ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 4, № 4 (2000) с. 454–463

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 4, No 4 (2000) p. 454–463

ТЕРМОДИНАМІКА МОДЕЛІ ІЗИНҐА В ПОПЕРЕЧНОМУ ПОЛІ В КЛАСТЕРНОМУ НАБЛИЖЕННІ

Р. Р. Левицький, О. Р. Баран
Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України
вул. Свєнціцького, 1, Львів, 79011, Україна

(Отримано 21 липня 2000 р.)

У наближенні двочастинкового кластера з двома та одним варіяційними параметрами за короткосяжними взаємодіями при врахуванні далекосяжних взаємодій у наближенні молекулярного поля досліджено термодинамічні характеристики спін–$\frac{1}{2}$ моделі Ізинґа в поперечному полі з парними короткосяжними та далекосяжними взаємодіями.

При різних значеннях величини поперечного поля та далекосяжної взаємодії побудовано фазові діяграми й отримано температурні залежності параметра порядку та поздовжньої статичної сприйнятливості. Показано, що кластерне наближення з двома варіяційними параметрами дає некоректні результати в низькотемпературній ділянці, а кластерне наближення з одним варіяційним параметром є незастосовним для одновимірних ґраток.

Ключові слова: модель Ізинґа в поперечному полі, фазові переходи, кластерне наближення.

PACS number: 75.10.Jm, 77.80.Bh

I. ВСТУП

У сучасній статистичній теорії конденсованих систем велику увагу приділяють дослідженню сеґнетоактивних та магнетних матеріялів, які описуються псевдоспіновими моделями із суттєвими короткосяжними та далекосяжними взаємодіями. Серед них особливо слід виділити сеґнетоактивні матеріяли з водневими зв'язками [1–4] та низьковимірні магнетики [5,6]. Для цього типу речовин характерними є суттєві низьковимірні короткосяжні кореляції поряд із тривимірними далекосяжними взаємодіями. Для адекватного опису таких об'єктів необхідний теоретичний підхід, який би дозволив використовувати різні математичні методи при врахуванні короткосяжних і далекосяжних взаємодій. Така проблема типова для статистичної теорії багаточастинкових систем. Її успішно розв'язували при вивченні рівноважних властивостей класичних систем [7–13] і металів [14–18] на основі підходу, запропонованого в працях [7–9,11–14]. Далекосяжні взаємодії в цьому підході описуються у фазовому просторі колективних змінних, а короткосяжні — у фазовому просторі індивідуальних координат. При цьому систему з короткосяжними взаємодіями називають базисною системою відліку (БСВ) [7–9,11].

Дуже актуальною проблемою було створення відповідного методу і для псевдоспінових систем. Для розв'язання цієї задачі в працях [19–23] було запропоновано підхід, у рамках якого створена узгоджена методика розрахунку термодинамічних та динамічних характеристик псевдоспінових систем із суттєвими короткосяжними й далекосяжними взаємодіями між псевдоспінами, що ґрунтується на базисному врахуванні короткосяжних кореляцій. БСВ у цьому підході включає короткосяжні кореляції і середнє поле за далекосяжними взаємодіями. Слід відзначити, що отримані в працях [19,20,23] загальні вирази для термодинамічних характеристик псевдоспінових систем, які досліджуються, містять термодинамічні та кореляційні функції БСВ.

Досить успішний опис псевдоспінових БСВ може бути досягнутим у кластерному підході [1–4,24–32]. У низці праць (див., наприклад, [33–37]) він успішно використовувався для дослідження невпорядкованих магнетних і сеґнетоактивних матеріялів. Однак, на жаль, кластерний підхід був розвинений коректно лише для гамільтоніянів, у яких комутують частина, що описує взаємодію псевдоспінів із зовнішніми та внутрішніми полями, з частиною, що описує обмінну взаємодію псевдоспінів. При цьому він успішно використовувався лише для дослідження термодинамічних характеристик псевдоспінових систем. У зв'язку з цим дуже важливою проблемою було узагальнення розвиненого в працях [1–4,24–37] кластерного підходу для розрахунку $\mathbf{q}$–залежних кореляційних функцій та динамічних характеристик псевдоспінових БСВ. У працях [38,39] уперше було запропоновано метод, який дозволяє в рамках кластерного наближення для кореляційних функцій ізинґівських БСВ довільного порядку отримати рівняння типу рівнянь Орнштайна–Церніке. Одержано в наближенні двочастинкового кластера (НДК) в $\mathbf{q}$–просторі парні та тернарні кореляційні функції для спін–$\frac{1}{2}$ моделі Ізинґа і в наближенні чотиричастинкового кластера залежну від квазіімпульсу парну кореляційну функцію сеґнетоелектрика типу KD_2PO_4. Показано [38,39], що в НДК запропонований метод дає для одновимірної моделі Ізинґа відомі точні результати для кореляційних функцій. Запропонована в [38,39] методика в працях [40–42] була узагальнена для розрахунку $\mathbf{q}$–залежних парних кореляційних функцій ізинґівських моделей із довільним значенням спіну. У працях [43–50] уперше запропоновано кластерний підхід для розрахунку термодинамічних і динамічних характеристик та кореляційних функцій невпорядкованих ізинґівських моделей для рівноважного й нерівноважного безладів.

У працях [51,52] для базисних квантових псевдоспінових систем послідовно сформульований метод кластерних розвинень. Уперше запропоновано метод, який дозволяє в рамках кластерного наближення отримувати для температурних кумулянтних функцій Ґріна довільного порядку рівняння типу рівнянь Орнштайна–Церніке. У НДК у явному вигляді отримано вираз для парної кумулянтної функції Ґріна БСВ. Для квантових псевдоспінових систем із короткосяжними й далекосяжними взаємодіями досить ефективним є кластерне наближення хаотичних фаз [51,52], у якому базисна задача розв'язується в кластерному наближенні, а вплив далекосяжних взаємодій ураховується в наближенні хаотичних фаз.

Метою нашої роботи є дослідження меж застосування НДК з двома та одним варіяційними параметрами при врахуванні далекосяжних взаємодій у наближенні молекулярного поля (НМП) для моделі Ізинґа в поперечному полі (МІПП). Тут будуть розраховані лише термодинамічні характеристики моделі, а дослідження динамічних властивостей (в ділянках, де НДК дає коректні результати для термодинамічних характеристик) ми проведемо в наступній роботі. Крім того, результати отримані в цій праці, застосовуватимуться для дослідження низки характеристик МІПП з мікропараметрами, які відповідають квазіодновимірному сеґнетоелектрикові CsH_2PO_4.

II. НАБЛИЖЕННЯ ДВОЧАСТИНКОВОГО КЛАСТЕРА ПРИ ВРАХУВАННІ ДАЛЕКОСЯЖНИХ ВЗАЄМОДІЙ У НАБЛИЖЕННІ МОЛЕКУЛЯРНОГО ПОЛЯ

A. Вільна енерґія

Розглядатимемо модель Ізинґа в поперечному полі з перенормованим оператором псевдоспіну $S^z = (-1,1)$.

$$H = -\sum_{i=1}^{N}\Big[hS_i^z + \Gamma S_i^x\Big] \tag{2.1}$$

$$- \tfrac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\delta=1}^{z} K S_i^z S_{i+\delta}^z - \tfrac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} J_{ij} S_i^z S_j^z .$$

Тут K — короткосяжна, J_{ij} — далекосяжна парні взаємодії, Γ — поперечне поле, z — число найближчих сусідів, а $h \to 0$ введене для зручності.

