання можливості її строгого квантового дослідження із застосуванням сучасних функціональних методів. В роботах [14, 15] на основі оригінальної методики узагальнених операторів переходу (типу операторів Хаббарда-Стасюка) доведено принципову можливість функціонального розгляду кластерної моделі де-Жена (коротко-, далекосяжні взаємодії та поперечне поле) на основі перетворення Стратоновича, або методу колективних змінних. При цьому уже четвертий кумулянт (коефіцієнт при четвертій степені розподілу колективних змінних) при певних значеннях поперечного поля змінює свій знак, що, в результаті, веде до розбіжності функціонала вільної енергії. Природно виникає питання про загальні закономірності в поведінці кумулянтів вищих порядків, тобто про можливість функціонального зображення вільної енергії кластерної системи. Для цього необхідно мати вирази для кумулянтів довільних порядків, що у випадку гамільтоніанів з короткосяжними і далекосяжними взаємодіями складає самостійну проблему. Розв'язання її, а також з'ясування питання про допустимі значення поперечного поля у квантовій кластерній моделі де-Жена складає зміст даної роботи. Конкретні розрахунки будуть виконані для кластерної системи із числом частинок в кожному кластері $f_0 = 2$.

1. Кумулянти системи двочастинкових кластерів

Розглянемо гамільтоніан кластерної моделі де-Жена:

$$H = \Gamma \sum_{q,f} S_f^x(\vec{R}_q) + h \sum_{q,f} S_f^z(\vec{R}_q) + V \sum_{q,f,f'} S_f^z(\vec{R}_q) S_{f'}^z(\vec{R}_{q'}) + \sum_{q,q',f,f'} J_{ff'}(\vec{R}_q, \vec{R}_{q'}) S_f^z(\vec{R}_q) S_{f'}^z(\vec{R}_{q'}). \quad (1.1)$$

Тут Γ, h - поперечне та поздовжнє поля, V - енергія внутрікластерної взаємодії пари частинок, $J_{ff'}(\vec{R}_q, \vec{R}_{q'})$ - потенціал далекосяжної взаємодії, S^α - матриці Паулі, $1 \leq q \leq N$ - номер вузла-кластера, $1 \leq f \leq f_0$ - номер частинки у кластері.

В зображенні узагальнених операторів переходу

$$Y_\lambda(\vec{R}_q) = \sum_m U_{\lambda m} X^m(\vec{R}_q), \quad (1.2)$$

де $X^m(\vec{R}_q)$ - оператори Хаббарда-Стасюка, $U_{\lambda m}$ - власні функції матриці повної міжчастинкової взаємодії, гамільтоніан (1.1) набирає

вигляду:

$$H = \sum_{\lambda=1}^{2^2 f_0} \left\{ \Lambda_\lambda \sum_q Y_\lambda(\vec{R}_q) - \frac{1}{2} \sum_{q,q'} \Phi_\lambda(\vec{R}_q, \vec{R}_{q'}) Y_\lambda(\vec{R}_q) Y_\lambda(\vec{R}_{q'}) \right\}. \quad (1.3)$$

Тут Λ_λ - енергетичні параметри кластера, $\Phi_\lambda(\vec{R}_q, \vec{R}_{q'})$ - власні значення матриці далекоюсяжного потенціалу $J_{ff'}(\vec{R}_q, \vec{R}_{q'})$. Наприклад, для системи двочастинкових взаємодіючих кластерів ($f_0 = 2$) [14]:

$$\begin{aligned} \Lambda_1 &= -2h, & \Phi_1(\vec{R}_q, \vec{R}_{q'}) &= J_{11}(\vec{R}_q, \vec{R}_{q'}) + J_{12}(\vec{R}_q, \vec{R}_{q'}), \\ \Lambda_9 &= E_1 = \sqrt{V^2 + 4\Gamma^2}, \\ \Lambda_{12} &= E_2 = -\sqrt{V^2 + 4\Gamma^2}, & \Phi_5(\vec{R}_q, \vec{R}_{q'}) &= J_{11}(\vec{R}_q, \vec{R}_{q'}) - J_{12}(\vec{R}_q, \vec{R}_{q'}); \\ \Lambda_{15} &= E_3 = -V, \\ \Lambda_{16} &= E_4 = V, \end{aligned} \quad (1.4)$$

усі інші коефіцієнти Λ_λ та $\Phi_\lambda(\vec{R}_q, \vec{R}_{q'})$ в цьому випадку дорівнюють нулеві.

Виділимо в (1.3) діагональний гамільтоніан нульового наближення (гамільтоніан системи неваємодіючих кластерів):

$$H_0 = \sum_{\lambda \neq 1} \sum_q \Lambda_\lambda Y_\lambda(\vec{R}_q). \quad (1.5)$$

Взявши H_0 за систему відліку, для функціонала статистичної суми в зображенні колективних змінних отримуємо вираз [15]:

$$\begin{aligned} Z &= Z_0^N \int (d\rho_\lambda(\vec{k}, \nu))^N \exp \left\{ \sum_{\lambda=1}^{2^2 f_0} \sum_{k \leq B} \sum_{\nu=0}^{\infty} \left[\frac{\beta}{2} \Phi_\lambda(\vec{k}) \rho_\lambda(\vec{k}, \nu) \rho_\lambda(-\vec{k}, -\nu) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - 2\beta\sqrt{N} h \rho_\lambda(\vec{k}, \nu) \delta_{\lambda 1} \delta(\vec{k}) \delta(\nu) \right] \right\} \times \\ &\times \int (d\omega_\lambda(\vec{k}, \nu))^N \exp \left\{ i 2\pi \sum_{\lambda=1}^{2^2 f_0} \sum_{k, \nu} \omega_\lambda(\vec{k}, \nu) \rho_\lambda(\vec{k}, \nu) \right\} \times \\ &\times \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i 2\pi)^n}{n!} \sum_{\lambda_1 \dots \lambda_n=1}^{2^2 f_0} \sum_{k_1, \dots, k_n \leq B} \sum_{\nu_1, \dots, \nu_n=0}^{\infty} \mathcal{M}_{\lambda_1 \dots \lambda_n}(\vec{k}_1, \nu_1, \dots, \vec{k}_n, \nu_n) \times \right. \\ &\quad \left. \times \omega_{\lambda_1}(\vec{k}_1, \nu_1) \dots \omega_{\lambda_n}(\vec{k}_n, \nu_n) \right\}. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Кумулянти $\mathcal{M}_{\lambda_1 \dots \lambda_n}(\vec{k}_1, \nu_1, \dots, \vec{k}_n, \nu_n)$ розраховуються за формулою:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{\lambda_1 \dots \lambda_n}(\vec{k}_1, \nu_1, \dots, \vec{k}_n, \nu_n) &= \frac{\partial^n}{\partial \omega_{\lambda_1}(\vec{k}_1, \nu_1) \dots \partial \omega_{\lambda_n}(\vec{k}_n, \nu_n)} \times \\ &\times \ln \left\langle R \exp \left\{ \sum_{\lambda=1}^{2^2 f_0} \sum_{k \leq B} \sum_{\nu=0}^{\infty} \omega_\lambda(\vec{k}, \nu) Y_\lambda(\vec{k}, \nu) \right\} \right\rangle_{\omega=0}, \end{aligned} \quad (1.7)$$

де

$$Y_\lambda(\vec{k}, \nu) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\beta' e^{-i\beta'\nu} \sum_{q=1}^N e^{-\beta H_0} Y_\lambda(\vec{R}_q) e^{\beta H_0} e^{i\vec{k}\vec{R}_q}. \quad (1.8)$$

