

19. *Займан Дж.* Модели беспорядка. — М. : Мир, 1982. — 592 с.  
 20. *Lu Y., Patton B. R.* Effects of spin frustration in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  // *J. Phys.: Condens. Matter.* — 1990. — 2, N 47. — P. 9423—9433.  
 21. *Aristov D. N., Maleyev S. V.* Quantum frustration in quasi-2D antiferromagnets // *Z. Phys. B.* — 1990. — 81, N 3. — P. 433—440.

Інститут фізики конденсованих систем  
 АН України, Львів

Одержано 9.07.92

УДК 538.9

Г. В. ПОНЕДІЛОК

## ФУНКЦІОНАЛЬНЕ ІНТЕГРУВАННЯ В ТЕОРІЇ ФЕРОМАГНІТНИХ СПЛАВІВ ЗАМІЩЕННЯ

Метод функціонального інтегрування за бозе-полями застосовується для розрахунку термодинамічних властивостей магнітних сплавів заміщення. Детально розглянуто можливі у цьому підході способи виділення самоузгодженого поля. Розроблено схему розрахунку конфігураційно засереднених фізичних величин. Як приклад застосування запропонованого підходу розраховується вільна енергія сплаву. Отримано рівняння для розрахунку намагніченості і температури переходу парамагнетик — феромагнетик.

**Вступ.** У поданій статті вивчаються магнітні властивості бінарних сплавів заміщення на основі квантової моделі Гейзенберга. Ця модель є однією з найпростіших теорії магнетизму, яка доволі добре описує характерні властивості такого явища. До дослідження моделі Гейзенберга застосовувались різноманітні методи з арсеналу теоретичної фізики: діаграмна техніка [1, 2], кластерні розклади [3, 4], функціональне інтегрування [5—8].

Досить успішно «працює» модель Гейзенберга також в теорії структурно неупорядкованих магнетиків (аморфні системи, сплави заміщення). При дослідженні структурно неупорядкованої моделі Гейзенберга виникають додаткові принципові труднощі і проблеми, пов'язані з необхідністю здійснення конфігураційного засереднення спостережуваних фізичних величин. У працях [7, 8] зазначено, що найбільш зручним і ефективним методом розрахунку термодинамічних і динамічних властивостей з погляду конфігураційного засереднення є метод функціонального інтегрування. Власне, в цій праці і розглядаються деякі технічні деталі методу функціонального інтегрування і його використання до дослідження магнітних сплавів заміщення. Основна мета праці полягає в дослідженні внеску структурних флуктуацій у термодинамічні властивості. Тут, зокрема, обговорюються можливі схеми введення просторово неоднорідних параметрів порядку.

**Модель бінарного магнітного сплаву.** Розгляньмо правильну кристалічну ґратку, вузли якої  $R_1, \dots, R_N \in \mathbb{Z}^3$  цілком хаотично (некорельовано) зайняті магнітними або немагнітними атомами. Фактично розглядається сплав заміщення типу  $A_c B_{1-c}$ , де  $c$  — концентрація магнітних;  $(1-c)$  — концентрація немагнітних атомів. Випадку  $c = 1$  відповідає ідеальний кристал з магнітних атомів.

Гамільтоніан вихідної моделі такого сплаву запишемо у вигляді

$$\hat{H} = -\mu h \sum_{1 \leq j \leq N} \hat{c}_j S_j^z - \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i < j \leq N} J(|R_i - R_j|) \hat{c}_i S_i \hat{c}_j S_j. \quad (1)$$

Тут  $\mu$  — магнітний момент сорту  $A$ ;  $S_j$  — оператор спіна атома сорту  $A$ , що знаходиться в  $j$ -му вузлі ґратки.

Оператор спіна задовольняє умову  $[S_j]^2 = S(S+1)$ , де  $\frac{1}{2} \leq S \leq \infty$  — величина спіна атома. Зовнішнє магнітне поле  $h$  направлене вздовж осі  $OZ$  лабораторної системи координат. Формальний оператор

© Г. В. Понеділок, 1993

заповнення вузлів ґратки магнітними атомами задається стандартним означенням

$$\hat{c}_j = \begin{cases} 1, & \text{коли вузол } R_j \text{ зайнятий магнітним атомом,} \\ 0, & \text{коли вузол } R_j \text{ зайнятий немагнітним атомом.} \end{cases} \quad (2)$$

Модель (1) враховує тільки магнітні взаємодії у сплаві. Роль немагнітної компоненти сплаву в такій моделі зводиться до формальної стабілізації ґратки при різних концентраціях атомів. Зрозуміло, що це є дуже спрощене трактування ролі немагнітних атомів. В реальних системах за посередництвом підсистеми немагнітних атомів формуються магнітні моменти атомів та інтеграл обмінної взаємодії. Іншими словами, як магнітний момент  $\mu$ , так і обмінний інтеграл  $J(|R_i - R_j|)$  залежать також певним чином від концентрації атомів.

У моделі (1) така залежність не враховується.

Гамільтоніан (1) перепишемо у вигляді

$$\hat{H} = \frac{1}{2} S(S+1) J(0) \sum_{1 \leq j \leq N} \hat{c}_j - \mu h \sum_{1 \leq j \leq N} \hat{c}_j S_j^z - \frac{1}{2} \sum_k J_k S_k S_{-k} \quad (3)$$

де

$$J_k = \sum_{1 \leq j \leq N} J(|R_j|) \exp(-ikR_j) \quad (4)$$

є фур'є-компоненти обмінного інтеграла.

Обернене до (4) перетворення Фур'є має вигляд

$$J(|R_i - R_j|) = \frac{1}{N} \sum_k J_k \exp(ik(R_i - R_j)). \quad (4a)$$

Хвильовий вектор  $k$  змінюється у межах першої зони Бріллюена. Оператор

$$S_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{1 \leq j \leq N} \hat{c}_j S_j \exp(-ikR_j) \quad (5)$$

є фур'є-образом оператора  $\hat{c}_j S_j$ .

Спочатку виділимо в гамільтоніані самоузгоджене поле. З цією метою можна ввести такі оператори:

$$\hat{Q}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{1 \leq j \leq N} \{\hat{c}_j S_j - m_j e_z\} \exp(-ikR_j), \quad (6a)$$

$$\hat{Q}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{1 \leq j \leq N} \{\hat{c}_j S_j - \hat{c}_j m_j e_z\} \exp(-ikR_j), \quad (6b)$$

$$\hat{Q}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{1 \leq j \leq N} \{\hat{c}_j S_j - \hat{c}_j m e_z\} \exp(-ikR_j), \quad (6b)$$

де  $e_z$  — одиничний вектор, направлений вздовж осі  $OZ$  лабораторної системи координат.

На фізичному змісті параметра  $m_j$ ,  $1 \leq j \leq N$ , варто зупинитись детальніше. Кожний з операторів (6a) — (6b) характеризує той чи інший спосіб виділення самоузгодженого поля. Найбільш загальним є оператор (6a). Параметру  $m_j$  можна надати зміст середньої термодинамічної намагніченості  $j$ -го вузла:  $m_j = \langle s_j^z \rangle$ , де термодинамічне засереднення за спіновими координатами

$$\langle (\dots) \rangle_T = \text{Sp} [e^{-\beta \hat{H}_{\text{eff}}} (\dots)] / \text{Sp} e^{-\beta \hat{H}_{\text{eff}}}, \quad (7)$$

$\beta = k_B T$  — обернена температура. Тут  $\hat{H}_{\text{eff}}$  — деякий ефективний гамільтоніан, що отримується з вихідного гамільтоніана сплаву шляхом певних наближень. Конкретний вигляд  $\hat{H}_{\text{eff}}$  вибирається на основі міркувань, які будуть наведені нижче. У загальному випадку параметр  $m_j$  залежить від номера вузла і описує флюктуючий характер локальних намагніченостей. Локальна намагніченість знаходиться самоузгодженим чином за умови мінімуму вільної енергії.

