ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 1, № 1 (1996) с. 70–89

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 1, No 1 (1996) p. 70–89

НЕВПОРЯДКОВАНА МОДЕЛЬ ІЗІНҐА З НЕРІВНОВАЖНИМ БЕЗЛАДОМ У НАБЛИЖЕННІ ДВОЧАСТИНКОВОГО КЛАСТЕРА

Р. Р. Левицький, С. І. Сороков, Р. О. Соколовський
Інститут фізики конденсованих систем Національної Академії наук України
Львів 290011, вул. Свєнціцького, 1; тел.: 42-74-39, E-mail: ccc@icmp.lviv.ua
(Отримано 11 березня 1996)

Розглянуто термодинаміку і ґлауберівську кінетику сплаву заміщення ізінґівських магнетиків з нерівноважним типом безладу. В наближенні двочастинкового кластера розраховано кореляційні функції в **q**-просторі і динамічний структурний фактор моделі. Наближення відтворює точні результати для одновимірної моделі. Досліджено його особливості і недоліки для вищих розмірностей.

Ключові слова: невпорядкована модель Ізінґа, кореляційні функції, динамічний структурний фактор, перколяція.

PACS number: 64.60.Cn

I. ВСТУП

Ми розглянемо невпорядковану модель Ізінґа, призначену для опису процесів упорядкування (магнетного, сеґнетоелектричного чи хемічного) в сплавах магнетиків, магнетиках з немагнетними домішками, твердих розчинах сеґнетоелектриків та ін. Невпорядкованість у моделі виникає через те, що на вузлах кристалічної ґратки можуть міститися спіни (у випадку сеґнетоелектриків більш доречним є термін “псевдоспіни”) різних сортів (задача вузлів). Розглядатимемо модель у випадку нерівноважного безладу, коли сортова конфіґурація фіксована. Якщо в такій суміші є взаємодії різних знаків, то матимемо проблему спінового скла, яку ми оминаємо в цій роботі, приймаючи, що взаємодії між усіма вузлами феромагнетні. Особливий інтерес становить випадок розведеної системи (невзаємодіючі домішки) із взаємодією найближчих сусідів. Питання універсальності і перколяції в такій системі викликають неослабний інтерес і стимулюють численні Монте–Карлівські експерименти [1–3].

У випадку одновимірної системи і нульового зовнішнього поля в моделі, яку розглядаємо, отримано точні вирази для термодинамічних характеристик і спінових кореляційних функцій [4]. Системи з вищою розмірністю є полігоном для різних варіантів машинних розрахунків та наближених методів. Найпростіше наближення молекулярного поля (НМП) зазнає невдачі, бо не розрізняє систем з рівноважним і нерівноважним типами безладу і не відтворює перколяційних явищ. Цих недоліків не мають різні кластерні підходи, серед яких часто використовується “теорія ефективного поля” (effective field theory). Таку назву мають різні варіанти розщеплення ланцюжка рівнянь для кореляційних функцій [5], отриманого на основі тотожностей Каллена. Таким методом розраховують намагнетованість, сприйнятливість системи й отримують критичну температуру T_c. У вищих порядках теорії отримують залежність перколяційної концентрації від геометрії ґратки.

У праці [6] запропоновано підхід, що ґрунтується на формулі кластерного розвинення для намагнетованості, а також на матрицях густини, отриманих уведенням стохастичних змінних. Отримано близькі до точних результати для критичної температури та перколяційної концентрації. Результати поліпшуються зі збільшенням розміру кластера, і при цьому враховується геометрія ґратки. Однак цей метод для розрахунку інших характеристик не використовували.

Однакові результати для термодинаміки моделі отримані в наближенні Бете ([7] — розглянута тільки розведена система), першому порядку методу варіації кластера [7] і наближенні двочастинкового кластера (НДК) [8]. У праці [8] отримано вирази для термодинамічних потенціалів системи, рівняння для параметрів порядку, вирази для T_c і сприйнятливості в парафазі. Зазначено, що для одновимірної моделі НДК дає точні результати.

Останніми роками значну увагу приділяли дослідженню динамічних властивостей моделі Ізінґа. Вивчення релаксаційної динаміки моделі започатковано працею Ґлаубера [9], в якій він розглянув лише одновимірну модель на основі запропонованого ним рівняння (master equation) для матриці густини системи. Пізніше підхід Ґлаубера було поширено на ґратки вищих розмірностей [10]. Слід зазначити, що рівняння глауберівського типу, які описують сильно нерівноважний ізінґівський магнетик у контакті з термостатом під дією інтенсивного зовнішнього змінного поля, можна отримати з рівняння Ліувілля в припущенні малих часів кореляції змінних термостата [11–13].

Для односортного ланцюжка і ланцюжка з домішкою на одному вузлі отримано точні розв’язки [9,10,14,15] (за умови, що нема зовнішнього поля). Для систем з полем, з хаосом, на ґратках вищих розмірностей користуються безмежним ланцюжком рівнянь для часових функцій розподілу, який випливає з рівняння Ґлаубера. Цей ланцюжок можна обірвати і замкнути в різних наближеннях і на основі отриманих функцій розподілу розрахувати динамічні характеристики моделі. В працях [16–19] запропоновані різні замикання для ідеальної (односортної) системи, серед них замикання типу НМП і двовузлового кластерного наближення. Невпорядковані системи розглядались тільки в одновимірному випадку [15,20].

Ми пропонуємо єдиний кластерний підхід до опису термодинаміки і динаміки невпорядкованої моделі Ізінґа. Принципово новою рисою цього дослідження є розрахунок **q**-залежних кореляційних функцій і динамічного структурного фактора невпорядкованої моделі Ізінґа з нерівноважним типом безладу. Така проблема для ґраток з розмірністю $D \geq 2$ не розв'язана в жодному задовільному наближенні. Сформульована задача становить інтерес для опису процесів розсіювання в модельованих об'єктах. Ми використаємо наближення двочастинкового кластера і проаналізуємо його переваги та недоліки. Запропонований простий аналітичний підхід можна використати як для опису експериментальних даних, так і для більш точних і складних теорій, таких як ренормґрупа в дійсному просторі [21].

У цій праці ми розглядаємо лише взаємодію найближчих сусідів. Після того, як корелятори отримані, можна врахувати далекосяжні взаємодії шляхом розвинень по оберненому радіусу взаємодії, приймаючи систему з короткодією за базисну.

II. КЛАСТЕРНЕ РОЗВИНЕННЯ ВІЛЬНОЇ ЕНЕРГІЇ

Ми будемо розглядати невпорядковану псевдоспінову модель з гамільтоніаном $-\beta\mathcal{H} = H_x(\{S\})$

$$H_x(\{S\}) = \sum_i \kappa_i S_i + \frac{1}{2}\sum_{ij} K_{ij} S_i S_j, \qquad (2.1)$$

який описує систему псевдоспінів на вузлах простої ґратки з параметром парної взаємодії K_{ij} у неоднорідному полі κ_i. Множина змінних $\{S_i\}$ ($S_i = \pm 1$; $i = 1, ..., N$, N — кількість вузлів ґратки) описує стан спінової системи. На кожному вузлі може бути псевдоспін одного з Ω сортів. Параметри гамільтоніана залежать від "сортової" конфіґурації, яку ми описуватимемо множиною змінних $\{X_{i\alpha}\}$ ($X_{i\alpha} = 1$, якщо на вузлі i є псевдоспін сорту α, інакше $X_{i\alpha} = 0$):

$$\kappa_i = \sum_\alpha \kappa_{i\alpha} X_{i\alpha},\ K_{ij} = \sum_{\alpha\beta} K_{i\alpha,j\beta} X_{i\alpha} X_{j\beta}. \qquad (2.2)$$

З урахуванням (2.2) гамільтоніан можна записати у формі

$$H_x(\{S\}) = \sum_{i\alpha} \kappa_{i\alpha} S_{i\alpha} + \frac{1}{2}\sum_{i\alpha,j\beta} K_{i\alpha} S_{i\alpha} S_{j\beta}. \qquad (2.3)$$

Тут уведено позначення $S_{i\alpha} = S_i X_{i\alpha}$. Зауважимо, що параметри (2.2) гамільтоніана (2.1), (2.3) неявно містять обернену температуру $\beta = 1/k_B T$, яку будемо явно записувати лише в кінцевих результатах. Парну взаємодію вважатимемо короткосяжною:

$$K_{i\alpha,j\beta} = K_{\alpha\beta}\pi_{ij},\ \pi_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{якщо } j \in \pi_i \\ 0, & \text{якщо } j \notin \pi_i \end{cases}, \qquad (2.4)$$

де π_i позначає множину найближчих сусідів вузла i. Розглядатимемо систему у випадку так званого нерівноважного безладу ("заморожена" система — фіксована сортова конфіґурація), коли для заданої конфіґурації сортів (задана множина $\{X_{i\alpha}\}$) система описується матрицею густини $\rho_x(\{S\})$:

$$\rho_x(\{S\}) = Z_x^{-1} \exp H_x(\{S\}),$$
$$Z_x = \mathrm{Sp}_{\{S\}} \exp H_x(\{S\}), \qquad (2.5)$$

або твірною функцією $F_x = \ln Z_x$. Спостережувані величини визначаються шляхом усереднення відповідних термодинамічних середніх за всеможливими сортовими конфіґураціями з певною функцією розподілу $\rho(\{X\})$.

Наприклад, вільна енергія F системи має вигляд

$$F = -\beta^{-1} \langle F_x \rangle_x, \qquad (2.6)$$

$$\langle \cdots \rangle_x = \mathrm{Sp}_{\{X\}} \rho(\{X\})(\cdots). \qquad (2.7)$$

Функція розподілу $\rho(\{X\})$ залежить від умов приготування (замерзання) системи. Наприклад, гартування зразка від високих температур приводить до відсутності кореляцій у розміщенні атомів по вузлах (повний хаос):

$$\langle X_{i\alpha_1} \cdots X_{i\alpha_n} \rangle_x = \langle X_{i\alpha_1} \rangle_x \cdots \langle X_{i\alpha_n} \rangle_x. \qquad (2.8)$$

Наближення, використовуване нами нижче, є чутливим лише до найнижчих моментів розподілу $\rho(\{X\})$, а саме:

$$\langle X_{i\alpha} X_{j\beta} \rangle_x = w_{\alpha\beta},\ (j \in \pi_i),\ \langle X_{i\alpha} \rangle_x = c_\alpha, \qquad (2.9)$$

де $c_\alpha \equiv \sum_\beta w_{\alpha\beta}$ має зміст концентрації спінів сорту α.

Нашим завданням буде розрахувати кореляційні функції (КФ)

$$\langle \langle S_{i_1\alpha_1} \cdots S_{i_n\alpha_n} \rangle_H^c \rangle_x = \frac{\delta}{\delta\kappa_{i_1\alpha_1}} \cdots \frac{\delta}{\delta\kappa_{i_n\alpha_n}} \langle F_x \rangle_x, \qquad (2.10)$$

де $\langle \cdots \rangle_H$ — термодинамічне усереднення (з функцією розподілу $\rho_x(\{S\})$), а значок c — кумулянтне середнє.

З метою побудови кластерного розвинення виконаємо в гамільтоніані таке тотожне перетворення:

$$H_x(\{S\}) = \sum_i H_i + \sum_{(ij)} V_{ij}, \tag{2.11}$$

де

$$H_i = \bar{\kappa}_i S_i,\ \bar{\kappa}_i = \kappa_i + \sum_{r\in\pi_i} {}_r\bar{\varphi}_i, \tag{2.12}$$

$$V_{ij} = -\ {}_j\bar{\varphi}_i S_i -\ {}_i\bar{\varphi}_j S_j + K_{ij} S_i S_j. \tag{2.13}$$

Тут у гамільтоніані введено поля

$${}_r\bar{\varphi}_i = \sum_\alpha X_{i\alpha}\, {}_r\bar{\varphi}_{i\alpha}, \tag{2.14}$$

де ${}_r\bar{\varphi}_{i\alpha}$ надається змісту ефективного поля, яке діє на спін вузла i сорту α з боку найближчого сусіда на вузлі r.

Користуючись формою (2.11), твірну функцію (2.6) можна записати у вигляді

$$F_x = \sum_i F_i + \ln Q, \tag{2.15}$$

де

$$F_i = \ln Z_i,\ Z_i = \mathrm{Sp}_{S_i} \exp H_i,\ Q = \left\langle \exp \sum_{(ij)} V_{ij} \right\rangle_0,$$

$$\langle\cdots\rangle_0 = \mathrm{Sp}\,(\cdots) \prod_i \rho_i,\ \rho_i = Z_i^{-1} \exp H_i. \tag{2.16}$$

Символ $\sum_{(ij)}$ у (2.16) означає сумування за парами найближчих сусідів. Перший член $\mathcal{K}_1$ кластерного розвинення [22,24] $\ln Q$ має вигляд

$$\ln Q = \ln \left\langle \exp \sum_{(ij)} V_{ij} \right\rangle_0 \approx \mathcal{K}_1$$
$$= \sum_{(ij)} \ln \langle \exp V_{ij} \rangle_0 = -z \sum_i F_i + \sum_{(ij)} F_{ij}, \tag{2.17}$$

де $z = \sum_j \pi_{ij}$ — перше координаційне число. Тоді твірна функція у першому кластерному наближенні набуває такої форми:

$$\langle F_x \rangle_x = -z' \sum_i \langle F_i \rangle_x + \sum_{(ij)} \langle F_{ij} \rangle_x, \tag{2.18}$$

де $z' = z - 1$,

$$F_{ij} = \ln Z_{ij},\ Z_{ij} = \mathrm{Sp}_{S_i S_j} \exp H_{ij},$$
$$H_{ij} = {}_i\bar{\kappa}_j S_i + {}_j\bar{\kappa}_i S_j + K_{ij} S_i S_j, \tag{2.19}$$
$${}_r\bar{\kappa}_i = \bar{\kappa}_i - {}_r\bar{\varphi}_i.$$

Твірну функцію (2.18) легко обчислити, оскільки вона містить лише одно- і двочастинкові внески.

