Національна академія наук України

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP–97–21U

Р.Р.Левицький, С.І.Сороков, О.Р.Баран, І.М.Пиндзин

ТЕРМОДИНАМІКА XXZ–МОДЕЛІ В НАБЛИЖЕННІ ДВОЧАСТИНКОВОГО КЛАСТЕРА

ЛЬВІВ

УДК: 548:573.611.4
PACS: 75.10.Jm

Термодинаміка XXZ–моделі в наближенні двочастинкового кластера

Р.Р.Левицький, С.І.Сороков, О.Р.Баран, І.М.Пиндзин

Анотація. В наближенні двочастинкового кластера з двома варіаційними параметрами φ^z, φ^x досліджена XXZ–модель. Далекосяжна взаємодія J враховується в наближенні молекулярного поля.

При різних значеннях параметра анізотропії $\frac{\alpha}{\gamma}$ ($K^{zz} = \gamma K$, $K^{xx} = K^{yy} = \alpha K$, $J^{zz} = \gamma J$, $J^{xx} = J^{yy} = \alpha J$, K – короткояжна взаємодія) та далекосяжної взаємодії J побудовані фазові діаграми і отримані температурні залежності $\langle S^z \rangle$, $\langle S^x \rangle$, ентропії, теплоємності та статичної сприйнятливості. Показано, що при $\frac{\alpha}{\gamma} \geq 1$ наближення двочастинкового кластера дає некоректні результати в низькотемпературній області.

Thermodynamics of XXZ–model within two-particle cluster approximation

R.R.Levitskii, S.I.Sorokov, O.R.Baran, I.M.Pyndsyn

Abstract. The XXZ–model was investigated within two–particle cluster approximation with two variational parameters φ^z, φ^x. The long–range interaction J was taken into account in the framework of mean–field approximation.

At various values of the anisotropy parameter $\frac{\alpha}{\gamma}$ ($K^{zz} = \gamma K$, $K^{xx} = K^{yy} = \alpha K$, $J^{zz} = \gamma J$, $J^{xx} = J^{yy} = \alpha J$, K – short–range interaction) and long–range interaction J, phase diagrams were constructed and temperature dependences of $\langle S^z \rangle$, $\langle S^x \rangle$, entropy, specific heat, and static susceptibility were calculated. It was shown that at $\frac{\alpha}{\gamma} \geq 1$ two–particle cluster approximation gave qualitatively incorrect results in a low–temperature region.

Подається в Журнал Фізичних Досліджень
Submitted to Journal of Physical Studies

1. Вступ

В сучасній статистичній фізиці значна увага приділяється дослідженню сегнетоактивних і магнітних матеріалів. Так, для псевдоспінових систем з далекосяжними взаємодіями, а також з короткосяжними кореляціями при наявності великого числа найближчих сусідів широко використовувався розклад по оберненому радіусу взаємодії [1–4]. У випадку псевдоспінових систем з короткосяжними взаємодіями (переважно з врахуванням лише найближчих сусідів) достатньо ефективним (особливо для низькорозмірних систем) є метод кластерних розвинень [5–16]. Проте є цілий ряд речовин, для яких суттєвими є єфективні далекосяжні і короткосяжні взаємодії між псевдоспінами. Серед них слід виділити перш за все сегнетоактивні матеріали типу порядок–безлад, в тому числі сегнетоактивні сполуки з водневими зв'язками, а також квазіодновимірні і квазідвовимірні магнітні і сегнетоактивні сполуки. Ми тут не будемо зупинятися на виясненні фізичної природи обох типів взаємодій. В кожній конкретній задачі це питання потребує спеціального розгляду. Для адекватного опису таких об'єктів необхідний теоретичний підхід, який би позволив застосовувати різноманітну техніку при врахуванні короткосяжних і далекосяжних взаємодій. Варто зауважити, що згадана вижче математична проблема є типовою для багаточастинкових систем. Вона успішно вирішувалася при побудові мікроскопічної теорії металів [17–20] та класичних систем [21,22]. В цих роботах далекосяжні взаємодії описуються в фазовому просторі колективних змінних, а короткосяжні – в фазовому просторі індивідуальних координат. Короткосяжні взаємодії, таким чином, відіграють ніби базисну роль по відношенню до далекосяжних взаємодій. Тому переважно [21,22] систему з короткосяжними взаємодіями називають базисною системою, або системою відліку.

Застосовуючи ідею виділення базисної системи [21,22], в роботах [23,24] для кристалічних структур була побудована послідовна теорія псевдоспінових систем з короткосяжними та далекосяжними взаємодіями. Слід зауважити, що отримані в цих роботах загальні вирази для термодинамічних та динамічних характеристик систем, що розглядалися, містять термодинамічні та кореляційні функції базисної системи. Досить успішний опис базисної системи може бути досягнутим на основі методу кластерних розвинень [5–15]. Однак, нажаль, кластерний підхід розвинутий лише для розрахунку статичних властивостей псевдоспінових систем. В зв'язку з тим дуже важливою проблемою є узагальнення розвинутого в роботах [5–15] кластерного підходу для розрахунку динамічних характеристик базисної системи. В роботі [25] для моделі Ізінга ця проблема була вирішеною при обмеженні першим порядком клатерного розвинення по двочастинковому кластеру (те ж саме що наближення двочастинкового кластера (НДК)). Запропонована в [25] методика розрахунку кореляційних функцій була узагальненою для випадку квантових псевдоспінових систем із спіном $\frac{1}{2}$ (вирази для кореляційних функцій у явному вигляді отримані для моделі Гейзенберга) [26], та в роботах [27,28] для випадку Ізінгівських моделей з довільним значенням спіна (вирази для кореляційних функцій у явному вигляді отримані для моделі Блюма–Емері–Гріфітса).

Метою даної роботи є дослідження меж застосування наближення двочастинкового кластера з двома варіаційними параметрами по короткосяжних взаємодіях при врахуванні далекосяжних взаємодій в наближенні молекулярного поля (НМП) для XXZ–моделі із спіном $\frac{1}{2}$. Тут будуть розраховані лише термодинамічні характеристики моделі, а дослідження динамічних властивостей (в областях де НДК дає коректні результати для термодинамічних характеристик) буде проведене нами в наступній роботі.

2. Постановка задачі

Будемо розглядати псевдоспінові системи з $S^z = (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, які описуються гамільтоніаном

$$\mathcal{H}\Big(\{h^z, h^x\}\Big) = -\beta H = \sum_{i=1}^{N} \Big[h_i^z S_i^z + h_i^x S_i^x\Big] + \tfrac{1}{2}\sum_{i,\delta} K\Big[\gamma S_i^z S_{i+\delta}^z + \alpha\Big(S_i^x S_{i+\delta}^x + S_i^y S_{i+\delta}^y\Big)\Big] + \tfrac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}\Big[\gamma S_i^z S_j^z + \alpha\Big(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y\Big)\Big]. \tag{2.1}$$

Тут перший доданок описує взаємодію локалізованих атомних магнітних моментів з неоднорідними магнітними полями, другий доданок – обмінну взаємодію атомних магнітних моментів, а останній доданок описує далекосяжні взаємодії між магнітними моментами. S_i^a $(a{=}x,y,z)$ – дворядні матриці Паулі, γ, α – параметри анізотропії (випадок $\gamma = 0$ відповідає XY–моделі, $\alpha = 0$ – моделі Ізінга, а $\gamma = \alpha$ відповідає моделі Гейзенберга). Зауважимо, що множник $\beta = (k_B T)^{-1}$ будемо виділяти явно (його містять h_i^z, h_i^x, K, J_{ij}) лише в ряді кінцевих співвідношень.

Метою даної роботи є дослідження термодинамічних властивостей XXZ–моделі в першому порядку кластерного розвинення по короткосяжних взаємодіях та в наближенні молекулярного поля по далекосяжних взаємодіях.

В рамках НМП по далекосяжних взаємодіях гамільтоніан (2.1) представимо у вигляді

$$\mathcal{H}\Big(\{h^z, h^x\}\Big) = {}^k\mathcal{H}\Big(\{æ^z, æ^x\}\Big) \tag{2.2}$$
$$-\tfrac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}\Big[\gamma\langle S_i^z\rangle\langle S_j^z\rangle + \alpha\langle S_i^x\rangle\langle S_j^x\rangle\Big] .$$

Тут використане позначення для базисного гамільтоніану:

$${}^k\mathcal{H}\Big(\{æ^z, æ^x\}\Big) = \sum_{i=1}^{N}\Big[æ_i^z S_i^z + æ_i^x S_i^x\Big] \tag{2.3}$$
$$+\tfrac{1}{2}\sum_{i,\delta} K\Big[\gamma S_i^z S_{i+\delta}^z + \alpha\Big(S_i^x S_{i+\delta}^x + S_i^y S_{i+\delta}^y\Big)\Big] ;$$

$$æ_i^z = h_i^z + \gamma\sum_{j=1}^{N} J_{ij}\langle S_j^z\rangle \ ; \qquad æ_i^x = h_i^x + \alpha\sum_{j=1}^{N} J_{ij}\langle S_j^x\rangle \ . \tag{2.4}$$

Зауважимо, що $\langle S_i^y\rangle \equiv 0$, що легко бачити з симетрії гамільтоніану (2.1) відносно заміни $S_i^y \longrightarrow -S_i^y$.

Для $\mathcal{F}\Big(\{h^z, h^x\}\Big)$–функції (логарифма статистичної суми) в НМП по далекосяжних взаємодіях на основі (2.2) отримаємо:

$$\mathcal{F}\Big(\{h^z, h^x\}\Big) = \ln \mathrm{Sp}_{\{S\}} \mathrm{e}^{\mathcal{H}} \tag{2.5}$$
$$= {}^k\mathcal{F}\Big(\{æ^z, æ^x\}\Big) - \tfrac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}\Big[\gamma\langle S_i^z\rangle\langle S_j^z\rangle + \alpha\langle S_i^x\rangle\langle S_j^x\rangle\Big],$$

де ${}^k\mathcal{F}\Big(\{æ^z, æ^x\}\Big)$–функція – логарифм статистичної суми базисної системи (2.3).

Кореляційні функції (кумулянтні середні від псевдоспінових операторів по розподілу Гіббса з $\mathcal{H}$) моделі, що розглядається, шукатимемо таким чином:

$$\langle S_{i_1}^{a_1} \ldots S_{i_k}^{a_k}\rangle^c = \frac{\delta}{\delta h_{i_1}^{a_1}} \cdots \frac{\delta}{\delta h_{i_k}^{a_k}}\, \mathcal{F}\Big(\{h^z, h^x\}\Big) . \tag{2.6}$$

А КФ базисної моделі –

$${}^k\langle S_{i_1}^{a_1} \ldots S_{i_k}^{a_k}\rangle^c = \frac{\delta}{\delta æ_{i_1}^{a_1}} \cdots \frac{\delta}{\delta æ_{i_k}^{a_k}}\, \mathcal{F}\Big(\{æ^z, æ^x\}\Big) . \tag{2.7}$$

Виходячи з вигляду $\mathcal{F}$–функції (2.5), легко отримати співвідношення між унарними КФ базисної моделі (2.3) та повної моделі в НМП по далекосяжних взаємодіях (2.2):

$$\langle S_i^a\rangle = \frac{\delta}{\delta h_i^a}\mathcal{F}\Big(\{h^z, h^x\}\Big) \tag{2.8}$$
$$= \frac{\delta}{\delta æ_i^a}\, {}^k\mathcal{F}\Big(\{æ^z, æ^x\}\Big) = {}^k\langle S_i^a\rangle \ , \quad {\scriptstyle (a=z,x)} \ .$$

3. Наближення двочастинкового кластера з двома варіаційними параметрами

В даному розділі ми розглянемо псевдоспінові системи, які описуються гамільтоніаном (2.3) (базисна задача). Проведемо кластерне розвинення при розбитті гратки на двочастинкові кластери [16]. Позначимо через ${}^r\varphi_i^z S_i^z + {}^r\varphi_i^x S_i^x$ (${}^r\varphi_i^a$ містить множник β) оператор ефективного поля, яке діє на вузол i з боку вузла r, що належить до найближчого оточення i $(r \in \pi_i)$. Очевидно, що на довільний вузол i при розбитті гратки на двочастинкові кластери діє z полів (z – число найближчих сусідів) з боку кластерів, що містять даний вузол. Перейдемо від вузольного до кластерного сумування [16].

