ТЕРМОДИНАМІКА XXZ–МОДЕЛІ В НАБЛИЖЕННІ ДВОЧАСТИНКОВОГО КЛАСТЕРА

Р. Р. Левицький, С. І. Сороков, О. Р. Баран, І. М. Пиндзин
Інститут фізики конденсованих систем Національної Академії наук України,
вул. Свєнціцького, 1, Львів, 290011, Україна
E–mail: sorok@icmp.lviv.ua
(Отримано 11 березня 1997 р.)

Досліджена XXZ–модель у наближенні двочастинкового кластера з двома варіяційними параметрами φ^z, φ^x. Далекосяжну взаємодію J враховано в наближенні молекулярного поля. Для різних значень 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 — короткосяжна взаємодія) та далекосяжної взаємодії J побудовані фазові діяграми й отримані температурні залежності $\langle S^z\rangle$, $\langle S^x\rangle$, ентропії, теплоємности та статичної сприйнятливости. Показано, що при $\frac{\alpha}{\gamma}\geq 1$ наближення двочастинкового кластера дає некоректні результати в низькотемпературній області.

Ключові слова: XXZ–модель, наближення двочастинкового кластера.

PACS number: 75.10.Jm

I. ВСТУП

У сучасній статистичній фізиці значну увагу приділяють дослідженню сеґнетоактивних і магнетних матеріялів, які описуються псевдоспіновими моделями. Так, для псевдоспінових систем з далекосяжними взаємодіями, а також з короткосяжними кореляціями за наявности великого числа найближчих сусідів широко використовують розклади за оберненим радіусом взаємодії [1–4]. У випадку псевдоспінових систем з короткосяжними взаємодіями (переважно з урахуванням лише найближчих сусідів) достатньо ефективним (особливо для низькорозмірних систем) є метод кластерних розвинень [5–16]. Проте існує цілий ряд речовин, для яких суттєвими є ефективні далекосяжні й короткосяжні взаємодії між псевдоспінами. Серед них слід виділити насамперед сеґнетоактивні матеріяли типу лад–безлад, у тому числі сеґнетоактивні сполуки з водневими зв'язками, а також квазіодновимірні і квазідвовимірні магнетні й сеґнетоактивні сполуки. Ми тут не будемо зупинятися на з'ясуванні фізичної природи обох типів взаємодій. У кожній конкретній задачі це питання вимагає спеціяльного розгляду. Для адекватного опису таких об'єктів необхідний теоретичний підхід, який би дозволив застосовувати різну техніку при врахуванні короткосяжних і далекосяжних взаємодій. Варто зауважити, що згадана вище математична проблема є типовою для багаточастинкових систем. Її успішно вирішували при побудові мікроскопічної теорії металів [17–20] та класичних систем [21,22]. У цих роботах далекосяжні взаємодії описано у фазовому просторі колективних змінних, а короткосяжні — у фазовому просторі індивідуальних координат. Короткосяжні взаємодії, таким чином, відіграють ніби базисну роль стосовно далекосяжних взаємодій. Тому переважно [21,22] систему з короткосяжними взаємодіями називають базисною системою або системою відліку.

Використовуючи ідею виділення базисної системи [21,22], у 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 досягнутий на основі методу кластерних розвинень [5–15]. Однак, на жаль, кластерний підхід розвинений лише для розрахунку статичних характеристик псевдоспінових систем. У зв'язку з тим дуже важливою проблемою є узагальнення розвиненого в роботах [5–15] кластерного підходу для розрахунку динамічних характеристик базисної системи. У роботі [25] для моделі Ізинґа ця проблема вирішена при обмеженні першим порядком кластерного розвинення за двочастинковим кластером (те ж саме, що наближення двочастинкового кластера (НДК)). Запропонована в [25] методика розрахунку кореляційних функцій узагальнена для випадку квантових псевдоспінових систем зі спіном $\frac{1}{2}$ (вирази для кореляційних функцій у явному вигляді отримані для моделі Гайзенберґа) [26] та в роботах [27,28] для випадку Ізинґівських моделей з довільним значенням спіну (вирази для кореляційних функцій у явному вигляді отримані для моделі Блюма–Емері–Ґріфітса).

Метою цієї роботи є дослідити межі застосування наближення двочастинкового кластера з двома варіяційними параметрами за короткосяжними взаємодіями при врахуванні далекосяжних взаємодій у наближенні молекулярного поля (НМП) для XXZ–моделі зі 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) зробимо в наступній роботі.

II. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Розглянемо псевдоспінові системи з $S = \frac{1}{2}$, які описуються гамільтоніяном

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

Тут перший доданок описує взаємодію локалізованих атомних магнетних моментів з неоднорідними магнетними полями, другий — обмінну взаємодію атомних магнетних моментів, а останній доданок описує далекосяжні взаємодії між магнетними моментами. S_i^a $(a = x, y, z)$ — дворядні матриці Паулі, γ, α — параметри анізотропії (випадок $\gamma = 0$ відповідає XY–моделі, $\alpha = 0$ — моделі Ізинґа, а $\gamma = \alpha$ відповідає моделі Гайзенберґа). 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 цієї роботи є дослідження термодинамічних властивостей XXZ–моделі в першому порядку кластерного розвинення за короткосяжними взаємодіями та в наближенні молекулярного поля за далекосяжними взаємодіями.

У рамках НМП за далекосяжними взаємодіями гамільтоніян (2.1) зобразимо у вигляді

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

Тут використане позначення для базисного гамільтоніяна:

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

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

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

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

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

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

Кореляційні функції моделі (кумулянтні середні від псевдоспінових операторів за розподілом Ґіббса з гамільтоніяном $\mathcal{H}$), шукатимемо таким чином:

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

Кореляційні функції (КФ) базисної моделі визначаються співвідношеннями

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

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

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

III. НАБЛИЖЕННЯ ДВОЧАСТИНКОВОГО КЛАСТЕРА З ДВОМА ВАРІЯЦІЙНИМИ ПАРАМЕТРАМИ

У цьому розділі ми розглянемо псевдоспінові системи, які описуються гамільтоніяном (2.3) (базисна задача). Проведемо кластерне розвинення при розбитті ґратки 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 ґратки на двочастинкові кластери діє z полів (z — число найближчих сусідів) з боку кластерів, що містять цей вузол. Перейдемо від вузлового до кластерного підсумовування [16]:

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

Після тотожного перетворення з урахуванням (3.1) базисний гамільтоніян (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

