

## ТЕРМОДИНАМІКА МОДЕЛІ ІЗИНҐА В МЕТОДІ КЛАСТЕРНИХ РОЗВИНЕНЬ

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

*Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України,  
вул. Свенціцького, 1, Львів, 79011, Україна*

(Отримано 11 березня 2005)

Для моделі Ізинґа реалізовано кластерне розвинення на основі двочастинкового кластера з точністю до четвертого порядку по зв'язках. Для квадратної ґратки протестовано різні порядки кластерного розвинення в широкому температурному інтервалі. Отримані результати також порівнюються з результатами наближення чотиричастинкового кластера з різним способом розбиття ґратки на кластери.

**Ключові слова:** модель Ізинґа, метод кластерних розвинень, кластерне наближення.

PACS number: 75.10.Nk

### I. ВСТУП

При теоретичному вивченні псевдоспінових моделей, що використовуються для опису певних властивостей фізичних систем, у яких можна виділити дискретні стани, локалізовані на вузлах, виникає проблема розробки, тестування та вдосконалення наближених методів. Це зумовлено тим, що тільки невелику кількість таких моделей (переважно низькорозмірних) можна розв'язати точно. Крім того, на сьогодні немає універсального методу, який би адекватно відображав властивості різних псевдоспінових моделей при будь-яких наборах їх мікроскопічних параметрів. З цього погляду великий інтерес становить кластерне наближення (КН) [1, 2].

Для матеріалів, які описуються псевдоспіновими моделями з суттєвими короткосяжними кореляціями, найбільш природним багаточастинковим узагальненням наближення молекулярного поля є КН. У цьому наближенні безмежну ґратку розбивають на кластери з фіксованого числа псевдоспінів. Задачу взаємодіючих вузлів у кластері розв'язують точно, що дає змогу частково врахувати короткосяжні кореляції. Задачу ж взаємодії вузлів кластера з вузлами, які не належать цьому кластеру, розв'язують в дусі наближення молекулярного поля. А саме, взаємодії вузла, що належить цьому кластеру, з вузлами, що належать іншому кластеру, замінюють дією на цей вузол варіаційного кластерного поля. Тобто КН еквівалентне заміні системи взаємодіючих вузлів на систему кластерів, кожен з яких перебуває в ефективних полях, створених іншими кластерами, і при цьому взаємодії між вузлами в самих кластерах враховуються точно.

При наявності в системі сильних короткосяжних кореляцій важливим є врахування поправок, пов'язаних із взаємодією кластерів. Це можна зробити на основі методу кластерних розвинень (МКР). Уперше як метод, який дозволяє послідовно знаходити поправки до вільної енергії, пов'язані з взаємодією між кластерами, і в межах якого в першому порядку отримується КН, МКР був сформульований у праці [3]. Незважаючи на значну кількість робіт, де кластерний підхід використовується для розрахунку фізич-

них характеристик різноманітних систем [4–15], нам відомо лише три [16–18], у яких розглядалися вищі кластерні поправки в межах МКР. У цих працях проведено кластерне розвинення на основі двочастинкового кластера. Зокрема у статті [16] досліджено модель Гайзенберґа з точністю до тривузлового наближення, а в працях [17, 18] — модель Ізинґа з точністю до чотириузлового наближення [17] та до четвертого порядку кластерного розвинення по зв'язках [18]. Проте в статті [16] розраховано лише коефіцієнти високотемпературного розвинення для сприйнятливості та температури фазових переходів для різних типів ґраток. У праці [17] отримано коефіцієнти високотемпературного розвинення для теплоємності для різних типів ґраток. Побудовано її температурні залежності в різних порядках розвинення для ґранецентрованої ґратки, але лише в інтервалі температур, близьких до температури фазового переходу. Продемонстровано збіжність отриманих результатів на цій вузькій температурній ділянці зі зростанням порядку наближення до точних. У роботі [18] запропоновано метод розрахунку кореляційних функцій в імпульсному просторі, проте конкретні розрахунки проводилися лише в першому порядку кластерного розвинення.

Слід зауважити, що в праці [17] також показано, що точність чотириузлового наближення в МКР є нижчою від точності відповідного наближення в методі варіації кластера, про який слід коротко згадати. Цей метод був спочатку запропонований на основі комбінаторної техніки [19], а пізніше послідовно сформульований на основі варіаційного принципу для інформаційної ентропії, зображеної як кумулянтне розвинення [20]. У цьому методі в кожному порядку розвинення забезпечується виконання точних співвідношень між матрицями густини різних порядків. Однак зі зростанням порядку наближення збільшується й кількість варіаційних параметрів, що суттєво ускладнює його застосування.

Метою нашої статті є тестування на основі моделі Ізинґа методу кластерних розвинень у широкому температурному інтервалі. На основі двочастинкового кластера проведено розвинення з точністю до четвертого порядку по зв'язках. У випадку квадратної

ґратки результати порівнюються з точними та результатами першого порядку кластерного розвинення на основі чотиричастинкового кластера з різним способом покриття ґратки.

## II. МЕТОД КЛАСТЕРНИХ РОЗВИНЕНЬ

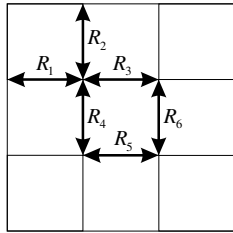
Проведімо кластерне розвинення для моделі Ізинґа, яка описується гамільтоніаном ( $S = S^z = \pm 1$ ):

$$H = - \sum_{\nu=1}^N h S_{\nu} - \frac{1}{2} \sum_{\nu} \sum_{\delta} K S_{\nu} S_{\nu+\delta}. \quad (2.1)$$

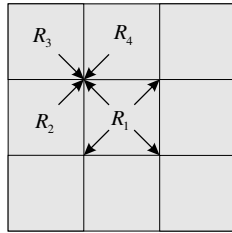
Підсумовування  $\sum_{\nu}$  проходить по всіх вузлах ґратки, а  $\sum_{\delta}$  — по найближчих сусідах цього вузла  $\nu$ . Прілюструймо спочатку розбиття квадратної ґратки на кластери: двочастинкові, чотиричастинкові з повним та шаховим способом покриття ґратки (див. рис. 1). Уведемо позначення:  $s$  — кількість кластерів, яким належить вузол;  $b$  — кількість кластерів, яким належить ребро;  $k$  — кількість вузлів у кластері;  $z$  — кількість найближчих сусідів.