$$\tfrac{1}{2}\sum_{i,\delta} K S_i^a S_{i+\delta}^a = \sum_{(1,2)} K S_1^a S_2^a \ , \quad {\scriptstyle (a=x,y,z)} \ ; \tag{3.1}$$
$$\sum_i \sum_{r\in\pi_i} {}^r\varphi_i^a S_i^a = \sum_{(1,2)} \big({}^2\varphi_1^a S_1^a + {}^1\varphi_2^a S_2^a\big) \ , \quad {\scriptstyle (a=x,z)} \ .$$

Після тотожнього перетворення з врахуванням (3.1) базисний гамільтоніан (2.3) матиме вигляд:

$${}^k\mathcal{H}\Big(\{æ^z, æ^x\}, \{\varphi^z, \varphi^x\}\Big) = \sum_1 \mathcal{H}_1\Big(\tilde{æ}_1^z, \tilde{æ}_1^x\Big) \tag{3.2}$$
$$+\sum_{(1,2)} U_{12}\Big({}^2\varphi_1^z, {}^2\varphi_1^x, {}^1\varphi_2^z, {}^1\varphi_2^x\Big) ,$$

причому

$$\mathcal{H}_1\Big(\tilde{æ}_1^z, \tilde{æ}_1^x\Big) = \tilde{æ}_1^z S_1^z + \tilde{æ}_1^x S_1^x \ ; \tag{3.3}$$

$$\tilde{\text{æ}}_1^a = \text{æ}_1^a + \sum_{r\in\pi_1} {}^r\varphi_1^a \quad , \quad (a{=}x,z) \quad ;$$

$$U_{12} = -{}^2\varphi_1^z S_1^z - {}^2\varphi_1^x S_1^x - {}^1\varphi_2^z S_2^z - {}^1\varphi_2^x S_2^x \\ +K\Big[\gamma S_1^z S_2^z + \alpha\Big(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y\Big)\Big] \quad . \tag{3.4}$$

Для ${}^k\mathcal{F}\Big(\{\text{æ}^z,\text{æ}^x\},\{\varphi^z,\varphi^x\}\Big)$–функції будемо мати

$$\begin{aligned} &{}^k\mathcal{F}\Big(\{\text{æ}^z,\text{æ}^x\},\{\varphi^z,\varphi^x\}\Big) \\ &= \ln \mathrm{Sp}_{\{\boldsymbol{S}\}} \exp\Big[{}^k\mathcal{H}\Big(\{\text{æ}^z,\text{æ}^x\},\{\varphi^z,\varphi^x\}\Big)\Big] \\ &= \ln \mathrm{Sp}_{\{\boldsymbol{S}\}} \exp\Big[\sum_1 \mathcal{H}_1\Big(\tilde{\text{æ}}_1^z,\tilde{\text{æ}}_1^x\Big) + \sum_{(1,2)} U_{12}\Big(\{\varphi^z,\varphi^x\}\Big)\Big] \; . \end{aligned} \tag{3.5}$$

Проведемо розпутування операторів за допомогою T_τ експоненти, тоді (3.5) перепишеться

$$\begin{aligned} &{}^k\mathcal{F}\Big(\{\text{æ}^z,\text{æ}^x\},\{\varphi^z,\varphi^x\}\Big) \\ &\quad = \ln \mathrm{Sp}_{\{\boldsymbol{S}\}}\Big\{\mathrm{e}^{\mathcal{H}_0}\ \mathrm{T}_\tau \exp\Big[\sum_{(1,2)}\int_0^1 d\tau U_{12}(\tau)\Big]\Big\} \\ &\quad = \sum_1 F_1\Big(\tilde{\text{æ}}_1^z,\tilde{\text{æ}}_1^x\Big) + \ln\langle\, \mathrm{T}_\tau \prod_{(1,2)} \exp\Big[\int_0^1 d\tau U_{12}(\tau)\Big]\rangle_{\rho_0} \; ; \end{aligned} \tag{3.6}$$

$$U_{12}(\tau) = \mathrm{e}^{-\tau\mathcal{H}_0}\ U_{12}\ \mathrm{e}^{\tau\mathcal{H}_0} \quad ; \tag{3.7}$$

$$\mathcal{H}_0\Big(\{\tilde{\text{æ}}^z,\tilde{\text{æ}}^x\}\Big) = \sum_1 \mathcal{H}_1\Big(\tilde{\text{æ}}_1^z,\tilde{\text{æ}}_1^x\Big) \; ;$$

$$\langle A\rangle_{\rho_0} = \mathrm{Sp}_{\{\boldsymbol{S}\}}\Big(\rho_0(\{\boldsymbol{S}\})\cdot A\Big) \quad ; \tag{3.8}$$

$$\rho_0(\{\boldsymbol{S}\}) = \prod_1 \rho_1(\boldsymbol{S}_1) = \prod_1 \frac{\exp(\mathcal{H}_1)}{Z_1} \; .$$

Тут використані позначення для одночастинкової F_1–функції:

$$F_1\Big(\tilde{\text{æ}}_1^z,\tilde{\text{æ}}_1^x\Big) = \ln Z_1\Big(\tilde{\text{æ}}_1^z,\tilde{\text{æ}}_1^x\Big) \quad ; \\ Z_1\Big(\tilde{\text{æ}}_1^z,\tilde{\text{æ}}_1^x\Big) = \mathrm{Sp}_{\boldsymbol{S}_1} \exp\Big[\mathcal{H}_1\Big(\tilde{\text{æ}}_1^z,\tilde{\text{æ}}_1^x\Big)\Big] \; . \tag{3.9}$$

Обмежимося першим порядком кластерного розвинення [16], що відповідає наближенню двочастинкового кластера. Тоді для ${}^k\mathcal{F}$–функції будемо мати:

$${}^k\mathcal{F}\Big(\{\text{æ}^z,\text{æ}^x\},\{\varphi^z,\varphi^x\}\Big) = \sum_1 F_1\Big(\tilde{\text{æ}}_1^z,\tilde{\text{æ}}_1^x\Big) \\ + \sum_{(1,2)} \ln\langle\ \mathrm{T}_\tau \exp\Big[\int_0^1 d\tau U_{12}(\tau)\Big]\rangle_{\rho_0} \; . \tag{3.10}$$

Враховуючи

$$U_{12}(\tau) = \mathrm{e}^{-\tau\mathcal{H}_0}\ U_{12}\ \mathrm{e}^{\tau\mathcal{H}_0} = \mathrm{e}^{-\tau(\mathcal{H}_1+\mathcal{H}_2)}\ U_{12}\ \mathrm{e}^{\tau(\mathcal{H}_1+\mathcal{H}_2)} \; , \tag{3.11}$$

будемо мати

$$\begin{aligned} &{}^k\mathcal{F}\Big(\{\text{æ}^z,\text{æ}^x\},\{\varphi^z,\varphi^x\}\Big) \\ &= \sum_1 F_1\Big(\tilde{\text{æ}}_1^z,\tilde{\text{æ}}_1^x\Big) + \sum_{(1,2)} \ln\Big\{\tfrac{1}{Z_1Z_2}\mathrm{Sp}\ \mathrm{e}^{\mathcal{H}_1+\mathcal{H}_2}\ \mathrm{T}_\tau \exp\Big[\int_0^1 d\tau U_{12}(\tau)\Big]\Big\} \\ &= \sum_1 F_1\Big(\tilde{\text{æ}}_1^z,\tilde{\text{æ}}_1^x\Big) + \tfrac{1}{2}\sum_{1,2} \ln\Big\{\tfrac{1}{Z_1Z_2}\mathrm{Sp}\ \mathrm{e}^{\mathcal{H}_1+\mathcal{H}_2+U_{12}}\Big\} \\ &= (1-z)\sum_1 F_1\Big(\tilde{\text{æ}}_1^z,\tilde{\text{æ}}_1^x\Big) + \tfrac{1}{2}\sum_{1,2} F_{12}\Big({}^2\tilde{\text{æ}}_1^z,{}^2\tilde{\text{æ}}_1^x,{}^1\tilde{\text{æ}}_2^z,{}^1\tilde{\text{æ}}_2^x\Big) \; . \end{aligned} \tag{3.12}$$

В НДК ${}^k\mathcal{F}$–функція виражається через одночастинкові та двочастинкові внутрішньокластерні функції, причому двочастинкова F_{12}–функція має вигляд:

$$\begin{aligned} &F_{12}\Big({}^2\tilde{\text{æ}}_1^z,{}^2\tilde{\text{æ}}_1^x,{}^1\tilde{\text{æ}}_2^z,{}^1\tilde{\text{æ}}_2^x\Big) \\ &\quad = \ln Z_{12}\Big({}^2\tilde{\text{æ}}_1^z,{}^2\tilde{\text{æ}}_1^x,{}^1\tilde{\text{æ}}_2^z,{}^1\tilde{\text{æ}}_2^x\Big) = \ln \mathrm{Sp}_{\boldsymbol{S}_1,\boldsymbol{S}_2}\mathrm{e}^{\mathcal{H}_{12}} \; ; \end{aligned} \tag{3.13}$$

$$\begin{aligned} &\mathcal{H}_{12}\Big({}^2\tilde{\text{æ}}_1^z,{}^2\tilde{\text{æ}}_1^x,{}^1\tilde{\text{æ}}_2^z,{}^1\tilde{\text{æ}}_2^x\Big) \\ &= \mathcal{H}_1\Big(\tilde{\text{æ}}_1^z,\tilde{\text{æ}}_1^x\Big) + \mathcal{H}_2\Big(\tilde{\text{æ}}_2^z,\tilde{\text{æ}}_2^x\Big) + U_{12} \\ &= {}^2\tilde{\text{æ}}_1^z S_1^z + {}^1\tilde{\text{æ}}_2^z S_2^z + {}^2\tilde{\text{æ}}_1^x S_1^x + {}^1\tilde{\text{æ}}_2^x S_2^x + K\Big[\gamma S_1^z S_2^z + \alpha\Big(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y\Big)\Big]; \end{aligned} \tag{3.14}$$

$${}^1\tilde{\text{æ}}_2^a = \tilde{\text{æ}}_2^a - {}^1\varphi_2^a = \text{æ}_2^a + \sum_{\substack{r\in\pi_2\\ r\neq 1}} {}^r\varphi_2^a \quad , \quad (a{=}z,x) \; . \tag{3.15}$$

Знайдемо рівняння для $\langle S_1^a\rangle = {}^k\langle S_1^a\rangle$ та для кластерних полів ${}^r\varphi_1^a$ $(a{=}z,x)$. На основі (2.7), (3.12) та умови екстремуму ${}^k\mathcal{F}$–функції по ${}^r\varphi_i^a$

$$\frac{\partial\, {}^k\mathcal{F}}{\partial\, {}^r\varphi_i^a} = 0 \ , \tag{3.16}$$

отримаємо

$$\frac{\partial\, {}^k\mathcal{F}}{\partial\, {}^{r_1}\varphi_i^{(n)}} = (1-z)\cdot\frac{\partial\, F_i}{\partial\, \tilde{\ae}_i^a} + \sum_{r\in\pi_i}\frac{\partial\, F_{ir}}{\partial\, {}^r\tilde{\ae}_i^a} - \frac{\partial\, F_{ir_1}}{\partial\, {}^{r_1}\tilde{\ae}_i^a} = 0, \qquad (r_1\in\pi_i)\,; \tag{3.17}$$

$$\frac{\partial\, {}^k\mathcal{F}}{\partial\, \ae_1^{(n)}} = (1-z)\cdot\frac{\partial\, F_1}{\partial\, \tilde{\ae}_1^a} + \sum_{r\in\pi_1}\frac{\partial\, F_{1r}}{\partial\, {}^r\tilde{\ae}_1^a} = \langle S_1^a\rangle \ . \tag{3.18}$$

Очевидно, що з врахуванням (3.17) спроститься і (3.18). В результаті з (3.17) та (3.18) отримаємо систему $2N(z+1)$ рівнянь для $\langle S_1^a\rangle$ та ${}^r\varphi_1^a$ $(a{=}z,x)$.

$$\langle S_1^a\rangle = \frac{\partial\, F_1}{\partial\, \tilde{\ae}_1^a} \tag{3.19}$$

$$\frac{\partial\, F_1}{\partial\, \tilde{\ae}_1^a} = \frac{\partial\, F_{1r}}{\partial\, {}^r\tilde{\ae}_1^a} \tag{3.20}$$