У рамках наближення молекулярного поля за далекосяжними взаємодіями гамільтоніян (2.1) запишемо у вигляді:

$$H = {}^kH + \tfrac{1}{2}NJ_0 m^2, \tag{2.2}$$

причому

$$J_0 = \sum_{j=1}^{N} J_{ij}\ ; \qquad m = \langle S^z\rangle\ , \tag{2.3}$$

а ${}^kH$ — гамільтоніян базисної системи:

$${}^kH = -\sum_{i=1}^{N}\Big[\text{æ}^z S_i^z + \text{æ}^x S_i^x\Big] - \tfrac{1}{2}\sum_{i,\delta} K S_i^z S_{i+\delta}^z ; \tag{2.4}$$

$$\text{æ}^z = h + J_0 m\ ; \qquad \text{æ}^x = \Gamma. \tag{2.5}$$

Для вільної енерґії на один вузол в НМП за далекосяжними взаємодіями на основі (2.2) отримаємо:

$$f(h,\Gamma) = \tfrac{-k_{\mathrm{B}}T}{N}\ln \mathrm{Sp}_{\{\boldsymbol{S}\}} \mathrm{e}^{-\beta H} \tag{2.6}$$

$$= {}^kf(\text{æ}^z,\text{æ}^x) + \tfrac{1}{2}J_0 m^2,$$

де ${}^kf(\text{æ}^z,\text{æ}^x)$ вільна енерґія на один вузол базисної системи (2.4).

Проведемо тепер кластерне розвинення для базисної системи (2.4) при розбитті ґратки на двочастинкові кластери [32]. Позначимо через $\varphi^z S_i^z + \varphi^x S_i^x$ оператор ефективного поля, яке діє на вузол i з боку вузла, що належить до найближчого оточення i. Очевидно, що на довільний вузол i діє z полів.

Здійснимо тотожне перетворення базисного гамільтоніяна (2.4):

$${}^kH = \sum_{1} H_1 + \sum_{(1,2)} U_{12}, \tag{2.7}$$

причому

$$H_1 = -[\tilde{\text{æ}}^z S_1^z + \tilde{\text{æ}}^x S_1^x]\ ; \tag{2.8}$$

$$\tilde{\text{æ}}^a = \text{æ}^a + z\varphi^a\ , \qquad (a = x, z)\ ;$$

$$U_{12} = -K S_1^z S_2^z + \varphi^z(S_1^z + S_2^z) + \varphi^x(S_1^x + S_2^x)]. \tag{2.9}$$

Для вільної енерґії (на один вузол) базисної системи будемо мати:

$${}^kf(\text{æ}^z,\text{æ}^x,\varphi^z,\varphi^x) = \tfrac{-k_{\mathrm{B}}T}{N}\ln \mathrm{Sp}_{\{\boldsymbol{S}\}} \mathrm{e}^{-\beta\, {}^kH} \tag{2.10}$$

$$= \tfrac{-k_{\mathrm{B}}T}{N}\ln \mathrm{Sp}_{\{\boldsymbol{S}\}} \exp\Big[-\beta\Big(\sum_{1} H_1 + \sum_{(1,2)} U_{12}\Big)\Big]\ .$$

Проведемо розплутування операторів за допомогою T_τ–експоненти. Перепишемо (2.10) у вигляді:

$$
\begin{aligned}
{}^{k}f(æ^z, æ^x, \varphi^z, \varphi^x) &= \tfrac{-k_{\rm B}T}{N} \ln \mathrm{Sp}_{\{\boldsymbol{S}\}} \Big\{ \mathrm{e}^{-\beta H_0}\ \mathrm{T}_\tau \exp\Big[-\sum_{(1,2)} \int_0^\beta d\tau U_{12}(\tau) \Big] \Big\} \\
&= f_1(\tilde{æ}^z, \tilde{æ}^x) - \tfrac{k_{\rm B}T}{N} \ln \langle\, \mathrm{T}_\tau \prod_{(1,2)} \exp\Big[-\int_0^\beta d\tau U_{12}(\tau) \Big] \rangle_{\rho_0}, \qquad (2.11)
\end{aligned}
$$

причому

$$
U_{12}(\tau) = \mathrm{e}^{\tau H_0}\ U_{12}\ \mathrm{e}^{-\tau H_0}\ ; \qquad H_0 = \sum_1 H_1\ ; \qquad (2.12)
$$

$$
\langle A \rangle_{\rho_0} = \mathrm{Sp}_{\{\boldsymbol{S}\}} \Big[\rho_0(\{\boldsymbol{S}\}) \cdot A \Big]\ ; \qquad (2.13)
$$

$$
\rho_0(\{\boldsymbol{S}\}) = \prod_1 \rho_1(\boldsymbol{S}_1) = \prod_1 \frac{\exp(-\beta H_1)}{Z_1}\ ,
$$

а f_1 — так звана одночастинкова внутрішньокластерна вільна енерґія.

$$
f_1(\tilde{æ}^z, \tilde{æ}^x) = -k_{\rm B}T \ln Z_1(\tilde{æ}^z, \tilde{æ}^x)\ ; \qquad (2.14)
$$

$$
Z_1(\tilde{æ}^z, \tilde{æ}^x) = \mathrm{Sp}_{\boldsymbol{S}_1} \mathrm{e}^{-\beta H_1}.
$$

Обмежимося першим порядком кластерного розвинення [32], що відповідає наближенню двочастинкового кластера. У цьому наближенні вільна енерґія (2.11) матиме вигляд:

$$
\begin{aligned}
&{}^{k}f(æ^z, æ^x, \varphi^z, \varphi^x) \qquad (2.15) \\
&= f_1(\tilde{æ}^z, \tilde{æ}^x) - \tfrac{k_{\rm B}T}{N} \sum_{(1,2)} \ln \langle\, \mathrm{T}_\tau \exp\Big[-\int_0^\beta d\tau U_{12}(\tau) \Big] \rangle_{\rho_0}.
\end{aligned}
$$

Ураховуючи (див. (2.12)), що

$$
U_{12}(\tau) = \mathrm{e}^{\tau(H_1+H_2)}\ U_{12}\ \mathrm{e}^{-\tau(H_1+H_2)}\ , \qquad (2.16)
$$

отримаємо вільну енерґію на одну частинку базисної МІПП:

$$
\begin{aligned}
&{}^{k}f(æ^z, æ^x, \varphi^z, \varphi^x) \qquad (2.17) \\
&= (1-z) f_1(\tilde{æ}^z, \tilde{æ}^x) + \tfrac{z}{2} f_{12}(\tilde{\tilde{æ}}^z, \tilde{\tilde{æ}}^x)\ .
\end{aligned}
$$

Тут f_{12} — так звана двочастинкова внутрішньокластерна вільна енерґія:

$$
f_{12}(\tilde{\tilde{æ}}^z, \tilde{\tilde{æ}}^x) = -k_{\rm B}T \ln Z_{12}(\tilde{\tilde{æ}}^z, \tilde{\tilde{æ}}^x), \qquad (2.18)
$$

$$
Z_{12}(\tilde{\tilde{æ}}^z, \tilde{\tilde{æ}}^x) = \mathrm{Sp}_{\boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{S}_2} \mathrm{e}^{-\beta H_{12}}\ ;
$$

$$
\begin{aligned}
H_{12} &= H_1 + H_2 + U_{12} \qquad (2.19) \\
&= -\tilde{\tilde{æ}}^z (S_1^z + S_2^z) - \tilde{\tilde{æ}}^x (S_1^x + S_2^x) - K S_1^z S_2^z];
\end{aligned}
$$

$$
\tilde{\tilde{æ}}^a = æ^a + (z-1)\varphi^a, \qquad (2.20)
$$

$$
(a = z, x).
$$

Тобто в НДК вільна енерґія базисної системи виражається через одночастинкову та двочастинкову внутрішньокластерні вільні енерґії. Зупинимося коротко на їх отриманні.