В (1.6) $\rho_\lambda(\vec{k}, \nu)$ - колективні змінні для операторів $Y_\lambda(\vec{k}, \nu)$ в частотно-імпульсному зображенні, $\omega_\lambda(\vec{k}, \nu)$ - величини спряжені до $\rho_\lambda(\vec{k}, \nu)$, $\nu = \frac{2\pi}{\beta} n$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) - мацубарівська частота, $\beta = \frac{1}{kT}$, T - абсолютна температура, k - стала Больцмана, B - границя зони Бріллюена, R - символ впорядкування за зворотною температурою β ,

$$Z_0 = Sp \{ e^{-\beta H_0} \}, \quad (1.9)$$

$$\langle \dots \rangle_0 = Sp \{ \dots e^{-\beta H_0} \} [Sp \{ e^{-\beta H_0} \}]^{-1}. \quad (1.10)$$

Предметом наших досліджень є знаходження явних виразів для кумулянтів $\mathcal{M}_{\lambda_1 \dots \lambda_n}(\vec{k}_1, \nu_1, \dots, \vec{k}_n, \nu_n)$ та встановлення їх залежності від величини поперечного поля Γ . Ці розрахунки виконаємо на прикладі системи двочастинкових взаємодіючих кластерів із параметрами (1.4).

Оскільки колективні змінні описують тільки далекоюсяжну частину гамільтоніана (короткоюсяжні взаємодії враховано в Z_0 точно, див. (1.6)), то серед всеможливих кумулянтів в (1.6) нам потрібні лише такі, в яких $\lambda = 1$, або $\lambda = 5$. Це означає, що при розрахунку за формулою (1.7) під знаком R - добутку слід брати лише оператори $Y_1(\vec{k}, \nu)$ та $Y_5(\vec{k}, \nu)$. Підставивши в (1.2) явні вирази для матричних елементів $U_{\lambda m}$ [14,16], отримуємо для операторів $Y_1(\vec{R}_q)$ та $Y_5(\vec{R}_q)$ в зображенні взаємодії такі матриці:

$$Y_1(\vec{R}_q, \beta) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & b e^{\beta E_{13}} & 0 \\ 0 & 0 & a e^{\beta E_{23}} & 0 \\ b e^{-\beta E_{13}} & a e^{-\beta E_{23}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$Y_5(\vec{R}_q, \beta) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -ae^{\beta E_{14}} \\ 0 & 0 & 0 & be^{\beta E_{24}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -ae^{-\beta E_{14}} & be^{-\beta E_{24}} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.11)$$

де

$$a^2 = \frac{1}{4} \left(1 + \frac{V}{\sqrt{V^2 + 4\Gamma^2}} \right), \quad b^2 = \frac{1}{4} \left(1 - \frac{V}{\sqrt{V^2 + 4\Gamma^2}} \right),$$

$$E_{ij} = E_i - E_j. \quad (1.12)$$

Легко бачити, що добутки довільного числа операторів $Y_1(\vec{R}_q, \beta)$, $Y_5(\vec{R}_q, \beta)$ можна знаходити як добутки відповідних матриць. Суттєвим моментом при цьому є те, що кожний із співмножників береться при одному і тому ж \vec{R}_q , адже при різних \vec{R}_q вони кумулюють:

$$[Y_\lambda(\vec{R}_q), Y_{\lambda'}(\vec{R}_{q'})] = \sum_{\mu} W_{\lambda\lambda'}^{\mu} Y_{\mu}(\vec{R}_q) \delta(\vec{R}_q - \vec{R}_{q'}), \quad (1.13)$$

$$W_{\lambda\lambda'}^{\mu} = \sum_{r,s,t} (U_{rs\lambda} U_{st\lambda'} - U_{st\lambda} U_{rs\lambda'}) U_{rt\mu},$$

r, s, t - звичайні, а λ, λ', μ - подвійні індекси.

Структура матриць (1.11) є такою, що будь-які їх змішані добутки мають нульові діагональні елементи. А це призводить до того, що відповідні середні (сума діагональних матричних елементів) дорівнюють нулеві. Відмінними від нуля можуть бути лише середні, в яких індекси усіх операторів співпадають. В результаті, функціонал (1.6) факторизується за індексом λ ($\lambda = 1$ і $\lambda = 5$). Це характерна особливість гамільтоніана (1.3) для системи двочастинкових взаємодіючих кластерів. Вона суттєво звужує кількість всеможливих кумулянтних середніх, які визначають функціонал статистичної суми (або вільної енергії). Отже, нам достатньо розрахувати середні усіх порядків типу

$$\langle RY_\lambda(\vec{R}_{q_1}, \beta_1) Y_\lambda(\vec{R}_{q_2}, \beta_2) \dots Y_\lambda(\vec{R}_{q_m}, \beta_m) \dots \rangle_0^c, \quad \lambda = 1 \quad i \quad \lambda = 5. \quad (1.14)$$

Неважко переконатись, що в (1.14) відмінними від нуля є лише середні від добутку парної кількості операторів $Y_\lambda(\vec{R}_q, \beta)$.

Розглянемо кумулянт другого порядку

$$\mathcal{M}_2^{(1)}(\vec{k}_1, \nu_1, \vec{k}_2, \nu_2) = \langle RY_1(\vec{k}_1, \nu_1) Y_1(\vec{k}_2, \nu_2) \rangle_0^c =$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{q_1, q_2} e^{-i(\vec{k}_1 R_{q_1} + \vec{k}_2 \vec{R}_{q_2})} \times$$

$$\times \beta^{-2} \int_0^\beta d\beta_1 \int_0^\beta d\beta_2 e^{-i(\beta_1 \nu_1 + \beta_2 \nu_2)} < RY_1(\vec{R}_{q_1}, \beta_1) Y_1(\vec{R}_{q_2}, \beta_2) \rangle_0^c. \quad (1.15)$$

Підставивши сюди добуток матриць $Y_1(\vec{R}_q, \beta_1)$, $Y_1(\vec{R}_q, \beta_2)$, проінтегрувавши по $d\beta_1$ і $d\beta_2$ та взявши суму діагональних елементів, одержуємо:

$$\mathcal{M}_2^{(1)}(\vec{k}_1, \nu_1, \vec{k}_2, \nu_2) = \delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2) \delta(\nu_1 + \nu_2) \left\{ \frac{e^{\beta(E_{13} + i\nu_2)} - 1}{\beta(E_{13} + i\nu_2)} b^2 < x^9 \rangle_0 + \right.$$

$$+ \frac{e^{\beta(E_{23} + i\nu_2)} - 1}{\beta(E_{23} + i\nu_2)} a^2 < x^{12} \rangle_0 - \frac{e^{-\beta(E_{13} - i\nu_2)} - 1}{\beta(E_{13} - i\nu_2)} b^2 < x^{15} \rangle_0 -$$

$$\left. - \frac{e^{-\beta(E_{23} - i\nu_2)} - 1}{\beta(E_{23} - i\nu_2)} a^2 < x^{15} \rangle_0 \right\}. \quad (1.16)$$

Врахувавши, що

$$e^{i\beta\nu} = e^{i\beta \frac{2\pi}{\beta} n} = 1,$$

$$\langle x^\lambda \rangle_0 = \frac{e^{-\beta E_\lambda}}{Z_0}, \quad Z_0 = \sum_{\lambda} e^{-\beta E_\lambda} = 2ch\beta V + 2ch\beta \sqrt{V^2 + 4\Gamma^2}, \quad (1.17)$$

а також те, що вираз для кумулянта $\mathcal{M}_2^{(5)}$ співпадає із виразом для $\mathcal{M}_2^{(1)}$, в якому індекс $3 \rightarrow 4$, що відповідає заміні $V \rightarrow -V$, остаточно маємо:

$$\mathcal{M}_2^{(\lambda)}(\vec{k}_1, \nu_1, \vec{k}_2, \nu_2) = \frac{E_1^2 - E_3^2}{2\beta Z_0 E_1} \left\{ \frac{e^{\mp\beta E_3} - e^{-\beta E_1}}{(E_1 \mp E_3)^2 + \nu^2} + \frac{e^{-\beta E_2} - e^{\mp\beta E_3}}{(E_2 \mp E_3)^2 + \nu^2} \right\} \times$$

$$\times \delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2) \delta(\nu_1 + \nu_2), \quad (1.18)$$

де верхній знак відповідає кумулянтові $\mathcal{M}_2^{(1)}$ ($\lambda = 1$), а нижній - кумулянтові $\mathcal{M}_2^{(5)}$ ($\lambda = 5$).