З іншого боку, враховуючи співвідношення (3.9), (3.13), а також означення одночастинкового та двочастинкового внутрішньокластерних середніх

$$\begin{aligned} \langle A\rangle_{\rho_1} &= \mathrm{Sp}_{\boldsymbol{S}_1}\left[\rho_1(\boldsymbol{S}_1)\cdot A\right] \ ; \\ \langle A\rangle_{\rho_{1r}} &= \mathrm{Sp}_{\boldsymbol{S}_1,\boldsymbol{S}_r}\left[\rho_{1r}(\boldsymbol{S}_1,\boldsymbol{S}_r)\cdot A\right] \ , \end{aligned} \tag{3.21}$$

легко отримати для унарних внутрішньокластерних КФ співвідношення

$$\frac{\partial\, F_1}{\partial\, \tilde{\ae}_1^a} = \langle S_1^a\rangle_{\rho_1} \quad ; \qquad \frac{\partial\, F_{1r}}{\partial\, {}^r\tilde{\ae}_1^a} = \langle S_1^a\rangle_{\rho_{1r}} \ , \tag{3.22}$$

де усереднення проводиться по внутрішньокластерних одночастинковій та двочастинковій матрицях густини

$$\begin{aligned} \rho_1(\boldsymbol{S}_1) &= \frac{\exp\left[\mathcal{H}_1\left(\tilde{\ae}_1^z, \tilde{\ae}_1^x\right)\right]}{Z_1\left(\tilde{\ae}_1^z, \tilde{\ae}_1^x\right)} \quad ; \\ \rho_{1r}(\boldsymbol{S}_1,\boldsymbol{S}_r) &= \frac{\exp\left[\mathcal{H}_{1r}\left({}^2\tilde{\ae}_1^z, {}^2\tilde{\ae}_1^x, {}^1\tilde{\ae}_2^z, {}^1\tilde{\ae}_2^x\right)\right]}{Z_{1r}\left({}^2\tilde{\ae}_1^z, {}^2\tilde{\ae}_1^x, {}^1\tilde{\ae}_2^z, {}^1\tilde{\ae}_2^x\right)} \ . \end{aligned} \tag{3.23}$$

Тобто з умови екстремуму ${}^k\mathcal{F}$–функції (3.16) ми отримали (див. систему рівнянь (3.19), (3.20)) $2zN$ рівнянь

$$\langle S_1^a\rangle_{\rho_1} = \langle S_1^a\rangle_{\rho_{1r}} \ , \qquad (a{=}z,x) \ . \tag{3.24}$$

Система $2zN$ рівнянь (3.24), як видно з означення середнього (3.21), еквівалентна $2zN$ незалежним співвідношенням між матрицями густини

$$\rho_1(\boldsymbol{S}_1) = \mathrm{Sp}_{\boldsymbol{S}_r}[\rho_{1r}(\boldsymbol{S}_1,\boldsymbol{S}_r)] \tag{3.25}$$

(із $3zN$ співвідношень (3.25) незалежними є $2zN$, оскільки з явного вигляду $\rho_1(\boldsymbol{S}_1)$, $\rho_{1r}(\boldsymbol{S}_1,\boldsymbol{S}_r)$ випливає тотожнє виконання zN умов $\mathrm{Sp}_{\boldsymbol{S}_1}[\rho_1(\boldsymbol{S}_1)] = \mathrm{Sp}_{\boldsymbol{S}_1,\boldsymbol{S}_r}[\rho_{1r}(\boldsymbol{S}_1,\boldsymbol{S}_r)] = 1$). Отже, в НДК умова екстремуму ${}^k\mathcal{F}$–функції (3.16) дає співвідношення (3.25) між внутрішньошньокластерними матрицями густини.

Оскільки нашим завданням в даній роботі є дослідження лише термодинамічних властивостей XXZ–моделі, то ми далі обмежимося випадком однорідного поля ($h_i^z = h^z$, $h_i^x = h^x$, $\langle S_i^z\rangle = \langle S^z\rangle$, $\langle S_i^x\rangle = \langle S^x\rangle$).

Логарифм статистичної суми на елементарну комірку кристалу (f–функція) в НМП по далекосяжних взаємодіях та в НДК по короткосяжній взаємодії матиме вигляд (тут і далі множник $\beta = \frac{1}{k_BT}$ будемо виділяти явно):

$$f\left(h^z, h^x\right) = {}^kf\left(\ae^z, \ae^x, \varphi^z, \varphi^x\right) - \tfrac{1}{8}\beta J_0\left[\gamma\left(m^z\right)^2 + \alpha\left(m^x\right)^2\right] \ ; \tag{3.26}$$

$$\begin{aligned} \ae^z &= h^z + \tfrac{1}{2}\gamma J_0 m^z \quad ; \quad \ae^x = h^x + \tfrac{1}{2}\alpha J_0 m^x \quad ; \\ J_0 &= \sum_{j=1}^{N} J_{ij} \quad ; \quad m^a = 2\langle S^a\rangle \ . \end{aligned} \tag{3.27}$$

${}^kf$–функція (логарифм статистичної суми на елементарну комірку кристалу базисної моделі)

$${}^kf\left(\ae^z, \ae^x, \varphi^z, \varphi^x\right) = (1-z)F_1\left(\tilde{\ae}^z, \tilde{\ae}^x\right) + \tfrac{z}{2}F_{12}\left(\tilde{\tilde{\ae}}^z, \tilde{\tilde{\ae}}^x\right) \tag{3.28}$$

виражається через одночастинкову внутрішньокластерну F_1–функцію

$$F_1\left(\tilde{\ae}^z, \tilde{\ae}^x\right) = \ln Z_1\left(\tilde{\ae}^z, \tilde{\ae}^x\right) = \ln \mathrm{Sp}_{\boldsymbol{S}_1} \mathrm{e}^{\mathcal{H}_1} \ ; \tag{3.29}$$

$$\mathcal{H}_1\left(\tilde{\ae}^z, \tilde{\ae}^x\right) = \beta\sum_{a=x,z}\tilde{\ae}^a S_1^a \quad ; \qquad \tilde{\ae}^a = \ae^a + z\varphi^a \ , \qquad (a{=}z,x) \ , \tag{3.30}$$

та двочастинкову внутрішньокластерну F_{12}–функцію

$$F_{12}\left(\tilde{\tilde{æ}}^z,\tilde{\tilde{æ}}^x\right)=\ln Z_{12}\left(\tilde{\tilde{æ}}^z,\tilde{\tilde{æ}}^x\right)=\ln \mathrm{Sp}_{\boldsymbol{S}_1,\boldsymbol{S}_2}\exp(\mathcal{H}_{12})\ ; \tag{3.31}$$

$$\mathcal{H}_{12}\left(\tilde{\tilde{æ}}^z,\tilde{\tilde{æ}}^x\right)=\beta\sum_{a=x,z}\tilde{\tilde{æ}}^a\left(S_1^a+S_2^a\right) \tag{3.32}$$

$$+\beta K\left[\gamma S_1^z S_2^z+\alpha\left(S_1^x S_2^x+S_1^y S_2^y\right)\right];$$

$$\tilde{\tilde{æ}}^a=æ^a+(z-1)\varphi^a\quad,\quad {\scriptstyle (a=z,x)}\ . \tag{3.33}$$

Для визначення m^a та φ^a $({\scriptstyle a=z,x})$ у випадку однорідного поля на основі (3.19) та (3.20) будемо мати чотири рівняння:

$$m^a=2\frac{\partial\ F_1}{\partial(\beta\tilde{æ}^a)} \tag{3.34}$$

$$\frac{\partial\ F_1}{\partial(\beta\tilde{æ}^a)}=\frac{\partial\ F_{1r}}{\partial(\beta\tilde{\tilde{æ}}^a)} \tag{3.35}$$

Тепер зупинимося на отриманні одночастинкової F_1–функції та рівнянь для унарних кореляторів у явному вигляді. Гамільтоніан $\mathcal{H}_1$ діє на базисі двох функцій стану однієї частинки

$$\begin{array}{cc} 1 & + \\ 2 & - \end{array} \tag{3.36}$$

В представленні (3.36) гамільтоніан $\mathcal{H}_1$ має вигляд:

$$\mathcal{H}_1=\tfrac{1}{2}\beta\begin{pmatrix}\tilde{æ}^z & \tilde{æ}^x\\ \tilde{æ}^x & -\tilde{æ}^z\end{pmatrix}. \tag{3.37}$$

Приймаючи до уваги (3.29), легко отримати в явному вигляді вираз для F_1–функції:

$$F_1\left(\tilde{æ}^z,\tilde{æ}^x\right)=\ln\left[2\mathrm{ch}\left(\tfrac{1}{2}\beta\Lambda\right)\right]\quad;\quad\Lambda=\sqrt{(\tilde{æ}^z)^2+(\tilde{æ}^x)^2}\ . \tag{3.38}$$

На основі (3.34) отримаємо рівняння для m^a, $(a=z,x)$:

$$m^a=\frac{\tilde{æ}^a}{\Lambda}\mathrm{th}\left(\tfrac{1}{2}\beta\Lambda\right)\ . \tag{3.39}$$

Враховуючи (3.30), на основі рівнянь (3.39) можна все звести до m^z та m^x звільнившись від φ^z, φ^x.

$$\varphi^a=\frac{1}{z}\left[k_BT\frac{m^a}{M}\ln\left(\frac{1+M}{1-M}\right)-æ^a\right]\ , \tag{3.40}$$

де

$$M=\sqrt{(m^z)^2+(m^x)^2}\ . \tag{3.41}$$

Тепер зупинимося на отриманні двочастинкової F_{12}–функції. Гамільтоніан $\mathcal{H}_{12}$ діє на базисі чотирьох функцій стану двочастинкового кластера

$$\begin{array}{ccc} 1 & + & + \\ 2 & + & - \\ 3 & - & + \\ 4 & - & - \end{array} \tag{3.42}$$

В представленні (3.42) гамільтоніан $\mathcal{H}_{12}$ має вигляд:

$$\mathcal{H}_{12}=\beta\begin{pmatrix}\tilde{\tilde{æ}}^z+\frac{1}{4}\gamma K & \frac{1}{2}\tilde{\tilde{æ}}^x & \frac{1}{2}\tilde{\tilde{æ}}^x & 0\\ \frac{1}{2}\tilde{\tilde{æ}}^x & -\frac{1}{4}\gamma K & \frac{1}{2}\alpha K & \frac{1}{2}\tilde{\tilde{æ}}^x\\ \frac{1}{2}\tilde{\tilde{æ}}^x & \frac{1}{2}\alpha K & -\frac{1}{4}\gamma K & \frac{1}{2}\tilde{\tilde{æ}}^x\\ 0 & \frac{1}{2}\tilde{\tilde{æ}}^x & \frac{1}{2}\tilde{\tilde{æ}}^x & -\tilde{\tilde{æ}}^z+\frac{1}{4}\gamma K\end{pmatrix} \tag{3.43}$$

На основі (3.31) та (3.43) отримаємо для двочастинкової F_{12}–функції

$$F_{12}\left(\tilde{\tilde{æ}}^z,\tilde{\tilde{æ}}^x\right)=\ln\left[\sum_{\xi=1}^{4}\mathrm{e}^{\beta E_\xi^{(12)}}\right]\ , \tag{3.44}$$

де

$$E_4^{(12)}=-\tfrac{1}{4}\gamma K-\tfrac{1}{2}\alpha K\ , \tag{3.45}$$

а три інші власні значення $E_{1,2,3}^{(12)}$ матриці (3.43) є коренями кубічного рівняння, яке зручно записати у вигляді:

$$\left(\tfrac{1}{4}\gamma K-E^{(12)}\right)^2\left(\tfrac{1}{4}\gamma K-\tfrac{1}{2}\alpha K+E^{(12)}\right) \tag{3.46}$$

$$-\left(\tfrac{1}{4}\gamma K-\tfrac{1}{2}\alpha K+E^{(12)}\right)\left(\tilde{\tilde{æ}}^z\right)^2+\left(\tfrac{1}{4}\gamma K-E^{(12)}\right)\left(\tilde{\tilde{æ}}^x\right)^2=0\ .$$

4. Дослідження вільної енергії

Тепер зупинимося на дослідженні вільної енергії XXZ–моделі в НДК з двома варіаційними параметрами по короткосяжних взаємодіях та в НМП по далекосяжних взаємодіях.

$$F(m^z,m^x,\varphi^z,\varphi^x)=-k_BTN\left(f(m^z,m^x,\varphi^z,\varphi^x)\right) \tag{4.1}$$