Гамільтоніян H_1 діє на базисі двох функцій стану однієї частинки

$$
\begin{array}{cc} 1 & + \\ 2 & - \end{array} \qquad (2.21)
$$

У представленні (2.21) гамільтоніян H_1 має вигляд:

$$
H_1 = -\begin{pmatrix} \tilde{æ}^z & \tilde{æ}^x \\ \tilde{æ}^x & -\tilde{æ}^z \end{pmatrix}. \qquad (2.22)
$$

На основі (2.14) та (2.22) легко отримати одночастинкову внутрішньокластерну статсуму в явному вигляді:

$$
Z_1(\tilde{æ}^z, \tilde{æ}^x) = 2\mathrm{ch}(\beta\Lambda)\ ; \qquad (2.23)
$$

$$
\Lambda = \sqrt{(\tilde{æ}^z)^2 + (\tilde{æ}^x)^2}\ .
$$

Гамільтоніян H_{12} діє на базисі чотирьох функцій стану двочастинкового кластера

$$
\begin{array}{ccc} 1 & + & + \\ 2 & + & - \\ 3 & - & + \\ 4 & - & -. \end{array} \qquad (2.24)
$$

У представленні (2.24) гамільтоніян H_{12} має вигляд:

$$H_{12} = -\begin{pmatrix} 2\tilde{\tilde{æ}}^z + K & \tilde{\tilde{æ}}^x & \tilde{\tilde{æ}}^x & 0 \\ \tilde{\tilde{æ}}^x & -K & 0 & \tilde{\tilde{æ}}^x \\ \tilde{\tilde{æ}}^x & 0 & -K & \tilde{\tilde{æ}}^x \\ 0 & \tilde{\tilde{æ}}^x & \tilde{\tilde{æ}}^x & -2\tilde{\tilde{æ}}^z + K \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

На основі (2.18) та (2.25) отримаємо для двочастинкової внутрішньокластерної статсуми:

$$Z_{12}(\tilde{\tilde{æ}}^z, \tilde{\tilde{æ}}^x) = \sum_{\alpha=1}^{4} \mathrm{e}^{-\beta E_\alpha} , \quad (2.26)$$

де

$$E_4 = K , \quad (2.27)$$

а три інші власні значення $E_{1,2,3}$ матриці (2.25) є коренями кубічного рівняння:

$$E^3 + KE^2 - \Big[K^2 + 4\big(\tilde{\tilde{æ}}^x\big)^2 + 4\big(\tilde{\tilde{æ}}^z\big)^2\Big]E \quad (2.28)$$
$$- K\Big[K^2 + 4\big(\tilde{\tilde{æ}}^x\big)^2 - 4\big(\tilde{\tilde{æ}}^z\big)^2\Big] = 0.$$

B. Система рівнянь для параметра порядку та кластерних полів

Знайдемо тепер рівняння для параметра порядку $m = \langle S^z \rangle$ та для кластерних полів φ^a $(a = z, x)$. Будемо виходити із співвідношень:

$$m = \langle S^z \rangle = -\frac{d\, f(h, \Gamma)}{d\, h} \; ; \quad (2.29)$$

$$^k\langle S^z \rangle = -\frac{d\, ^k f(æ^z, æ^x, \varphi^z, \varphi^x)}{d\, æ^z} \; . \quad (2.30)$$

Легко переконатись (див. (2.6)), що коли далекосяжні взаємодії враховуються в НМП, має місце співвідношення:

$$m = {^k}\langle S^z \rangle \; . \quad (2.31)$$

Слід зауважити, що остання рівність виконується незалежно від того, у якому наближенні розглядається базисна задача.

На основі умови екстремуму вільної енерґії за φ^a

$$\frac{\partial\, ^k f}{\partial\, \varphi^a} = 0 \quad (2.32)$$

та співвідношень (2.31), (2.30) з урахуванням (2.32)

$$m = -\frac{\partial\, ^k f}{\partial\, æ^z} \; , \quad (2.33)$$

(ми тут наводимо співвідношення (2.33), оскільки воно буде корисне при одержанні поздовжньої сприйнятливости) отримаємо систему рівнянь для варіяційних параметрів та для параметра порядку:

$$\frac{\tilde{æ}^x}{\Lambda}\mathrm{th}(\beta\Lambda) \quad (2.34)$$
$$= \frac{4\tilde{\tilde{æ}}^x}{Z_{12}} \sum_{\alpha=1}^{3} \frac{(-E_\alpha - K)\mathrm{e}^{-\beta E_\alpha}}{3E_\alpha^2 + 2KE_\alpha - [K^2 + 4(\tilde{\tilde{æ}}^x)^2 + 4(\tilde{\tilde{æ}}^z)^2]};$$

$$\frac{\tilde{æ}^z}{\Lambda}\mathrm{th}(\beta\Lambda) \quad (2.35)$$
$$= \frac{4\tilde{\tilde{æ}}^z}{Z_{12}} \sum_{\alpha=1}^{3} \frac{(-E_\alpha + K)\mathrm{e}^{-\beta E_\alpha}}{3E_\alpha^2 + 2KE_\alpha - [K^2 + 4(\tilde{\tilde{æ}}^x)^2 + 4(\tilde{\tilde{æ}}^z)^2]};$$

$$m = \frac{\tilde{æ}^z}{\Lambda}\mathrm{th}(\beta\Lambda) \; . \quad (2.36)$$

Зауважимо, що коли далекосяжна взаємодія відсутня ($J_0 = 0$), ми маємо систему двох рівнянь (2.34) та (2.35) для φ^x та φ^z у неявному вигляді (E_α – корені кубічного рівняння (2.28)) і вираз (2.36) для m. Коли ж $J_0 \neq 0$, ми маємо систему трьох рівнянь (2.34) – (2.36) для φ^x, φ^z та m.

Подібно, як і рівняння для m (2.36), можна отримати вираз для параметра $\langle S^x \rangle$:

$$\langle S^x \rangle = \frac{\tilde{æ}^x}{\Lambda}\mathrm{th}(\beta\Lambda) \; . \quad (2.37)$$

Слід зауважити, що на основі виразу для $\langle S^x \rangle$ та рівняння для m можна записати варіяційні параметри φ^x і φ^z через $\langle S^x \rangle$ і m

$$\varphi^a = \frac{1}{z}\Big[\frac{k_\mathrm{B}T}{2}\frac{\langle S^a \rangle}{M}\ln\Big(\frac{1+M}{1-M}\Big) - æ^a\Big], \quad a = x, z \quad (2.38)$$

$$M = \sqrt{(\langle S^x \rangle)^2 + m^2},$$

що дозволяє звести систему трьох рівнянь (2.34) - (2.36) до системи двох рівнянь для $\langle S^x \rangle$ та m.

C. Статична сприйнятливість

Беручи до уваги, що $m = \langle S^z \rangle = {^k}\langle S^z \rangle$, та (2.5), для поздовжньої статичної сприйнятливости МІПП при врахуванні далекосяжних взаємодій у НМП будемо мати:

$$\chi^{zz} = \frac{dm}{dh} = \frac{^k\chi^{zz}}{1 - J_0\, {^k}\chi^{zz}} \; , \quad (2.39)$$

де

$$ {}^k\chi^{zz} = \frac{dm}{d\text{æ}^z} = -\frac{d}{d\,\text{æ}^z}\Big(\frac{d^kf}{d\text{æ}^z}\Big) = -\frac{d}{d\,\text{æ}^z}\Big(\frac{\partial\,{}^kf}{\partial\,\text{æ}^z}\Big) \qquad (2.40) $$

— поздовжня статична сприйнятливість базисної системи. Використовуючи вигляд ${}^kf$–функції (2.17) та беручи до уваги (2.23), (2.26)–(2.28), легко отримати її в явному вигляді (результат НДК):

$$ {}^k\chi^{zz} = -\Big[f^{(|2|2)} + f^{(|2|4)}\frac{d\varphi^z}{d\text{æ}^z} + f^{(|2|3)}\frac{d\varphi^x}{d\text{æ}^z}\Big]\,; \qquad (2.41) $$

$$ \frac{d\varphi^z}{d\text{æ}^z} = \frac{f^{(|2|3)}f^{(|3|4)} - f^{(|2|4)}f^{(|3|3)}}{f^{(|4|4)}f^{(|3|3)} - (f^{(|3|4)})^2}; \qquad (2.42) $$

$$ \frac{d\varphi^x}{d\text{æ}^z} = -\frac{f^{(|2|4)} + f^{(|4|4)}\frac{d\varphi^z}{d\text{æ}^z}}{f^{(|3|4)}}. $$