Ефективні поля ${}_r\bar{\varphi}_{i\alpha} = {}_r\bar{\varphi}_{i\alpha}(\{\kappa\})$ визначають з умови мінімуму вільної енергії ($\frac{\partial F}{\partial\, {}_r\bar{\varphi}_{i\alpha}} = 0$), яка приводить до таких співвідношень для середнього значення спіну [22]:

$$m_{i\alpha}^{(1)} = \left\langle F_{i\alpha}^{(1)} \right\rangle_x, \tag{2.20}$$

$$\left\langle F_{i\alpha}^{(1)} \right\rangle_x = \left\langle F_{i\alpha,r}^{(10)} \right\rangle_x. \tag{2.21}$$

Тут ми ввели позначення

$$\left\langle F^{(n)}_{i\alpha_1\cdots\alpha_n} \right\rangle_x = \frac{\partial}{\partial \kappa_{i\alpha_1}} \cdots \frac{\partial}{\partial \kappa_{i\alpha_n}} \langle F_i \rangle_x = \left\langle \langle S_{i\alpha_1} \cdots S_{i\alpha_n} \rangle^c_{H_i} \right\rangle_x, \tag{2.22}$$

$$\left\langle F^{(nl)}_{i\alpha_1\cdots\alpha_n, j\beta_1\cdots\beta_l} \right\rangle_x = \frac{\partial}{\partial \kappa_{i\alpha_1}} \cdots \frac{\partial}{\partial \kappa_{i\alpha_n}} \frac{\partial}{\partial \kappa_{j\beta_1}} \cdots \frac{\partial}{\partial \kappa_{j\beta_l}} \langle F_{ij} \rangle_x = \left\langle \langle S_{i\alpha_1} \cdots S_{i\alpha_n} S_{j\beta_1} \cdots S_{j\beta_l} \rangle^c_{H_{ij}} \right\rangle_x, \tag{2.23}$$

де $\langle\cdots\rangle_{H_i}$ і $\langle\cdots\rangle_{H_{ij}}$ позначають усереднення з одно– і двочастинковим гамільтоніанами

$$\langle\cdots\rangle_{H_i} = Z_i^{-1} \mathrm{Sp}_{S_i}(\cdots) \exp(H_i),$$

$$\langle\cdots\rangle_{H_{ij}} = Z_{ij}^{-1} \mathrm{Sp}_{S_i S_j}(\cdots) \exp(H_{ij}). \tag{2.24}$$

Співвідношення (2.20), (2.21) ще можна записати у вигляді

$$m_{i\alpha}^{(1)} = \left\langle \langle S_{i\alpha} \rangle_{H_i} \right\rangle_x = \left\langle \langle S_{i\alpha} \rangle_{H_{ij}} \right\rangle_x , \tag{2.25}$$

тобто вимагається рівність параметра порядку, визначеного з одночастинковою і кластерною матрицями густини.

Наведемо тепер явні вирази для $\langle F_i \rangle_x$, $\langle F_{ij} \rangle_x$ і тих їхніх похідних, які будемо використовувати далі (тут обернена температура $\beta = 1/k_B T$ не входить у параметри гамільтоніана, а явно виписана):

$$\begin{aligned}
&\langle F_i \rangle_x = \sum_\alpha c_\alpha F_{i\alpha},\ F_{i\alpha} = \ln 2 \cosh \beta \bar{\kappa}_{i\alpha}, \\
&\langle F_{ij} \rangle_x = \sum_{\alpha\beta} w_{\alpha\beta} F_{i\alpha,j\beta},\ F_{i\alpha,j\beta} = K_{\alpha\beta} + \ln 2 L_{i\alpha,j\beta} , \\
&\left\langle F^{(n)}_{i\alpha_1\cdots\alpha_n} \right\rangle_x = \delta_{\alpha_1\alpha_2} \cdots \delta_{\alpha_{n-1}\alpha_n} c_{\alpha_1} F^{(n)}_{i\alpha_1} , \\
&\left\langle F^{(n0)}_{i\alpha_1\cdots\alpha_n,j} \right\rangle_x = \delta_{\alpha_1\alpha_2} \cdots \delta_{\alpha_{n-1}\alpha_n} \sum_\beta w_{\alpha_1\beta} F^{(n0)}_{i\alpha_1,j\beta} , \\
&F^{(1)}_{i\alpha} = \tanh \beta \bar{\kappa}_{i\alpha},\ F^{(2)}_{i\alpha} = 1 - \tanh^2 \beta \bar{\kappa}_{i\alpha},\ F^{(3)}_{i\alpha} = -2 F^{(1)}_{i\alpha} F^{(2)}_{i\alpha} , \\
&L_{i\alpha,j\beta} = \cosh \beta ({}_j\bar{\kappa}_{i\alpha} + {}_i\bar{\kappa}_{j\beta}) + a_{\alpha\beta} \cosh \beta ({}_j\bar{\kappa}_{i\alpha} - {}_i\bar{\kappa}_{j\beta}),\ a_{\alpha\beta} = e^{-2\beta K_{\alpha\beta}} , \\
&F^{(10)}_{i\alpha,j\beta} = \left(\sinh \beta ({}_j\bar{\kappa}_{i\alpha} + {}_i\bar{\kappa}_{j\beta}) + a_{\alpha\beta} \sinh \beta ({}_j\bar{\kappa}_{i\alpha} - {}_i\bar{\kappa}_{j\beta}) \right) / L_{i\alpha,j\beta}, \\
&F^{(20)}_{i\alpha,j\beta} = 1 - \left(F^{(10)}_{i\alpha,j\beta} \right)^2 = \left(1 + a^2_{\alpha\beta} + 2 a_{\alpha\beta} \cosh 2\beta\, {}_i\bar{\kappa}_{j\beta} \right) / L^2_{i\alpha,j\beta}, \\
&F^{(30)}_{i\alpha,j\beta} = -2 F^{(10)}_{i\alpha,j\beta} F^{(20)}_{i\alpha,j\beta}, \\
&\left\langle F^{(nl)}_{i\alpha_1\cdots\alpha_n,j\beta_1\cdots\beta_l} \right\rangle_x = \delta_{\alpha_1\alpha_2} \cdots \delta_{\alpha_{n-1}\alpha_n} \delta_{\beta_1\beta_2} \cdots \delta_{\beta_{l-1}\beta_l} w_{\alpha_1\beta_1} F^{(nl)}_{i\alpha_1,j\beta_1}, \\
&F^{(11)}_{i\alpha,j\beta} = \frac{1 - a^2_{\alpha\beta}}{L^2_{i\alpha,j\beta}},\ F^{(21)}_{i\alpha,j\beta} = -2 F^{(10)}_{i\alpha,j\beta} F^{(11)}_{i\alpha,j\beta} .
\end{aligned} \tag{2.26}$$

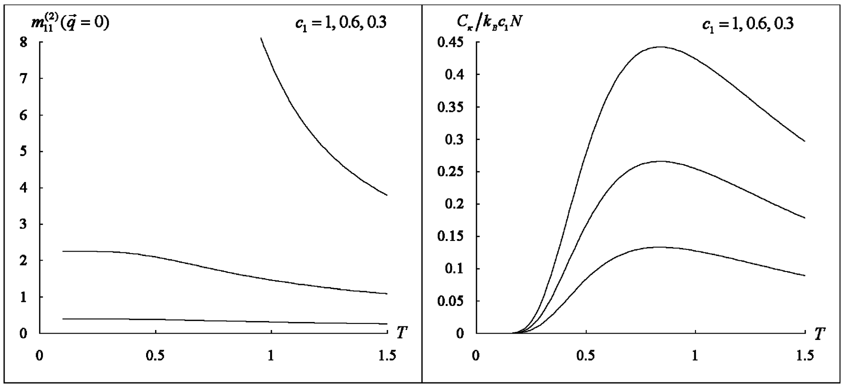


Рис. 1. Парний корелятор $m_{11}^{(2)}(\mathbf{0})$ (сприйнятливість системи $\chi(\mathbf{q}) \sim m_{11}^{(2)}(\mathbf{q})/T$) і теплоємність при сталому полі на один взаємодіючий спін $C_\kappa / k_B c_1 N$ чистого і розведеного ланцюжків ($z = 2$) спінів у НДК (точні результати). $K_{11} = 1$, $K_{1\alpha} = 0$.

Вираз (2.21) містить $Nz\Omega$ рівнянь для такої ж кількості невідомих ${}_r\bar{\varphi}_{i\alpha}$. У випадку однорідного поля (ОП: $\kappa_{i\alpha} \to \kappa_\alpha$) середнє значення спіну, як і величин $F^{(n)}_{i\alpha}$, $F^{(ln)}_{i\alpha,j\beta}$, втрачають залежність від вузла, і (2.21) зводиться до Ω рівнянь для Ω полів $\bar{\varphi}_\alpha$ (${}_r\bar{\varphi}_{i\alpha} \to \bar{\varphi}_\alpha$).

Розрахуємо парну і вищі КФ, для чого скористаємося співвідношеннями (2.10), (2.20), (2.21). З (2.20) випливає

$$m^{(2)}_{i\alpha,j\beta} = \frac{\delta m^{(1)}_{i\alpha}}{\delta\kappa_{j\beta}} = \frac{\partial \left\langle F^{(1)}_{i\alpha}\right\rangle_x}{\partial\bar\kappa_{i\gamma}}\frac{\delta\bar\kappa_{i\gamma}}{\delta\kappa_{j\beta}} = \left\langle F^{(2)}_{i\alpha\gamma}\right\rangle_x \bar\kappa^{(1)}_{i\gamma,j\beta}. \tag{2.27}$$

Тут і нижче ми не виписуємо явно сумування за сортовими індексами (грецькі літери), отже, знак сумування за німим індексом γ у (2.27) опущено. Ми ввели позначення

$$\bar\kappa^{(1)}_{i\alpha,j\beta} = \frac{\delta\bar\kappa_{i\alpha}}{\delta\kappa_{j\beta}} = \delta_{ij}\delta_{\alpha\beta} + \sum_{r\in\pi_i} {}_r\bar\varphi^{(1)}_{i\alpha,j\beta}, \tag{2.28}$$

$$\bar\varphi^{(1)}_{i\alpha,j\beta} = \frac{\delta\, {}_r\bar\varphi_{i\alpha}}{\delta\kappa_{j\beta}}. \tag{2.29}$$

Співвідношення (2.27) зручно записати в матричному вигляді

$$\hat m^{(2)}_{ij} = \hat F^{(2)}_i \hat{\bar\kappa}^{(1)}_{ij}, \tag{2.30}$$

де використано такі матричні позначення:

$$\left(\hat m^{(2)}_{ij}\right)_{\alpha\beta} = m^{(2)}_{i\alpha,j\beta}, \quad \left(\hat F^{(2)}_i\right)_{\alpha\beta} = \left\langle F^{(2)}_{i\alpha\beta}\right\rangle_x,$$

$$\left(\hat{\bar\kappa}^{(1)}_{ij}\right)_{\alpha\beta} = \bar\kappa^{(1)}_{i\alpha,j\beta}. \tag{2.31}$$

Для розрахунку величин ${}_r\bar\varphi^{(1)}_{i\alpha,j\beta}$ необхідно скористатися співвідношеннями (2.21). Беручи похідну по $\kappa_{j\beta}$, отримуємо

$$\hat F^{(2)}_i \bar\kappa^{(1)}_{ij} = \hat F^{(20)}_{ir}\, {}_r\hat{\bar\kappa}^{(1)}_{ij} + \hat F^{(11)}_{ir}\, {}_i\hat{\bar\kappa}^{(1)}_{rj}, \tag{2.32}$$

де

$$\left(\hat F^{(20)}_{ir}\right)_{\alpha\beta} = \left\langle F^{(20)}_{i\alpha\beta,r}\right\rangle_x, \quad \left(\hat F^{(11)}_{ir}\right)_{\alpha\beta} = \left\langle F^{(11)}_{i\alpha,r\beta}\right\rangle_x, \tag{2.33}$$

$${}_r\hat{\bar\kappa}^{(1)}_{ij} = \hat{\bar\kappa}^{(1)}_{ij} - {}_r\hat{\bar\varphi}^{(1)}_{ij}, \quad \left({}_r\hat{\bar\varphi}^{(1)}_{ij}\right)_{\alpha\beta} = {}_r\bar\varphi^{(1)}_{i\alpha,j\beta}. \tag{2.34}$$

Враховуючи (2.34), рівняння (2.32) можна записати у формі

$$\hat F^{(20)}_{ir}\, {}_r\hat{\bar\varphi}^{(1)}_{ij} + \hat F^{(11)}_{ir}\, {}_i\hat{\bar\varphi}^{(1)}_{rj} = \left(\hat F^{(20)}_{ir} - \hat F^{(2)}_i\right)\hat{\bar\kappa}^{(1)}_{ij} + \hat F^{(11)}_{ir}\hat{\bar\kappa}^{(1)}_{rj}. \tag{2.35}$$

Виконавши в (2.35) заміну індексів $i \leftrightarrow r$, отримаємо ще одне рівняння

$$\hat F^{(11)}_{ri}\, {}_r\hat{\bar\varphi}^{(1)}_{ij} + \hat F^{(20)}_{ri}\, {}_i\hat{\bar\varphi}^{(1)}_{rj} = \hat F^{(11)}_{ri}\hat{\bar\kappa}^{(1)}_{ij} + \left(\hat F^{(20)}_{ri} - \hat F^{(2)}_r\right)\hat{\bar\kappa}^{(1)}_{rj}, \tag{2.36}$$