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

$$\tilde{æ}_1^a = æ_1^a + \sum_{r\in\pi_1} {}^r\varphi_1^a, \quad (a = x, z);$$

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

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

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

Провівши розплутування операторів за допомогою T_τ–експоненти та обмежившись першим порядком кластерного розвинення [16], що відповідає наближенню двочастинкового кластера, отримаємо ${}^k\mathcal{F}$–функцію (див. [29]) у вигляді:

$${}^k\mathcal{F}\Big(\{æ^z, æ^x\}, \{\varphi^z, \varphi^x\}\Big) \tag{3.6}$$
$$= (1-z)\sum_1 F_1\Big(\tilde{æ}_1^z, \tilde{æ}_1^x\Big)$$
$$+\tfrac{1}{2}\sum_{1,2} F_{12}\Big({}^2\tilde{æ}_1^z, {}^2\tilde{æ}_1^x, {}^1\tilde{æ}_2^z, {}^1\tilde{æ}_2^x\Big).$$

Тут F_1 — одночастинкова, F_{12} — двочастинкова внутрішньокластерні функції:

$$F_1\Big(\tilde{æ}_1^z, \tilde{æ}_1^x\Big) = \ln Z_1\Big(\tilde{æ}_1^z, \tilde{æ}_1^x\Big); \tag{3.7}$$
$$Z_1\Big(\tilde{æ}_1^z, \tilde{æ}_1^x\Big) = \mathrm{Sp}_{\boldsymbol{S}_1} \exp\Big[\mathcal{H}_1\Big(\tilde{æ}_1^z, \tilde{æ}_1^x\Big)\Big];$$

$$F_{12}\Big({}^2\tilde{æ}_1^z, {}^2\tilde{æ}_1^x, {}^1\tilde{æ}_2^z, {}^1\tilde{æ}_2^x\Big) \tag{3.8}$$
$$= \ln Z_{12}\Big({}^2\tilde{æ}_1^z, {}^2\tilde{æ}_1^x, {}^1\tilde{æ}_2^z, {}^1\tilde{æ}_2^x\Big) = \ln \mathrm{Sp}_{\boldsymbol{S}_1,\boldsymbol{S}_2} \mathrm{e}^{\mathcal{H}_{12}};$$

$$\mathcal{H}_{12}\Big({}^2\tilde{æ}_1^z, {}^2\tilde{æ}_1^x, {}^1\tilde{æ}_2^z, {}^1\tilde{æ}_2^x\Big) \tag{3.9}$$
$$= \mathcal{H}_1\Big(\tilde{æ}_1^z, \tilde{æ}_1^x\Big) + \mathcal{H}_2\Big(\tilde{æ}_2^z, \tilde{æ}_2^x\Big) + U_{12}$$
$$= {}^2\tilde{æ}_1^z S_1^z + {}^1\tilde{æ}_2^z S_2^z + {}^2\tilde{æ}_1^x S_1^x + {}^1\tilde{æ}_2^x S_2^x$$
$$+K\Big[\gamma S_1^z S_2^z + \alpha\Big(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y\Big)\Big];$$

$${}^1\tilde{æ}_2^a = \tilde{æ}_2^a - {}^1\varphi_2^a = æ_2^a + \sum_{\substack{r\in\pi_2\\ r\neq 1}} {}^r\varphi_2^a, \quad (a = z, x). \tag{3.10}$$

На основі (2.7), (3.6) та умови екстремуму ${}^k\mathcal{F}$–функції за ${}^r\varphi_i^a$,

$$\frac{\partial\, {}^k\mathcal{F}}{\partial\, {}^r\varphi_i^a} = 0, \tag{3.11}$$

отримаємо систему $2N(z+1)$ рівнянь для $\langle S_1^a\rangle$ та кластерних полів ${}^r\varphi_1^a$ $(a = z, x)$

$$\langle S_1^a\rangle = \frac{\partial\, F_1}{\partial\, \tilde{æ}_1^a}, \tag{3.12}$$
$$\frac{\partial\, F_1}{\partial\, \tilde{æ}_1^a} = \frac{\partial\, F_{1r}}{\partial\, {}^r\tilde{æ}_1^a}. \tag{3.13}$$

Зауважимо, що система $2zN$ рівнянь для кластерних полів (3.13) (яку можна записати у вигляді $\langle S_1^a\rangle_{\rho_1} = \langle S_1^a\rangle_{\rho_{1r}}$, $(a = z, x)$ [29]), еквівалентна $2zN$ незалежним співвідношенням між матрицями густини

$$\rho_1(\boldsymbol{S}_1) = \mathrm{Sp}_{\boldsymbol{S}_r}[\rho_{1r}(\boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{S}_r)] \tag{3.14}$$

(із $3zN$ співвідношень (3.14) незалежними є $2zN$, оскільки з явного вигляду $\rho_1(\boldsymbol{S}_1)$, $\rho_{1r}(\boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{S}_r)$ випливає тотожне 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 (3.11) дає співвідношення (3.14) між внутрішньокластерними матрицями густини.

Оскільки нашим завданням у цій роботі є дослідження лише термодинамічних властивостей XXZ–моделі, то надалі 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 кристала (f–функція) в НМП за далекосяжними взаємодіями та в НДК за короткосяжною взаємодією матиме вигляд (тут і далі множник $\beta = \frac{1}{k_B T}$ будемо виділяти явно):

$$f\left(h^z, h^x\right) = {}^k f\left(æ^z, æ^x, \varphi^z, \varphi^x\right) \tag{3.15}$$
$$-\tfrac{1}{8}\beta J_0\left[\gamma\left(m^z\right)^2 + \alpha\left(m^x\right)^2\right];$$

$$æ^z = h^z + \tfrac{1}{2}\gamma J_0 m^z; \quad æ^x = h^x + \tfrac{1}{2}\alpha J_0 m^x; \tag{3.16}$$
$$J_0 = \sum_{j=1}^{N} J_{ij}; \quad m^a = 2\langle S^a\rangle.$$

${}^k f$–функція (логарифм статистичної суми на елементарну комірку кристала базисної моделі)

$${}^k f\left(æ^z, æ^x, \varphi^z, \varphi^x\right) \tag{3.17}$$
$$= (1-z)F_1\left(\tilde{æ}^z, \tilde{æ}^x\right) + \tfrac{z}{2}F_{12}\left(\tilde{\tilde{æ}}^z, \tilde{\tilde{æ}}^x\right)$$