Позначмо через  $\varphi S_{\nu}$  оператор ефективного поля, що діє на вузол  $\nu$  з боку кластера  $R$ , який містить вузол  $\nu$ . Очевидно, що на довільний вузол  $\nu$  діє  $s$  полів. При цьому

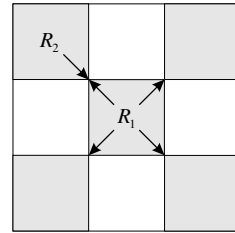
$$\sum_{\substack{R=1 \\ (\nu \in R)}}^s \varphi S_{\nu}$$



$s = 4, b = 1, k = 2$



$s = 4, b = 2, k = 4$



$s = 2, b = 1, k = 4$

Рис. 1. Розбиття квадратної ґратки ( $z = 4$ ) на кластери (двочастинкові та чотиричастинкові при різних способах покриття ґратки) з ілюстрацією дії кластерних полів на вузол.

Для вільної енергії моделі будемо мати:

$$F = -k_B T \ln \text{Sp} e^{-\beta H} \quad (2.6)$$

$$= \sum_{\nu} F_{\nu} - k_B T \ln \left\langle \exp \left( -\beta \sum_R U_R \right) \right\rangle_{\rho_0};$$

$$\langle A \rangle_{\rho_0} = \text{Sp}(\rho_0 A); \quad \rho_0 = \prod_{\nu} \rho_{\nu} = \prod_{\nu} \frac{e^{-\beta H_{\nu}}}{Z_{\nu}}, \quad (2.7)$$

де  $F_{\nu}$  — одночастинкова внутрішньокластерна вільна енергія, яка будується на основі одночастинкового

є повним полем, що діє на вузол  $\nu$  з боку всіх кластерів, які його містять. Перейдімо від вузольного до кластерного сумування.

$$\frac{1}{2} \sum_{\nu} \sum_{\delta} K S_{\nu} S_{\nu+\delta} = \frac{1}{b} \sum_R \sum_{(\nu, \mu) \in R} K S_{\nu} S_{\mu}; \quad (2.2)$$

$$\sum_{\nu} \sum_{\substack{R=1 \\ (\nu \in R)}}^s \varphi S_{\nu} = \sum_R \sum_{\nu \in R} \varphi S_{\nu}.$$

Підсумовування  $\sum_R$  проходить по всіх кластерах, а  $\sum_{(\nu, \mu) \in R}$  та  $\sum_{\nu \in R}$  — по парах найближчих сусідів та по вузлах, які належать кластерові  $R$  відповідно. Після тотожного перетворення з урахуванням (2.2) гамільтоніан (2.1) матиме вигляд:

$$H = \sum_{\nu} H_{\nu} + \sum_R U_R, \quad (2.3)$$

причому

$$H_{\nu} = -\tilde{z} S_{\nu}, \quad \tilde{z} = h + s\varphi, \quad (2.4)$$

$$U_R = \sum_{\nu \in R} \varphi S_{\nu} - \frac{1}{b} \sum_{(\nu, \mu) \in R} K S_{\nu} S_{\mu}. \quad (2.5)$$

Слід зауважити, що тотожне перетворення здійснено так, що в одночастинковому гамільтоніані  $H_{\nu}$  поле  $\tilde{z}$  створене зовнішнім полем і кластерними полями, які діють на цей вузол.

гамільтоніана (2.4).

$$F_{\nu} = -k_B T \ln Z_{\nu}; \quad Z_{\nu} = \text{Sp} e^{-\beta H_{\nu}}. \quad (2.8)$$

Використовуючи для функції  $\ln \langle \exp(-\beta \sum_R U_R) \rangle_{\rho_0}$  кластерне розвинення [3], запишемо вільну енергію у вигляді:

$$F = \sum_{\nu} F_{\nu} + \sum_{l=1}^{\infty} \mathcal{K}^{(l)}. \quad (2.9)$$

Тут виділені суми за сукупностями  $(R_1, \dots, R_l)$  кластерів, серед яких нема таких, що співпадають.

При цьому:

$$\begin{aligned} \mathcal{K}^{(1)} &= \sum_R K^{(1)}(R), & (2.10) \\ \mathcal{K}^{(l)} &= \sum_{(R_1, \dots, R_l)} K^{(l)}(R_1, \dots, R_l). \end{aligned}$$

Кластерні функції виражаються через моментні функції  $M^{(l)}(R_1, \dots, R_l)$  так [3]:

$$K^{(1)}(R) = -k_B T \ln M^{(1)}(R); \quad (2.11)$$

$$K^{(2)}(R_1, R_2) = -k_B T \ln \frac{M^{(2)}(R_1, R_2)}{M^{(1)}(R_1) \cdot M^{(1)}(R_2)};$$

$$\begin{aligned} K^{(3)}(R_1, R_2, R_3) &= -k_B T \\ &\times \ln \frac{M^{(3)}(R_1, R_2, R_3) \cdot M^{(1)}(R_1) \cdot M^{(1)}(R_2) \cdot M^{(1)}(R_3)}{M^{(2)}(R_1, R_2) \cdot M^{(2)}(R_2, R_3) \cdot M^{(2)}(R_3, R_1)}; \end{aligned}$$

і т. д. А моментні функції [3]:

$$M^{(1)}(R) = \langle e^{-\beta U_R} \rangle_{\rho_0}; \quad \dots; \quad (2.12)$$

$$M^{(l)}(R_1, \dots, R_l) = \langle e^{-\beta(U_{R_1} + U_{R_2} + \dots + U_{R_l})} \rangle_{\rho_0}.$$

Слід зауважити, що в  $n$ -тому порядку кластерного розвинення, яке будемо називати наближенням  $\mathcal{K}^{(n)}$ , нескінченний ряд у (2.9) обривають на  $n$ -тому члені ( $\mathcal{K}^{(1)} + \mathcal{K}^{(2)} + \dots + \mathcal{K}^{(n)}$ ).

Наближення  $\mathcal{K}^{(1)}$  в методі кластерних розвинень відповідає, як зазначалось вище, кластерному наближенню — наближенню статистично незалежних кластерів, коли приймається, що  $\langle \exp(-\beta \sum_R U_R) \rangle_{\rho_0} = \prod_R \langle \exp(-\beta U_R) \rangle_{\rho_0}$ .