яке разом з (2.35) становить систему рівнянь для невідомих ${}_r\hat{\bar\varphi}^{(1)}_{ij}$, ${}_i\hat{\bar\varphi}^{(1)}_{rj}$. Вилучаючи з неї ${}_i\hat{\bar\varphi}^{(1)}_{rj}$ і заміняючи $\hat{\bar\kappa}^{(1)}_{ij}$ на $m^{(2)}_{ij}$ (див. (2.30), отримаємо

$${}_r\hat{\bar\varphi}^{(1)}_{ij} = \left[(\hat F^{(2)}_i)^{-1} + \hat E_{ii}\right]\hat m^{(2)}_{ij} + \hat G_{ir}\hat m^{(2)}_{rj}, \tag{2.37}$$

де

$$\hat E_{ii} = \left(\hat F^{(11)}_{ir}\left(\hat F^{(20)}_{ri}\right)^{-1}\hat F^{(11)}_{ri} - \hat F^{(20)}_{ir}\right)^{-1},$$

$$\hat G_{ir} = \left(\hat F^{(20)}_{ri}\left(\hat F^{(11)}_{ir}\right)^{-1}\hat F^{(20)}_{ir} - \hat F^{(11)}_{ri}\right)^{-1}. \tag{2.38}$$

Сумуючи співвідношення (2.37) за $r \in \pi_i$ і враховуючи (2.28), (2.30), отримаємо таке рівняння типу Орнштейна–Церніке для парного корелятора $\hat m^{(2)}_{ij}$:

$$\hat U_{ii}\hat m^{(2)}_{ij} = \delta_{ij} + \sum_{r\in\pi_i}\hat G_{ir}\hat m^{(2)}_{rj}, \tag{2.39}$$

де

$$\hat{U}_{ii} = -z' \left(\hat{F}_i^{(2)}\right)^{-1} - \sum_{r\in\pi_i} \hat{E}_{ii}. \qquad (2.40)$$

У випадку однорідного поля ($\kappa_{i\alpha} \to \kappa_\alpha$) матриці $\hat{F}$ перестають залежати від вузлових індексів, а корелятор $\hat{m}_{ij}^{(2)}$ залежить від різниці координат вузлів i, j, і ми можемо розв'язати рівняння (2.39), роблячи фур'є–перетворення

$$\hat{m}_{ij}^{(2)} = \hat{m}^{(2)}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i) = \frac{V_e}{(2\pi)^D} \int d\mathbf{q}\, e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_j-\mathbf{R}_i)} \hat{m}^{(2)}(\mathbf{q}), \qquad (2.41)$$

де V_e — об'єм елементарної комірки; D — вимірність ґратки (простору), інтеґрування ведеться по першій зоні Бріллюена. Розв'язок має вигляд

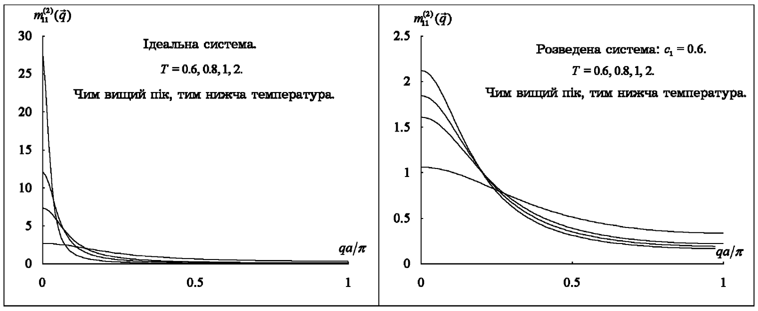


Рис. 2. Парний корелятор чистого і розведеного ланцюжків спінів у НДК (точні результати).

$$\left(\hat{m}^{(2)}(\mathbf{q})\right)^{-1} = -z'\left(\hat{F}^{(2)}\right)^{-1} + z\left(\hat{F}^{(20)} + \hat{F}^{(11)}\right)^{-1} + (\pi_{\mathbf{0}} - \pi_{\mathbf{q}})\left(\hat{F}^{(20)}\left(\hat{F}^{(11)}\right)^{-1}\hat{F}^{(20)} - \hat{F}^{(11)}\right)^{-1}, \qquad (2.42)$$

де

$$\pi_{\mathbf{q}} = \sum_{j\in\pi_i} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_j-\mathbf{R}_i)},\ \pi_{\mathbf{0}} = z. \qquad (2.43)$$

Для ґраток з гіперкубічною симетрією

$$\pi_{\mathbf{q}} = 2\sum_{l=1}^{D} \cos(q_l a), \qquad (2.44)$$

де a — період ґратки.

Зазначимо, що результат (2.42) у випадку $c_1 = 1$ відтворює результат для парної КФ ідеальної системи в НДК [23], а у випадку $\mathbf{q} = 0$ збігається з отриманим у [22,8].

Вираз для тернарного корелятора $m^{(3)}_{1\alpha,2\beta,3\gamma}$ отримаємо, беручи похідні від рівняння (2.39), яке спершу запишемо у такій формі (тут вільні вузлові індекси позначено цифрами):

$$U_{1\alpha,1\delta} m^{(2)}_{1\delta,2\beta} = \delta_{12}\delta_{\alpha\beta} + \sum_{r\in\pi_1} G_{1\alpha,r\delta} m^{(2)}_{r\delta,2\beta}. \qquad (2.45)$$

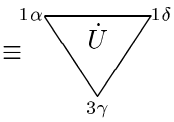
Похідна від (2.45) по $\kappa_{3\gamma}$ дає

$$\dot{U}_{1\alpha,1\delta,3\gamma} m^{(2)}_{1\delta,2\beta} + U_{1\alpha,1\delta} m^{(3)}_{1\delta,2\beta,3\gamma} \qquad (2.46)$$

$$= \sum_{r\in\pi_1}\left(\dot{G}_{1\alpha,r\delta,3\gamma} m^{(2)}_{r\delta,2\beta} + G_{1\alpha,r\delta} m^{(3)}_{r\delta,2\beta,3\gamma}\right),$$

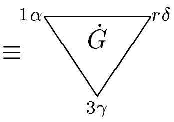
де крапкою позначені похідні по $\kappa_{3\gamma}$:

$$\dot{U}_{1\alpha,1\delta,3\gamma} = \frac{\delta U_{1\alpha,1\delta}}{\delta\kappa_{3\gamma}} \equiv$$



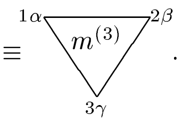
,

$$\dot{G}_{1\alpha,r\delta,3\gamma} = \frac{\delta G_{1\alpha,r\delta}}{\delta\kappa_{3\gamma}} \equiv$$



,

$$m^{(3)}_{1\alpha,2\beta,3\gamma} = \frac{\delta m^{(2)}_{1\alpha,2\beta}}{\delta\kappa_{3\gamma}} \equiv$$



. (2.47)

У (2.47) введені триполюсники, які дають змогу записати (2.47) більш наочно:

$$ {}^{1}\underset{3}{\bigtriangledown_{\dot U}}{}^{1}\, \hat m^{(2)}_{12} + \hat U_{11}\, {}^{1}\underset{3}{\bigtriangledown_{m^{(3)}}}{}^{2} \tag{2.48}$$

$$ = \sum_{r\in\pi_1}\left({}^{1}\underset{3}{\bigtriangledown_{\dot G}}{}^{r}\, \hat m^{(2)}_{r2} + \hat G_{1r}\, {}^{r}\underset{3}{\bigtriangledown_{m^{(3)}}}{}^{2}\right). $$

Зауважимо, що у триполюсниках вершини з однаковими вузловими індексами є симетричними за відповідними сортовими індексами, тобто

$$ {}^{1\gamma}\underset{3\epsilon}{\bigtriangledown_{\dot U}}{}^{1\delta} = {}^{1\delta}\underset{3\epsilon}{\bigtriangledown_{\dot U}}{}^{1\gamma}. $$

Беручи похідні від виразів (2.38) і (2.34), визначаємо

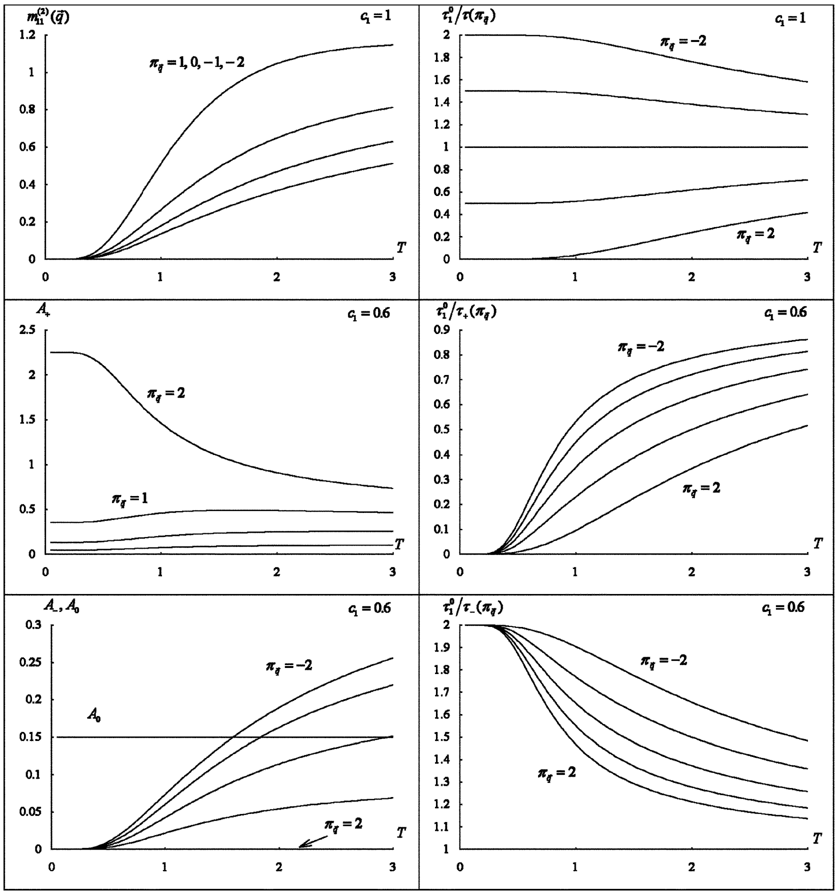


Рис. 3. Динамічний структурний фактор чистого (точний результат) і розведеного ланцюжків спінів у НДК: амплітуди й обернені часи релаксації для різних хвильових векторів ($\pi_{\mathbf q} = 2, 1, 0, -1, -2$). У чистій системі лінію $m^{(2)}_{11}(\vec 0)$ вилучено, оскільки $m^{(2)}_{11}(\vec 0) \stackrel{T\to 0}{\longrightarrow} \infty$. На температурній залежності A_+ з $\pi_{\mathbf q} = 1$ видно максимум при $T \approx 1.9$.

$$ {}^{1}\underset{3}{\bigtriangledown_{\dot U}}{}^{1} = z' \left(\hat F^{(2)}_1\right)^{-1} {}^{1}\underset{3}{\bigtriangledown_{\dot F^{(2)}}}{}^{1} \left(\hat F^{(2)}_1\right)^{-1} + \sum_{r\in\pi_1} \hat E_{11} \left({}^{1}\underset{3}{\bigtriangledown_{\dot F^{(11)}}}{}^{r} \left(\hat F^{(20)}_{r1}\right)^{-1} \hat F^{(11)}_{r1} \right. $$

$$-\hat{F}^{(11)}_{1r}\left(\hat{F}^{(20)}_{r1}\right)^{-1} {}^{r}\bigtriangledown^{r}_{3}\,\dot{F}^{(20)} \left(\hat{F}^{(20)}_{r1}\right)^{-1}\hat{F}^{(11)}_{r1} + \hat{F}^{(11)}_{1r}\left(\hat{F}^{(20)}_{r1}\right)^{-1} {}^{r}\bigtriangledown^{1}_{3}\,\dot{F}^{(11)} - {}^{1}\bigtriangledown^{1}_{3}\,\dot{F}^{(20)}\Bigg)\hat{E}_{11}. \qquad (2.49)$$

Для отримання (2.49) використано тотожності вигляду

$$\frac{\delta\left(\hat{F}^{(2)}_{1}\right)^{-1}}{\delta\kappa_{3\gamma}} = -\left(\hat{F}^{(2)}_{1}\right)^{-1}\left(\frac{\delta\hat{F}^{(2)}_{1}}{\delta\kappa_{3\gamma}}\right)\left(\hat{F}^{(2)}_{1}\right)^{-1}, \qquad (2.50)$$

які можна отримати для довільної матриці $\hat{A}$, диференціюючи тотожність $\hat{A}\hat{A}^{-1}=1$.