Оператор (6б) збудовано на основі певного анзацу про характер залежності локальної намагніченості від конфігурації магнітних атомів. При цьому слід пам'ятати, що  $m_j$  і далі залишається неявно залежним від конфігурації  $\{c^N\}$ . Нарешті, в операторі (6в) виділено засереднене як за Гібсом, так і за конфігураціями самоузгоджене поле:

$$m = \langle \langle S_j^z \rangle \rangle_c \equiv \langle m_j \rangle_c.$$

Операція  $\langle \langle \dots \rangle \rangle_c$  тут і далі буде означати конфігураційне засереднення за всіма можливими розподілами атомів на гратці.

Зупинимось у цій праці на способі введення самоузгоджених намагніченостей типу (6в). У термінах операторів  $\hat{Q}_k$  гамільтоніан моделі остаточно запишеться у вигляді

$$\hat{H} = \frac{1}{2} S(S+1) J(0) \sum_{1 \leq j \leq N} \hat{c}_j + \frac{1}{2} \sum_k J_k m_k m_{-k} - \sum_{1 \leq j \leq N} h_j \hat{c}_j S_j^z - \frac{1}{2} \sum_k J_k \hat{Q}_k \hat{Q}_k. \quad (8)$$

Тут величини

$$m_k = \frac{m}{\sqrt{N}} \sum_{1 \leq j \leq N} \hat{c}_j \exp(-ikR_j) \quad (9)$$

є фур'є-компонентами намагніченості системи при фіксованій структурній конфігурації. Ефективне локальне поле, яке діє на спин магнітного атома, що знаходиться у вузлі  $R_j$ , виражається формулою

$$h_j = \mu h + \frac{1}{2\sqrt{N}} \sum_k J_k [m_k e^{ikR_j} + m_{-k} e^{-ikR_j}]. \quad (10)$$

У випадку ідеального кристала ( $\hat{c}_j \equiv 1$  для всіх  $j = 1, \dots, N$ ) локальна намагніченість є однаковою для кожного вузла:  $m = \langle S_j^z \rangle_T$ ,  $j = 1, \dots, N$ . Тоді співвідношення (10) зводиться до виразу

$$h_j \rightarrow h_0 = \mu h + m J_0 \quad (11)$$

— звичайного однорідного самоузгодженого поля магнітних кристалів. Тут параметр  $J_0$ , який характеризує інтенсивність обмінної взаємодії, визначається співвідношенням

$$J_0 = \lim_{|k| \rightarrow 0} J_k = \sum_j J(|R_j - R_i|).$$

Для взаємодії тільки наближених сусідів  $J_0 = zJ$ , де  $z$  — число найближчих сусідів;  $J$  — обмінний інтеграл взаємодії між найближчими атомами.

**Функціонал термодинамічного потенціалу.** Для деякої заданої конфігурації атомів  $\{\hat{c}_1, \dots, \hat{c}_N\} \equiv \{c^N\}$  статистична сума моделі може бути записана через температурну матрицю розсіювання

$$Z[c^N] = e^{-\beta C} \text{Sp} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_0} \hat{T}_\tau e^{-\int_0^\beta d\tau \hat{H}_{\text{int}}(\tau)} \right\}, \quad (12)$$

де  $C$  — неоператорна величина, яка задається сумою перших двох доданків правої сторони співвідношення (8); гамільтоніан  $\hat{H}_0$  — енергія магнітних атомів у самоузгодженому полі:

$$\hat{H}_0 = - \sum_{1 \leq j \leq N} h_j c_j S_j^z. \quad (13)$$

Величина  $\hat{H}_{\text{int}}(\tau)$  є гамільтоніаном взаємодії спінів (останній доданок формули (8), записаний у представленні взаємодії). Символ  $\hat{T}_\tau$  — оператор хронологічного впорядкування «часів»,  $\tau \in [0; \beta]$ .

Використовуючи тотожність Стратоновича — Хаббарда, статистичну суму (12) записуємо у вигляді функціонального інтеграла

$$Z[\hat{c}^N] = e^{-\beta c} \int (d\varphi) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \sum_k \varphi_k(\tau) \varphi_{-k}(\tau) \right\} \times \\ \times \text{Sp} \left[ e^{-\beta \hat{H}_0 \hat{T}_\tau} \exp \left\{ \int_0^\beta d\tau \sum_k V \bar{J}_k \varphi_k(\tau) \hat{Q}_k(\tau) \right\} \right]. \quad (14)$$

Декартові компоненти оператора  $\hat{Q}_k(\tau)$  задовольняють умови

$$Q_k^\alpha(\tau) = \text{Re} \hat{Q}_k^\alpha(\tau) - i \text{Im} \hat{Q}_k^\alpha(\tau), \quad \alpha = x, y, z, \\ \text{Re} \hat{Q}_k^\alpha(\tau) = \text{Re} \hat{Q}_{-k}^\alpha(\tau), \quad \text{Im} \hat{Q}_k^\alpha(\tau) = -\text{Im} \hat{Q}_{-k}^\alpha(\tau), \quad \hat{Q}_k^\alpha(\tau) = (\hat{Q}_{-k}^\alpha(\tau))^*. \quad (15a)$$

Відповідно польова змінна  $\varphi_k^\alpha(\tau)$ , спряжена до  $\hat{Q}_k(\tau)$ , володіє властивостями

$$\varphi_k^\alpha(\tau) = \text{Re} \varphi_k^\alpha(\tau) + i \text{Im} \varphi_k^\alpha(\tau), \quad \text{Re} \varphi_k^\alpha(\tau) = \text{Re} \varphi_{-k}^\alpha(\tau), \\ \text{Im} \varphi_k^\alpha(\tau) = -\text{Im} \varphi_{-k}^\alpha(\tau). \quad \varphi_k^\alpha(\tau) = (\varphi_{-k}^\alpha(\tau))^*. \quad (15b)$$

Функціональний інтеграл в (14) за польовими змінними  $\varphi_k(\tau)$  визначений у такий спосіб:

$$\int (d\varphi) (\dots) = \prod_{\alpha=x,y,z} \prod_{0 \leq \tau \leq \beta} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varphi_0^\alpha(\tau)}{\sqrt{2\pi}} \prod_{k>0} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d \text{Re} \varphi_k^\alpha(\tau)}{\sqrt{\pi}} \times \\ \times \frac{d \text{Im} \varphi_k^\alpha(\tau)}{\sqrt{\pi}}. \quad (16)$$

У строгому математичному сенсі співвідношення (16) не є означенням міри інтегрування, а лише формальним позначенням нескінченно кратного інтеграла.

Введемо циркуляційні компоненти спінових операторів  $\hat{Q}_k^\alpha(\tau)$

$$\hat{Q}_k^\pm(\tau) = \hat{Q}_k^x(\tau) \pm i \hat{Q}_k^y(\tau), \quad (17a)$$

а також спряжені до них польові змінні

$$\varphi_k^\pm(\tau) = \varphi_k^x(\tau) \mp i \varphi_k^y(\tau). \quad (17b)$$

Зручно перейти до частотного представлення польових змінних, розкладаючи їх у ряд Фур'є на інтервалі  $\tau \in [0, \beta]$ :

$$\varphi_k^\alpha(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{\omega} e^{i\tau\omega} \varphi_{k\omega}^\alpha; \quad \varphi_{k\omega}^\alpha = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \int_0^\beta d\tau \varphi_k^\alpha(\tau) e^{-i\tau\omega}. \quad (18)$$

Частоти  $\omega$  приймають дискретні значення:  $\omega = 2\pi n/\beta$ ,  $n \in \mathbb{Z}$ .