Беручи добуток чотирьох операторів $Y_1(\vec{R}_q, \beta_i)$ (або $Y_5(\vec{R}_q, \beta_i)$), інтегруючи по $d\beta_1, \dots, d\beta_n$ та сумуючи діагональні елементи, знаходимо вираз для $\mathcal{M}_4^{(\lambda)}(\vec{k}_1, \nu_1, \dots, \vec{k}_4, \nu_4)$:

$$\mathcal{M}_4^{(\lambda)}(\vec{k}_1, \nu_1, \dots, \vec{k}_4, \nu_4) = \frac{E_1^2 - E_3^2}{4\beta^3 Z_0 E_1^2} \left\{ \frac{e^{\mp\beta E_3} - e^{-\beta E_1}}{(E_1 \mp E_3)^2 + \nu^2} + \frac{e^{-\beta E_2} - e^{\mp\beta E_3}}{(E_2 \mp E_3)^2 + \nu^2} \right\} \times$$

$$\times \left\{ \frac{(E_1 \mp E_3)(ch\beta(E_2 \mp E_3) - 1)}{(E_2 \mp E_3)^2 + \nu^2} - \frac{(E_2 \mp E_3)(ch\beta(E_1 \mp E_3) - 1)}{(E_1 \mp E_3)^2 + \nu^2} \right\} \times \\ \times \delta(\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_4)\delta(\nu_1 + \dots + \nu_4) - 3(\mathcal{M}_2^{(\lambda)})^2, \quad (1.19)$$

де, так само як і в (1.18), верхній знак відповідає $\mathcal{M}_4^{(1)}$ ($\lambda = 1$), а нижній - $\mathcal{M}_4^{(5)}$ ($\lambda = 5$).

Діючи аналогічним чином, можна отримати усі кумулянти вищих порядків. При цьому для повних середніх (звідних кумулянтів)

$$\tilde{\mathcal{M}}_{2m}^{(\lambda)}(\vec{k}_1, \nu_1, \dots, \vec{k}_{2m}, \nu_{2m}) = \langle RY_\lambda(\vec{k}_1, \nu_1) Y_\lambda(\vec{k}_2, \nu_2) \dots Y_\lambda(\vec{k}_{2m}, \nu_{2m}) \rangle_0$$

при $\lambda = 1$ або $\lambda = 5$ має місце формула:

$$\mathcal{M}_{2m}^{(\lambda)}(\vec{k}_1, \nu_1, \dots, \vec{k}_{2m}, \nu_{2m}) = \frac{A^{(\lambda)}(B^{(\lambda)})^{n-1}(E_1^2 - E_3^2)}{\beta^{2n-1} Z_0(2E_1)^n} \delta(\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_{2n}) \times \\ \times \delta(\nu_1 + \dots + \nu_{2n}). \quad (1.20)$$

Тут

$$A^{(\lambda)} = \frac{e^{-\beta E_2} - e^{\mp\beta E_3}}{(E_2 \mp E_3)^2 + \nu^2} + \frac{e^{\mp\beta E_3} - e^{-\beta E_1}}{(E_1 \mp E_3)^2 + \nu^2}, \\ B^{(\lambda)} = \frac{(E_1 \mp E_3)(ch\beta(E_2 \mp E_3) - 1)}{(E_2 \mp E_3)^2 + \nu^2} - \frac{(E_2 \mp E_3)(ch\beta(E_1 \mp E_3) - 1)}{(E_1 \mp E_3)^2 + \nu^2}. \quad (1.21)$$

Кумулянти $\mathcal{M}_{2m}(\vec{k}_1, \nu_1, \dots, \vec{k}_{2m}, \nu_{2m})$ є відомими комбінаціями виразів (1.20):

$$\mathcal{M}_2^{(\lambda)} = \tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)}, \quad \mathcal{M}_4^{(\lambda)} = \tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)} - 3(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^2, \\ \mathcal{M}_6^{(\lambda)} = \tilde{\mathcal{M}}_6^{(\lambda)} - 15\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)} + 30(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^3, \\ \mathcal{M}_8^{(\lambda)} = \tilde{\mathcal{M}}_8^{(\lambda)} - 28\tilde{\mathcal{M}}_6^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)} - 35(\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)})^2 + 420\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)}(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^2 - \\ - 630(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^4, \\ \mathcal{M}_{10}^{(\lambda)} = \tilde{\mathcal{M}}_{10}^{(\lambda)} - 45\tilde{\mathcal{M}}_8^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)} - 210\tilde{\mathcal{M}}_6^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)} + 1260\tilde{\mathcal{M}}_6^{(\lambda)}(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^2 + \\ + 3150(\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)})^2\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)} - 18900\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)}(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^3 + 22680(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^5, \\ \mathcal{M}_{12}^{(\lambda)} = \tilde{\mathcal{M}}_{12}^{(\lambda)} - 66\tilde{\mathcal{M}}_{10}^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)} - 495\tilde{\mathcal{M}}_8^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)} - 462(\tilde{\mathcal{M}}_6^{(\lambda)})^2 + \\ + 2970\tilde{\mathcal{M}}_8^{(\lambda)}(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^2 + \\ + 27720\tilde{\mathcal{M}}_6^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)} + 11550(\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)})^3 - 83160\tilde{\mathcal{M}}_6^{(\lambda)}(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^3 - \\ - 311850(\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)})^2(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^2 + 1247400\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)}(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^4 - 1247400(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^6,$$