Визначимо вираз для триполюсників, які з'явилися у (2.49):

$$\frac{\delta(\hat{F}^{(2)}_{1})_{\alpha\beta}}{\delta\kappa_{3\gamma}} = \frac{\delta\left\langle F^{(2)}_{1\alpha\beta}\right\rangle_x}{\delta\kappa_{3\gamma}} = \left\langle F^{(3)}_{1\alpha\beta\delta}\right\rangle_x \hat{\bar{\kappa}}^{(1)}_{1\delta,3\gamma}, \qquad (2.51)$$

те саме в діаграмній формі має вигляд

$${}^{1}\bigtriangledown^{1}_{3}\,\dot{F}^{(2)} = {}^{1}\bigtriangledown^{1}_{1\;\hat{\bar{\kappa}}^{(1)}_{13}}\,F^{(3)}. \qquad (2.52)$$

Аналогічно отримаємо вирази для інших триполюсників

$${}^{r}\bigtriangledown^{r}_{3}\,\dot{F}^{(20)} = {}^{r}\bigtriangledown^{r}_{r\;{}_{1}\hat{\bar{\kappa}}^{(1)}_{r3}}\,F^{(30)} + {}^{r}\bigtriangledown^{r}_{1\;{}_{r}\hat{\bar{\kappa}}^{(1)}_{13}}\,F^{(21)}, \qquad (2.53)$$

$${}^{1}\bigtriangledown^{r}_{3}\,\dot{F}^{(11)} = {}^{1}\bigtriangledown^{r}_{1\;{}_{r}\hat{\bar{\kappa}}^{(1)}_{13}}\,F^{(21)} + {}^{1}\bigtriangledown^{r}_{r\;{}_{1}\hat{\bar{\kappa}}^{(1)}_{r3}}\,F^{(21)}, \qquad (2.54)$$

$${}^{1\alpha}\bigtriangledown^{1\beta}_{1\gamma}\,F^{(30)} = \left\langle F^{(30)}_{1\alpha\beta\gamma,r}\right\rangle_x = \left\langle\langle S_{1\alpha}S_{1\beta}S_{1\gamma}\rangle^{c}_{H_{1r}}\right\rangle_x,$$

$${}^{r\alpha}\bigtriangledown^{r\beta}_{1\gamma}\,F^{(21)} = \left\langle F^{(21)}_{r\alpha\beta,1\gamma}\right\rangle_x = \left\langle\langle S_{r\alpha}S_{r\beta}S_{1\gamma}\rangle^{c}_{H_{1r}}\right\rangle_x,$$

$${}^{1\alpha}\bigtriangledown^{r\beta}_{1\gamma}\,F^{(21)} = \left\langle F^{(21)}_{1\alpha\gamma,r\beta}\right\rangle_x = \left\langle\langle S_{1\alpha}S_{1\gamma}S_{r\beta}\rangle^{c}_{H_{1r}}\right\rangle_x,$$

$${}^{1\alpha}\bigtriangledown^{r\beta}_{r\gamma}\,F^{(12)} = \left\langle F^{(12)}_{1\alpha,r\beta\gamma}\right\rangle_x = \left\langle\langle S_{1\alpha}S_{r\beta}S_{r\gamma}\rangle^{c}_{H_{1r}}\right\rangle_x.$$

Вирази для величин ${}_{r}\hat{\bar{\kappa}}^{(1)}_{13}$ у (2.53) визначимо з (2.34), (2.30) і (2.37):

$${}_{r}\hat{\bar{\kappa}}^{(1)}_{13} = \hat{\bar{\kappa}}^{(1)}_{13} - {}_{r}\hat{\bar{\varphi}}^{(1)}_{13} = -\hat{E}_{11}\hat{m}^{(2)}_{13} - \hat{G}_{1r}\hat{m}^{(2)}_{r3}. \qquad (2.55)$$

Підставляючи (2.52)–(2.54) з урахуванням (2.55) і (2.30) в (2.49), отримаємо вираз для триполюсника $\dot{U}$, в який увійдуть лише матриці і триполюсники F, а також парні КФ $\hat{m}^{(2)}_{ij}$, розраховані вище. Подібну процедуру слід проробити і для отримання триполюсника $\dot{G}$. Підставляючи одержані вирази у (2.49), отримаємо таке рівняння для потрійного корелятора:

$$\hat{U}_{11}\,{}^{1}\bigtriangledown^{2}_{3}\,m^{(3)} = \sum_{r\in\pi_1}\hat{G}_{1r}\,{}^{r}\bigtriangledown^{2}_{3}\,m^{(3)} \qquad (2.56)$$

$$+\sum_{r\in\pi_1}\left({}^{1}\bigtriangledown^{1\;\hat{m}^{(2)}_{12}}_{1\;\hat{m}^{(2)}_{13}}\,A + {}^{1}\bigtriangledown^{1\;\hat{m}^{(2)}_{12}}_{r\;\hat{m}^{(2)}_{r3}}\,B + {}^{1}\bigtriangledown^{r\;\hat{m}^{(2)}_{r2}}_{1\;\hat{m}^{(2)}_{13}}\,C + {}^{1}\bigtriangledown^{r\;\hat{m}^{(2)}_{r2}}_{r\;\hat{m}^{(2)}_{r3}}\,D\right),$$

де триполюсники A, B, C, D мають такий вигляд

$$
\begin{aligned}
{}^{1}\underset{1}{\nabla_{A}}{}^{1} = {} & \frac{z'}{z}\,(\hat F_1^{(2)})^{-1}\;{}^{1}\underset{1\,(\hat F_1^{(2)})^{-1}}{\nabla_{F^{(3)}}}{}^{1}\,(\hat F_1^{(2)})^{-1} \qquad (2.57)\\
& - \Big(\hat G_{1r}\,{}^{r}\underset{r\,\hat G_{r1}}{\nabla_{F^{(30)}}}{}^{r}\,\hat G_{r1} + \hat G_{1r}\,{}^{r}\underset{1\,\hat E_{11}}{\nabla_{F^{(21)}}}{}^{r}\,\hat G_{r1} + \hat E_{11}\,{}^{1}\underset{r\,\hat G_{r1}}{\nabla_{F^{(21)}}}{}^{r}\,\hat G_{r1} + \hat G_{1r}\,{}^{r}\underset{r\,\hat G_{r1}}{\nabla_{F^{(21)}}}{}^{1}\,\hat E_{11} \Big)\\
& - \Big\{ \hat E_{11}\,{}^{1}\underset{1\,\hat E_{11}}{\nabla_{F^{(30)}}}{}^{1}\,\hat E_{11} + \hat E_{11}\,{}^{1}\underset{r\,\hat G_{r1}}{\nabla_{F^{(21)}}}{}^{1}\,\hat E_{11} + \hat G_{1r}\,{}^{r}\underset{1\,\hat E_{11}}{\nabla_{F^{(21)}}}{}^{1}\,\hat E_{11} + \hat E_{11}\,{}^{r}\underset{1\,\hat E_{11}}{\nabla_{F^{(21)}}}{}^{r}\,\hat G_{r1} \Big\},
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
{}^{1}\underset{r}{\nabla_{B}}{}^{1} = -\Big(& \hat G_{1r}\,{}^{r}\underset{r\,\hat E_{rr}}{\nabla_{F^{(30)}}}{}^{r}\,\hat G_{r1} + \hat G_{1r}\,{}^{r}\underset{1\,\hat G_{1r}}{\nabla_{F^{(21)}}}{}^{r}\,\hat G_{r1}\\
& + \hat E_{11}\,{}^{1}\underset{r\,\hat E_{rr}}{\nabla_{F^{(21)}}}{}^{r}\,\hat G_{r1} + \hat G_{1r}\,{}^{r}\underset{r\,\hat E_{rr}}{\nabla_{F^{(21)}}}{}^{1}\,\hat E_{11} \Big) - \text{п.д.}\,, \qquad (2.58)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
{}^{1}\underset{1}{\nabla_{C}}{}^{r} = -\Big(& \hat G_{1r}\,{}^{r}\underset{r\,\hat G_{r1}}{\nabla_{F^{(30)}}}{}^{r}\,\hat E_{rr} + \hat G_{1r}\,{}^{r}\underset{1\,\hat E_{11}}{\nabla_{F^{(21)}}}{}^{r}\,\hat E_{rr}\\
& + \hat E_{11}\,{}^{1}\underset{r\,\hat G_{r1}}{\nabla_{F^{(21)}}}{}^{r}\,\hat E_{rr} + \hat G_{1r}\,{}^{r}\underset{r\,\hat G_{r1}}{\nabla_{F^{(21)}}}{}^{1}\,\hat G_{1r} \Big) - \text{п.д.}\,, \qquad (2.59)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
{}^{1}\underset{r}{\nabla_{D}}{}^{r} = -\Big(& \hat G_{1r}\,{}^{r}\underset{r\,\hat E_{rr}}{\nabla_{F^{(30)}}}{}^{r}\,\hat E_{rr} + \hat G_{1r}\,{}^{r}\underset{1\,\hat G_{1r}}{\nabla_{F^{(21)}}}{}^{r}\,\hat E_{rr}\\
& + \hat E_{11}\,{}^{1}\underset{r\,\hat E_{rr}}{\nabla_{F^{(21)}}}{}^{r}\,\hat E_{rr} + \hat G_{1r}\,{}^{r}\underset{r\,\hat E_{rr}}{\nabla_{F^{(21)}}}{}^{1}\,\hat G_{1r} \Big) - \text{п.д.} \qquad (2.60)
\end{aligned}
$$

У виразах (2.57)–(2.60) “п.д.” означає парний доданок до попереднього (у дужках), тобто доданок, у якому зроблена заміна матриць $E \leftrightarrow G$, а в триполюсниках — заміна індексів $1 \leftrightarrow r$. Наприклад, останній (у фігурних дужках) доданок (2.57) є “п.д.” до попереднього (у круглих дужках).

Під час переходу до однорідного поля і фур'є–зображення за вузловими індексами

$$
\begin{aligned}
{}^{i}\underset{k}{\nabla_{m^{(3)}}}{}^{j} &= \nabla_{m^{(3)}}\,(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i, \mathbf{R}_k - \mathbf{R}_i) \qquad (2.61)\\
&= \frac{V_e}{(2\pi)^D}\int d\mathbf{q}_1\, e^{-i\mathbf{q}_1(\mathbf{R}_j-\mathbf{R}_i)}\,\frac{V_e}{(2\pi)^D}\int d\mathbf{q}_2\, e^{-i\mathbf{q}_2(\mathbf{R}_k-\mathbf{R}_i)}\;\nabla_{m^{(3)}}\,(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)
\end{aligned}
$$

з рівняння (2.56) отримаємо

$$\underset{}{\nabla_{m^{(3)}}}(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2) = \hat{m}^{(2)}(\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2)\left(z\,\nabla_{A} + \pi_{\mathbf{q}_1}\nabla_{B} + \pi_{\mathbf{q}_2}\nabla_{C} + \pi_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2}\nabla_{D}\right)\begin{matrix}\hat{m}^{(2)}(\mathbf{q}_1)\\ \\ \hat{m}^{(2)}(\mathbf{q}_2)\end{matrix}, \tag{2.62}$$

де врахована рівність, що випливає з (2.39)

$$\hat{U} - \pi(\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2)\hat{G} = \left(\hat{m}^{(2)}(\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2)\right)^{-1}. \tag{2.63}$$

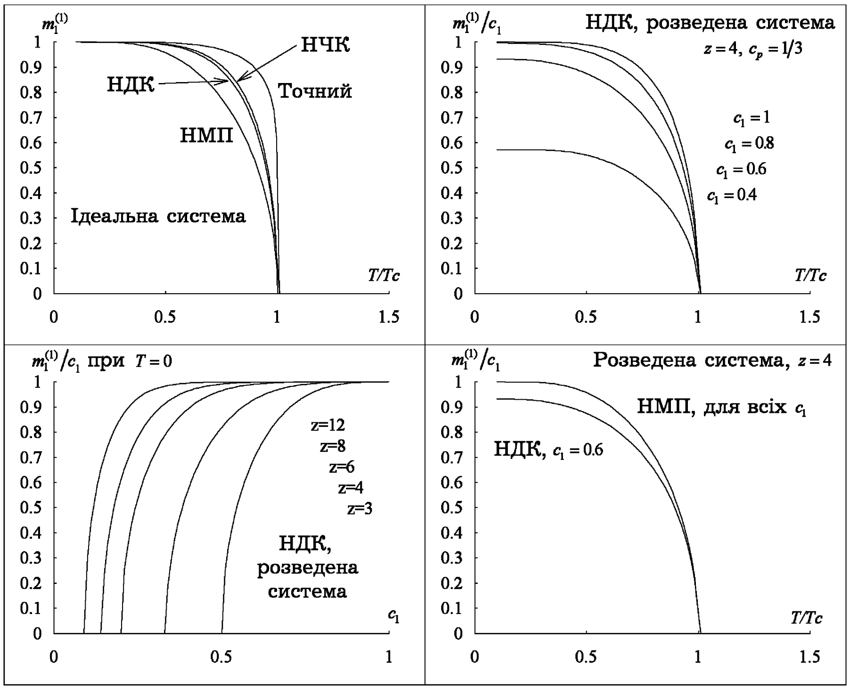


Рис. 4. Параметр порядку $m_1^{(1)}$ чистої і розведеної систем на плоскій квадратній ґратці ($z = 4$) в наближеннях молекулярного поля, дво– і чотиричастинкового кластера, а також точний результат Онсаґера для чистої системи.

Зауважимо, що триполюсники B, C, D співпадають при повороті на 120°, тобто

$$\underset{\gamma}{{}^{\alpha}\nabla_{B}{}^{\beta}} = \underset{\alpha}{{}^{\beta}\nabla_{C}{}^{\gamma}} = \underset{\beta}{{}^{\gamma}\nabla_{D}{}^{\alpha}}, \tag{2.64}$$

як і повинно бути з міркувань симетрії.