Статистичну суму можна записати у вигляді

$$Z[\hat{c}^N] = e^{-\beta F_0[\hat{c}^N]} \int (d\varphi) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_x \varphi_x \varphi_{-x} \right\} \langle U[\varphi] \rangle_0. \quad (19)$$

Тут

$$U[\varphi] = \hat{T}_\tau \exp \left\{ \sum_x \sum_{\alpha=z,+,-} V \bar{J}_x^\alpha \varphi_x^\alpha \hat{Q}_x^\alpha \right\} \quad (20)$$

є функціонал температурної матриці розсіювання.

У виразах (19), (20) індекс  $x \equiv (k, \omega)$  означає вектор чотиривимірного імпульсно-частотного простору. Сумування за 4-вектором  $\sum_x \equiv \sum_k \sum_\omega$ . Оператори, що входять в означення функціоналу матриці розсіювання, мають вигляд

$$\hat{Q}_x^\alpha = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \int_0^\beta d\tau e^{i\tau\omega} \hat{Q}_k^\alpha(\tau), \quad \alpha = +, -, z, \text{ або } (x, y, z). \quad (21)$$

Тепер коефіцієнти взаємодії перепозначені таким чином:

$$J_x^\alpha \equiv J_k^\alpha = \begin{cases} J_k, & \alpha = z, \\ J_k/4, & \alpha = +, -. \end{cases} \quad (22)$$

Термодинамічне засереднення за незваженою системою спінів у формулі (19) має вигляд

$$\langle (\dots) \rangle_0 = \text{Sp} [(\dots) e^{-\beta \hat{H}_0}] / \text{Sp} e^{-\beta \hat{H}_0}. \quad (23)$$

Вільна енергія сплаву в наближенні флюктууючого самоузгодженого поля для заданої конфігурації атомів записується таким чином:

$$F_0[\hat{c}^N] = -\beta^{-1} \ln [\text{Sp} e^{-\beta(C + \hat{H}_0)}]. \quad (24)$$

Якобіан переходу від польових змінних  $\hat{Q}_k^\alpha(\tau)$  до польових змінних в імпульсно-частотному представленні дорівнює одиниці. Тому інтегрування за польовими змінними в (19) означене як нескінченнократний інтеграл

$$\int (d\varphi) \equiv \prod_{\alpha=x,y,z} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varphi_0^\alpha}{\sqrt{2\pi}} \prod_{x>0} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d \text{Re } \varphi_x^\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{d \text{Im } \varphi_x^\alpha}{\sqrt{\pi}}. \quad (25)$$

Остаточно статистичну суму сплаву можна записати у вигляді функціонального інтеграла

$$Z[\hat{c}^N] = \int (d\varphi) e^{-\beta F[\varphi; \hat{c}^N]}. \quad (26)$$

Функціонал термодинамічного потенціалу для деякої заданої на гратці конфігурації магнітних атомів

$$F[\varphi; \hat{c}^N] = F_0[\hat{c}^N] + \frac{1}{2\beta} \sum_x |\varphi_x|^2 - \beta^{-1} \ln \langle U[\varphi] \rangle_0. \quad (27)$$

Термодинамічне середнє від функціоналу матриці розсіювання  $U[\varphi]$  можна розрахувати, наприклад, за допомогою розкладу за незвідними середніми від операторів  $\hat{Q}_x^\alpha$ , як це зроблено у працях [5, 7, 8]. Тоді для функціоналу вільної енергії дістанемо поліноміальний функціональний ряд

$$F[\varphi; \hat{c}^N] = F_0[\hat{c}^N] + \frac{1}{2\beta} \sum_x \varphi_x \varphi_{-x} - \beta^{-1} \sum_{m \geq 1} \frac{1}{m!} \sum_{x_1, \alpha_1} \dots \sum_{x_m, \alpha_m} \sqrt{J_{x_1}^{\alpha_1} \dots J_{x_m}^{\alpha_m}} \mathfrak{M}_{\alpha_1, \dots, \alpha_m}(x_1, \dots, x_m) \times \varphi_{x_1}^{\alpha_1} \dots \varphi_{x_m}^{\alpha_m}. \quad (28)$$

Ядрами функціоналу є незвідні середні від хронологічного добутку операторів  $\hat{Q}_x^\alpha$

$$\mathfrak{M}_{\alpha_1, \dots, \alpha_m}(x_1, \dots, x_m) = \langle \hat{T}_\tau Q_{x_1}^{\alpha_1} \dots Q_{x_m}^{\alpha_m} \rangle_0^{\text{irr}}, \quad (29)$$

які можуть бути пораховані за допомогою теореми Віка для спінових операторів.

Вільна енергія сплаву для фіксованої конфігурації в наближенні флуктуюючого самоузгодженого поля виражається формулою

$$F_0[\hat{c}^N] = \frac{1}{2} \sum_k J_k \hat{m}_k \hat{m}_{-k} - \frac{1}{\beta} \sum_{j=1}^N \hat{c}_j \ln \frac{\text{sh} \left| \beta h_j \left( S + \frac{1}{2} \right) \right|}{\text{sh} \frac{\beta h_j}{2}}. \quad (30)$$

Тут ми наклали характерну для кристалічних систем умову  $\sum_k J_k = 0$ .

Середнє термодинамічне значення намагніченості  $i$ -го вузла в наближенні самоузгодженого поля

$$\langle \hat{c}_i S_i^z \rangle_0 = \frac{\text{Sp} \left[ \hat{c}_i S_i^z \exp \left( \beta \sum_{1 \leq j \leq N} h_j \hat{c}_j S_j^z \right) \right]}{\text{Sp} \exp \left( \beta \sum_{1 \leq j \leq N} h_j \hat{c}_j S_j^z \right)} = - \frac{\partial F_0[\hat{c}^N]}{\partial h_i}. \quad (31)$$

Для незвідного середнього другого порядку має місце співвідношення

$$\langle \hat{c}_i S_i^z \hat{c}_j S_j^z \rangle_0^{\text{irr}} \equiv \langle \hat{c}_i S_i^z \hat{c}_j S_j^z \rangle_0 - \langle \hat{c}_i S_i^z \rangle_0 \langle \hat{c}_j S_j^z \rangle_0 = - \frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 F_0[\hat{c}^N]}{\partial h_i \partial h_j}, \quad (32)$$

а незвідне середнє довільного порядку через  $F_0[\hat{c}^N]$  виражається формулою

$$\langle \hat{c}_{i_1} S_{i_1}^z \dots \hat{c}_{i_m} S_{i_m}^z \rangle_0^{\text{irr}} = - \frac{1}{\beta^{m-1}} \frac{\partial^m F_0[\hat{c}^N]}{\partial h_{i_1} \dots \partial h_{i_m}}. \quad (33)$$

Використовуючи вираз (30) для вільної енергії в наближенні самоузгодженого поля, знаходимо

$$\langle \hat{c}_i S_i^z \rangle_0 = \hat{c}_i S B_S(S y_i) \equiv \hat{c}_i M_1(y_i), \quad (34)$$

де  $y_i = \beta h_i$  — безрозмірне ефективне поле, що діє на спін, який розташований у  $i$ -му вузлі ґратки. Функція Бріллюена для спіна величиною  $S$  має вигляд

$$B_S(t) = \left( 1 + \frac{1}{2S} \right) \text{cth} \left( t + \frac{t}{2S} \right) - \frac{1}{2S} \text{cth} \frac{t}{2S}, \quad t \in \mathbb{R}. \quad (35)$$