$$\mathcal{M}_{14}^{(\lambda)} = \tilde{\mathcal{M}}_{14}^{(\lambda)} - 91\tilde{\mathcal{M}}_{12}^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)} - 1001\tilde{\mathcal{M}}_{10}^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)} - 3003\tilde{\mathcal{M}}_8^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_6^{(\lambda)} + \\ + 6006\tilde{\mathcal{M}}_{10}^{(\lambda)}(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^2 + 90090\tilde{\mathcal{M}}_8^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)} + 210210\tilde{\mathcal{M}}_6^{(\lambda)}(\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)})^2 + \\ + 84084(\tilde{\mathcal{M}}_6^{(\lambda)})^2\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)} - \\ - 270270\tilde{\mathcal{M}}_8^{(\lambda)}(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^3 - 3783780\tilde{\mathcal{M}}_6^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)}(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^2 - \\ - 3153153(\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)})^3\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)} + \\ + 7567560\tilde{\mathcal{M}}_6^{(\lambda)}(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^4 + 37837800(\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)})^2(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^3 - \\ - 113513400\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)}(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^5 + 97297200(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^7, \\ \mathcal{M}_{16}^{(\lambda)} = \tilde{\mathcal{M}}_{16}^{(\lambda)} - 120\tilde{\mathcal{M}}_{14}^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)} - 1820\tilde{\mathcal{M}}_{12}^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)} - 8008\tilde{\mathcal{M}}_{10}^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_6^{(\lambda)} - \\ - 6435(\tilde{\mathcal{M}}_8^{(\lambda)})^2 + \\ + 10920\tilde{\mathcal{M}}_{12}^{(\lambda)}(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^2 + 240240\tilde{\mathcal{M}}_{10}^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)} + 900900\tilde{\mathcal{M}}_8^{(\lambda)}(\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)})^2 + \\ + 720720\tilde{\mathcal{M}}_8^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_6^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)} + 1681680(\tilde{\mathcal{M}}_6^{(\lambda)})^2\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)} - \\ - 720720\tilde{\mathcal{M}}_{10}^{(\lambda)}(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^3 - 16216200\tilde{\mathcal{M}}_8^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)}(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^2 - \\ - 15135120(\tilde{\mathcal{M}}_6^{(\lambda)})^2(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^2 - \\ - 75675600\tilde{\mathcal{M}}_6^{(\lambda)}(\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)})^2\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)} - 15765750(\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)})^4 + \\ + 32432400\tilde{\mathcal{M}}_8^{(\lambda)}(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^4 + 605404800\tilde{\mathcal{M}}_6^{(\lambda)}\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)}(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^3 + \\ + 756756000(\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)})^3(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^2 - \\ - 908107200\tilde{\mathcal{M}}_6^{(\lambda)}(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^5 - 567567000(\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)})^2(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^4 + \\ + 13621608000\tilde{\mathcal{M}}_4^{(\lambda)}(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^6 - 10216206000(\tilde{\mathcal{M}}_2^{(\lambda)})^8 \quad (1.22)$$

і т.д.

Загальна структура кумулянта $(2m)$ -го порядку має вигляд:

$$\mathcal{M}_{2m} = \tilde{\mathcal{M}}_{2m} - \left[\frac{(2m)!}{2!(2m-2)!} \tilde{\mathcal{M}}_2 \tilde{\mathcal{M}}_{2m-2} + \frac{(2m)!}{4!(2m-4)!} \tilde{\mathcal{M}}_4 \tilde{\mathcal{M}}_{2m-4} + \right. \\ \left. + \frac{(2m)!}{6!(2m-6)!} \tilde{\mathcal{M}}_6 \tilde{\mathcal{M}}_{2m-6} + \dots + \frac{(2m)!}{(2p)!(2m-2p)!} \times \right. \\ \left. \times \left(1 - \frac{\delta_{m-2p}}{2} \right)_{2p \leq m} \tilde{\mathcal{M}}_{2p} \tilde{\mathcal{M}}_{2m-2p} \right] + \\ + 2! \left[\frac{(2m)!}{2!(2!)^2(2m-4)!} \tilde{\mathcal{M}}_2^2 \tilde{\mathcal{M}}_{2m-4} + \frac{(2m)!}{2!4!(2m-6)!} \tilde{\mathcal{M}}_2 \tilde{\mathcal{M}}_4 \tilde{\mathcal{M}}_{2m-6} + \right. \\ \left. + \frac{(2m)!}{2!(4!)^2(2m-8)!} \tilde{\mathcal{M}}_4^2 \tilde{\mathcal{M}}_{2m-8} + \frac{(2m)!}{2!6!(2m-8)!} \tilde{\mathcal{M}}_2 \tilde{\mathcal{M}}_6 \tilde{\mathcal{M}}_{2m-8} + \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{(2m)!}{4!6!(2m-10)!} \tilde{\mathcal{M}}_4 \tilde{\mathcal{M}}_6 \tilde{\mathcal{M}}_{2m-10} + \frac{(2m)!}{2!8!(2m-10)!} \tilde{\mathcal{M}}_2 \tilde{\mathcal{M}}_8 \tilde{\mathcal{M}}_{2m-10} + \\
& + \frac{(2m)!}{2!(6!)^2(2m-12)!} \tilde{\mathcal{M}}_6^2 \tilde{\mathcal{M}}_{2m-12} + \frac{(2m)!}{4!8!(2m-12)!} \tilde{\mathcal{M}}_4 \tilde{\mathcal{M}}_8 \tilde{\mathcal{M}}_{2m-12} + \\
& + \frac{(2m)!}{2!10!(2m-12)!} \tilde{\mathcal{M}}_2 \tilde{\mathcal{M}}_{10} \tilde{\mathcal{M}}_{2m-12} + \dots \Big] - \\
& - 3! \left[\frac{(2m)!}{3!(2!)^3(2m-6)!} \tilde{\mathcal{M}}_2^3 \tilde{\mathcal{M}}_{2m-6} + \frac{(2m)!}{2!(2!)^24!(2m-8)!} \tilde{\mathcal{M}}_2^2 \tilde{\mathcal{M}}_4 \tilde{\mathcal{M}}_{2m-8} + \right. \\
& + \frac{(2m)!}{2!(2!)^26!(2m-10)!} \tilde{\mathcal{M}}_2^2 \tilde{\mathcal{M}}_6 \tilde{\mathcal{M}}_{2m-10} + \\
& + \frac{(2m)!}{2!2!(4!)^2(2m-10)!} \tilde{\mathcal{M}}_2 \tilde{\mathcal{M}}_4^2 \tilde{\mathcal{M}}_{2m-10} + \\
& + \frac{(2m)!}{2!(2!)^28!(2m-12)!} \tilde{\mathcal{M}}_2^2 \tilde{\mathcal{M}}_8 \tilde{\mathcal{M}}_{2m-12} + \\
& + \frac{(2m)!}{2!4!6!(2m-12)!} \tilde{\mathcal{M}}_2 \tilde{\mathcal{M}}_4 \tilde{\mathcal{M}}_6 \tilde{\mathcal{M}}_{2m-12} + \\
& + \left. \frac{(2m)!}{3!(4!)^3(2m-12)!} \tilde{\mathcal{M}}_4^3 \tilde{\mathcal{M}}_{2m-12} + \dots \right] + \\
& + 4! \left[\frac{(2m)!}{4!(2!)^4(2m-8)!} \tilde{\mathcal{M}}_2^4 \tilde{\mathcal{M}}_{2m-8} + \right. \\
& + \left. \frac{(2m)!}{3!(2!)^34!(2m-10)!} \tilde{\mathcal{M}}_2^3 \tilde{\mathcal{M}}_4 \tilde{\mathcal{M}}_{2m-10} + \dots \right] + \\
& + \dots + (-1)^{m-1} (m-1)! \frac{(2m)!}{(2!)^m m!} \tilde{\mathcal{M}}_2^m. \tag{1.23}
\end{aligned}$$

Підставляючи в (1.23) значення повних середніх $\tilde{\mathcal{M}}_{2m}^{(\lambda)}(\vec{k}_1, \nu_1, \dots, \vec{k}_{2m}, \nu_{2m})$ (1.20), (1.21), отримуємо загальну формулу для кумулянтів $(2m)$ -го порядку:

$$\begin{aligned}
\mathcal{M}_{2m}^{(\lambda)}(\vec{k}_1, \nu_1, \dots, \vec{k}_{2m}, \nu_{2m}) & = \left[\frac{A^{(\lambda)}(E_1^2 - E_3^2)}{2\beta E_1 Z_0} \right]^m C_{m-1}(x_\lambda) \times \\
& \times \delta(\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_{2m}) \delta(\nu_1 + \dots + \nu_{2m}). \tag{1.24}
\end{aligned}$$