### III. ДВОЧАСТИНКОВИЙ КЛАСТЕР

Розглянемо тепер кластерне розвинення по двочастинковому кластеру. Зауважимо, що в цьому випадку множина  $R$  складається з двох вузлів  $R = (1, 2)$ , а кількість кластерів, яким належить вузол, дорівнює кількості найближчих сусідів ( $s = z$ ).

Одночастинкова вільна енергія, побудована на основі одночастинкового гамільтоніяна

$$H_1 = -\varkappa^{(1,0)} S_1; \quad \varkappa^{(1,0)} = \tilde{\varkappa} = h + z\varphi, \quad (3.1)$$

має вигляд:

$$\begin{aligned} F_1 &= -k_B T \ln Z_1; & (3.2) \\ Z_1 &= \text{Sp } e^{-\beta H_1} = 2 \text{ch}(\beta \varkappa^{(1,0)}). \end{aligned}$$

А  $U_R$  буде таким:

$$U_R = [\varphi(S_1 + S_2) - K S_1 S_2]. \quad (3.3)$$

Із співвідношень (2.11), (2.12) випливає, що якщо хоч один із кластерів не зв'язаний з іншими (не має спільних вузлів), то  $K^{(l)}(R_1, \dots, R_l) = 0$ . Для  $\mathcal{K}^{(l)}$  до четвертого порядку включно (використовуючи діяграмні позначення) будемо мати:

$$\begin{aligned} \mathcal{K}^{(1)} &= \sum_R \otimes^R \otimes = \sum_{(\nu_1, \nu_2)} \begin{array}{c} \nu_1 \\ \otimes \\ \nu_2 \end{array} = N k(\bullet \bullet) \begin{array}{c} 1 \\ \otimes \\ 2 \end{array}; & (3.4) \\ \mathcal{K}^{(2)} &= \sum_{(R_1, R_2)} \begin{array}{c} R_1 \\ \otimes \\ R_2 \end{array} \otimes = \sum_{(\nu_1, \nu_2, \nu_3)} \begin{array}{c} \nu_1 \\ \otimes \\ \nu_2 \\ \otimes \\ \nu_3 \end{array} \\ &= N k(\bullet \bullet) \begin{array}{c} 1 \\ \otimes \\ 2 \\ \otimes \\ 3 \end{array}; \\ \mathcal{K}^{(3)} &= N \left[ k(\bullet \bullet) \begin{array}{c} 1 \\ \otimes \\ 2 \\ \otimes \\ 3 \\ \otimes \\ 4 \end{array} + k(\bullet \bullet \bullet) \begin{array}{c} \otimes^3 \\ 2 \\ \otimes \\ 1 \\ \otimes \\ 4 \end{array} \right]; \\ \mathcal{K}^{(4)} &= N \left[ k(\bullet \bullet) \begin{array}{c} 2 \\ \otimes \\ 1 \\ \otimes \\ 4 \end{array} + k(\bullet \bullet \bullet) \begin{array}{c} 1 \\ \otimes \\ 2 \\ \otimes \\ 3 \\ \otimes \\ 4 \\ \otimes \\ 5 \end{array} \right. \\ &\quad \left. + k(\bullet \bullet \bullet) \begin{array}{c} \otimes^3 \\ 2 \\ \otimes \\ 1 \\ \otimes \\ 4 \\ \otimes \\ 5 \end{array} + k(\bullet \bullet \bullet \bullet) \begin{array}{c} \otimes^3 \\ 2 \\ \otimes \\ 1 \\ \otimes \\ 4 \\ \otimes \\ 5 \end{array} \right]. \end{aligned}$$

Зауважимо, що при кластерному розвиненні по двочастинковому кластеру зручно від сумування за кластерами перейти до сумування за сукупністю вузлів  $(\nu_1, \dots, \nu_l)$ , які об'єднані в цю діяграму (див. (3.4)). Кількість доданків у такій сумі дорівнює кількості способів розміщення такої діяграми на ґратці з  $N$  вузлів. Наведімо тут значення коефіцієнтів  $k(\dots)$  для гіперкубичних ґраток:

$$\begin{aligned} k(\bullet \bullet) &= \frac{1}{2} z; & k(\bullet \bullet \bullet) &= \frac{1}{2} z(z-1); & (3.5) \\ k(\bullet \bullet \bullet) &= \frac{1}{2} z(z-1)^2; & k(\bullet \bullet \bullet \bullet) &= \frac{1}{8} z(z-2); \\ k(\bullet \bullet \bullet \bullet) &= \frac{1}{6} z(z-1)(z-2); \\ k(\bullet \bullet \bullet \bullet \bullet) &= \frac{1}{2} z[(z-1)^3 - (z-2)]; \\ k(\bullet \bullet \bullet \bullet \bullet) &= \frac{1}{2} z(z-1)^2(z-2); \\ k(\bullet \bullet \bullet \bullet \bullet \bullet) &= \frac{1}{24} z(z-1)(z-2)(z-3) \end{aligned}$$

( $Nk(\dots)$  — скільки разів діяграма цього типу покриває ґратку з  $N$  вузлів).

Такий перехід від сумування за кластерами до сумування за вузлами тягне за собою зміну позначення:

$$U_R \rightarrow U_{12} \Big|_{2 \in \pi_1}, \quad (3.6)$$

причому тепер  $\varphi S_1$  можна трактувати як оператор ефективного поля, яке діє на вузол 1 з боку вузла 2, що є найближчим сусідом 1 ( $2 \in \pi_1$ ). Увівши і для моментних функцій діяграмні позначення

$$M^{(1)}(R_1) = \bullet \sim \bullet, \quad M^{(2)}(R_1, R_2) = \bullet \sim \bullet \sim \bullet,$$