III. РЕЛАКСАЦІЙНА ДИНАМІКА МОДЕЛІ

Ми будемо досліджувати динаміку системи на основі Ґлауберівського керівного рівняння (master equation) для функції розподілу $\rho_x(\{S\},t)$:

$$\frac{d}{dt}\rho_x(\{S\},t) = \sum_i W_i(\ldots -S_i\ldots)\rho_x(\ldots -S_i\ldots,t) - \sum_i W_i(\ldots S_i\ldots)\rho_x(\ldots S_i\ldots,t). \tag{3.1}$$

У цьому підході динаміка спінової підсистеми спричиняється її взаємодією з іншими (наприклад, фононною) підсистемами, які відіграють роль термостата. Форма $W_i(\{S\})$ виводиться з умови детального балансу для матриці густини $\rho_x(\{S\})$ канонічного ансамблю

$$\frac{W_i(\ldots S_i \ldots)}{W_i(\ldots - S_i \ldots)} = \frac{\rho_x(\ldots - S_i \ldots)}{\rho_x(\ldots S_i \ldots)} = \frac{\exp(-\varepsilon_i S_i)}{\exp(\varepsilon_i S_i)} = \frac{1 - S_i \tanh \varepsilon_i}{1 + S_i \tanh \varepsilon_i}, \tag{3.2}$$

де

$$\varepsilon_i = \kappa_i + \sum_j K_{ij} S_j \tag{3.3}$$

є локальним полем, що діє на i-й спін. Слідуючи роботі Ґлаубера [9], імовірність, що i-й спін за одиницю часу переорієнтується із стану S_i в $-S_i$, приймають такою:

$$W_i(\ldots S_i \ldots) = \frac{1}{2\tau_i}(1 - S_i \tanh \varepsilon_i). \tag{3.4}$$

Величина τ_i має розмірність часу і визначає часовий масштаб динамічних процесів. Співвідношення (3.1) і (3.4) приводять до такого кінетичного рівняння для середнього значення спіну:

$$D_{i,t} \langle S_i \rangle_{H,t} = \langle \tanh \varepsilon_i \rangle_{H,t}\,, \tag{3.5}$$

де

$$\langle (\cdots) \rangle_{H,t} = Sp_{\{S\}} \rho(\{S\}, t)(\cdots),\ D_{i,t} = 1 + \tau_i \frac{d}{dt}. \tag{3.6}$$

Рівняння (3.5) є незамкнене. Якщо розкласти $\langle \tanh \varepsilon_i \rangle_{H,t}$ у правій частині (3.5), то виявляється, що це рівняння захоплює кореляційні функції типу $\langle S_{i_1} \cdots S_{i_n} \rangle_{H,t}$, де індекси $i_1 \cdots i_n$ належать до першої координаційної сфери вузла i ($i_1 \cdots i_n \in \pi_i$). Рівняння для $\langle S_{i_1} \cdots S_{i_n} \rangle_{H,t}$, виведене з (3.1)–(3.3), включає ще вищі КФ, тому точний розв'язок ґлауберівських рівнянь визначений тільки для одновимірних систем у нульовому полі (ідеальний ланцюжок [9,10,14], ланцюжок з домішкою на одному вузлі [15]). Для інших випадків використовують наближення, що виражають вищі КФ через нижчі, наприклад $\left\langle \prod_j S_j \right\rangle_{H,t} \approx \prod_j \langle S_j \rangle_{H,t}$.

Тут ми пропонуємо розчеплення рівняння (3.5) в дусі кластерного наближення. В одночастинковому підході ми замінюємо внески всіх найближчих сусідів в ε_i на ефективні поля:

$$\varepsilon_i \to \varepsilon_i^{[1]} = \kappa_{i,t} + \sum_{r \in \pi_i} {}_r\bar{\varphi}_{i,t} \equiv \bar{\kappa}_{i,t}, \tag{3.7}$$

де ${}_r\bar{\varphi}_{i,t}$ має зміст ефективного поля, що діє на спін i з боку найближчого сусіда на вузлі r. Зауважимо, що тепер ми приймаємо зовнішнє поле залежним від часу: $\kappa_i = \kappa_{i,t}$.

У двочастинковому підході один з найближчих сусідів враховується в ε_i явно:

$$\begin{aligned} \varepsilon_i \to \varepsilon_i^{[2]} &= \kappa_{i,t} + \sum_{\substack{r \in \pi_i \\ r \neq j}} {}_r\bar{\varphi}_{i,t} + K_{ij} S_j \\ &\equiv {}_j\bar{\kappa}_{i,t} + K_{ij} S_j,\ (j \in \pi_i). \end{aligned} \tag{3.8}$$

Для ідеальної системи не потрібно більше жодних припущень, щоб отримати замкнену систему рівнянь для середнього значення спіну $\langle S_i \rangle_{H,t}$:

$$\begin{aligned} D_{i,t} \langle S_i \rangle_{H,t} &= \left\langle \tanh \varepsilon_{i,t}^{[1]} \right\rangle_{H,t} \\ D_{i,t} \langle S_i \rangle_{H,t} &= \left\langle \tanh \varepsilon_{i,t}^{[2]} \right\rangle_{H,t}. \end{aligned} \tag{3.9}$$

Для багатосортної системи слід вказати залежність полів ${}_r\bar{\varphi}_{i,t}$ від сортової конфіґурації. Ми вважатимемо поля ${}_r\bar{\varphi}_{i,t}$ різними в одно– і двочастинковому підходах, поки не буде виконано сортове усереднення. Для процедури сортового усереднення приймаємо обидва — і "одночастинкове", і "двочастинкове" — поля локально залежними від сортової конфіґурації так само, як і часи релаксації τ_i:

$${}_r\bar{\varphi}_{i,t} = \sum_\alpha X_{i\alpha}\, {}_r\bar{\varphi}_{i\alpha,t}\ ,\ \tau_i = \sum_\alpha \tau_\alpha^0 X_{i\alpha}, \tag{3.10}$$

де ${}_r\bar{\varphi}_{i\alpha,t}, \tau_\alpha^0$ не залежать від спінової чи сортової конфіґурації (не містять X- чи S-операторів).

Після простих перетворень (3.9) можна записати у формі

$$\begin{aligned} D_{i,t} \langle S_i \rangle_{H,t} &= \tanh \bar{\kappa}_{i,t}, \\ D_{i,t} \langle S_i \rangle_{H,t} &= L_{ij,t} + P_{ij,t} \langle S_j \rangle_{H,t}\,, \\ D_{j,t} \langle S_j \rangle_{H,t} &= L_{ji,t} + P_{ji,t} \langle S_i \rangle_{H,t}\,,\ (j \in \pi_i), \end{aligned} \tag{3.11}$$

де

$$L_{ij,t} = \frac{1}{2}\left[\tanh({}_j\bar{\kappa}_{i,t} + K_{ij}) + \tanh({}_j\bar{\kappa}_{i,t} - K_{ij})\right],$$

$$P_{ij,t} = \frac{1}{2}\left[\tanh({}_j\bar{\kappa}_{i,t} + K_{ij}) - \tanh({}_j\bar{\kappa}_{i,t} - K_{ij})\right]. \quad (3.12)$$

Вирази (3.11) становлять систему нелінійних диференціальних рівнянь. Для лінеаризації цих виразів ми розглянемо тільки лінійний відгук системи на малу залежну від часу зміну зовнішнього поля. З цією метою ми запишемо залежні від часу величини в такому вигляді (з точністю до лінійних членів за зміною поля):

$$\begin{aligned}
&\kappa_{i,t} = \kappa_i + \delta\kappa_{i,t},\ \bar{\kappa}_{i,t} = \bar{\kappa}_i + \delta\bar{\kappa}_{i,t},\\
&{}_j\bar{\kappa}_{i,t} = {}_j\bar{\kappa}_i + \delta\,{}_j\bar{\kappa}_{i,t},\ \langle S_i\rangle_{H,t} = m_i + \delta m_{i,t},\\
&L_{ij,t} = L_{ij} + L'_{ij}\,\delta\,{}_j\bar{\kappa}_{i,t},\ P_{ij,t} = P_{ij} + P'_{ij}\,\delta\,{}_j\bar{\kappa}_{i,t},\\
&\tanh\bar{\kappa}_{i,t} = F_i^{(1)} + F_i^{(2)}\,\delta\bar{\kappa}_{i,t},.
\end{aligned} \quad (3.13)$$

де κ_i, $\bar{\kappa}_i$, ${}_j\bar{\kappa}_i$, m_i, L_{ij}, P_{ij} є статичними (незалежними від часу) компонентами відповідних величин, а $\delta\bar{\kappa}_{i,t}$, $\delta\,{}_j\bar{\kappa}_{i,t}$, $\delta m_{i,t}$, $L'_{ij}\delta\,{}_j\bar{\kappa}_{i,t}$, $P'_{ij}\delta\beta\,{}_i\bar{\kappa}_{j,t}$ відображають лінійні за $\delta\kappa_{i,t}$ відхилення цих величин від статичних значень;

$$L_{ij} = \frac{1}{2}\left(\tanh({}_j\bar{\kappa}_i + K_{ij}) + \tanh({}_j\bar{\kappa}_i - K_{ij})\right),$$

$$P_{ij} = \frac{1}{2}\left(\tanh({}_j\bar{\kappa}_i + K_{ij}) - \tanh({}_j\bar{\kappa}_i - K_{ij})\right),$$

$$\begin{aligned}
L'_{ij} &= \frac{1}{2}\left(\cosh^{-2}({}_j\bar{\kappa}_i + K_{ij})\right.\\
&\left.+ \cosh^{-2}({}_j\bar{\kappa}_i - K_{ij})\right),
\end{aligned} \quad (3.14)$$

$$P'_{ij} = \frac{1}{2}\left(\cosh^{-2}({}_j\bar{\kappa}_i + K_{ij}) - \cosh^{-2}({}_j\bar{\kappa}_i - K_{ij})\right).$$

Завдяки (3.14) рівняння (3.11) розпадається на дві незалежні системи рівнянь — для статичних і динамічних величин. Статична частина

$$\begin{aligned}
&m_i = \tanh\bar{\kappa}_i,\\
&m_i = L_{ij} + P_{ij}m_j,\ m_j = L_{ji} + P_{ji}m_i
\end{aligned} \quad (3.15)$$

зводиться до форми

$$m_i = \tanh\bar{\kappa}_i, \quad (3.16)$$

$$m_i = \frac{L_{ij} + P_{ij}L_{ji}}{1 - P_{ij}P_{ji}}. \quad (3.17)$$

Зауважимо, що права частина (3.17) співпадає з $\langle S_i\rangle_{H_{ij}}$, тобто ми отримали те саме, що й на основі кластерного розкладу вільної енергії. Домножуючи (3.16) і (3.17) на $X_{i\alpha}$ і усереднюючи по сортових конфіґураціях, отримаємо такий же вираз:

$$\langle m_i X_{i\alpha}\rangle_x \equiv m_{i\alpha}^{(1)} = c_\alpha \tanh\bar{\kappa}_{i\alpha} = \sum_\beta w_{\alpha\beta}\frac{\sinh({}_j\bar{\kappa}_{i\alpha} + {}_i\bar{\kappa}_{j\beta}) + a_{\alpha\beta}\sinh({}_j\bar{\kappa}_{i\alpha} - {}_i\bar{\kappa}_{j\beta})}{\cosh({}_j\bar{\kappa}_{i\alpha} + {}_i\bar{\kappa}_{j\beta}) + a_{\alpha\beta}\cosh({}_j\bar{\kappa}_{i\alpha} - {}_i\bar{\kappa}_{j\beta})}. \quad (3.18)$$

Динамічна лінеаризована частина (3.11) (відкинуто квадратичні по $\delta\kappa_i$ члени $L'_{ij}\delta\,{}_i\bar{\kappa}_{j,t}\delta m_{i,t}$, $L'_{ji}\delta\,{}_j\bar{\kappa}_{i,t}\delta m_{j,t}$) має вигляд

$$\begin{aligned}
D_{i,t}\,\delta m_{i,t} &= F_i^{(2)}\,\delta\bar{\kappa}_{i,t},\\
D_{i,t}\,\delta m_{i,t} &= P_{ij}\,\delta m_{j,t} + R_{ij}\,\delta\,{}_j\bar{\kappa}_{i,t},\\
D_{j,t}\,\delta m_{j,t} &= P_{ji}\,\delta m_{i,t} + R_{ji}\,\delta\,{}_i\bar{\kappa}_{j,t},
\end{aligned} \quad (3.19)$$

де

$$R_{ij} = L'_{ij} + P'_{ij}m_j = \langle S_iS_i\rangle^c_{H_{ij}} - \langle S_iS_j\rangle^c_{H_{ij}}\,\langle S_iS_j\rangle^c_{H_{ji}}\,/\,\langle S_jS_j\rangle^c_{H_{ji}}$$

$$= 2a_{ij}\frac{2a_{ij}(1 + \cosh 2\,{}_j\bar{\kappa}_i\cosh 2\,{}_i\bar{\kappa}_j) + (1 + a_{ij}^2)(\cosh 2\,{}_j\bar{\kappa}_i + \cosh 2\,{}_i\bar{\kappa}_j)}{\left[\cosh({}_j\bar{\kappa}_i + {}_i\bar{\kappa}_j) + a_{ij}\cosh({}_j\bar{\kappa}_i + {}_i\bar{\kappa}_j)\right]^2(1 + a_{ij}^2 + 2a_{ij}\cosh 2\,{}_j\bar{\kappa}_i)}. \quad (3.20)$$

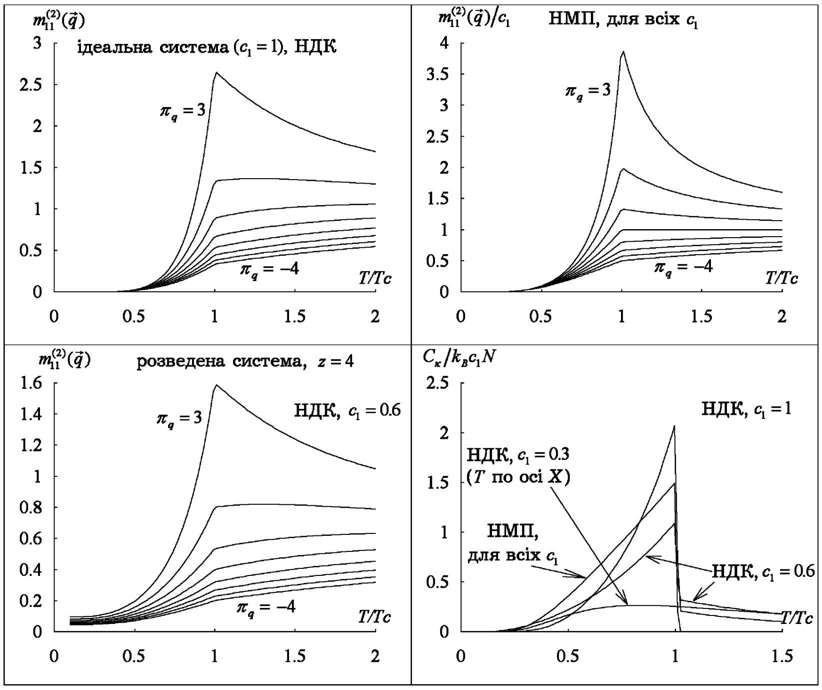


Рис. 5. Порівняння НДК і НМП для чистої і розведеної ($c_1 = 0.6$) систем на плоскій квадратній ґратці ($z = 4$). Парні кореляційні функції $m_{11}^{(2)}(\mathbf{q})$ для різних $\mathbf{q}$: $\pi_{\mathbf{q}} = 3, 2, 1, 0, -1, -2, -3, -4$. Теплоємність на один взаємодіючий спін $C_\kappa/c_1 N k_B$.