У (34) введено також зручне позначення:  $M_1(y_i) = S B_S(S y_i)$ . Для незвідного середнього другого порядку легко отримується вираз

$$\langle \hat{c}_i S_i^z \hat{c}_j S_j^z \rangle_0^{\text{irr}} = \hat{c}_i \frac{1}{\beta} \frac{dM_1(y_i)}{dy_i} \delta_{i,j} = \hat{c}_i M_2(y_i) \delta_{i,j}, \quad (36)$$

а для незвідних середніх довільного порядку —

$$\langle \hat{c}_{i_1} S_{i_1}^z \dots \hat{c}_{i_m} S_{i_m}^z \rangle_0^{\text{irr}} = \hat{c}_{i_1} M_m(y_{i_1}) \delta_{i_1, \dots, i_m}. \quad (37)$$

Тут

$$\delta_{i_1, \dots, i_m} = \prod_{\alpha=1}^{m-1} \delta_{i_\alpha, i_{\alpha+1}}. \quad (38)$$

Коефіцієнти  $M_m(y_i)$  знаходяться за допомогою рекурентного співвідношення

$$M_m(y_i) = \frac{dM_{m-1}(y_i)}{dy_i} = \left( \frac{d}{dy_i} \right)^{m-1} M_1(y_i). \quad (39)$$

Тепер повернемось до семіінваріантів (29). Легко зауважити, що коефіцієнти  $\mathfrak{M}_\pm(x) = 0$ , як наслідок алгебри спінових операторів і змісту термодинамічного середнього  $\langle \dots \rangle_0$  [5]. Для  $\mathfrak{M}_z(x)$  знаходимо

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}_z(x) &= \frac{1}{V \beta^N} \sum_{j=1}^N \hat{c}_j e^{-ikR_j} \int_0^\beta d\tau e^{i\tau\omega} \langle \hat{T}_\tau(S_j^z(\tau) - m) \rangle_0 = \\ &= \beta \delta_{\omega,0} \frac{1}{V \beta^N} \sum_{j=1}^N \hat{c}_j e^{-ikR_j} (M_1(y_j) - m). \end{aligned} \quad (40)$$

У випадку кристала, коли  $\hat{c}_j \equiv 1$ , а локальна намагніченість  $\langle S_j^z \rangle \equiv m$  і не залежить від номера вузла, коефіцієнт  $\mathfrak{M}_z(x) \equiv 0$ . Після нескладних перетворень для незвідного середнього  $m$ -го порядку дістанемо вираз

$$\mathfrak{M}_{z\dots z}(x_1, \dots, x_m) = \left(\frac{\beta}{N}\right)^{\frac{m}{2}} \sum_{j=1}^N \hat{c}_j M_m(y_j) e^{-i(k_1 + \dots + k_m) R_j} \prod_{i=1}^m \delta_{\omega_i, 0}. \quad (41)$$

Незвідні середні, побудовані на комбінаціях операторів  $\hat{Q}_x^\pm$ , виражаються через поперечні вузлові спінові функції Гріна не взаємодіючої системи

$$K_0^{-+}(\tau_1 - \tau_2 | y_j) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\langle \hat{T}_\tau S_i^-(\tau_1) S_j^+(\tau_2) \rangle_0}{2 \langle S_j^z \rangle_0}. \quad (42)$$

Для розрахунку цих функцій Гріна необхідно скористатись співвідношеннями

$$S_j^\pm(\tau) = e^{\mp \tau \hat{c}_j h_j} S_j^\pm, \quad S_j^-(\tau) \hat{\rho}_0 = e^{\hat{c}_j y_j \hat{\rho}_0} S_j^-(\tau), \quad (43)$$

де  $\hat{\rho}_0 = \exp(-\beta \hat{H}_0) / \text{Sp} \exp(-\beta \hat{H}_0)$  — функція розподілу Гіббса не взаємодіючої системи спіна.

Простий розрахунок для функцій Гріна (43) дає [1]

$$K_0^{-+}(\tau_1 - \tau_2 | y_j) = e^{\frac{\tau_1 - \tau_2}{\beta} y_j} \begin{cases} n(y_j), & \tau_1 > \tau_2, \\ 1 + n(y_j), & \tau_1 < \tau_2, \end{cases} \quad (44)$$

де функція  $n(y_j) = (\exp y_j - 1)^{-1}$ .

При розрахунках зручно користуватись фур'є-компонентами  $K_0^{-+}(\omega | y_j)$  функцій Гріна (42):

$$K_0^{-+}(\omega | y_j) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau e^{-i\omega\tau} K_0^{-+}(\tau | y_j),$$

$$K_0^{-+}(\tau_1 - \tau_2 | y_j) = \sum_{\omega} K_0^{-+}(\omega | y_j) e^{i\omega(\tau_1 - \tau_2)},$$

де частоти  $-\omega = 2\pi n/\beta$ ,  $n \in \mathbb{Z}$ .

Для фур'є-компонент функції (44) отримується вираз

$$K_0^{-+}(\omega | y_j) = (y_j - i\beta\omega)^{-1}. \quad (45)$$

Декілька перших відмінних від нуля незвідних середніх від добуток операторів  $Q_x^\pm$  та  $Q_x^z$  можна записати одною формулою

$$\mathfrak{M}_{\alpha_1 \dots \alpha_m}(x_1, \dots, x_m) = \left(\frac{\beta}{N}\right)^{\frac{m}{2}} \sum_{j=1}^N \hat{c}_j \Lambda_{\alpha_1 \dots \alpha_m}(\omega_1, \dots, \omega_m | \hat{c}^N) \times \\ \times e^{-i(k_1 + \dots + k_m) R_j}. \quad (46)$$

Тут

$$\Lambda_z(\omega | \hat{c}^N) = (M_1(y_j) - m) \delta_{\omega, 0}; \quad (47a)$$

$$\Lambda_{z\dots z}(\omega_1, \dots, \omega_m | \hat{c}^N) = M_m(y_j) \prod_{i=1}^m \delta_{\omega_i, 0}, \quad m \geq 2; \quad (47b)$$

$$\Lambda_{-+}(\omega_1, \omega_2 | \hat{c}^N) = 2M_1(y_j) K_0^{-+}(\omega_2 | y_j) \delta_{\omega_1 + \omega_2, 0}; \quad (48)$$

$$\Lambda_{-+z}(\omega_1, \omega_2, \omega_3 | \hat{c}^N) = 2 \{ M_2(y_j) K_0^{-+}(\omega_2 | y_j) \delta_{\omega_1 + \omega_2, 0} \delta_{\omega_3, 0} - \\ - M_1(y_j) K_0^{-+}(-\omega_1 | y_j) K_0^{-+}(\omega_2 | y_j) \delta_{\omega_1 + \omega_2 + \omega_3, 0} \}; \quad (49)$$

$$\Lambda_{-+zz}(\omega_1, \dots, \omega_3 | \hat{c}^N) = 2 \{ M_3(y_j) K_0^{-+}(\omega_2 | y_j) \delta_{\omega_1 + \omega_2, 0} \delta_{\omega_3, 0} \delta_{\omega_4, 0} - \\ - M_2(y_j) K_0^{-+}(-\omega_1 | y_j) K_0^{-+}(\omega_2 | y_j) \delta_{\omega_1 + \omega_2 + \omega_3, 0} \delta_{\omega_4, 0} \}$$

$$+ \delta_{\omega_1+\omega_2+\omega_3,0} \delta_{\omega_3,0} + M_1(y_j) K_0^- + (-\omega_1 | y_j) K_0^- + (\omega_2 | y_j) \times \\ \times [K_0^- + (-\omega_1 - \omega_4 | y_j) + K_0^- + (-\omega_1 - \omega_3 | y_j)] \delta_{\omega_1+\dots+\omega_4,0}; \quad (50)$$

$$\Lambda_{-+-+}(\omega_1, \dots, \omega_4 | \hat{c}^N) = 4 \{ M_2(y_j) K_0^- + (\omega_2 | y_j) K_0^- + (\omega_4 | y_j) \times \\ \times [\delta_{\omega_1+\omega_2,0} \delta_{\omega_3+\omega_4,0} + \delta_{\omega_1+\omega_4,0} \delta_{\omega_2+\omega_3,0}] - M_1(y_j) K_0^- + (-\omega_1 | y_j) \times \\ \times K_0^- + (-\omega_3 | y_j) [K_0^- + (\omega_4 | y_j) + K_0^- + (\omega_2 | y_j)] \delta_{\omega_1+\dots+\omega_4,0} \}. \quad (51)$$