Тут використані позначення:

$$ f^{(|n|m)} = \frac{\partial^2\,{}^kf}{\partial\,\mathrm{x}^{(n)}\,\partial\,\mathrm{x}^{(m)}} = (1-z)f_1^{(|n|m)} + \frac{z}{2}f_{12}^{(|n|m)}; \qquad \mathrm{x}^{(1)} = \text{æ}^x\,; \quad \mathrm{x}^{(2)} = \text{æ}^z\,; \quad \mathrm{x}^{(3)} = \varphi^x\,; \quad \mathrm{x}^{(4)} = \varphi^z\,; \qquad (2.43) $$

$$ f_1^{(|n|m)} = \frac{\partial^2\,f_1}{\partial\,\mathrm{x}^{(n)}\,\partial\,\mathrm{x}^{(m)}} = \bar{\mathrm{z}}^{(n)}\bar{\mathrm{z}}^{(m)}\Big[\frac{\bar{\mathrm{x}}^{(n)}\bar{\mathrm{x}}^{(m)}}{\Lambda^3}\Big(\mathrm{th}(\beta\Lambda) - \frac{\beta\Lambda}{\mathrm{ch}^2(\beta\Lambda)}\Big) - \frac{\mathrm{th}(\beta\Lambda)}{\Lambda}\Theta^{(n,m)}\Big]; \qquad (2.44) $$

$$ \bar{\mathrm{z}}^{(1)} = \bar{\mathrm{z}}^{(2)} = 1\,; \qquad \bar{\mathrm{z}}^{(3)} = \bar{\mathrm{z}}^{(4)} = z\,; \qquad \bar{\mathrm{x}}^{(1)} = \bar{\mathrm{x}}^{(3)} = \tilde{\text{æ}}^x\,; \qquad \bar{\mathrm{x}}^{(2)} = \bar{\mathrm{x}}^{(4)} = \tilde{\text{æ}}^z\,; $$

$$ f_{12}^{(|n|m)} = \frac{\partial^2\,f_{12}}{\partial\,\mathrm{x}^{(n)}\,\partial\,\mathrm{x}^{(m)}} = \frac{\beta}{(Z_{12})^2}\Big[\sum_{\alpha=1}^{3}\mathrm{e}^{-\beta E_\alpha}E_\alpha^{(|n)}\Big]\Big[\sum_{\alpha=1}^{3}\mathrm{e}^{-\beta E_\alpha}E_\alpha^{(|m)}\Big] + \frac{1}{Z_{12}}\sum_{\alpha=1}^{3}\mathrm{e}^{-\beta E_\alpha}\Big[E_\alpha^{(|n|m)} - \beta E_\alpha^{(|n)}E_\alpha^{(|m)}\Big]; \qquad (2.45) $$

$$ E_\alpha^{(|n)} = \frac{\partial\,E_\alpha}{\partial\,\mathrm{x}^{(n)}} = \frac{8\bar{\bar{\mathrm{z}}}^{(n)}}{A_\alpha}\bar{\bar{\mathrm{x}}}^{(n)}\mathcal{E}_\alpha^{(n)}; $$

$$ E_\alpha^{(|n|m)} = \frac{\partial^2\,E_\alpha}{\partial\,\mathrm{x}^{(n)}\,\partial\,\mathrm{x}^{(m)}} = \frac{8\bar{\bar{\mathrm{z}}}^{(n)}\bar{\bar{\mathrm{z}}}^{(m)}\mathcal{E}_\alpha^{(n)}}{A_\alpha}\Theta^{(n,m)} + \frac{64\bar{\bar{\mathrm{z}}}^{(n)}\bar{\bar{\mathrm{z}}}^{(m)}\bar{\bar{\mathrm{x}}}^{(n)}\bar{\bar{\mathrm{x}}}^{(m)}}{A_\alpha^2}\Big[\mathcal{E}_\alpha^{(n)} + \mathcal{E}_\alpha^{(m)} - \mathcal{E}_\alpha^{(n)}\mathcal{E}_\alpha^{(m)}\frac{6E_\alpha + 2K}{A_\alpha}\Big]; $$

$$ A_\alpha = 3E_\alpha^2 + 2KE_\alpha - [K^2 + 4(\tilde{\tilde{\text{æ}}}^x)^2 + 4(\tilde{\tilde{\text{æ}}}^z)^2]; \qquad \mathcal{E}_\alpha^{(1)} = \mathcal{E}_\alpha^{(3)} = E_\alpha + K\,; \qquad \mathcal{E}_\alpha^{(2)} = \mathcal{E}_\alpha^{(4)} = E_\alpha - K\,; $$

$$ \bar{\bar{\mathrm{z}}}^{(1)} = \bar{\bar{\mathrm{z}}}^{(2)} = 1\,; \qquad \bar{\bar{\mathrm{z}}}^{(3)} = \bar{\bar{\mathrm{z}}}^{(4)} = z-1\,; \qquad \bar{\bar{\mathrm{x}}}^{(1)} = \bar{\bar{\mathrm{x}}}^{(3)} = \tilde{\tilde{\text{æ}}}^x\,; \qquad \bar{\bar{\mathrm{x}}}^{(2)} = \bar{\bar{\mathrm{x}}}^{(4)} = \tilde{\tilde{\text{æ}}}^z\,; $$

$$ \Theta^{(n,m)} = \begin{cases} 0 & \text{коли } (n+m) \ - \ \text{непарне}, \\ 1 & \text{коли } (n+m) \ - \ \text{парне}. \end{cases} $$

Зауважимо, що коли $\Gamma = 0$ ($\varphi^x = 0$), цей результат узгоджується з результатом, отриманим в НДК за короткосяжними взаємодіями при врахуванні далекосяжних взаємодій в НМП для статичної сприйнятливости моделі Ізинґа [32], а у випадку парафази ($h = 0$, $m = \varphi^z = 0$) – з результатом для статичної поздовжньої сприйнятливості МІПП в аналогічному наближенні [52], який ми наведемо трохи пізніше.

D. Термодинамічні характеристики парафази

Зупинимося тепер коротко на парафазі (при $h = 0$), тобто коли $\text{æ}^z = \tilde{\text{æ}}^z = \tilde{\tilde{\text{æ}}}^z = \varphi^z = m = 0$. Власні значення E_α двочастинкового гамільтоніяна (2.25) є такими (див. (2.28)):

$$ E_1 = -L\,; \quad E_2 = L\,; \quad E_3 = -K\,; \quad E_4 = K\,. \qquad (2.46) $$

Тут використане позначення:

$$ L = \sqrt{K^2 + 4(\tilde{\tilde{\text{æ}}}^x)^2}\,. \qquad (2.47) $$

На основі (2.46) отримаємо двочастинкову статсуму, а отже, і вільну енергію МІПП в НДК за короткосяжними та НМП за далекосяжними взаємодіями для парафази в явному вигляді:

$$f(h=0,\Gamma) \tag{2.48}$$
$$= -k_{\rm B}T\Big[(1-z)\ln Z_1(\tilde{æ}^x) + \tfrac{z}{2}\ln Z_{12}(\tilde{\tilde{æ}}^x)\Big]\ ;$$

$$Z_1(\tilde{æ}^x) = Z_1(æ^x,\varphi^x) = 2{\rm ch}(\beta\tilde{æ}^x);$$

$$Z_{12}(\tilde{\tilde{æ}}^x) = Z_{12}(æ^x,\varphi^x) = 2\Big[{\rm ch}(\beta L) + {\rm ch}(\beta K)\Big].$$

