

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-97-22U

Р.Р.Левицький, О.Р.Баран, С.І.Сороков

ДОСЛІДЖЕННЯ ІЗІНГІВСЬКИХ МОДЕЛЕЙ З ДОВІЛЬНИМ
ЗНАЧЕННЯМ СПІНА В НАБЛИЖЕННІ
ДВОЧАСТИНКОВОГО КЛАСТЕРА. КОРЕЛЯЦІЙНІ ФУНКЦІЇ
МОДЕЛІ БЛЮМА-ЕМЕРІ-ГРІФІТСА

Дослідження Ізінгівських моделей з довільним значенням спіна в наближенні двочастинкового кластера. Кореляційні функції моделі Блюма-Емері-Гріфйтса

Р.Р.Левицький, О.Р.Баран, С.І.Сороков

Анотація. В наближенні двочастинкового кластера досліджується Ізінгівська модель з довільним значенням спіна. Отримані вирази для парних кореляційних функцій в \vec{q} -просторі (у випадку гіперкубічних ґраток). Для моделі Блюма-Емері-Гріфйтса у випадках $K' = 0$, $D = 0$ (K' – біквадратична взаємодія, D – одноіонна анізотропія) та у випадку $D = -\frac{8}{3}zK'$ (квадрупольна модель) побудовані фазові діаграми і отримані температурні залежності термодинамічних характеристик та парних кореляційних функцій при $\vec{q} = 0$. У випадку простої кубічної ґратки для цієї моделі побудована проекція фазової діаграми на площину $(D - K')$. При різному наборі параметрів D та K' отримані температурні залежності унарних та парних кореляційних функцій (при $\vec{q} = 0$).

Investigation of Ising type model with arbitrary value of spin within two-particle cluster approximation. Correlation functions of Blume-Emery-Griffiths model

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

Abstract. The Ising model with an arbitrary value of spin is investigated within the two-particle cluster approximation. For this model on hypercubic lattices the expressions for the pair correlation functions in \vec{q} -space are obtained. For the Blume-Emery-Griffiths model in the cases $K' = 0$, $D = 0$ (K' - biquadratic interaction, D - single-ion anisotropy) and in the case $D = -\frac{8}{3}zK'$ (quadrupolar model) the phase diagrams are constructed and the temperature dependences of thermodynamical characteristics and pair correlation functions at $\vec{q} = 0$ are calculated. For this model on a simple cubic lattice a projection of the phase diagram on $(D - K')$ plane is constructed. The temperature dependences of single-site and pair correlation functions at $\vec{q} = 0$ are calculated at various values of parameters D and K' .

Подається в Condensed Matter Physics
Submitted to Condensed Matter Physics

© Інститут фізики конденсованих систем 1997
Institute for Condensed Matter Physics 1997

1. Вступ

При теоретичному дослідженні псевдоспінових систем велика увага приділяється ізінгівським моделям (ІМ), тобто системам, в гамільтоніан яких входить лише S^z -компонента оператора псевдоспіна. Це пов'язано як з відносною простотою проведення на їх основі наближених розрахунків та тестування наближених методів, так і з можливістю моделювання ними широкого класу реальних об'єктів. Так модель Блюма-Емері-Гріфітса (БЕГ), що відповідає ІМ з $\eta = 2$ (тут і далі $S^z = -\eta, -\eta + 2, \dots, \eta - 2, \eta$), була запропонована для дослідження фазових переходів (ФП) в суміші $He_3 - He_4$ [1]. В загальному вигляді ІМ з $\eta = 2$ містить в порівнянні з моделлю БЕГ також доданки типу $S_i^z (S_j^z)^2$ і використовується для опису впливу зовнішнього тиску на феромагнетика у випадку $\eta = 1$, для дослідження кристалів з феромагнітними (з $\eta = 1$) домішками, трикомпонентних немагнітних сплавів, двокомпонентних ґраткових рідин [2,3]. Згадаємо ІМ виявляється ефективною при дослідженні трикритичної поведінки анізотропних феромагнетиків $FeCl_2$ та DAG , структурного ФП в NH_4Cl і KH_2PO_4 під дією тиску [2,4].

Для матеріалів, які описуються псевдоспіновими моделями з суттєвими короткосяжними кореляціями, найбільш природнім багаточастинковим узагальненням наближення молекулярного поля (НМП) і значно точнішим в позакритичній області є кластерне наближення (КН) (див. [5–7]). В КН безмежну ґратку замінюють кластером з фіксованим числом псевдоспінів, а вплив відкинутих вузлів враховується дією на граничні вузли кластера єдиного зовнішнього варіаційного поля $\varphi(S)$. Вперше як метод кластерних розвинень (МКР), який дозволяє систематично знаходити поправки до вільної енергії, пов'язані із взаємодією кластерів, був послідовно сформульований в роботі [8].

Незважаючи на значну кількість робіт, в яких МКР використовується для розрахунку фізичних характеристик різноманітних матеріалів, нам відомо лише декілька, в яких розглядаються псевдоспінові моделі із спіном $\eta > 1$. Так в роботі [9] КН було застосовано до моделі Гейзенберга із спіном $\eta > 1$, але в ній не враховувалась залежність варіаційного поля φ від величини псевдоспіна, що навіть у випадку ІМ з $\eta = 2$ приводить для низькорозмірних систем до якісно невірних результатів [3]. В роботі [10], в якій розглядається модель БЕГ, хоча і враховано залежність $\varphi(S)$, але коефіцієнти розкладу варіаційного поля φ по степенях псевдоспіна ($\varphi(S) = \varphi^{(1)} + \varphi^{(2)}S$) покладаються рівними з точністю до констант величинам $\langle S \rangle, \langle S^2 \rangle$,

що дає близькі до НМП результати.

Для дослідження термодинамічних властивостей моделі БЕГ широко використовувались і інші наближені методи. Зокрема, є цілий ряд робіт, в яких, отримані на основі тотожностей Каллена, ланцюжки рівнянь замикають, використовуючи найпростіше розщеплення $\langle S_1 S_2 \dots S_k \rangle \approx \langle S_1 \rangle \langle S_2 \rangle \dots \langle S_k \rangle$ [11–15]. Відомо [16], що у випадку $\eta = 1$ отримана в подібному наближенні температура ФП (T_c) більше відрізняється від результатів числових методів, ніж T_c , яку дає перший порядок КН при розвиненні по двочастинковому кластеру. Останнє наближення відповідає наближенню двочастинкового кластера (НДК). В роботі [17] для дослідження моделі БЕГ з довільними значеннями одноіонної анізотропії та біквадратичної взаємодії використовують наближення константи зв'язку (результати даного наближення відповідають результатам НДК). Побудована тривимірна фазова діаграма і отримані температурні залежності дипольного та квадрупольного моментів для певних значень параметрів гамільтоніану. В роботі [18] використовуючи наближення Бете (результати даного наближення також узгоджуються з результатами НДК) досліджують модель БЕГ з довільними значеннями одноіонної анізотропії та біквадратичної взаємодії. Особлива увага приділяється випадку антиферомагнітного впорядкування. Отримані результати порівнюються з результатами моделювання Монте Карло. Важливими є також результати дослідження моделі БЕГ в рамках методу високотемпературних розвинень [19] і методом Монте Карло [20,21]. Зауважимо, що у всіх відомих нам роботах по ІМ з $\eta > 1$ вивчаються лише термодинамічні властивості.

Метою даної роботи є дослідження в наближенні двочастинкового кластера термодинамічних властивостей і парних кореляційних функцій (КФ) моделі БЕГ.

2. Постановка задачі

Будемо розглядати псевдоспінові системи з $S = S^z = (-\eta, -\eta + 2, \dots, \eta - 2, \eta)$, які описуються гамільтоніаном

$$\mathcal{H}(\{h^{(i)}\}) = -\beta H = \sum_{n=1}^{\eta} \sum_{i=1}^N h_i^{(n)} S_i^n + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\eta} \sum_{m=1}^{\eta} \left[\sum_{i,\delta} K^{(nm)} S_i^n S_{i+\delta}^m + \sum_{i,j} J_{ij}^{(nm)} S_i^n S_j^m \right]. \quad (2.1)$$

Тут $K^{(nm)}$ - короткосяжна, $J_{ij}^{(nm)}$ - далекосяжна взаємодії, $\mathcal{H}(\{h^{(\cdot)}\})$ означає, що \mathcal{H} є функцією від $(h_1^{(1)}, \dots, h_N^{(1)}, \dots, h_1^{(\eta)}, \dots, h_N^{(\eta)})$. Зауважимо, що множник $\beta = (k_B T)^{-1}$ будемо виділяти явно (його містять $h_i^{(n)}$, $K^{(nm)}$, $J_{ij}^{(nm)}$) лише в ряді кінцевих співвідношень. Як частинний випадок будемо розглядати модель Блюма-Емері-Гріфітса ($\eta = 2$) з далекосяжними взаємодіями.

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N [\Gamma_i S_i + D_i S_i^2] + \frac{1}{2} \sum_{i,\delta} [K S_i S_{i+\delta} + K' S_i^2 S_{i+\delta}^2] + \frac{1}{2} \sum_{i,j} [J_{ij} S_i S_j + J'_{ij} S_i^2 S_j^2] \quad (2.2)$$

Тут Γ_i - зовнішнє поле, D_i - одноіонна анізотропія, K - білінійна, K' - біквадратична короткосяжні взаємодії, J_{ij} - білінійна, J'_{ij} - біквадратична далекосяжні взаємодії.

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

$$\mathcal{H}(\{h^{(\cdot)}\}) = {}^k \mathcal{H}(\{\mathfrak{a}^{(\cdot)}\}) - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\eta} \sum_{m=1}^{\eta} \sum_{i,j} J_{ij}^{(nm)} \langle S_i^n \rangle \langle S_j^m \rangle. \quad (2.3)$$

Тут використано позначення для базисного гамільтоніану

$${}^k \mathcal{H}(\{\mathfrak{a}^{(\cdot)}\}) = \sum_{n=1}^{\eta} \sum_{i=1}^N \mathfrak{a}_i^{(n)} S_i^n + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\eta} \sum_{m=1}^{\eta} \sum_{i,\delta} K^{(nm)} S_i^n S_{i+\delta}^m, \quad (2.4)$$

$$\mathfrak{a}_i^{(n)} = h_i^{(n)} + \sum_{m=1}^{\eta} \sum_{j=1}^N J_{ij}^{(nm)} \langle S_j^m \rangle. \quad (2.5)$$

Для $\mathcal{F}(\{h^{(\cdot)}\})$ -функції (логарифма статистичної суми) в НМП по далекосяжних взаємодіях на основі (2.3) отримуємо:

$$\mathcal{F}(\{h^{(\cdot)}\}) = \ln \text{Sp}_{\{S\}} e^{\mathcal{H}} = {}^k \mathcal{F}(\{\mathfrak{a}^{(\cdot)}\}) - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\eta} \sum_{m=1}^{\eta} \sum_{i,j} J_{ij}^{(nm)} \langle S_i^n \rangle \langle S_j^m \rangle, \quad (2.6)$$

де ${}^k \mathcal{F}(\{\mathfrak{a}^{(\cdot)}\})$ -функція - логарифм статистичної суми базисної системи (2.4).

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

$$\langle (S_{i_1}^{n_1})^{\nu_1} \dots (S_{i_k}^{n_k})^{\nu_k} \rangle^c = \frac{\delta^{\nu_1}}{\delta(h_{i_1}^{(n_1)})^{\nu_1}} \dots \frac{\delta^{\nu_k}}{\delta(h_{i_k}^{(n_k)})^{\nu_k}} \mathcal{F}(\{h^{(\cdot)}\}). \quad (2.7)$$

А КФ базисної моделі -

$${}^k \langle (S_{i_1}^{n_1})^{\nu_1} \dots (S_{i_k}^{n_k})^{\nu_k} \rangle^c = \frac{\delta^{\nu_1}}{\delta(\mathfrak{a}_{i_1}^{(n_1)})^{\nu_1}} \dots \frac{\delta^{\nu_k}}{\delta(\mathfrak{a}_{i_k}^{(n_k)})^{\nu_k}} {}^k \mathcal{F}(\{\mathfrak{a}^{(\cdot)}\}). \quad (2.8)$$

Виходячи з вигляду \mathcal{F} -функції (2.6), легко отримати співвідношення між унарними КФ базисної моделі (2.4) та повної моделі в НМП по далекосяжних взаємодіях (2.3)

$$\langle S_i^n \rangle = \frac{\delta}{\delta(h_i^{(n)})} \mathcal{F}(\{h^{(\cdot)}\}) = \frac{\delta}{\delta(\mathfrak{a}_i^{(n)})} {}^k \mathcal{F}(\{\mathfrak{a}^{(\cdot)}\}) = {}^k \langle S_i^n \rangle. \quad (2.9)$$

Співвідношення між парними КФ для простоти приведемо лише для моделі БЕГ (2.2). Приймаючи до уваги (2.9), ($n = 1, 2$; $J = J^{(11)}$, $J' = J^{(22)}$, $J^{(12)} = J^{(21)} = 0$), отримуються співвідношення між КФ $\langle S_i^n S_j^m \rangle^c$ та ${}^k \langle S_i^n S_j^m \rangle^c$ [3]. Перейшовши в цих співвідношеннях до матричної форми по індексах i, j , та здійснивши Фур'є-перехід, отримаємо систему чотирьох рівнянь, яка пов'язує $\langle S^n S^m \rangle_{\vec{q}}^c$ та ${}^k \langle S^n S^m \rangle_{\vec{q}}^c$. Цю систему рівнянь зручно записати у матричній формі

$$\hat{b}(\vec{q}) = {}^k \hat{b}(\vec{q}) + {}^k \hat{b}(\vec{q}) \begin{pmatrix} J_{\vec{q}} & 0 \\ 0 & J'_{\vec{q}} \end{pmatrix} \hat{b}(\vec{q}), \quad (2.10)$$

$$\hat{b}(\vec{q}) = \begin{pmatrix} \langle SS \rangle_{\vec{q}}^c & \langle SS^2 \rangle_{\vec{q}}^c \\ \langle S^2 S \rangle_{\vec{q}}^c & \langle S^2 S^2 \rangle_{\vec{q}}^c \end{pmatrix}; \quad {}^k \hat{b}(\vec{q}) = \begin{pmatrix} {}^k \langle SS \rangle_{\vec{q}}^c & {}^k \langle SS^2 \rangle_{\vec{q}}^c \\ {}^k \langle S^2 S \rangle_{\vec{q}}^c & {}^k \langle S^2 S^2 \rangle_{\vec{q}}^c \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

З матричного рівняння (2.10) легко отримуються вирази для парних КФ моделі БЕГ через парні КФ базисної моделі при врахуванні далекосяжних взаємодій в НМП [3].

3. Наближення двочастинкового кластера по короткосяжних взаємодіях

В даному розділі ми розглянемо псевдоспінові системи, які описуються гамільтоніаном (2.4) (базисна задача). Проведемо кластерне розвинення при розбитті ґратки на двочастинкові кластери [22].

Позначимо через $\sum_{n=1}^{\eta} r \varphi_i^{(n)} S_i^n$ 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 ґратки на двочастинкові кластери діє z полів (z - число найближчих сусідів) з боку кластерів, що містять даний вузол. Перейдемо від вузольного до кластерного сумування [22].

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{i,\delta} K^{(nm)} S_i^n S_{i+\delta}^m &= \sum_{(1,2)} K^{(nm)} S_1^n S_2^m ; \\ \sum_i \sum_{r \in \pi_i} r \varphi_i^{(n)} S_i^n &= \sum_{(1,2)} \left({}^2\varphi_1^{(n)} S_1^n + {}^1\varphi_2^{(n)} S_2^n \right) \end{aligned} \quad (3.1)$$

Після тотожного перетворення з врахуванням (3.1) базисний гамільтоніан (2.4) матиме вигляд:

$${}^k\mathcal{H}(\{\mathfrak{a}^{(\cdot)}\}, \{\varphi^{(\cdot)}\}) = \sum_1 \mathcal{H}_1(\{\tilde{\mathfrak{a}}_1^{(\cdot)}\}) + \sum_{(1,2)} U_{12} , \quad (3.2)$$

причому

$$\mathcal{H}_1(\{\tilde{\mathfrak{a}}_1^{(\cdot)}\}) = \sum_{n=1}^{\eta} \tilde{\mathfrak{a}}_1^{(n)} S_1^n ; \quad \tilde{\mathfrak{a}}_1^{(n)} = \mathfrak{a}_1^{(n)} + \sum_{r \in \pi_1} r \varphi_1^{(n)} , \quad (3.3)$$

$$U_{12} = \sum_{n=1}^{\eta} \left(-{}^2\varphi_1^{(n)} S_1^n - {}^1\varphi_2^{(n)} S_2^n + \sum_{m=1}^{\eta} K^{(nm)} S_1^n S_2^m \right) . \quad (3.4)$$

$\mathcal{H}_1(\{\tilde{\mathfrak{a}}_1^{(\cdot)}\})$ означає, що $\mathcal{H}_1 \in$ функцію $(\tilde{\mathfrak{a}}_1^{(1)}, \dots, \tilde{\mathfrak{a}}_1^{(\eta)})$.

Для ${}^k\mathcal{F}(\{\mathfrak{a}^{(\cdot)}\}, \{\varphi^{(\cdot)}\})$ -функції будемо мати

$$\begin{aligned} {}^k\mathcal{F}(\{\mathfrak{a}^{(\cdot)}\}, \{\varphi^{(\cdot)}\}) &= \ln \text{Sp}_{\{S\}} \exp \left[{}^k\mathcal{H}(\{\mathfrak{a}^{(\cdot)}\}, \{\varphi^{(\cdot)}\}) \right] = \\ &= \sum_1 F_1(\{\tilde{\mathfrak{a}}_1^{(\cdot)}\}) + \ln \langle \exp(\sum_{(1,2)} U_{12}) \rangle_{\rho_0} ; \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\langle A \rangle_{\rho_0} = \text{Sp}_{\{S\}}(\rho_0(\{S\}) \cdot A) ; \quad (3.6)$$

$$\rho_0(\{S\}) = \prod_1 \rho_1(S_1) = \prod_1 \frac{\exp(\mathcal{H}_1)}{Z_1} .$$

Тут використані позначення для одночастинкової F_1 -функції:

$$\begin{aligned} F_1(\{\tilde{\mathfrak{a}}_1^{(\cdot)}\}) &= \ln Z_1(\{\tilde{\mathfrak{a}}_1^{(\cdot)}\}) ; \\ Z_1(\{\tilde{\mathfrak{a}}_1^{(\cdot)}\}) &= \text{Sp}_{S_1} \exp \left[\mathcal{H}_1(\{\tilde{\mathfrak{a}}_1^{(\cdot)}\}) \right] . \end{aligned} \quad (3.7)$$

Обмежимося першим порядком кластерного розвинення [22], що відповідає наближенню двочастинкового кластера. Тоді ${}^k\mathcal{F}$ -функція запишеться у вигляді суми одно- та двочастинкових внутрішньо-кластерних F -функцій:

$$\begin{aligned} {}^k\mathcal{F}(\{\mathfrak{a}^{(\cdot)}\}, \{\varphi^{(\cdot)}\}) &= \sum_1 F_1(\{\tilde{\mathfrak{a}}_1^{(\cdot)}\}) + \sum_{(1,2)} \ln \langle \exp(U_{12}) \rangle_{\rho_0} = \\ &= (1-z) \sum_1 F_1(\{\tilde{\mathfrak{a}}_1^{(\cdot)}\}) + \frac{1}{2} \sum_{1,2} F_{12}(\{\tilde{\mathfrak{a}}_1^{(\cdot)}\}, \{\tilde{\mathfrak{a}}_2^{(\cdot)}\}) , \end{aligned} \quad (3.8)$$

причому двочастинкова F_{12} -функція має вигляд:

$$F_{12}(\{\tilde{\mathfrak{a}}_1^{(\cdot)}\}, \{\tilde{\mathfrak{a}}_2^{(\cdot)}\}) = \quad (3.9)$$

$$\ln Z_{12}(\{\tilde{\mathfrak{a}}_1^{(\cdot)}\}, \{\tilde{\mathfrak{a}}_2^{(\cdot)}\}) = \ln \text{Sp}_{S_1, S_2} \exp(\mathcal{H}_{12}) ,$$

$$\mathcal{H}_{12}(\{\tilde{\mathfrak{a}}_1^{(\cdot)}\}, \{\tilde{\mathfrak{a}}_2^{(\cdot)}\}) = \mathcal{H}_1(\{\tilde{\mathfrak{a}}_1^{(\cdot)}\}) + \mathcal{H}_2(\{\tilde{\mathfrak{a}}_2^{(\cdot)}\}) + U_{12} = \quad (3.10)$$

$$= \sum_{n=1}^{\eta} \left({}^2\tilde{\mathfrak{a}}_1^{(n)} S_1^n + {}^1\tilde{\mathfrak{a}}_2^{(n)} S_2^n + \sum_{m=1}^{\eta} K^{(nm)} S_1^n S_2^m \right) ,$$

$${}^1\tilde{\mathfrak{a}}_2^{(n)} = \tilde{\mathfrak{a}}_2^{(n)} - {}^1\varphi_2^{(n)} = \mathfrak{a}_2^{(n)} + \sum_{\substack{r \in \pi_2 \\ r \neq 1}} r \varphi_2^{(n)} . \quad (3.11)$$