При одержанні написаних вище формул необхідно скористатись тотожністю

$$\sum_{j=1}^N \hat{c}_j f(x_j \hat{c}_j) = \sum_{j=1}^N \hat{c}_j f(x_j),$$

де  $f(t)$  — довільна аналітична функція. Ця тотожність випливає з властивості  $\hat{c}_j \equiv \hat{c}_j^n$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$ , проєкційного оператора  $\hat{c}_j$ .

**Вільна енергія сплаву заміщення. Схема конфігураційного зосередження.** Вільна енергія деякої фіксованої конфігурації  $[\hat{c}^N]$  магнітних атомів розраховується за формулою

$$F[\hat{c}^N] \stackrel{\text{def}}{=} -\beta^{-1} \ln Z[\hat{c}^N] = F_0[\hat{c}^N] - \beta^{-1} \ln \int (d\varphi) \exp \left\{ \sum_{m \geq 1} \Phi_m[\varphi; \hat{c}^N] \right\}. \quad (52)$$

Тут функціональні мономи згідно з формулами (26) — (28) задаються виразами

$$\Phi_1[\varphi; \hat{c}^N] = (\beta N)^{1/2} \sum_x V \overline{J_k} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \hat{c}_j e^{-ikR_j} \Lambda_z(\omega | \hat{c}^N) \varphi_x^z, \quad (53)$$

$$\Phi_2[\varphi; \hat{c}^N] = -\frac{1}{2} \sum_x \varphi_x \varphi_{-x} + \frac{\beta}{2} \sum_{x_1} \sum_{x_2} V \overline{J_{k_1} J_{k_2}} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \hat{c}_j e^{-i(k_1+k_2)R_j} \times \\ \times \left\{ \Lambda_{zz}(\omega_1, \omega_2 | \hat{c}^N) \varphi_{x_1}^z \varphi_{x_2}^z + \frac{1}{2} \Lambda_{-+}(\omega_1, \omega_2 | \hat{c}^N) \varphi_{x_1}^- \varphi_{x_2}^+ \right\}, \quad (54)$$

$$\Phi_3[\varphi; \hat{c}^N] = \frac{1}{3!} \left( \frac{\beta^3}{N} \right)^{1/2} \sum_{x_1} \sum_{x_2} \sum_{x_3} V \overline{J_{k_1} J_{k_2} J_{k_3}} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \hat{c}_j e^{-i(k_1+k_2+k_3)R_j} \times \\ \times \left\{ \Lambda_{zzz}(\omega_1, \omega_2, \omega_3 | \hat{c}^N) \varphi_{x_1}^z \varphi_{x_2}^z \varphi_{x_3}^z + \frac{6}{4} \Lambda_{-+z}(\omega_1, \omega_2, \omega_3 | \hat{c}^N) \varphi_{x_1}^- \varphi_{x_2}^+ \varphi_{x_3}^z \right\}, \quad (55)$$

$$\Phi_4[\varphi; \hat{c}^N] = \frac{\beta^2}{4! N} \sum_{x_1} \dots \sum_{x_4} V \overline{J_{k_1} \dots J_{k_4}} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \hat{c}_j e^{-i(k_1+\dots+k_4)R_j} \times \\ \times \left\{ \Lambda_{zzzz}(\omega_1, \dots, \omega_4) \varphi_{x_1}^z \dots \varphi_{x_4}^z + \frac{12}{4} \Lambda_{-+zz}(\omega_1, \dots, \omega_4) \varphi_{x_1}^- \varphi_{x_2}^+ \varphi_{x_3}^z \varphi_{x_4}^z + \right. \\ \left. + \frac{6}{16} \Lambda_{-+-+}(\omega_1, \dots, \omega_4 | \hat{c}^N) \varphi_{x_1}^- \varphi_{x_2}^+ \varphi_{x_3}^- \varphi_{x_4}^+ \right\} \quad (56)$$

і т. ін. При написанні виразів для  $\Phi_m[\varphi; \hat{c}^N]$  врахована симетричність коефіцієнтів  $\Lambda_{\alpha_1 \dots \alpha_m}(\omega_1, \dots, \omega_m | \hat{c}^N)$ . Коли розглянути ідеальну кристалічну ґратку, складену з магнітних атомів ( $\hat{c}_j \equiv 1$ ,  $j = 1, \dots, N$ ), то співвідношення (53) — (56) зводяться до відомих виразів [5].

Тепер перейдемо до розрахунку конфігураційно засередненої вільної енергії сплаву. Це, у свою чергу, вимагає застосування певної схеми конфігураційного засереднення. Розгляньмо детальніше залежність від атомної конфігурації функціональних мононів  $\Phi_m[\varphi; \hat{c}^N]$ .

Тут від конфігурації залежать коефіцієнти  $\Lambda_{\alpha_1 \dots \alpha_m}(\omega_1, \dots, \omega_m | \hat{c}^N)$ . Ця залежність, як видно з формул (47) — (51), виражається лише через флуктуаційні поля  $y_j$ . Зручно виділити у цьому полі однорідну (незалеж-

ну від номера вузла ґратки) складову. З цією метою вираз (9) запишемо так:

$$m_k = mc\sqrt{N} \delta_{k,0} + m\hat{c}_k.$$

де

$$\hat{c}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{1 \leq i \leq N} \delta c_i \exp(-ikR_i) \quad (57)$$

є фур'є-компоненти концентрації флуктуації. Тут  $c = \langle \hat{c}_j \rangle_c$  концентрація магнітних атомів;  $\delta \hat{c}_j = \hat{c}_j - c$  — флуктуація атомної конфігурації на  $j$ -му вузлі ґратки відносно середнього значення.

Тепер поле  $y_j$  записується у вигляді

$$y_j = y + \Delta y_j, \quad (58)$$

де однорідне поле

$$y = \beta \mu h + \beta m c J_0, \quad (59)$$

а флуктуююче на вузлі поле

$$\begin{aligned} \Delta y_j &= \frac{\beta m}{2lN} \sum_k J_k [\delta \hat{c}_k \exp(ikR_j) + \delta \hat{c}_{-k} \exp(-ikR_j)] \equiv \\ &\equiv \beta m \sum_{1 \leq i \leq N} \delta c_i J(|R_j - R_i|). \end{aligned} \quad (60)$$

З виразів (53) — (56) легко зауважити, що конфігураційна залежність функціоналів  $\Phi_m[\varphi; \hat{c}^N]$  виражається лише через фактори

$$\begin{aligned} \mathfrak{R}_{\alpha_1 \dots \alpha_m}(x_1, \dots, x_m | \hat{c}^N) &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \hat{c}_j \Lambda_{\alpha_1 \dots \alpha_m}(\omega_1, \dots, \omega_m | \hat{c}^N) \times \\ &\times e^{-i(k_1 + \dots + k_m)R_j}, \end{aligned} \quad (61)$$