Тут поліном $(m-1)$ -го порядку по x_λ $C_{m-1}(x_\lambda)$ має вигляд:

$$\begin{aligned}
C_{m-1}(x_\lambda) & = \sum_{p=1}^m (-1)^{p-1} a_p x_\lambda^{m-p} = \\
& a_1 x_\lambda^{m-1} - a_2 x_\lambda^{m-2} + \dots + (-1)^{p-1} a_p x_\lambda^{m-p} + \dots + (-1)^{m-1} a_m, \tag{1.25}
\end{aligned}$$

$$x_\lambda = \frac{B^{(\lambda)} Z_0}{\beta A^{(\lambda)} (E_1^2 - E_3^2)}, \quad x_\lambda > 0, \tag{1.26}$$

коефіцієнти a_p дорівнюють сумам відповідних коефіцієнтів при однакових розбиттях p -го рівня в (1.23). Наприклад:

$$\begin{aligned}
m=1 & \quad c_0 = 1, \\
m=2 & \quad c_1 = x - 3, \\
m=3 & \quad c_2 = x^2 - 15x + 30, \\
m=4 & \quad c_3 = x^3 - 63x^2 + 420x - 630, \\
m=5 & \quad c_4 = x^4 - 255x^3 + 4410x^2 - 18900x + 22680, \\
m=6 & \quad c_5 = x^5 - 1023x^4 + 42240x^3 - 395010x^2 + 1247400x - 1247400, \\
m=7 & \quad c_6 = x^6 - 4095x^5 + 390390x^4 - 7207200x^3 + 45405360x^2 - \\
& \quad - 113513400x - 97297200, \\
m=8 & \quad c_7 = x^7 - 16383x^6 + 3554460x^5 - 123513390x^4 + 1394593200x^3 - \\
& \quad - 6583777200x^2 + 13621608000x - 10216206000. \tag{1.27}
\end{aligned}$$

2. Вплив параметрів V і Γ на поведінку кластерних кумулянтів

Асимптотична поведінка кумулянтів $\mathcal{M}_{2n}(\vec{k}_1, \nu_1, \dots, \vec{k}_{2n}, \nu_{2n})$ при різних значеннях внутрікластерної взаємодії V та поперечного поля Γ є неоднозначною. Розглянемо випадок $\lambda = 1$.

$$V = 0$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{M}_{2m} & = \frac{(\beta\Gamma)^m sh^m 2\beta\Gamma}{\beta^{2m} (4\Gamma^2 + \nu^2)^m (ch 2\beta\Gamma + 1)^m} C_{m-1}(x), \\
x & = \frac{sh 2\beta\Gamma}{\beta\Gamma} \geq 2. \tag{2.1}
\end{aligned}$$

$$\Gamma = 0$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{M}_{2m} & = \left(\frac{e^{\beta V}}{4ch\beta V} \right)^m C_{m-1}(y), \\
y & = \frac{2ch\beta V}{e^{\beta V}} \leq 2. \tag{2.2}
\end{aligned}$$

Можна бачити, що при великих значеннях Γ кумулянти \mathcal{M}_{2m} розбігаються, в той час, як при $V \rightarrow \infty$ вони залишаються скінченими. Це свідчить про різну роль цих двох типів взаємодії в формуванні стійкості системи, що розглядається.

Враховуючи множники, пов'язані з нормуванням операторів $Y_\lambda(\vec{R}_q)$ та із кластерною структурою гамільтоніана (див. [17]), із (2.1) (або (2.2)) при $V = 0$, $\Gamma = 0$ отримуються значення класичних кумулянтів для моделі Ізінга [18]:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_2 &= 1, & \mathcal{M}_{10} &= 7936, \\ \mathcal{M}_4 &= -2, & \mathcal{M}_{12} &= -353792, \\ \mathcal{M}_6 &= 16, & \mathcal{M}_{14} &= 22368256, \\ \mathcal{M}_8 &= -272, & \mathcal{M}_{16} &= -1903757312 \text{ і т.д.} \end{aligned} \quad (2.3)$$

В нашому випадку при $V = 0$, $\Gamma = 0$ маємо:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_2 &= \frac{1}{4} = 0,25, & \mathcal{M}_{10} &= \frac{31}{64} \approx 0,4844, \\ \mathcal{M}_4 &= -\frac{1}{16} = -0,0625, & \mathcal{M}_{12} &= -\frac{691}{256} \approx -2,6992, \\ \mathcal{M}_6 &= \frac{1}{16} = 0,0625, & \mathcal{M}_{14} &= \frac{87375}{4096} \approx 21,3318, \\ \mathcal{M}_8 &= -\frac{17}{128} \approx -0,1328, & \mathcal{M}_{16} &= -\frac{798569}{4096} \approx -194,9631 \text{ і т.д.} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Як бачимо, при $V = 0$ та $\Gamma = 0$ кумулянти \mathcal{M}_{2m} мають правильні знаки і функціонал (1.6) добре визначений. Зростання \mathcal{M}_{2m} при $\Gamma \rightarrow \infty$ не є єдиною небезпекою при розгляді функціонала (1.6). Оскільки $C_{m-1}(x)$ є поліномом степені $(m-1)$, то при відмінних від нуля значеннях V та Γ кумулянти \mathcal{M}_{2m} стають немонотонними функціями параметра x (1.26) і, отже, можливою є зміна знаків \mathcal{M}_{2m} , а в результаті, розбіжність функціонала статистичної суми при певних значеннях параметрів кластера і температури. Очевидно, поява перших дійсних коренів $C_{m-1}(x)$ визначає граничні допустимі значення цих параметрів.

Підставляючи в (1.26) значення A і B із (1.21), можна пересвідчитись, що залежність x від мацубарівської частоти ν є достатньо слабкою. При аналітичному розгляді кількох перших поліномів $C_{m-1}(x)$ візьмемо $\nu = 0$. Тоді:

$$\begin{aligned} x &= \frac{ch \beta V + ch \beta \sqrt{V^2 + 4\Gamma^2}}{\beta \Gamma^2} \times \\ &\times \left[\sqrt{V^2 + 4\Gamma^2} (V^2 + \Gamma^2) (ch \beta V \cdot ch \beta \sqrt{V^2 + 4\Gamma^2} - 1) - \right. \\ &\left. - V(V^2 + 3\Gamma^2) sh \beta V sh \beta \sqrt{V^2 + 4\Gamma^2} \right] \times \end{aligned}$$

$$\times \left[(V^2 + 2\Gamma^2) sh \beta \sqrt{V^2 + 4\Gamma^2} + V \sqrt{V^2 + 4\Gamma^2} (ch \beta \sqrt{V^2 + 4\Gamma^2} - e^{\beta V}) \right]^{-1}. \quad (2.5)$$

Шукатимемо перші дійсні ($x > 0$) корені поліномів (1.27). В Таблиці I подані їх значення до $m = 8$ включно:

Таблиця I

m	1	2	3	4	5	6	7	8
x	-	3,0	2,3765	2,2017	2,1264	2,0868	2,0634	2,0482

Можна думати, що перші дійсні корені вищих поліномів $C_{m-1}(x)$ мають таку ж тенденцію, тобто:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} C_{m-1}(x) = 0, \quad \text{при } x = 2. \quad (2.6)$$

Звертаючись до формул (2.1), (2.2) бачимо, що при $\Gamma = 0$ поліном $C_{m-1}(x)$ не має жодного кореня в області $0 < V < \infty$, тобто позитивні короткосяжні взаємодії забезпечують правильність знаків усіх кумулянтів \mathcal{M}_{2m} і, отже, стійкість кластерної системи при довільних температурах.