Зупинимося тепер на дослідженні ${}^k\mathcal{F}$ -функції. Знайдемо спочатку рівняння для $\langle S_1^n \rangle = {}^k\langle S_1^n \rangle$ та для кластерних полів $r \varphi_1^{(n)}$, використовуючи методику запропоновану для випадку $\eta = 1$ [23]. На основі (2.8) та (2.9) отримаємо

$$\langle S_1^n \rangle = \frac{\partial {}^k\mathcal{F}}{\partial \mathfrak{a}_1^{(n)}} + \sum_i \sum_{r \in \pi_i} \sum_m \frac{\partial {}^k\mathcal{F}}{\partial r \varphi_i^{(m)}} \cdot \frac{\delta r \varphi_i^{(m)}}{\delta \mathfrak{a}_1^{(n)}} . \quad (3.12)$$

Виходячи з того, що ${}^k\mathcal{F}$ -функція (3.8) є сумою одночастинкових та двочастинкових F -функцій, та приймаючи до уваги позначення (3.3) та (3.11), отримаємо для частинних похідних від ${}^k\mathcal{F}$ -функції:

$$\frac{\partial {}^k\mathcal{F}}{\partial \mathfrak{a}_1^{(n)}} = (1-z) \cdot F_1\left(\frac{1}{n}\right) + \sum_{r \in \pi_1} F_{1r}\left(\frac{1}{n}\right) , \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial {}^k\mathcal{F}}{\partial r_1 \varphi_i^{(n)}} = (1-z) \cdot F_i\left(\frac{1}{n}\right) + \sum_{r \in \pi_i} F_{ir}\left(\frac{1}{n}\right) - F_{ir_1}\left(\frac{1}{n}\right) ; \quad (r_1 \in \pi_i) . \quad (3.14)$$

Тут введені позначення для частинних похідних від одно- та двочастинкових F -функцій:

$$F_i \left(\begin{matrix} \nu_1 & \nu_2 & \dots & \nu_k \\ n_1 & n_2 & \dots & n_k \end{matrix} \middle| \{\tilde{\mathfrak{a}}_i^{(l)}\} \right) = \frac{\partial^{\nu_1}}{\partial (\tilde{\mathfrak{a}}_i^{(n_1)})^{\nu_1}} \dots \frac{\partial^{\nu_k}}{\partial (\tilde{\mathfrak{a}}_i^{(n_k)})^{\nu_k}} F_i \left(\{\tilde{\mathfrak{a}}_i^{(l)}\} \right), \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} F_{ir} \left(\begin{matrix} \nu_1 & \nu_2 & \dots & \nu_k & \mu_1 & \mu_2 & \dots & \mu_l \\ n_1 & n_2 & \dots & n_k & m_1 & m_2 & \dots & m_l \end{matrix} \middle| \{r \tilde{\mathfrak{a}}_i^{(l)}\}, \{i \tilde{\mathfrak{a}}_r^{(l)}\} \right) = & \quad (3.16) \\ = \frac{\partial^{\nu_1}}{\partial (r \tilde{\mathfrak{a}}_i^{(n_1)})^{\nu_1}} \dots \frac{\partial^{\nu_k}}{\partial (r \tilde{\mathfrak{a}}_i^{(n_k)})^{\nu_k}} \times & \\ \times \frac{\partial^{\mu_1}}{\partial (i \tilde{\mathfrak{a}}_r^{(m_1)})^{\mu_1}} \dots \frac{\partial^{\mu_l}}{\partial (i \tilde{\mathfrak{a}}_r^{(m_l)})^{\mu_l}} F_{ir} \left(\{r \tilde{\mathfrak{a}}_i^{(l)}\}, \{i \tilde{\mathfrak{a}}_r^{(l)}\} \right), & \end{aligned}$$

які будемо називати відповідно одно- та двочастинковими внутрішньокластерними КФ. На основі співвідношень (3.12) та (3.13), (3.14), приймаючи до уваги умову екстремуму ${}^k \mathcal{F}$ -функції по $r \varphi_i^{(n)}$

$$\frac{\partial {}^k \mathcal{F}}{\partial r \varphi_i^{(n)}} = 0, \quad (3.17)$$

легко отримати систему $(z+1)\eta N$ рівнянь для $r \varphi_i^{(n)}$ та $\langle S_i^n \rangle$ ($n = 1, \dots, \eta$; $i = 1, \dots, N$), врахувавши при цьому ще і (2.9), (3.3), (3.11).

$$\langle S_1^n \rangle = F_1 \left(\begin{matrix} 1 \\ n \end{matrix} \middle| \{\tilde{\mathfrak{a}}_1^{(l)}\} \right) \quad (3.18)$$

$$F_1 \left(\begin{matrix} 1 \\ n \end{matrix} \middle| \{\tilde{\mathfrak{a}}_1^{(l)}\} \right) = F_{1r} \left(\begin{matrix} 1 \\ n \end{matrix} \middle| \{r \tilde{\mathfrak{a}}_1^{(l)}\}, \{1 \tilde{\mathfrak{a}}_r^{(l)}\} \right) \quad (3.19)$$

З іншого боку, враховуючи співвідношення (3.7), (3.9), а також означення одночастинкового та двочастинкового внутрішньокластерних середніх

$$\langle A \rangle_{\rho_1} = \text{Sp}_{S_1} [\rho_1(S_1) \cdot A]; \quad \langle A \rangle_{\rho_{1r}} = \text{Sp}_{S_1, S_r} [\rho_{1r}(S_1, S_r) \cdot A], \quad (3.20)$$

легко отримати для унарних внутрішньокластерних КФ співвідношення

$$F_1 \left(\begin{matrix} 1 \\ n \end{matrix} \right) = \langle S_1^n \rangle_{\rho_1}; \quad F_{1r} \left(\begin{matrix} 1 \\ n \end{matrix} \right) = \langle S_1^n \rangle_{\rho_{1r}}, \quad (3.21)$$

де усереднення проводиться по внутрішньокластерних одночастинковій та двочастинковій матрицях густини

$$\rho_1(S_1) = \frac{\exp \left[\mathcal{H}_1 \left(\{\tilde{\mathfrak{a}}_1^{(l)}\} \right) \right]}{Z_1 \left(\{\tilde{\mathfrak{a}}_1^{(l)}\} \right)}; \quad (3.22)$$

$$\rho_{1r}(S_1, S_r) = \frac{\exp \left[\mathcal{H}_{1r} \left(\{r \tilde{\mathfrak{a}}_1^{(l)}\}, \{1 \tilde{\mathfrak{a}}_r^{(l)}\} \right) \right]}{Z_{1r} \left(\{r \tilde{\mathfrak{a}}_1^{(l)}\}, \{1 \tilde{\mathfrak{a}}_r^{(l)}\} \right)}.$$

Тобто з умови екстремуму ${}^k \mathcal{F}$ -функції (3.17) ми отримали (див. систему рівнянь (3.18), (3.19)) $z\eta N$ рівнянь

$$\langle S_1^n \rangle_{\rho_1} = \langle S_1^n \rangle_{\rho_{1r}}, \quad (n=1, \dots, \eta). \quad (3.23)$$

Система $z\eta N$ рівнянь (3.23), як видно з означення середнього (3.20), еквівалентна $z\eta N$ незалежним співвідношенням між матрицями густини

$$\rho_1(S_1) = \text{Sp}_{S_r} [\rho_{1r}(S_1, S_r)], \quad S = (-\eta, -\eta + 2, \dots, \eta - 2, \eta) \quad (3.24)$$

(із $z(\eta+1)N$ співвідношень (3.24) незалежними є $z\eta N$, оскільки з явного вигляду $\rho_1(S_1)$, $\rho_{1r}(S_1, S_r)$ випливає тотожне виконання zN умов $\text{Sp}_{S_1} [\rho_1(S_1)] = \text{Sp}_{S_1, S_r} [\rho_{1r}(S_1, S_r)] = 1$). Отже, в НДК умова екстремуму ${}^k \mathcal{F}$ -функції (3.17) дає співвідношення (3.24) між внутрішньокластерними матрицями густини.

Зауважимо, що у випадку однорідних полів $h_i^{(n)}$ ($h_i^{(n)} = h^{(n)}$, $\langle S_i^n \rangle = \langle S^n \rangle$, $\mathfrak{a}_i^{(n)} = \mathfrak{a}^{(n)}$), тобто коли

$$r \tilde{\mathfrak{a}}_1^{(n)} = \tilde{\mathfrak{a}}^{(n)} = \mathfrak{a}^{(n)} + (z-1)\varphi^{(n)}; \quad \tilde{\mathfrak{a}}_1^{(n)} = \tilde{\mathfrak{a}}^{(n)} = \mathfrak{a}^{(n)} + z\varphi^{(n)}; \quad (3.25)$$

$$\mathfrak{a}^{(n)} = h^{(n)} + \sum_{m=1}^{\eta} J_0^{(nm)} \langle S^m \rangle; \quad J_0^{(nm)} = J^{(nm)}(\vec{q}=0),$$

(3.18), (3.19) являють собою систему 2η рівнянь для $\varphi^{(n)}$ та $\langle S^n \rangle$. При відсутності далекосяжних взаємодій ($J_0^{(nm)} = 0$) у випадку однорідного поля матимемо систему η рівнянь (3.19) для кластерних полів $\varphi^{(n)}$ та η виразів (3.18) для унарних КФ $\langle S^n \rangle$.

Зупинимось тепер коротко на запропонованому нами [3] методі розрахунку парних КФ базисної системи з довільним η , який ґрунтується на методиці, розробленій в роботі [23] для випадку $\eta = 1$. Виходячи з (2.8) та (3.18), легко отримати вираз для парних КФ базисної системи.

$${}^k b_{12}^{(nm)} = {}^k \langle S_1^n S_2^m \rangle^c = \sum_{k=1}^{\eta} F_1 \left(\begin{matrix} 1 & 1 \\ n & k \end{matrix} \right) \cdot \frac{\delta \tilde{\mathfrak{a}}_1^{(k)}}{\delta \mathfrak{a}_2^{(m)}} \quad (3.26)$$

Оскільки величини $F_1 \left(\begin{matrix} 1 & 1 \\ n & k \end{matrix} \right)$ для конкретних систем обчислюються безпосередньо, то для розрахунку парних КФ (3.26) нам необхідно отримати рівняння для $\delta \tilde{\mathfrak{a}}_1^{(k)} / \delta \mathfrak{a}_2^{(m)}$.

Введемо позначення:

$$\frac{\delta \tilde{\alpha}_1^{(k)}}{\delta \alpha_2^{(m)}} = \tilde{\alpha}_{12}(k|m) ; \quad \frac{\delta {}^r \tilde{\alpha}_1^{(k)}}{\delta \alpha_2^{(m)}} = {}^r \tilde{\alpha}_{12}(k|m) ; \quad (3.27)$$

$$\frac{\delta {}^r \varphi_1^{(k)}}{\delta \alpha_2^{(m)}} = {}^r \varphi_{12}(k|m) .$$

Взявши похідну $\delta / \delta \alpha_2^{(m)}$ від обох сторін рівняння (3.19) і враховуючи співвідношення

$${}^r \tilde{\alpha}_{12}(k|m) = \tilde{\alpha}_{12}(k|m) - {}^r \varphi_{12}(k|m) \quad (3.28)$$

(див. (3.11)), отримаємо рівняння

$$\sum_{k=1}^{\eta} F_1 \left(\begin{matrix} 1 \\ n \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 1 \\ k \end{matrix} \right) \cdot \tilde{\alpha}_{12}(k|m) = \sum_{k=1}^{\eta} F_{1r} \left(\begin{matrix} 1 \\ n \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 1 \\ k \end{matrix} \right) \left[\tilde{\alpha}_{12}(k|m) - {}^r \varphi_{12}(k|m) \right] +$$

$$+ \sum_{k=1}^{\eta} F_{1r} \left(\begin{matrix} 1 \\ n \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 1 \\ k \end{matrix} \right) \left[\tilde{\alpha}_{r2}(k|m) - {}^1 \varphi_{r2}(k|m) \right] . \quad (3.29)$$

Перейшовши в (3.29) до матричної форми та здійснивши ряд перетворень, отримаємо

$$\left[\widehat{F}_{1r}^{(20)} + \widehat{F}_1^{(2)} \right] \cdot \widehat{\alpha}_{12} + \widehat{F}_{1r}^{(11)} \cdot \widehat{\alpha}_{r2} = \widehat{F}_{1r}^{(20)} \cdot {}^r \widehat{\varphi}_{12} + \widehat{F}_{1r}^{(11)} \cdot {}^1 \widehat{\varphi}_{r2} . \quad (3.30)$$

Тут використані позначення

$$\widehat{F}_i^{(2)} = \begin{pmatrix} F_i \left(\begin{matrix} 2 \\ 1 \end{matrix} \right) & F_i \left(\begin{matrix} 1 \\ 1 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix} \right) & \dots & F_i \left(\begin{matrix} 1 \\ 1 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 1 \\ \eta \end{matrix} \right) \\ \vdots & & & \\ F_i \left(\begin{matrix} 1 \\ \eta \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 1 \\ 1 \end{matrix} \right) & F_i \left(\begin{matrix} 1 \\ \eta \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix} \right) & \dots & F_i \left(\begin{matrix} 2 \\ \eta \end{matrix} \right) \end{pmatrix}, \quad (3.31)$$

$$\widehat{F}_{ir}^{(20)} = \begin{pmatrix} F_{ir} \left(\begin{matrix} 2 \\ 1 \end{matrix} \right) & F_{ir} \left(\begin{matrix} 1 \\ 1 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix} \right) & \dots & F_{ir} \left(\begin{matrix} 1 \\ 1 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 1 \\ \eta \end{matrix} \right) \\ \vdots & & & \\ F_{ir} \left(\begin{matrix} 1 \\ \eta \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 1 \\ 1 \end{matrix} \right) & F_{ir} \left(\begin{matrix} 1 \\ \eta \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix} \right) & \dots & F_{ir} \left(\begin{matrix} 2 \\ \eta \end{matrix} \right) \end{pmatrix},$$

$$\widehat{F}_{ir}^{(11)} = \begin{pmatrix} F_{ir} \left(\begin{matrix} 1 \\ 1 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 1 \\ 1 \end{matrix} \right) & \dots & F_{ir} \left(\begin{matrix} 1 \\ 1 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 1 \\ \eta \end{matrix} \right) \\ \vdots & & \\ F_{ir} \left(\begin{matrix} 1 \\ \eta \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 1 \\ 1 \end{matrix} \right) & \dots & F_{ir} \left(\begin{matrix} 1 \\ \eta \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 1 \\ \eta \end{matrix} \right) \end{pmatrix},$$

$$\widehat{\alpha}_{ir} = \begin{pmatrix} \tilde{\alpha}_{ir}(1|1) & \dots & \tilde{\alpha}_{ir}(1|\eta) \\ \vdots & & \\ \tilde{\alpha}_{ir}(\eta|1) & \dots & \tilde{\alpha}_{ir}(\eta|\eta) \end{pmatrix}.$$

Зауважимо, що ми отримали рівняння (3.30) з невідомими ${}^r \widehat{\varphi}_{12}$, ${}^1 \widehat{\varphi}_{r2}$. Необхідно дописати для нього ще лінійно незалежне рівняння. Використовуючи співвідношення

$$F_1 \left(\begin{matrix} 2 \\ n \end{matrix} \right) = F_{1r} \left(\begin{matrix} 2 \\ n \end{matrix} \right) ; \quad F_1 \left(\begin{matrix} 1 \\ n \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 1 \\ m \end{matrix} \right) = F_{1r} \left(\begin{matrix} 1 \\ n \end{matrix} \middle| \begin{matrix} 1 \\ m \end{matrix} \right) , \quad (3.32)$$

які є наслідком співвідношень (3.24) між матрицями густини, та ввівши позначення

$$\widehat{f}_{1r} = \left[\widehat{F}_{1r}^{(20)} \right]^{-1} \cdot \widehat{F}_{1r}^{(11)} , \quad (3.33)$$

перепишемо співвідношення (3.30) у формі:

$${}^r \widehat{\varphi}_{12} + \widehat{f}_{1r} \cdot {}^1 \widehat{\varphi}_{r2} = \widehat{f}_{1r} \cdot \widehat{\alpha}_{r2} . \quad (3.34)$$

Здійснивши заміну індексів $r \rightleftharpoons 1$, отримаємо

$$\widehat{f}_{r1} \cdot {}^r \widehat{\varphi}_{12} + {}^1 \widehat{\varphi}_{r2} = \widehat{f}_{r1} \cdot \widehat{\alpha}_{12} . \quad (3.35)$$

Легко бачити, що (3.34), (3.35) являють собою систему рівнянь для ${}^r \widehat{\varphi}_{12}$, ${}^1 \widehat{\varphi}_{r2}$. Сумуючи в (3.34) по $r \in \pi_1$ та приймаючи до уваги

$$\sum_{r \in \pi_1} {}^r \widehat{\varphi}_{12} = \widehat{\alpha}_{12} - \widehat{\alpha}_{12} = \widehat{\alpha}_{12} - \delta_{12} \cdot \widehat{1} , \quad (3.36)$$

з системи рівнянь (3.34), (3.35) можна отримати замкнене рівняння для $\widehat{\alpha}_{12}$.

$$\widehat{Q}_{11} \cdot \widehat{\alpha}_{12} = \delta_{12} \cdot \widehat{1} + \sum_{r \in \pi_1} \widehat{f}_{1r} \cdot \widehat{d}_{r1r}^{-1} \cdot \widehat{\alpha}_{r2} \cdot \pi_{1r} \quad (3.37)$$

Тут використані позначення:

$$\widehat{Q}_{11} = \widehat{1} + \sum_{r \in \pi_1} \widehat{f}_{1r} \cdot \widehat{d}_{r1r}^{-1} \cdot \widehat{f}_{r1} ; \quad (3.38)$$

$$\widehat{d}_{r1r} = \widehat{1} - \widehat{f}_{r1} \cdot \widehat{f}_{1r} ; \quad \pi_{1r} = \begin{cases} 1, & r \in \pi_1 \\ 0, & r \notin \pi_1 \end{cases} .$$

Зупинимся тепер на розв'язуванні отриманого рівняння (3.37). У випадку однорідного поля мають місце співвідношення:

$$\widehat{\alpha}_{12} = \widehat{\alpha}_{(1-2)} ; \quad \widehat{f}_{1r} = \widehat{f}_{(1-r)} = \widehat{f} ; \quad (3.39)$$

$$\widehat{d}_{r1r} = \widehat{d}_{(1-r)} = \widehat{d} = \widehat{1} - \widehat{f}^2 .$$

Переходячи в (3.37) у випадку однорідного поля до Фур'є-представлення і розв'язуючи отримане рівняння, отримуємо для $\widehat{\mathfrak{a}}(\vec{q})$

$$\widehat{\mathfrak{a}}(\vec{q}) = \left[z \cdot \widehat{1} - (z-1) (\widehat{1} + \widehat{f}) + z (\widehat{1} - \widehat{f})^{-1} \cdot \widehat{f} \cdot \Theta(\vec{q}) \right]^{-1} \cdot (\widehat{1} + \widehat{f}), \quad (3.40)$$

де у випадку ґратки з гіперкубічною симетрією

$$\Theta(\vec{q}) = 1 - \frac{\pi(\vec{q})}{z} = \frac{2}{d} \sum_{i=1}^d \sin^2 \left(\frac{q_i \cdot a}{2} \right). \quad (3.41)$$

Тут $d = z/2$ - розмірність ґратки, $\pi(\vec{q})$ - Фур'є образ π_{1r} .

Перейшовши в (3.26) до матричного представлення і здійснивши перехід до \vec{q} -простору, враховуючи (3.40), отримуємо для парних КФ базисної системи

$${}^k \widehat{b}(\vec{q}) = \widehat{F}_1^{(2)} \cdot \widehat{\mathfrak{a}}(\vec{q}) = \frac{1}{z} \left[\left(\widehat{F}^{(+)} \right)^{-1} + \left(\frac{1}{z} - 1 \right) \left(\widehat{F}^{(2)} \right)^{-1} + \right. \quad (3.42)$$

$$\left. \left(\widehat{F}^{(+)} \right)^{-1} \left\{ \widehat{F}^{(2)} \cdot \left(\widehat{F}^{(-)} \right)^{-1} - \widehat{1} \right\} \Theta(\vec{q}) \right]^{-1},$$

де $\widehat{F}^{(+)} = \widehat{F}^{(2)} + \widehat{F}^{(11)}$, $\widehat{F}^{(-)} = \widehat{F}^{(2)} - \widehat{F}^{(11)}$.