які перепишемо у такому вигляді:

$$\begin{aligned} \mathfrak{R}_{\alpha_1 \dots \alpha_m}(x_1, \dots, x_m | \hat{c}^N) &= c \Lambda_{\alpha_1 \dots \alpha_m}^0(\omega_1, \dots, \omega_m) \delta_{k_1 + \dots + k_m, 0} + \\ &+ \frac{1}{\sqrt{N}} [\delta \hat{c}_{k_1 + \dots + k_m} + \hat{B}_{k_1 + \dots + k_m}] \Lambda_{\alpha_1 \dots \alpha_m}^0(\omega_1, \dots, \omega_m). \end{aligned} \quad (62)$$

Тут коефіцієнти  $\Lambda_{\alpha_1 \dots \alpha_m}^0(\omega_1, \dots, \omega_m)$  задаються формулами (47) — (51), де необхідно всюди замінити випадкове на вузлі поле  $y_j$  його однорідною складовою, яка означена співвідношенням (59). Оператори запишемо так:

$$\hat{B}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{1 \leq j \leq N} \hat{c}_j (e^{\Delta y_j \frac{d}{dy}} - 1) \exp(-ikR_j). \quad (63)$$

Представимо функціонали  $\Phi_n[\varphi; \hat{c}^N]$  як суму двох виразів

$$\Phi_n[\varphi; \hat{c}^N] = \Phi_n^0[\varphi] + \Delta \Phi_n[\varphi; \hat{c}^N], \quad (64)$$

де  $\Phi_n^0[\varphi]$  не залежить від атомної конфігурації і отримується з формул (53) — (56), якщо врахувати лише перший доданок правої сторони виразу (62). Функціонал  $\Delta \Phi_n[\varphi; \hat{c}^N]$  є конфігураційно залежним і одержується від врахування другого доданку правої сторони рівності (62).

Детально розгляньмо функціонал  $\Phi_1[\varphi; \hat{c}^N]$ . Виділимо в (53) окремо доданок з  $x \equiv (k, \omega) = 0$ . Беручи до уваги означення локальної вузлової намагніченості (34), можна показати, що цей доданок у границі  $N \rightarrow \infty$  зникає, оскільки має місце співвідношення

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \hat{c}_j M_1(y_j) - cm \right) = 0,$$

справедливе в сенсі асимптотичного значення. Отже, у функціоналі  $\Phi_1[\varphi; \hat{c}^N]$  в термодинамічній границі залишаються лише доданки з  $x \neq 0$ . Це, у свою чергу, еквівалентне тому, що функціонал  $\Phi_1^0[\varphi]$  в термодинамічній границі зникає, а структурна флуктуаційна частина функціоналу  $\Delta\Phi_1[\varphi; \hat{c}^N]$  має вигляд

$$\Delta\Phi_1[\varphi; \hat{c}^N] = \sum_{k \neq 0} \sum_{\omega} \sqrt{\beta J_k} \Delta_k \delta_{\omega,0} \varphi_{k\omega}^z, \quad (65)$$

$$\Delta_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N \hat{c}_j e^{-ikR_j} (M_1(y_j) - m).$$

Величина  $\delta M_1(y_j) = M_1(y_j) - m$  має зміст флуктуації намагніченості  $j$ -го вузла, зумовленої випадковим розподілом атомів по вузлах ґратки.

Явний вигляд функціоналу  $\Phi_2^0[\varphi]$  є таким:

$$\begin{aligned} \Phi_2^0[\varphi] = & -\frac{1}{2} \sum_x (1 - \beta c J_k M_2(y) \delta_{\omega,0}) \varphi_x^z \varphi_{-x}^z - \\ & - \frac{1}{4} \sum_x (1 - \beta c J_k M_1(y) K_0^- + (-\omega | y)) (\varphi_x^- \varphi_{-x}^+ + \varphi_x^+ \varphi_{-x}^-), \end{aligned} \quad (66a)$$

а структурна флуктуаційна поправка до цього функціоналу

$$\begin{aligned} \Delta\Phi_2[\varphi; \hat{c}^N] = & \frac{\beta}{2 + N} \sum_{x_1} \sum_{x_2} \sqrt{J_{k_1} J_{k_2}} [\delta \hat{c}_{k_1+k_2} + \hat{B}_{k_1+k_2}] \times \\ & \times \left\{ \Lambda_{zz}^0(\omega_1, \omega_2) \varphi_{x_1}^z \varphi_{x_2}^z + \frac{1}{2} \Lambda_{-}^0(\omega_1, \omega_2) \varphi_{x_1}^- \varphi_{x_2}^+ \right\}. \end{aligned} \quad (66b)$$

Подібну аналітичну структуру матимуть і вищі функціональні мономи.

Розрахунок функціонального інтеграла в (52) можна здійснити шляхом розкладу за гауссовими моментами, використовуючи (66a) у ролі функції розподілу польових змінних. Тоді конфігураційно засереднену вільну енергію сплаву можна записати у вигляді розкладу

$$\begin{aligned} \beta F = & \frac{1}{2} \beta c^2 m^2 N J_0 + \frac{\beta}{2} \sum_k J_k \langle \delta \hat{c}_k \delta \hat{c}_{-k} \rangle_c - cN \langle e^{\Delta y_j \frac{d}{dy}} \rangle_c \ln \frac{\text{sh} \left( y \left( S + \frac{1}{2} \right) \right)}{\text{sh} \frac{y}{2}} - \\ & - N \langle \delta \hat{c}_j (e^{\Delta y_j \frac{d}{dy}} - 1) \rangle_c \ln \frac{\text{sh} \left( y \left( S + \frac{1}{2} \right) \right)}{\text{sh} \frac{y}{2}} - \ln \int (d\varphi) \exp(\Phi_2^0[\varphi]) - \\ & - \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \left\langle \left\langle \left( \Delta\Phi_1[\varphi; \hat{c}^N] + \Delta\Phi_2[\varphi; \hat{c}^N] + \sum_{s \geq 3} \Phi_s[\varphi; \hat{c}^N] \right)^n \right\rangle_F \right\rangle_c. \end{aligned} \quad (67)$$

Функціональне засереднення в (67) задається означенням

$$\langle \dots \rangle_F = \frac{\int (d\varphi) (\dots) e^{\Phi_2^0[\varphi]}}{\int (d\varphi) e^{\Phi_2^0[\varphi]}}. \quad (68)$$

Легко зауважити, що виконання конфігураційного засереднення у (67) зводиться до розрахунку середніх лише типу

$$\left\langle \prod_{i=1}^m \delta \hat{c}_{k_i} \prod_{i=1}^s \hat{B}_{p_i} \right\rangle_c, \quad m + s \geq 1. \quad (69)$$

Спочатку розгляньмо кореляційну функцію

$$C_m(k_1, \dots, k_m) = \langle \delta \hat{c}_{k_1} \dots \delta \hat{c}_{k_m} \rangle_c^{\text{irr}}, \quad (70)$$

розрахунок якої при відсутності просторових конфігураційних кореляцій між магнітними атомами виконується досить просто. Кореляційні функції (70) у цьому випадку можна виразити через кумулянти  $P_m(c) = \langle \hat{c}_{j_1} \dots \hat{c}_{j_m} \rangle_c^{\text{ит}}$ , твірний функціонал яких [9]

$$g(t; c) = \sum_{m \geq 1} \frac{1}{m!} P_m(c) t^m = \ln(1 - c + ce^t). \quad (71)$$

Деякі перші кумулянтів є такими:

$$\begin{aligned} P_1(c) &= c, \\ P_2(c) &= c(1 - c), \\ P_3(c) &= c(1 - c)(1 - 2c), \\ P_4(c) &= c(1 - c)(1 - 6c + 6c^2) \text{ і т. ін.} \end{aligned} \quad (72)$$

Структурні кореляційні функції через кумулянти  $P_m(c)$  записуються виразами

$$\begin{aligned} C_1(k) &= 0, \\ C_2(k_1, k_2) &= P_2(c) \delta_{k_1+k_2, 0}, \\ C_3(k_1, k_2, k_3) &= \frac{1}{V^N} P_3(c) \delta_{k_1+k_2+k_3, 0}, \\ C_4(k_1, \dots, k_4) &= \frac{1}{N} P_4(c) \delta_{k_1+\dots+k_4, 0} - P_2^2(c) [\delta_{k_1+k_2, 0} \delta_{k_3+k_4, 0} + \\ &+ \delta_{k_1+k_3, 0} \delta_{k_2+k_4, 0} + \delta_{k_1+k_4, 0} \delta_{k_2+k_3, 0}]. \end{aligned} \quad (73)$$

Подібну аналітичну структуру мають вищі кореляційні структурні функції.