отримаємо для кластерних функцій  $K^{(l)}(R_1, \dots, R_l)$  (див. (2.11)):

$$\begin{aligned}
 \text{---}\otimes\text{---} &= -k_B T \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}; & \text{---}\otimes\text{---}\otimes\text{---} &= -k_B T (\ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} - 2 \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}); \\
 \text{---}\otimes\text{---}\otimes\text{---}\otimes\text{---} &= -k_B T (\ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} - 2 \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} + \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}); \\
 \text{---}\otimes\text{---}\otimes &= -k_B T \left( \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} - 3 \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} + 3 \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} \right); \\
 \text{---}\otimes\text{---}\otimes &= -k_B T \left( \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} - 4 \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} + 4 \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} \right); \\
 \text{---}\otimes\text{---}\otimes\text{---}\otimes\text{---}\otimes\text{---} &= -k_B T (\ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} - 2 \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} + \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}); \\
 \text{---}\otimes\text{---}\otimes\text{---}\otimes &= -k_B T \left( \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} - 2 \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} - \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} + 3 \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} - \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} \right); \\
 \text{---}\otimes\text{---}\otimes &= -k_B T \left( \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} - 4 \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} + 6 \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} - 4 \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} \right).
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

Наведемо також моментні функції в явному вигляді:

$$\begin{aligned}
 \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} &= \ln \langle e^{-\beta U_{12}} \rangle_{\rho_0} \equiv \text{---}\circ\text{---}\circ\text{---} - 2 \circ F_1; \\
 \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} &= \ln \langle e^{-\beta(U_{12}+U_{23})} \rangle_{\rho_0} \equiv \text{---}\circ\text{---}\circ\text{---}\circ\text{---} - 3 \circ F_1; \\
 \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} &= \ln \langle e^{-\beta(U_{12}+U_{23}+U_{34})} \rangle_{\rho_0} \equiv \text{---}\circ\text{---}\circ\text{---}\circ\text{---}\circ\text{---} - 4 \circ F_1; \\
 \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} &= \ln \langle e^{-\beta(U_{12}+U_{13}+U_{14})} \rangle_{\rho_0} \equiv \text{---}\circ\text{---}\circ\text{---}\circ\text{---} - 4 \circ F_1; \\
 \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} &= \ln \langle e^{-\beta(U_{12}+U_{23}+U_{34}+U_{41})} \rangle_{\rho_0} \equiv \text{---}\circ\text{---}\circ\text{---}\circ\text{---}\circ\text{---} - 4 \circ F_1; \\
 \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} &= \ln \langle e^{-\beta(U_{12}+U_{23}+U_{34}+U_{45})} \rangle_{\rho_0} \equiv \text{---}\circ\text{---}\circ\text{---}\circ\text{---}\circ\text{---}\circ\text{---} - 5 \circ F_1; \\
 \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} &= \ln \langle e^{-\beta(U_{12}+U_{13}+U_{14}+U_{45})} \rangle_{\rho_0} \equiv \text{---}\circ\text{---}\circ\text{---}\circ\text{---}\circ\text{---} - 5 \circ F_1; \\
 \ln \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---} &= \ln \langle e^{-\beta(U_{12}+U_{13}+U_{14}+U_{15})} \rangle_{\rho_0} \equiv \text{---}\circ\text{---}\circ\text{---}\circ\text{---}\circ\text{---} - 5 \circ F_1.
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

Тут використано позначення:

$$\begin{aligned}
 \circ F_1 &= \ln Z_1; \\
 \text{---}\circ\text{---} &= \ln \text{Sp} e^{-\beta(H_1+H_2+U_{12})} = \ln \left[ 2e^{\beta K} \left( \text{ch}(2\beta\mathcal{K}^{(1,-1)}) + e^{-2\beta K} \right) \right]; \\
 \text{---}\circ\text{---}\circ\text{---} &= \ln \text{Sp} e^{-\beta(H_1+H_2+H_3+U_{12}+U_{23})} = \ln 2 \left[ e^{2\beta K} \text{ch}(\beta\mathcal{K}^{(3,-4)}) + e^{-2\beta K} \text{ch}(\beta\mathcal{K}^{(1,0)}) + 2\text{ch}(\beta\mathcal{K}^{(1,-2)}) \right]; \\
 \text{---}\circ\text{---}\circ\text{---}\circ\text{---} &= \ln 2 \left[ e^{3\beta K} \text{ch}(2\beta\mathcal{K}^{(2,-3)}) + e^{\beta K} \left( 2\text{ch}(2\beta\mathcal{K}^{(1,-2)}) + 1 \right) + e^{-\beta K} \left( \text{ch}(2\varphi) + 2\text{ch}(2\beta\mathcal{K}^{(1,-1)}) \right) + e^{-3\beta K} \right]; \\
 \text{---}\circ\text{---}\circ\text{---} &= \ln 2 \left[ e^{3\beta K} \text{ch}(2\beta\mathcal{K}^{(2,-3)}) + 3e^{\beta K} \text{ch}(2\beta\mathcal{K}^{(1,-2)}) + 3e^{-\beta K} \text{ch}(2\varphi) + e^{-3\beta K} \text{ch}(2\beta\mathcal{K}^{(1,0)}) \right]; \\
 \text{---}\circ\text{---}\circ\text{---} &= \ln 2 \left[ e^{4\beta K} \text{ch}(4\beta\mathcal{K}^{(1,-2)}) + 4\text{ch}(2\beta\mathcal{K}^{(1,-2)}) + 2 + e^{-4\beta K} \right]; \\
 \text{---}\circ\text{---}\circ\text{---}\circ\text{---} &= \ln 2 \left[ e^{4\beta K} \text{ch}(\beta\mathcal{K}^{(5,-8)}) + 2e^{2\beta K} \text{ch}(3\beta\mathcal{K}^{(1,-2)}) + \text{ch}(\beta\mathcal{K}^{(1,-4)}) + 3\text{ch}(\beta\mathcal{K}^{(3,-4)}) \right. \\
 &\quad \left. + (4e^{-2\beta K} + 2e^{2\beta K}) \text{ch}(\beta\mathcal{K}^{(1,-2)}) + (2 + e^{-4\beta K}) \text{ch}(\beta\mathcal{K}^{(1,0)}) \right]; \\
 \text{---}\circ\text{---}\circ\text{---}\circ\text{---} &= \ln 2 \left[ e^{4\beta K} \text{ch}(\beta\mathcal{K}^{(5,-8)}) + 3e^{2\beta K} \text{ch}(3\beta\mathcal{K}^{(1,-2)}) + 3\text{ch}(\beta\mathcal{K}^{(1,-4)}) + \text{ch}(\beta\mathcal{K}^{(3,-4)}) + e^{-2\beta K} \text{ch}(\beta\mathcal{K}^{(3,-2)}) \right. \\
 &\quad \left. + (2e^{-2\beta K} + e^{2\beta K}) \text{ch}(\beta\mathcal{K}^{(1,-2)}) + (2 + e^{-4\beta K}) \text{ch}(\beta\mathcal{K}^{(1,0)}) + e^{-2\beta K} \text{ch}(\beta\mathcal{K}^{(1,2)}) \right]; \\
 \text{---}\circ\text{---}\circ\text{---}\circ\text{---} &= \ln 2 \left[ e^{4\beta K} \text{ch}(\beta\mathcal{K}^{(5,-8)}) + 4e^{2\beta K} \text{ch}(3\beta\mathcal{K}^{(1,-2)}) + 6\text{ch}(\beta\mathcal{K}^{(1,-4)}) + e^{-4\beta K} \text{ch}(3\beta\mathcal{K}^{(1,0)}) + 4e^{-2\beta K} \text{ch}(\beta\mathcal{K}^{(1,2)}) \right];
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