Співвідношення (3.19) є системою лінійних диференціальних рівнянь. Використовуючи Фур'є–перетворення $\delta m_{j,t} = \int d\omega \exp(i\omega t)\delta m_j(\omega)$ і вилучаючи δm_j з (3.19), отримуємо

$$\delta m_i(\omega) = \phi_i^{(2)}(\omega)\, \delta\bar{\kappa}_i(\omega),$$

$$\delta m_i(\omega) = \phi_{ij}^{(20)}(\omega)\, \delta_{\,j}\bar{\kappa}_i(\omega) + \phi_{ij}^{(11)}(\omega)\, \delta_{\,i}\bar{\kappa}_j(\omega), \quad (3.21)$$

де

$$\phi_i^{(2)}(\omega) = \frac{F_i^{(2)}}{D_i(\omega)},\; D_i(\omega) = 1 + i\omega\tau_i,$$

$$\phi_{ij}^{(20)}(\omega) = \frac{R_{ij}D_j(\omega)}{D_i(\omega)D_j(\omega) - P_{ij}P_{ji}}, \quad (3.22)$$

$$\phi_{ij}^{(11)}(\omega) = \frac{R_{ji}P_{ij}}{D_i(\omega)D_j(\omega) - P_{ij}P_{ji}}. \quad (3.23)$$

Нижче ми будемо опускати аргумент ω функцій ϕ, δm тощо, пам'ятаючи, що розгляд іде в ω-просторі.

Домножуючи (3.21) на $X_{i\alpha}$ і усереднюючи за сортовими конфіґураціями, ми отримуємо

$$\delta m_{i\alpha} = \left\langle X_{i\alpha}\phi_i^{(2)} \right\rangle_x \delta\bar{\kappa}_{i\alpha},$$

$$\delta m_{i\alpha} = \left\langle X_{i\alpha}\phi_{ij}^{(20)} \right\rangle_x \delta_{\,j}\bar{\kappa}_{i\alpha} + \sum_\beta \left\langle X_{i\alpha}X_{j\beta}\phi_{ij}^{(11)} \right\rangle_x \delta_{\,i}\bar{\kappa}_{j\beta}. \quad (3.24)$$

У попередньому розділі з рівняння типу (3.24) одержано статичну парну КФ системи. Тут ми отримаємо структурний фактор

$$m_{i\alpha,j\beta}^{(2)}(\omega) = \frac{\delta m_{i\alpha}(\omega)}{\delta\kappa_{j\beta}(\omega)}. \quad (3.25)$$

Ділячи (3.24) на $\delta\kappa_{j\beta}$, отримуємо рівняння типу (2.39), розв'язок якого (для випадку однорідного статичного поля: $\kappa_{i\alpha} = \kappa_\alpha$) має вигляд

$$\left(\hat{m}^{(2)}(\mathbf{q},\omega)\right)^{-1} = (1-z)\left(\hat{\phi}^{(2)}\right)^{-1} + z\left(\hat{\phi}^{(20)} + \hat{\phi}^{(11)}\right)^{-1} + (\pi_{\mathbf{0}} - \pi_{\mathbf{q}})\left(\hat{\phi}^{(20)}\left(\hat{\phi}^{(11)}\right)^{-1}\hat{\phi}^{(20)} - \hat{\phi}^{(11)}\right)^{-1}, \quad (3.26)$$

де елементами матриць є

$$\left(\hat{m}^{(2)}(\mathbf{q},\omega)\right)_{\alpha\beta} = \sum_j \exp\left(-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)\right) m^{(2)}_{i\alpha,j\beta}(\omega),\ \left(\hat{\phi}^{(11)}_{ij}\right)_{\alpha\beta} = \left\langle X_{i\alpha} X_{j\beta} \phi^{(11)}_{ij} \right\rangle_x \overset{\text{ОП}}{=} w_{\alpha\beta} \frac{R_{\beta\alpha} P_{\alpha\beta}}{D_\alpha D_\beta - P_{\alpha\beta} P_{\beta\alpha}}, \tag{3.27}$$

$$\left(\hat{\phi}^{(2)}_i\right)_{\alpha\beta} = \left\langle X_{i\alpha} X_{i\beta} \phi^{(2)}_i \right\rangle_x \overset{\text{ОП}}{=} \delta_{\alpha\beta} c_\alpha \frac{1 - \tanh^2 \bar{\kappa}_\alpha}{D_\alpha},\ \left(\hat{\phi}^{(20)}_{ij}\right)_{\alpha\beta} = \left\langle X_{i\alpha} X_{i\beta} \phi^{(20)}_{ij} \right\rangle_x \overset{\text{ОП}}{=} \delta_{\alpha\beta} \sum_\gamma w_{\alpha\gamma} \frac{R_{\alpha\gamma} D_\gamma}{D_\alpha D_\gamma - P_{\alpha\gamma} P_{\gamma\alpha}}. \tag{3.28}$$

причому

$$D_\alpha = 1 + i\omega\tau^0_\alpha,\ P_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\left[\tanh(\bar{\kappa}'_\alpha + K_{\alpha\beta}) - \tanh(\bar{\kappa}'_\alpha - K_{\alpha\beta})\right], \tag{3.29}$$

$$R_{\alpha\beta} = 2a_{\alpha\beta} \frac{2a_{\alpha\beta}(1 + \cosh 2\bar{\kappa}'_\alpha \cosh 2\bar{\kappa}'_\beta) + (1 + a^2_{\alpha\beta})(\cosh 2\bar{\kappa}'_\alpha + \cosh 2\bar{\kappa}'_\beta)}{\left[\cosh(\bar{\kappa}'_\alpha + \bar{\kappa}'_\beta) + a_{\alpha\beta} \cosh(\bar{\kappa}'_\alpha + \bar{\kappa}'_\beta)\right]^2 (1 + a^2_{\alpha\beta} + 2a_{\alpha\beta} \cosh 2\bar{\kappa}'_\alpha)}$$

У випадку $\omega = 0$ формула (3.26) переходить у (2.42).

IV. ОБГОВОРЕННЯ ОТРИМАНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ

Вирази для парного (2.42), тернарного (2.62) кореляторів і динамічного структурного фактора (3.26) є новими результатами. Для з'ясування особливостей системи і самого наближення розглянемо деякі модельні випадки. Всі рисунки збудовані для систем з повним сортовим хаосом: $w_{\alpha\beta} = c_\alpha c_\beta$.

1. Невзаємодіюча система

Спіни не взаємодіють: $K_{\alpha\beta} = 0\ \forall\ \alpha,\ \beta$,

$$m^{(1)}_\alpha = c_\alpha \tanh \beta\kappa_\alpha, \tag{4.1}$$

$$m^{(2)}_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega) = \delta_{\alpha\beta} \frac{c_\alpha(1 - \tanh^2 \beta\kappa_\alpha)}{1 + i\omega\tau^0_\alpha}. \tag{4.2}$$

Усі спіни незалежні, тому структурний фактор не залежить від довжини хвилі. Часи релаксації дорівнюють τ^0_α.

2. Односортна система

Цей випадок можна отримати, прийнявши $K_{\alpha\beta} = K$, $\kappa_\alpha = \kappa$, $\tau^0_\alpha = \tau^0$ або в границі $c_1 = 1$. В останньому випадку одержуємо таке рівняння для параметра порядку $m^{(1)}_1$ і ефективного поля $\bar{\varphi}_1$:

$$m^{(1)}_1 / c_1 \equiv \sigma^{(1)}_1 = \tanh \beta\bar{\kappa}_1 = \frac{\sinh 2\beta\bar{\kappa}'_1}{\cosh 2\beta\bar{\kappa}'_1 + a}, \tag{4.3}$$

де

$$\bar{\kappa}_1 = \kappa_1 + z\bar{\varphi}_1,\ \bar{\kappa}'_1 = \kappa_1 + z'\bar{\varphi}_1,\ a = \exp(-2\beta K). \tag{4.4}$$

Структурний фактор $m^{(2)}_{11}(\mathbf{q},\omega)$ має вигляд [25]

$$m^{(2)}_{11}(\mathbf{q},\omega)/c_1 \equiv \sigma^{(2)}_{11} = \frac{m^{(2)}_{11}(\mathbf{q})}{1 + i\omega\tau(\pi_\mathbf{q})}, \tag{4.5}$$

де $m^{(2)}_{11}(\mathbf{q})$ збігається з парним корелятором ідеальної системи у НДК [23],

$$\begin{aligned} m^{(2)}_{11}(\mathbf{q}) &= \left(1 - \left(\sigma^{(1)}_1\right)^2\right) \frac{1 - P^2}{1 + z'P^2 - \pi_\mathbf{q} P}, \\ P &= \left\langle \langle S_{i1} S_{j1} \rangle^c_{H_{ij}} \right\rangle_x / \left\langle \langle S_{i1} S_{i1} \rangle^c_{H_i} \right\rangle_x \\ &= \frac{1 - a^2}{\left[\cosh 2\beta\bar{\kappa}'_1 + a\right]^2} \frac{1}{1 - \left(\sigma^{(1)}_1\right)^2}, \end{aligned} \tag{4.6}$$

а час релаксації

$$\begin{aligned} \tau(\pi_\mathbf{q}) &= \tau^0_1 \left(1 - \pi_\mathbf{q} \frac{P}{1 + z'P^2}\right)^{-1} \\ &\xrightarrow{\text{у парафазі}} \tau^0_1 \left(1 - \pi_\mathbf{q} \frac{\tanh \beta K}{1 + z' \tanh^2 \beta K}\right)^{-1} \end{aligned} \tag{4.7}$$

збільшується при $\mathbf{q} \to 0$. Є симетрія $\tau_1^0/\tau(\pi_\mathbf{q}) - 1 = 1 - \tau_1^0/\tau(-\pi_\mathbf{q})$. Зауважимо, що відомий точний результат [24] (одновимірна система, нульове зовнішнє поле) є частковим випадком формул (4.5)–(4.7).

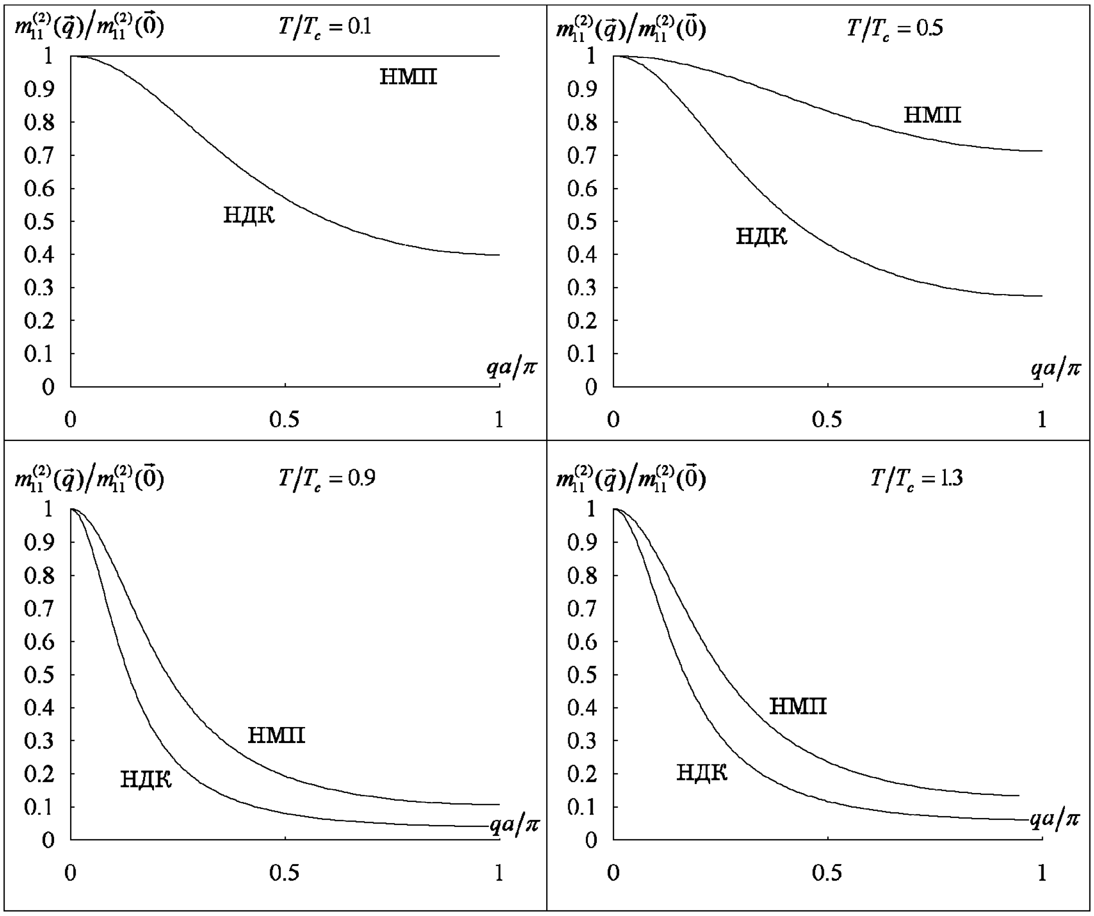


Рис. 6. Залежність від $\mathbf{q}$ ($q_x = q_y = q$) кореляційної функції $m_{11}^{(2)}(\mathbf{q})$ розведеної ($c_1 = 0.6$) системи на плоскій квадратній ґратці ($z = 4$) в НДК і НМП при різних температурах: $T/T_c = 0.1, 0.5, 0.9, 1.3$.