Враховуючи, що φ^a виражається через m^z, m^x (3.40), отримаємо вільну енергію як функцію двох параметрів m^z, m^x:

$$F(m^z,m^x) = -k_B T N\left\{(1-z)\ln\left[2\mathrm{ch}\left(\tfrac{\beta}{2}\sqrt{(\tilde{\ae}^z)^2+(\tilde{\ae}^x)^2}\right)\right]\right. \tag{4.2}$$

$$\left. + \tfrac{1}{2}z\ln\left[\mathrm{e}^{-\beta K(\frac{1}{4}\gamma+\frac{1}{2}\alpha)} + \sum_{\xi=1}^{3}\mathrm{e}^{\beta E_\xi^{(12)}}\right]\right\} + \tfrac{1}{8}J_0 N\left[\gamma(m^z)^2+\alpha(m^x)^2\right],$$

де $E_{1,2,3}^{(12)}$ є коренями кубічного рівняння (3.46) ($\sum_{n=0}^{3} a_n(E^{(12)})^n = 0$), причому

$$\begin{aligned} a_3 &= 1\ ;\quad a_2 = -K(\tfrac{1}{2}\alpha+\tfrac{1}{4}\gamma)\ ; \\ a_1 &= -\tfrac{1}{16}(\gamma K)^2 + \tfrac{1}{4}\gamma\alpha K^2 - (\tilde{\tilde{\ae}}^z)^2 - (\tilde{\tilde{\ae}}^x)^2\ ; \\ a_0 &= K(\tfrac{1}{4}\gamma-\tfrac{1}{2}\alpha)\left[\tfrac{1}{16}(\gamma K)^2-(\tilde{\tilde{\ae}}^z)^2\right] + \tfrac{1}{4}\gamma K(\tilde{\tilde{\ae}}^x)^2 . \end{aligned} \tag{4.3}$$

На рисунках 1, 2 приведена вільна енергія (4.2) ($z=4$, $J_0=0.1$, $h^z=h^x=0$) як функція параметрів m^z, m^x для $\alpha=0.5$, $\gamma=1$ при $t=4\frac{k_BT}{zK}=0.75$, $t=0.55$ та для $\alpha=1$, $\gamma=0.25$ при $t=0.65$, $t=0.4$ та $t=0.1$ відповідно. Рисунок 1 є характерним для випадку $\alpha<\gamma$, а рисунок 2 – для випадку $\alpha>\gamma$ при довільних z, $J_0\geq 0$ ($z=2$, $J_0>0$), $h^z=h^x=0$. Для $\alpha<\gamma$ абсолютний мінімум вільної енергії буде при $m^x\equiv 0$, а для $\alpha>\gamma$ – при $m^z\equiv 0$. У випадку $\alpha=\gamma$ (ізотропна модель Гейзенберга) вводимо інфінітезимальне поле $h^z\longrightarrow 0$ ($h^x\equiv 0$) [29], тоді $m^x\equiv 0$, або інфінітезимальне поле $h^x\longrightarrow 0$ ($h^z\equiv 0$), тоді $m^z\equiv 0$. Зауважимо також, що для анізотропної моделі Гейзенберга ($\alpha\neq\gamma$) ми вводимо інфінітезимальні поля $h^z\longrightarrow 0$, $h^x\longrightarrow 0$, оскільки при $h^z\equiv 0$, $h^x\equiv 0$, як видно з симетрії гамільтоніану відносно заміни $S^a\longrightarrow -S^a$, $m^a\equiv 0$ ($a=x,y,z$).

Тобто, з врахуванням (3.40), видно, що для $\alpha<\gamma$, $h^z=h^x\longrightarrow 0$ та для $\alpha=\gamma$, $h^z\longrightarrow 0$, $h^x\equiv 0$ маємо $\varphi^x=m^x\equiv 0$, а для $\alpha>\gamma$, $h^z=h^x\longrightarrow 0$ та для $\alpha=\gamma$, $h^x\longrightarrow 0$, $h^z\equiv 0$ маємо $\varphi^z=m^z\equiv 0$.

5. Наближення двочастинкового кластера з варіаційним параметром φ^z

Проведене числове дослідження вільної енергії як функції m^z та m^x показує, що доцільно розглядати окремо такі два випадки:
1) $\alpha\leq\gamma$, $h^x\equiv 0$, $\varphi^x=m^x\equiv 0$;
2) $\alpha\geq\gamma$, $h^z\equiv 0$, $\varphi^z=m^z\equiv 0$.

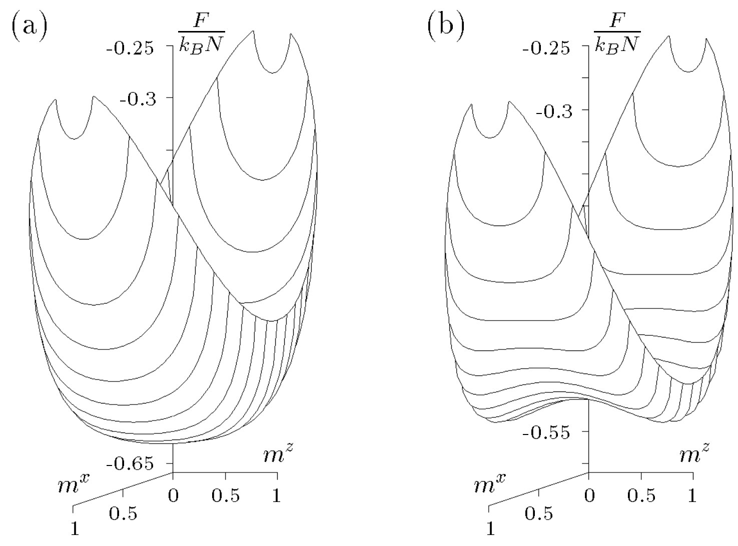

Рис. 1: Вільна енергія як функція параметрів m^x та m^z для $z=4$, $J_0=0.1$, $\alpha=0.5$, $\gamma=1.0$ при $t=4\frac{k_BT}{zK}=0.75$ (a) та $t=0.55$ (b).

В даному розділі ми розглянемо перший випадок. На основі (3.26), (3.28), (3.38), та (3.42) – (3.44) отримаємо $f(h^z)$–функцію у явному вигляді:

$$f(h^z) = (1-z)F_1(\tilde{\ae}^z) + \tfrac{z}{2}F_{12}(\tilde{\tilde{\ae}}^z) - \tfrac{1}{8}\beta\gamma J_0\left(m^z\right)^2, \tag{5.1}$$

де

$$F_1(\tilde{\ae}^z) = \ln Z_1(\tilde{\ae}^z)\ ;\qquad Z_1(\tilde{\ae}^z) = 2\mathrm{ch}(\tfrac{1}{2}\beta\tilde{\ae}^z)\ ; \tag{5.2}$$

$$F_{12}(\tilde{\tilde{\ae}}^z) = \ln Z_{12}(\tilde{\tilde{\ae}}^z)\ ;\qquad Z_{12}(\tilde{\tilde{\ae}}^z) = 2\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\gamma K}L(\tilde{\tilde{\ae}}^z)\ ; \tag{5.3}$$

$$L(\tilde{\tilde{\ae}}^z) = \left[\mathrm{ch}(\beta\tilde{\tilde{\ae}}^z) + \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\beta\gamma K}\mathrm{ch}(\tfrac{1}{2}\beta\alpha K)\right]. \tag{5.4}$$

На основі рівнянь (3.34) (або (3.39)) та (3.35), отримаємо систему рівнянь для m^z та φ^z.

$$m^z = \mathrm{th}(\tfrac{1}{2}\beta\tilde{\ae}^z) \tag{5.5}$$

$$\mathrm{th}(\tfrac{1}{2}\beta\tilde{\ae}^z) = \frac{\mathrm{sh}(\beta\tilde{\tilde{\ae}}^z)}{L(\tilde{\tilde{\ae}}^z)} \tag{5.6}$$

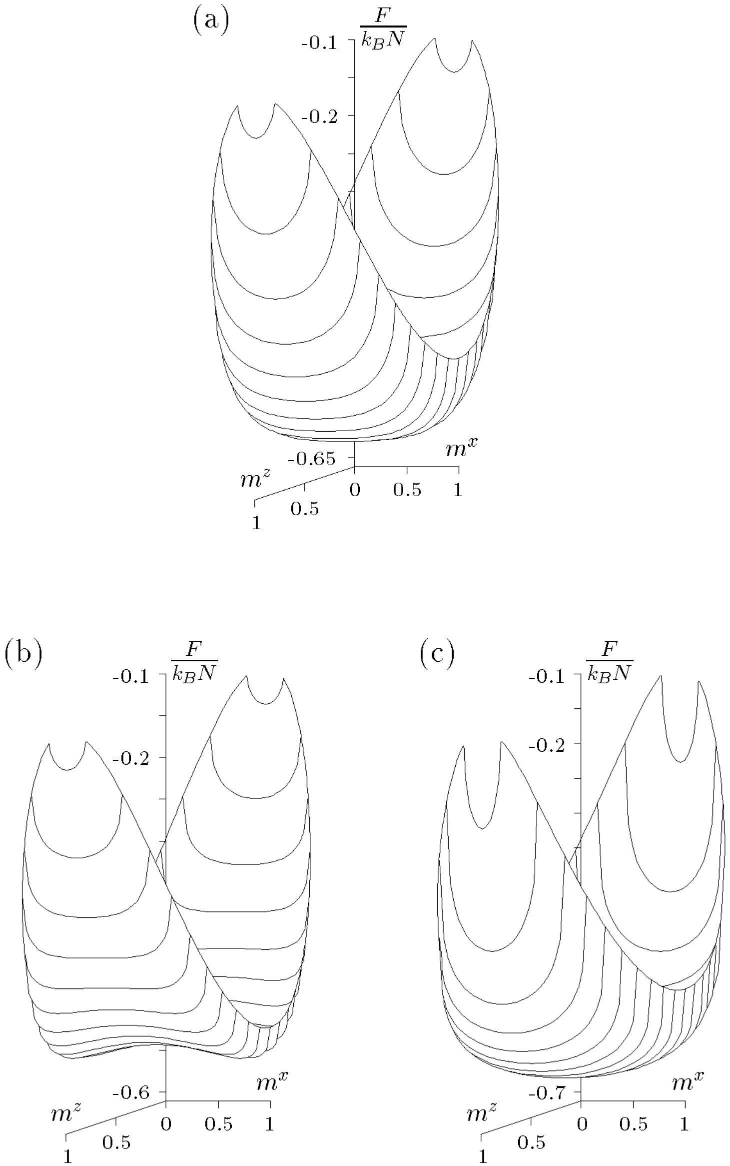

Рис. 2: Вільна енергія як функція параметрів m^x та m^z для $z=4$, $J_0=0.1$, $\alpha=1.0$, $\gamma=0.25$ при $t=4\frac{k_BT}{zK}=0.65$ (a), $t=0.4$ (b) та $t=0.1$ (c).