4. Модель Блюма-Емері-Гріфітса

Зупинимся тепер на базисній моделі БЕГ ($\eta = 2$), яка описується гамільтоніаном

$${}^k \mathcal{H}(\{\mathfrak{a}\}, \{\mathfrak{a}'\}) = \beta \sum_{i=1}^N [\mathfrak{a}_i S_i + \mathfrak{a}'_i S_i^2] + \quad (4.1)$$

$$\frac{1}{2} \beta \sum_{i,\delta} [K S_i S_{i+\delta} + K' S_i^2 S_{i+\delta}^2].$$

Тут $\mathfrak{a}_i = \Gamma_i + \sum_{j=1}^N J_{ij} \langle S_j \rangle$, $\mathfrak{a}'_i = D_i + \sum_{j=1}^N J'_{ij} \langle S_j^2 \rangle$, Γ_i - зовнішнє поле, D_i - одноіонна анізотропія. Зауважимо, що тут і далі множник $\beta = (k_B T)^{-1}$ виділяємо явно.

На основі (3.3), (3.7) та (3.9), (3.10) отримуємо одно- та двочастинкові F -функції.

$$F_1(T, \tilde{\mathfrak{a}}_1, \tilde{\mathfrak{a}}'_1) = \ln \left(2 \exp(4\beta \tilde{\mathfrak{a}}'_1) \cdot \text{ch}(2\beta \tilde{\mathfrak{a}}_1) + 1 \right) \quad (4.2)$$

$$F_{12}(T, {}^2 \tilde{\mathfrak{a}}_1, {}^2 \tilde{\mathfrak{a}}'_1, {}^1 \tilde{\mathfrak{a}}_2, {}^1 \tilde{\mathfrak{a}}'_2) = \quad (4.3)$$

$$\ln \left\{ 2 \exp[4\beta({}^2 \tilde{\mathfrak{a}}'_1 + {}^1 \tilde{\mathfrak{a}}'_2 + 4K')] \left(\exp(4\beta K) \cdot \text{ch}[2\beta({}^2 \tilde{\mathfrak{a}}_1 + {}^1 \tilde{\mathfrak{a}}_2)] + \right. \right.$$

$$\left. \exp(-4\beta K) \cdot \text{ch}[2\beta({}^2 \tilde{\mathfrak{a}}_1 - {}^1 \tilde{\mathfrak{a}}_2)] \right) + 2 \exp(4\beta {}^2 \tilde{\mathfrak{a}}'_1) \cdot \text{ch}(2\beta {}^2 \tilde{\mathfrak{a}}_1) +$$

$$\left. 2 \exp(4\beta {}^1 \tilde{\mathfrak{a}}'_2) \cdot \text{ch}(2\beta {}^1 \tilde{\mathfrak{a}}_2) + 1 \right\}$$

У випадку однорідного поля, коли мають місце співвідношення

$$\tilde{\mathfrak{a}}_1 = \tilde{\mathfrak{a}} = \mathfrak{a} + z \cdot \varphi; \quad {}^r \tilde{\mathfrak{a}}_1 = \tilde{\mathfrak{a}} = \mathfrak{a} + (z-1)\varphi; \quad (4.4)$$

$$\tilde{\mathfrak{a}}'_1 = \tilde{\mathfrak{a}}' = \mathfrak{a}' + z \cdot \varphi'; \quad {}^r \tilde{\mathfrak{a}}'_1 = \tilde{\mathfrak{a}}' = \mathfrak{a}' + (z-1)\varphi',$$

для ${}^k \mathcal{F}$ -функції будемо мати

$$\frac{1}{N} {}^k \mathcal{F}(T, \Gamma, D, \varphi, \varphi', \langle S \rangle, \langle S^2 \rangle) = \quad (4.5)$$

$$(1-z)F_1(T, \tilde{\mathfrak{a}}, \tilde{\mathfrak{a}}') + \frac{z}{2} F_{12}(T, \tilde{\mathfrak{a}}, \tilde{\mathfrak{a}}');$$

$$F_1(T, \tilde{\mathfrak{a}}, \tilde{\mathfrak{a}}') = \ln Z_1(T, \tilde{\mathfrak{a}}, \tilde{\mathfrak{a}}'); \quad F_{12}(T, \tilde{\mathfrak{a}}, \tilde{\mathfrak{a}}') = \ln Z_{12}(T, \tilde{\mathfrak{a}}, \tilde{\mathfrak{a}}'); \quad (4.6)$$

$$Z_1(T, \tilde{\mathfrak{a}}, \tilde{\mathfrak{a}}') = 2e^{4\beta \tilde{\mathfrak{a}}'} \cdot \text{ch}(2\beta \tilde{\mathfrak{a}}) + 1;$$

$$Z_{12}(T, \tilde{\mathfrak{a}}, \tilde{\mathfrak{a}}') = 2e^{8\beta(\tilde{\mathfrak{a}}' + 2K')} (e^{4\beta K} \cdot \text{ch}(4\beta \tilde{\mathfrak{a}}) + e^{-4\beta K}) +$$

$$4e^{4\beta \tilde{\mathfrak{a}}'} \cdot \text{ch}(2\beta \tilde{\mathfrak{a}}) + 1.$$

Зауважимо, що у випадку $J = J' = 0$ маємо функціональну залежність ${}^k \mathcal{F}(T, \Gamma, D, \varphi, \varphi')$. Для того, щоб у випадку однорідного поля записати у явному вигляді систему рівнянь для кластерних полів φ, φ' , унарних КФ $\langle S \rangle, \langle S^2 \rangle$ та вирази для парних КФ, необхідно порахувати внутрішньокластерні КФ $F_1 \left(\frac{1}{n} \right), F_1 \left(\frac{2}{n} \right), F_1 \left(\frac{1}{n} \middle| \frac{1}{m} \right), F_{1r} \left(\frac{1}{n} \right), F_{1r} \left(\frac{2}{n} \right), F_{1r} \left(\frac{1}{n} \middle| \frac{1}{m} \right)$. Беручи відповідні частинні похідні від F -функцій (4.2), (4.3) ($n, m = 1$ та $n, m = 2$ відповідають упохідненням по $\tilde{\mathfrak{a}}_1$ та $\tilde{\mathfrak{a}}'_1$ для одночастинкової F_1 -функції (див. (3.15)), і упохідненням по ${}^2 \tilde{\mathfrak{a}}_1$ та ${}^2 \tilde{\mathfrak{a}}'_1$ або ${}^1 \tilde{\mathfrak{a}}_2$ та ${}^1 \tilde{\mathfrak{a}}'_2$ для двочастинкової F_{12} -функції (див. (3.16)), відповідно і перейшовши до випадку однорідного поля, отримуємо

$$F_1 \left(\frac{1}{1} \right) = 4e^{4\beta \tilde{\mathfrak{a}}'} \cdot \text{sh}(2\beta \tilde{\mathfrak{a}}) \cdot Z_1^{-1}; \quad (4.7)$$

$$F_1 \left(\frac{1}{2} \right) = 8e^{4\beta \tilde{\mathfrak{a}}'} \cdot \text{ch}(2\beta \tilde{\mathfrak{a}}) \cdot Z_1^{-1};$$

$$F_1 \left(\frac{2}{1} \right) = 8e^{4\beta \tilde{\mathfrak{a}}'} \left[2e^{4\beta \tilde{\mathfrak{a}}'} + \text{ch}(2\beta \tilde{\mathfrak{a}}) \right] Z_1^{-2};$$

$$F_1 \left(\frac{2}{2} \right) = 32e^{4\beta \tilde{\mathfrak{a}}'} \cdot \text{ch}(2\beta \tilde{\mathfrak{a}}) \cdot Z_1^{-2};$$

$$F_1 \left(\frac{1}{1} \middle| \frac{1}{2} \right) = F_1 \left(\frac{1}{2} \middle| \frac{1}{1} \right) = 16e^{4\beta \tilde{\mathfrak{a}}'} \cdot \text{sh}(2\beta \tilde{\mathfrak{a}}) \cdot Z_1^{-2};$$

$$F_{12}(\begin{smallmatrix} 1 \\ 1 \end{smallmatrix}) = 4 \left(e^{4\beta(2\tilde{\alpha}' + 4K' + K)} \cdot \text{sh}(4\beta\tilde{\alpha}) + e^{4\beta\tilde{\alpha}'} \cdot \text{sh}(2\beta\tilde{\alpha}) \right) \cdot Z_{12}^{-1} ; \quad (4.8)$$

$$F_{12}(\begin{smallmatrix} 1 \\ 2 \end{smallmatrix}) = 8 \left\{ e^{8\beta(\tilde{\alpha}' + 2K')} [e^{4\beta K} \cdot \text{ch}(4\beta\tilde{\alpha}) + e^{-4\beta K}] + e^{4\beta\tilde{\alpha}'} \cdot \text{ch}(2\beta\tilde{\alpha}) \right\} \cdot Z_{12}^{-1} ;$$

$$F_{12}(\begin{smallmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{smallmatrix}) = 8e^{8\beta\tilde{\alpha}'} \left\{ e^{16\beta K'} [4e^{8\beta(\tilde{\alpha}' + 2K')} \cdot \text{sh}(8\beta K) + 8e^{4\beta\tilde{\alpha}'} \cdot \text{sh}(4\beta K) \cdot \text{ch}(2\beta\tilde{\alpha}) + e^{4\beta K} \cdot \text{ch}(4\beta\tilde{\alpha}) - e^{-4\beta K}] - 2\text{sh}^2(2\beta\tilde{\alpha}) \right\} \cdot Z_{12}^{-2} ;$$

$$F_{12}(\begin{smallmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{smallmatrix}) = 32e^{8\beta\tilde{\alpha}'} \left\{ e^{16\beta K'} [e^{4\beta K} \cdot \text{ch}(4\beta\tilde{\alpha}) + e^{-4\beta K}] - 2\text{ch}^2(2\beta\tilde{\alpha}) \right\} \cdot Z_{12}^{-2} ;$$

$$F_{12}(\begin{smallmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{smallmatrix}) = F_{12}(\begin{smallmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{smallmatrix}) = 16e^{8\beta\tilde{\alpha}'} \left\{ 4e^{4\beta(\tilde{\alpha}' + 4K')} \cdot \text{sh}(2\beta\tilde{\alpha}) \cdot \text{sh}(4\beta K) + e^{4\beta(4K' + K)} \cdot \text{sh}(4\beta\tilde{\alpha}) - 2\text{sh}(2\beta\tilde{\alpha}) \cdot \text{ch}(2\beta\tilde{\alpha}) \right\} \cdot Z_{12}^{-2} .$$

На основі (3.18), (3.19) та (4.7), (4.8) запишемо систему рівнянь для φ , φ' , $\langle S \rangle$, $\langle S^2 \rangle$ у випадку однорідного поля у явному вигляді.

$$\langle S \rangle = \frac{4e^{4\beta\tilde{\alpha}'} \cdot \text{sh}(2\beta\tilde{\alpha})}{Z_1(T, \tilde{\alpha}, \tilde{\alpha}')} ; \quad \langle S^2 \rangle = \frac{8e^{4\beta\tilde{\alpha}'} \cdot \text{ch}(2\beta\tilde{\alpha})}{Z_1(T, \tilde{\alpha}, \tilde{\alpha}')} ; \quad (4.9)$$

$$\frac{e^{4\beta\tilde{\alpha}'} \cdot \text{sh}(2\beta\tilde{\alpha})}{Z_1(T, \tilde{\alpha}, \tilde{\alpha}')} = \frac{e^{4\beta(2\tilde{\alpha}' + 4K' + K)} \cdot \text{sh}(4\beta\tilde{\alpha}) + e^{4\beta\tilde{\alpha}'} \cdot \text{sh}(2\beta\tilde{\alpha})}{Z_{12}(T, \tilde{\alpha}, \tilde{\alpha}')} ; \quad (4.10)$$

$$\frac{e^{4\beta\tilde{\alpha}'} \cdot \text{ch}(2\beta\tilde{\alpha})}{Z_1(T, \tilde{\alpha}, \tilde{\alpha}')} = \frac{e^{8\beta(\tilde{\alpha}' + 2K')} [e^{4\beta K} \cdot \text{ch}(4\beta\tilde{\alpha}) + e^{-4\beta K}] + e^{4\beta\tilde{\alpha}'} \cdot \text{ch}(2\beta\tilde{\alpha})}{Z_{12}(T, \tilde{\alpha}, \tilde{\alpha}')} .$$

Зауважимо, що у випадку, коли далекосяжні взаємодії відсутні ($J = J' = 0$), маємо систему рівнянь (4.10) для кластерних полів φ , φ' та вирази (4.9) для $\langle S \rangle$, $\langle S^2 \rangle$ (вирази (4.9) та система рівнянь (4.10) узгоджуються з результатами наближення константи зв'язку [18]).

На основі (3.42) ($\eta = 2$), враховуючи $F_1(\begin{smallmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{smallmatrix}) = F_1(\begin{smallmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{smallmatrix})$, $F_{12}(\begin{smallmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{smallmatrix}) = F_{12}(\begin{smallmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{smallmatrix})$, запишемо вирази для парних КФ базисної моделі БЕГ.

$$k\hat{b}(\vec{q}) = \begin{pmatrix} k\langle SS \rangle_{\vec{q}}^c & k\langle SS^2 \rangle_{\vec{q}}^c \\ k\langle S^2 S \rangle_{\vec{q}}^c & k\langle S^2 S^2 \rangle_{\vec{q}}^c \end{pmatrix} = \frac{d^+ d^- d^{(2)}}{z(\tilde{b}_1 \tilde{b}_3 - (\tilde{b}_2)^2)} \cdot \begin{pmatrix} \tilde{b}_1 & \tilde{b}_2 \\ \tilde{b}_2 & \tilde{b}_3 \end{pmatrix} , \quad (4.11)$$

причому

$$\tilde{b}_\alpha = d^{(-)} \left\{ d^{(2)} F_\alpha^{(+)} + \left(\frac{1}{z} - 1 \right) d^{(+)} F_\alpha^{(2)} \right\} - \quad (4.12)$$

$$d^{(2)} \left\{ F_\alpha^{(+)} \left(d^{(-)} + F_2^{(-)} F_2^{(2)} \right) - B_\alpha \right\} \Theta(\vec{q}) , \quad (\alpha=1,2,3) ;$$

$$\hat{F}^{(\xi)} = \begin{pmatrix} F_1^{(\xi)} & F_2^{(\xi)} \\ F_2^{(\xi)} & F_3^{(\xi)} \end{pmatrix} , \quad (\xi=+,-,2) ; \quad \hat{F}^{(\pm)} = \hat{F}^{(2)} \pm \hat{F}^{(11)} ; \quad (4.13)$$

$$d^{(-)} = \det \left| \hat{F}^{(-)} \right| ; \quad d^{(+)} = \det \left| \hat{F}^{(+)} \right| ; \quad d^{(2)} = \det \left| \hat{F}^{(2)} \right| ;$$

$$\hat{F}^{(2)} = \begin{pmatrix} F_1(\begin{smallmatrix} 2 \\ 1 \end{smallmatrix}) & F_1(\begin{smallmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{smallmatrix}) \\ F_1(\begin{smallmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{smallmatrix}) & F_1(\begin{smallmatrix} 2 \\ 2 \end{smallmatrix}) \end{pmatrix} ; \quad (4.14)$$

$$\hat{F}^{(11)} = \begin{pmatrix} F_{12}(\begin{smallmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{smallmatrix}) & F_{12}(\begin{smallmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{smallmatrix}) \\ F_{12}(\begin{smallmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{smallmatrix}) & F_{12}(\begin{smallmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{smallmatrix}) \end{pmatrix} ;$$

$$\begin{aligned} B_1 &= F_1^{(+)} F_1^{(-)} F_3^{(2)} + F_2^{(+)} F_2^{(-)} F_1^{(2)} - F_2^{(+)} F_1^{(-)} F_2^{(2)} ; \\ B_2 &= F_2^{(+)} F_1^{(-)} F_3^{(2)} + F_3^{(+)} F_2^{(-)} F_1^{(2)} - F_3^{(+)} F_1^{(-)} F_2^{(2)} ; \\ B_3 &= F_3^{(+)} F_3^{(-)} F_1^{(2)} + F_2^{(+)} F_2^{(-)} F_3^{(2)} - F_2^{(+)} F_3^{(-)} F_2^{(2)} . \end{aligned} \quad (4.15)$$

5. Результати числових розрахунків

В даному розділі зупинимося на результатах числових розрахунків (при $\Gamma = 0$) термодинамічних характеристик і парних кореляційних функцій (при $\vec{q} = 0$) моделі БЕГ.

Зауважимо, що в цьому розділі використовуються позначення для відносних величин:

$$t = \frac{3}{8} \frac{k_B T}{zK} , \quad d = \frac{D}{K} , \quad k' = \frac{4K'}{K} , \quad m = \frac{1}{2} \langle S \rangle , \quad q = \frac{1}{4} \langle S^2 \rangle ,$$

$$G_{11} = \frac{1}{4} \langle SS \rangle_{\vec{q}=0}^c , \quad G_{12} = \frac{1}{8} \langle SS^2 \rangle_{\vec{q}=0}^c , \quad G_{111} = \frac{1}{16} \langle S^2 S^2 \rangle_{\vec{q}=0}^c ;$$

та термінологія роботи [17]

F - феромагнітна фаза ($m \neq 0$, $q \neq \frac{2}{3}$),

P - парамагнітна фаза ($m = 0$, $q \neq \frac{2}{3}$, $q(t = \infty) = \frac{2}{3}$),

Q - квадрупольна фаза ($m = 0$, $q \neq \frac{2}{3}$).

Зауважимо, що в НДК система рівнянь для φ , φ' (4.10) має декілька

пар розв'язків (їх число залежить від параметрів d , k' та температури) φ_ν та φ'_ν , які однозначно відповідають парам m_ν та q_ν [24]. Пара розв'язків, яка відповідає \mathbf{P} - фазі існує при $t \in [t_{P_1}, \infty]$ ($t_{P_1} \geq 0$, її значення залежить від d , k'). Пари розв'язків, які відповідають \mathbf{F} - фазі та \mathbf{Q} - фазі існують при $t \in [t_{F_1}, t_{F_2}]$ та $t \in [t_{Q_1}, t_{Q_2}]$ відповідно (значення t_{F_1} , t_{F_2} та t_{Q_1} , t_{Q_2} залежать від d , k' і є скінченими величинами).

Нагадаємо також [3], що пари розв'язків φ, φ' системи рівнянь (4.10) відповідають екстремумам вільної енергії

$$F = -k_B T^k \mathcal{F}(t, d, \varphi, \varphi') \quad (5.1)$$

(при цьому $^k \mathcal{F}$ розраховується на основі (4.5)), а поведінку фізичних характеристик досліджуваної моделі визначає пара розв'язків φ, φ' , яка відповідає абсолютному мінімуму вільної енергії (5.1).

Температуру $\Phi \mathbf{P} \mathbf{F} \leftrightarrow \mathbf{P}$ 2-го роду ($\mathbf{FP2}$) та $\mathbf{PF2}$ (тут і далі будемо все розглядати в напрямку зростання температури), шукатимемо з умови $\left(^k \langle SS \rangle_0^c \right)^{-1} = 0$ (див. (4.11)). Оскільки в парафазі є лише одна пара розв'язків ($\varphi = 0$, $\varphi' \neq 0$) системи рівнянь для кластерних полів (4.10), нам достатньо знайти розв'язки t_α рівняння

$$Y(t_\alpha) = 0 ; \quad Y(t) = \left(^k \langle SS \rangle_0^c(t, \varphi = 0, \varphi'(t)) \right)^{-1}, \quad (5.2)$$

і досліджуючи вільну енергію, відібрати ті t_α , які є насправді температурами $\Phi \mathbf{P}$ 2-го роду [3,24]. Зауважимо, що в (5.2) $\varphi'(t)$ знаходиться з другого рівняння системи рівнянь (4.10) при $\varphi = 0$, так як перше рівняння при $\varphi = 0$ перетворюється в тотожність.

Температури інших $\Phi \mathbf{P}$ будемо шукати досліджуючи вільну енергію (5.1) як функцію φ та φ' [3,24].

Спочатку приведемо фазові діаграми та температурні залежності термодинамічних характеристик та парних кореляційних функцій при $\vec{q} = 0$, отримані в НДК та в НМП, у наступних трьох випадках: модель з одноіонною анізотропією ($K' = 0$), модель з біквадратичною взаємодією ($D = 0$), квадрупольна модель ($D = -\frac{8}{3}zK'$).