виражається через одночастинкову внутрішньокластерну F_1–функцію

$$F_1\left(\tilde{æ}^z, \tilde{æ}^x\right) = \ln Z_1\left(\tilde{æ}^z, \tilde{æ}^x\right) = \ln \mathrm{Sp}_{\boldsymbol{S}_1} \mathrm{e}^{\mathcal{H}_1}; \tag{3.18}$$
$$\mathcal{H}_1\left(\tilde{æ}^z, \tilde{æ}^x\right) = \beta \sum_{a=x,z} \tilde{æ}^a S_1^a; \tag{3.19}$$
$$\tilde{æ}^a = æ^a + z\varphi^a, \quad (a = z, x)$$

та двочастинкову внутрішньокластерну F_{12}–функцію

$$F_{12}\left(\tilde{\tilde{æ}}^z, \tilde{\tilde{æ}}^x\right) \tag{3.20}$$
$$= \ln Z_{12}\left(\tilde{\tilde{æ}}^z, \tilde{\tilde{æ}}^x\right) = \ln \mathrm{Sp}_{\boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{S}_2} \exp(\mathcal{H}_{12});$$

$$\mathcal{H}_{12}\left(\tilde{\tilde{æ}}^z, \tilde{\tilde{æ}}^x\right) = \beta \sum_{a=x,z} \tilde{\tilde{æ}}^a \left(S_1^a + S_2^a\right) \tag{3.21}$$
$$+\beta K\left[\gamma S_1^z S_2^z + \alpha\left(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y\right)\right];$$

$$\tilde{\tilde{æ}}^a = æ^a + (z-1)\varphi^a, \quad (a = z, x). \tag{3.22}$$

Для визначення m^a та φ^a $(a = z, x)$ у випадку однорідного поля на основі (3.12) та (3.13) будемо мати чотири рівняння:

$$m^a = 2\frac{\partial F_1}{\partial(\beta\tilde{æ}^a)}, \tag{3.23}$$
$$\frac{\partial F_1}{\partial(\beta\tilde{æ}^a)} = \frac{\partial F_{1r}}{\partial(\beta\tilde{\tilde{æ}}^a)}. \tag{3.24}$$

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

$$\begin{array}{cc} 1 & + \\ 2 & -. \end{array} \tag{3.25}$$

У зображенні (3.25) гамільтоніян $\mathcal{H}_1$ має вигляд:

$$\mathcal{H}_1 = \tfrac{1}{2}\beta \begin{pmatrix} \tilde{æ}^z & \tilde{æ}^x \\ \tilde{æ}^x & -\tilde{æ}^z \end{pmatrix}. \tag{3.26}$$

Узявши до уваги (3.18), легко отримати в явному вигляді вираз для F_1–функції:

$$F_1\left(\tilde{æ}^z, \tilde{æ}^x\right) = \ln\left[2\mathrm{ch}\left(\tfrac{1}{2}\beta\Lambda\right)\right]; \tag{3.27}$$
$$\Lambda = \sqrt{(\tilde{æ}^z)^2 + (\tilde{æ}^x)^2}.$$

На основі (3.23) отримаємо рівняння для m^a, $(a = z, x)$:

$$m^a = \frac{\tilde{æ}^a}{\Lambda}\mathrm{th}\left(\tfrac{1}{2}\beta\Lambda\right). \tag{3.28}$$

Ураховуючи (3.19), на основі рівнянь (3.28) можна все звести до m^z та m^x, звільнившись від φ^z, φ^x:

$$\varphi^a = \frac{1}{z}\left[k_B T \frac{m^a}{M}\ln\left(\frac{1+M}{1-M}\right) - æ^a\right], \tag{3.29}$$

де

$$M = \sqrt{(m^z)^2 + (m^x)^2}. \tag{3.30}$$

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

$$\begin{array}{ccc} 1 & + & + \\ 2 & + & - \\ 3 & - & + \\ 4 & - & -. \end{array} \tag{3.31}$$

У зображенні (3.31) гамільтоніян $\mathcal{H}_{12}$ має вигляд:

$$\mathcal{H}_{12} = \tag{3.32}$$
$$= \beta \begin{pmatrix} \tilde{\tilde{æ}}^z + \frac{1}{4}\gamma K & \frac{1}{2}\tilde{\tilde{æ}}^x & \frac{1}{2}\tilde{\tilde{æ}}^x & 0 \\ \frac{1}{2}\tilde{\tilde{æ}}^x & -\frac{1}{4}\gamma K & \frac{1}{2}\alpha K & \frac{1}{2}\tilde{\tilde{æ}}^x \\ \frac{1}{2}\tilde{\tilde{æ}}^x & \frac{1}{2}\alpha K & -\frac{1}{4}\gamma K & \frac{1}{2}\tilde{\tilde{æ}}^x \\ 0 & \frac{1}{2}\tilde{\tilde{æ}}^x & \frac{1}{2}\tilde{\tilde{æ}}^x & -\tilde{\tilde{æ}}^z + \frac{1}{4}\gamma K \end{pmatrix}.$$

На основі (3.20) та (3.32) отримаємо для двочастинкової F_{12}–функції

$$F_{12}\Big(\tilde{\ae}^z, \tilde{\ae}^x\Big) = \ln\Big[\sum_{\xi=1}^{4} \mathrm{e}^{\beta E_\xi^{(12)}}\Big], \tag{3.33}$$

де

$$E_4^{(12)} = -\tfrac{1}{4}\gamma K - \tfrac{1}{2}\alpha K, \tag{3.34}$$

а три інші власні значення $E_{1,2,3}^{(12)}$ матриці (3.32) є коренями кубічного рівняння, яке зручно записати у вигляді:

$$\begin{aligned}&\Big(\tfrac{1}{4}\gamma K - E^{(12)}\Big)^2\Big(\tfrac{1}{4}\gamma K - \tfrac{1}{2}\alpha K + E^{(12)}\Big)\\ &\quad -\Big(\tfrac{1}{4}\gamma K - \tfrac{1}{2}\alpha K + E^{(12)}\Big)\Big(\tilde{\ae}^z\Big)^2\\ &\quad +\Big(\tfrac{1}{4}\gamma K - E^{(12)}\Big)\Big(\tilde{\ae}^x\Big)^2 = 0.\end{aligned} \tag{3.35}$$

IV. ДОСЛІДЖЕННЯ ВІЛЬНОЇ ЕНЕРҐІЇ

Тепер зупинимося на дослідженні вільної енерґії XXZ–моделі в НДК з двома варіяційними параметрами за короткосяжними взаємодіями та в НМП за далекосяжними взаємодіями.

$$F(m^z, m^x, \varphi^z, \varphi^x) = -k_B T N\Big(f(m^z, m^x, \varphi^z, \varphi^x)\Big). \tag{4.1}$$