Рівняння (2.35), (2.36) виконуються тотожно, а рівняння (2.34) для варіяційного параметра φ^x можна записати на основі (2.46) (також у явному вигляді):

$$ {\rm th}(\beta\tilde{æ}^x) = \frac{4\tilde{\tilde{æ}}^x}{LZ_{12}}{\rm sh}(\beta L)\ . \tag{2.49}$$

Наведемо також вираз для $\langle S^x\rangle$:

$$\langle S^x\rangle = {\rm th}(\beta\tilde{æ}^x)\ .$$

На основі (2.41) із урахуванням (2.46) та (2.49) отримаємо статичну поздовжню сприйнятливість МІПП для парафази:

$$\chi^{zz} = \Big[\frac{zLZ_{12}}{2R} - (z-1)\frac{\tilde{æ}^x}{{\rm th}(\beta\tilde{æ}^x)} - J_0\Big]^{-1}\ ; \tag{2.50}$$
$$R = \frac{L+K}{L-K}\cdot e^{\beta L} - \frac{L-K}{L+K}\cdot e^{-\beta L} - \frac{4LK}{L^2-K^2}\cdot e^{\beta K}\ .$$

Маючи вільну енерґію (2.48), можна отримати ентропію S та теплоємність C парафази:

$$\tfrac{1}{Nk_{\rm B}}S = \tfrac{z}{2}\ln Z_{12} + (1-z)\ln Z_1 - z\beta\frac{K{\rm sh}(\beta K) + L{\rm sh}(\beta L)}{Z_{12}} - (1-z)\beta\tilde{æ}^x{\rm th}(\beta\tilde{æ}^x)\ ; \tag{2.51}$$

$$\tfrac{1}{Nk_{\rm B}}C = -\frac{2z\big[\beta L{\rm sh}(\beta L) + \beta K{\rm sh}(\beta K)\big]^2}{(Z_{12})^2} - \frac{(z-1)(\beta\tilde{æ}^x)^2}{{\rm ch}^2(\beta\tilde{æ}^x)} + \frac{z\big[(\beta K)^2{\rm ch}(\beta K) + (\beta L)^2{\rm ch}(\beta L)\big]}{Z_{12}} \tag{2.52}$$
$$-(z-1)\left\{\frac{8\beta\tilde{\tilde{æ}}^x}{(Z_{12})^2}\Big[1+{\rm ch}(\beta K){\rm ch}(\beta L) - \frac{K{\rm sh}(\beta L){\rm sh}(\beta K)}{L}\Big] - \frac{\beta\tilde{æ}^x}{{\rm ch}^2(\beta\tilde{æ}^x)}\right\}$$
$$\times\left\{\frac{\beta\tilde{æ}^x}{{\rm ch}^2(\beta\tilde{æ}^x)} - \frac{8\beta\tilde{æ}^x}{(Z_{12})^2}\Big[1+{\rm ch}(\beta L){\rm ch}(\beta K) - \frac{K}{L}\cdot{\rm sh}(\beta K){\rm sh}(\beta L)\Big]\right\}$$
$$\times\left\{\frac{1}{{\rm ch}^2(\beta\tilde{æ}^x)} - \frac{4(z-1)}{z}\Big[\frac{K^2}{\beta L^3}\cdot{\rm sh}(\beta L) + \frac{8(\tilde{\tilde{æ}}^x)^2}{(Z_{12})^2L}\Big(1+{\rm ch}(\beta K){\rm ch}(\beta L)\Big)\Big]\right\}^{-1}\ .$$

E. Наближення двочастинкового кластера з одним варіяційним параметром φ^z

Ми також розглядатимимо НДК при нехтуванні варіяційним параметром φ^x. Зауважимо, що в системах взаємодіючих кластерів [53] таке нехтування відповідним варіяційним параметром дозволило уникнути низькотемпературного фазового переходу (антиточку Кюрі).

Усі результати, які ми отримали раніше в НДК із двома варіяційними параметрами (за винятком (2.34), (2.42) та (2.49)), можна використовувати і в НДК з одним варіяційним параметром, маючи на увазі, що

$$\varphi^x = 0,$$
$$æ^x = \tilde{æ}^x = \tilde{\tilde{æ}}^x = \Gamma,$$
$$\frac{d\varphi^x}{dæ^z} = 0, \qquad \frac{d\varphi^z}{dæ^z} = -\frac{f^{(|2|4)}}{f^{(|4|4)}}.$$

Зокрема, у такому варіянті наближення для φ^z та m маємо систему рівнянь (2.35) та (2.36) (рівняння (2.35) є рівнянням у неявному вигляді, E_α — корені кубічного рівняння (2.28)). А для поздовжньої статичної сприйнятливости базисної системи нам потрібні тільки $f^{(|2|2)}$, $f^{(|2|4)}$, $f^{(|4|4)}$.

III. РЕЗУЛЬТАТИ ЧИСЛОВИХ РОЗРАХУНКІВ

Розгляньмо тепер результати числових розрахунків (при $h=0$ та додатних Γ, K, J_0) термодинамічних характеристик МІПП, отриманих в НДК із двома φ^z, φ^x та одним φ^z варіяційними параметрами при врахуванні далекосяжних взаємодій у НМП. Надалі, для зручности, такий підхід будемо часто називати просто НДК (маючи на увазі, що далекосяжні взаємодії враховуються в НМП). Коли $J_0 = 0$, результати порівнюватимуть з результатами НМП за короткосяжними взаємодіями та іншими наближеними й чисельними методами.

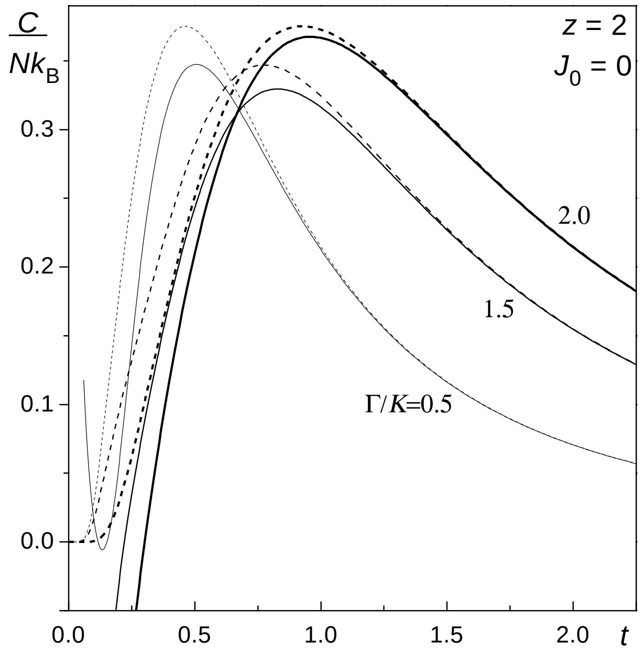

Рис. 1. Температурні залежності теплоємности при $z = 2$, $J_0 = 0$ при різних значеннях величини поперечного поля $\Gamma/K = 0.5,\ 1.5,\ 2.0$. Результати НДК з двома варіяційними параметрами — (суцільна), точні результати — (штрих).

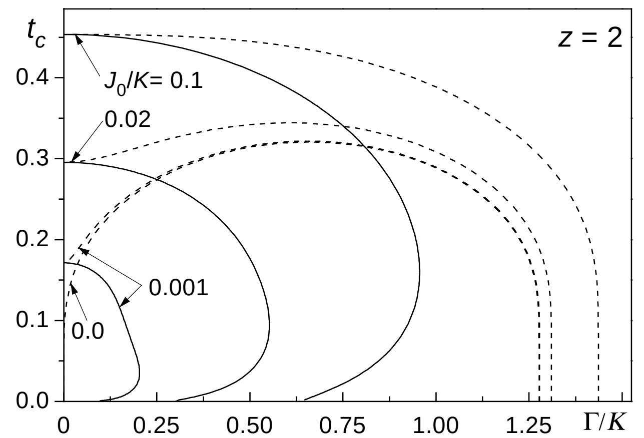

Рис. 2. Фазові діяграми на $(t-\Gamma/K)$ площині отримані в НДК з одним (штрих) та двома (суцільна) варіяційними параметрами при врахуванні далекосяжних взаємодій у НМП для ланцюжка ($z = 2$) при різних значеннях величини далекосяжної взаємодії J_0/K.