Зупинимся коротко на вивченні впливу на термодинамічні характеристики параметра одноіонної анізотропії d при $k' = 0$. На рис. 1 приведені залежності температур $\Phi \mathbf{P}$ $\mathbf{FP2}$ та $\mathbf{FP1}$ від величини d для ґраток з $z = 3, 4, 6$ (результати НДК). При $d > d_k(z)$ ($d_k(z = 6) \approx -2.82$) в системі відбувається $\Phi \mathbf{P}$ $\mathbf{FP2}$, при $\tilde{d}_k(z) < d < d_k(z)$ ($\tilde{d}_k(z = 6) \approx -3.0$) – $\Phi \mathbf{P}$ $\mathbf{FP1}$, а при $d < \tilde{d}_k(z)$ в системі $\Phi \mathbf{P}$ відсутній. На цьому рисунку приведені також фазові діаграми, отримані

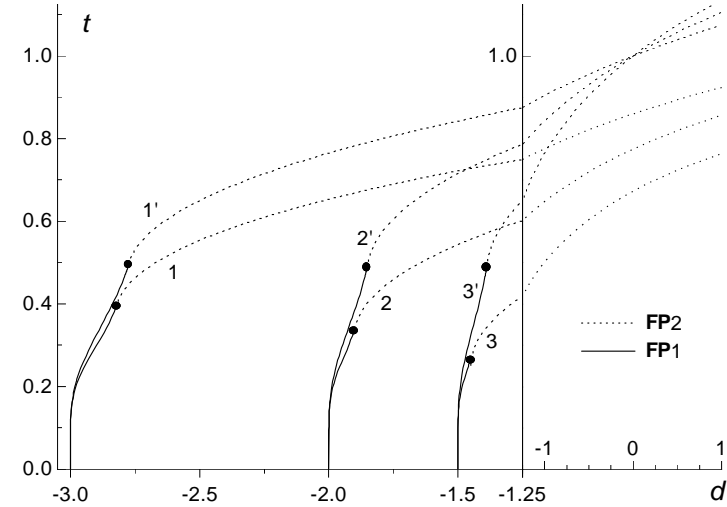


Рис. 1: Фазові діаграми на $(t-d)$ площині при $k' = 0.0$ отримані в НДК для різних типів ґраток: 1 – $z = 6$; 2 – $z = 4$; 3 – $z = 3$, та в НМП: 1' – $z = 6$; 2' – $z = 4$; 3' – $z = 3$.

в НМП. На рис. 2 - 7 приведені температурні залежності дипольного m , квадрупольного q моментів, парних кореляційних функцій та теплоємності, отримані в НДК при різних значеннях d для кубічної ґратки (в \mathbf{P} фазі обернена $K\Phi G_{12}^{-1}$ є нескінченно великою, тобто в точці фазового переходу G_{12}^{-1} терпить нескінченний скачок з нуля при $\Phi \mathbf{P}$ 2-го роду та з певного скінченного значення при $\Phi \mathbf{P}$ 1-го роду на нескінченність). Для ґраток з $z = 3, 4$ результати якісно подібні. Зауважимо, що НДК не дає якісно нових результатів в порівнянні з НМП, проте результати НДК значно ближчі до результатів числових методів [1,3,14,21].

У випадку моделі з біквадратичною взаємодією ($d = 0$) НДК і НМП дають якісно відмінні результати (див. рис. 8 - 12), причому результати НДК узгоджуються з результатами моделювання Монте Карло [20]. При $k' > -1.0$ для $z = 3, 4, 6$ НДК передбачає $\Phi \mathbf{P}$ $\mathbf{FP2}$, при $-1.12 < k' < -1.0$ для $z = 6$ – $\Phi \mathbf{P}$ $\mathbf{PF2}$ та $\mathbf{FP2}$, а при $k' < -1.12$ для $z = 6$ і $k' < -1.0$ для $z = 3, 4$ – жодного. НМП ж передбачає $\Phi \mathbf{P}$ $\mathbf{FP2}$ (z - довільне) при будь-яких значеннях k' . Слід проте зауважити, що ми та автори роботи [20] обмежилися розглядом одноіонної задачі, що є некоректним при $k' < -1.0$ де має

місце так звана "staggered" квадрупольна фаза (**S**) [18,21]. Зокрема (див. [18]) для $z = 6$ температура ФП **S** \leftrightarrow **P** є меншою ніж температура ФП **FP2**, яку ми тут отримували. На рис. 13 - 16 приведені температурні залежності парних кореляційних функцій при $\vec{q} = 0$ та теплоємності отримані в НДК для різних значень параметра k' .

Для квадрупольної моделі, що описується гамільтоніаном

$$\mathcal{H} = 2K\beta \sum_{i,\delta} \left[\frac{1}{4} S_i S_{i+\delta} + k' \left(\frac{1}{4} S_i^2 - \frac{2}{3} \right) \left(\frac{1}{4} S_{i+\delta}^2 - \frac{2}{3} \right) \right], \quad (5.3)$$

який є частковим випадком гамільтоніану моделі БЕГ (4.1) при $d = -\frac{2}{3}zk'$, $\Gamma = 0$, $J = J' = 0$, результати НДК і НМП [25] теж якісно відмінні (див. рис. 17 - 21). Оскільки для різних z результати якісно подібні, зупинимось на випадку $z = 6$. В НДК інтервал зміни параметра k' можна розбити на чотири області: $k' \in [-3.0, 2.28]$, $k' \in]2.28, 3.0]$, $k' \in]3.0, 3.2]$, $k' \in]3.2, \infty]$ (ми обмежилися розглядом моделі на інтервалі $k' \in [-3.0, \infty]$, оскільки при $k' < -3.0$ слід розглядати двовідграткову задачу [18]). При $k' \in]-3.0, 2.28]$ та при $k' \in]2.28, 3.0]$ в НДК, а в НМП при $k' \in]-3.0, 1.5]$ та при $k' \in]1.5, 3.0]$ має місце ФП **FP2** та ФП **FP1**, відповідно, причому НДК на відміну від НМП не передбачає занулення параметера $3(q - \frac{2}{3})$ разом з зануленням дипольного моменту при $t = t_c + 0$. В області $k' \in]3.0, 3.2]$ в НДК та при $k' > 3.0$ в НМП має місце ФП **QP1**, причому, знову ж в НДК квадрупольний момент $q \neq \frac{2}{3}$, а в НМП $q = \frac{2}{3}$ при $t = t_c + 0$.

На рис. 22 - 30 приведені температурні залежності парних кореляційних функцій при $\vec{q} = 0$ та теплоємності отримані в НДК для різних значень параметра k' .

Тепер коротко зупинимось на дослідженні унарних та парних кореляційних функцій (при $\vec{q} = 0$) моделі БЕГ на кубічній ґратці при різних значеннях величин одноіонної анізотропії та біквадратичної взаємодії. Проекція фазової діаграми на (d, k') площину при $d < 0$, $k' > -0.1$ [17] і $d > 0$, $k' > -1 - \frac{1}{6}d$ (див. рис. 31) складається з семи регіонів:

- I - ФП **QP1**,
- II - ФП **FP2**,
- III - ФП **FP1**,
- IV - ФП відсутній,
- V - ФП **QF1** та **FP2**,
- VI - ФП **QF1** та **FP1**,
- VII - ФП **FQ1** та **QP1**.

В даній роботі ми обмежимося областями $d < 0$, $k' > -0.1$ та $d > 0$, $k' > -1 - \frac{1}{6}d$, оскільки для областей $d > 0$, $k' < -1 - \frac{1}{6}d$ та

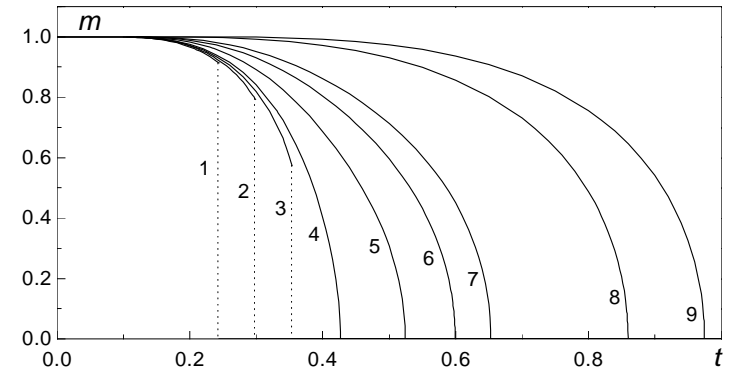


Рис. 2: Температурні залежності дипольного моменту m для $z = 6$, $k' = 0$ при різних значеннях параметра d у НДК: 1 - $d = -2.95$; 2 - $d = -2.9$; 3 - $d = -2.85$; 4 - $d = -2.8$; 5 - $d = -2.6$; 6 - $d = -2.3$; 7 - $d = -2.0$; 8 - $d = 0.0$; 9 - $d = 2.0$.

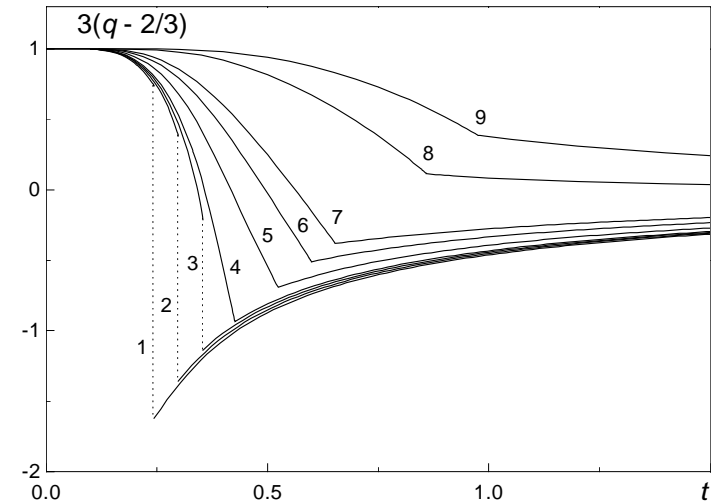


Рис. 3: Температурні залежності квадрупольного моменту q для $z = 6$, $k' = 0$ при різних значеннях параметра d у НДК (позначення такі ж, як на рис. 2).

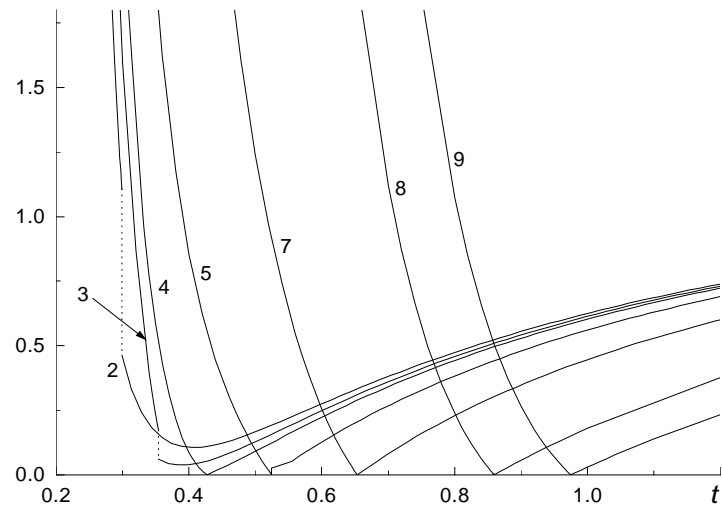


Рис. 4: Температурні залежності оберненої кореляційної функції G_{11}^{-1} для $z = 6$, $k' = 0$ при різних значеннях параметра d у НДК (позначення такі ж, як на рис. 2).

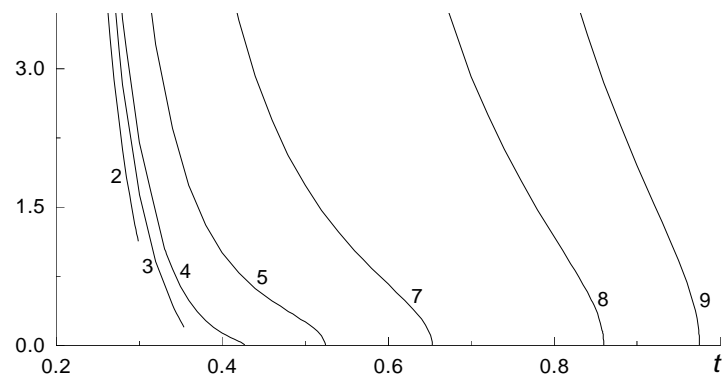


Рис. 5: Температурні залежності оберненої кореляційної функції G_{12}^{-1} для $z = 6$, $k' = 0$ при різних значеннях параметра d у НДК (позначення такі ж, як на рис. 2).

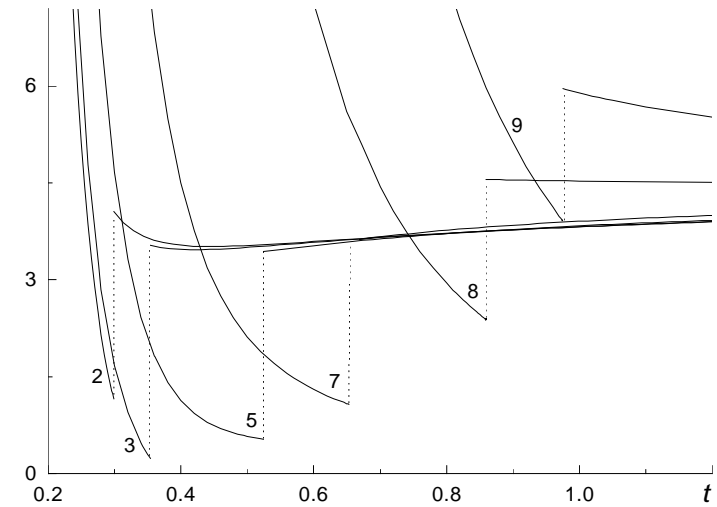


Рис. 6: Температурні залежності оберненої кореляційної функції G_{22}^{-1} для $z = 6$, $k' = 0$ при різних значеннях параметра d у НДК (позначення такі ж, як на рис. 2).

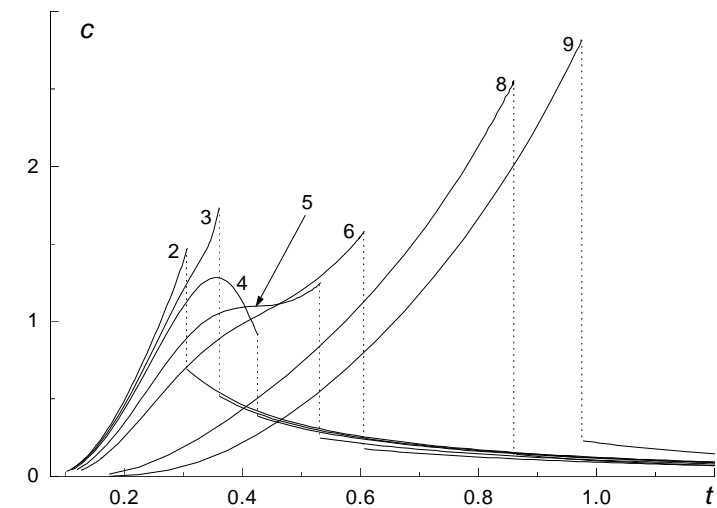


Рис. 7: Температурні залежності теплоємності c для $z = 6$, $k' = 0$ при різних значеннях параметра d у НДК (позначення такі ж, як на рис. 2).

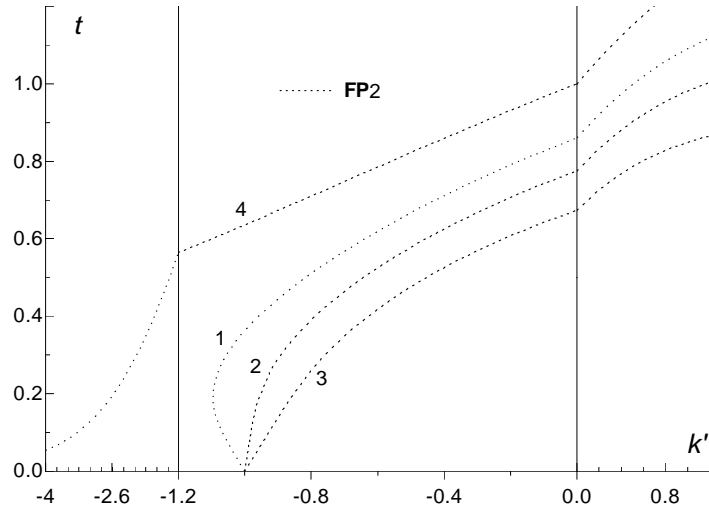


Рис. 8: Фазові діаграми на $(t - k')$ площині при $d = 0.0$ отримані в НДК для різних типів ґраток: 1 - $z = 6$; 2 - $z = 4$; 3 - $z = 3$, та в НМП (4 - z - довільне).

$d < 0$, $k' < -1$ слід розглядати двоїдґраткову модель [18]. Слід зауважити, що в області $d < 0$, $-0.1 > k' > -1$ поблизу лінії $k' = -1 - \frac{1}{3}d$ знаходяться регіони з різним числом різноманітних ФП, і побудова проєкції фазової діаграми на (d, k') площину та дослідження термодинамічних властивостей в цих регіонах є темою окремої роботи.

На рис. 32, 33 приведені фазові діаграми на (t, d) площині (окремі фазові діаграми з рис. 32(a) в іншому масштабі приведені на рис. 32(b)-(e)) для $k' = -0.1, 0.0, 1.0, 2.0, 2.6$ (регіони II, III, IV), $k' = 2.88$ (регіони II, III, VII, III, IV), $k' = 2.95$ (регіони II, III, VII, I, IV), $k' = 3.2$ (регіони II, III, VI, I, IV), $k' = 3.44$ (регіони II, V, VI, I, IV), $k' = 4.0, 8.0, 20.0$ (регіони II, V, I, IV). Зауважимо, що тут і далі все будемо розглядати в напрямку спадання величини одноіонної анізотропії.

Тепер коротко зупинимося на дослідженні унарних та парних КФ.

При ФП **FP2** (регіон II і V) обернена КФ G_{12}^{-1} має нескінченний розрив ($G_{12}^{-1}(t_c - 0) = 0$, $G_{12}^{-1}(t_c + 0) = \infty$), а обернена КФ $G_{11}^{-1}(t_c) = 0$ (див. рис. 34, 35, 36, 38, 46, 49). Обернена КФ G_{22}^{-1} має скінченний

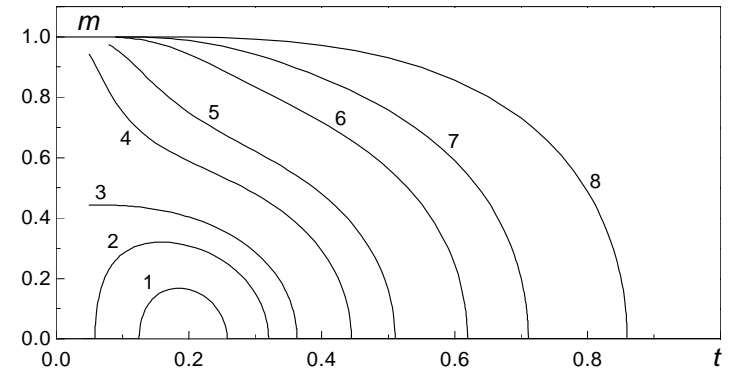


Рис. 9: Температурні залежності дипольного моменту m для $z = 6$, $d = 0$ при різних значеннях параметра k' у НДК: 1 - $k' = -1.08$; 2 - $k' = -1.04$; 3 - $k' = -1.0$; 4 - $k' = -0.9$; 5 - $k' = -0.8$; 6 - $k' = -0.6$; 7 - $k' = -0.4$; 8 - $k' = 0.0$.

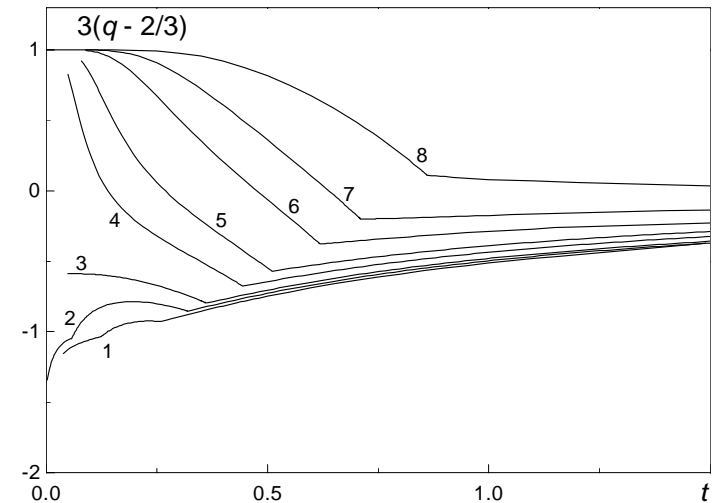


Рис. 10: Температурні залежності квадрупольного моменту q для $z = 6$, $d = 0$ при різних значеннях параметра k' у НДК (позначення такі ж, як на рис. 9).

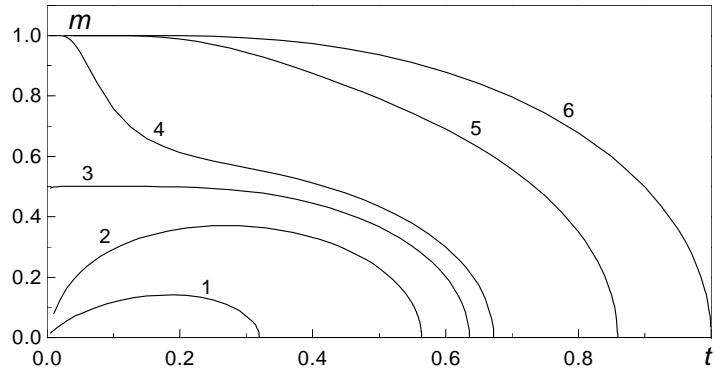


Рис. 11: Температурні залежності дипольного моменту m для $z = 6$, $d = 0$ при різних значеннях параметра k' у НМП: 1 - $k' = -2.0$; 2 - $k' = -1.2$; 3 - $k' = -1.0$; 4 - $k' = -0.9$; 5 - $k' = -0.4$; 6 - $k' = 0.0$.