Ураховуючи, що φ^a виражається через m^z, m^x (3.29), отримаємо вільну енерґію як функцію двох параметрів m^z, m^x:

$$\begin{aligned}&F(m^z, m^x)\\ &= -k_B T N\Big\{(1-z)\ln\Big[2\mathrm{ch}\Big(\tfrac{\beta}{2}\sqrt{(\tilde{\ae}^z)^2 + (\tilde{\ae}^x)^2}\Big)\Big]\\ &\quad + \tfrac{1}{2}z\ln\Big[\mathrm{e}^{-\beta K(\frac{1}{4}\gamma + \frac{1}{2}\alpha)} + \sum_{\xi=1}^{3}\mathrm{e}^{\beta E_\xi^{(12)}}\Big]\Big\}\\ &\quad + \tfrac{1}{8}J_0 N\Big[\gamma(m^z)^2 + \alpha(m^x)^2\Big],\end{aligned} \tag{4.2}$$

де $E_{1,2,3}^{(12)}$ є коренями кубічного рівняння (3.35); $\sum_{n=0}^{3} a_n (E^{(12)})^n = 0$, причому

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

Розглянемо спочатку анізотропну модель Гайзенберґа ($\alpha \neq \gamma$) при $h^z = h^x = 0$. Зауважимо, що ми вводимо інфінітезимальні поля $h^z \to 0$, $h^x \to 0$, оскільки при $h^z \equiv 0$, $h^x \equiv 0$, як видно з симетрії гамільтоніяна щодо заміни $S^a \to -S^a$, $m^a \equiv 0$ ($a = x, y, z$). На рис. 1, який є характерним для випадку $\alpha < \gamma$ при $z > 2$, $J_0 \geq 0$ та $z = 2$, $J_0 > 0$, наведена вільна енерґія (4.2) як функція параметрів m^z, m^x для $\alpha = 0.5$, $\gamma = 1$, $z = 4$, $J_0 = 0.1$ при $t = 4\frac{k_B T}{zK} = 0.75 > t_c$ та $t = 0.55 < t_c$. Видно, що при $\alpha < \gamma$ абсолютний мінімум вільної енерґії буде при $m^x \equiv 0$. У випадку $\alpha > \gamma$ залежності вільної енерґії від параметрів m^z, m^x якісно відмінні від поданих на рис. 1. У цьому випадку абсолютний мінімум вільної енерґії буде при $m^z \equiv 0$.

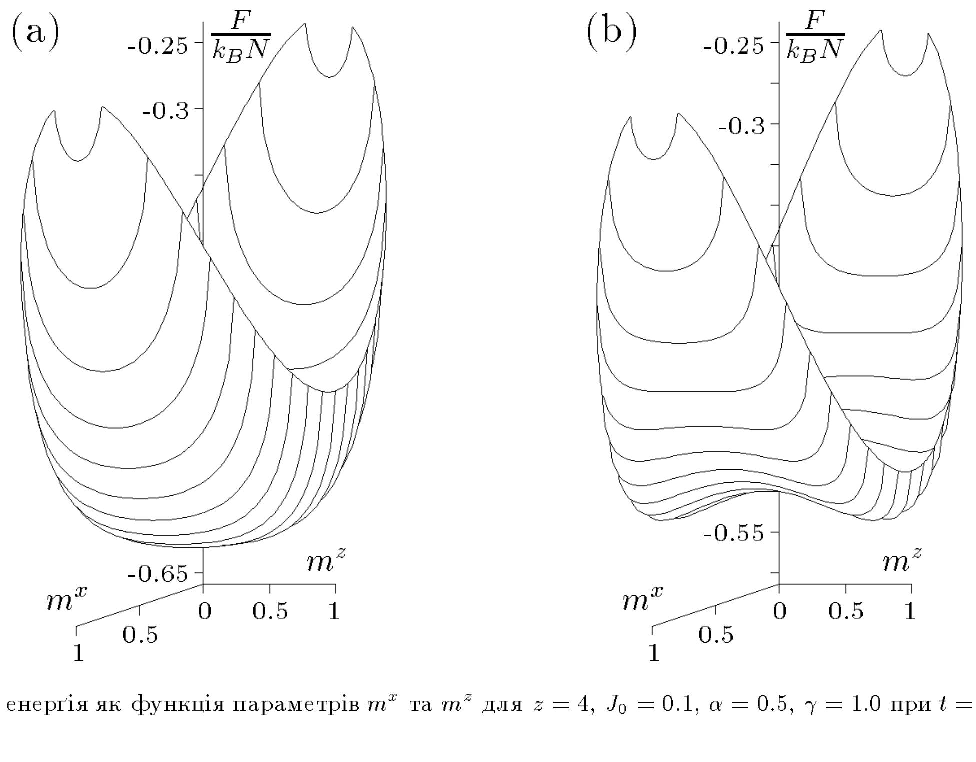

Рис. 1. Вільна енерґія як функція параметрів m^x та m^z для $z = 4$, $J_0 = 0.1$, $\alpha = 0.5$, $\gamma = 1.0$ при $t = 4\frac{k_B T}{zK} = 0.75$ (a) та $t = 0.55$ (b).

Крім того, у низькотемпературній області (за винятком певного проміжку значень параметра анізотропії $\frac{\alpha}{\gamma} \in [1, (\frac{\alpha}{\gamma})_a]$; значення $(\frac{\alpha}{\gamma})_a$ залежить від типу ґратки та величини далекосяжної взаємодії) абсолютний мінімум вільної енергії досягається при $m^z = m^x = 0$, тобто має місце антиточка Кюрі.

У випадку $\alpha = \gamma$ (ізотропна модель Гайзенберга) вводимо інфінітезимальне поле $h^z \to 0$ ($h^x \equiv 0$) [30], тоді $m^x \equiv 0$, або інфінітезимальне поле $h^x \to 0$ ($h^z \equiv 0$), тоді $m^z \equiv 0$.

Отже, з урахуванням (3.29), бачимо, що для $\alpha < \gamma$, $h^z = h^x \to 0$ та для $\alpha = \gamma$, $h^z \to 0$, $h^x \equiv 0$ маємо $\varphi^x = m^x \equiv 0$, а для $\alpha > \gamma$, $h^z = h^x \to 0$ та для $\alpha = \gamma$, $h^x \to 0$, $h^z \equiv 0$ маємо $\varphi^z = m^z \equiv 0$.