Зауважимо, що використовуватимемо відносну температуру $t = k_{\mathrm{B}}T/(zK)$.

Спочатку коротко зупинимося на одновимірній МІПП ($z = 2$) при $J_0 = 0$. Порівняння результатів НДК з двома варіяційними параметрами з точними (для вільної енерґії, ентропії та теплоємности) при різних значеннях Γ/K показало, що це наближення дає задовільні результати для термодинамічних характеристик, крім низькотемпературної ділянки. Так, при високих температурах результати НДК з двома варіяційними параметрами узгоджуються з точними не тільки якісно, а й достатньо добре кількісно (див. рис. 1). При пониженні температури результати цього наближення чимраз більше відхиляються від точних (занижені значення вільної енерґії, ентропії та теплоємности), а в низькотемпературній ділянці $t < t_l$ ($t_l < \frac{1}{2}\mathrm{th}(\sqrt[4]{\frac{1}{6}\Gamma/K}) + \frac{1}{12}\Gamma/K$) є якісно неправильними (від'ємні ентропія та теплоємність; вільна енерґія та поздовжня статична сприйнятливість є зростаючими функціями температури; теплоємність може бути спадною функцією температури). Нехтування варіяційним параметром φ^x ($\varphi^x = 0$) приводить до якісно неправильних результатів. При $0 < \Gamma/K < 1.28$ такий варіянт НДК передбачає сеґнетоелектричне впорядкування (див. рис. 2), причому при $0 < \Gamma/K < 0.66$ температура фазового переходу зростає зі збільшенням Γ/K.

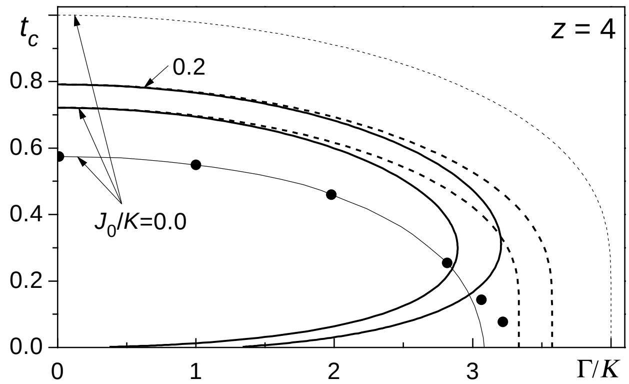

Рис. 3. Фазові діяграми на $(t-\Gamma/K)$ площині, отримані в НДК з одним (товстий штрих) та двома (товста суцільна) варіяційними параметрами при врахуванні далекосяжних взаємодій у НМП для квадратної ґратки ($z = 4$) при різних значеннях величини далекосяжної взаємодії J_0/K. Результати НМП за короткосяжними взаємодіями (тонкий штрих), високотемпературного розвинення [54] (тонка суцільна), моделювання Монте Карло [55] (кружечки) при $J_0 = 0$.

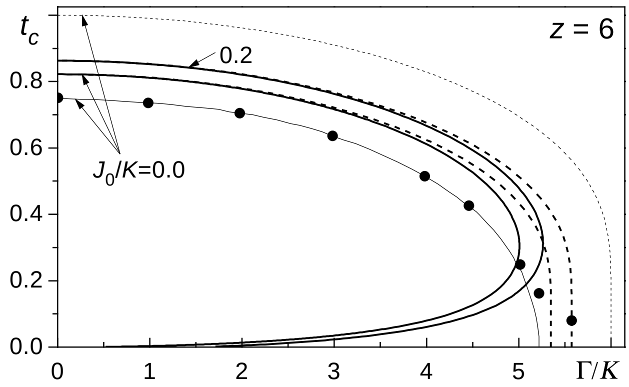

Рис. 4. Те ж саме, що на рис. 3 для простої кубічної ґратки.

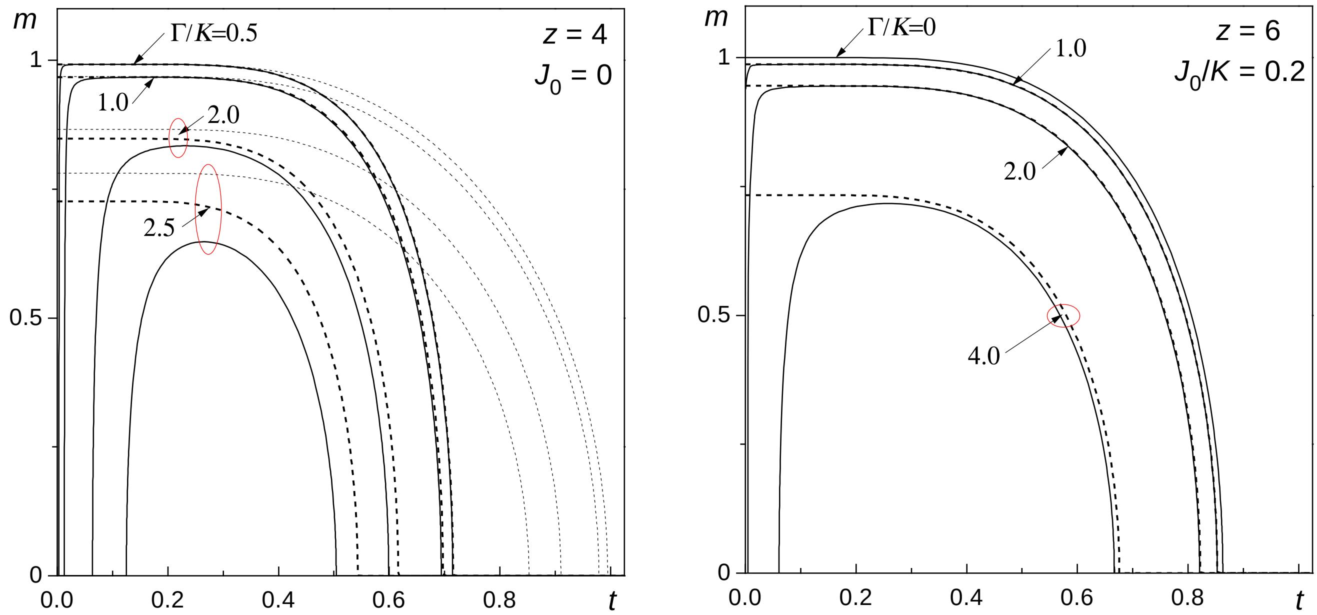

Рис. 5. Температурні залежності параметра порядку, отримані в НДК з одним (товстий штрих) та двома (суцільна) варіаційними параметрами при врахуванні далекосяжних взаємодій у НМП для $z = 4$, $J_0 = 0$ — (a), та $z = 6$, $J_0/K = 0.2$ — (b) при різних значеннях Γ/K. Результати НМП за короткосяжними взаємодіями при $z = 4$, $J_0 = 0$ — тонкий штрих.