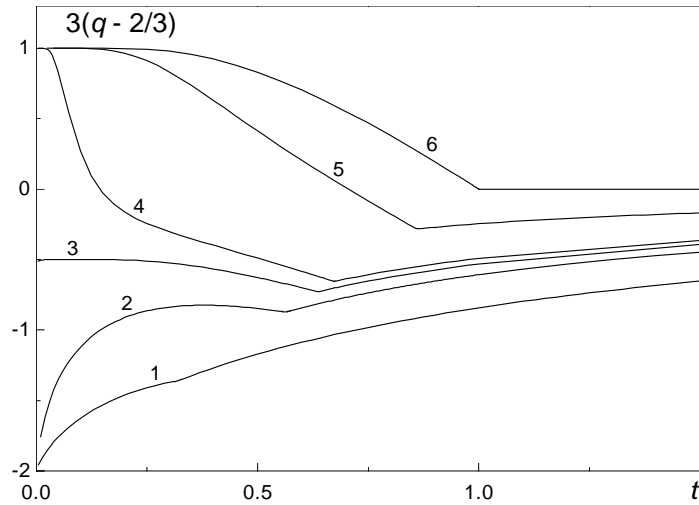


Рис. 12: Температурні залежності квадрупольного моменту q для $z = 6$, $d = 0$ при різних значеннях параметра k' у НМП (позначення такі ж, як на рис. 11).

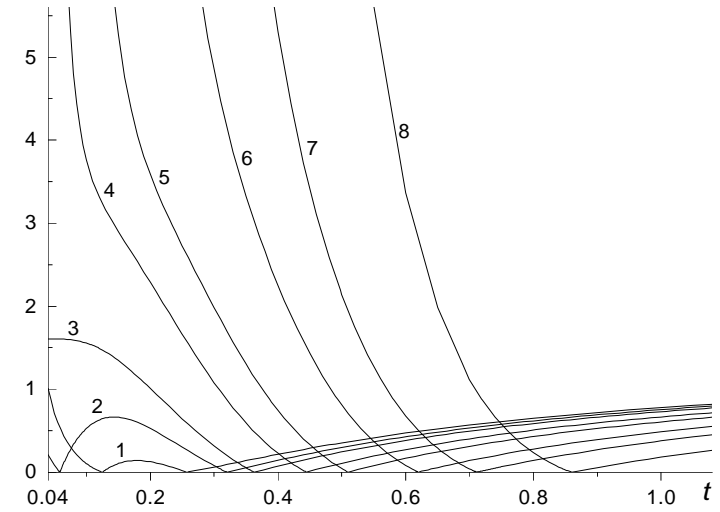


Рис. 13: Температурні залежності оберненої кореляційної функції G_{11}^{-1} для $z = 6$, $d = 0$ при різних значеннях параметра k' у НДК (позначення такі ж, як на рис. 9).

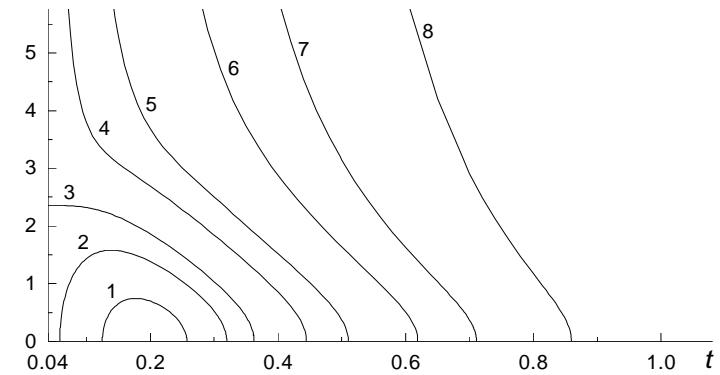


Рис. 14: Температурні залежності оберненої кореляційної функції G_{12}^{-1} для $z = 6$, $d = 0$ при різних значеннях параметра k' у НДК (позначення такі ж, як на рис. 9).

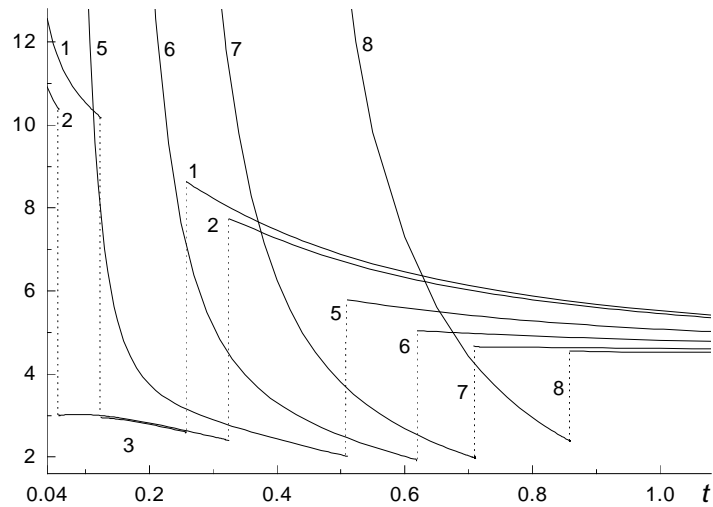


Рис. 15: Температурні залежності оберненої кореляційної функції G_{22}^{-1} для $z = 6$, $d = 0$ при різних значеннях параметра k' у НДК (позначення такі ж, як на рис. 9).

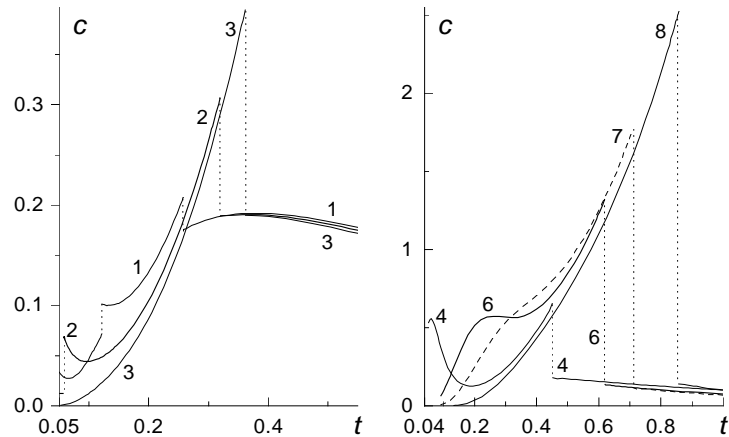


Рис. 16: Температурні залежності теплоємності c для $z = 6$, $d = 0$ при різних значеннях параметра k' у НДК (позначення такі ж, як на рис. 9).

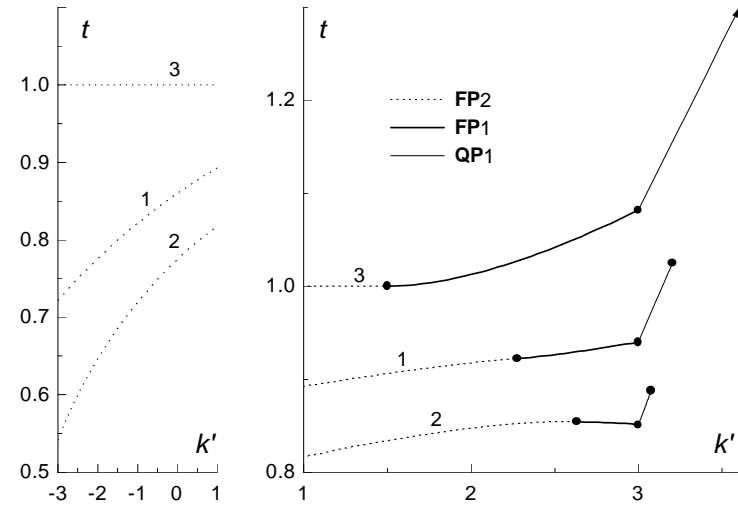


Рис. 17: Фазові діаграми на $(t - k')$ площині при $d = -\frac{2}{3}zk'$ отримані в НДК для різних типів ґраток: 1 - $z = 6$; 2 - $z = 4$, та в НМП (3 - z - довільне).

розрив ($G_{22}^{-1}(t_c - 0) < G_{22}^{-1}(t_c + 0)$), причому в фазі **P** G_{22}^{-1} завжди спадає.

Зауважимо також, що близькість до області $d > 0$, $k' < -1 - \frac{1}{8}d$ приводить до того, що при $t = 0$ $q \neq 1$, $m \neq 1$, G_{11}^{-1} , G_{12}^{-1} , G_{22}^{-1} є скінченими величинами (див. рис. 34(c), 35). Якщо трохи відійти від області $d > 0$, $k' < -1 - \frac{1}{8}d$ (збільшуючи d або k'), то величини q , m , G_{11}^{-1} , G_{12}^{-1} , G_{22}^{-1} мають перегини при низьких температурах (див. рис. 34(b)). На більшій віддалі від області $d > 0$, $k' < -1 - \frac{1}{8}d$ ці особливості в **F** фазі зникають.

Проаналізуємо температурну поведінку $G_{22}^{-1}(t > t_c)$ в напрямку зростання k' при спаданні d (наближення до області $d < 0$, $k' > -1 - \frac{1}{8}d$; наближення до області III, наближення до області V). Якщо ми знаходимося далеко від регіонів III, V (див. рис. 34, 35), то $G_{22}^{-1}(t > t_c)$ спадає, причому спадання G_{22}^{-1} не завжди пов'язане із спаданням $q(t)$. Так для невеликих від'ємних k' близькість до області $d > 0$, $k' < -1 - \frac{1}{8}d$ приводить до того, що $q(t)$ зростає, а $G_{22}^{-1}(t)$ спадає (див. рис. 35). При невеликих додатніх k' із спаданням d (наближення до регіону III) $G_{22}^{-1}(t > t_c)$ та $q(t > t_c)$ починають зростати з температурою (див. рис. 36), хоча і можливі області

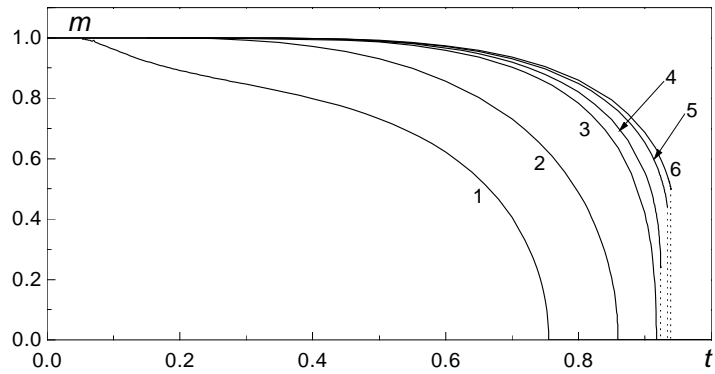


Рис. 18: Температурні залежності дипольного моменту m для $z = 6$, $d = -\frac{2}{3}zk'$ при різних значеннях параметра k' у НДК: 1 - $k' = -2.4$; 2 - $k' = 0.0$; 3 - $k' = 2.0$; 4 - $k' = 2.4$; 5 - $k' = 2.8$; 6 - $k' = 2.996$.

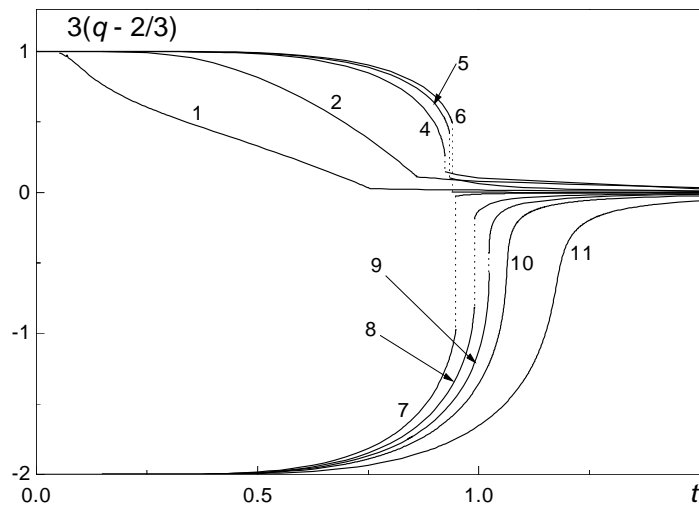


Рис. 19: Температурні залежності квадрупольного моменту q для $z = 6$, $d = -\frac{2}{3}zk'$ при різних значеннях параметра k' у НДК (див. позначення рис. 18; 7 - $k' = 3.02$; 8 - $k' = 3.12$; 9 - $k' = 3.2$; 10 - $k' = 3.3$; 11 - $k' = 3.6$).

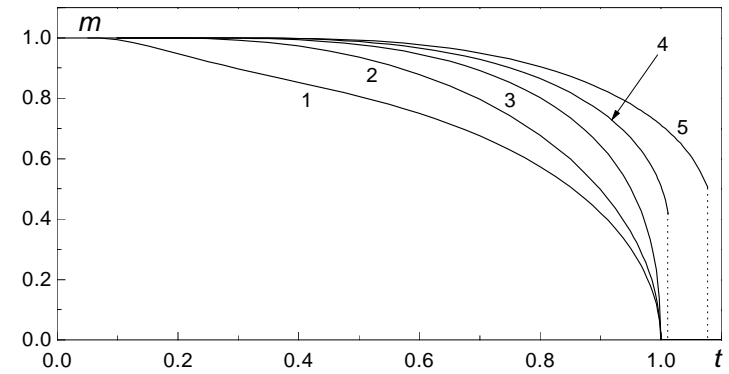


Рис. 20: Температурні залежності дипольного моменту m для $z = 6$, $d = -\frac{2}{3}zk'$ при різних значеннях параметра k' у НМП: 1 - $k' = -2.0$; 2 - $k' = 0.0$; 3 - $k' = 1.2$; 4 - $k' = 2.0$; 5 - $d = 2.96$.

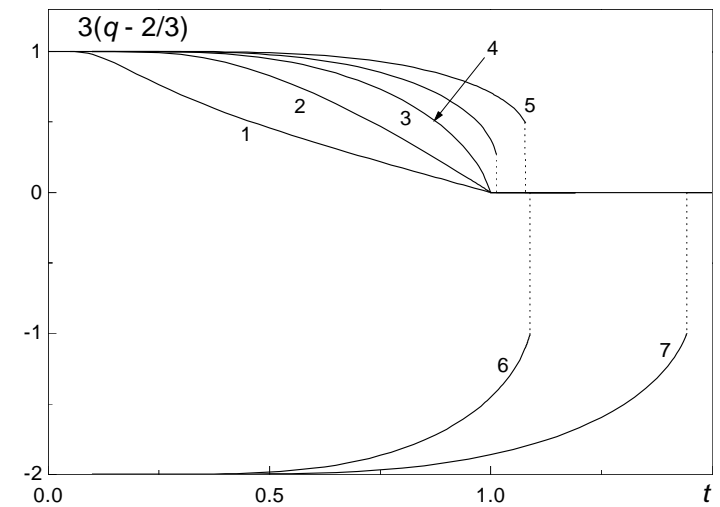


Рис. 21: Температурні залежності квадрупольного моменту q для $z = 6$, $d = -\frac{2}{3}zk'$ при різних значеннях параметра k' у НМП (див. позначення рис. 20; 6 - $k' = 3.02$; 7 - $k' = 4.0$).

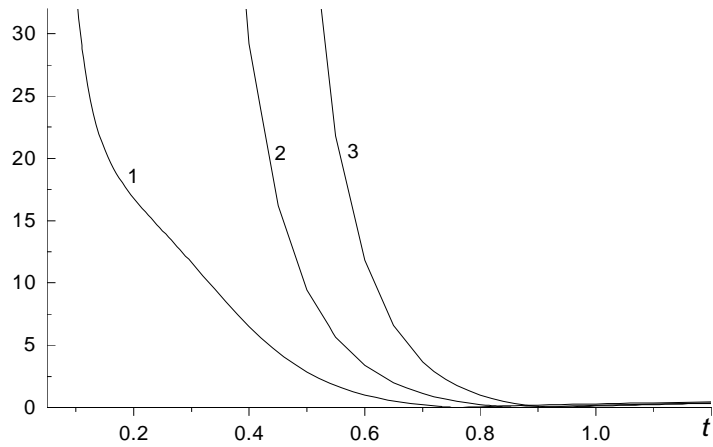


Рис. 22: Температурні залежності оберненої кореляційної функції G_{11}^{-1} для $z = 6$, $d = -\frac{2}{3}zk'$ при різних значеннях параметра k' у НДК (позначення такі ж, як на рис. 18).

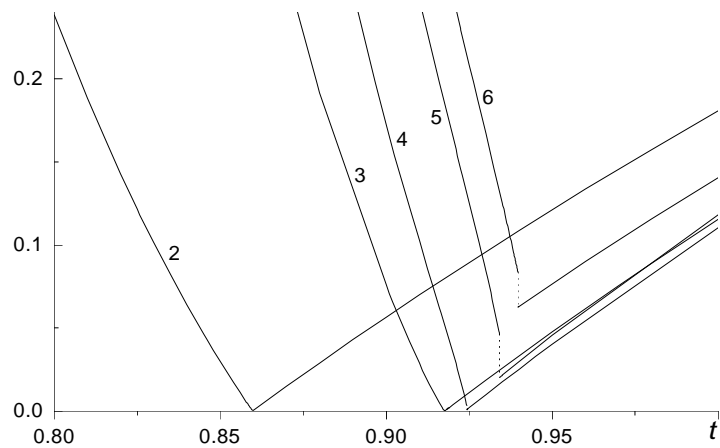


Рис. 23: Температурні залежності оберненої кореляційної функції G_{11}^{-1} для $z = 6$, $d = -\frac{2}{3}zk'$ при різних значеннях параметра k' у НДК (позначення такі ж, як на рис. 18).

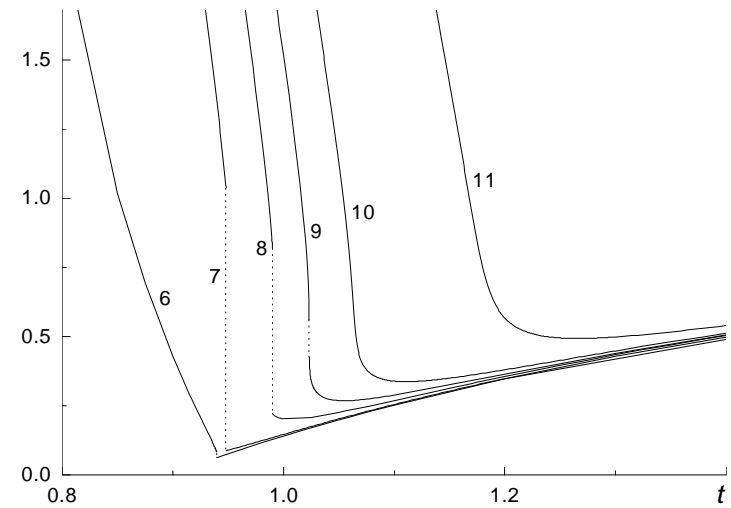


Рис. 24: Температурні залежності оберненої кореляційної функції G_{11}^{-1} для $z = 6$, $d = -\frac{2}{3}zk'$ при різних значеннях параметра k' у НДК (позначення такі ж, як на рис. 18, 19).

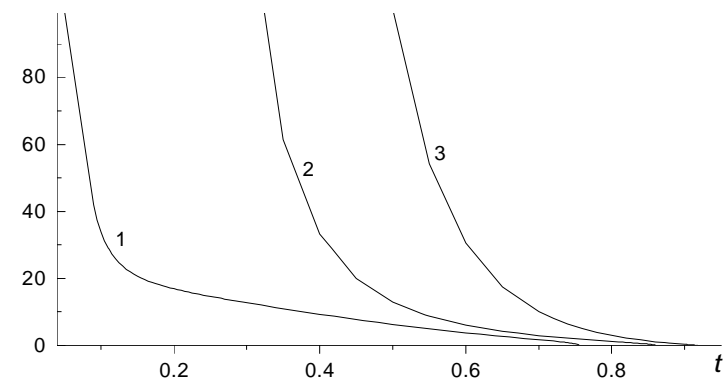


Рис. 25: Температурні залежності оберненої кореляційної функції G_{12}^{-1} для $z = 6$, $d = -\frac{2}{3}zk'$ при різних значеннях параметра k' у НДК (позначення такі ж, як на рис. 18).