V. НАБЛИЖЕННЯ ДВОЧАСТИНКОВОГО КЛАСТЕРА З ОДНИМ ВАРІЯЦІЙНИМ ПАРАМЕТРОМ

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

Розглянемо спочатку перший випадок. На основі (3.15), (3.17), (3.27) та (3.31)–(3.33) отримаємо $f(h^z)$–функцію у явному вигляді:

$$f(h^z) = (1-z)F_1(\tilde{æ}^z) + \tfrac{z}{2}F_{12}(\tilde{\tilde{æ}}^z) - \tfrac{1}{8}\beta\gamma J_0\left(m^z\right)^2, \quad (5.4)$$

де

$$F_1(\tilde{æ}^z) = \ln Z_1(\tilde{æ}^z); \quad (5.5)$$
$$Z_1(\tilde{æ}^z) = 2\mathrm{ch}(\tfrac{1}{2}\beta\tilde{æ}^z);$$
$$F_{12}(\tilde{\tilde{æ}}^z) = \ln Z_{12}(\tilde{\tilde{æ}}^z); \quad (5.6)$$
$$Z_{12}(\tilde{\tilde{æ}}^z) = 2\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\gamma K}L(\tilde{\tilde{æ}}^z);$$
$$L(\tilde{\tilde{æ}}^z) = \left[\mathrm{ch}(\beta\tilde{\tilde{æ}}^z) + \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\beta\gamma K}\mathrm{ch}(\tfrac{1}{2}\beta\alpha K)\right]. \quad (5.7)$$

На основі рівнянь (3.23) (або (3.28)) та (3.24) отримаємо систему рівнянь для m^z та φ^z:

$$m^z = \mathrm{th}(\tfrac{1}{2}\beta\tilde{æ}^z), \quad (5.8)$$

$$\mathrm{th}(\tfrac{1}{2}\beta\tilde{æ}^z) = \frac{\mathrm{sh}(\beta\tilde{\tilde{æ}}^z)}{L(\tilde{\tilde{æ}}^z)}. \quad (5.9)$$

Узявши до уваги, що за допомогою (3.29) можна виключити φ^z, отримаємо рівняння для m^z:

$$m^z = \frac{\mathrm{sh}\left(\beta\tilde{\tilde{æ}}^z(m^z)\right)}{L(m^z)}, \quad (5.10)$$

де

$$\tilde{\tilde{æ}}^z(m^z) = \tfrac{1}{z}\left\{(z-1)k_BT\ln\left(\frac{1+m^z}{1-m^z}\right) + \tfrac{1}{2}\gamma J_0 m^z + h^z\right\}. \quad (5.11)$$

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

$$\chi = \frac{\mathrm{d}\, m^z}{\mathrm{d}\, h^z} = \frac{{}^k\chi}{1 - \gamma J_0 \cdot {}^k\chi}; \quad (5.12)$$

$${}^k\chi = \beta\left({}^kf_{ææ} - \frac{\left({}^kf_{æ\varphi}\right)^2}{{}^kf_{\varphi\varphi}}\right);$$

$$S = \frac{\mathrm{d}\, F}{\mathrm{d}\, T} = {}^kS; \quad {}^kS = k_BN\left({}^kf - \beta\frac{\partial\, {}^kf}{\partial\, \beta}\right); \quad (5.13)$$

$$C = T\frac{\mathrm{d}\, S}{\mathrm{d}\, T} = {}^kC + \frac{k_B\beta\gamma J_0}{1-\gamma J_0\cdot {}^k\chi}\left\{-\beta\frac{\partial\, {}^kf_æ}{\partial\, \beta} + \frac{{}^kf_{æ\varphi}}{{}^kf_{\varphi\varphi}}\left({}^kf_\varphi + \beta\frac{\partial\, {}^kf_\varphi}{\partial\, \beta}\right)\right\}^2; \quad (5.14)$$

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

Тут використані позначення:

$${}^kf_{\underbrace{æ\ldots æ}_{l_1}\underbrace{\varphi\ldots\varphi}_{l_2}} = \frac{\partial^{l_1}}{\partial(\beta æ^z)^{l_1}}\,\frac{\partial^{l_2}}{\partial(\beta\varphi^z)^{l_2}}\,{}^kf(æ^z, \varphi^z). \quad (5.15)$$

Частинні похідні у явному вигляді наведені в роботі [29]. Випишемо тут лише вираз для статичної магнетної сприйнятливости:

$$\chi = \beta\left\{\frac{2zL^2}{1 + \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\beta\gamma K}\mathrm{ch}(\beta\tilde{\tilde{æ}}^z)\mathrm{ch}(\frac{1}{2}\beta\alpha K)} + \frac{4(1-z)}{1-(m^z)^2} - \beta\gamma J_0\right\}^{-1}. \quad (5.16)$$

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

$$\tfrac{1}{2}z\left(1 + \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\beta_c\gamma K}\,\mathrm{ch}(\tfrac{1}{2}\beta_c\alpha K)\right) + (1-z) - \tfrac{1}{4}\beta_c\gamma J_0 = 0. \quad (5.17)$$

Розглянемо тепер другий випадок. На основі (3.15), (3.17), (3.27) та (3.31)–(3.33) отримаємо $f(h^x)$–функцію у явному вигляді:

$$f(h^x) = (1-z)F_1(\tilde{æ}^x) + \tfrac{z}{2}F_{12}(\tilde{\tilde{æ}}^x) - \tfrac{1}{8}\beta\alpha J_0\left(m^x\right)^2, \quad (5.18)$$

де

$$F_1(\tilde{æ}^x) = \ln Z_1(\tilde{æ}^x); \quad (5.19)$$
$$Z_1(\tilde{æ}^x) = 2\mathrm{ch}(\tfrac{1}{2}\beta\tilde{æ}^x);$$
$$F_{12}(\tilde{\tilde{æ}}^x) = \ln Z_{12}(\tilde{\tilde{æ}}^x); \quad (5.20)$$
$$Z_{12}(\tilde{\tilde{æ}}^x) = \mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\gamma K} + 2\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\alpha K}\mathrm{ch}(\beta r) + \mathrm{e}^{-(\frac{1}{4}\gamma+\frac{1}{2}\alpha)\beta K};$$
$$r(\tilde{\tilde{æ}}^x) = \sqrt{(\tilde{\tilde{æ}}^x)^2 + \tfrac{1}{16}(\alpha-\gamma)^2K^2}. \quad (5.21)$$