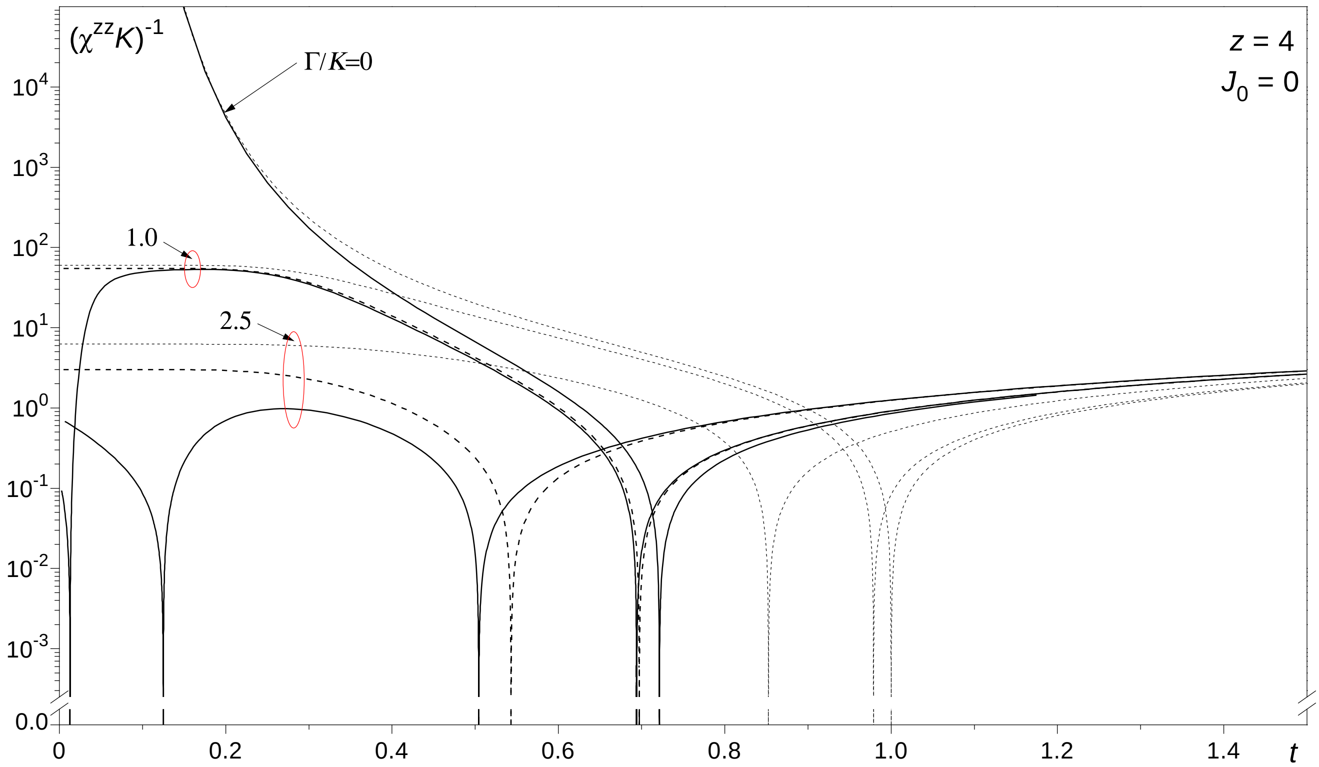

Рис. 6. Температурні залежності статичної поздовжньої сприйнятливості, отримані в НДК з одним (товстий штрих) та двома (суцільна) варіаційними параметрами та в НМП за короткосяжними взаємодіями (тонкий штрих) для $z = 4$, $J_0 = 0$ при різних значеннях Γ/K.

Розгляньмо тепер коротко результати, отримані в обох варіантах НДК за короткосяжними та в НМП за далекосяжними взаємодіями для одновимірної моделі ($z = 2$) при $J_0 > 0$ і для двовимірної та тривимірної моделей ($z = 4, 6$) при $J_0 \geq 0$. Усе, що будемо далі говорити, стосуватиметься тільки таких значень $\Gamma/K \in [0, (\Gamma/K)_k]$, при яких за певних температур є можливим сеґнетоелектричне впорядкування. $(\Gamma/K)_k$ – граничне значення параметра поперечного поля (яке є тим більше, чим більші z та J_0/K), вище від якого рівняння для t_c $(1/\chi^{zz}_{(+)}(t_c) = 0)$ не має розв'язків. Наприклад, див. рис. 3, при $z = 4$, $J_0 = 0$ $(\Gamma/K)_k = 2.89,\ 3.33$ в НДК з двома та одним варіяційними параметрами відповідно.

При $(\Gamma/K)_a < \Gamma/K < (\Gamma/K)_k$ $((\Gamma/K)_a \approx \sqrt{2zJ_0/K})$ НДК з двома варіяційними параметрами передбачає разом із фазовим переходом з парафази в сеґнетоелектричну фазу (зі зменшенням температури) також перехід із сеґнетофази в парафазу, так звану антиточку Кюрі (див. рис. 2–6). При $0 < \Gamma/K < (\Gamma/K)_a$ антиточка Кюрі відсутня, проте температурна поведінка термодинамічних характеристик при низьких температурах залишається якісно неправильною (параметр порядку та обернена статична сприйнятливість є зростаючими функціями температури; див. рис. 5, 6). Низькотемпературна ділянка $(t < t_l)$, у якій НДК із двома варіяційними параметрами дає некоректні результати для термодинамічних характеристик, є тим меншою, чим менші значення параметрів Γ/K та J_0/K. Наприклад, для квадратної ґратки температура, нижче від якої це наближення не може бути застосованим для опису термодинамічних характеристик, є: $t_l = 0.14$ при $\Gamma/K = 0.5$, $J_0 = 0$; $t_l = 0.23$ при $\Gamma/K = 2$, $J_0 = 0$; $t_l = 0.24$ при $\Gamma/K = 2$, $J_0/K = 0.4$. Слід відзначити, що значення t_l при $z = 4$ є більшим, аніж коли $z = 2$ та $z = 6$ при таких самих значеннях Γ/K, J_0/K. У високотемпературній ділянці $(t > t_l)$ при $J_0 = 0$ $z > 2$ НДК з двома варіяційними параметрами є значно точнішим (див. рис. 3, 4), ніж НМП за короткосяжними взаємодіями.

Нехтування варіяційним параметром φ^x для двовимірних та тривимірних ґраток приводить до незначного кількісного погіршення результатів розрахунку при високих температурах (яке є тим менше, чим більші вимірність ґратки і величина далекосяжної взаємодії та чим менша величина поперечного поля) та до якісно правильного опису термодинамічних характеристик при низьких температурах (див. рис. 3–6). Однак в одновимірній моделі при достатньо малих значеннях $J_0/K < 0.09$ та Γ/K НДК із одним варіяційним параметром передбачає збільшення температури фазового переходу зі збільшенням Γ/K (наприклад, при $J_0/K = 0.02$, $0 < \Gamma/K < 0.6$, див. рис. 2). Тобто це наближення не можна застосовувати для ланцюжка при малих значеннях величини далекосяжної взаємодії та поперечного поля.

Слід зауважити, що для двовимірних та тривимірних ґраток при малих Γ/K та $J_0 = 0$ максимальні значення в температурних залежностях параметра порядку (аналогічно й оберненої статичної сприйнятливости) в обох варіянтах НДК та в НМП за короткосяжними взаємодіями є дуже близькими між собою, хоча t_c, передбачене НМП, суттєво відрізняється від отриманих в обох варіянтах НДК.

IV. ВИСНОВКИ

У наближенні двочастинкового кластера за короткосяжними взаємодіями при врахуванні далекосяжних взаємодій у наближенні молекулярного поля було проведене дослідження температурних залежностей параметра порядку та поздовжньої статичної сприйнятливости моделі Ізинґа в поперечному полі на різних типах ґраток. Показано, що НДК з двома варіяційними параметрами дає задовільні результати (при відсутній далекосяжній взаємодії значно точніші, ніж наближення молекулярного поля за короткосяжними взаємодіями), крім низькотемпературної ділянки. Низькотемпературна ділянка, у якій це наближення передбачає нефізичні результати, є тим меншою, чим менші величини поперечного поля та далекосяжної взаємодії. При значенні поперечного поля, значно меншому від певного критичного значення $(\Gamma/K)_k$, вище від якого в системі неможливе сеґнетоелектричне впорядкування, температура t_l, нижче від якої НДК з двома варіяційними параметрами дає некоректні результати, є значно меншою від температури Кюрі.