Тепер розглянемо метод розрахунку кореляційних функцій, побудованих на операторах  $\hat{B}_k$ . Розрахунок таких функцій зводиться до обчислення конфігураційного середнього від добутків операторів  $\exp \left[ \Delta y_j \frac{d}{dy} \right]$  та  $\hat{\delta}_{c_i}$ . Найпростіше середнє такого типу — це

$$\langle e^{\Delta y_j \frac{d}{dy}} \rangle_c \equiv \left\langle \exp \left\{ \beta m \sum_{1 \leq l \leq N} \hat{\delta}_{c_l} J(|R_j - R_l|) \frac{d}{dy} \right\} \right\rangle_c.$$

Здійснивши розклад за семіінваріантами, отримаємо

$$\langle e^{\Delta y_j \frac{d}{dy}} \rangle_c = \exp \left( \sum_{s \geq 2} \frac{(\beta m J_0)^s}{s!} I_s P_s(c) \left( \frac{d}{dy} \right)^s \right). \quad (74)$$

Тут коефіцієнти, які характеризують просторовий характер обмінної взаємодії,

$$I_s = \frac{\sum_{1 \leq l \leq N} (J(|R_j - R_l|))^s}{\left[ \sum_{1 \leq l \leq N} J(|R_j - R_l|) \right]^s}, \quad (75)$$

де сумування проводиться за всіма вузлами ґратки, які оточують  $j$ -й вузол. Легко зауважити, що для спадної з відстанню обмінної взаємодії коефіцієнти  $I_s < 1$  для всіх  $s \geq 2$ . Зокрема, для взаємодії тільки найближчих сусідів коефіцієнти  $I_s = z^{1-s}$ , де  $z$  — число найближчих сусідів  $j$ -го атома.

Інший тип кореляційного середнього, який зустрічається у виразі (67), — це оператор  $\langle \hat{\delta}_{c_j} \left( \exp \Delta y_j \frac{d}{dy} - 1 \right) \rangle_c$ . Легко показати, що такий

оператор можна звести до нескінченного ряду

$$\left\langle \delta \hat{c}_j \left( \exp \Delta y_i \frac{d}{dy} - 1 \right) \right\rangle_c = \sum_{s \geq 1} \frac{(\beta m)^s}{s!} P_{s+1}(c) (J(0))^s \frac{d^s}{dy^s} = 0. \quad (76)$$

Остання рівність випливає з наведеної вище умови  $J(|\mathbf{R}|=0) = 0$ .

Інші типи кореляційних операторних функцій розраховуються за аналогією до операторних функцій (74) та (76) і зображуються у вигляді нескінченних поліноміальних диференціальних операторів. Практично виникає потреба лише у розрахунках декількох найнижчих функцій. Це зумовлено тим, що зображення вільної енергії сплаву у формі (67) є певною версією розкладу в ряд теорії збурення. У випадку кристалів це є розклад за параметром  $r_0^{-3}$ , де  $r_0$  — ефективний радіус обмінної взаємодії. Це еквівалентно тому, що пропорційна параметру  $r_0^{-3n}$   $n$ -а поправка до вільної енергії записується аналітичним виразом, який містить  $n$  сумувань за імпульсами [10]. Формально такий же зміст розкладу вільної енергії буде і у випадку сплавів заміщення.

Поправки до вільної енергії сплаву від вищих флуктуаційних магнітних та структурних ефектів, зображені останнім доданком формули (67), можуть бути розвинуті у ряд

$$-\beta \Delta F = \frac{1}{2} \langle \langle (\Delta \Phi_1[\Phi; \hat{c}^N])^2 \rangle_F \rangle_c + \frac{1}{2} \langle \langle (\Delta \Phi_2[\Phi; \hat{c}^N])^2 \rangle_F \rangle_c + \\ + \langle \Phi_4^0[\Phi] \rangle_F + \frac{1}{2} \langle \langle \Phi_3^0[\Phi] \rangle^2 \rangle_F + \dots \quad (77)$$

Перший виписаний у співвідношенні (77) доданок описує найпростіший внесок структурних флуктуацій у вільну енергію. За порядком величини цей внесок співмірний з вільною енергією, яка відповідає наближенню хаотичних фаз. Інші доданки характеризують вищі поправки до вільної енергії і можуть бути згруповані за зростаючим числом сум за хвильовими векторами.

Обмежимось тут розрахунком вільної енергії у напростішому наближенні, якому відповідає припущення, що функціонал  $\Delta \Phi_2[\Phi; \hat{c}^N] = 0$ , а також  $\Phi_n[\Phi; \hat{c}^N] = 0$ ,  $n \geq 3$ . Тоді внесок у вільну енергію сплаву від структурних флуктуацій, які описуються функціоналом (65), зображується у вигляді

$$-\beta \Delta F = \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} \frac{\beta J_k \langle \Delta_k \Delta_{-k} \rangle_c}{1 - \beta c J_k M_2(y)}. \quad (78)$$

Корелятор  $\langle \Delta_k \Delta_{-k} \rangle_c$  після досить громіздких перетворень, використовуючи зображення (62), можна записати як нескінченний ряд. З точністю до наближення, яке зараз розглядається,

$$\langle \Delta_k \Delta_{-k} \rangle_c = P_2(c) (M_1(y) - m)^2 + 2\beta m c P_2(c) M_2(y) J_k (M_1(y) - m). \quad (79)$$

Остаточно вільна енергія сплаву в наближенні хаотичних фаз після підстановки виразу (78) у (67) і деяких перетворень зводиться до вигляду

$$\beta F = \frac{1}{2} \beta c^2 m^2 N J_0 - c N \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} \ln \frac{\text{sh} \left( \tilde{y}(x) \left( S + \frac{1}{2} \right) \right)}{\text{sh} \frac{\tilde{y}(x)}{2}} + \\ + \sum_k \ln \frac{\text{sh} \left( \frac{y - \beta c J_k M_1(y)}{2} \right)}{\text{sh} \frac{y(x)}{2}} - \frac{1}{2} \sum_k \ln [1 - \beta c J_k M_2(y)] - \\ - \frac{1}{2} P_2(c) (M_1^2(y) - m^2) \sum_{k \neq 0} \frac{\beta J_k}{1 - \beta c J_k M_2(y)}. \quad (80)$$

Перенормоване ефективне поле в другому доданку виразу (80)

$$\tilde{y}(x) = \beta\mu h + \beta mc J_0 + \beta m J_0 \sqrt{2c(1-c)I_2} x. \quad (81)$$

Для одержання другого доданку в правій стороні співвідношення (80) необхідно врахувати лише квадратичний операторний доданок у показнику експоненти (74) і лінеаризувати цей оператор за допомогою інтегральної тотожності Стратоновича — Хаббарда.