На основі рівнянь (3.23) (або (3.28)) та (3.24) отримаємо систему рівнянь для m^x та φ^x:

$$m^x = \mathrm{th}(\tfrac{1}{2}\beta\tilde{æ}^x) \quad (5.22)$$
$$\mathrm{th}(\tfrac{1}{2}\beta\tilde{æ}^x) = \frac{2\tilde{\tilde{æ}}^x\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\alpha K}\mathrm{sh}(\beta r)}{r(\tilde{\tilde{æ}}^x)Z_{12}(\tilde{\tilde{æ}}^x)}. \quad (5.23)$$

Беручи до уваги, що за допомогою (3.29) можна виключити φ^x, отримаємо рівняння для m^x:

$$m^x = \frac{2\tilde{\tilde{æ}}^x(m^x)\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\alpha K}\mathrm{sh}(\beta r)}{r(m^x)Z_{12}(m^x)}, \quad (5.24)$$

де

$$\tilde{\tilde{æ}}^x(m^x) \quad (5.25)$$
$$= \tfrac{1}{z}\left\{(z-1)k_BT\ln\left(\frac{1+m^x}{1-m^x}\right) + \tfrac{1}{2}\alpha J_0 m^x + h^x\right\}.$$

Сприйнятливість, ентропію та теплоємність можна розрахувати з використанням формул (5.12)–(5.14), зробивши в них заміну $\gamma \to \alpha$ та врахувавши такі позначення:

$${}^kf_{\underbrace{æ\ldots æ}_{l_1}\underbrace{\varphi\ldots\varphi}_{l_2}} = \frac{\partial^{l_1}}{\partial(\beta æ^x)^{l_1}}\frac{\partial^{l_2}}{\partial(\beta\varphi^x)^{l_2}}\ {}^kf(æ^x,\varphi^x). \quad (5.26)$$

Частинні похідні у явному вигляді наведено в роботі [29]. Випишемо тут лише вираз для статичної магнетної сприйнятливости:

$$\chi = \beta\left\{\frac{z}{A} + \frac{4(1-z)}{1-(m^x)^2} - \beta\alpha J_0\right\}^{-1}, \quad (5.27)$$

$$A = \mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta\alpha K}\left[\left(\tfrac{\tilde{\tilde{æ}}^x}{r}\right)^2\mathrm{ch}(\beta r) + \tfrac{(\alpha-\gamma)^2K^2}{16\beta r^3}\mathrm{sh}(\beta r)\right]/Z_{12}$$
$$-2\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\beta\alpha K}\left(\tfrac{\tilde{\tilde{æ}}^x}{r}\right)^2\mathrm{sh}^2(\beta r)/Z_{12}^2.$$

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

$$2\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta_c\alpha K}\mathrm{sh}(\tfrac{1}{4}\beta_c(\alpha-\gamma)K)\left[\beta_c\alpha J_0 - 4 + 4z\right] \quad (5.28)$$
$$-zK(\alpha-\gamma)\mathrm{e}^{\frac{1}{4}\beta_c\gamma K}\left[1 + \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\beta_c\gamma K}\mathrm{ch}(\tfrac{1}{2}\beta_c\alpha K)\right] = 0.$$

VI. РЕЗУЛЬТАТИ ЧИСЛОВИХ РОЗРАХУНКІВ

У цьому розділі зупинимося на результатах числових розрахунків (при $h^z \to 0$, $h^x \to 0$) термодинамічних характеристик XXZ–моделі.

Зауважимо, що тут використано позначення для відносних величин:

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

Спочатку коротко зупинимося на випадку одновимірної моделі ($z = 2$) при $J_0 = 0$. На рис. 2 подано температурні залежності оберненої сприйнятливости χ^{-1}, ентропії s та теплоємности c, отримані в НДК при $\alpha \in [0;1]$, $\gamma = 1$. При α близькому до 1 в низькотемпературній області для ентропії та теплоємности в НДК отримуємо якісно неправильні результати ($s(t=0) > 0$, $c(t)$ не є зростаючою функцією при низьких температурах). Коли $\gamma \leq 1$ ($\alpha = 1$), результати НДК для s при $\gamma \in [0;1]$ та для χ^{-1} при $\gamma \in [0;1[$ в низькотемпературній області є якісно неправильними. Ентропія від'ємна, за винятком випадку значень γ близьких до 1 (тут $s(t=0) > 0$). Обернена статична сприйнятливість не є зростаючою функцією температури. На рис. 3 подано результати для моделі Гайзенберґа та XY–моделі, отримані різними методами. Видно, що НДК дає лише якісний опис температурної залежности теплоємности. Очевидно, що в рамках кластерного підходу необхідно враховувати вищі порядки кластерного наближення, що можна послідовно зробити в методі варіяції кластера [32].

Розглянемо тепер коротко результати, отримані в НДК для одновимірної моделі ($z = 2$) при $J_0 > 0$ і для двовимірної та тривимірної моделей ($z = 4, 6$) при $J_0 \geq 0$. Спочатку зупинимося на випадку $\alpha \in [0;1]$ при $\gamma = 1$. На рис. 4 подано фазові діяграми для різних ґраток 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. Для термодинамічних харктеристик НДК дає якісно правильні результати (див. рис. 5), за винятком випадку, коли α близьке до 1, при малих значеннях J_0 у низькотемпературній області. Зокрема, для квадратної ґратки $s(t=0) > 0$, а параметр порядку та обернена статична сприйнятливість мають у низькотемпературній області точки перегину. Для кубічної ґратки параметр порядку не виходить при $t = 0$ на насичення ($m^z(t=0) < 1$), $s(t=0) > 0$, χ^{-1} не є спадною функцією температури в низькотемпературній області.

При $\gamma \in [0,1]$, $\alpha = 1$ (для $z > 2$, $J_0 \geq 0$ і для $z = 2$, $J_0 > 0$) результати, отримані в НДК, є якісно неправильними в низькотемпературній області (див. рис. 6). При $\gamma \in [0,\gamma_a]$ (значення γ_a тим менше, чим більше значення J_0 та чим менше z; при $J_0 \to 0$ $\gamma_a \to 1$) передбачається низькотемпературний фазовий перехід (антиточка Кюрі), більше того, ентропія є від'ємною в цій області. При $\gamma \in [\gamma_a, 1]$ антиточка Кюрі відсутня, проте температурні залежності термодинамічних характеристик є також якісно неправильними при низьких температурах. Зокрема, m^x не виходить при $t = 0$ на насичення або має перегини; $s(t=0) > 0$; обернена статична сприйнятливість не є спадною функцією температури або має перегини.