3. Розведена система

Особливий інтерес становить випадок $K_{11} = K$ при $K_{1\alpha} = 0\ \forall\alpha \neq 1$ (сорт 1 розведений невзаємодіючими домішками). Рівняння для параметра впорядкування $m_1^{(1)} \equiv \langle\langle S_{i1}\rangle_H\rangle_x$ й ефективного поля $\bar{\varphi}_1$ набуває вигляду

$$m_1^{(1)} = c_1 \tanh \beta\bar{\kappa}_1 \tag{4.8}$$

$$= w_{11}\frac{\sinh 2\beta\bar{\kappa}_1'}{\cosh 2\beta\bar{\kappa}_1' + a} + w_{12}\tanh\beta\bar{\kappa}_1',$$

$$\bar{\kappa}_1 = \kappa_1 + z\bar{\varphi}_1,\ \bar{\kappa}_1' = \kappa_1 + z'\bar{\varphi}_1. \tag{4.9}$$

Структурний фактор містить три дебаївські доданки

$$m_{11}^{(2)}(\mathbf{q},\omega) = \frac{A_0}{1+i\omega\tau_1^0} + \frac{A_+(\pi_\mathbf{q})}{1+i\omega\tau_+(\pi_\mathbf{q})} \tag{4.10}$$

$$+ \frac{A_-(\pi_\mathbf{q})}{1+i\omega\tau_-(\pi_\mathbf{q})},$$

де

$$A_0 = \frac{c_1F_1^{(2)}w_{12}R_{12}}{zc_1F_1^{(2)} - z'w_{12}R_{12}} \xrightarrow{\text{у парафазі}} \frac{c_1w_{12}}{c_1+z'w_{11}},\quad A_\pm(\pi_\mathbf{q}) = \frac{B_\pm(\pi_\mathbf{q})}{1-D_\pm(\pi_\mathbf{q})},\quad \tau_\pm(\pi_\mathbf{q}) = \frac{\tau_1^0}{1-D_\pm(\pi_\mathbf{q})},$$

$$B_\pm(\pi_\mathbf{q}) = \pm\frac{c_1F_1^{(2)}}{PD_\pm(\pi_\mathbf{q})\sqrt{\mathcal{D}(\pi_\mathbf{q})}}\left(\langle R_1\rangle^2 D_\pm^2(\pi_\mathbf{q}) - (Pw_{12}R_{12})^2\right),\quad D_\pm(\pi_\mathbf{q}) = P\frac{c_1F_1^{(2)}w_{11}R_{11} \pm \sqrt{\mathcal{D}(\pi_\mathbf{q})}}{2\langle R_1\rangle\left(zc_1F_1^{(2)} - z'\langle R_1\rangle\right)},$$

$$\mathcal{D}(\pi_{\mathbf{q}}) = \left(c_1 F_1^{(2)} w_{11} R_{11} \pi_{\mathbf{q}}\right)^2 + 4 \langle R_1 \rangle \left(z c_1 F_1^{(2)} - z' \langle R_1 \rangle\right) w_{12} R_{12} \left(z c_1 F_1^{(2)} - z' R_{12}\right) \tag{4.11}$$

і

$$\langle R_1 \rangle = w_{11} R_{11} + w_{12} R_{12}, \qquad F_1^{(2)} = c_1 \left(1 - \left(\sigma_1^{(1)}\right)^2\right), \qquad R_{12} = 1 - \tanh^2 \beta \bar{\kappa}_1',$$

$$R_{11} = 4a \frac{1 + a\cosh 2\beta\bar{\kappa}_1'}{(\cosh 2\beta\bar{\kappa}_1' + a)(1 + a^2 + 2a\cosh 2\beta\bar{\kappa}_1')},$$

$$P = \frac{1}{2}\left[\tanh \beta(\bar{\kappa}_1' + K) - \tanh \beta(\bar{\kappa}_1' - K)\right]. \tag{4.12}$$

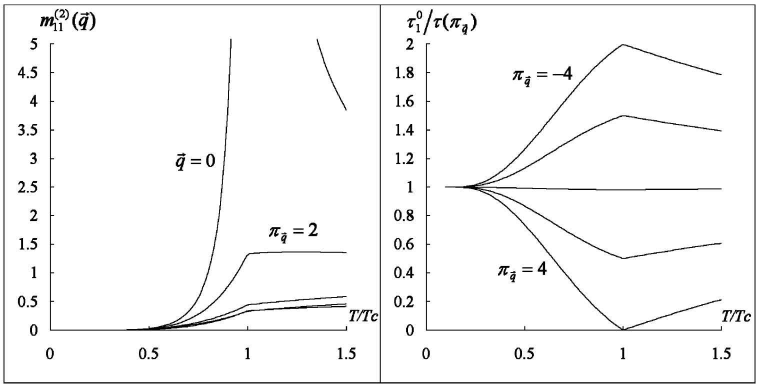


Рис. 7. Динамічний структурний фактор чистої системи ($K = 1$) на плоскій квадратній ґратці ($z = 4$) для різних довжин хвиль ($\pi_{\mathbf{q}} = 4, 2, 0, -2, -4$): парний корелятор і обернений час релаксації.

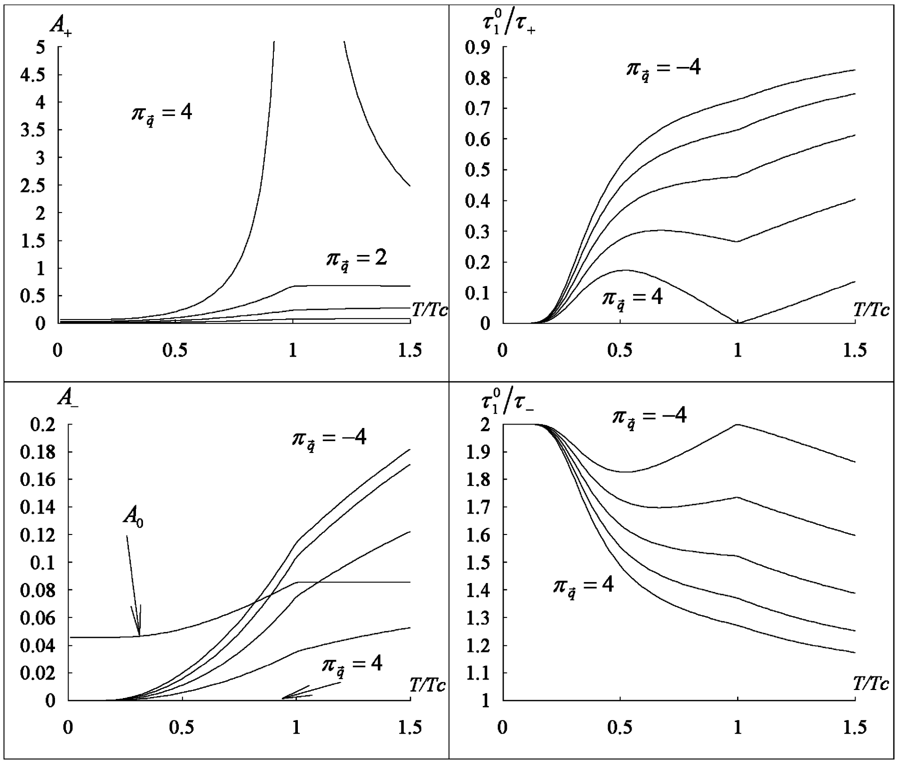


Рис. 8. Динамічний структурний фактор розведеної системи ($K_{11} = 1$, $K_{1\alpha} = 0$) на плоскій квадратній ґратці ($z = 4$) при різних довжинах хвиль ($\pi_{\mathbf{q}} = 4, 2, 0, -2, -4$): амплітуди й обернені часи релаксації.

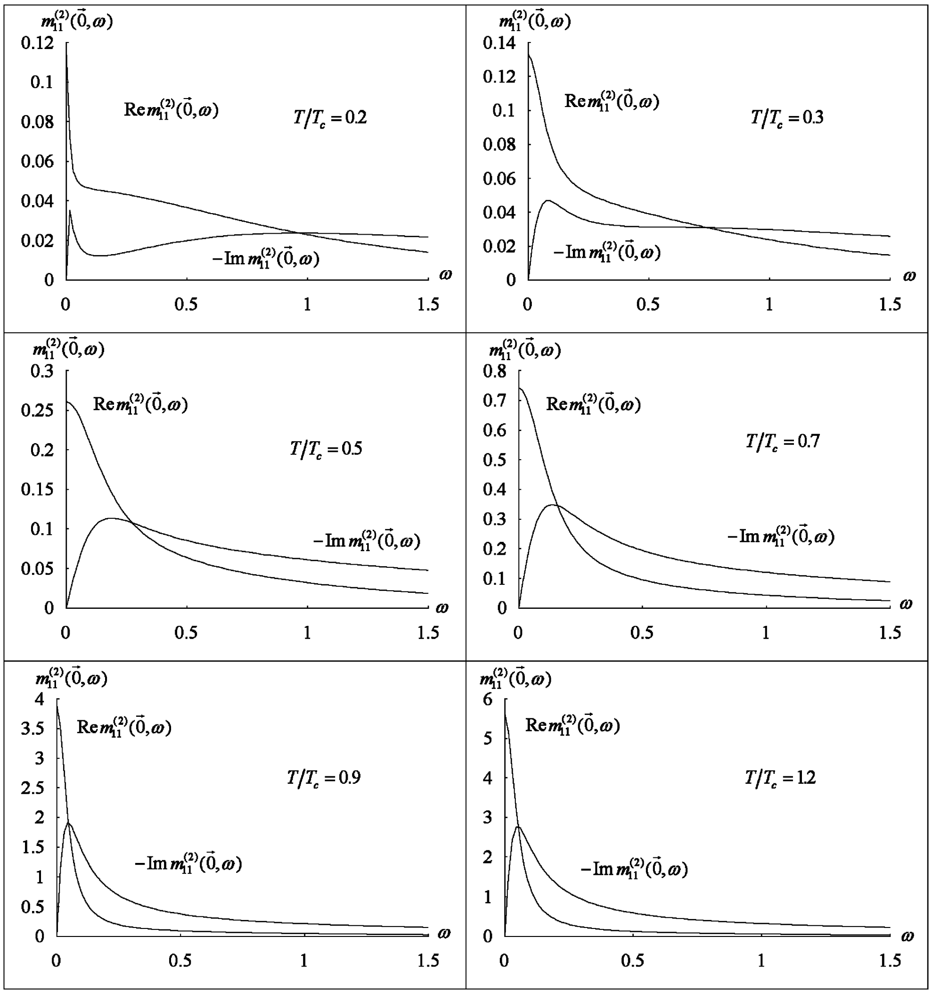


Рис. 9. Частотна залежність динамічного структурного фактора $m_{11}^{(2)}(0,\omega)$ розведеної системи ($c_1 = 0.6$, $K_{11} = 1$, $K_{1\alpha} = 0$, $\tau_1^0 = 1$) на плоскій квадратній ґратці ($z = 4$) при різних температурах. Наявність двох часів релаксації добре видно при низьких температурах.

Перший доданок (4.11) характеризує поведінку (4.2) невзаємодіючих спінів (час релаксації дорівнює зародковому τ_1^0), тому ми вважаємо його внеском ізольованих спінів (тобто тих спінів сорту 1, усі сусіди яких є невзаємодіючими). Останні два члени (4.11) мають такі симетрії:

$$B_{\pm}(\pi_{\mathbf{q}}) = B_{\mp}(-\pi_{\mathbf{q}}), \qquad A_{+}(-z) = A_{-}(z) = 0,$$

$$\frac{\tau_1^0}{\tau_{\pm}(\pi_{\mathbf{q}})} - 1 = 1 - \frac{\tau_1^0}{\tau_{\mp}(-\pi_{\mathbf{q}})}. \tag{4.13}$$

Часи релаксації $\tau_{\pm}$ є зростаючими функціями $\pi_{\mathbf{q}}$. Час релаксації τ_{-} завжди менший від τ_1^0, а τ_{+} завжди більший від τ_1^0 і приводить до критичного сповільнення ($\tau_{+}(\pi_{\mathbf{0}}) \stackrel{T\to T_c}{\longrightarrow} \infty$, $A_{+}(\pi_{\mathbf{0}}) \stackrel{T\to T_c}{\longrightarrow} \infty$). Амплітуда $A_{-}=0$ в центрі першої зони Бріллюена, тоді як A_{+} зникає при $\pi_{\mathbf{q}} = -z$ (у вершинах першої зони Бріллюена).

Якщо взаємодії в системі короткосяжні, то повинні простежуватися перколяційні ефекти: при великій концентрації домішок у системі нема нескінченного кластера взаємодіючих спінів, є лише ізольовані острівки спінів сорту 1, а тому перехід у впорядковану фазу не відбувається.

Зауважимо, що НМП не описує перколяції. У рамках НМП рівняння для параметра порядку і вираз для динамічного структурного фактора розведеної системи мають вигляд

$$m_1^{(1)} = c_1 \tanh\beta(\kappa_1 + zKm_1^{(1)}),\ m_{11}^{(2)}(\mathbf{q},\omega) = \left[\left(c_1\frac{1-\tanh^2\beta(\kappa_1 + zKm_1^{(1)})}{1+i\omega\tau_1^0}\right)^{-1} - \beta K\pi_{\mathbf{q}}\right]^{-1}. \tag{4.14}$$

При нульовому зовнішньому полі ($\kappa_1 = 0$) корелятори НМП (а також ентропія і теплоємність), взяті на один взаємодіючий спін,

$$\sigma_1^{(1)} = \tanh \frac{T_c}{T} \sigma_1^{(1)}, \tag{4.15}$$

$$\sigma_{11}^{(2)}(\mathbf{q}, \omega) = \left[\left(\frac{1 - \tanh^2 \frac{T_c}{T} \sigma_1^{(1)}}{1 + i\omega\tau_1^0} \right)^{-1} - \frac{T_c}{T} \frac{\pi_{\mathbf{q}}}{z} \right]^{-1},$$

залежать від T/T_c ($T_c = zKc_1/k_B$) і не залежать окремо від температури чи концентрації. Тому $\sigma_1^{(1)} = 1$ при $T = 0$. В НДК така поведінка спостерігається тільки при $w_{12} = 0$ ($w_{11} = c_1$ — всі взаємодіючі спіни утворюють один нескінченний кластер). Тоді отримуємо те ж, що в односортній системі: $\sigma_1^{(1)}$ задається формулою (4.3); A_0 у (4.11) дорівнює нулю, A_- занулюється при $\pi_{\mathbf{q}} > 0$, A_+ дорівнює нулю при $\pi_{\mathbf{q}} < 0$, а структурний фактор $\sigma_{11}^{(2)}$ збігається з правою частиною (4.5). Якщо ж $w_{12} > 0$, то параметр порядку не насичується: $\sigma_1^{(1)} < 1$ при $T = 0$, критична температура

$$T_c = 2K_{11} \left(k_B \ln \frac{z' w_{11} + c_1}{z' w_{11} - c_1} \right)^{-1}, \tag{4.16}$$

і при $c_1 > z w_{11}$ зникає перехід у впорядковану фазу. Сприйнятливість системи $\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\mu_1^2}{k_B T} \frac{N}{V} m_{11}^{(2)}(\mathbf{q}, \omega)$ розбігається при низьких температурах, оскільки A_0 і A_+ не занулюються при $\kappa_1 = 0$, $T = 0$.

На рис. 1, 2 показано температурну залежність теплоємності, сприйнятливості і кореляційних функцій чистої і розведеної одновимірних систем ($z = 2$). Ці результати є точними. Динамічний структурний фактор моделі зображений на рис. 3. Видно, що розведення знищує фазовий перехід у точці $T = 0$, зменшує теплоємність на 1 взаємодіючий спін, але не змінює положення максимуму теплоємності (теплоємність на один зв'язок $C_\kappa / w_{11} N$ в одновимірній моделі не змінюється внаслідок розведення). Корелятор $m_{11}^{(2)}(\mathbf{q})$ має максимум при $\mathbf{q} = 0$ тим гострішим, чим нижча температура і чим менше розведення. На T-залежності $m_{11}^{(2)}(\mathbf{q})$ є максимум для всіх $\pi_{\mathbf{q}} > 0$. Температура, при якій є максимум, зменшується зі зменшенням $\mathbf{q}$ і прямує до нуля при $\mathbf{q} \to 0$. У чистій системі $m_{11}^{(2)}(\vec{0}) \xrightarrow{T \to 0} \infty$, $\tau(\pi_{\vec{0}}) \xrightarrow{T \to 0} \infty$, тоді $m_{11}^{(2)}(\mathbf{q} \neq 0) \xrightarrow{T \to 0} 0$, що і дає привід говорити про фазовий перехід другого роду при нульовій температурі. Час релаксації $\tau(\pi_{\mathbf{q}}) \xrightarrow{T \to 0} \frac{\tau_1^0 z}{z - \pi_{\mathbf{q}}}$. У розведеній системі НДК передбачає три часи релаксації (в центрі і вершинах зони Бріллюена — два), при цьому синґулярність $m_{11}^{(2)}(\mathbf{q}, 0)$ зникає, однак з'являється сповільнення $\tau_+ \xrightarrow{T \to 0} \infty$ при всіх $\mathbf{q}$.

Перед обговоренням вищих розмірностей ґратки, де результати НДК не є точними, слід зробити таке зауваження. Великі флуктуації в системі погіршують результати "ефективно–польових" теорій (як НДК або НМП). Тому в даній моделі велика відмінність у взаємодіях $K_{\alpha\beta}$ (як у випадку розведеної системи)

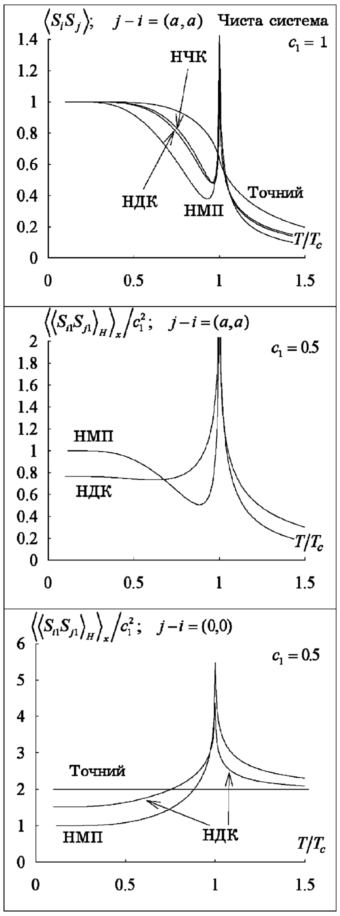


Рис. 10. Парна функція розподілу $\left\langle \langle S_{i1} S_{j1} \rangle_H \right\rangle_x$ чистої і розведеної систем на плоскій квадратній ґратці. Порівняння результатів теорії молекулярного поля (ТМП), наближень дво– і чотиричастинкового кластера і точних (де вони відомі).

повинна погіршувати якість результатів НДК, водночас великі z, коли взаємодія $K_{i\alpha, j\beta}$ зачеплює багато вузлів, поліпшують ці результати. Враховуючи, що НДК дає точні результати для ланцюжка ($z = 2$), розведена система на плоскій квадратній ґратці ($z = 4$) повинна бути найважчим тестом для НДК, який може виявити всі недоліки наближення. Тому нижче ми особливо детально розглянемо цю систему, яка є зручною ще й тим, що для неї є точні результати (односортна система в нульовому полі).

На рис. 4–6 показано температурну і концентраційну залежність параметра впорядкування, теплоємності і сприйнятливості системи на квадратній ґратці. З рис. 4 видно, що врахування флуктуацій, зроблене в кластерному наближенні, приводить до певного поліпшення (порівняно з НМП) $m_1^{(1)}$ в чистій системі і до якісно нових результатів для розведеної. При розведенні параметр порядку перестає насичуватись: $m_1^{(1)}/c_1 < 1$ при $T = 0$, і при $c_1 < c_p = \frac{1}{z-1}$ перехід у впорядковану фазу не виникає. Сприйнятливість розведеної системи $\chi(\mathbf{q}) \stackrel{T\to 0}{\longrightarrow} \infty$, оскільки парний корелятор (рис. 5) $m_{11}^{(2)}(\mathbf{q})$ не занулюється при $T \to 0$. Ці явища викликані існуванням у системі макроскопічної кількості скінченних кластерів взаємодіючих спінів, відокремлених один від одного незайнятими вузлами (невзаємодіючими спінами). Такі кластери, зрозуміло, не дають внеску в спонтанну поляризацію (намагнетованість). Вони ж приводять до розбіжності сприйнятливості при нульовому полі в точці $T = 0$. Стрибок теплоємності в НДК зменшується при розведенні. Якщо концентрація c_1, нижча від перколяційної c_p, то система веде себе якісно так само, як і розведена одновимірна система. На рис. 6 показано, що парний корелятор $m_{11}^{(2)}(\mathbf{q})$ в НДК сильніше змінюється із зміною $\mathbf{q}$, тобто величина $m_{11}^{(2)}(\mathbf{q})/m_{11}^{(2)}(\mathbf{0})$ в НДК лежить нижче, ніж у НМП. Це справедливо і для чистої, і для розведеної ($c_1 > c_p$) систем. На рис. 7, 8 показано поведінку амплітуд і часів релаксації динамічного структурного фактора чистої і розведеної систем в НДК. При низьких температурах амплітуди $A_+(\pi_\mathbf{0})$, A_0 стають порівнянними за значенням, і це виявляється як на частотній (рис. 9), так і на температурній залежності динамічного структурного фактора $m_{11}^{(2)}(\vec{0},\omega)$.

На рис. 10 показано температурну залежність функцій розподілу $\left\langle\langle S_{i1}S_{j1}\rangle_H\right\rangle_x = m_{i1,j1}^{(2)} + m_{i1}^{(1)}m_{j1}^{(1)}$ чистої і розведеної систем, отриману шляхом Фур'є–перетворення парного корелятора $m_{11}^{(2)}(\mathbf{q})$. Вузли i, j розміщені у вершинах квадрата: $\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i = (a,a)$ (a є періодом ґратки). Видно, що функція розподілу набуває ненормальних значень в околі критичної точки. Крім того, тотожність $\left\langle\langle S_{i1}S_{i1}\rangle_H\right\rangle_x/c_1 = 1$ теж порушується в околі T_c. Видно також, що для чистої системи область нефізичних значень звужується в НДК порівняно з НМП, а в розведеній системі неузгодженість із точними співвідношенями суттєво менша в НДК, ніж в НМП.

У праці [21] в кластерному наближенні було розраховано сприйнятливість ідеальної системи на квадратній ґратці в парафазі. Автори стверджують, що сприйнятливість $\chi(\mathbf{q})$ системи має максимум як функція температури при всіх фіксованих q, більших від $q_0 \approx 0.15a^{-1}$. Це твердження є не зовсім точним — на основі (4.11) можна показати, що на сприйнятливості максимуму немає. Натомість корелятор $m_{11}^{(2)}(\mathbf{q})$ чистої і розведеної систем постійно збільшується з температурою при $\pi_\mathbf{q} \in [-z;0]$, постійно зменшується при $T > T_c$, якщо $\pi_\mathbf{q} \in [\frac{2zz'}{z'^2+1};z]$ і має максимум на T-залежності $m_{11}^{(2)}(\mathbf{q})$ для всіх $\pi_\mathbf{q} \in [0;\frac{2zz'}{z'^2+1}]$. Слід зауважити, що високотемпературні розвинення і ренормгрупові методи для чистої системи передбачають наявність такого максимуму [21]. Водночас НМП не відтворює цієї особливості ні для чистої, ні для невпорядкованої систем.

ПОДЯКИ

Робота виконана при частковій фінансовій підтримці Об'єднаного Фонду уряду України та Міжнародного Наукового Фонду (ґрант № K6A100).

[1] W. Y. Ching, D. L. Huber, Phys. Rev. B **13**, 2962 (1976).
[2] E. Stoll, T. Schneider, J. Phys. A **9**, 67 (1976).
[3] H.-O. Heuer, Phys. Rev. B **42**, 6476 (1990).
[4] Б. Я. Балагуров, В. Г. Вакс, Р. О. Зайцев, Физ. твер. тела **16**, 2302 (1974).
[5] T. Kaneyoshi, I. Tamura, R. Honmura, Phys. Rev. B **29**, 2769 (1984).
[6] H. Mano, Progr. Theor. Phys. **57**, 1848 (1977).
[7] H. Sato, A. Arrott, J. Phys. Chem. Sol. **10**, 19 (1959).
[8] В. Г. Вакс, Н. Е. Зейн, ЖЭТФ **67**, 1082 (1974).
[9] R. J. Glauber, J. Math. Phys. **4**, 294 (1963).
[10] M. Suzuki, R. Kubo, J. Phys. Soc. Jap. **24**, 51 (1968).
[11] G. O. Berim, A. R. Kessel, Physica A **102**, 112 (1980).
[12] G. O. Berim, A. R. Kessel, Physica A **102**, 127 (1980).
[13] Р. Р. Левицкий, И. Р. Зачек, М. В. Токарчук, Препринт Ин-та физики конд. сист. АН УССР, № ИФКС-91-65Р, Львов, 1991.
[14] H. J. Hilhorst, M. Suzuki, B. U. Felderhof, Physica **60**, 199 (1972).
[15] D. F. Calef, J. Stat. Phys. **32**, 81 (1983).
[16] S. Zumer, Phys. Rev. B **21**, 238 (1980).
[17] E. Kanda, A. Tamaki, T. Fujimura, J. Phys. C **21**, 3401 (1982).
[18] R. R. Levitskii, J. Grigas, I. R. Zachek, Ye. V. Mits, W. Paprotny, Ferroelectrics **67**, 109 (1986).
[19] И. Григас, И. Р. Зачек, П. Зайцева, Р. Р. Левицкий, Р. Мизерис, Е. В. Миц, Лит. физ. сб. **28**, 486 (1988).
[20] J. V. Jose, M. Mehl, J. B. Sokoloff, Phys. Rev. B **27**, 334 (1982).
[21] S. Havlin, H. Sompolinsky, Phys. Rev. B **25**, 5828 (1982).
[22] Р. Р. Левицький, С. І. Сороков, Р. О. Соколовський, препринт ІФКС-93-17У (Львів, 1993).
[23] И. Р. Юхновский, Р. Р. Левицкий, С. И. Сороков, Препринт Ин-та теор. физики АН УССР, № ИТФ-86-142Р, Киев, 1986.
[24] R. Kubo, J. Phys. Soc. Jap. **17**, 1100 (1962).
[25] R. R. Levitskii, S. I. Sorokov, Cond. Matt. Phys. (Lviv) **4**, 79 (1994).

ISING MODEL WITH QUENCHED DISORDER IN TWO–SITE CLUSTER APPROXIMATION

R. R. Levitskii, S. I. Sorokov, R. O. Sokolovskii
Institute for Condensed Matter Physics, 1 Svientsitskii Str., Lviv UA–290011, Ukraine
phone: 42-74-39, E-mail: ccc@icmp.lviv.ua

Thermodynamics and Glauberian kinetics of the quenched alloy of Ising magnets are considered. Within the two–site cluster approximation **q**-dependent correlation functions and dynamic structure factor of the model are obtained and investigated. The approach yields accurate results for the 1D lattice. Peculiarities and inconsistencies of the approximation in the higher dimensions are considered in detail.