НДК з одним варіяційним параметром для двовимірних та тривимірних ґраток передбачає якісно правильні результати для термодинамічних характеристик у всьому температурному інтервалі. Для одновимірного ланцюжка такий варіянт наближення виявляється некоректним.

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

[2] Р. Блинц, Б. Жекш, *Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. Динамика решетки* (Мир, Москва, 1975).

[3] В. Г. Вакс, В. И. Зиненко, В. Е. Шнейдер, Усп. физ. наук **141**, 629 (1983).

[4] R. R. Levitsky, J. Grigas, I. R. Zachek, Ye. V. Mits, W. Paprotny, Ferroelectrics **64**, 1 (1985).

[5] M. Steiner, J. Villain, C. G. Windsor, Adv. Phys. **25**, 87 (1976).

[6] Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Скрябин, *Статистическая механика магнитоупорядоченых систем* (Наука, Москва, 1987).

[7] И. Р. Юхновский, Журн. эксп. теор. физ. **34**, 379 (1958).

[8] И. Р. Юхновский, препринт ИТФ–79–133Р, Київ, 1979.

[9] И. Р. Юхновский, М. Ф. Головко, *Статистическая теория классических равновесных систем* (Наукова думка, Київ, 1980).

[10] І. Р. Юхновский, В. О. Коломієць, І. М. Ідзик, Cond.

Matt. Phys. (Lviv) iss. 1, 5 (1993).
[11] И. Р. Юхновский, Теор. мат. физ. **79**, 282 (1989).
[12] О. В. Пацаган, И. Р. Юхновский, Теор. мат. физ. **83**, 387 (1990).
[13] O. V. Patsahan, Physica A **272**, 358 (1999).
[14] И. Р. Юхновский, препринт ИТФ-71-26Р (1971).
[15] М. В. Вавpух, Теор. мат. физ. **50**, 438 (1982).
[16] М. В. Вавpух, препринт ИТФ–84–17Р, Київ, 1984.
[17] М. В. Вавpух, препринт ИТФ–87–56Р, Київ, 1987.
[18] М. В. Вавpух, Т. Е. Крохмальский Теор. мат. физ. **51**, 130 (1987).
[19] И. Р. Юхновский, Р. Р. Левицкий, С. И. Сороков, препринт ИТФ–86–132Р, Київ, 1986.
[20] И. Р. Юхновский, Р. Р. Левицкий, С. И. Сороков, препринт ИТФ–86–154Р, Київ, 1986.
[21] И. Р. Юхновский, Р. Р. Левицкий, С. И. Сороков, в *Современные проблемы статистической физики. Труды всесоюзной конференции* (Наукова думка, Київ **1**, 392, 1989).
[22] И. Р. Юхновский, Р. Р. Левицкий, С. И. Сороков, О. В. Держко, Изв. Акад. Наук СССР, сер. физ. **55**, 481 (1991).
[23] И. Р. Юхновский, Р. Р. Левицкий, С. И. Сороков, Cond. Matt. Phys. (Lviv) iss. 1, 43 (1993).
[24] R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **17**, 1100 (1962).
[25] Дж. Смарт, *Эффективное поле в теории магнетизма* (Наука, Москва, 1968).
[26] B. Strieb, H. B. Callen, Phys. Rev. **130**, 1798 (1963).
[27] R. Blinc, S. Svetina, Phys. Rev. **147**, 423 (1966).
[28] R. Blinc, S. Svetina, Phys. Rev. **147**, 430 (1966).
[29] V. G. Vaks, N. E. Zein, B. A. Strukov, Phys. Status Solidi A **30**, 801 (1975).
[30] Р. Р. Левицкий, Н. А. Кориневский, И. В. Стасюк, Укр. фіз. журн. **19**, 1289 (1974).
[31] R. R. Levitsky, N. A. Korinevsky, I. V. Stasjuk, Phys. Status Solidi B **88**, 51 (1978).
[32] С. І. Сороков, Р. Р. Левицький, О. Р. Баран, препринт ІФКС–92–18У, Львів, 1992.
[33] В. Г. Вакс, Н. Е. Зейн, Журн. эксп. теор. физ. **67**, 1082 (1974).
[34] V. K. Saxena, Phys. Rev. B **14**, 6884 (1983).
[35] В. Г. Вакс, Н. Е. Зейн, Физ. тверд. тела **17**, 1617 (1975).
[36] I. P. Dzyub, Phys. Status Solidi B **61**, 383 (1974).
[37] И. П. Дзюб, В. З. Кочмарский, Физ. тверд. тела **21**, 889 (1979).
[38] И. Р. Юхновский, Р. Р. Левицкий, С. И. Сороков, препринт ИТФ–86–142Р, Київ, 1986.
[39] R. R. Levitskii, S. I. Sorokov, Cond. Matt. Phys. (Lviv) iss. 3, 611 (1994).
[40] С. И. Сороков, Р. Р. Левицький, О. Р. Баран, Укр. фіз. журн. **41**, 490 (1996).
[41] S. I. Sorokov, R. R. Levitskii, O. R. Baran, Cond. Matt. Phys. (Lviv) iss. 9, 57 (1997).
[42] O. R. Baran, R. R. Levitskii, Phys. Status Solidi B **219**, 357 (2000).
[43] R. R. Levitskii, S. I. Sorokov, R. O. Sokolovskii, Ferroelectrics **153**, 147 (1994).
[44] R. R. Levitskii, S. I. Sorokov, Cond. Matt. Phys. (Lviv) iss. 5, 81 (1995).
[45] R. R. Levitskii, S. I. Sorokov, J. Magn. Magn. Matter, № 140–144, 271 (1995).
[46] R. R. Levitskii, S. I. Sorokov, R. O. Sokolovskii, Cond. Matt. Phys. (Lviv) iss.7, 117 (1996).
[47] Р. Р. Левицький, С. И. Сороков, Р. О. Соколовський, Журн. фіз. досл. **1**, 70 (1996).
[48] R. R. Levitskii, S. I. Sorokov, Ferroelectrics **192**, 11 (1997).
[49] R. R. Levitskii, R. O. Sokolovskii, S. I. Sorokov, Cond. Matt. Phys. (Lviv) iss. 10, 67 (1997).
[50] R. R. Levitskii, R. O. Sokolovskii, Cond. Matt. Phys. (Lviv) **2**, 393 (1999).
[51] Р. Р. Левицкий, С. И. Сороков, препринт ИТФ–87–28Р, Київ, 1987.
[52] Р. Р. Левицкий, С. И. Сороков, препринт ИТФ–88–34Р, Київ, 1988.
[53] М. А. Кориневський, дисерт. докт. фіз.-мат. наук, Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів (1997).
[54] R.J. Elliott, C. Wood, J. Phys. C **4**, 2359 (1971).
[55] O. Nagai, Y. Yamada, Y. Miyatake, in *Quantum Monte Carlo Methods* (Springer–Verlag Berlin Heidelberg New York London Paris Tokyo, 1986).

THERMODYNAMICS OF THE TRANSVERSE FIELD ISING MODEL WITHIN CLUSTER APPROXIMATION

R. R. Levitskii, O. R. Baran
Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Science of Ukraine
1 Svientsitskii Str., Lviv, UA–79011, Ukraine
Phone 70–74–39, e-mail: ostb@icmp.lviv.ua

The transverse field Ising model was investigated within two–particle cluster approximation with two and one variational parameters. The long–range interaction was taken into account in the framework of the mean–field approximation.

At various values of transverse field and long–range interaction, phase diagrams were constructed and temperature dependences of the order parameter and longitudinal static susceptibility were calculated. It was shown that cluster approximation with two variational parameters gave qualitatively incorrect results in a low–temperature region and that cluster approximation with one variational parameter is not suitable for one–dimensional lattices.