Очевидно, що НДК може бути застосованим для розрахунку термодинамічних характеристик XXZ–моделі при $0 \leq \frac{\alpha}{\gamma} \leq (\frac{\alpha}{\gamma})_k$ ($(\frac{\alpha}{\gamma})_k \leq 1$) у всьому температурному інтервалі. Значення $(\frac{\alpha}{\gamma})_k$ залежить від типу ґратки та величини J_0. Чим більше J_0, тим більше $(\frac{\alpha}{\gamma})_k$ наближається до одиниці, причому при достатньо великих значеннях далекосяжної взаємодії $(\frac{\alpha}{\gamma})_k = 1$. У випадку $(\frac{\alpha}{\gamma}) > (\frac{\alpha}{\gamma})_k$ НДК дає некоректні результати. Це пов'язане з тим, що таке наближення недостатньо враховує квантові флюктуації, що суттєво виявляється в низькотемпературній області. Проте і в цьому випадку НДК може бути застосованим для розрахунку термодинамічних характеристик моделі при температурах, вищих від деякого значення t_1 (t_1 лежить нижче від критичної температури і вище від антиточки Кюрі (якщо вона є); значення t_1 залежить від параметрів z, J_0, $\frac{\alpha}{\gamma}$).

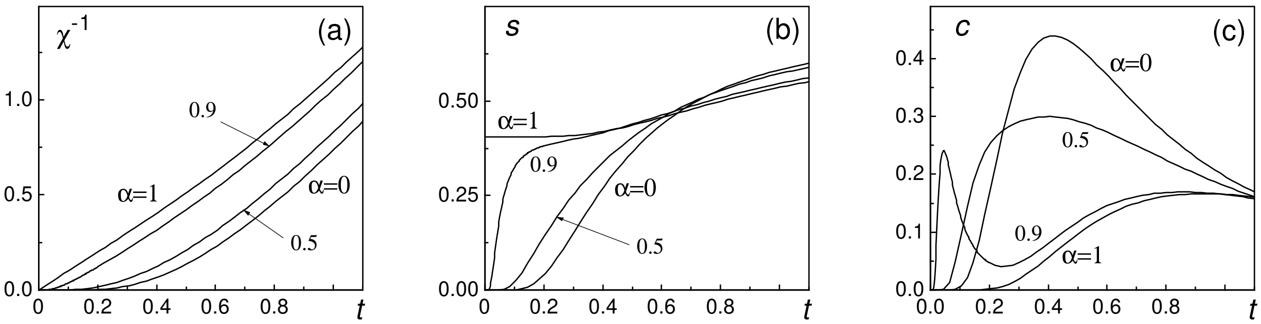

Рис. 2. Температурні залежності оберненої статичної сприйнятливости χ^{-1}, ентропії $s = \frac{1}{k_B N} S$, теплоємности $c = \frac{1}{k_B N} C$ для $z = 2$, $J_0 = 0$ ($\gamma = 1$) при різних значеннях параметра анізотропії α.

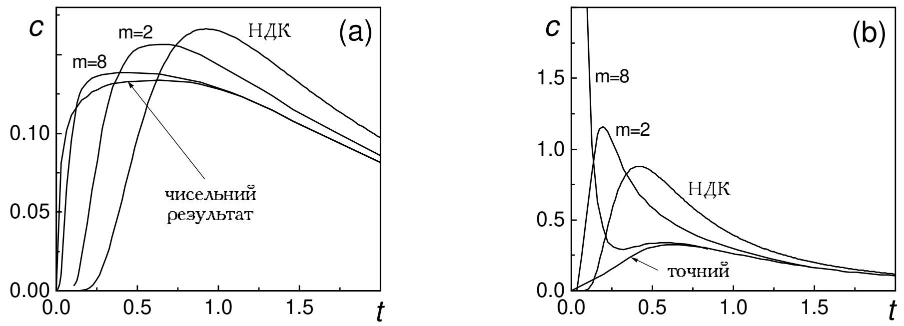

Рис. 3. Температурні залежності теплоємности $c = \frac{1}{k_B N} C$ при $z = 2$, $J_0 = 0$, для моделі Гайзенберґа (a) та для XY–моделі (b). Результати НДК, чисельний результат Боннера і Фішера (див. [31]), результати чисельного методу на основі перетворення (формула Сузукі–Троттера) одновимірної моделі до двовимірної ($N \times m$) моделі Ізинґа [31].

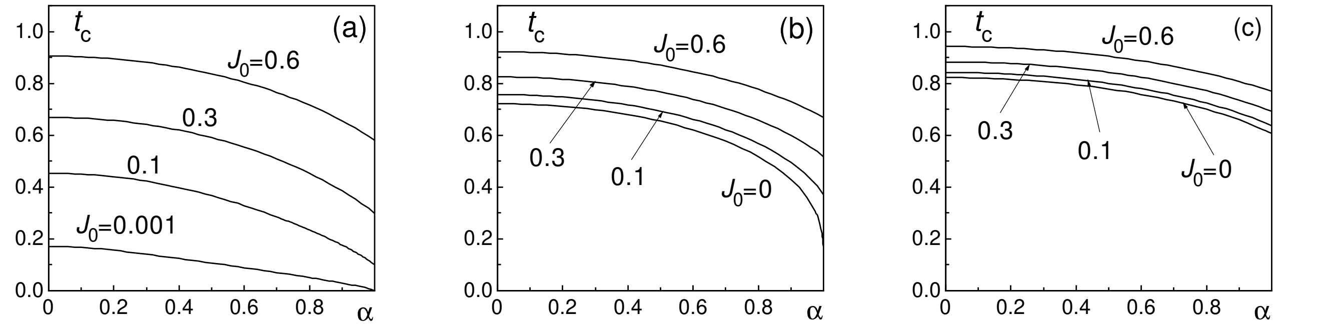

Рис. 4. Фазові діяграми при різних значеннях далекосяжної взаємодії J_0 ($\gamma = 1$) для різних ґраток: (a) $z = 2$; (b) $z = 4$; (c) $z = 6$.