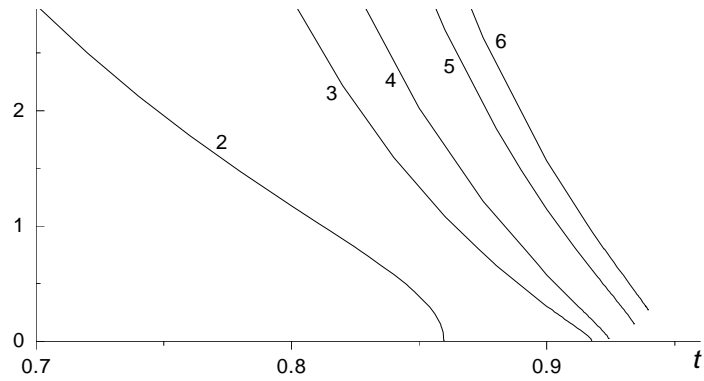


Рис. 26: Температурні залежності оберненої кореляційної функції G_{12}^{-1} для $z = 6$, $d = -\frac{2}{3}zk'$ при різних значеннях параметра k' у НДК (позначення такі ж, як на рис. 18).

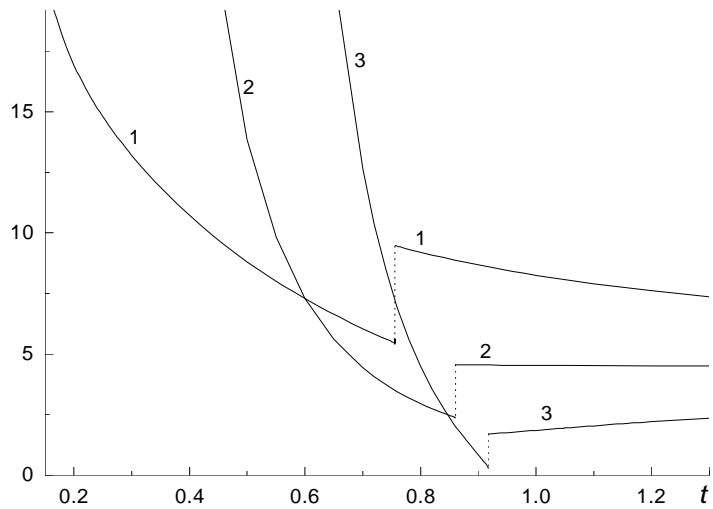


Рис. 27: Температурні залежності оберненої кореляційної функції G_{22}^{-1} для $z = 6$, $d = -\frac{2}{3}zk'$ при різних значеннях параметра k' у НДК (позначення такі ж, як на рис. 18).

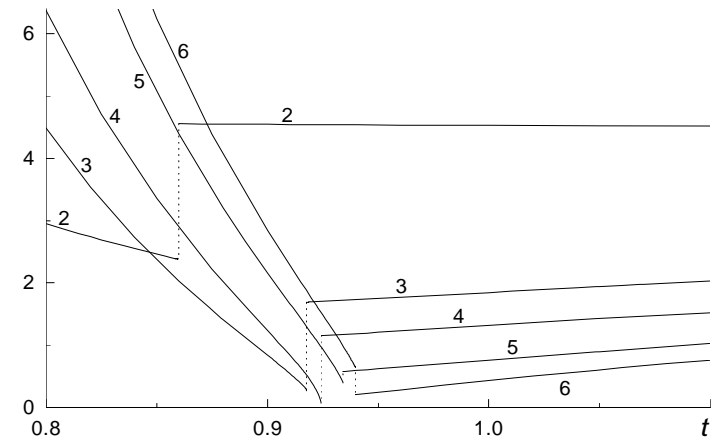


Рис. 28: Температурні залежності оберненої кореляційної функції G_{22}^{-1} для $z = 6$, $d = -\frac{2}{3}zk'$ при різних значеннях параметра k' у НДК (позначення такі ж, як на рис. 18).

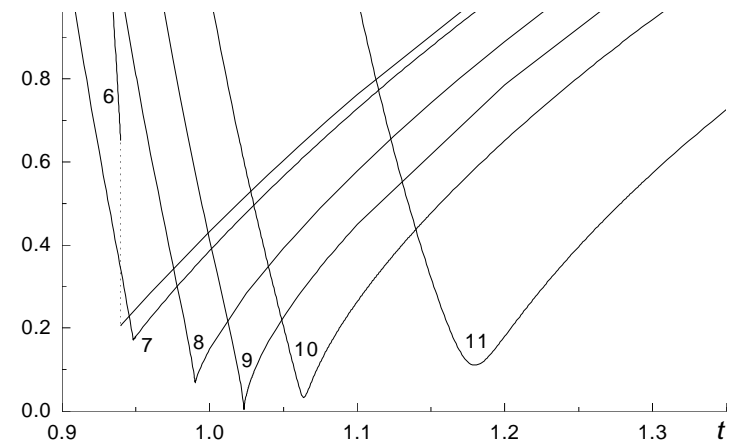


Рис. 29: Температурні залежності оберненої кореляційної функції G_{22}^{-1} для $z = 6$, $d = -\frac{2}{3}zk'$ при різних значеннях параметра k' у НДК (позначення такі ж, як на рис. 18, 19).

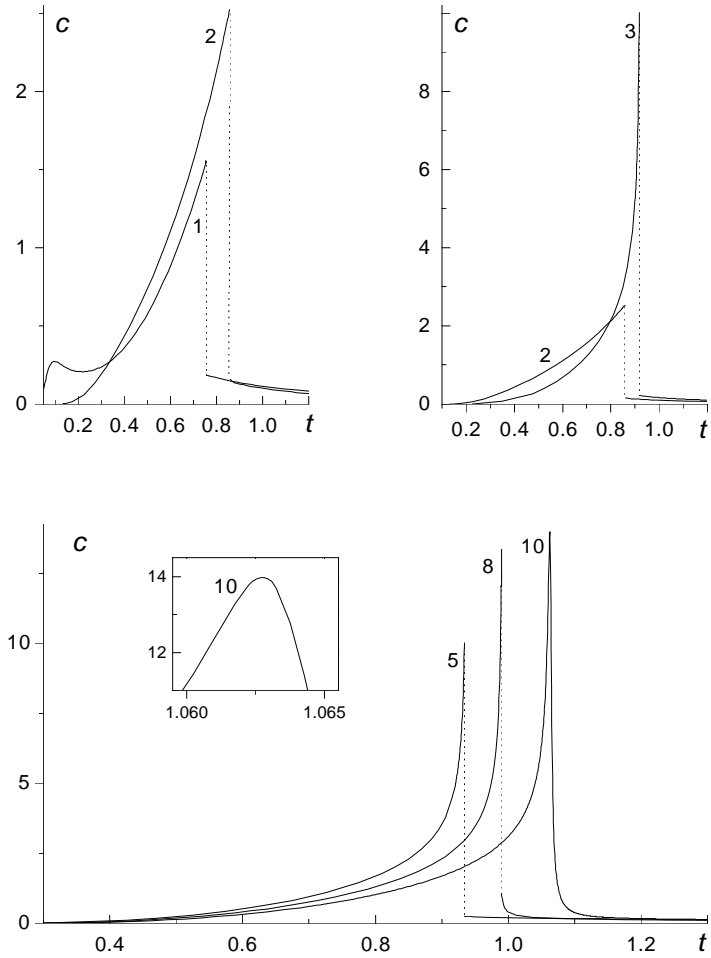


Рис. 30: Температурні залежності теплоємності c для $z = 6$, $d = -\frac{2}{3}zk'$ при різних значеннях параметра k' у НДК (позначення такі ж, як на рис. 18-19).

параметрів коли q спадає, а G_{22}^{-1} зростає (див. рис. 38). Якщо ще збільшити k' , то зменшення d (наближення до регіонів III, V, а також в самому регіоні V) приводить до того, що G_{22}^{-1} в парафазі має мінімум (див. рис. 46, 49).

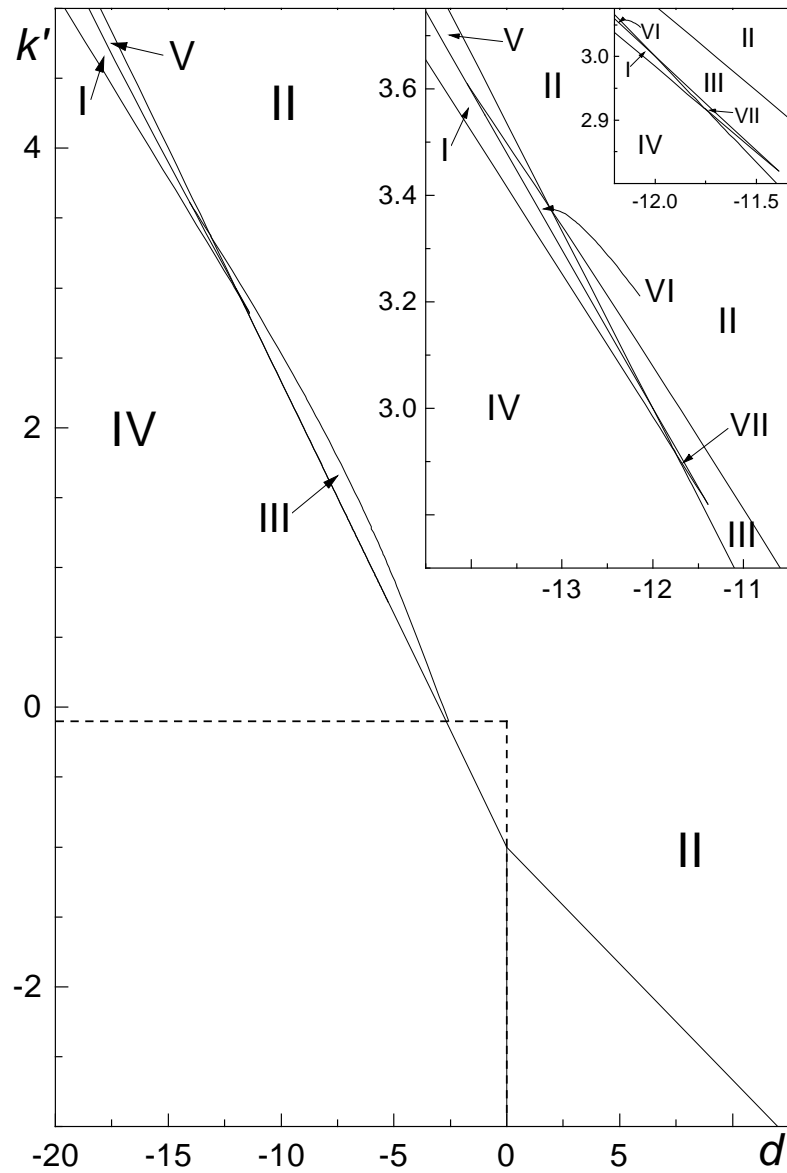


Рис. 31: Проекція фазової діаграми на $(d-k')$ площину ($z = 6$, результат НДК).

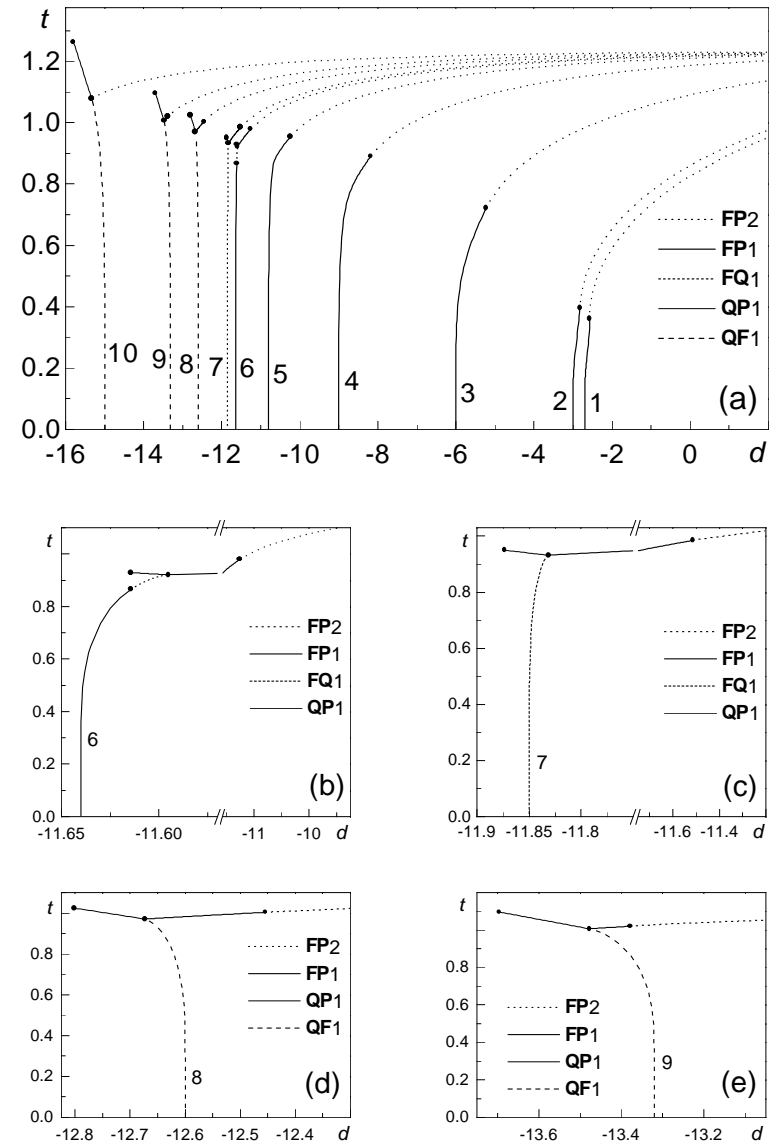


Рис. 32: Фазові діаграми при різних значеннях k' на $(d-t)$ площині ($z = 6$, результати НДК). 1 - $k' = -0.1$; 2 - $k' = 0.0$; 3 - $k' = 1.0$; 4 - $k' = 2.0$; 5 - $k' = 2.6$; 6 - $k' = 2.88$; 7 - $k' = 2.95$; 8 - $k' = 3.2$; 9 - $k' = 3.44$; 10 - $k' = 4.0$.

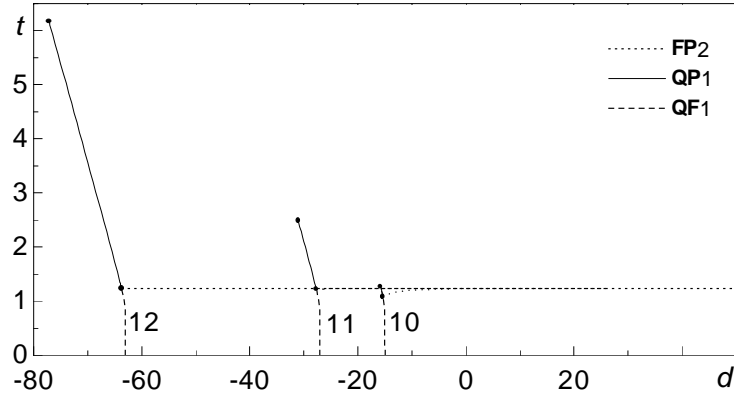


Рис. 33: Фазові діаграми при різних значеннях k' на $(d - t)$ площині ($z = 6$, результати НДК). 10 - $k' = 4.0$; 11 - $k' = 8.0$; 12 - $k' = 20.0$.

При **FP1** обернена КФ $G_{12}^{-1}(t)$ має нескінченний розрив ($G_{12}^{-1}(t_c - 0) > 0$, $G_{12}^{-1}(t_c + 0) = \infty$), а обернені КФ $G_{11}^{-1}(t)$, $G_{22}^{-1}(t)$ мають скінченний розрив, причому в **F** фазі $G_{11}^{-1}(t)$ та $G_{22}^{-1}(t)$ спадають. Проаналізуємо поведінку $G_{11}^{-1}(t)$ та $G_{22}^{-1}(t)$ поблизу точки ФП **FP1** і в парафазі в регіоні III (для $k' = 0.0, 1.0, 2.0, 2.6, 2.88, 2.95, 3.2$) в напрямку спадання величини одноісної анізотропії d (віддалення від регіону II і наближення до регіону IV для $k' = 0.0, 1.0, 2.0, 2.6$, віддалення від регіону II і наближення до регіону VII для $k' = 2.88, 2.95$, між регіонами VII і IV для $k' = 2.88$, а також у регіонах III та VI для $k' = 3.2$ (віддалення від II і наближення до регіону I), та у регіоні VI для $k' = 3.44$ (віддалення від регіону V і наближення до I). Коли ми знаходимося в регіоні III близько від регіону II (див. рис. 37(a), 39(a), 40(a), 41(a), 44(a), 47), то $G_{11}^{-1}(t_c - 0) > G_{11}^{-1}(t_c + 0)$, $G_{22}^{-1}(t_c - 0) < G_{22}^{-1}(t_c + 0)$, $G_{11}^{-1}(t > t_c)$, $G_{22}^{-1}(t > t_c)$ зростають (за виключенням $k' = 3.2$ (див. рис. 47) де в парафазі $G_{22}^{-1}(t)$ має мінімум). Для $k' = 0$ при зменшенні d спочатку у $G_{11}^{-1}(t)$ в парафазі (див. рис. 37(b)), а потім і у $G_{22}^{-1}(t > t_c)$ (див. рис. 37(c)) появляются мінімуми. Якщо ще зменшити d , то $G_{22}^{-1}(t)$ терпить скачок з більшого значення на менше (див. рис. 37(d)). Для $k' = 2.0$ при зменшенні d скачок $G_{22}^{-1}(t)$ відбувається з більшого значення на менше (див. рис. 39(b)). Далі для $G_{11}^{-1}(t)$, а потім і для $G_{22}^{-1}(t)$ в парафазі з'являються мінімуми (див. рис. 39(c), 39(d)). Якщо ще зменшувати d , то $G_{11}^{-1}(t)$ терпить скачок з меншого значення на більше (див. рис. 39(e)), а потім знову $G_{11}^{-1}(t_c - 0) > G_{11}^{-1}(t_c + 0)$ (див. рис. 39(f)). Тобто, біля

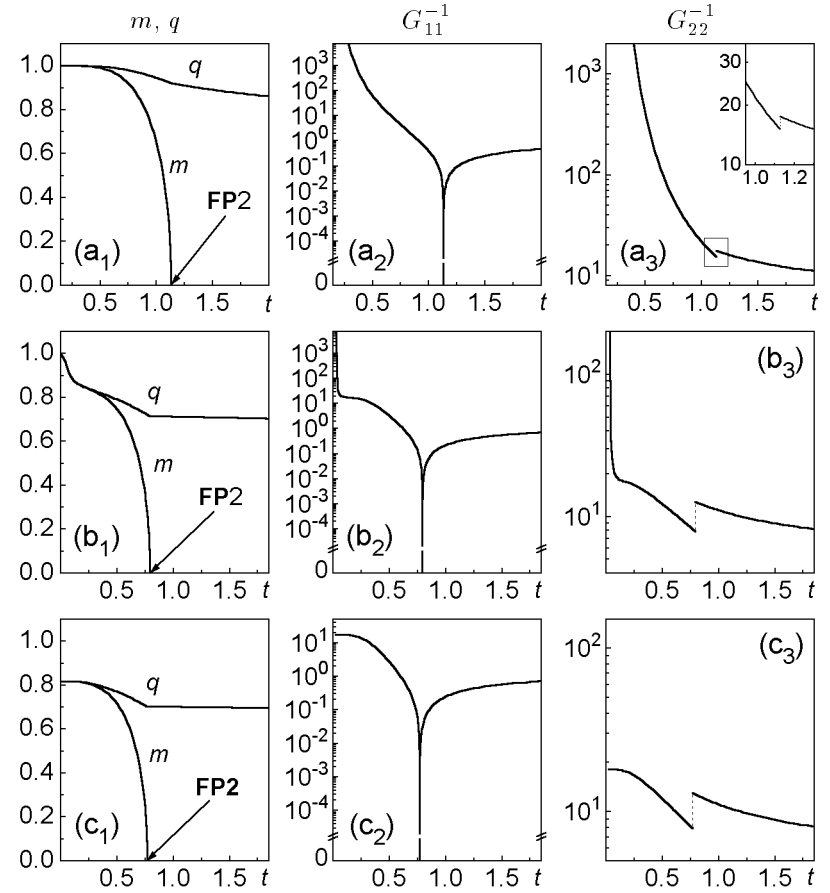


Рис. 34: Температурні залежності m , q та парних КФ G_{11}^{-1} , G_{22}^{-1} для $k' = -4.0$ при різних значеннях параметра d : (a) - $d = 30.0$; (b) - $d = 18.5$; (c) - $d = 18.0$.

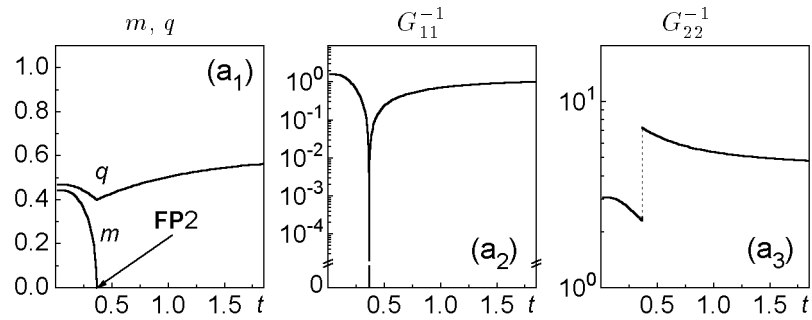


Рис. 35: Температурні залежності m , q та парних КФ G_{11}^{-1} , G_{22}^{-1} для $k' = -1.0$ при $d = 0.0$.