Приймаючи до уваги, що з допомогою (3.40) можна виключити φ^z, отримаємо рівняння для m^z:

$$m^z = \frac{\mathrm{sh}\Big(\beta \tilde{\tilde{\text{æ}}}^z(m^z)\Big)}{L(m^z)}\,, \tag{5.7}$$

де

$$\tilde{\tilde{\text{æ}}}^z(m^z) = \tfrac{1}{z}\left\{(z-1)k_BT\ln\left(\frac{1+m^z}{1-m^z}\right) + \tfrac{1}{2}\gamma J_0 m^z + h^z\right\}. \tag{5.8}$$

Сприйнятливість, ентропію і теплоємність можна розрахувати таким чином [16]:

$$\chi = \frac{\mathrm{d}\ m^z}{\mathrm{d}\ h^z} = \frac{{}^k\chi}{1-\gamma J_0\cdot{}^k\chi}\ \ ;\quad {}^k\chi = \beta\left({}^kf_{\text{ææ}} - \frac{\left({}^kf_{\text{æ}\varphi}\right)^2}{{}^kf_{\varphi\varphi}}\right)\ \ ; \tag{5.9}$$

$$S = \frac{\mathrm{d}\ F}{\mathrm{d}\ T} = {}^kS\ \ ;\quad {}^kS = k_BN\left({}^kf - \beta\frac{\partial\ {}^kf}{\partial\ \beta}\right)\ ; \tag{5.10}$$

$$\begin{aligned} C &= T\frac{\mathrm{d}\ S}{\mathrm{d}\ T} \qquad (5.11)\\ &= {}^kC + \frac{k_B\beta\gamma J_0}{1-\gamma J_0\cdot{}^k\chi}\left\{-\beta\frac{\partial\ {}^kf_{\text{æ}}}{\partial\ \beta} + \frac{{}^kf_{\text{æ}\varphi}}{{}^kf_{\varphi\varphi}}\left({}^kf_\varphi + \beta\frac{\partial\ {}^kf_\varphi}{\partial\ \beta}\right)\right\}^2\ ; \end{aligned}$$

$${}^kC = k_B\left\{\beta^2\frac{\partial^2\ {}^kf}{\partial\ \beta^2} - \left({}^kf_\varphi + \beta\frac{\partial\ {}^kf_\varphi}{\partial\ \beta}\right)^2\frac{1}{{}^kf_{\varphi\varphi}}\right\}\ .$$

Тут використані позначення:

$${}^kf_{\underbrace{\text{æ}\ldots\text{æ}}_{l_1}\underbrace{\varphi\ldots\varphi}_{l_2}} = \frac{\partial^{l_1}}{\partial(\beta\text{æ}^z)^{l_1}}\ \frac{\partial^{l_2}}{\partial(\beta\varphi^z)^{l_2}}\ {}^kf(\text{æ}^z,\varphi^z) \tag{5.12}$$

Приведемо також необхідні нам частинні похідні у явному вигляді:

$$\begin{aligned} {}^kf_\varphi &= \tfrac{1}{2}(1-z)zZ_1' + \tfrac{1}{2}(z-1)zZ_{12}'\ ; \qquad (5.13)\\ {}^kf_{\text{æ}} &= \tfrac{1}{2}(1-z)Z_1' + \tfrac{1}{2}zZ_{12}'\ ;\\ {}^kf_{\varphi\varphi} &= \tfrac{1}{4}(1-z)z^2Z_1'' + \tfrac{1}{2}(z-1)^2zZ_{12}''\ ;\\ {}^kf_{\text{ææ}} &= \tfrac{1}{4}(1-z)Z_1'' + \tfrac{1}{2}zZ_{12}''\ ; \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
{}^k f_{\ae\varphi} &= \tfrac{1}{4}(1-z)zZ_1'' + \tfrac{1}{2}(z-1)zZ_{12}'' \ ; \\
\frac{\partial\, {}^k f}{\partial\, \beta} &= \tfrac{1}{2}(1-z)\tilde{\ae}^z Z_1' + \tfrac{1}{2}zZ_{12}^{(\beta)} \ ; \\
\frac{\partial^2\, {}^k f}{\partial\, \beta^2} &= \tfrac{1}{4}(1-z)(\tilde{\ae}^z)^2 Z_1'' + \tfrac{1}{2}zZ_{12}^{(\beta\beta)} \ ; \\
\frac{\partial\, {}^k f_{\ae}}{\partial\, \beta} &= \tfrac{1}{4}(1-z)\tilde{\ae}^z Z_1'' + \tfrac{1}{2}zZ_{12}^{(\beta\ae)} \ ; \\
\frac{\partial\, {}^k f_{\varphi}}{\partial\, \beta} &= \tfrac{1}{4}(1-z)z\tilde{\ae}^z Z_1'' + \tfrac{1}{2}(z-1)zZ_{12}^{(\beta\varphi)} \ ,
\end{aligned}
$$

де

$$
\begin{aligned}
&Z_1' = \mathrm{th}(\tfrac{1}{2}\beta\tilde{\ae}^z) \ ; \qquad Z_{12}' = 2\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\gamma K}\mathrm{sh}(\beta\tilde{\tilde{\ae}}^z)/Z_{12} \ ; \qquad (5.14) \\
&Z_1'' = \Big(\mathrm{ch}(\tfrac{1}{2}\beta\tilde{\ae}^z)\Big)^{-2} \ ; \\
&Z_{12}'' = 4\Big(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\beta\gamma K} + \mathrm{ch}(\beta\tilde{\tilde{\ae}}^z)\mathrm{ch}(\tfrac{1}{2}\beta\alpha K)\Big)/Z_{12}^2 \ ; \\
&Z_{12}^{(\beta)} = 2\Big\{\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\gamma K}\Big[\tfrac{1}{4}\gamma K\mathrm{ch}(\beta\tilde{\tilde{\ae}}^z) + \tilde{\tilde{\ae}}^z\mathrm{sh}(\beta\tilde{\tilde{\ae}}^z)\Big] \\
&\qquad +\mathrm{e}^{-\frac{1}{4}\beta\gamma K}\Big[\tfrac{1}{2}\alpha K\mathrm{sh}(\tfrac{1}{2}\beta\alpha K) - \tfrac{1}{4}\gamma K\mathrm{ch}(\tfrac{1}{2}\beta\alpha K)\Big]\Big\}/Z_{12} \ ; \\
&Z_{12}^{(\beta\beta)} = 2\Big\{\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\gamma K}\Big[\Big(\tfrac{1}{16}\gamma^2K^2 + (\tilde{\tilde{\ae}}^z)^2\Big)\mathrm{ch}(\beta\tilde{\tilde{\ae}}^z) + \tfrac{1}{2}\gamma K\tilde{\tilde{\ae}}^z\mathrm{sh}(\beta\tilde{\tilde{\ae}}^z)\Big] \\
&\qquad +\mathrm{e}^{-\frac{1}{4}\beta\gamma K}\Big[\tfrac{1}{4}K^2\Big(\alpha^2+\tfrac{1}{4}\gamma^2\Big)\mathrm{ch}(\tfrac{1}{2}\beta\alpha K) \\
&\qquad -\tfrac{1}{4}\alpha\gamma K^2\mathrm{sh}(\tfrac{1}{2}\beta\alpha K)\Big]\Big\}/Z_{12} - \Big(Z_{12}^{(\beta)}\Big)^2 \ ; \\
&Z_{12}^{(\beta\varphi)} = Z_{12}^{(\beta\ae)} = 2\Big[\tfrac{1}{4}\gamma K\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\gamma K}\mathrm{sh}(\beta\tilde{\tilde{\ae}}^z) \\
&\qquad +\tilde{\tilde{\ae}}^z\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\gamma K}\mathrm{ch}(\beta\tilde{\tilde{\ae}}^z)\Big]/Z_{12} - Z_{12}^{(\beta)}Z_{12}' \ .
\end{aligned}
$$

На основі (5.9), (5.13), (5.14) отримаємо вираз для статичної магнітної сприйнятливості.

$$
\chi = \beta\left\{\frac{2zL^2}{1+\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\beta\gamma K}\mathrm{ch}(\beta\tilde{\tilde{\ae}}^z)\mathrm{ch}(\frac{1}{2}\beta\alpha K)} + \frac{4(1-z)}{1-(m^z)^2} - \beta\gamma J_0\right\}^{-1} \qquad (5.15)
$$

З умови $\Big(\chi(m^z=0, T=T_c)\Big)^{-1} = 0$ отримаємо рівняння для T_c.

$$
\tfrac{1}{2}z\Big(1+\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\beta_c\gamma K}\ \mathrm{ch}(\tfrac{1}{2}\beta_c\alpha K)\Big) + (1-z) - \tfrac{1}{4}\beta_c\gamma J_0 = 0 \qquad (5.16)
$$

Вирази для ентропії та теплоємності не приводимо через громіздкість.

6. Наближення двочастинкового кластера з варіаційним параметром φ^x

Розглянемо тепер випадок $\alpha \geq \gamma$, $h^z \equiv 0$, $\varphi^z = m^z \equiv 0$.

На основі (3.26), (3.28), (3.38), та (3.42) – (3.44) отримаємо $f(h^x)$–функцію у явному вигляді:

$$
f(h^x) = (1-z)F_1(\tilde{\ae}^x) + \tfrac{z}{2}F_{12}(\tilde{\tilde{\ae}}^x) - \tfrac{1}{8}\beta\alpha J_0\Big(m^x\Big)^2, \qquad (6.1)
$$

де

$$
\begin{aligned}
&F_1(\tilde{\ae}^x) = \ln Z_1(\tilde{\ae}^x) \ ; \qquad Z_1(\tilde{\ae}^x) = 2\mathrm{ch}(\tfrac{1}{2}\beta\tilde{\ae}^x) \ ; \qquad (6.2) \\
&F_{12}(\tilde{\tilde{\ae}}^x) = \ln Z_{12}(\tilde{\tilde{\ae}}^x) \ ; \qquad (6.3) \\
&Z_{12}(\tilde{\tilde{\ae}}^x) = \mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\gamma K} + 2\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\alpha K}\mathrm{ch}(\beta r) + \mathrm{e}^{-(\frac{1}{4}\gamma+\frac{1}{2}\alpha)\beta K} \ ; \\
&r(\tilde{\tilde{\ae}}^x) = \sqrt{(\tilde{\tilde{\ae}}^x)^2 + \tfrac{1}{16}(\alpha-\gamma)^2K^2} \ . \qquad (6.4)
\end{aligned}
$$

На основі рівнянь (3.34) (або (3.39)) та (3.35), отримаємо систему рівнянь для m^x та φ^x.

$$
m^x = \mathrm{th}(\tfrac{1}{2}\beta\tilde{\ae}^x) \qquad (6.5)
$$

$$
\mathrm{th}(\tfrac{1}{2}\beta\ae^x) = \frac{2\tilde{\tilde{\ae}}^x\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\alpha K}\mathrm{sh}(\beta r)}{r(\tilde{\tilde{\ae}}^x)Z_{12}(\tilde{\tilde{\ae}}^x)} \qquad (6.6)
$$

Приймаючи до уваги, що з допомогою (3.40) можна виключити φ^x, отримаємо рівняння для m^x:

$$
m^x = \frac{2\tilde{\tilde{\ae}}^x(m^x)\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\alpha K}\mathrm{sh}(\beta r)}{r(m^x)Z_{12}(m^x)} \ , \qquad (6.7)
$$

де

$$
\tilde{\tilde{\ae}}^x(m^x) = \tfrac{1}{z}\left\{(z-1)k_BT\ln\left(\frac{1+m^x}{1-m^x}\right) + \tfrac{1}{2}\alpha J_0m^x + h^x\right\}. \qquad (6.8)
$$

Сприйнятливість, ентропію і теплоємність можна розрахувати використовуючи (5.9) – (5.11), зробивши в них заміну $\gamma \longrightarrow \alpha$, та враховуючи, що тепер використані такі позначення:

$$
{}^k f_{\underbrace{\ae\ldots\ae}_{l_1}\underbrace{\varphi\ldots\varphi}_{l_2}} = \frac{\partial^{l_1}}{\partial(\beta\ae^x)^{l_1}}\ \frac{\partial^{l_2}}{\partial(\beta\varphi^x)^{l_2}}\ {}^k f(\ae^x, \varphi^x). \qquad (6.9)
$$

Приведемо також необхідні нам частинні похідні у явному вигляді:

$$
\begin{aligned}
{}^k f_\varphi &= \tfrac{1}{2}(1-z)zZ_1' + \tfrac{1}{2}(z-1)zZ_{12}' \ ; \\
{}^k f_{\text{\ae}} &= \tfrac{1}{2}(1-z)Z_1' + \tfrac{1}{2}zZ_{12}' \ ; \\
{}^k f_{\varphi\varphi} &= \tfrac{1}{4}(1-z)z^2 Z_1'' + \tfrac{1}{2}(z-1)^2 zZ_{12}'' \ ; \\
{}^k f_{\text{\ae}\text{\ae}} &= \tfrac{1}{4}(1-z)Z_1'' + \tfrac{1}{2}zZ_{12}'' \ ; \\
{}^k f_{\text{\ae}\varphi} &= \tfrac{1}{4}(1-z)zZ_1'' + \tfrac{1}{2}(z-1)zZ_{12}'' \ ; \\
\frac{\partial\, {}^k f}{\partial\, \beta} &= \tfrac{1}{2}(1-z)\tilde{\text{\ae}}^x Z_1' + \tfrac{1}{2}zZ_{12}^{(\beta)} \ ; \\
\frac{\partial^2\, {}^k f}{\partial\, \beta^2} &= \tfrac{1}{4}(1-z)(\tilde{\text{\ae}}^x)^2 Z_1'' + \tfrac{1}{2}zZ_{12}^{(\beta\beta)} \ ; \\
\frac{\partial\, {}^k f_{\text{\ae}}}{\partial\, \beta} &= \tfrac{1}{4}(1-z)\tilde{\text{\ae}}^x Z_1'' + \tfrac{1}{2}zZ_{12}^{(\beta\text{\ae})} \ ; \\
\frac{\partial\, {}^k f_\varphi}{\partial\, \beta} &= \tfrac{1}{4}(1-z)z\tilde{\text{\ae}}^x Z_1'' + \tfrac{1}{2}(z-1)zZ_{12}^{(\beta\varphi)} \ ,
\end{aligned}
\tag{6.10}
$$