$$\varkappa^{(i,j)} = ih + (iz + j)\varphi. \quad (3.10)$$

Варіаційний параметр  $\varphi$  в методі кластерних розвинень знаходять з умови мінімуму вільної енергії.

$$\frac{\partial F(\beta, h, \varphi)}{\partial \varphi} = 0 \quad (3.11)$$

А для намагненості ( $m = \langle S \rangle = -N^{-1} \cdot dF/dh$ ), врахувавши (3.11), будемо мати:

$$m = -\frac{1}{N} \frac{\partial F(\beta, h, \varphi)}{\partial h}. \quad (3.12)$$

Явний вигляд рівняння (3.11) та виразу (3.12) не подаємо через громіздкість.

Для ілюстрації наведемо відомі результати наближення двочастинкового кластера (НДК), яке, як уже зазначалось вище, відповідає наближенню  $\mathcal{K}^{(1)}$  в методі кластерних розвинень за двочастинковим кластером. Вільна енергія моделі в НДК виражається через одночастинкову та двочастинкову внутрішньокластерні вільні енергії:

$$F(\beta, h, \varphi) = N \left[ (1-z)F_1 + \frac{z}{2}F_{12} \right]. \quad (3.13)$$

Двочастинкова внутрішньокластерна вільна енергія будується на основі двочастинкового гамільтоніяна

$$\begin{aligned} H_{12} &= H_1 + H_2 + U_{12} \\ &= -\varkappa^{(1,-1)}(S_1 + S_2) - K S_1 S_2 \end{aligned} \quad (3.14)$$

і має вигляд:

$$\begin{aligned} F_{12} &= -k_B T \ln Z_{12}; \\ Z_{12} &= \text{Sp } e^{-\beta H_{12}} = 2e^{\beta K} [\text{ch}(2\beta \varkappa^{(1,-1)}) + e^{-2\beta K}]. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Рівняння для варіаційного параметра  $\varphi$  в НДК буде таким:

$$\text{th}(\beta \varkappa^{(1,0)}) = \frac{2e^{\beta K} \text{sh}(2\beta \varkappa^{(1,-1)})}{Z_{12}}, \quad (3.16)$$

а вираз для намагненості (3.12) (з урахуванням (3.16)) матиме такий простий вигляд:

$$m = \text{th}(\beta \varkappa^{(1,0)}). \quad (3.17)$$

Легко бачити, що рівняння (3.16) є еквівалентним рівнянню  $\langle S_1 \rangle_{\rho_1} = \langle S_1 \rangle_{\rho_{12}}$ , де  $\rho_1 = \exp(-\beta H_1)/Z_1$ ,  $\rho_{12} = \exp(-\beta H_{12})/Z_{12}$ ,  $\langle A \rangle_{\rho_1} = \text{Sp}_{S_1} [\rho_1 \cdot A]$ ,  $\langle A \rangle_{\rho_{12}} = \text{Sp}_{S_1, S_2} [\rho_{12} \cdot A]$ . Тобто в наближенні двочастинкового кластера виконуються точні співвідношення між матрицями густини різних порядків:  $\rho_1 = \text{Sp}_{S_2} \rho_{12}$ .

У використаному підході врахування поправок до

вільної енергії, пов'язаних із взаємодією кластерів, за порядок розвинення відповідає максимальна кількість кластерів, взаємодії яких ми враховуємо (об'єднаних у діаграми; див. наприклад (3.4)). А в роботах [16, 17] за порядок розвинення відповідає максимальна кількість вузлів, об'єднаних у діаграми. Тобто чотиривузлове наближення [17] еквівалентне нашому наближенню  $\mathcal{K}^{(3)}$  плюс перший доданок із  $\mathcal{K}^{(4)}$ :

$$\mathcal{K}^{(1)} + \mathcal{K}^{(2)} + \mathcal{K}^{(3)} + Nk \left( \begin{array}{c} \bullet \bullet \\ | \quad | \\ \bullet \bullet \end{array} \right) + \begin{array}{c} 2 \otimes 3 \\ | \quad | \\ 1 \otimes 4 \end{array}.$$

#### ІV. НАБЛИЖЕННЯ ЧОТИРИЧАСТИНКОВОГО КЛАСТЕРА

Розглянемо розбиття квадратної ґратки на чотиричастинкові кластери, як показано на рис. 1, і обмежмося першим порядком кластерного розвинення. Тепер множина  $R$  складається з чотирьох вузлів  $R = (1, 2, 3, 4)$ .