Іншою є ситуація, коли $V = 0$, $\Gamma \neq 0$. В цьому випадку кумулянти \mathcal{M}_{2m} змінюють свої знаки при скінчених значеннях поперечного поля Γ (вищих, чим вищою є температура системи). Ці граничні значення $\beta \Gamma_{\text{гр}}$ подані в Таблиці II.

Таблиця II

m	1	2	3	4	5	6	7	8
$\beta \Gamma_{\text{гр}}$	∞	0,8111	0,5175	0,3833	0,3049	0,2534	0,2171	0,1895

При великих m $\beta \Gamma_{\text{гр}} \rightarrow 0$. А це означає, що у відсутності короткосяжних взаємодій повний функціонал (1.6) має сенс лише при $\Gamma = 0$. Відмінні від нуля значення поперечного поля ведуть до руйнування стійкості системи. Як легко бачити, подібну дію спричиняють і від'ємні короткосяжні взаємодії V .

Значно складнішим є випадок, коли обидва параметри V і Γ відмінні від нуля. Результати числового розрахунку залежності граничних значень $\Gamma_{\text{гр}}$ від величини короткосяжних взаємодій при різних значеннях температури подані на Рис.1, а від температури - на Рис.2.

Бачимо, що для кожного значення температури та інтенсивності короткосяжних взаємодій існує $\Gamma_{\text{гр}}$, яке розділяє діаграму Γ , V (або Γ , T) на дві області. У першій ($\Gamma < \Gamma_{\text{гр}}$) функціонал (1.6) є правильно визначений, і система перебуває в стійкому стані. Коли ж

$\Gamma > \Gamma_{\text{гр}}$, функціонал (1.6) стає розбіжним, що сигналізує про математичну нестійкість системи при відповідному значенні її параметрів. Термодинамічні функції, розраховані на основі функціонала (1.6), проявлятимуть незвичну поведінку, яку, проте, не можна вважати обумовленою фізичними властивостями системи. Адже в даному випадку маємо "випадковий" збіг параметрів системи, причому неоднаковий при використанні різних наближень в (1.6). Так, гаусове наближення не призводить до виникнення нефізичних ефектів, при четверному - вони мають місце при достатньо великих значеннях Γ , для шестерного - $\Gamma_{\text{гр}}$ зменшується і т.д., досягаючи $\Gamma_{\text{гр}} = 0$ для повного розподілу (1.6) (при умові, що $V = 0$). Коли ж $V \neq 0$, то значення $\Gamma_{\text{гр}}$ зростає із зростанням V у будь-якому наближенні (1.6).

При практичних розрахунках завжди доводиться обмежуватись певною (як правило, невисокою) степінню в розподілі (1.6), тому вже при виході за рамки гаусового наближення при дослідженні моделі де-Жена при низьких температурах виникають певні нефізичності, які називають анти-Кюрі точками, оскільки в цих точках, наприклад, параметр порядку обертається в нуль. Пояснимо механізм появи анти-Кюрі точок на прикладі моделі із четверним базисним розподілом. При пониженні температури в системі може статися ситуація, коли вибране значення поперечного поля Γ стає рівним граничному для цих умов. Це означає, що незвідний кумулянт четвертого порядку $\mathcal{M}_4 = 0$. Відповідний, спряжений до \mathcal{M}_4 , коефіцієнт a_4 також стає рівним нулеві, адже в гаусовому розподілі, який відповідає ситуації $\mathcal{M}_4 = 0$, усі коефіцієнти $a_{2m} = 0$ ($m \geq 2$), крім $a_2 = 1$ (докладно див. [15, 18]). В методі колективних змінних параметр порядку системи знаходиться із недоінтегрованого за однією змінною ρ_{λ_0} ($\vec{k} = 0, \nu = 0$) [18, 19] функціонала (1.6).

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z = \text{const}(V, \Gamma, \beta) - \frac{1}{\beta} \ln \int \exp \{ -N(D\rho_{\lambda_0}^4 - B\rho_{\lambda_0}^2 - A\rho_{\lambda_0}) \} d\rho_{\lambda_0}, \quad (2.7)$$

де

$$D \sim a_4, \quad B \sim a_2 - \beta\Phi(0), \quad A \sim h. \quad (2.8)$$

Отже, щоб F мала сенс при $a_4 = 0$, необхідно виконати умову:

$$\rho_{\lambda_0}(\vec{k} = 0, \nu = 0) = 0. \quad (2.9)$$

Параметр порядку при цьому значенні енергетичних характеристик кластера і температури "випадково" перетворюється в нуль

- з'являється анти-Кюрі точка. Такі точки завжди мають місце при дослідженні кластерної моделі де-Жена (див. [9,13,20]). Висловлене, наприклад в [9], міркування щодо механізму появи анти-Кюрі точок, незважаючи на правильність твердження про їх квантову природу, не містить обґрунтованого пояснення мікроскопічної суті явища. Цікаво відзначити, що застосування мінімізаційної процедури, яка є неодмінним елементом кластерного наближення, в певній мірі близьке до врахування вищих кореляційних ефектів, зокрема четверного порядку, адже без цієї процедури анти-Кюрі точки не виникають, як не виникають вони і при обмеженні в (1.6) лише гаусовим наближенням.

Слід підкреслити, що проблеми математичної стійкості системи, яка описується функціоналом (1.6), мають місце лише при низьких температурах. Адже саме в цій області суттєвою є квантовість системи, а її кількісним параметром є величина поперечного поля Γ .

При високих температурах кумулянти (1.24) переходять у свої класичні відповідники

$$\mathcal{M}_{2m}(\vec{k}_1, \nu_1, \dots, \vec{k}_{2m}, \nu_{2m}) = \left(\frac{1}{4}\right)^m C_{m-1}(2) \times \delta(\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_{2m}) \delta(\nu_1 + \dots + \nu_{2m}). \quad (2.10)$$

Неважно переконатись, що із (2.10) отримуються вирази (2.4), тобто при високих температурах короткосяжні взаємодії і поперечне поле не є визначальними характеристиками системи.

Вважаючи поперечне поле набагато меншим від величини короткосяжних взаємодій ($\frac{2\Gamma}{V} \ll 1$) знайдемо значення $\Gamma_{\text{гр}}$ при високих і при низьких температурах. Розклавши вирази (1.4), (1.21) та (1.26) по $\frac{2\Gamma}{V}$ з точністю до другого порядку по параметру розкладу, одержимо:

$$x = \left(2ch\beta V + \frac{2\beta\Gamma^2}{V} sh\beta V \right) \times \frac{\Gamma^2 \left[\beta V + \left(\frac{\nu}{2}\right)^2 \frac{\beta}{V} \left(1 - \left(\frac{sh\beta V}{\beta V}\right)^2 - \frac{sh2\beta V}{\beta V} \right) \right] + \left(\frac{\nu}{2}\right)^2 \frac{sh^2\beta V}{\beta V}}{\Gamma^2 \left[\beta V e^{\beta V} + \left(\frac{\nu}{2}\right)^2 2\beta^2 \frac{ch\beta V}{\beta V} \right] + \left(\frac{\nu}{2}\right)^2 sh\beta V}. \quad (2.11)$$

При $\nu = 0$ значення Γ , для яких повний функціонал (1.6) є збіжним ($x \leq 2$), визначаються з нерівності:

$$\Gamma^2 \leq \frac{V}{\beta}. \quad (2.12)$$

(2.12) є класичною асимптотикою $\Gamma_{\text{гр}}$ як при високих, так і при низьких температурах. Бачимо, що зменшуючись із падінням температури, $\Gamma_{\text{гр}}$ пропорційне до \sqrt{V} , що підтверджує висновок про стабілізуючу роль короткосяжних взаємодій в досягненні стійкого стану системи.