Рівняння для розрахунку намагніченості та критичної температури фазового переходу парамагнетик — феромагнетик знаходиться за умови мінімуму вільної енергії за параметром  $m$ . Після нескладних перетворень знаходимо рівняння

$$\begin{aligned} mc = & \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{V\pi} e^{-x^2} M_1(\tilde{y}(x)) [c + \sqrt{2c(1-c)I_2} x] - \\ & - \frac{1}{2N} \sum_k \left\{ (1 - \beta c J_k M_2(y)) \operatorname{cth} \frac{y - \beta c J_k M_1(y)}{2} - \operatorname{cth} \frac{y}{2} \right\} + \\ & + (M_3(y) + 2P_2(c) [M_1(y) M_2(y) - m]) \frac{1}{2N} \sum_{k \neq 0} \frac{\beta J_k}{1 - \beta c J_k M_2(y)} + \\ & + M_3(y) P_2(c) (M_1^2(y) - m^2) \frac{1}{2N} \sum_{k \neq 0} \frac{c\beta^2 J_k^2}{1 - \beta c J_k M_2(y)}. \end{aligned} \quad (82)$$

Наближення однорідного самоузгодженого поля отримується з останнього рівняння, коли у виразі (81) для ефективного поля  $y(x)$  нехтувати останнім доданком, а також відкинути у (82) доданки, що містять сумування за імпульсами. Коли в рівнянні (82) покласти концентрацію  $c = 1$ , то дістається відоме рівняння для намагніченості ідеального феромагнітного кристала. З рівняння для намагніченості легко знаходиться рівняння на критичну температуру переходу феромагнетик — парамагнетик. Для цього необхідно покласти, що зовнішнє магнітне поле  $h = 0$ , і розкласти праву сторону (82) за ступенями параметра  $m$  в околі температури фазового переходу, де  $0 \leq m \leq 1$ .

**Висновки.** Дана праця має здебільшого методичний характер і присвячена розробці методу функціонального інтегрування і його використанню для дослідження термодинамічних властивостей феромагнітних сплавів заміщення. Цій задачі, як зрештою і деяким іншим задачам теорії неупорядкованих систем, притаманний ряд принципових труднощів. Серед них — проблема послідовного врахування структурних кореляційних ефектів вищих порядків. Як правило, внесок структурних флуктуацій у термодинамічні функції і спостережувані фізичні величини неможливо прокласифікувати за допомогою якого-небудь малого параметра. У такій ситуації розрахунки мають екстраполяційний, якісний характер. Майже єдиним критерієм їх достовірності є фізично правильна поведінка розрахованих величин і якісне співпадання з експериментально спостережуваними даними.

У задачах теорії магнетизму зручно спочатку виділити самоузгоджене поле і знаходити його за умови мінімізації термодинамічних потенціалів. Коли розглядаються кристалічні моделі, то введення самоузгодженого поля, пов'язаного з макроскопічним параметром порядку, є однозначною процедурою. У випадку неупорядкованих систем (аморфних, рідких магнетиків чи кристалічних сплавів заміщення) спосіб виділення самоузгоджених полів є зовсім не однозначним. Це видно з формул (6) основного тексту. Причому тут знову ж таки не маємо жодного критерію оцінки цих способів самоузгодження.

При дослідженні аморфних і рідких магнетиків [7, 8] нами використувався найпростіший спосіб виділення параметра порядку, який у термінах моделі сплаву заміщення еквівалентний мінімізації вільної енергії

за параметром  $M = \left\langle \left\langle \sum_{1 \leq j \leq N} \hat{c}_j S_j^z \right\rangle \right\rangle_c$  — повній конфігураційно засередненій намагніченості. Запропонована у цій праці схема виділення самоузгоджених полів дає можливість більш послідовно врахувати вплив структурних кореляцій на термодинамічні та динамічні властивості магнетиків.

Автор висловлює вдячність проф. І. О. Вакарчуку за корисні обговорення результатів даної праці.

1. Изюмов Ю. А., Кассан-оглы Ф. А., Скрыбин Ю. Н. Полевые методы в теории ферромагнетизма. — М.: Наука, 1974. — 22 с.
2. Барьяхтар В. Г., Криворучко В. Н., Яблонский Д. А. Функции Грина в теории магнетизма. — Киев: Наук. думка, 1984. — 336 с.
3. Mano H. A new cluster approximation to the dilute Ising and Heisenberg ferromagnets // Progr. of Theor. Phys. — 1977. — 57, N 6. — P. 1848—1861.
4. Hoepfener B., Sobotta G., Wagner D. Cluster expansion for dilute Heisenberg ferromagnets // J. Phys. C: Solid State Phys. — 1979. — 12, N 21. — P. 4553—4571.
5. Vakarchuk I. A., Rudavsky Yu. K. Free energy representation of quantum Heisenberg model as the functional integral. — Kiev, 1979. — 61 p. — (Prepr. // Acad. Sci. Ukr. SSR. Inst. Theor. Phys.; ITP-79-62E).
6. Micnas R. Application of the functional integral method to the classical and quantum spin models // Physica. — 1979. — 98A, N 2. — P. 403—441.
7. Вакарчук І. А., Понедилок Г. В., Рудауский Ю. К. Теория жидких магнетиков // ТМФ. — 1984. — 58, № 3. — С. 445—460.
8. Vakarchuk I. A., Rudavskii Yu. K., Ponedilok G. V. Free energy of the amorphous ferromagnets with Heisenberg exchange interaction and liquid-like disorder // Phys. status solidi (b). — 1985. — 128, N 2. — P. 231—242.
9. Yonezawa F., Morigaki K. Coherent potential approximation // Progr. Theor. Phys. (Suppl.). — 1973. — 58. — P. 1—76.
10. Вакс В. Г., Ларкин А. И., Пикин С. А. Термодинамика идеального ферромагнетика // ЖЭТФ. — 1967. — 53, № 1. — С. 281—296.

Інститут фізики конденсованих систем  
АН України, Львів

Одержано 9.07.92

УДК 531/533; 530.12:531.18

А. А. ДУВІРЯК, В. І. ТРЕТЯК

## КЛАСИЧНА РЕЛЯТИВІСТСЬКА ДИНАМІКА ДВОХ ТІЛ НА СВІТЛОВОМУ КОНУСІ

Розглядається релятивістська механіка двох взаємодіючих частинок при означенні одночасності на ізотропних конусах майбутнього (або минулого). Побудовано різні формулювання такої механіки в рамках як 3-вимірних, так і явно коваріантних лагранжових та гамільтонових формалізмів. Шляхом встановлення її зв'язку з формалізмом асиметричних інтегралів дії типу Фоккера знайдено клас моделей, що допускають теоретико-польову інтерпретацію взаємодії.

Релятивістська механіка системи взаємодіючих частинок може формулюватися у рамках як 4-вимірних (явно коваріантних) підходів, так і 3-вимірних із виділеним параметром еволюції  $t$  [1]. У межах кожного із цих формулювань існує велика різноманітність теорій з різними вихідними положеннями. Взаємозв'язок між різними формалізмами релятивістської динаміки значно складніший, ніж у нерелятивістському випадку. Його часто буває зручно встановити на рівні моделей, що допускають більш-менш явну конструкцію з обмеженим числом довільних функцій. Такі моделі корисні і для більш глибокого розуміння структури та можливостей різних формалізмів.

В основі кожного 3-вимірного опису релятивістської системи взаємодіючих частинок лежить певне означення одночасності, що виділяє спільний для всіх частинок системи параметр еволюції [2]. За термінологією Дірака [3], такий опис відповідає певній формі релятивістської динаміки. Найбільш поширене ейнштейнове означення одночасності  $x_a^0(t) = t$ , де  $a = \overline{1, N}$ ,  $N$  — число частинок системи, відповідає миттєвій формі динаміки.

© А. А. Дувір'як, В. І. Трет'як, 1993