Згідно зі співвідношеннями (2.9)–(2.12), запишемо вільну енергію в наближенні  $\mathcal{K}^{(1)}$ , яке відповідає наближенню чотиричастинкового кластера (НЧК).

$$F = N \left[ (1-s)F_1 + \frac{s}{4}F_R \right] \quad (4.1)$$

Одночастинкова  $F_\nu$  та чотиричастинкова  $F_R$  внутрішньокластерні вільні енергії будуються на основі одночастинкового та чотиричастинкового гамільтоніанів

$$H_1 = -\tilde{\varkappa} S_1; \quad \tilde{\varkappa} = h + s\varphi; \quad (4.2)$$

$$H_R = \sum_{\nu=1}^4 H_\nu + U_R \quad (4.3)$$

$$= -\sum_{\nu=1}^4 \tilde{\varkappa} S_\nu - \frac{K}{b} [S_1 S_2 + S_2 S_3 + S_3 S_4 + S_1 S_4];$$

$$\tilde{\varkappa} = h + (s-1)\varphi$$

і мають вигляд:

$$F_1 = -k_B T \ln Z_1; \quad F_R = -k_B T \ln Z_R; \quad (4.4)$$

$$Z_1 = \text{Sp } e^{-\beta H_1} = 2 \text{ch}(\beta \tilde{\varkappa}); \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} Z_R &= \text{Sp } e^{-\beta H_R} \\ &= 2 \left[ 2 + e^{-4\beta K/b} + 4 \text{ch}(2\beta \tilde{\varkappa}) + e^{4\beta K/b} \text{ch}(4\beta \tilde{\varkappa}) \right]. \end{aligned}$$

На основі (3.11) отримаємо рівняння для варіаційного параметра  $\varphi$ .

$$\text{th}(\beta \tilde{\varkappa}) = \frac{4 \text{sh}(2\beta \tilde{\varkappa}) + 2e^{4\beta K/b} \text{sh}(4\beta \tilde{\varkappa})}{Z_R} \quad (4.6)$$

А на основі (3.12), з урахуванням (4.6), отримаємо вираз для  $m$  у такій простій формі:

$$m = \text{th}(\beta \tilde{z}). \quad (4.7)$$

Так само, як і у НДК, легко бачити, що рівняння (4.6) є еквівалентним рівнянню  $\langle S_1 \rangle_{\rho_1} = \langle S_1 \rangle_{\rho_R}$ , де  $\rho_R = \exp(-\beta H_R) / Z_R$ ,  $\langle A \rangle_{\rho_R} = \text{Sp}_{S_1, \dots, S_4} [\rho_R \cdot A]$ . Тобто в цьому випадку також виконуються точні співвідношення між матрицями густини різних порядків:  $\rho_1 = \text{Sp}_{S_2, S_3, S_4} \rho_R$ .

### V. РЕЗУЛЬТАТИ ЧИСЛОВИХ РОЗРАХУНКІВ

Числовий аналіз термодинамічних характеристик моделі Ізинга на квадратній ґратці при  $h = 0$  у різних порядках кластерного розвинення на основі двочастинкового кластера показав (див. рис. 2), що результати збігаються до точного зі зростанням порядку наближення, за винятком досить широкої низькотемпе-

ратурної ділянки. Так, у парафазі та високотемпературній частині впорядкованої фази результати наближень  $\mathcal{K}^{(2)}$  та  $\mathcal{K}^{(3)}$  збігаються з результатами наближення  $\mathcal{K}^{(1)}$  (те ж саме, що й НДК), а результати наближень  $\mathcal{K}^{(4)}$  та чотиривузлового є значно ближчими до точного, причому чотиривузлове наближення виявляється дещо кращим. У низькотемпературній ділянці впорядкованої фази наближення вищі від  $\mathcal{K}^{(1)}$  передбачають нефізичну поведінку термодинамічних характеристик, зокрема більший від одиниці параметр порядку, немонотонні вільну енергію, ентропію, теплоємність та статичну сприйнятливості (причому ентропія та теплоємність при низьких температурах є від'ємними; статична сприйнятливості та теплоємність можуть мати розриви). Чим вищий порядок кластерного розвинення, тим ширшою є вказана низькотемпературна ділянка, де це наближення дає некоректні результати, причому в наближенні  $\mathcal{K}^{(4)}$  вона ширша, ніж у чотиривузловому наближенні.

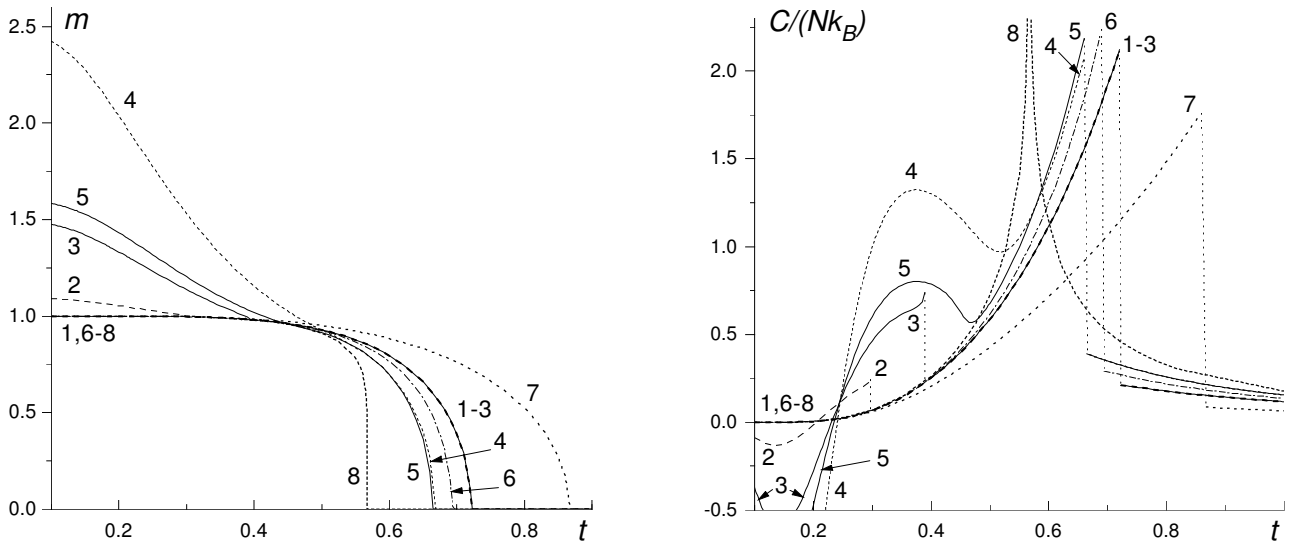


Рис. 2. Температурні ( $t = k_B T / (zK)$ ) залежності параметра порядку  $m$  та теплоємності  $C$  при  $z = 4$ ,  $h = 0$ , отримані в різних порядках кластерного розвинення по двочастинковому кластеру (1 —  $\mathcal{K}^{(1)}$ ; 2 —  $\mathcal{K}^{(2)}$ ; 3 —  $\mathcal{K}^{(3)}$ ; 4 —  $\mathcal{K}^{(4)}$ ; 5 — чотиривузлове наближення) та в наближенні чотиричастинкового кластера з різним способом покриття ґратки (6 — шахове; 7 — повне). Точний розв'язок Онсаґера — 8.