Врахування мацубарівської частоти в (2.11) дає мінімальне значення Γ , коли при $V \neq 0$ функціонал (1.6) не втрачає сенсу:

$$\Gamma^2 = \frac{V^2}{1 + \beta V}. \quad (2.13)$$

Нагадаємо, що в класичному випадку ($\nu = 0$) при $V \neq 0$ допустимим є значення $\Gamma = 0$ (див. (2.12)), але це протирічить нерівності, яка слідує з (2.11) при $\Gamma = 0$:

$$\frac{sh2\beta V}{\beta V} \leq 2 \quad (2.14)$$

і виконується як рівність лише при $V = 0$. Отже, врахування квантових ефектів суттєвим чином уточнило допустимі значення $\Gamma_{\text{гр}}$ при $V \rightarrow 0$.

На Рис.3 подано залежності $\Gamma_{\text{гр}}$ для класичного ($n = 0$) та квантового випадків у (2.11). Видно, що в області низьких температур існує пропорційне до V обмеження на мінімальне значення $\Gamma_{\text{гр}}$.

3. Термодинамічна стійкість базисної системи

Зважаючи на різну роль короткосяжних взаємодій V і поперечно-го поля Γ у формуванні поведінки кластерних кумулянтів і, отже, забезпечення математичної стійкості системи, важливим є визначення умов термодинамічної рівноваги, а саме, знаходження основного стану базисної системи. Для цього розглянемо точки екстремума системи з гамільтоніаном H_0 (1.5), мінімізуючи відповідну вільну енергію за параметрами V та Γ . Змістивши нижній рівень енергії спектру (1.4) $E_2 = -\sqrt{V^2 + 4\Gamma^2}$ так щоб $E_2 = 0$, для вільної енергії F маємо вираз:

$$F = -\frac{1}{\beta} \left(1 + e^{-2\beta\sqrt{V^2+4\Gamma^2}} + 2e^{-\beta\sqrt{V^2+4\Gamma^2}} ch\beta V \right). \quad (3.1)$$

Мінімізуючи (3.1) за V та Γ , отримуємо:

$$\frac{\partial F}{\partial V} = \frac{2V \left(e^{-2\beta\sqrt{V^2+4\Gamma^2}} + e^{-\beta\sqrt{V^2+4\Gamma^2}} ch\beta V - \frac{\sqrt{V^2+4\Gamma^2}}{V} e^{-\beta\sqrt{V^2+4\Gamma^2}} sh\beta V \right)}{\sqrt{V^2+4\Gamma^2} \left(1 + e^{-2\beta\sqrt{V^2+4\Gamma^2}} + 2e^{-\beta\sqrt{V^2+4\Gamma^2}} ch\beta V \right)} = 0, \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \Gamma} = \frac{8\Gamma \left(e^{-2\beta\sqrt{V^2+4\Gamma^2}} + e^{-\beta\sqrt{V^2+4\Gamma^2}} ch\beta V \right)}{\sqrt{V^2+4\Gamma^2} \left(1 + e^{-2\beta\sqrt{V^2+4\Gamma^2}} + 2e^{-\beta\sqrt{V^2+4\Gamma^2}} ch\beta V \right)} = 0. \quad (3.3)$$

Екстремум F за параметром V визначається двома рівностями:

$$V = 0, \quad (3.4)$$

або

$$e^{-\beta\sqrt{V^2+4\Gamma^2}} + ch\beta V - \frac{\sqrt{V^2+4\Gamma^2}}{V} sh\beta V = 0; \quad (3.5)$$

а за параметром Γ однією:

$$\Gamma = 0. \quad (3.6)$$

Тобто, точка $V = 0, \Gamma = 0$ задовільняє необхідні умови екстремальності функції F .

Дослідимо умову (3.5). Неважко переконатись, що єдиною точкою, де вона задовільняється, є $V = \infty$ (при довільних Γ). Підставивши (3.5) в (3.3), бачимо, що в тій же точці ($V = \infty$) $\frac{\partial F}{\partial \Gamma} = 0$. Отже, другою необхідною умовою екстремальності F є значення ($V^* = \infty, \Gamma^*$ - довільне). Для встановлення достатніх умов екстремума F знайдемо змішану похідну:

$$\left. \frac{\partial^2 F}{\partial V \partial \Gamma} \right|_{\substack{V=0 \\ \Gamma=0}} = 0 \quad (3.7)$$

і в точці, що визначається рівністю (3.5):

$$\frac{\partial^2 F}{\partial V \partial \Gamma} = -\frac{8\beta V \Gamma e^{-\beta\sqrt{V^2+4\Gamma^2}} \left(e^{-\beta\sqrt{V^2+4\Gamma^2}} + \frac{sh\beta V}{\beta V} \right)}{(V^2 + 4\Gamma^2) \left(1 + e^{-2\beta\sqrt{V^2+4\Gamma^2}} + 2e^{-\beta\sqrt{V^2+4\Gamma^2}} ch\beta V \right)}. \quad (3.8)$$

Неважко бачити, що при $V = V^*, \Gamma = \Gamma^*$, змішана похідна (3.8) дорівнює нулеві. Таким чином, вільна енергія (3.1) в усій області зміни параметрів V та Γ не має жодного максимуму чи мінімуму, досягаючи точок перегину при $V = 0, \Gamma = 0$ і при $V = \infty, \Gamma$ - довільне. Система невзаємодіючих кластерів не є термодинамічно стійкою. Відповідна стійкість досягається лише при врахуванні

міжкластерних взаємодій, а також зовнішнього (або внутрішнього самоузгодженого) поля (див., напр. [21]).

Інший важливий висновок: наявність хоча б невеликого зовнішнього поля Γ зміщує умову відносної стійкості системи в область великих значень параметра короткосяжних взаємодій. В такий спосіб короткосяжні взаємодії "намагаються" стабілізувати термодинамічну рівновагу. Якісно це відповідає висновку зробленому вище при дослідженні математичної стійкості кластерної системи на основі функціонала вільної енергії. Оскільки в самій базисній системі не виявлено будь-яких можливостей щодо зміни термодинамічного стану, то отримані нами особливості в поведінці кластерних кумулянтів при різних значеннях V та Γ є чисто математичними властивостями досліджуваної кластерної системи і не пов'язані з аномаліями її фізичних характеристик. Прояви цих особливостей у вигляді анти-Кюрі точок свідчать про непросту природу моделей, в основі якої лежить гамільтоніан де-Жена, і, можливо, не повну відповідність їх тим фізичним об'єктам, до опису яких вони застосовуються.