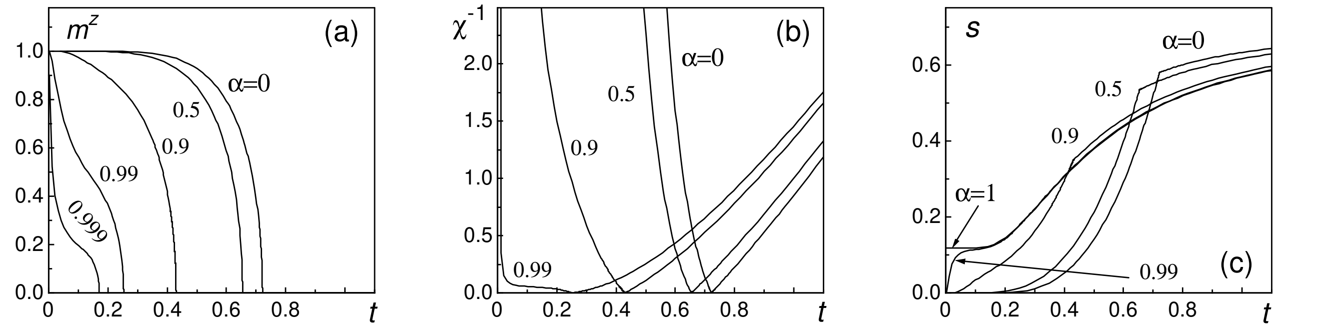

Рис. 5. Температурні залежності параметра $m^z = 2\langle S^z\rangle$, оберненої статичної сприйнятливості χ^{-1} та ентропії $\mathrm{s} = \frac{1}{k_B N} S$ для $z = 4$, $J_0 = 0$ при різних значеннях параметра анізотропії α ($\gamma = 1$).

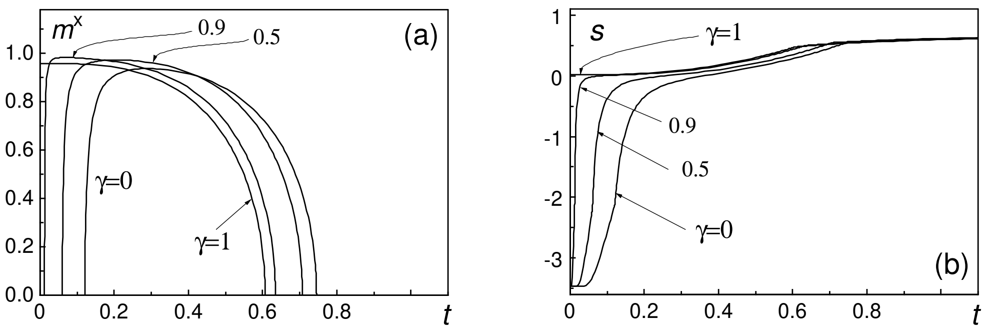

Рис. 6. Температурні залежності параметра $m^x = 2\langle S^x\rangle$ та ентропії $\mathrm{s} = \frac{1}{k_B N} S$ для $z = 6$, $J_0 = 0$ при різних значеннях параметра анізотропії γ ($\alpha = 1$).

---

[1] В. Г. Вакс, А. И. Ларкин, С. А. Пикин, Журн. експ. теор. физ. **53**, 281 (1967).

[2] В. Г. Вакс, А. И. Ларкин, С. А. Пикин, Журн. експ. теор. физ. **53**, 1089 (1967).

[3] Ю. А. Изюмов, Ф. А. Кассан–оглы, Ю. Н. Скрябин, *Полевые методы в теории ферромагнетизма* (Наука, Москва, 1974).

[4] В. Г. Барьяхтар, В. Н. Криворучко, Д. А. Яблонский, *Функции Грина в теории магнетизма* (Наукова думка, Киев, 1984).

[5] Дж. Смарт, *Эффективное поле в теории магнетизма* (Наука, Москва, 1968).

[6] B. Strieb, H. B. Callen, Phys. Rev. **130**, 1798 (1963).

[7] R. Blinc, S. Svetina, Phys. Rev. **147**, 423 (1966).

[8] R. Blinc, S. Svetina, Phys. Rev. **147**, 430 (1966).

[9] В. Г. Вакс, *Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков* (Наука, Москва, 1973).

[10] V. S. Vaks, N. E. Zein, B. A. Strukov, Phys. Status Solidi A **30**, 801 (1975).

[11] Р. Р. Левицкий, Н. А. Кориневский, И. В. Стасюк, Укр. физ. журн. **19**, 1289 (1974).

[12] R. R. Levitsky, N. A. Korinevsky, I. V. Stasjuk, Phys. Status Solidi B **88**, 51 (1978).

[13] В. Г. Вакс, В. И. Зиненко, В. Е. Шнейдер, Укр. физ.

журн. **141**, 629 (1983).
[14] R. R. Levitsky, J. Grigas, I. R. Zachek, Ye. V. Mits, W. Papronty, Ferroelectrics **64**, 1 (1985).
[15] R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **17**, 1100 (1962).
[16] С. І. Сороков, Р. Р. Левицький, О. Р. Баран, препринт ІФКС–92–18У (1992).
[17] И. Р. Юхновский, препринт ИТФ–71–26Р (1971).
[18] М. В. Ваврух, Теор. мат. физ. **50**, 438 (1982).
[19] М. В. Ваврух, Т. Е. Крохмальский, Теор. мат. физ. **51**, 130 (1982).
[20] Т. Е. Крохмальский, препринт ИТФ–86–158Р (1986).
[21] И. Р. Юхновский, препринт ИТФ–74–149Р (1974).
[22] И. Р. Юхновский, М. Ф. Головко, *Статистическая теория классических равновесных систем* (Наукова думка, Київ, 1980).
[23] И. Р. Юхновский, Р. Р. Левицкий, С. И. Сороков, препринт ИТФ–86–132Р (1986).
[24] И. Р. Юхновский, Р. Р. Левицкий, С. И. Сороков, препринт ИТФ–86–154Р (1986).
[25] И. Р. Юхновский, Р. Р. Левицкий, С. И. Сороков, препринт ИТФ–86–142Р (1986).
[26] Р. Р. Левицкий, С. И. Сороков, препринт ИТФ–87–28Р (1987).
[27] С. І. Сороков, Р. Р. Левицький, О. Р. Баран, Укр. физ. журн. **41**, 490 (1996).
[28] S. I. Sorokov, R. R. Levitskii, O. R. Baran, Cond. Matt. Phys. (Lviv) iss. 9, 57 (1997).
[29] Р. Р. Левицький, С. І. Сороков, О. Р. Баран, І. М. Пиндзин, препринт ICMP–97–21U (1997).
[30] С. В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма* (Наука, Москва, 1975).
[31] H. Betsuyaku, Prog. Theor. Phys. **73**, 319 (1985).
[32] T. Morita, J. Math. Phys. **13**, 115 (1972).

THERMODYNAMICS OF XXZ–MODEL WITHIN TWO–PARTICLE CLUSTER APPROXIMATION

R. R. Levitskii, S. I. Sorokov, O. R. Baran, I. M. Pyndsyn
Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine,
1 Svientsitskii Str., Lviv, 290011, Ukraine
Phone: 42–74–39, e-mail: sorok@icmp.lviv.ua

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.