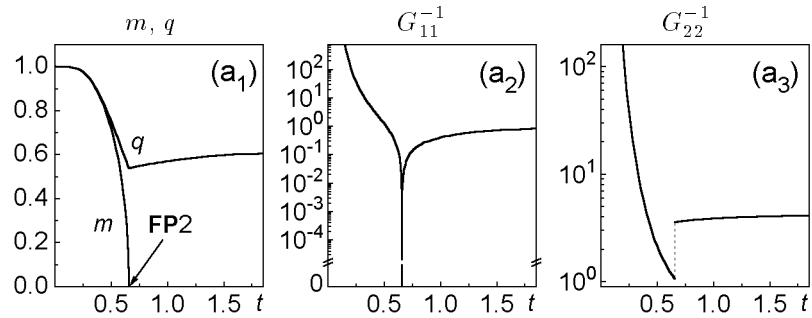


Рис. 36: Температурні залежності m , q та парних КФ G_{11}^{-1} , G_{22}^{-1} для $k' = 0.0$ при $d = -2.0$.

регіону IV для $k'=2.0$, 0.0 обернені КФ $G_{11}^{-1}(t)$, $G_{22}^{-1}(t)$ поведуть себе якісно однаково (див. рис. 37(d), 39(f)). Для $k'=2.6$ та $k' = 2.88$ при зменшенні d все спочатку відбувається так само, як і для $k' = 2.0$ (див. рис. 39(b), 40(b), 41(b), 39(c), 40(c), 41(c)). Проте біля регіону IV для $k' = 2.6$ $G_{11}^{-1}(t)$ терпить скачок з меншого значення на більше (див. рис. 40(d)). Для $k' = 2.88$ біля регіону VII $G_{11}^{-1}(t)$ поводить себе якісно так само як для $k' = 2.6$, біля регіону IV, але $G_{22}^{-1}(t)$ в парафазі не має мінімуму (див. рис. 40(d), 41(d)). Між регіонами VII і IV у $G_{22}^{-1}(t > t_c)$ з'являється мінімум (поведінка $G_{11}^{-1}(t)$ і $G_{22}^{-1}(t)$ тут така сама як для $k' = 2.6$ біля регіону IV (див. рис. 40(d), 43)). Для $k' = 2.95$ регіон III є досить вузьким, тому при відході від регіону II і наближення до регіону VII змінюється тільки поведінка $G_{22}^{-1}(t)$

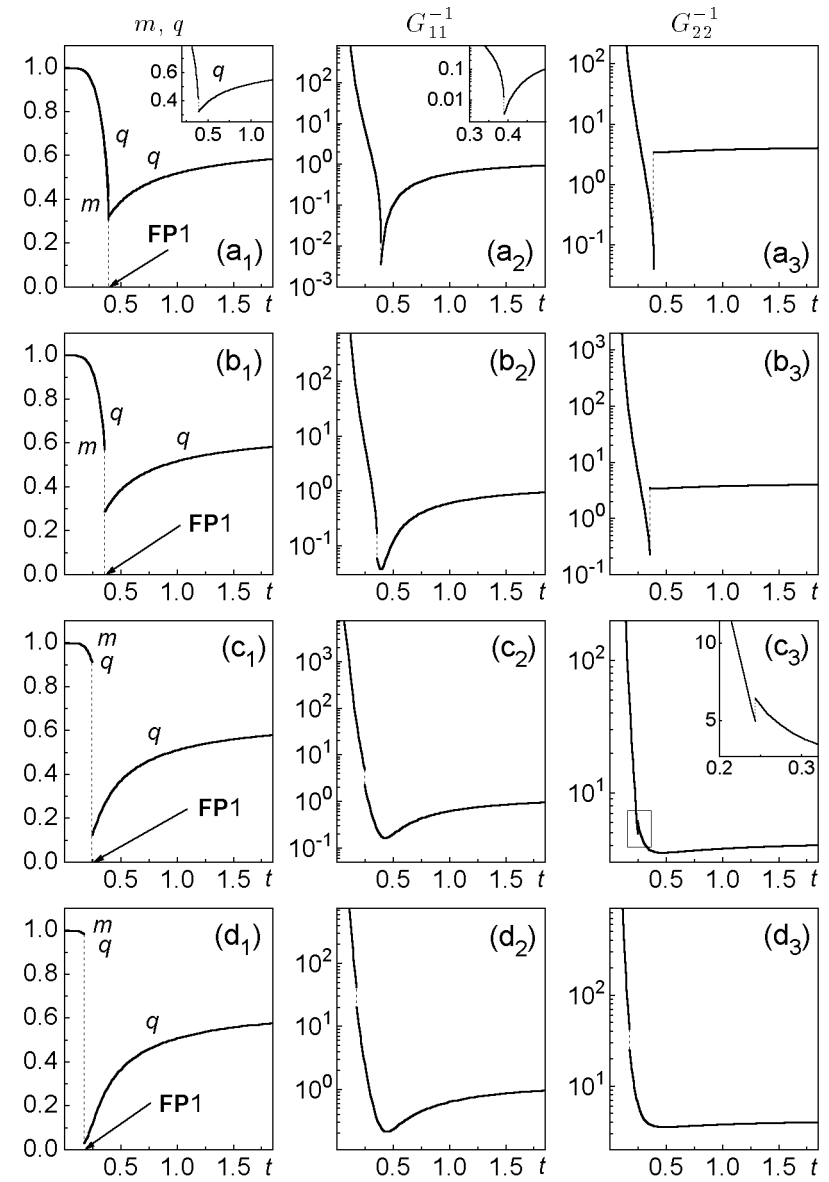


Рис. 37: Температурні залежності m , q та парних КФ G_{11}^{-1} , G_{22}^{-1} для $k' = 0$ при різних значеннях параметра d : (a) $-d = -2.825$; (b) $-d = -2.85$; (c) $-d = -2.95$; (d) $-d = -2.99$.

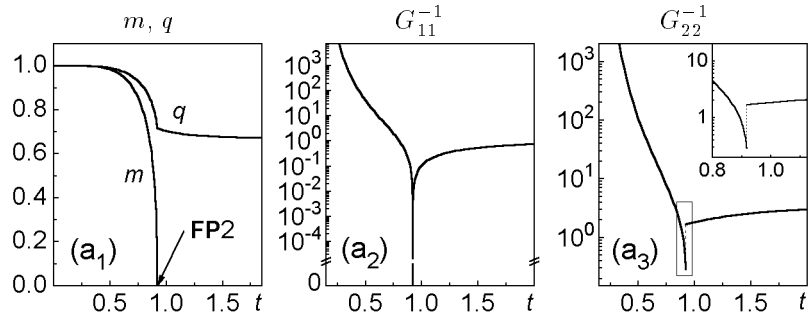
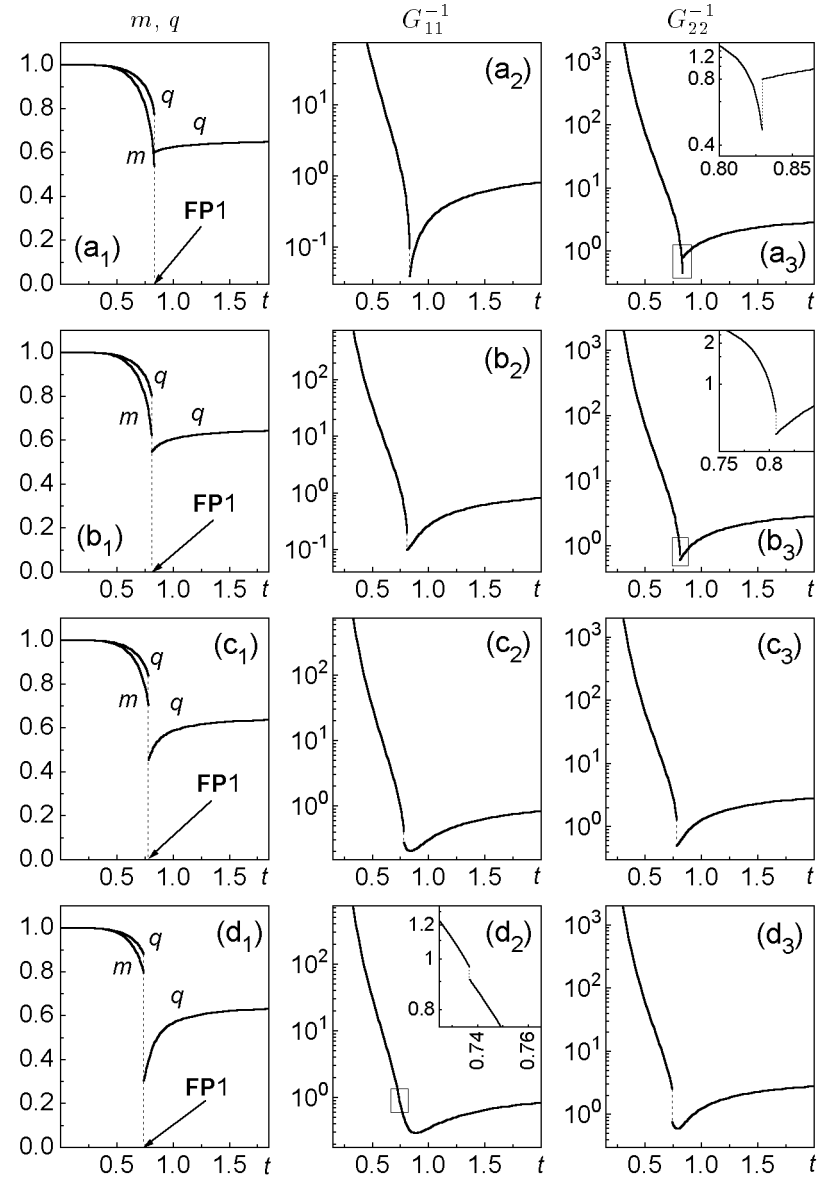


Рис. 38: Температурні залежності m , q та парних КФ G_{11}^{-1} , G_{22}^{-1} для $k' = 2.0$ при $d = -8.0$.

(див. рис. 44(b)) так само, як для $k'=2.0, 2.6, 2.88$ (див. рис. 39(b), 40(b), 41(b)) коли трохи відійти від регіону II. Для $k'=3.2$ в регіоні VI (між регіонами V та I) поведінка $G_{11}^{-1}(t)$ та $G_{22}^{-1}(t)$ якісно інакша ніж для $k'=0.0, 2.0, 2.6, 2.88, 2.95$ біля регіону II (див. рис. 37(a), 39(a), 40(a), 41(a), 44(a)). Тут $G_{22}^{-1}(t > t_c)$ (див. рис. 47) має мінімум (така поведінка $G_{22}^{-1}(t)$ в парафазі збереглася ще з регіону II (див. рис. 46)). Для $k'=3.2$ якщо трохи відійти від регіону II (в регіонах III та VI) мінімум $G_{22}^{-1}(t > t_c)$ зникає (див. рис. 48) і поведінка $G_{11}^{-1}(t)$ та $G_{22}^{-1}(t)$ стає якісно такою самою як і для $k' = 0.0, 2.0, 2.6, 2.88, 2.95$ біля регіону II (див. рис. 37(a), 39(a), 40(a), 41(a), 44(a)).

Тепер розглянемо поведінку обернених КФ $G_{11}^{-1}(t)$, $G_{12}^{-1}(t)$, $G_{22}^{-1}(t)$ при ФП **QP1** в регіонах I та VII (див. рис. 42, 45, 51). Тут обернена КФ $G_{12}^{-1}(t)$ як у фазі **Q** так і у фазі **P** є нескінченно великою величиною. Обернена КФ $G_{11}^{-1}(t)$ має розрив, причому $G_{11}^{-1}(t_c - 0) > G_{11}^{-1}(t_c + 0)$, $G_{11}^{-1}(t < t_c)$ спадає, а $G_{11}^{-1}(t > t_c)$ може зростати, або спадати з наступним зростанням. Обернена КФ $G_{22}^{-1}(t)$ в точці ФП має злам. Для $k' = 2.88$ у всьому регіоні VII обернена КФ $G_{11}^{-1}(t)$ в парафазі має мінімум (див. рис. 42). Для $k' = 2.95, 4.0$ спочатку $G_{11}^{-1}(t > t_c)$ зростає (див. рис. 45(a), 51(a)), а якщо зменшувати d , то у $G_{11}^{-1}(t > t_c)$ появляється мінімум (див. рис. 45(b), 51(b)). Зауважимо також, що переважно, якщо в парафазі $q(t)$ зростає, то і $G_{11}^{-1}(t > t_c)$ має мінімум (див. рис. 42, 45(b), 51(b)), а якщо $q(t > t_c)$ спадає, то $G_{11}^{-1}(t > t_c)$ зростає (див. рис. 51(a)). Але буває і так, що $q(t)$ в фазі **P** зростає, проте $G_{11}^{-1}(t > t_c)$ зростає не маючи мінімуму (див. рис. 45(a)). Слід ще також зауважити, що обернена КФ $G_{22}^{-1}(t)$



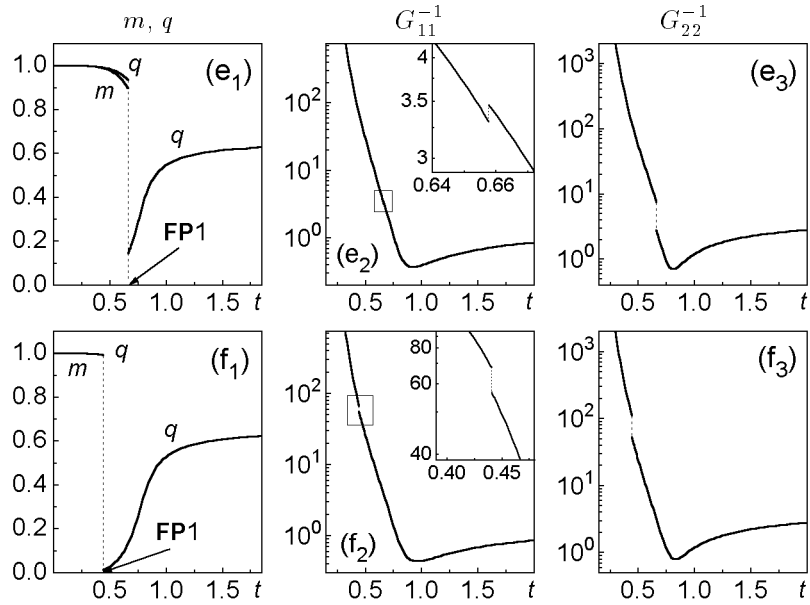


Рис. 39: Температурні залежності m , q та парних КФ G_{11}^{-1} , G_{22}^{-1} для $k' = 2.0$ при різних значеннях параметра d : (a) $-d = -8.5$; (b) $-d = -8.6$; (c) $-d = -8.7$; (d) $-d = -8.8$; (e) $-d = -8.9$; (f) $-d = -8.99$. (Частини (a), (b), (c), (d) рис. є на попередній сторінці.)

для малих k' в парафазі зростає (див. рис. 42, 45), проте для великих k' , коли ми знаходимося дуже близько до регіону V, то $G_{22}^{-1}(t)$ як перед зломом в точці ФП так і після нього спадає, і тільки при вищих температурах починає зростати (див. рис. 51(a)).

При **FQ1** (регіон VII) обернена КФ $G_{12}^{-1}(t)$ має нескінченний скачок ($G_{12}^{-1}(t_c - 0) > 0$, $G_{12}^{-1}(t_c + 0) = \infty$, $G_{12}^{-1}(t < t_c)$ спадає), а обернені КФ $G_{11}^{-1}(t)$ і $G_{22}^{-1}(t)$ мають скінченний розрив. Як в **F** фазі так і в **Q** фазі $G_{11}^{-1}(t)$ і $G_{22}^{-1}(t)$ спадають, причому $G_{11}^{-1}(t_c - 0) < G_{11}^{-1}(t_c + 0)$, $G_{22}^{-1}(t_c - 0) > G_{22}^{-1}(t_c + 0)$ (див. рис. 42, 45).

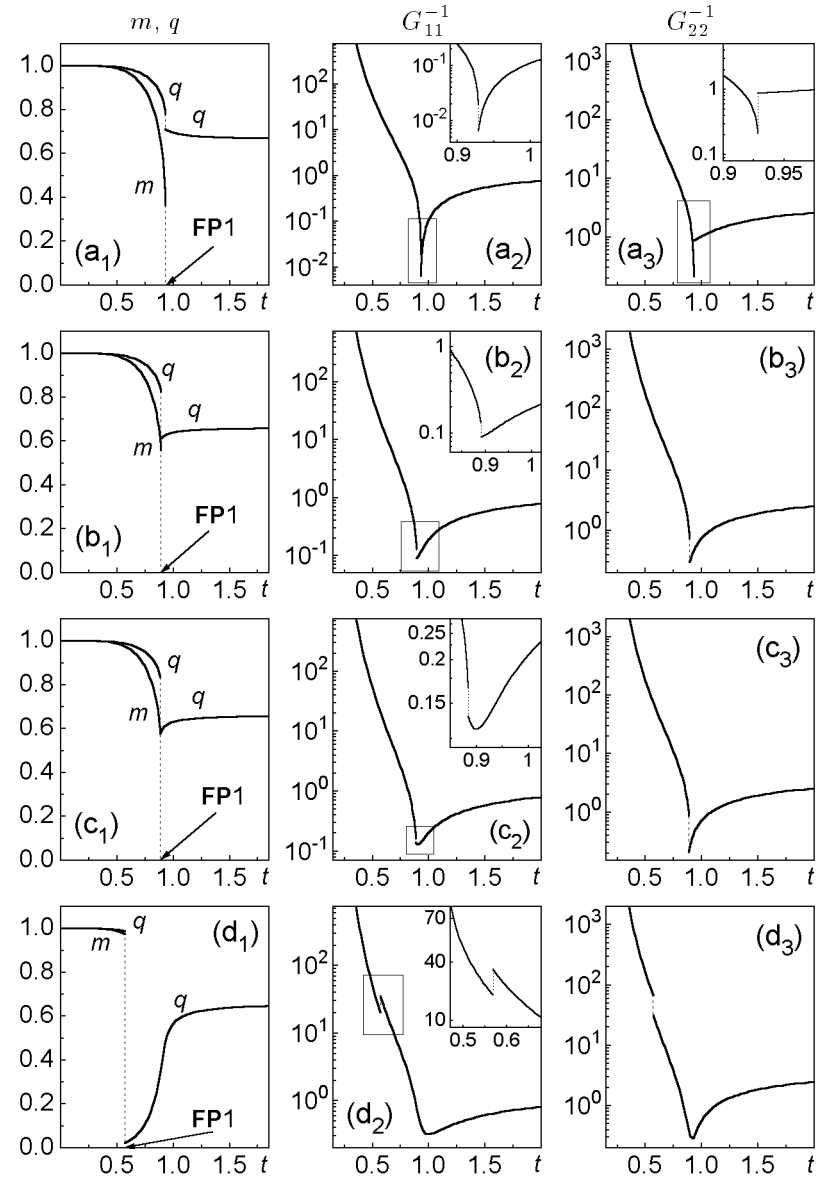


Рис. 40: Температурні залежності m , q та парних КФ G_{11}^{-1} , G_{22}^{-1} для $k' = 2.6$ при різних значеннях параметра d : (a) $-d = -10.4$; (b) $-d = -10.6$; (c) $-d = -10.625$; (d) $-d = -10.79$.