Слід, проте, зауважити, що при низьких температурах у вищих порядках кластерного розвинення рівняння (3.11) має декілька розв'язків (див. рис. 3). Розв'язок  $\varphi_{\text{abs}, \text{min}}$  відповідає абсолютному мінімуму вільної енергії. Розв'язки  $\varphi_{i, \text{min}}$  відповідають мінімумам вільної енергії (але не абсолютним), а  $\varphi_{i, \text{max}}$  — максимумам. У наближеннях  $\mathcal{K}^{(2)}$  та  $\mathcal{K}^{(3)}$  розв'язок  $\varphi_{1, \text{min}}$  передбачає коректні температурні залежності термодинамічних характеристик і є ніби продовженням розв'язку  $\varphi_{\text{abs}, \text{min}}(T)$  після стрибка  $\varphi_{\text{abs}, \text{min}}(T)$  на іншу гілку зі зниженням температури (див. рис. 3 (b), (c)). Проте, як уже сказано вище, цей розв'язок  $\varphi_{1, \text{min}}$  не відповідає абсолютному мінімуму вільної енергії. У наближенні  $\mathcal{K}^{(4)}$  розв'язок  $\varphi_{\text{abs}, \text{min}}$  не має розри-

вів і вже не перетинається з гілкою  $\varphi_{1, \text{min}}$  (див. рис. 3 (d)), яка при достатньо низьких температурах передбачає коректні результати для термодинамічних характеристик.

Некоректність вищих порядків кластерного розвинення при низьких температурах пов'язана, на нашу думку, з порушенням співвідношень між матрицями густини різних порядків.

Порівняймо тепер результати першого порядку кластерного розвинення на основі двочастинкового кластера та чотиричастинкового кластера з різним способом покриття ґратки. НЧК при шаховому способі покриття ґратки дає значно ліпші результати, ніж НДК, а при повному — значно гірші (див. рис. 2). Це пов'язано з тим, що при повному способі покриття

ґратки ми враховуємо взаємодії між вузлами по два рази (легко бачити з рис. 1), що приводить, так би мовити, до “посилення” взаємодії. Таке некоректне покриття ґратки кластерами спричиняє не тільки збільшення  $T_c$ . Якщо будувати залежності термодинамічних характеристик від зведеної температури  $T/T_c$ , то результати НЧК при повному способі покриття ґратки є суттєво гіршими від результатів НДК, які, своєю чергою, гірші від результатів НЧК при шаховому

способі покриття ґратки. Зокрема параметр порядку, який повинен стрімко спадати в околі  $T_c$  у впорядкованій фазі, в НЧК при повному способі покриття ґратки спадає повільніше, ніж у інших варіантах кластерного розвинення (див. рис. 4). Ентропія, отримана в НЧК при повному способі покриття ґратки, відрізняється від точної більше, ніж отримана в НДК та НЧК при шаховому способі покриття ґратки.

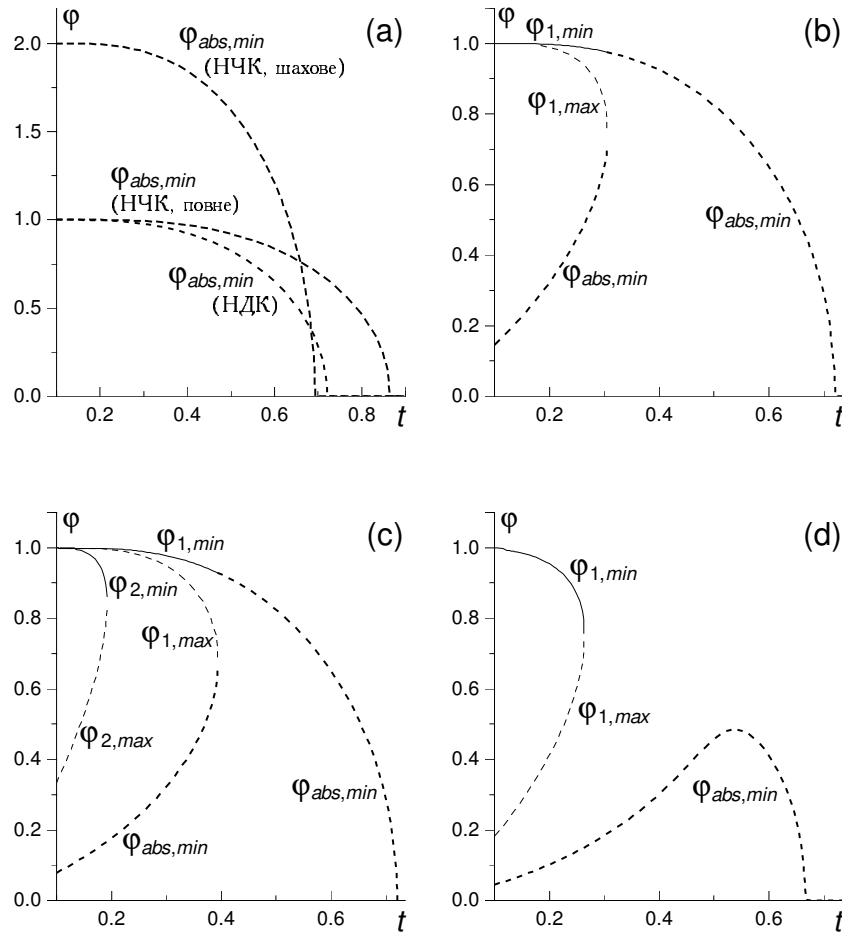


Рис. 3. Температурні ( $t = k_B T / (zK)$ ) залежності розв’язків рівняння для кластерного поля (3.11) при  $z = 4$ ,  $h = 0$ , отримані в різних варіантах кластерного розвинення. (а) — наближення  $\mathcal{K}^{(1)}$  при розвиненні по дво- та чотиричастинковому (з різним способом покриття) кластерах; (б), (с), (д) — наближення  $\mathcal{K}^{(2)}$ ,  $\mathcal{K}^{(3)}$ ,  $\mathcal{K}^{(4)}$ , відповідно, при розвиненні по двочастинковому кластеру.

### ВИСНОВКИ

Установлено, що в достатньо широкій низькотемпературній ділянці вище від першого порядку кластерного розвинення передбачають некоректні результати для термодинамічних характеристик. Це пов’язано з незабезпеченням у методі кластерних розвинень виконання співвідношень між матрицями густини різних порядків. На прикладах кластерного розвинення

по двочастинковому кластеру та наближеннях чотиричастинкового кластера з різним способом розбиття квадратної ґратки показано, що доцільніше збільшувати розмір кластера (за умови коректного способу розбиття ґратки на кластери) і обмежуватись кластерним наближенням, аніж проводити вище від першого порядку розвинення в методі кластерних розвинень.

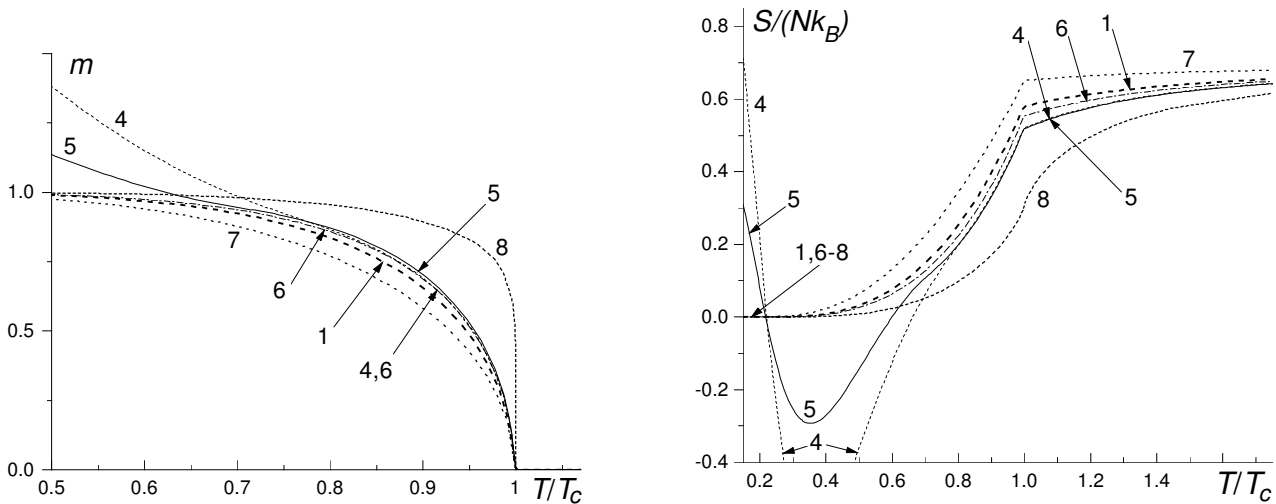


Рис. 4. Залежності параметра порядку  $m$  та ентропії  $S$  від зведеної температури  $T/T_c$  для  $z = 4$ ,  $h = 0$ , отримані в різних варіантах кластерного розвинення. (Позначення такі ж, як на рис. 2).

- 
- [1] J. S. Smart, *Effective field theories of magnetism* (Philadelphia–London, W. B. Saunders Company, 1996).
- [2] В. Г. Вакс, *Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков* (Наука, Москва, 1973).
- [3] R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **17**, 1100 (1962).
- [4] R. Blinc, S. Svetina, Phys. Rev. **147**, 423 (1966).
- [5] Р. Р. Левицкий, Н. А. Кориневский, И. В. Стасюк, Укр. фіз. журн. **19**, 1289 (1974).
- [6] V. S. Vaks, N. E. Zein, B. A. Strukov, Phys. Status Solidi A **30**, 801 (1975).
- [7] В. Г. Вакс, Н. Е. Зейн, Физ. тверд. тела **17**, 1617 (1975).
- [8] R. R. Levitsky, N. A. Korinevsky, I. V. Stasjuk, Phys. Status Solidi B **88**, 51 (1978).
- [9] J. A. Plascak, Phys. Status Solidi B **124**, K35 (1984).
- [10] R. R. Levitsky, J. Grigas, I. R. Zachek, Ye. V. Mits, W. Papronty, Ferroelectrics **64**, 1 (1985).
- [11] С. І. Сороков, Р. Р. Левицкий, О. Р. Баран, Укр. фіз. журн. **41**, 490 (1996).
- [12] Р. Р. Левицкий, С. І. Сороков, О. Р. Баран, І. М. Пиндзин, Журн. фіз. досл. **2**, 391 (1998).
- [13] R. R. Levitskii, S. I. Sorokov, O. R. Baran, Condens. Matter Phys. (Lviv) **3**, No 3(23), 515 (2000).
- [14] О. Р. Баран, Р. Р. Левицкий, Phys. Rev. B **65**, 172407 (2002).
- [15] R. R. Levitskii, B. M. Lisnii, O. R. Baran, Condens. Matter Phys. (Lviv) **5**, No 3(31), 553 (2002).
- [16] B. Strieb, H. B. Callen, G. Horwitz, Phys. Rev. **130**, 1798 (1963).
- [17] R. van der Haegen, R. Luycckx, Mol. Phys. **49**, 849 (1983).
- [18] І. Р. Юхновский, Р. Р. Левицкий, С. І. Сороков, препринт ИТФ-86-142Р (Киев, 1986).
- [19] R. Kikuchi, Phys. Rev. **81**, 988 (1951).
- [20] T. Morita, J. Math. Phys. **13**, 115 (1972).

## THERMODYNAMICS OF ISING MODEL WITHIN CLUSTER EXPANSION METHOD

R. R. Levitskii, S. I. Sorokov, O. R. Baran  
*Institute for Condensed Matter Physics,*  
*1 Svientsitskii St., Lviv, UA-79011, Ukraine,*  
*e-mail: ost@icmp.lviv.ua*

For the Ising model the cluster expansion on the basis of a two-particle cluster is performed up to terms of the fourth-order in bonds. For a square lattice different orders of the cluster expansion are tested in a wide temperature range. The obtained results are compared with those of a four-particle cluster approximation at different forms of lattice division into clusters.