де

$$
\begin{aligned}
Z_1' &= \mathrm{th}(\tfrac{1}{2}\beta\tilde{\text{\ae}}^x) \ ; \qquad Z_{12}' = 2\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\alpha K}\tilde{\tilde{\text{\ae}}}^x \mathrm{sh}(\beta r)/(rZ_{12}) \ ; \\
Z_1'' &= \Big(\mathrm{ch}(\tfrac{1}{2}\beta\tilde{\text{\ae}}^x)\Big)^{-2} \ ; \\
Z_{12}'' &= 2\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\alpha K}\Big[\Big(\tfrac{\tilde{\tilde{\text{\ae}}}^x}{r}\Big)^2 \mathrm{ch}(\beta r) + \tfrac{(\alpha-\gamma)^2K^2}{16\beta r^3}\mathrm{sh}(\beta r)\Big]/Z_{12}^2 - \Big(Z_{12}'\Big)^2 \ ; \\
Z_{12}^{(\beta)} &= \Big\{\tfrac{1}{4}\gamma K\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\gamma K} - \Big(\tfrac{1}{4}\gamma + \tfrac{1}{2}\alpha\Big)K\mathrm{e}^{-\beta(\frac{1}{4}\gamma+\frac{1}{2}\alpha)K} \\
&\quad + \mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\alpha K}\Big[\tfrac{1}{2}\alpha K\mathrm{ch}(\beta r) + 2r\,\mathrm{sh}(\beta r)\Big]\Big\}/Z_{12} \ ; \\
Z_{12}^{(\beta\beta)} &= \Big\{\Big(\tfrac{1}{4}\gamma K\Big)^2 \mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\gamma K} + \Big(\tfrac{1}{4}\gamma + \tfrac{1}{2}\alpha\Big)^2 K^2 \mathrm{e}^{-\beta(\frac{1}{4}\gamma+\frac{1}{2}\alpha)K} \\
&\quad + \mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\alpha K}\Big[\Big(\tfrac{1}{8}(\alpha K)^2 + 2r^2\Big)\mathrm{ch}(\beta r) + \alpha K r\,\mathrm{sh}(\beta r)\Big]\Big\}/Z_{12} - \Big(Z_{12}^{(\beta)}\Big)^2 \ ; \\
Z_{12}^{(\beta\varphi)} &= Z_{12}^{(\beta\text{\ae})} = \tfrac{2\tilde{\tilde{\text{\ae}}}^x}{r}\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\alpha K}\Big[\tfrac{1}{4}\alpha K\mathrm{sh}(\beta r) + r\,\mathrm{ch}(\beta r)\Big]/Z_{12} \\
&\quad - Z_{12}^{(\beta)}Z_{12}' \ .
\end{aligned}
\tag{6.11}
$$

На основі (5.9), (6.10), (6.11) отримаємо вираз для статичної магнітної сприйнятливості.

$$
\chi = \beta\left\{\frac{2z}{Z_{12}''} - \frac{4(1-z)}{Z_1''} - \beta\alpha J_0\right\}^{-1} \tag{6.12}
$$

З умови $\Big(\chi(m^x = 0, T = T_c)\Big)^{-1} = 0$ отримаємо рівняння для T_c.

$$
\begin{aligned}
&2\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta_c\alpha K}\mathrm{sh}(\tfrac{1}{4}\beta_c(\alpha-\gamma)K)\Big[\beta_c\alpha J_0 - 4 + 4z\Big] \\
&\quad - zK(\alpha-\gamma)\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta_c\gamma K}\Big[1 + \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\beta_c\gamma K}\mathrm{ch}(\tfrac{1}{2}\beta_c\alpha K)\Big] = 0
\end{aligned}
\tag{6.13}
$$

Вирази для ентропії та теплоємності не приводимо через громіздкість.

7. Результати числових розрахунків

В даному розділі зупинимося на результатах числових розрахунків (при $\Gamma^z \to 0$, $\Gamma^x \to 0$) термодинамічних характеристик XXZ–моделі.

Зауважимо, що в даному розділі використовуватимемо позначення для відносних величин:

$$
t = 4\tfrac{k_BT}{zK} \ ; \qquad m^z = 2\langle S^z\rangle \ ; \qquad m^x = 2\langle S^x\rangle \ ;
$$
$$
s = \tfrac{1}{k_BT}S \ ; \qquad c = \tfrac{1}{k_BT}C \ .
$$

Зупинимося спочатку коротко на випадку одновимірної моделі ($z = 2$) при $J_0 = 0$. На рисунках 3 (a), (c), (e) приведено температурні залежності оберенної сприйнятливості χ^{-1}, ентропії s, та теплоємності c отриманих в НДК при $\gamma = 1$ $\alpha \in [0;1]$. При $\alpha \to 1$ в низькотемпературній області для s в НДК отримуються якісно невірні результати ($s(t=0) > 0$). На рисунках 3 (b), (d), (f) приведені температурні залежності χ^{-1}, s, c отримані в НДК при $\alpha = 1$ $\gamma \in [0;1]$. Отримані результати для s при $\gamma \in [0;1]$ та для χ^{-1} при $\gamma \in [0;\gamma_k]$ ($\gamma_k \to 1$) в низькотемпературній області є якісно невірними. Зокрема при $\gamma \to 1$ $s(t=0) \neq 0$. При $\gamma < 1$ ентропія є від'ємною при низьких температурах. На рисунку 4 приведено результати для моделі Гейзенберга та XY–моделі отримані різними методами.

Розглянемо тепер коротко результати отримані в НДК для одновимірної моделі ($z = 2$) при $J_0 > 0$ і для двовимірної та тривимірної моделей ($z = 3, 4, 6$) при $J_0 \geq 0$. Зупинимося спочатку на випадку $\gamma = 1$, при $\alpha \in [0;1]$. На рисунку 5 приведено фазові діаграми для різних граток при різних значеннях далекосяжної взаємодії J_0. Зауважимо, що для $z = 4$, $J_0 = 0$, $\alpha = 1$ НДК, на відміну від НМП, не передбачає фазового переходу. На рисунках 6 – 9 приведені температурні залежності параметра порядку m^z, оберненої сприйнятливості χ^{-1}, ентропії s, та теплоємності c для квадратної і кубічної

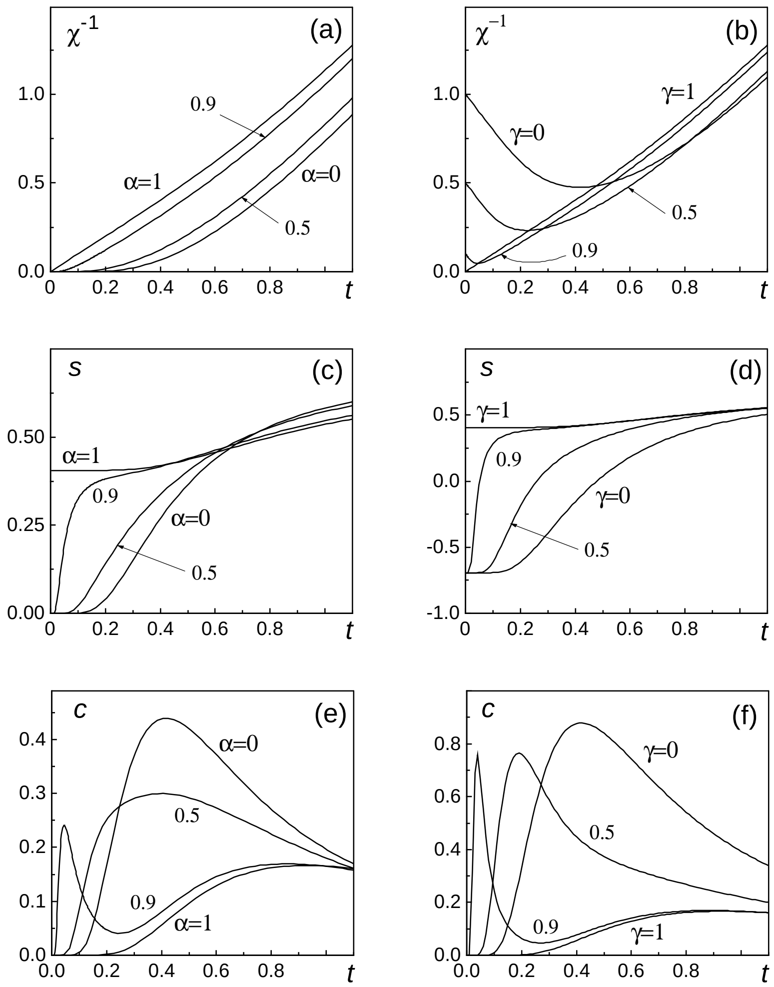

Рис. 3: Температурні залежності оберненої статичної сприйнятливості χ^{-1}, ентропії $s = \frac{1}{k_B N} S$, теплоємності $c = \frac{1}{k_B N} C$ для $z = 2$, $J_0 = 0$ при різних значеннях параметра анізотропії:
(a), (c), (e) – $\gamma = 1$, $\alpha = 0.0, 0.5, 0.9, 1.0$;
(b), (d), (f) – $\alpha = 1$, $\gamma = 0.0, 0.5, 0.9, 1.0$.

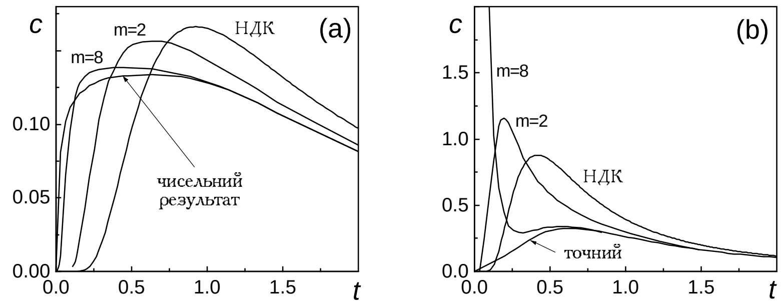

Рис. 4: Температурні залежності теплоємності $c = \frac{1}{k_B N} C$ при $z = 2$, $J_0 = 0$, для моделі Гейзенберга (a) та для XY–моделі (b). Результати НДК, чисельний результат Боннера і Фішера (див. [30]), результати чисельного методу на основі перетворення (Suzuki–Trotter formula) одновимірної моделі до двовимірної ($N \times m$) моделі Ізінга [30].

граток. Отримані результати є якісно вірними, за вийнятком випадку $J_0 \to 0$, $\alpha \to 1$ в низькотемпературній області (для $z = 4, 6$ $s(t = 0) > 0$; для $z = 6$ $m^z(t = 0) < 1$, χ^{-1} зростає з ростом температури).

При $\alpha = 1$, $\gamma \in [0; 1]$ (для довільних граток при $J_0 \geq 0$ і для $z = 2$ при $J_0 > 0$) результати отримані в НДК є якісно невірними в низькотемпературній області (див. рисунки 10 – 12). Дане наближення передбачає низькотемпературний фазовий перехід (за виключенням випадку $\gamma \to 1$ при $J_0 > 0$), більше того, ентропія в цьому регіоні є від'ємною.

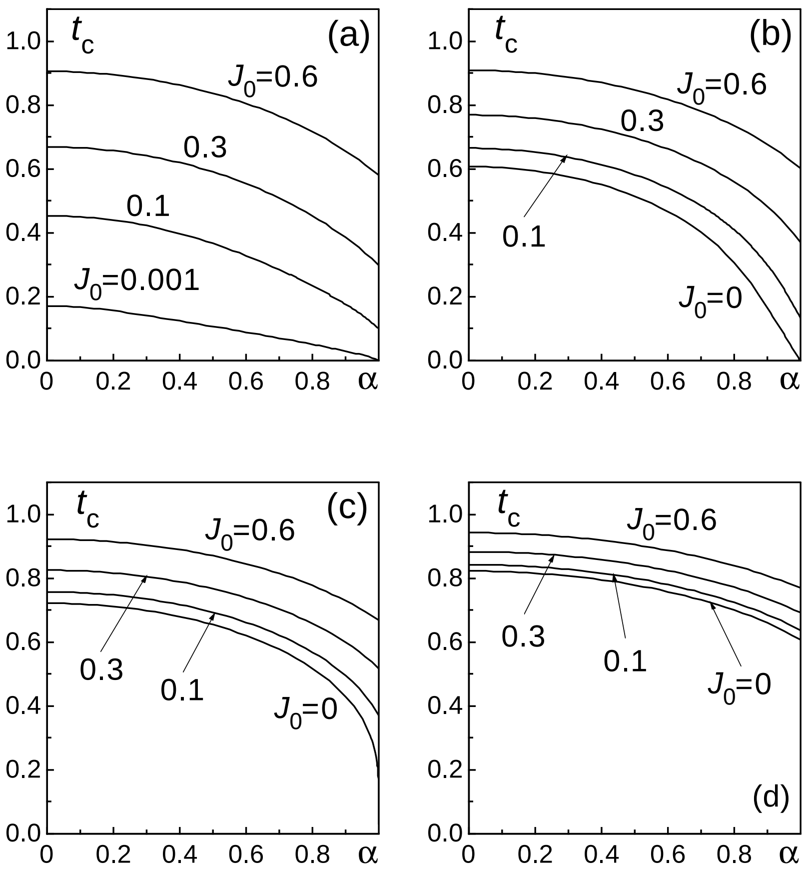

Рис. 5: Фазові діаграми при різних значеннях далекосяжної взаємодії J_0 ($\gamma = 1$) для різних граток: (a) $z = 2$; (b) $z = 3$; (c) $z = 4$; (d) $z = 6$.

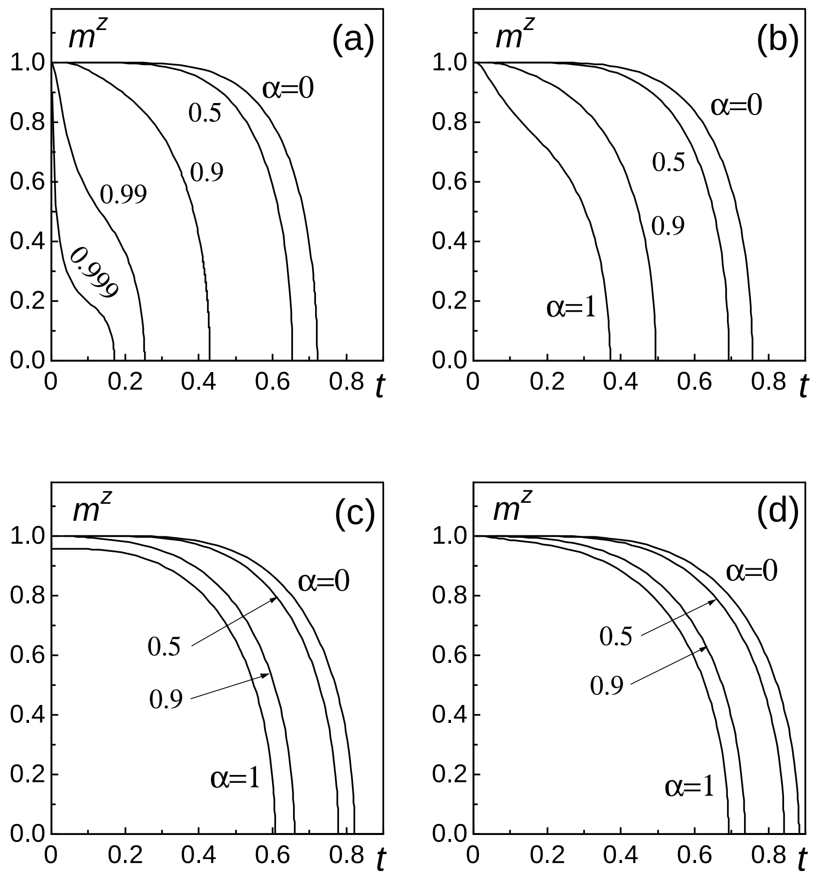

Рис. 6: Температурні залежності параметра $m^z = 2\langle S^z\rangle$ при різних значеннях параметра анізотропії α ($\gamma = 1$) для: (a) – $z = 4$, $J_0 = 0$; (b) – $z = 4$, $J_0 = 0.1$; (c) – $z = 6$, $J_0 = 0$; (d) – $z = 6$, $J_0 = 0.3$.

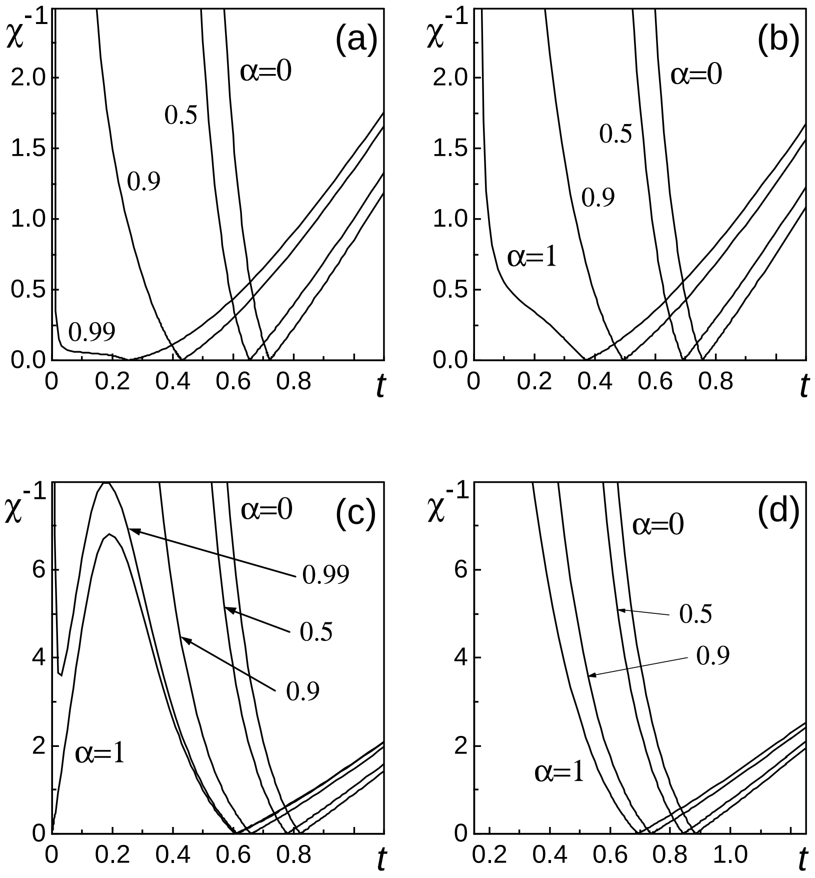

Рис. 7: Температурні залежності оберненої статичної сприйнятливості χ^{-1} при різних значеннях параметра анізотропії α $(\gamma = 1)$ для: (a) – $z = 4$, $J_0 = 0$;
(b) – $z = 4$, $J_0 = 0.1$; (c) – $z = 6$, $J_0 = 0$; (d) – $z = 6$, $J_0 = 0.3$.

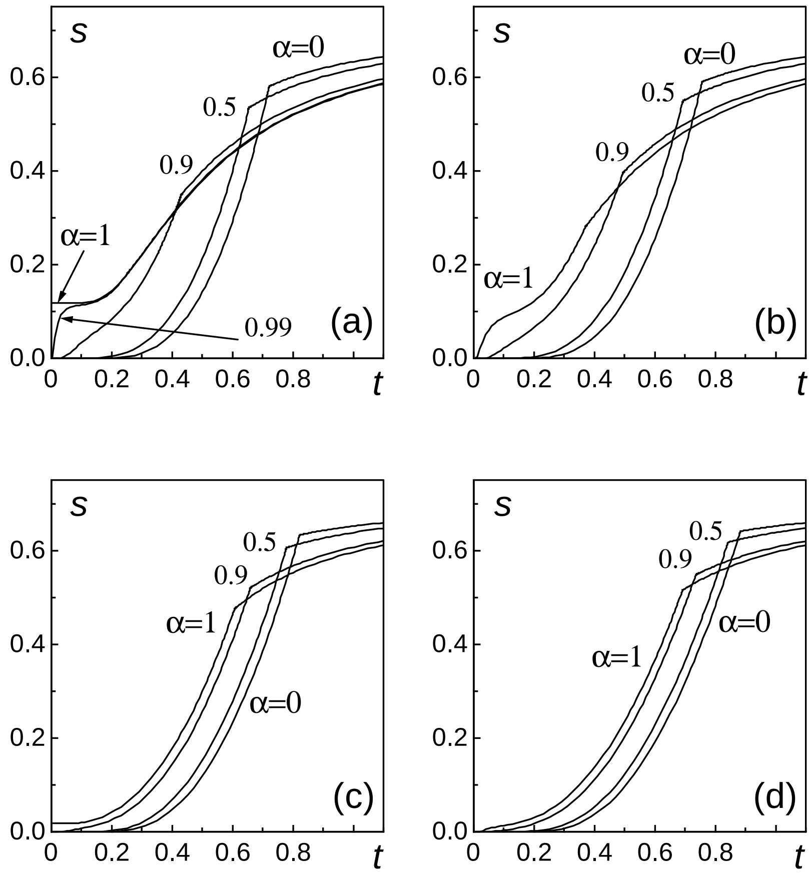

Рис. 8: Температурні залежності ентропії $s = \frac{1}{k_B N} S$ при різних значеннях параметра анізотропії α $(\gamma = 1)$ для: (a) – $z = 4$, $J_0 = 0$; (b) – $z = 4$, $J_0 = 0.1$; (c) – $z = 6$, $J_0 = 0$; (d) – $z = 6$, $J_0 = 0.3$.

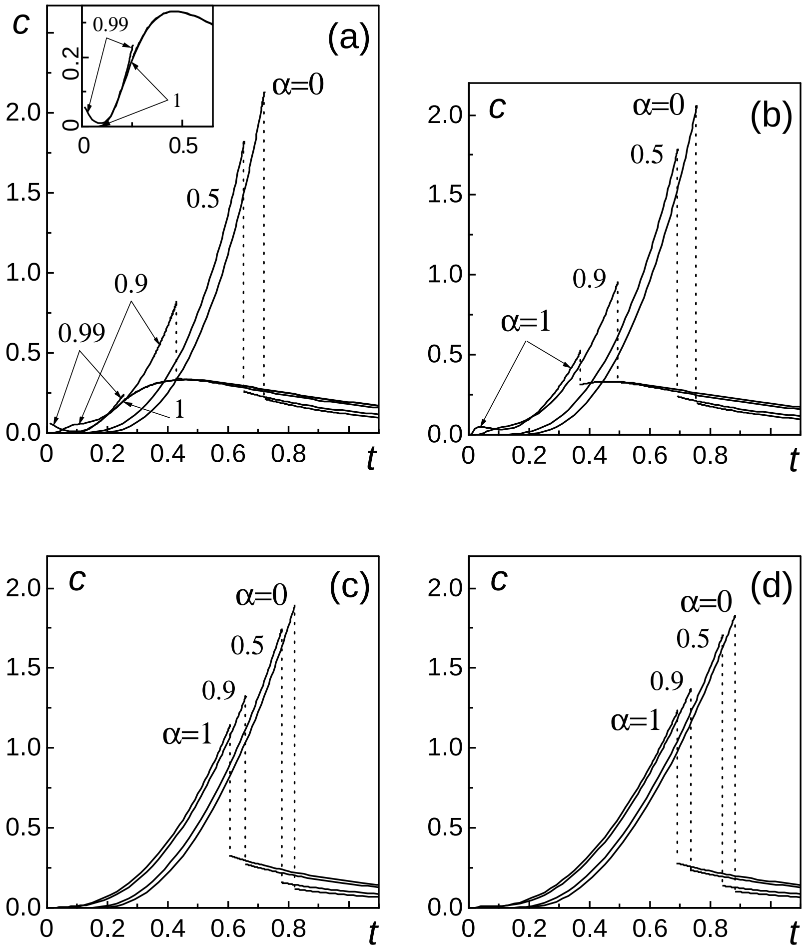

Рис. 9: Температурні залежності теплоємності $c = \frac{1}{k_B N} C$ при різних значеннях параметра анізотропії α ($\gamma = 1$) для: (a) – $z = 4$, $J_0 = 0$; (b) – $z = 4$, $J_0 = 0.1$; (c) – $z = 6$, $J_0 = 0$; (d) – $z = 6$, $J_0 = 0.3$.

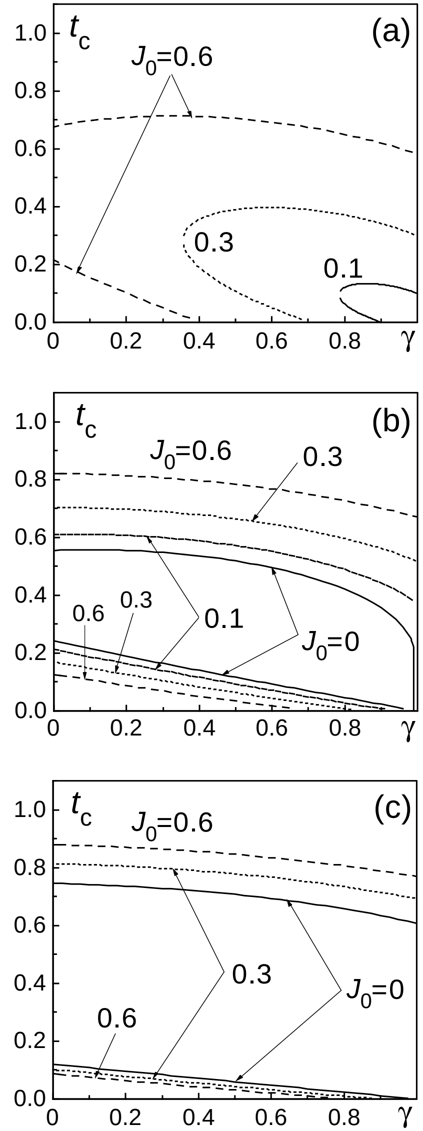

Рис. 10: Фазові діаграми при різних значеннях далекосяжної взаємодії J_0 ($\alpha = 1$) для різних граток: (a) $z = 2$; (b) $z = 4$; (c) $z = 6$.

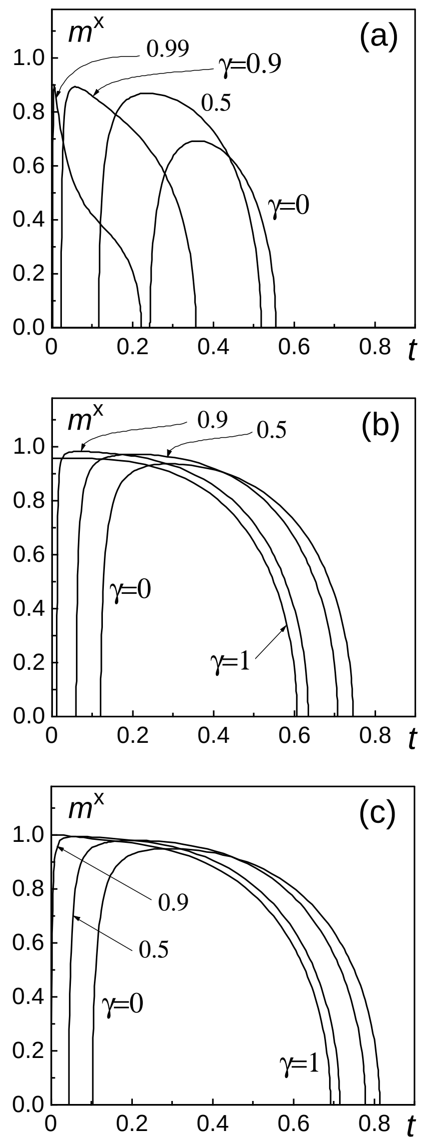

Рис. 11: Температурні залежності параметра $m^x = 2\langle S^x \rangle$ при різних значеннях параметра анізотропії γ ($\alpha = 1$) для: (a) – $z = 4$, $J_0 = 0$; (b) – $z = 6$, $J_0 = 0$; (c) – $z = 6$, $J_0 = 0.3$.

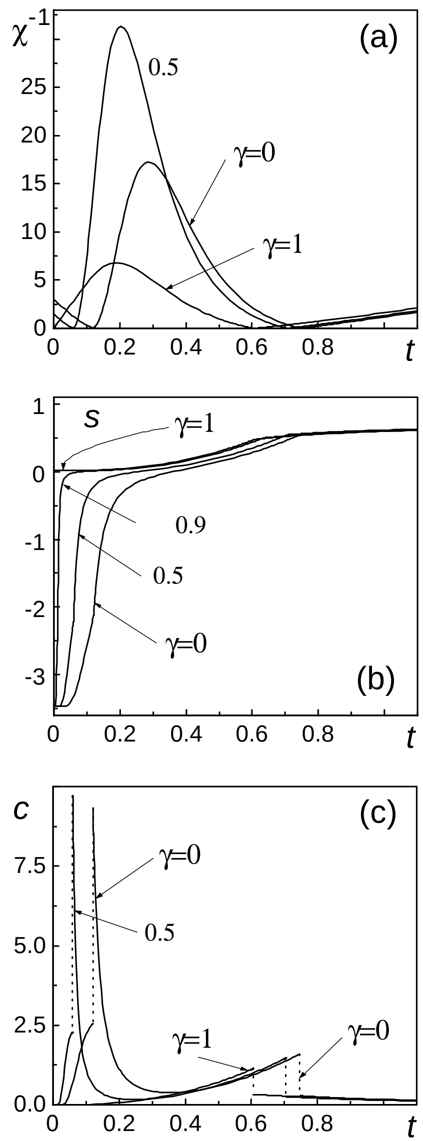

Рис. 12: Температурні залежності оберненої статичної сприйнятливості χ^{-1}, ентропії $s = \frac{1}{k_B N} S$, теплоємності $c = \frac{1}{k_B N} C$ для $z = 6$, $J_0 = 0$ ($\alpha = 1$) при різних значеннях параметра анізотропії γ.

Література

[1] Вакс В.Г., Ларкин А.И., Пикин С.А. Термодинамика идеального ферромагнетика. // ЖЭТФ, 1967, т. 53, вып. 1, с. 281-299.

[2] Вакс В.Г., Ларкин А.И., Пикин С.А. Спиновые волны и корреляционные функции в ферромагнетике. // ЖЭТФ, 1967, т. 53, вып. 3, с. 1089-1106.

[3] Изюмов Ю.А., Кассан-оглы Ф.А., Скрябин Ю.Н. Полевые методы в теории ферромагнетизма.- М.: Наука, 1974, 224с.

[4] Барьяхтар В.Г., Криворучко В.Н., Яблонский Д.А. Функции Грина в теории магнетизма.- Киев: Наукова думка, 1984, 336с.

[5] Смарт Дж. Эффективное поле в теории магнетизма.- М.: Наука, 1968, 271с.

[6] Strieb B., Callen H.B. Cluster expansion for the Heisenberg ferromagnet. // Phys.Rev., 1963, vol. 130, No 5, p. 1798-1808 .

[7] Blinc R., Svetina S. Cluster approximation for order-disorder-type hydrogen-bounded ferroelectrics. I. Small cluster. // Phys.Rev., 1966, vol. 147, No 2, p. 423-429.

[8] Blinc R., Svetina S. Cluster approximation for order-disorder-type hydrogen-bounded ferroelectrics. II. Application to KH_2PO_4. // Phys.Rev., 1966 vol. 147, No 2, 430-438.

[9] Вакс В.Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. – М.: Наука, 1973, 328с.

[10] Vaks V.S., Zein N.E., Strukov B.A. On the theory of ferroelectric KH_2PO_4 - KDP type. // Phys.Stat.Sol.(a), 1975, vol. 30, No 2, p. 801-819.

[11] Левицкий Р.Р., Кориневский Н.А., Стасюк И.В. Теория протонного упорядочения в сегнето- и антисегнетоэлектриках типа ортофосфатов. // УФЖ, 1974, т. 19, No 8, с. 1289-1297.

[12] Levitsky R.R., Korinevsky N.A., Stasjuk I.V. Distribution function KD_2PO_4 and $ND_4D_2PO_4$. // Phys.Stat. Sol.(b), 1978, vol. 88, No 1, p. 51-63.

[13] Вакс В.Г., Зиненко В.И., Шнейдер В.Е. Микроскопические теории структурных фазовых переходов типа порядок-беспорядок в кристаллах. // УФН, 1983, т. 141, вып. 4, с. 629-673.

[14] Levitsky R.R., Grigas J., Zachek I.R., Mits Ye.V., Papronty W. Relaxational dynamics of quasi-one-dimensional CsD_2PO_4-type ferroelectrics. // Ferroelectrics, 1985, vol. 64, No 1-3, p. 1-16.

[15] Kubo R. Generalized cumulant expansion method. // J. Phys. Soc. Jpn., 1962, vol. 17, No 7, p. 1100-1120.

[16] Сороков С.І., Левицький Р.Р., Баран О.Р. Дослідження моделі Ізінга в методі кластерних розвинень. // Львів, 1992, 47с. (Препринт./АН України. Ін-т фіз. конденс. систем; ІФКС-92-18У).

[17] Юхновский И.Р. Метод смещений и коллективных переменных. // Киев, 1971, 82с. (Препринт./АН УССР. Ин-т теор. физ.; ИТФ-71-26Р).

[18] Ваврух М.В. n-частичные корреляционные функции взаимодействующего электронного газа. // ТМФ, 1982, vol. 50, No 3, с. 438-449.

[19] Ваврух М.В., Крохмальский Т.Е. Эффективные многочастичные взаимодействия ионов в металлах. // ТМФ, 1982, vol. 51, No 1, с. 130-141.

[20] Крохмальский Т.Е. Учет многочастичных нелокальных электрон-ионных взаимодействий в теории простых металлов. // Киев, 1986, 32с. (Препринт./АН УССР. Ин-т теор. физ.; ИТФ-86-158Р).

[21] Юхновский И.Р. Выделение системы отсчета в методе коллективных переменных. // Киев, 1974, 35с. (Препринт./АН УССР. Ин-т теор. физ.; ИТФ-74-149Р).

[22] Юхновский И.Р., Головко М.Ф. Статистическая теория классических равновесных систем. Киев: Наукова думка, 1980, 372с.

[23] Юхновский И.Р., Левицкий Р.Р., Сороков С.И. Теория квазиспиновых систем с базисным учетом короткодействующих взаимодействий. Разложение по обратному радиусу дальнодействующего взаимодействия. // Киев, 1986, 49с. (Препринт./АН УССР. Ин-т теор. физ.; ИТФ-86-132Р).

[24] Юхновский И.Р., Левицкий Р.Р., Сороков С.И. Теория квазиспиновых систем с базисным учетом короткодействующих взаимодействий. Суммирование приводимых диаграмм. // Киев, 1986, 50с. (Препринт./АН УССР. Ин-т теор. физ.; ИТФ-86-154Р).

[25] Юхновский И.Р., Левицкий Р.Р., Сороков С.И. Термодинамика и функции распределения модели Изинга. Приближение двухчастичного кластера. // Киев, 1986, 33с. (Препринт./АН УССР. Ин-т теор. физ.; ИТФ-86-142Р).

[26] Левицкий Р.Р., Сороков С.И. Теория квазиспиновых систем с базисным учетом короткодействующих взаимодействий в приближении двухчастичного кластера. Применение к модели Гейзенберга. // Киев, 1987, 44с. (Препринт./АН УССР. Ин-т теор. физ.; ИТФ-87-28Р).

[27] Сороков С.І., Левицький Р.Р., Баран О.Р. Дослідження Ізінгівських моделей з довільним значенням спіна в наближенні двочастинкового кластера. Модель Блюма-Емері-Гріфітса. // УФЖ,

1996, т. 41, No 4, с. 490-500.

[28] Sorokov S.I., Levitskii R.R., Baran O.R. Two-particle cluster approximation for Ising type model with arbitrary value of spin. Correlation functions of Blume-Emery-Griffiths model // Cond. Matt. Phys., 1997, No 9, p. 57-87.

[29] Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма.- М.: Наука, 1975, 527с.

[30] Betsuyaku H. // Progress of Theoretical Physics, 1985, vol. 73, p. 319.

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/)

Роман Романович Левицький
Сергій Іванович Сороков
Остап Романович Баран
Ігор Миколайович Пиндзин

Термодинаміка XXZ–моделі в наближенні двочастинкового кластера

Роботу отримано 17 вересня 1997 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії модельних спінових систем

Виготовлено при ІФКС НАН України