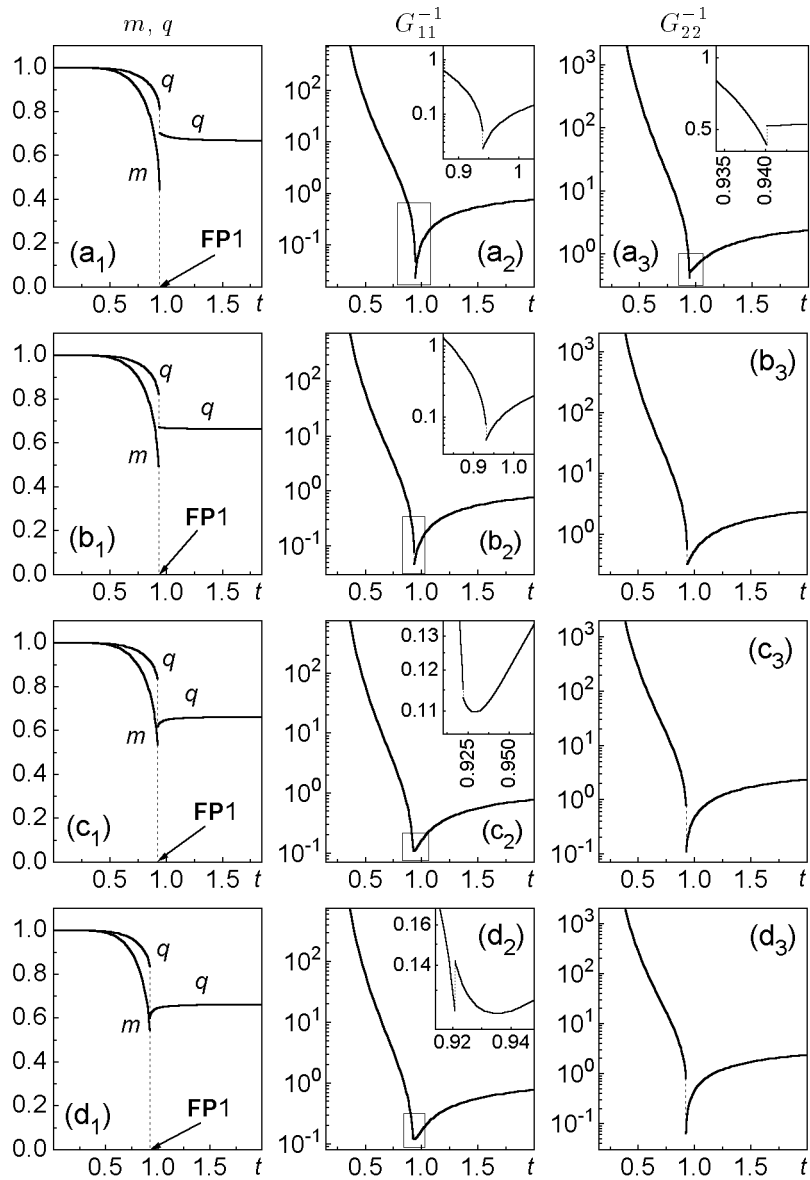


Рис. 41: Температурні залежності m , q та парних КФ G_{11}^{-1} , G_{22}^{-1} для $k' = 2.88$ при різних значеннях параметра d : (a) $-d = -11.5$; (b) $-d = -11.55$; (c) $-d = -11.59$; (d) $-d = -11.595$.

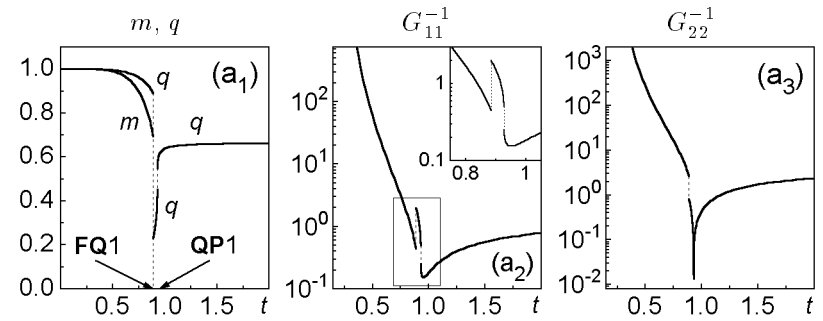


Рис. 42: Температурні залежності m , q та парних КФ G_{11}^{-1} , G_{22}^{-1} для $k' = 2.88$ для $d = -11.61$.

При **QF1** (регіони V, VI) обернена КФ $G_{12}^{-1}(t)$ має нескінченний скачок ($G_{12}^{-1}(t_c - 0) = \infty$, $G_{12}^{-1}(t_c + 0) > 0$, $G_{12}^{-1}(t)$ в **F** фазі спадає), а обернені КФ $G_{11}^{-1}(t)$ і $G_{22}^{-1}(t)$ мають скінченний розрив, причому $G_{11}^{-1}(t_c - 0) > G_{11}^{-1}(t_c + 0)$. Як в **Q** фазі так і в **F** фазі $G_{11}^{-1}(t)$ і $G_{22}^{-1}(t)$ спадають (див. рис. 48, 49, 50). При достатньо малих k' для довільних d (див. рис. 48), а також при більших k' і достатньо великих d (див. рис. 49, 50(a)) $G_{22}^{-1}(t_c - 0) < G_{22}^{-1}(t_c + 0)$. Для великих k' і малих d (див. рис. 50(b)) $G_{22}^{-1}(t_c - 0) > G_{22}^{-1}(t_c + 0)$.

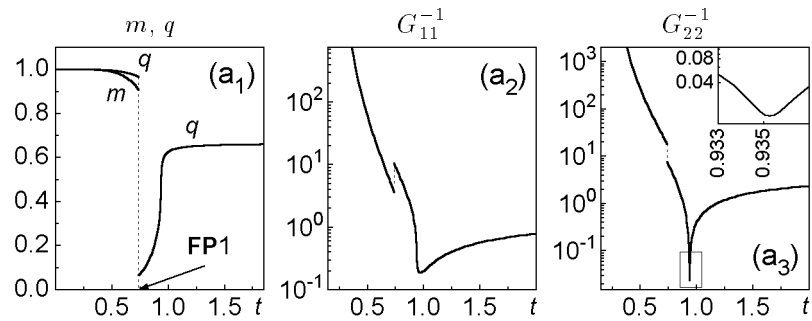


Рис. 43: Температурні залежності m , q та парних КФ G_{11}^{-1} , G_{22}^{-1} для $k' = 2.88$ для $d = -11.63$.

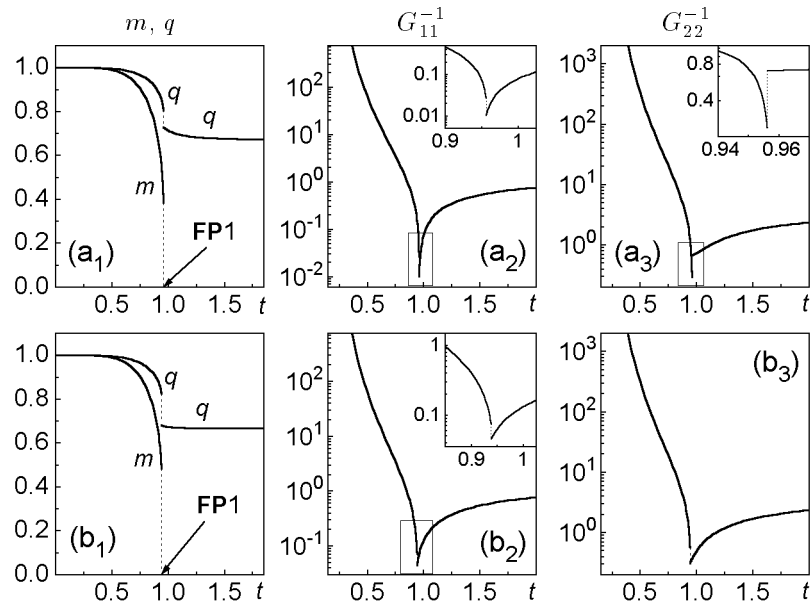


Рис. 44: Температурні залежності m , q та парних КФ G_{11}^{-1} , G_{22}^{-1} для $k' = 2.95$ при різних значеннях параметра d :
(a) $-d = -11.7$; (b) $-d = -11.8$.

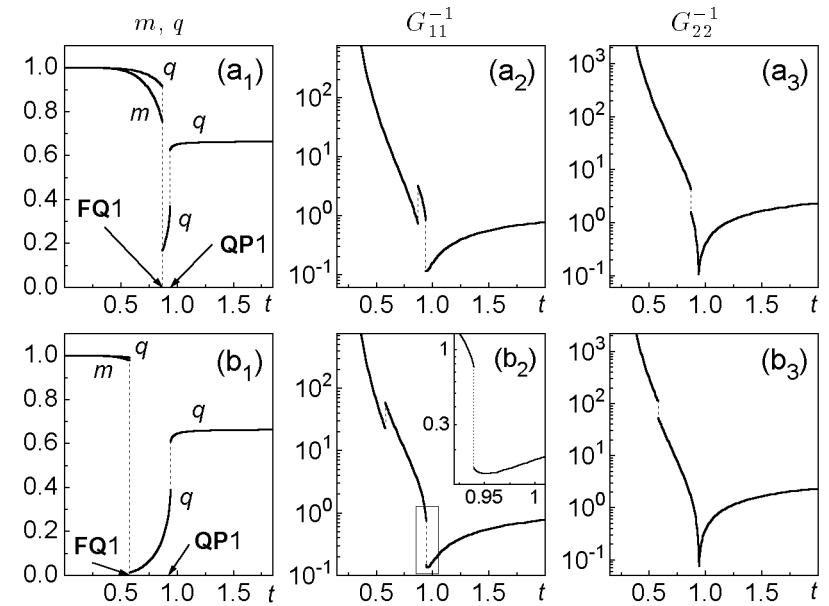


Рис. 45: Температурні залежності m , q та парних КФ G_{11}^{-1} , G_{22}^{-1} для $k' = 2.95$ при різних значеннях параметра d :
(a) $-d = -11.84$; (b) $-d = -11.849$.

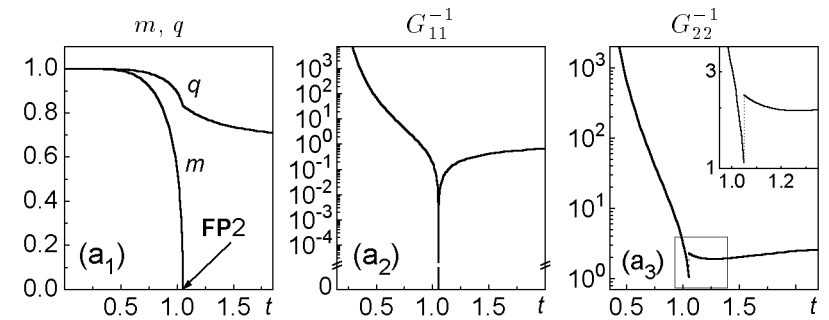


Рис. 46: Температурні залежності m , q та парних КФ G_{11}^{-1} , G_{22}^{-1} для $k' = 3.2$ при $d = -12.0$.

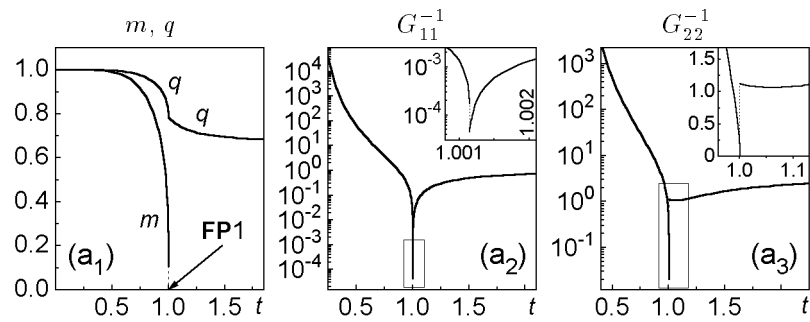


Рис. 47: Температурні залежності m , q та парних КФ G_{11}^{-1} , G_{22}^{-1} для $k' = 3.2$ при $d = -12.47$.

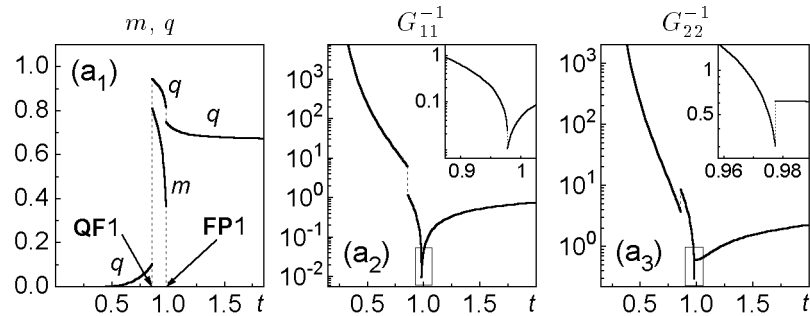


Рис. 48: Температурні залежності m , q та парних КФ G_{11}^{-1} , G_{22}^{-1} для $k' = 3.2$ при $d = -12.63$.

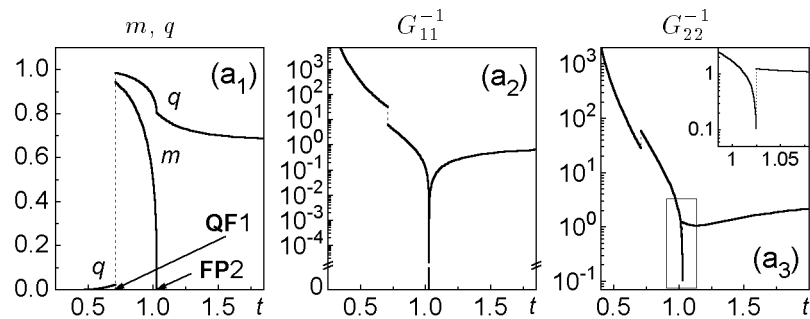


Рис. 49: Температурні залежності m , q та парних КФ G_{11}^{-1} , G_{22}^{-1} для $k' = 3.44$ при $d = -13.34$.

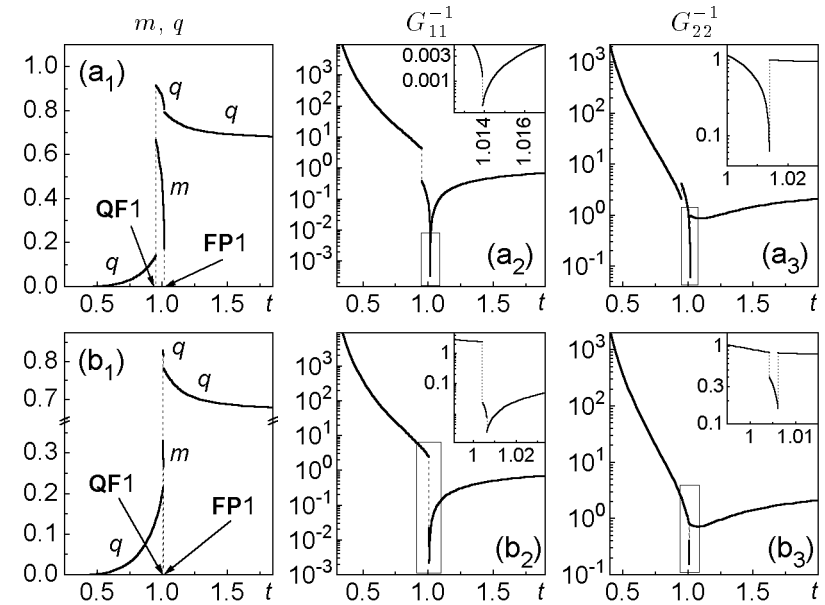


Рис. 50: Температурні залежності m , q та парних КФ G_{11}^{-1} , G_{22}^{-1} для $k' = 3.44$ при різних значеннях параметра d :
(a) - $d = -13.42$; (b) - $d = -13.475$.

Література

- [1] Blume M., Emery V.J., Griffiths R.B. Ising model for the λ -transition and phase separation in $\text{He}^3 - \text{He}^4$ mixtures. // Phys. Rev. A., 1971, vol. 4, No 3, p. 1071-1077.
- [2] Sivardiere J. Critical and multicritical points in fluids and magnets // Lecture' Notes in physics. Static critical phenomena in inhomogeneous systems. Proceedings, Karpacz. 1984, p. 247-289.
- [3] Сороков С.І., Левицький Р.Р., Баран О.Р. Наближення дво-частинкового кластера для зіпівських моделей з довільним значенням спіна. 1. Модель Блума-Капеля-Гріфітса.// Львів, 1993. (Препринт./АН України. Ін-т фіз.конденс.систем; ІФКС-93-1У).
- [4] Wang Y., Lee F. Linked-cluster series analysis of the Blume-Capel model. // The American Physical Society, 1984, vol. 29, No 9, p. 5156-5164.
- [5] Смарт Дж. Эффе́ктивное поле в теории магнетизма.- М.: Наука, 1968, 271с.
- [6] Вакс В.Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков.- М.: Наука, 1973, 327с.

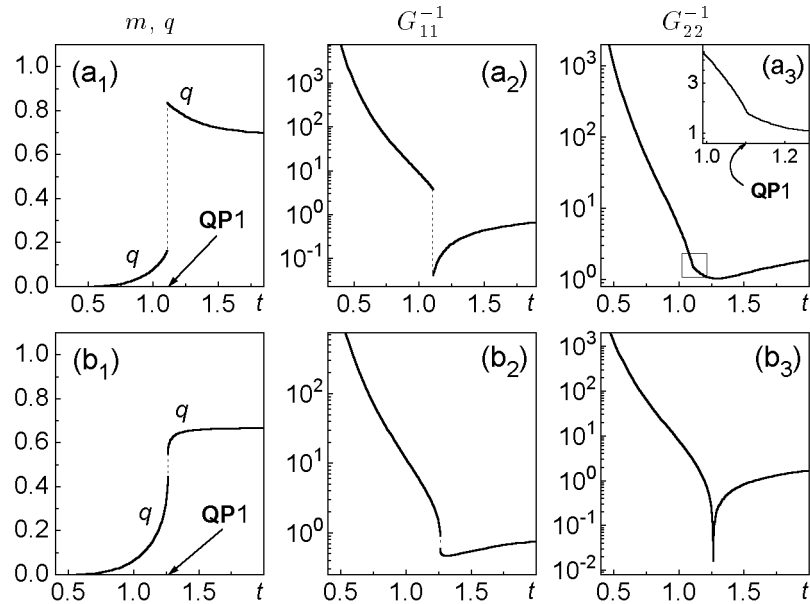


Рис. 51: Температурні залежності m , q та парних КФ G_{11}^{-1} , G_{22}^{-1} для $k' = 4.0$ при різних значеннях параметра d : (а) – $d = -15.4$; (б) – $d = -15.79$.

[7] Вакс В.Г., Зиненко В.И., Шнейдер В.Е. Микроскопические теории структурных фазовых переходов типа порядок-беспорядок в кристаллах. // Усп. физ. наук, 1983, vol. 29, No 4, с.629-673.

[8] Kubo P. Generalized cumulant expansion method. // J. Phys. Soc. Japan, 1962, vol. 17, No 7, p. 1100-1120.

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

[10] Iwashita T., Uryû N. Ising Ferromagnet with biquadratic exchange interaction and uniaxial anisotropy. // Phys. Stat. Sol. (b), 1986, vol. 137, p. 65-72.

[11] Kaneyoshi T., Sarmiento E.F. The application of the differential operator method to the Blume-Emery-Griffiths model. // Phys. A, 1988, vol. 152, p. 343-358.

[12] Tucker J.W. Two-site cluster theory for the spin-one Ising model. // J. Magn. Magn. Mat., 1990, vol. 87, p. 16-22.

[13] Chakraborty K.G. Effective-field model for a spin-1 Ising system with dipolar and quadrupolar interactions. // Phys. Rev. B, 1984, vol. 29, No 3, p. 1454-1457.

[14] Siqueira A.F., Fittipaldi I.P. On the phase transition in the Blume-Capel

model. // Phys. Stat. Sol. (b), 1983, vol. 119, p. K31-K36.

[15] Tamura I., Kaneyoshi T. Ising ferromagnets with random anisotropy. // Prog. Theor. Phys., 1981, vol. 66, No 5, p. 1892-1894.

[16] Taggart B.G. Correlation effective field approximation for the Ising model. // Physica A, 1982, vol. 113A, p. 535-545.

[17] Takahashi K., Tanaka M. Spin-one Ising model with bilinear and biquadratic interactions. II. Phase diagram. // J. Phys. Soc. Japan, 1980, vol. 48, No 5, p. 1423-1428.

[18] Kasono K., Ono I. Re-entrant phase transitions of the Blume-Emery-Griffiths model. // Z. Phys. B - Condensed Matter, 1992, vol. 88, p. 205-212.

[19] Saul D., Wortis M., Stauffer D. Tricritical behavior of the Blume-Capel model. // Phys. Rev. B, 1974, vol. 9, No 11, p. 4964-4980.

[20] De Alcantara Bonfim O.F., Obcemea C.H. Reentrant behaviour in Ising models with biquadratic exchange interaction. // Z. Phys. B - Condensed Matter, 1986, vol. 64, p. 469-471.

[21] Booth R.J.C., Lu Hua, Tucker J.W., Care C.M., Halliday I. Monte Carlo study of the BEG model on a honeycomb lattice. // J. Magn. Magn. Mat., 1993, vol. 128, p. 117-123.

[22] 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).

[23] Юхновський І.Р., Левицький Р.Р., Сороков С.І. Термодинамика и функции распределения модели Изинга. Приближение двухчастичного кластера. // Киев, 1986, 33с. (Препринт./АН УССР. Ін-т теор.физ.; ИТФ-86-142Р).

[24] Сороков С.І., Левицький Р.Р., Баран О.Р. Модель Блюма-Капеля-Гріфітса в наближенні двочастинкового кластера. Числові розрахунки. // Львів, 1995, 45с. (Препринт./АН України. Ін-т фіз. конденс. систем; ІФКС-95-9У).

[25] Chen H., Levy P. Dipole and quadrupole phase transitions in spin-1 models. // Phys. Rev. B, 1973, vol. 7, No 9, p. 4267-4283.

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

Дослідження Ізінгівських моделей з довільним значенням спіна в наближенні двочастинкового кластера.
Кореляційні функції моделі Блюма-Емері-Гріфитса

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

© Усі права застережені