4. Висновки

1. Функціональне зображення статистичної суми (або вільної енергії) моделі деякої фізичної системи має місце за умови забезпечення її фінітності в усій області зміни внутрішніх і зовнішніх параметрів. Це може накладати певні умови на значення цих параметрів, які суттєвим чином визначаються вибором самої моделі.
2. В кластерній моделі сегнетоелектрика, яка ґрунтується на квантовій моделі де-Жена, короткосяжні внутрікластерні взаємодії і поперечне поле виявляють протилежні тенденції щодо забезпечення збіжності функціонала статистичної суми. Перші - сприяють правильній визначеності усіх коефіцієнтів функціонала, другі - навпаки, протидіють цьому. Існує зв'язок між граничними значеннями цих параметрів (залежний від температури), при яких функціонал втрачає фінітність. Короткосяжні взаємодії протидіють дестабілізуючому впливу поперечного поля, причому їх роль зростає з пониженням температури.
3. Ці ефекти є виключно математичними особливостями кластерної моделі де-Жена і не пов'язані безпосередньо з умовами термодинамічної стійкості фізичної системи. Проте, термо-

динамічна стійкість також зростає із збільшенням відносного (порівняно з поперечним полем) вкладу короткосяжних взаємодій.

4. Математична нестійкість кластерної моделі де-Жена, яка зростає із пониженням температури, може бути пов'язана із виникненням фізично не вмотивованих явищ аномальної поведінки термодинамічних функцій кластерних сегнетоелектриків, які передбачає теорія при ненульових поперечних полях, т.зв. анти-Кюрі точок.

Автор висловлює щире подяку О.Є.Кобрину за допомогу при виконанні числових розрахунків і оформленні графічного матеріалу.

Література

1. Юхновский И.Р., Головки М.Ф. Статистическая теория классических равновесных систем. - К.: Наук. думка, 1980.
2. Wertheim M.S. // J. Stat. Phys. - 1984. - V.35, p.19-35.
3. Holovko M.F., Kapko V. // Cond. Matt. Phys. (Ukr.). - 1998. - V.1, p.239-255.
4. Slater J.C. // J. Chem. Phys. - 1941. - V.9. - p.16-33.
5. De-Gennes P.G. // Sol. St. Com. - 1963. - V.1. - p.132-137.
6. Blinc R., Svetina S. // Phys. Rev. - 1966. - V.147. - p.423-429.
7. Blinc R., Svetina S. // Phys. Rev. - 1966. - V.147. - p.430-438.
8. Вакс В.Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. - М.: Наука, 1973.
9. Вакс В.Г., Зиненко В.И. // ЖЭТФ. - 1973. - V.64. - p.650-664.
10. Вакс В.Г., Зейн Н.Е. // ФТТ. - 1975. - V.17. - p.1617-1626.
11. Levitsky R.R., Stasyuk I.V., Korynevsky N.A. // Ferroelectrics. - 1978. - V.21. - p.481-483.
12. Stasyuk I.V., Levitsky R.R., Korynevsky N.A. // Phys. Stat. Sol(b). - 1979. - V.91. - p.541-550.
13. Левицький Р.Р., Баран О. (приватне повідомлення).
14. Кориневский Н.А. // ТМФ. - 1983. - Т.55. - с.291-304.
15. Yukhnovskii I.R., Korynevskii N.A. // Phys. Stat. Sol.(b). - 1989. - V.153. - p.583-593.
16. Кориневский Н.А. Функционал свободной энергии системы двухчастичных кластеров / Препринт ИТФ-82-4Р, Киев, 1982, 36с.

17. Кориневський М.А. Функціональне зображення статистичної суми квантових кластерних систем / Препринт ICMP-98-06U, Львів, 1998, 31с.
18. Yukhnovskii I.R. // Nuovo Cimento. - 1989. - V.12. - 112р.
19. Кориневський М.А. Параметр порядку системи двочастинкових магнітних кластерів / Препринт ICMP-99-01U, Львів, 1999, 24с.
20. Струков Б.А., Леванюк А.П. Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах. - М.: Наука, 1983.
21. Danyliv O., Stasyuk I.V. // Cond. Matt. Phys. (Ukr.). - 1996. - N 7, p.163-177.

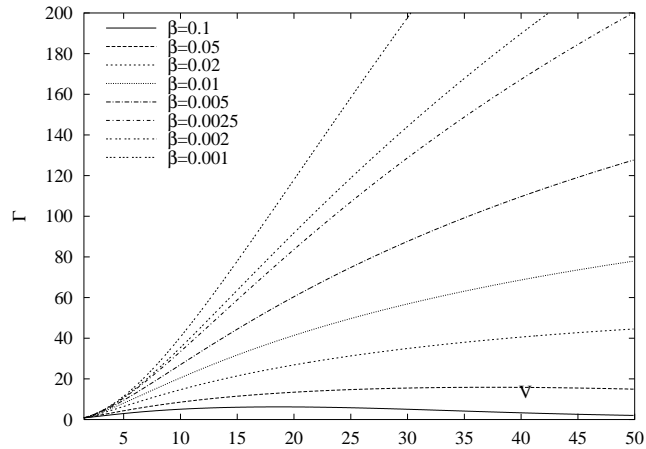


Рис. 1. Залежність граничного значення поперечного поля Γ_{gr} від величини внутрікластерної взаємодії V при різних значеннях оберненої температури β .

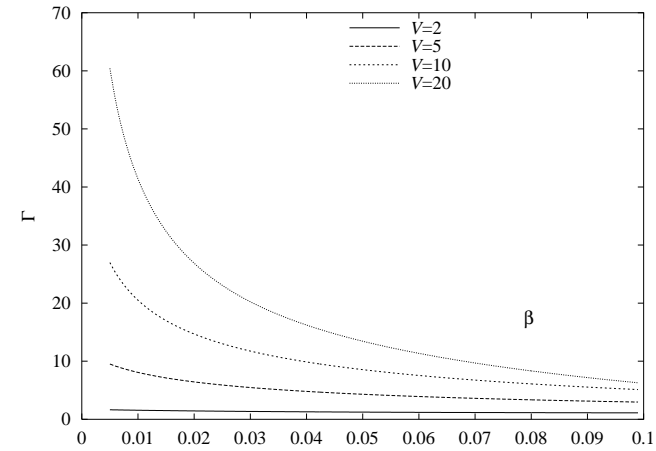


Рис. 2. Залежність граничного значення поперечного поля Γ_{gr} від оберненої температури β при різних величинах внутрікластерної взаємодії V .

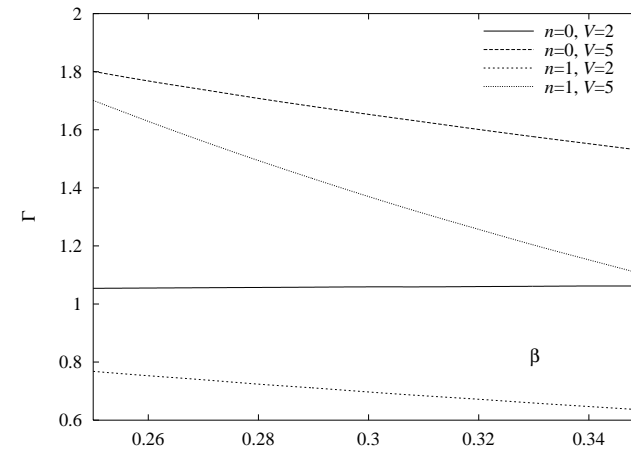


Рис. 3. Залежність граничного значення поперечного поля Γ_{gr} від оберненої температури β без врахування ($n = 0$) та з врахуванням ($n = 1$) мацубарівської частоти.

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

ПРО МАКСИМАЛЬНЕ ЗНАЧЕННЯ ПОПЕРЕЧНОГО ПОЛЯ В КВАНТОВІЙ
КЛАСТЕРНІЙ МОДЕЛІ

Роботу отримано 2 липня 1999 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу статистичної теорії
конденсованих систем

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені