УДК 548:537.611.44

І. Р. ЮХНОВСЬКИЙ, Р. Р. ЛЕВИЦЬКИЙ,
С. І. СОРОКОВ

ДОСЛІДЖЕННЯ КВАЗІСПІНОВИХ СИСТЕМ У БАЗИСНОМУ ПІДХОДІ

Для теоретичного опису квазіспінових систем з суттєвими коротко- і далекодіючими взаємодіями запропоновано метод, який грунтується на розрахунку функціоналу вільної енергії (ФВЕ) з базисним урахуванням короткодіючих взаємодій (виділення базисної системи відліку (БСВ)). Досліджено розвинення ФВЕ і функціоналів температурних кумулянтних функцій Гріна (КФГ) за далекодіючою взаємодією, проаналізовано і підсумовано різні класи діаграм для них. Для квантових квазіспінових систем з довільним квазіспіновим базисом вперше проведено повне сумування звідних за блоком діаграм в ФВЕ і некомпактних діаграм в функціоналах температурних КФГ. Детально обговорюється методика одержання так званих узгоджених наближень для термодинамічних і динамічних характеристик досліджуваних систем. На основі числових розрахунків для тривимірної моделі Ізінга з унарним базисом показано, що для обох типів взаємодій поведінка параметра порядку описується незадовільно в однопетлевому наближенні і є придатною (крім вузького околу температури фазового переходу) з урахуванням сумування двохвосток.

1. Вступ

У сучасній статистичній теорії конденсованих систем велика увага приділяється дослідженню матеріалів, які описуються квазіспіновими гамільтоніанами [1—9]. Серед численного арсеналу методів статистичної фізики, які широко використовуються при дослідженні квазіспінових систем, провідна роль належить методу двочасових температурних функцій Гріна (ФГ) і діаграмним методам теорії збурень. Для теоретичного дослідження в широкому температурному діапазоні квазіспінових систем з далекодіючими взаємодіями, а також короткодіючими кореляціями при наявності великого числа близьких сусідів ($z \geqslant 6$) у кристалах часто використовується розклад за оберненим радіусом взаємодії [2, 3, 10, 11]. Для ізінгівських моделей розрахунки проводились з урахуванням сумування діаграм вищих порядків за $1/z$ [12—19]. При цьому в усіх запропонованих різними авторами варіантах теорії збурень нéзбурений гамільтоніан був гамільтоніаном унарного типу. Основна увага в цих працях приділялась динамічним аспектам теорії квазіспінових систем.

Для квазіспінових моделей з короткодіючими взаємодіями (особливо для низькорозмірних систем) досить ефективним є кластерний метод [5, 6, 20], який застосовувався в основному для розрахунку їх термодинамічних характеристик і був розвинутий коректно лише для гамільтоніанів з комутуючими між собою унарною частиною і частиною, яка описує взаємодію. Для кількох низькорозмірних квазіспінових моделей з короткодіючими взаємодіями мають місце і точні результати для термодинамічних характеристик і статичних кореляторів. Проте до цього часу не розв'язана послідовно проблема розрахунку динамічних характеристик згаданих моделей.

Разом з тим добре відомий широкий клас матеріалів, для яких суттєвими є коротко- і далекодіючі взаємодії між спінами. Серед них особливо слід виділити сегнетоактивні сполуки з водневими зв'язками [5, 6] і квазіодномірні магнетики [7]. Для адекватного опису таких об'єктів необхідний теоретичний підхід, який дозволив би використовувати різні математичні методи при врахуванні коротко- і далекодіючих взаємодій. Така проблема є типовою для статичної теорії багаточастинкових систем. Вона успішно розв'язувалась при вивченні рівноважливих властивостей класичних систем [21—24] і металів [25—28] на основі підходу, запропонованого у працях [21—25]. Далекодіючі взаємодії в цьому підході описуються в фазовому просторі колективних змінних, а короткодіючі — в фазовому просторі індивідуальних координат. При цьому систему з короткодіючими взаємодіями звичайно називають БСВ.

Дуже актуальною проблемою було створення відповідного методу, що грунтується на базисному врахуванні короткодіючих кореляцій і для квазіспінових систем. Для розв'язання поставленої вище задачі у працях [29—31] запропоновано підхід, у рамках якого створена узгоджена методика розрахунку термодинамічних і динамічних характеристик квазіспінових систем з суттєвими короткодіючими кореляціями і далекодіючими взаємодіями між квазіспінами, що грунтується на базисному врахуванні короткодіючих кореляцій. Для квантових базисних квазіспінових гамільтоніанів вперше запропоновано послідовне формування методу кластерних розвинень для ФВЕ і розроблено метод, який дозволяє у рамках кластерного наближення одержати для базисних температурних КФГ довільного порядку рівняння типу Орнштейна — Церніке [32—34].

У даній статті коротко зупинимось на запропонованому в працях [29, 30] методі і одержаних на його основі результатах для конкретних квазіспінових моделей. Значна увага буде приділятись також методиці одержання узгоджених наближень для термодинамічних і динамічних характеристик квазіспінових систем, яка грунтується на розрахунку ФВЕ.

2. Теорія квазіспінових систем з базисним урахуванням короткодіючих взаємодій

У даному пункті для теоретичного опису квазіспінових систем з суттєвими короткодіючими кореляціями і далекодіючими взаємодіями запропоновано метод, який грунтується на базисному врахуванні короткодіючих кореляцій. Завдяки працям [21—24] виділяється БСВ, яка містить короткодіючі кореляції і середнє поле за далекодією. Повністю далекодіючі взаємодії враховуються за допомогою зображення ФВЕ досліджуваної системи через базисний ФВЕ.

Розглянемо спінову модель з коротко- і далекодією (СМКД), гамільтоніан якої запишемо у вигляді [29, 30]

$$-\beta H = \mathscr{H}\{\Gamma\} = {}^{k}\mathscr{H}\{\Gamma\} + \frac{1}{2}\sum_{na,n'b} J_{nn'}^{ab} S_n^a S_{n'}^b, \tag{2.1}$$

$${}^{k}\mathscr{H}\{\Gamma\} = \sum_{na} \Gamma_n^a S_n^a + {}^{k}V\{S\},$$

де

$${}^{k}V\{S\} = \frac{1}{2}\sum_{na,n'b} K_{nn'}^{ab} S_n^a S_{n'}^b + {}^{k}W\{S\}. \tag{2.2}$$

Тут $K_{nn'}^{ab}$ і $J_{nn'}^{ab}$ — коротко- і далекодіюча складові парної взаємодії квазіспінів; S_n^a ($a = x, y, z$ при $d_s = 3$) — компоненти оператора спіна $\hat{S}$ в d_s-мірному спіновому просторі, які задовольняють відомі комутаційні співвідношення. Тут прийнято: $S^z = -S, -S+2, \ldots, S-2, S$. Доданок ${}^{k}W\{S\}$ описує багаточастинкові (тричастинкові, чотиричастинкові і т. ін.) взаємодії у квазіспіновій системі. У частковому випадку $a, b = z$ замість СМКД будемо вживати абревіатуру ІМКД (ізінгівська модель з коротко- і далекодією).

ФВЕ розглядуваної системи згідно з [29] має вигляд

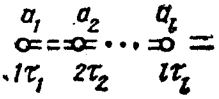
$$\mathscr{F}\{h, \Gamma\} = \ln Z\{h, \Gamma\}, \quad Z\{h, \Gamma\} = Sp_{(s)} e^{\mathscr{H}_h} T_\tau \exp\left[\int_0^1 d\tau \mathscr{H}_\tau\{\Gamma\}\right]. \tag{2.3}$$

Тут

$$\mathscr{H}_h = \sum_{na} h_n^a S_n^a; \quad A_\tau = e^{-\tau\mathscr{H}_h} A e^{\tau\mathscr{H}_h}; \quad \mathscr{H}_\tau\{\Gamma\} = e^{-\tau\mathscr{H}_h}\mathscr{H}\{\Gamma\} e^{\tau\mathscr{H}_h}. \tag{2.4}$$

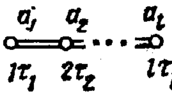
Вільну енергію, ФГ і КФГ досліджуваної системи будемо знаходити із наступних співвідношень:

$$-\beta F\{\Gamma\} = \mathscr{F}\{\Gamma\} = \mathscr{F}\{h, \Gamma\}\Big|_{\substack{\Gamma_{n\tau}^a = \Gamma_n^a \\ h_n^a = 0}}; \quad \tilde{\tilde{S}}_{n\tau}^a = e^{-\tau\mathscr{H}\{\Gamma\}} S_n^a e^{\tau\mathscr{H}\{\Gamma\}}, \tag{2.5}$$

$$\langle T\tilde{\tilde{S}}^{a_1}_{1\tau_1} \ldots \tilde{\tilde{S}}^{a_l}_{l\tau_l}\rangle_{\{\Gamma\}} = \Bigg(\langle T_\tau S^{a_1}_{1\tau_1} \ldots S^{a_l}_{l\tau_l}\rangle_{\{h,\Gamma\}} =$$  $$=$$

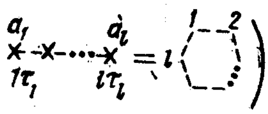
$$= \frac{1}{Z\{h,\Gamma\}} \frac{\delta}{\delta \Gamma^{a_1}_{1\tau_1}} \ldots \frac{\delta}{\delta \Gamma^{a_l}_{l\tau_l}} Z\{h,\Gamma\}\Bigg)\Bigg|_{\substack{\Gamma^a_{n\tau}=\Gamma^a_n \\ h^a_n=0}}, \tag{2.6}$$

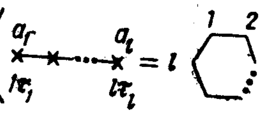
$$\langle T_\tau \tilde{\tilde{S}}^{a_1}_{1\tau_1} \ldots \tilde{\tilde{S}}^{a_l}_{l\tau_l}\rangle^c_{\{\Gamma\}} = \Bigg(\langle T_\tau S^{a_1}_{1\tau_1} \ldots S^{a_l}_{l\tau_l}\rangle_{\{h,\Gamma\}} = \mathscr{F}^{(l)}\begin{pmatrix} a_1 & \ldots & a_l \\ 1\tau_1 & \ldots & l\tau_l \end{pmatrix} =$$

$$=$$  $$= \frac{\delta}{\delta \Gamma^{a_1}_{1\tau_1}} \ldots \frac{\delta}{\delta \Gamma^{a_l}_{l\tau_l}} \mathscr{F}\{h,\Gamma\}\Bigg)\Bigg|_{\substack{\Gamma^a_{n\tau}=\Gamma^a_n \\ h^a_n=0}}. \tag{2.7}$$

Для БСВ мають місце співвідношення за аналогією до (2.3) — (2.7) з заміною $\mathscr{H}\{\Gamma\}$ на ${}^k\mathscr{H}\{\Gamma\}$. При цьому має місце наступна діаграмна відповідність:

$${}^k\mathscr{F}\{\Gamma\} = {}^k\mathscr{F}\{h,\Gamma\}\big|_{\substack{\Gamma^a_{n\tau}=\Gamma^a_n \\ h^a_n=0}}; \quad \tilde{S}^a_{n\tau} = e^{-\tau\, {}^k\mathscr{H}\{\Gamma\}} S^a_n e^{\tau\, {}^k\mathscr{H}\{\Gamma\}}; \tag{2.8}$$

$${}^k\langle T_\tau \tilde{S}^{a_1}_{1\tau_1} \ldots \tilde{S}^{a_l}_{l\tau_l}\rangle_{\{\Gamma\}} = \Bigg($$  $$\Bigg)\Bigg|_{\substack{\Gamma^a_{n\tau}=\Gamma^a_n \\ h^a_n=0}}; \tag{2.9}$$

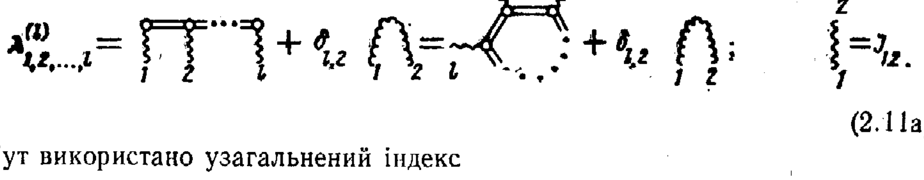
$${}^k\langle T_\tau \tilde{S}^{a_1}_{1\tau_1} \ldots \tilde{S}^{a_l}_{l\tau_l}\rangle^c_{\{\Gamma\}} = \Bigg($$  $$=$$

$$= {}^k\mathscr{F}^{(l)}\begin{pmatrix} a_1 & \ldots & a_l \\ 1\tau_1 & \ldots & l\tau_l \end{pmatrix}_{\{h,\Gamma\}}\Bigg)\Bigg|_{\substack{\Gamma^a_{n\tau}=\Gamma^a_n \\ h^a_n=0}}. \tag{2.10}$$

Надалі нам буде необхідне наступне позначення для l-хвосток:

$$\lambda^{(l)}_{1,2,\ldots,l} = \sum_{i_1} \ldots \sum_{i_l} J_{1i_1} \ldots J_{li_l} \langle T_\tau S_{i_1} \ldots S_{i_l}\rangle^c_{\{h,\Gamma\}} + \delta_{l,2} J_{12}. \tag{2.11}$$

У діаграмній формі (2.11) набуває вигляду



(2.11a)

Тут використано узагальнений індекс

$$i = {}^{a_i}_{n_i \tau_i}, \quad \sum_i (\ldots) = \sum_{n_i, a_i} \int_0^1 d\tau_i (\ldots). \tag{2.12}$$

У функціональній формі (2.1) має вигляд [29]

$$\mathscr{F}\{h, \Gamma\} = \ln \langle \exp [{}^k\mathscr{F}\{h, \Gamma + \sigma\}]\rangle_{\rho_0} = \ln \int D\sigma \exp [{}^k\mathscr{F}\{h, \Gamma + \sigma\}]\, \rho_0\{\sigma\}. \tag{2.13}$$

Тут введено гауссову функцію розподілу полів

$$\rho_0\{\sigma\} = (\det 2\pi J)^{-1/2} \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{na,n'b}\iint d\tau d\tau' (J^{-1})^{ab}_{n\tau,n'\tau'}\, \sigma^a_{n\tau}\sigma^b_{n'\tau'}\right], \tag{2.14}$$

$$(J^{-1})^{ab}_{n\tau,n'\tau'} = \delta(\tau - \tau')(J^{-1})^{ab}_{nn'}; \quad J^{ab}_{n\tau,n'\tau'} = \delta(\tau-\tau')\, J^{ab}_{nn'}.$$

Перетворення зсуву приводить до результату

$$\mathscr{F}\{h, \Gamma\} = -U\{\overline{S}\} + \bar{f}\{h, \bar{\varkappa}, \overline{S}\}, \quad \bar{\varkappa}_i = \Gamma_i + \bar{\lambda}_i; \tag{2.15}$$

$$U\{\overline{S}\} = \frac{1}{2}\sum_{i,j}\overline{S}_i J_{ij}\overline{S}_j, \quad \bar{\lambda} = \sum_j J_{ij}\overline{S}_j; \tag{2.16}$$

$$\bar{f}\{h, \bar{\varkappa}, \overline{S}\} = \ln \int \mathscr{D}\sigma\rho_0\{\sigma\} \exp [\mathscr{P}\{h, \bar{\varkappa}, \overline{S}, \sigma\}], \tag{2.17}$$

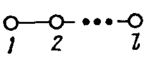
$$\mathscr{P}\{h, \bar{\varkappa}, \overline{S}, \sigma\} = {}^kF\{h, \bar{\varkappa} + \sigma\} - \sum_{na}\int d\tau \overline{S}^a_{n\tau}\sigma^a_{n\tau}.$$

У випадку $S_i = \langle T_\tau S_i\rangle$ діаграмна перебудова ряду для $\bar{f}\{h, \varkappa, \langle T_\tau\hat{S}\rangle\}$ приводить до зникнення діаграм типу однохвосток. При цьому одержуємо [29, 30]

$$\mathscr{F}\{h, \Gamma\} = -U\{\langle T_\tau S\rangle\} + f\{h, \varkappa\},$$

$$\bar{f}\{h, \varkappa, \langle T_\tau\hat{S}\rangle\} = f\{h, \varkappa\}, \quad \varkappa_i = \Gamma_i + \lambda_i, \quad \lambda_i = \lambda_i^{(1)}. \tag{2.18}$$

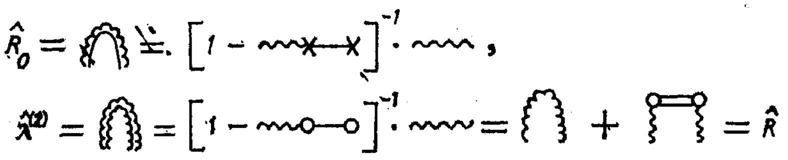
Тут $f\{h, \varkappa)$ — незвідна (за $\sim\!\sim$) частина ФВЕ. Введемо діаграмне позначення



$$= \frac{\delta}{\delta\varkappa_1}\frac{\delta}{\delta\varkappa_2}\cdots\frac{\delta}{\delta\varkappa_l} f\{h, \varkappa\}_0 = f^{(l)}_{1,\ldots,l}\{h, \varkappa\}. \tag{2.19}$$

За аналогією до випадку $l = 2$ функціонали ○—○-···-○ при $l \geqslant 3$ можна назвати незвідною за лінією $\sim\!\sim$ (незвідною за Ларкіним) частиною КФГ l-го порядку.

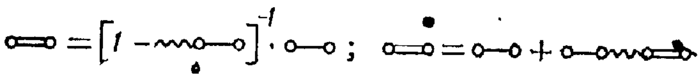
Ефективна взаємодія в наближенні хаотичних фаз (НХФ) $\hat{R}_0$ і повна ефективна взаємодія (повна двохвостка) мають вигляд



(2.20)

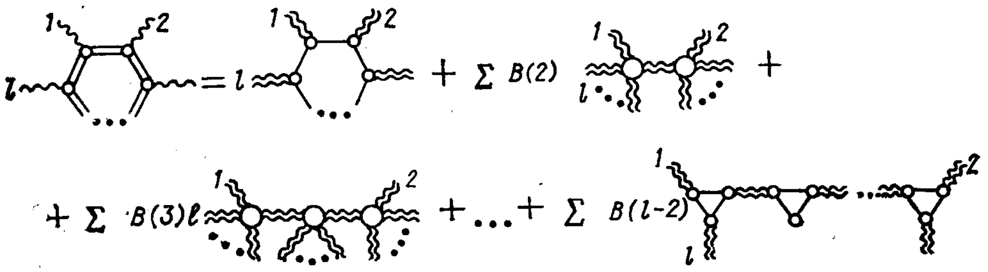
Використовуючи (2.7), функціонали КФГ можна записати через $f^{(l)}_{1,\ldots,l}\{h, \varkappa\}$. Зокрема, із (2.18) випливає

$$\langle T_\tau S_1\rangle = f_1^{(1)}\{h, \varkappa\} = \circ, \tag{2.21a}$$



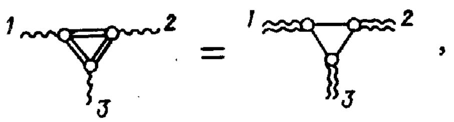
(2.21б)

Вирази для КФГ вищого порядку зручніше записати за допомогою l-хвосток. При цьому загальний вираз наступний:

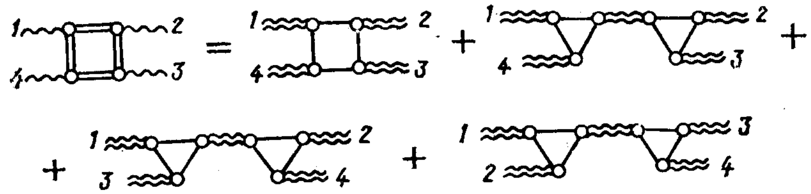


(2.22)

Тут блок ○ має максимальний порядок l, мінімальний – 3 ( ), а число зовнішніх ліній дорівнює l. При заданому числі блоків m $\Sigma B(m)$ (...) означає сумування за всіма розбиттями на m блоків і за всіма нееквівалентними перестановками зовнішніх індексів (1, ..., l). У випадку $l = 3$; 4 із 2.22) одержуємо



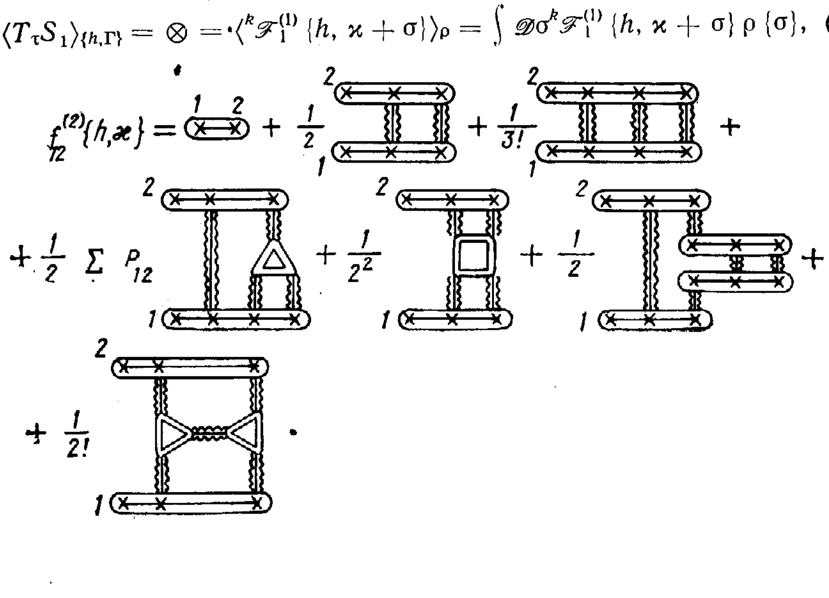
(2.23а)



(2.23б)

Функціонали $f^{(l)}_{1,\ldots,l}\{h, \varkappa\}$, $l \geqslant 1$, можна зобразити у вигляді ряду діаграм із звичайними блоками і також після сумування некомпактних діаграм у вигляді ряду лише компактних діаграм з потовщеними блоками [29]. Зокрема, для $f^{(1)}_{1}\{h, \varkappa\}$ і $f^{(2)}_{12}\{h, \varkappa\}$ одержуємо

$$\langle T_\tau S_1\rangle_{\{h,\Gamma\}} = \otimes = \langle {}^k\mathscr{F}^{(1)}_1\{h, \varkappa + \sigma\}\rangle_\rho = \int \mathscr{D}\sigma^k\mathscr{F}^{(1)}_1\{h, \varkappa + \sigma\}\,\rho\{\sigma\}, \quad (2.24)$$



(2.25)

Тут введено позначення для потовщеної (компактної) ефективної взаємодії

$$\hat{R} = \approx = \left[1 - \sim\!\sim (\times\!-\!-\!\times)\right]^{-1} \cdot \sim\!\sim . \qquad (2.26)$$

Потовщений блок зручно записати в інтегральній формі:

$$\circledast = \overset{1\quad 2 \qquad l}{(\times\!-\!\times\cdots-\!\times)} = \langle {}^{k}\mathscr{F}^{(l)}_{1,\ldots,l}\{h, \varkappa + \sigma\}\rangle =$$

$$= \int \mathscr{D}\sigma\, {}^{k}\mathscr{F}^{(l)}_{1,\ldots,l}\{h, \varkappa + \sigma\}\, \rho\{h, \varkappa, \sigma\}, \qquad (2.27)$$

$$\rho\{h, \varkappa, \sigma\} = \int \mathscr{D}\left(\frac{\zeta}{2\pi}\right) e^{i\zeta\sigma} M\{h, \varkappa, \zeta\}; \qquad (2.28)$$

$$M\{h, \varkappa, \zeta\} = \exp\left[\sum_{m=2}^{\infty} \sum_{1} \ldots \sum_{m} (-i\zeta_1) \ldots (-i\zeta_m) \frac{1}{m!} \lambda^{(m)}_{1,\ldots,m}\{h, \varkappa\}\right]. \qquad (2.29)$$

У диференціальній формі (2.27) має вигляд

$$\overset{1\quad 2 \qquad l}{(\times\!-\!\times\cdots-\!\times)} = E\left\{\frac{\delta}{\delta\varkappa}\right\} {}^{k}\mathscr{F}^{(l)}_{1,\ldots,l}\{h, \varkappa\}, \qquad (2.30а)$$

$$E\left\{\frac{\delta}{\delta\varkappa}\right\} = \exp\left[\sum_{m=2} \sum_{1} \ldots \sum_{m} \frac{1}{m!} \lambda^{(m)}_{1,\ldots,m}\{h, \varkappa\} \frac{\delta}{\delta\varkappa_1} \ldots \frac{\delta}{\delta\varkappa_m}\right]. \qquad (2.30б)$$

Внаслідок сумування звідних за блоком діаграм одержано вираз для ФВЕ [29] (див. також п. 3):

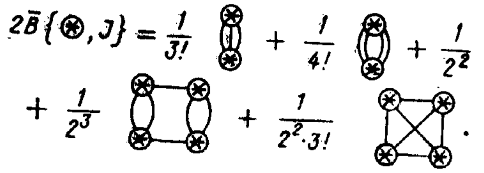
$$\mathscr{F}\{h, \Gamma\} = \langle {}^{k}\mathscr{F}^{(0)}\{h, \varkappa + \sigma\}\rangle_{\rho} + \overline{\Phi}\{h, \circledast\} -$$

$$- \circledast\!\frown\!\circledast - \sum_{m\geq 2} \frac{1}{m!} \overset{i_1 \qquad i_m}{(\times\!-\!\times\cdots-\!\times)}\, \lambda^{(m)}_{i_1,\ldots,i_m}\{h, \circledast\}. \qquad (2.31)$$

Тут функціонал $\overline{\Phi}\{h, \circledast\}$ містить лише незвідні (за «одягненим» блоком $\circledast$) діаграми [29, 30] і після сумування ланцюгових діаграм може бути записаний у вигляді

$$\overline{\Phi}\{h, \circledast\} = \frac{1}{2} \circledast\!\frown\!\circledast - \frac{1}{2} \mathrm{Sp}\ln\left[1 - \sim\!\sim(\times\!-\!-\!\times)\right] + \bar{B}\{h, \circledast\}. \qquad (2.32)$$

Функціонал $\bar{B}\{h, \circledast\}$ з точністю до трьох компактних петель набуває вигляду (взаємодія $\approx$ (2.26) позначена тут через «—»):



(2.33)

Для повного функціоналу $\overline{\Phi}\{h, \circledast\}$ виконуються тотожно співвідношення

$$\lambda^{(l)}_{i_1\ldots i_l}\{h, \Gamma\} = \overline{\Phi}^{(l)}_{i_1\ldots i_l}\{h, \circledast\} = \frac{\partial \overline{\Phi}\{h, \circledast\}}{\partial \underset{i_1 \quad i_2 \qquad i_l}{(\times\!-\!\times\cdots-\!\times)}}. \qquad (2.34)$$

З урахуванням тотожностей (2.34) ФВЕ у вигляді (2.31) набуває властивості стаціонарності за блоками $\overset{1\quad 2 \qquad l}{(\times\!-\!\times\cdots-\!\times)}$ ($l \geq 1$) чи за багатохвостками $\lambda^{(l)}_{i_1,\ldots,i_l}$ ($l \geqslant 1$) (з урахуванням залежності блока  від багатохвосток (див. (2.27) — (2.29))).

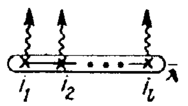
У наступному пункті (2.31) одержимо іншим способом. У п. 4 буде сформульована загальна методика одержання узгоджених наближень для термодинамічних і динамічних характеристик СМКД, яка грунтується на розрахунку ФВЕ. Модель Ізінга з унарним базисом в однопетлевому наближенні, в r_0^{-d} і з урахуванням сумування двохвосток досліджена в п. 5. Тут також наведено і проаналізовано результати числових досліджень вільної енергії і параметра порядку.

3. Одержання виразу для функціоналу вільної енергії

Тут коротко зупинимось на одержанні (2.31) іншим способом у порівнянні з працею [29]. Функціонал $\Phi\{\circledast, J\}$ згідно з [29] запишемо таким чином:

$$\overline{\Phi}_{\bar\lambda}\{h, \circledast\} = \ln \int \mathcal{D}\sigma \exp[\overline{\mathcal{P}}_{\bar\lambda}\{\circledast, \sigma\}], \tag{3.1}$$

$$\overline{\mathcal{P}}_{\bar\lambda}\{\circledast,\sigma\} = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l!} \sum_{\{i\}} JR$$

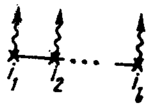


$$= \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l!} \sum_{\{i\}} JR\,\langle {}^k\mathcal{F}^{(l)}_{i_1\ldots i_l}\{h, \varkappa + \sigma'\}\rangle_{\rho_{\bar\lambda}} \sigma_{i_1} \ldots \sigma_{i_l}. \tag{3.2}$$

При діаграмних розкладах в (3.1) необхідно залишити лише незвідні діаграми, що здійснюється за допомогою оператора незвідності блока JR, який зануляє блок  у випадку, коли він виявиться звідним у даній діаграмі. Вважатимемо, що багатохвостки $\bar\lambda^{(l)}_{1,\ldots,l}$, які входять в $\rho_\lambda\{\sigma\} = \rho\{\sigma, \bar\lambda^{(2)}, \bar\lambda^{(3)}, \ldots\}$ (див. (2.28), (2.29)), є довільними функціоналами, а не обов'язково лише повними багатохвостками $\lambda^{(l)}_{1,\ldots,l}$. Зручно записати ФВЕ (2.13) у наступному вигляді:

$$\mathcal{F}\{h, \Gamma\} = {}^k\mathcal{F}\{h, \Gamma\} + \ln \int \mathcal{D}\sigma \exp[\mathcal{P}\{*, \sigma\}]\,\rho_0\{\sigma\}, \tag{3.3}$$

$$\mathcal{P}\{*,\sigma\} = \sum_{l\geqslant 1} \frac{1}{l!} \sum_{\{i\}}$$



$$= {}^k\mathcal{F}\{h, \varkappa + \sigma\} - {}^k\mathcal{F}\{h, \varkappa\} = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l!} \sum_{\{i\}} {}^k\mathcal{F}^{(l)}_{i_1,\ldots,i_l}\{h, \varkappa\}\,\sigma_{i_1} \ldots \sigma_{i_l}. \tag{3.4}$$

Після тотожних перетворень (3.3) набуває вигляду

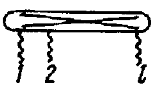
$$\mathcal{F}\{h, \Gamma\} = {}^k\mathcal{F}\{h, \Gamma\} + \overline{\Phi}_{\bar\lambda}\{h, \circledast\} + \ln\langle \exp[\mathcal{P}\{*, \sigma\} - \overline{\mathcal{P}}_{\bar\lambda}\{\circledast, \sigma\}]\rangle. \tag{3.5}$$

Тут

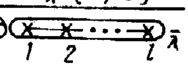
$$\langle(\ldots)\rangle_{\overline{\mathcal{P}}_{\bar\lambda}} = \frac{\langle \exp[\overline{\mathcal{P}}_{\bar\lambda}\{\circledast, \sigma\}](\ldots)\rangle_{\rho_0}}{\langle \exp[\overline{\mathcal{P}}_{\bar\lambda}\{\circledast, \sigma\}]\rangle_{\rho_0}}. \tag{3.6}$$

Розглянемо функціональні похідні

$$\bar\Phi^{(l)}_{1,\ldots,l}\{h,\circledast\} =$$



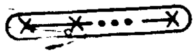
$$\stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \overline{\Phi}_{\bar\lambda}\{h,\circledast\}}{\partial}$$



$$= \langle JR\sigma_1, \ldots, \sigma_l\rangle_{\overline{\mathcal{P}}_{\bar\lambda}} = \langle \sigma_1, \ldots, \sigma_l\rangle^c_{\overline{\mathcal{P}}_{\bar\lambda}}. \tag{3.7}$$

Останню рівність у (3.7) легко доказати [29]. Введемо функціонали розподілу $\rho_{\overline{\Phi}}\{\sigma\} = \rho\{\sigma, \overline{\Phi}^{(2)}, \overline{\Phi}^{(3)}, \ldots\}$. Тепер легко одержати співвідношення

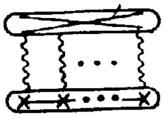
$$\langle \sigma_1, \ldots, \sigma_l \rangle^c_{\mathscr{P}_{\bar\lambda}} = \langle \sigma_1, \ldots, \sigma_l \rangle^c_{\rho_{\overline{\Phi}}}. \tag{3.8}$$

З (3.7) можна одержати замкнуту систему рівнянь для $\bar\lambda^{(l)}_{1,\ldots,l}$, якщо вимагати, щоб $\bar\lambda^{(l)}_{1,\ldots,l}$ була рівна частинній похідній $\overline{\Phi}_{\bar\lambda}$ за , тобто

$$\bar\lambda^{(l)}_{1,\ldots,l} \equiv \overline{\Phi}^{(l)}_{1,\ldots,l}\{h, \circledast\} = \langle \sigma_1, \ldots, \sigma_l \rangle^c_{\mathscr{P}_{\bar\lambda}}. \tag{3.9}$$

Система (3.9) збігається з системою рівнянь для повних багатохвосток (див. (2.34)). Тобто із (3.7) у припущенні існування єдиного розв'язку випливає, що $\bar\lambda^{(l)}_{1,\ldots,l} = \lambda^{(l)}_{1,\ldots,l}$.

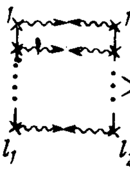
Розкладаючи середнє під знаком логарифма в (3.5) в ряд за кумулянтами і враховуючи (3.7) та (3.8), легко одержати

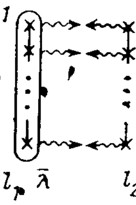
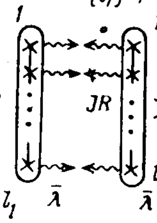
$$\mathscr{F}\{h, \Gamma\} = \langle {}^k\mathscr{F}\{h, \Gamma + \sigma\}\rangle_{\rho_{\overline{\Phi}}} + \overline{\Phi}_{\bar\lambda}\{h, \circledast\} - \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l!}$$  $$+$$

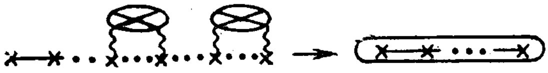
$$+ \sum_{l=2}^{\infty} \frac{1}{l!} \langle [\mathscr{P}\{*, \sigma\} - \overline{\mathscr{P}}\{\circledast, \sigma\}]^l \rangle^c_{\mathscr{P}_{\bar\lambda}}. \tag{3.10}$$

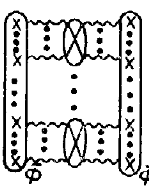
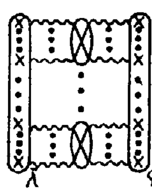
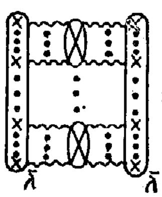
Тепер докажемо, що кожен член ряду за l в останньому доданку (3.10) при виконанні рівності (3.9) тотожно дорівнює нулеві.

Розглянемо схематично доданок з $l = 2$

$$X_2 = \langle [\mathscr{P}\{*, \sigma\} - \overline{\mathscr{P}}_{\bar\lambda}\{*, \sigma\}]^2 \rangle^c_{\mathscr{P}_{\bar\lambda}} = \sum_{\{l_i\}=1}^{\infty} \frac{1}{l_1!} \frac{1}{l_2!} \Big[\langle$$  $$\rangle^c_{\rho_{\overline{\Phi}}} -$$

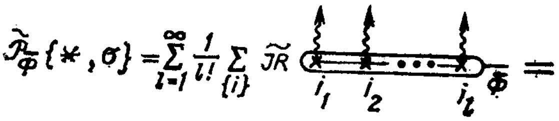
$$-2 \langle JR$$  $$\rangle^c_{\rho_{\overline{\Phi}}} + \langle JR$$  $$\rangle^c_{\rho_{\overline{\Phi}}} \Big] \tag{3.11}$$

При інтегруванні за $\{\sigma\}$ з $\rho_{\overline{\Phi}}\{\sigma\}$ в (3.11) необхідно залишити лише зв'язані діаграми і незвідні за блоком $\circledast_{\bar\lambda}$ (внаслідок дії оператора JR). Частина багатохвосток буде відсумована, що приведе до одягання базисних блоків, тобто $\sum$ . У результаті формула (3.11) має наступний вигляд (схематично):

$$X_2 = \sum$$  $$-2\sum$$  $$+ \sum$$  $$=$$

$$= \langle [\overline{\mathscr{P}}_{\overline{\Phi}}\{\circledast_{\overline{\Phi}}, \sigma\} - \overline{\mathscr{P}}_{\bar\lambda}\{\circledast_{\bar\lambda}, \sigma\}]^2 \rangle^c_{\rho_{\overline{\Phi}}}. \tag{3.12}$$

Числові коефіцієнти перед кожною конкретною діаграмою визначаються за правилами, які сформульовані у праці [29]. Зазначимо, що з (3.12) введено позначення

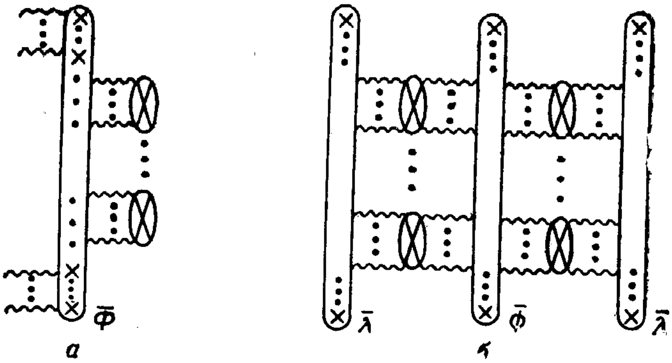


$$= \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l!} \sum_{\{i\}} \widetilde{JR} \, \langle {}^{k}\mathscr{F}^{(l)}_{i_1 \ldots i_l} \{h, \varkappa + \sigma'\} \rangle_{\rho_{\overline{\Phi}}} \sigma_{i_1} \ldots \sigma_{i_l}. \qquad (3.13)$$

Оператор $\widetilde{JR}$ (3.13) зануляє діаграми, в які входить блок

з «багатохвостками» $\phi^{(l)}_{1,\ldots,l}$ = , приєднаними лише до цього блока

(наприклад, блок (3.14а)):



(3.14а,б)

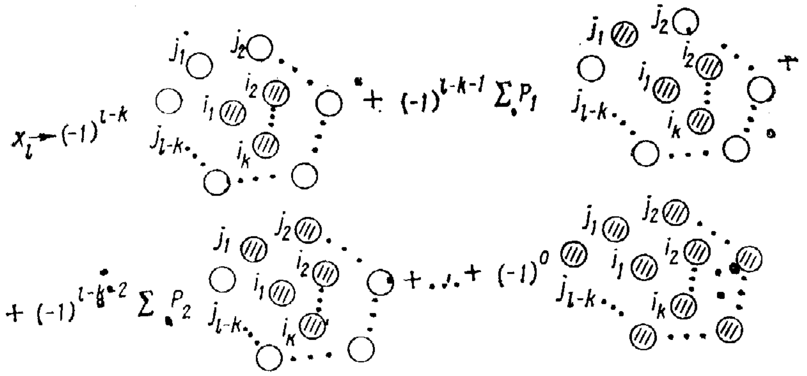
Такі діаграми вже відсумовано, що і привело до одягання базисних блоків. У той же час при $l \geqslant 3$ можуть залишатись також діаграми, в яких блок $\overline{\Phi}$ є звідним. Як приклад (див. (3.14б)) наведена такого типу діаграма з X_3. У загальному випадку для всіх l, як і для $l = 2$ див. (3.12)), можна записати вираз

$$X_l = \langle [\mathscr{P}\{*, \sigma\} - \overline{\mathscr{P}}_{\bar{\lambda}} \{\otimes \bar{\lambda}, \sigma\}]^l \rangle^c_{\rho_{\overline{\Phi}}} \equiv \langle [\tilde{\mathscr{P}}_{\overline{\Phi}} \{\otimes, \sigma\} - \overline{\mathscr{P}}_{\bar{\lambda}} \{\otimes, \bar{\lambda}\, \sigma\}]^l \rangle^c_{\rho_{\overline{\Phi}}}. \qquad (3.15)$$

У випадку виконання співвідношення (3.9), як видно з діаграмної форми (3.12), має місце рівність $X_2 \equiv 0$. Проте при $l \geqslant 3$ рівність не є очевидною, оскільки в ряди $\tilde{\mathscr{P}}_{\overline{\Phi}}$ і $\overline{\mathscr{P}}_{\bar{\lambda}}$ входять оператори незвідності різного типу $\widetilde{JR}$ і JR. Покажемо, що і при довільному l у випадку (3.9) має місце рівність $X_l \equiv 0$. Введемо наступні умовні позначення для блоків:

$$\bar{\lambda} = O_l \,; \qquad \overline{\Phi} = ⊘_{l'} \,. \qquad (3.16)$$

Багатохвостки , які з'єднують блоки типу (3.16), не будемо явно виписувати, оскільки нас цікавитиме лише симетрія діаграм. Проведемо усереднення за $\rho_{\overline{\Phi}}$ в (3.15) і розгляньмо з X_l певний клас звідних за блоком діаграм, які відрізняються одна від одної лише заміною світлих блоків на «темні» $\bigcirc \to \circledcirc$ і навпаки. Вважатимемо, що в даному класі діаграм є K звідних «темних» блоків. Ці місця «світлі» блоки займати не можуть внаслідок дії оператора JR (див. (3.2)). Тоді сукупність діаграм даного класу з X_l має вигляд



(3.17)

Тут ΣP_m означає сумування за всіма можливими перестановками «темних» блоків за $(l-k)$ блочними місцями. У випадку виконання співвідношення (3.9) «темні» та «світлі» блоки стануть рівними один одному $(\circledcirc \equiv \bigcirc)$ і всі діаграми даного класу співпадають між собою. Сума коефіцієнтів при діаграмах типу (3.17) рівна

$$X_l \to (-1)^{l-k}[1+(-1)^1 C^1_{l-k} + (-1)^2 C^2_{l-k} + \cdots + (-1)^{l-k} C^{l-k}_{l-k}] =$$
$$= (-1)^{l-k}(1-1)^{l-k} \equiv 0. \quad (3.18)$$

Таким чином, виконання співвідношення (3.9) приводить до того, що сума діаграм із звідними «темними» блоками зануляється. Це означає, що в (3.15) оператор $\widetilde{JR}$, який входить в $\mathscr{F}_{\overline{\Phi}}$, можна замінити оператором повної незвідності JR. Звідси і випливає внаслідок $\overline{\lambda}^{(l)} = \overline{\Phi}^{(l)}$ (див. (3.9)) тотожність $X_l \equiv 0$.

В силу (3.10) випливає вираз для ФВЕ (2.31), який у праці [29] одержано іншим способом:

$$\mathscr{F}\{h, \Gamma\} \equiv \langle {}^k\mathscr{F}\{h, \Gamma+\sigma\}\rangle_{\rho_\lambda} + \overline{\Phi}_\lambda\{h, \circledast\} - \sum_{l=1}^{\infty}\frac{1}{l!}\sum_{\{i\}}\langle \mathscr{F}^{(l)}_{i_1 \ldots i_l}\{h, \varkappa +$$
$$+\sigma\}\rangle_{\rho_\lambda}\lambda^{(l)}_{i_1 \ldots i_l}. \quad (3.19)$$

В (3.19) ми врахували, що $\overline{\lambda}^{(l)} \equiv \lambda^{(l)}$. З урахуванням (3.9) вираз (3.19) для ФВЕ набуває властивості стаціонарності [29]:

$$\frac{\partial \mathscr{F}\{h, \Gamma\}}{\partial(\underset{1}{\times}\!-\!\underset{2}{\times}\cdots\!-\!\underset{l}{\times})} = 0; \qquad \frac{\partial \mathscr{F}\{h, \Gamma\}}{\partial \lambda^{(l)}_{1,\ldots,l}} = 0; \quad l = 1 \div \infty. \quad (3.20)$$

Властивість стаціонарності (3.20) виконується і в тому випадку, якщо ряд за $\lambda^{(l)}$ в (3.19), в тому числі і в $\rho\{\sigma, \lambda^{(2)}, \lambda^{(3)}, \ldots\}$, обмежити довільною верхньою границею ($M \geqslant 1$). Таке обмеження необхідне для наближеного розрахунку ФВЕ і природним чином вводиться при класифікації наближень для $\overline{\Phi}_\lambda\{h, \circledast\}$ за кількістю петель. У попередньому пункті зазначено, що при наближеному розрахунку $\overline{\Phi}_\lambda\{h, \circledast\}$ розв'язок (3.9) (чи еквівалентний (2.33)) дає так звані затравочні багатохвостки, які можуть не співпадати з повними, розрахованими на основі співвідношень (2.22).

4. Формулювання узгоджених наближень

Нехай ми знайшли в певному наближенні незвідний функціонал $f\{h, \varkappa\}$ (див. (2.18)). Тоді використання тотожностей (2.7) приводить до співвідношень ((2.21) і (2.22) для функціоналів КФГ. Зазначимо, що в функціонал (2.22) l-го порядку ($l \geqslant 2$) входять похідні $f^{(m)}_{1,\ldots,m}\{h, \varkappa\}$ порядку $m = 2 \div l$. Наближення, запропоновані для функціоналів ВЕ і КФГ на основі незвідного функціоналу $f\{h, \varkappa\}$ і співвідношень (2.21) і (2.22), називатимемо узгодженими. Така процедура побудови узгоджених наближень зручна тим, що у випадку фазового переходу (ФП) другого роду деякі компоненти узагальнених статичних сприйнятливостей ($\{q_i\} = 0$, $\{\omega_{n_i}\} = 0$) всіх порядків будуть мати розбіжності при одній і тій же температурі — температурі ФП T_c. Вона визначається полюсами статичної двохвостки $\ldots$ (див. (2.20)), що входить в (2.22) як співмножник. Аналогічне рівняння для T_c можна одержати, прирівнюючи до нуля коефіцієнт при m^2 (m — параметр порядку) в розкладі вільної енергії за m.

Нехай, наприклад, в системі, що розглядається, має місце ФП другого роду з параметром порядку m^z. Тоді із (2.21а) шляхом розкладу у ряд за m^z ($m^z = \langle S^z \rangle$) одержуємо наступну систему рівнянь (тут і надалі при записі рівняння для T_c температуру будемо явно виділяти):

$$1 - \sum_{a_1} f^{(2)za_1}({}^0\beta_c \varkappa_e, {}^0\beta_c)\, J^{a_1 z} = 0, \quad {}^0\beta_c = 1/{}^0T_c,$$
$$m^a = f^{(1)a}({}^0\beta_c \varkappa_c, {}^0\beta_c), \quad a \neq z, \; m^a = \langle S^a \rangle; \tag{4.1}$$

$$\varkappa^a = \Gamma^a + \sum_{a_1 \neq z} J^{aa_1} m^{a_1}, \quad J^{aa_1} = J^{aa_1}(q)\big|_{q=0},$$
$$f^{(2)ab} = f^{(2)ab}(q, \omega_n)\big|_{\substack{q=0 \\ \omega_n=0}}. \tag{4.2}$$

Перше рівняння системи (4.1) є фактично коефіцієнтом при $(m^z)^2$ в розкладі за m^z вільної енергії (2.18). Якщо при отриманні рівнянь (2.21а) ми використали б незалежну методику (наприклад, проводили б часткове сумування діаграмного ряду для $\langle T_\tau S_1^a \rangle$ і знайшли б функціональну залежність $\langle T_\tau S_1^a \rangle = S_1^a \{h, \varkappa\}$), то замість (4.2) одержали б:

$$1 - \sum_{a_1} S^{(1)za_1}({}^1\beta_c \varkappa_c, {}^1\beta_c)\, J^{a_1 z} = 0,$$
$$m^a = S^a({}^1\beta_c \varkappa_c, {}^1\beta_c), \quad a \neq z. \tag{4.3}$$

Якщо $S_1\{h, \varkappa\} \neq f_1^{(1)}\{h, \varkappa\}$, то температури ${}^0T_c$ і ${}'T_c$ не співпадуть між собою.

Для статичних кумулянтних функцій Гріна $\mathscr{L}^{ab}$ має місце вираз

$$\hat{\mathscr{L}}(q, \omega_n)\big|_{q,\omega_n=0} = \hat{\mathscr{L}} = [1 - MJ]^{-1} M = (\langle T_\tau \tilde{\tilde{S}}^a_{n\tau} \tilde{\tilde{S}}^b_{n\tau'} \rangle)_{(q\omega_n)}\big|_{q,\omega_n=0},$$
$$M^{ab} = M^{ab}\{q, \omega_n\}\big|_{q,\omega_n=0}, \quad J^{ab} = J^{ab}(q)\big|_{q=0}. \tag{4.4}$$

Статична сприйнятливість досліджуваної системи пропорційна функції $\mathscr{L}^{zz}$, яка містить в знаменнику $1 - \sum_a M^{za} J^{az}$. Якщо визначити ${}^2T_c$ як точку розбіжності $\mathscr{L}^{zz}$, то прийдемо до системи рівнянь

$$1 - \sum_{a_1} M^{za_1}({}^2\beta_c \varkappa_c, {}^2\beta_c)\, J^{a_1 z} = 0,$$
$$m^a = S^a({}^2\beta_c \varkappa_c, {}^2\beta_c), \quad a \neq z. \tag{4.5}$$

Порівнюючи (4.1) і (4.5), легко бачити, що лише у випадку виконання співвідношень

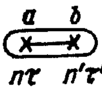
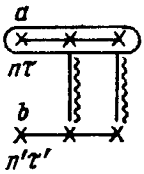
$$S_i\{h, \varkappa\} = \frac{\delta}{\delta \varkappa_i} f\{h, \varkappa\}; \quad M_{ij}\{h, \varkappa\} = \frac{\delta}{\delta \varkappa_i} \frac{\delta}{\delta \varkappa_j} f\{h, \varkappa\} \tag{4.6}$$

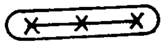
температури ${}^0T_c$, ${}^1T_c$, ${}^2T_c$, а також результати розрахунку m^a, $\mathscr{L}^{ab}$, одержані в рамках деяких наближень для $f\{h, \varkappa\}$, $S_i\{h, \varkappa\}$ та $M_{ij}\{h, \varkappa\}$, співпадають. Якщо при розрахунку m_i та M_{ij} скористатися методикою, описаною вище (див. (2.22)), то співвідношення (4.6) виконуються і вирази для m_i та $\mathscr{L}_{ij}$ узгоджені. Аналогічний висновок належить функціям Гріна вищих порядків $(l \geqslant 3)$.

Нехай ми для $f\{h, \varkappa\}$, $< T_\tau S^a_{n\tau} > \{h, \varkappa\}$ та $\hat{M}\{h, \varkappa\}$ використаємо звичайний розклад за петлями. Тоді, як зазначалось в [29, 30], внаслідок того що диференціювання $f\{h, \varkappa\}$ за $\varkappa_i$ лише додає зовнішні вершини, не змінюючи числа петель у діаграмах, співвідношення (4.6) виконується. Отже, вирази для $f\{h, \varkappa\}$, $\langle T_\tau S_i\rangle$ та $M_{ij}\{h, \varkappa\}$ узгоджені. Якщо брати для $\hat{M}\{h, \varkappa\}$ компактний розклад за петлями, то, як вказано в [29, 30], наближення для $\langle T_\tau S^a_{n\tau} > \{h, \varkappa\}$ і $\hat{M}\{h, \varkappa\}$ не будуть узгодженими.

Тепер ще коротко для прикладу зупинимось на наближенні для $\langle T_\tau \hat{S}_i\rangle$ з точністю до двохвосток, взявши для $\lambda^{(2)}$ НХФ (⩳ → ⩳). Тоді, використовуючи (2.24), можно записати

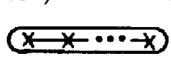
$$\langle T_\tau S^a_{n\tau}\rangle = \underset{n\tau\rho_2}{\overset{a}{\otimes}}\,, \tag{4.7а}$$

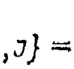
$$\frac{\partial}{\partial \varkappa^b_{n'\tau'}}\langle T_\tau S^a_{n\tau}\rangle = M^{ab}_{n\tau, n'\tau'} =$$  $$+\ \frac{1}{2}$$  (4.7б)

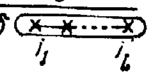
Вирази (4.7) будуть узгодженими. Очевидно, (4.7б) не співпадає з компактним НХФ (див. (2.25)), коли обмежуватися лише першим доданком у (4.7б). Проте, наприклад, у випадку ІМКД у парафазі  $_{\rho_2} = 0$ і вираз (4.7б) співпадає з компактним НХФ.

Тепер розглянемо наближення для $\mathscr{F}\{h, \Gamma\}$ (див. (2.31), (2.18)), а отже і для $\lambda^{(l)}_{1,\ldots,l}, \ldots \{h, \Gamma\}$ (2.22), яке будується на основі наближеного виразу для $\overline{\Phi}\{\circledast, J\}$ (див. (2.31), (2.32)). Багатохвостки $\bar{\lambda}^{(l)}\{\circledast, J\}$, одержані з $\overline{\Phi}\{\circledast, J\}$ на основі співвідношень (2.33), називатимемо затравочними. Завжди виконується співвідношення

$$\bar{\lambda}\{h, \Gamma\} = \frac{\delta}{\delta\circledast}\overline{\Phi}\{\circledast, J\} = \circledast = \langle {}^k\mathscr{F}^{(1)}_1\{h, \varkappa + \sigma\}\rangle_\rho = \lambda^{(1)}_1\{h, \Gamma\}. \tag{4.8}$$

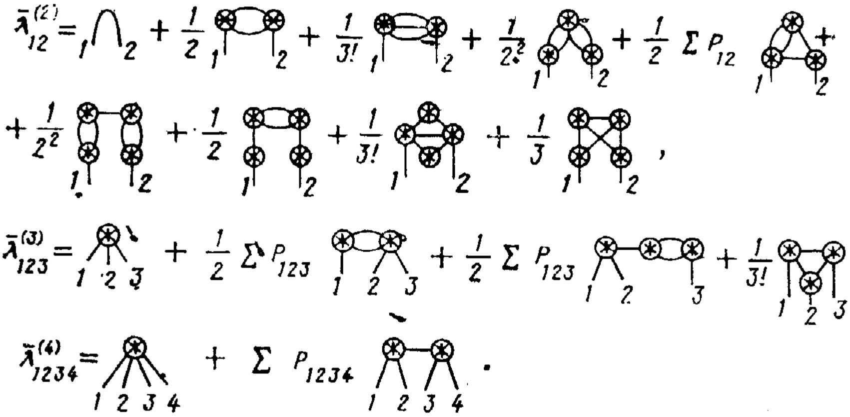
Вираз (4.8) співпадає з (2.24), тобто затравочна однохвостка завжди співпадає з повною. Зазначимо, що при деяких наближеннях для функціоналу $\overline{\Phi}\{\circledast, J\}$ можливий збіг затравочних і повних l-хвосток. Для наглядної ілюстрації розгляньмо наближення для $\overline{B}\{\circledast, J\}$ (2.32) з точністю до трьох петель. Тоді в $\overline{\Phi}\{\circledast, J\}$ не будуть входити блоки  з числом вершин більше, ніж чотири. З (2.32) і (2.33) для затравочних l-хвосток при $l \geqslant 2$ випливають співвідношення

$$\bar{\lambda}^{(l)}_{i_1,\ldots,i_l}\{\circledast, J\} = i_1$$  $$i_l\,\delta_{l,2} + \bar{B}^{(l)}_{i_1,\ldots,i_l}\{\circledast, J\},$$

$$\bar{B}^{(l)}_{i_1,\ldots,i_l}\{\circledast, J\} = \frac{\delta}{\delta}$$  $$\bar{B}\{\circledast, J\}. \tag{4.9}$$

Підставляючи в (4.9) вираз (2.32), одержимо систему рівнянь для $\bar{\lambda}_1^{(1)}$, $\bar{\lambda}_{12}^{(2)}$, $\bar{\lambda}_{123}^{(3)}$, $\bar{\lambda}_{1234}^{(4)}$ з точністю до трьох петель:

$$\bar{\lambda}_1^{(2)} = \sim\!\sim \otimes = \lambda_1^{(1)}; \quad \lambda^{(1)a} = \sum_b J^{ab}(\vec{q} \to 0) \langle {}^k\mathcal{F}^{(1)a}\{h, \varkappa + \sigma\}\rangle_{\rho},$$



(4.10)

Явний вигляд «одягнених» блоків наведено у п. 2 (див. (2.27) — (2.29)) із заміною $\lambda_{i_1,\ldots,i_l}^{(l)} \to \bar{\lambda}_{i_1,\ldots,i_l}^{(l)}$. У загальному випадку для однорідного поля ($h_n^a = 0$, $\Gamma_{n\tau}^a = \Gamma^a$) (4.10)) являє собою систему функціональних рівнянь відносно затравочних багатохвосток:

$$\lambda^a\{\Gamma\} = \sum_b J^{ab}\langle S^b\rangle, \quad \bar{\lambda}\left(\begin{matrix} a_1 & a_2 \\ n_1\tau_1 & n_2\tau_2 \end{matrix}\middle|\{\Gamma\}\right),$$
$$\bar{\lambda}\left(\begin{matrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ n_1\tau_1 & n_2\tau_2 & n_3\tau_3 \end{matrix}\middle|\{\Gamma\}\right), \quad \bar{\lambda}\left(\begin{matrix} a_1 & a_2 & a_3 & a_4 \\ n_1\tau_1 & n_2\tau_2 & n_3\tau_3 & n_4\tau_4 \end{matrix}\middle|\{\Gamma\}\right). \tag{4.11}$$

У випадку моделі Ізінга з далекодією (${}^kV\{S\} = 0$, $S_n^a = \delta_{az}S_n^z$, ${}^k\mathcal{F}_{1,\ldots,l}^{(l)} = \delta_{12}\ldots\delta_{1l}\mathcal{F}_1^{(l)}$) (4.10) зводиться до системи трансцендентних рівнянь відносно невідомих

$$\lambda_1^{(1)} = J(q \to 0)\langle S^z\rangle; \quad \bar{\lambda}_1^{(2)}, \ \lambda_1^{(3)}, \ \bar{\lambda}_1^{(4)}. \tag{4.12}$$

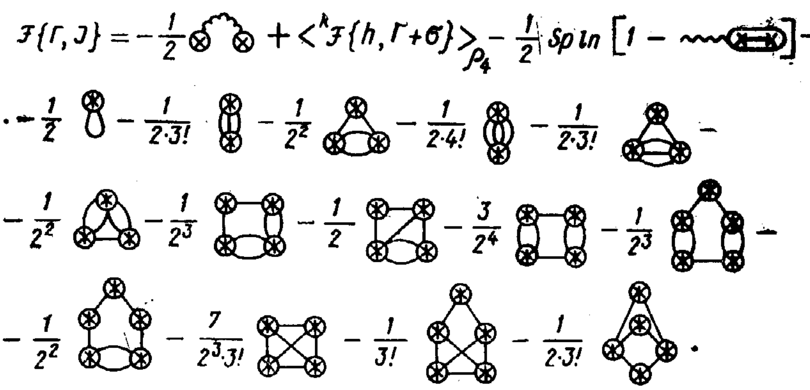
Для ІМКД інтеграли (2.27) мають кратність N (N — число вузлів у гратці). Проте, використовуючи для функціоналу ${}^k\mathcal{F}\{\varkappa + \sigma\}$ кластерні розклади за змінним σ_i, інтеграли в (2.27) можуть бути зведені до одно-двократних і т. ін. Ця процедура в наближенні $m = 2$ розглядалась у праці [30].

Нарешті, для СМКД виникають континуальні інтеграли за змінними $\sigma_{n\tau}^a$. Тут також можуть бути виділені ізінгівські флуктуації за змінними σ_n^a ($\omega_n = 0$). Врахування таких флуктуацій на прикладі квантових моделей з унарним базисом буде здійснено в окремій праці. У загальному випадку для СМД необхідні затравочні багатохвостки $\bar{\lambda}\left(\begin{matrix} a_1 & \ldots & a_l \\ 1\tau_1 & & l\tau_l \end{matrix}\middle|\{\Gamma\}\right)$, які залежні, як в ІМД, лише від одного вузольного індексу $l = 1$. Проте при цьому в (2.27) залишаються континуальні інтеграли за $\sigma_{1\tau}^a$ за рахунок τ.

Розв'язуючи систему (4.10), одержимо лише спостережувані величини

$$m^a = \langle S_n^a\rangle = \langle T_\tau S_{n\tau}^a\rangle_{\{h,\Gamma\}}\Big|_{\substack{\Gamma_{n\tau}^a = \Gamma_n^a \\ h_n^a = 0}}. \tag{4.13}$$

Для знаходження вільної енергії використаємо вираз (2.31), який з урахуванням явного вигляду (4.10) для затравочних l-хвосток з точністю до трьох петель матиме вигляд

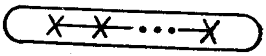


(4.14)

Для отримання КФГ l-го порядку на основі (2.22) необхідно обчислювати похідні за $\varkappa_i$ від функціоналу $f\{h, \varkappa\}$ (див. (2.18)). У результаті виникають похідні від затравочних багатохвосток

$$\bar{\lambda}^{(l)}_{1,\ldots,l;i_1,\ldots,i_m} = \frac{\delta}{\delta \varkappa_{i_m}} \cdots \frac{\delta}{\delta \varkappa_{i_1}} \bar{\lambda}^{(l)}_{1,\ldots,l}. \tag{4.15}$$

Рівняння для них можна одержати, диференціюючи за $\varkappa_i$ систему (4.10). Для розрахунку парної КФГ необхідно знати лише першу похідну $\bar{\lambda}^{(l)}_{1,\ldots,l,i}$. У наступному пункті детально зупинимося на наближенні для $\bar{\Phi}\{\otimes, J\}$ з точністю до однієї петлі, що відповідає врахуванню у виразах (4.14) перших чотирьох доданків.

Зауважимо, що в принципі можлива побудова наближень для функціоналу $\bar{B}\{\otimes, J\}$ на основі вибіркового сумування певного класу діаграм [23]. У цьому випадку в $\bar{B}\{\otimes, J\}$ будуть входити блоки  з довільним числом вершин «l». Тому обриву рядів за затравочними багатохвостками не буде і ми не зможемо використати для розрахунку фізичних характеристик методику, сформульовану в даному пункті.

Як зазначено в [29, 30], точний ФВЕ задовольняє тотожність

$$\frac{\partial}{\partial J_{ij}} \mathcal{F}\{h, \Gamma\} = \frac{\partial}{\partial \Gamma_i} \frac{\partial}{\partial \Gamma_j} \mathcal{F}\{h, \Gamma\} + \frac{\partial}{\partial \Gamma_i} \mathcal{F}\{h, \Gamma\} \frac{\partial}{\partial \Gamma_j} \mathcal{F}\{h, \Gamma\}, \tag{4.16}$$

яка за початкової умови $\mathcal{F}\{h, \Gamma\}|_{J=0} = {}^k\mathcal{F}\{h, \Gamma\}$ може використовуватись як рівняння в частинних похідних для знаходження ФВЕ [29]. Проте для наближень для $\mathcal{F}\{h, \Gamma\}$, що нами розглядаються, тотожність (4.16) може не виконуватись. Зокрема, вона не виконується при побудові наближень для $f\{h, \varkappa\}$ за числом петель (виключаючи, проте, однопетлеве наближення в парафазі для моделі Ізінга та моделі Ізінга в поперечному полі). Звичайно, для вказаних наближень з певним ступенем точності за R_{ij} (див. (2.20)) чи J_{ij} (4.16) буде задовольнятись [29].

5. Розрахунок термодинамічних характеристик ізінгівських моделей з базисним гамільтоніаном середнього поля

У даному пункті розглянемо ІМД і обмежимося для $\mathcal{F}\{\Gamma\}$ наближенням з точністю до двохвосток (чотири перших доданки в (4.14)). Зазначимо, що абревіатуру ІМД вживатимемо і у випадку наближення близьких сусідів (НБС) для короткодіючих взаємодій. Запишемо вираз для вільної енергії на один вузол $\varphi(t)$ для досліджуваної моделі у вигляді

$$\varphi(t) = \frac{-T}{J} \frac{1}{N} \mathcal{F}(\Gamma) = \frac{1}{2} m^2 - t \langle {}^0\mathcal{F}^0 (\tilde{\varkappa}_\xi/t) \rangle -$$
$$- \frac{t}{2} \int_{\zeta_0}^{\infty} d\zeta/\zeta A(\zeta) + \frac{t}{2} \bar{\lambda}^{(2)}(t) \langle {}^0\mathcal{F}^{(2)} (\tilde{\varkappa}_\xi/t) \rangle. \tag{5.1}$$

Тут використано такі перетворення і позначення:

$$\langle {}^0\mathcal{F}^{(l)}(\tilde{\varkappa}_\xi/t)\rangle_\xi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\xi\, {}^0\mathcal{F}^{(l)}(\tilde{\varkappa}_\xi/t) \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right); \tag{5.2а}$$

$$A(\zeta) = \frac{1}{N} \sum_{q} \frac{j(q)}{\zeta - j(q)}, \quad t = T/J, \; j(q) = J(q)/J; \tag{5.2б}$$

$$\tilde{\varkappa} = t\varkappa = \Gamma/J + m, \; \tilde{\varkappa}_\xi = \tilde{\varkappa} + \xi \sqrt{\bar{\lambda}^{(2)}(t)},$$

$$\lambda^{(1)}(t) = \lambda_1^{(1)}(\varkappa), \; \bar{\lambda}^{(2)}(t) = \bar{\lambda}_{11}^{(2)}(\varkappa), \; \zeta_0 = t/\langle {}^0\mathcal{F}^{(2)}(\tilde{\varkappa}_\xi/t)\rangle_\xi. \tag{5.3}$$

Вираз для ${}^0\mathcal{F}^{(0)}(x)$ для довільного спіна має вигляд

$${}^0\mathcal{F}^{(0)}(x) = \ln\{\operatorname{sh}[(S+1)x]\operatorname{sh}^{-1}(x)\}_{S=1} \to \ln[2\operatorname{ch}(x)]. \tag{5.4}$$

Зазначимо, що в (4.10) слід обмежитися лише першими двома рівняннями. Внаслідок одержуємо систему рівнянь для невідомих $m(t)$ і $\bar{\lambda}^{(2)}(t)$:

$$m(t) = \langle {}^0\mathcal{F}^{(1)}(\tilde{\varkappa}_\xi/t)\rangle_\xi; \tag{5.5а}$$

$$\bar{\lambda}^{(2)}(t)\langle {}^0\mathcal{F}^{(2)}(\tilde{\varkappa}_\xi/t)\rangle_\xi = A\left(\frac{t}{\langle {}^0\mathcal{F}^{(2)}(\tilde{\varkappa}_\xi/t)\rangle_\xi}\right). \tag{5.5б}$$

Тут вираз для $A(x)$ дається формулою (5.2б), а фур'є-образ двохвостки $\bar{\lambda}_{nn'}^{(2)}(t)$ має вигляд

$$\bar{\lambda}^{(2)}(q, t) = j(q)[t - j(q)\langle {}^0\mathcal{F}^{(2)}(\tilde{\varkappa}_\xi/t)\rangle_\xi]^{-1} \equiv \tilde{R}(q, t). \tag{5.6}$$

Для визначення сприйнятливості ($\chi(q) \sim \mathcal{L}(q)$) ІМД необхідно розрахувати незвідну частину $M(q, t)$. Диференціюючи вираз для $m(t)$ (див. (4.7а), (4.7б)), одержимо

$$M(q, t) = \langle {}^0\mathcal{F}^{(2)}(\tilde{\varkappa}_\xi/t)\rangle_\xi + \frac{1}{2}\langle {}^0\mathcal{F}^{(3)}(\tilde{\varkappa}_\xi/t)\rangle_\xi Y(q, t); \tag{5.7а}$$

$$\mathcal{L}(q, t) = \frac{tM(q, t)}{t - j(q)M(q, t)}, \; R(q, t) = \frac{j(q)}{t - j(q)M(q, t)} = \lambda^{(2)}(q, t). \tag{5.7б}$$

Тут введено функцію

$$Y(q, t) = (Y(1-2))_{(q)} = \left(\frac{\delta}{\delta\varkappa_2}\bar{\lambda}_{11}^{(2)}\{\varkappa\}\right)_{(q)} =$$

$$= \left[1 - \frac{1}{2}\langle {}^0\mathcal{F}^{(4)}(\tilde{\varkappa}_\xi/t)\rangle_\xi B(q, t)\right]^{-1}\langle {}^0\mathcal{F}^{(3)}(\tilde{\varkappa}_\xi/t)\rangle_\xi B(q, t), \tag{5.8}$$

де

$$B(q, t) = \frac{1}{N}\sum_{q'} \bar{\lambda}^{(2)}(q', t)\bar{\lambda}^{(2)}(q - q', t). \tag{5.9}$$

У парафазі ($t \geqslant t_c$, $\varkappa = 0$, $\langle {}^0\mathcal{F}^{(2n+1)}(\sigma)\rangle_{\rho_2} = 0$) $\mathcal{L}(q, t)$ має вигляд

$$\mathcal{L}(q, t) = t\langle {}^0\mathcal{F}^{(2)}\left(\sqrt{\bar{\lambda}^{(2)}(t)}\,\xi/t\right)\rangle_\xi\left[t - j(q)\langle {}^0\mathcal{F}^{(2)}\left(\sqrt{\bar{\lambda}^{(2)}(t)}\,\xi/t\right)\rangle_\xi\right]^{-1}, \tag{5.10а}$$

$$\lambda^{(2)}(q, t) = j(q)\left[t - j(q)\langle {}^0\mathcal{F}^{(2)}\left(\sqrt{\bar{\lambda}^{(2)}(t)}\,\xi/t\right)\rangle_\xi\right]^{-1} = \bar{\lambda}^{(2)}(q, t), \tag{5.10б}$$

причому двохвостка $\bar{\lambda}^{(2)}(t)$ знаходиться на основі (5.5б). Таким чином, у парафазі в наближенні, яке нами розглядається, повна $\lambda_{12}^{(2)}$ і затравочна $\bar{\lambda}_{12}^{(2)}$ двохвостки співпадають. Крім того, можна показати, використовуючи (5.1), виконання тотожності (4.16). У впорядкованій фазі ($t \leqslant t_c$) слід розв'язувати систему рівнянь (5.5) відносно невідомих $\lambda^{(1)}$ і $\bar{\lambda}^{(2)}$. Для температури розбіжності t_0 (t_0 — границя стійкості парафази) сприйнятливості (5.10а) у випадку $q = 0$ з урахуванням (5.5) одержуємо рівняння

$$t_0 = \left\langle {}^0\mathcal{F}^{(2)} \left(\sqrt{\frac{A(1)}{t_0}\,\xi} \right) \right\rangle_\xi . \qquad (5.11)$$

Для одержання конкретних результатів в однопетлевому наближенні у виразах (5.1), (5.5а), (5.5б) і (5.7) слід обмежитись розкладом величин $\langle {}^0\mathcal{F}^{(l)}(\varkappa_\xi/t)\rangle_\xi$ з точністю до $\tilde{\lambda}^{(2)}(t)$ $(\tilde{\lambda}^{(2)}(t) \sim r_0^{-d})$. Внаслідок одержуємо вирази для ${}^{(1)}\varphi(t)$, ${}^{(1)}\lambda^{(2)}(t)$ і $M^{(1)}(q, t)$, а також рівняння для ${}^{(1)}m(t)$, t_0 в даному наближенні:

$$ {}^{(1)}\varphi(t) = \frac{1}{2}m^2 - t\,{}^0\mathcal{F}^{(0)}\left(\frac{\tilde{\varkappa}}{t}\right) - \frac{t}{2}\int\limits_{t/{}^0\mathcal{F}^{(2)}(\tilde{\varkappa}/t)}^{\infty} d\zeta/\zeta\, A(\zeta), \qquad (5.12а)$$

$$ {}^{(1)}m(t) = {}^0\mathcal{F}^{(1)}(\varkappa) + \frac{1}{2}\,\frac{{}^0\mathcal{F}^{(3)}(\tilde{\varkappa}/t)}{{}^0\mathcal{F}^{(2)}(\tilde{\varkappa}/t)}\, A(t/{}^0\mathcal{F}^{(2)}(\tilde{\varkappa}/t)), \qquad (5.12б)$$

$$ {}^{(1)}\tilde{\lambda}^{(2)}(t) = A(t/{}^0\mathcal{F}^{(2)}(\tilde{\varkappa}/t))/{}^0\mathcal{F}^{(2)}(\tilde{\varkappa}/t), \qquad (5.12в)$$

$$ {}^{(1)}M(q, t) = {}^0\mathcal{F}^{(2)}(\tilde{\varkappa}/t) + \frac{1}{2}\,\frac{{}^0\mathcal{F}^{(4)}(\tilde{\varkappa}/t)}{{}^0\mathcal{F}^{(2)}(\tilde{\varkappa}/t)}\, A(t/{}^0\mathcal{F}^{(2)}(\tilde{\varkappa}/t)) + $$

$$ + \frac{1}{2}[{}^0\mathcal{F}^{(3)}(\tilde{\varkappa}/t)]^2 B(q, t), \qquad (5.12г)$$

$$ {}^{(1)}t_0 = {}^0\mathcal{F}^{(2)}(0) + \frac{1}{2}\,{}^0\mathcal{F}^{(4)}(0)/{}^0\mathcal{F}^{(2)}(0)\, A({}^{(1)}t_0/{}^0\mathcal{F}^{(2)}(0)). \qquad (5.12д)$$

При розрахунках з точністю r_0^{-d} необхідно в доданках з $A(x)$ і $B(q, t)$ виразів для термодинамічних характеристик ІМД, записаних в однопетлевому наближенні, брати значення ${}^{(0)}m(t)$ в наближенні молекулярного поля (НМП $\sim (r_0^{-d})^0$).

Зупинимось тепер коротко на результатах числових розрахунків. Спочатку за $J(q)$ візьмемо короткодіючу взаємодію у наближенні найближчих сусідів (ННС) і проаналізуємо результати розрахунків, які відомі з літературних джерел. У праці [12] рівняння (5.5) було одержано вперше, однак розв'язувалось графічно лише рівняння (5.11) у випадку $S = 1$. У працях [14, 16] вперше провадився числовий аналіз системи (5.5), і в [16] наведено графіки залежностей $m(t)$ і $\mathcal{L}^{-1}(t)$ (при $t \geqslant t_0$) у випадку $S = 1$ для ПК, ГЦК, ОЦК і алмазної граток. Точка t_0^- (t_0^- — границя стійкості впорядкованої фази), в якій зникають розв'язки (5.5) для $m(t)$, розміщена вище точки розбіжності $\mathcal{L}(t)$. У працях [14, 16] зазначено, що рівняння (5.5) описують фазовий перехід першого роду. Цей недолік пов'язувався з тим, що сумування двохвосток відповідає врахуванню флуктуацій $\sim 1/z$ і не є послідовним поблизу точного значення температури фазового переходу $t_c^{\text{т}}$, коли $\tau = (t - t_c^{\text{т}})/t_c^{\text{т}} \leqslant z^{-2}$. У випадку $S = 1, 2, 3, \infty$ для всіх вказаних вище граток в [14] були розраховані t_0^-. Слід зазначити, що, результати для t_0^- при $S = 1$ приблизно на 1 % занижені у порівнянні з результатами високотемпературних наближень (ВТР). Ще краща згода мала місце у випадку значень спіна $S > 1$. Криві для намагніченості $m(t)$ і оберненої сприйнятливості $\mathcal{L}^{-1}(t)$ для ПК ($S = 1$) дуже близькі до числових результатів [14, 20, 33]. Результати праць [12, 14], а також значення $t_c^{\text{в}}$, одержані із ВТР [20], у випадку ННС наведені у табл. 1.

У [14, 16] значення t_0 не наведені, однак їх автори зазначають, що t_0 нижче $t_c^{\text{в}}$ на 5—8 %. У той же час значення t_0 в [12] занижені в порівнянні з $t_c^{\text{в}}$ на 10—13 %.

У [14—16] не було одержано вираз для вільної енергії і тому не могла бути розрахована температура фазового переходу першого роду t_c ($t_0 < t_c < t_0^-$). Ми проводили числовий аналіз вільної енергії і параметра порядку для моделі Ізінга з унарним базисом ($S=1$) на гіперкубічних гратках у двох наближеннях: одна сума за q і з урахуванням двохвосток. Розглядались два варіанти ефективної взаємодії між квазіспінами:

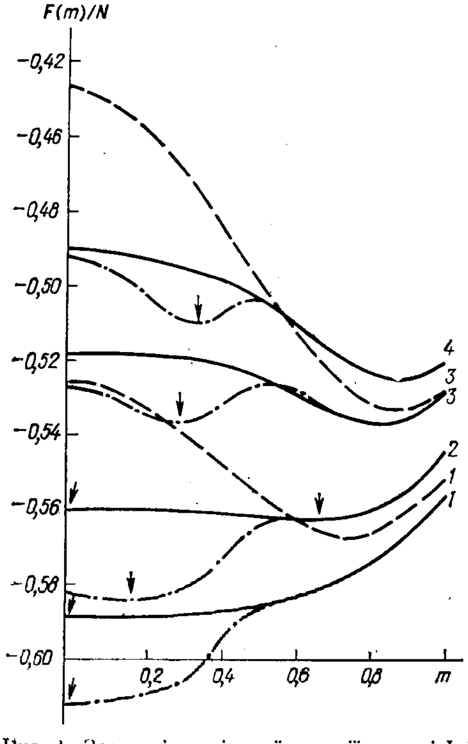
$$j(\mathbf{q}) = 1/d \sum_{\alpha=1}^{d} \cos(q_\alpha), \quad -\pi \leqslant q_\alpha \leqslant \pi, \tag{5.13а}$$

$$j(\mathbf{q}) = \begin{cases} 1-(r_0q)^2, & q \leqslant q_0 = r_0^{-1}, \\ 0, & q \geqslant q_0, \end{cases} \quad q \leqslant q_{\text{Бр}} \approx 3{,}90. \tag{5.13б}$$

Таблиця 1

t_0, t_c	Тип гратки			
	ПК	ОЦК	ГЦК	Алмазна
t_0 [12]	0,656	0,712	0,739	—
t_0^- [14]	0,744	0,785	0,809	0,673
$t_c^{\text{в}} = t_0^{\text{в}}$ [20, 33]	0,752	0,794	0,816	0,676

Один з них відповідає ННС, а другий є модельним для опису далекодіючої взаємодії. У випадку (5.13б) зона Бріллюена моделювалась сферою радіусом $q_{\text{Бр}}$, який вибирався за умовою $\sum_q 1 = N$. На рис. 1 наведено залежність вільної енергії від параметра порядку для $d=3$, використовуючи НБС, у випадку наближення молекулярного поля, однопетлевого наближення і з точністю до двохвосток. Для цих же наближень, d і $J(\mathbf{q})$ на рис. 2 наведено температурну залежність стаціонарних (за m) точок вільної енергії моделі, що розглядається, а також розв'язок рівняння (5.12б) для $^{(1)}m(t)$ з точністю до першої ітерації за $A(x)$ (наближення r_0^{-3} ($r_0 \sim 1$)). Спочатку зупинимося на результатах однопетлевого наближення для $d=3$ і (5.13а). На рис. 1 і 2 видно, що у даному випадку при $t_0 \simeq 0{,}759$ має місце фазовий пере-



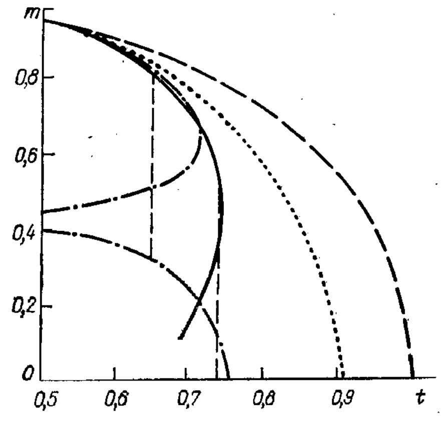


Рис. 1. Залежність вільної енергії моделі Ізінга від намагніченості при різних температурах (штрихова крива — НМП; штрихпунктирна — однопетлеве наближення; суцільна — з урахуванням двохвосток для $J(\mathbf{q})$ (5.13а))

Рис. 2. Температурна залежність намагніченості для моделі Ізінга з $J(\mathbf{q})$ (5.13а) (штрихова крива — НМП; штрихпунктирна — однопетлеве наближення; пунктирна — r_0^{-3}; суцільна — з урахуванням двохвосток) хід другого роду ($\mathscr{L}^{-1}(t_0) = 0$). Другий локальний мінімум $\varphi(t, m)$ за m, який з'являється при $t_0^- = 0{,}72$, при $t_0^\Delta \simeq 0{,}645$ стає абсолютним. Таким чином, має місце стрибок параметра порядку (з $m \simeq 0{,}31$ на $m \simeq 0{,}83$). При подальшому пониженні температури $m(t)$ росте монотонно і переходить у відповідний результат НМП. При $t' < 0{,}50$

Таблиця 2

d	Однопетлеве наближення	Наближення двохвосток	ВТР (t_c)	Кластерне наближення	Тип кластера
	—	—	0	0	
1	—	—	0,567	0,721	
				0,693	
2	$0{,}645(t_0^\Delta)$	$0{,}659t_0$		0,822	
3	$0{,}759(t_0)$	$0{,}738t_c$	0,752	0,815	
	$0{,}91(t_0,\ r_0^{-3})$	$0{,}744t_0^-$		0,806	

перший мінімум зникає. Незважаючи на близькість $t_0 \simeq 0{,}759$ до $t_c^{\text{в}} \simeq 0{,}752$, в однопетлевому наближенні термодинамічні характеристики моделі Ізінга з короткодією (5.13а) описуються явно незадовільно. При розв'язанні рівняння (5.12г) з точністю до r_0^{-3} температурна залежність $m(t)$ виявляється якісно правильною. Проте при цьому результат для температури фазового переходу другого роду $t_0 \simeq 0{,}91$ значно перевищує $t_0^{\text{в}} \simeq 0{,}752$, хоч і кращий за НМП.

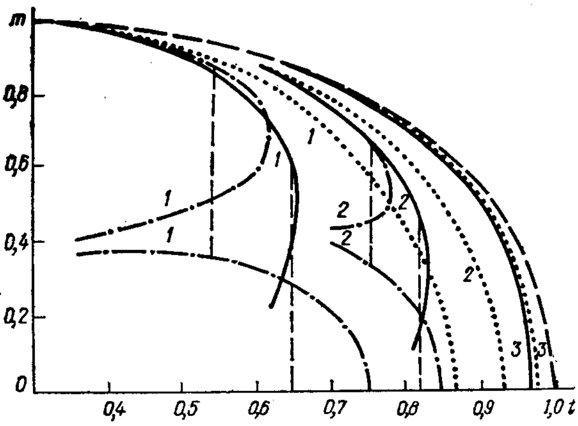


Рис. 3. Температурна залежність намагніченості для моделі Ізінга з $J(q)$ (5.13б) і при різних значеннях r_0 (*1* — 1,36; *2* — 1,96; *3* — 3,90): штрихові криві — НМП; штрихпунктирні — однопетлеве наближення; пунктирні — r_0^{-3}; суцільні — з урахуванням двохвосток; для $r_0 = 3{,}90$ штрихові і пунктирні криві не відрізняються

Ситуація значною мірою покращується при врахуванні двохвосток (див. рис. 1 і 2). У цьому наближенні при $t_0^- = 0{,}744$ виникає другий локальний мінімум. Перший залишається в точці $m = 0$ до точки перегину $t_0 \simeq 0{,}659$. При $t_c = 0{,}738$ (точка фазового переходу першого роду) мінімум стає абсолютним (при $m \simeq 0{,}56$). При цьому значення $m(t)$ для $t < t_c$ близькі до результатів числових розрахунків (див. рис. 2).

У табл. 2 для моделі Ізінга ($S = 1$) наведено результати розрахунку t_0, t_c або t_0^-, отримані на основі $J(q)$ із (5.13а) в різних наближеннях (одна сума за q, врахування двохвосток, перший порядок кластерного розкладу для різного типу кластерів). Відомо [5, 6, 20], що при описі термодинамічних властивостей низькорозмірних ($d = 1$; 2) ізінгівських моделей з короткодіючими взаємодіями у рамках кластерного наближення одержано цілком задовільні результати. Тоді у даному випадку наближення (5.1) і (5.5) непридатні. Це пов'язано з тим, що нас цікавить область температур

$t < 1$. При цьому функція $A(x)$ в (5.5б) використовується при $x < 1$. Проте в даній області x для $d = 1$ $A(x) = -1$, а для $d = 2$ $A(x) > 0$ лише при $x \simeq 1$. Тому рівняння (5.5б) при $t < 1$ не має додатних розв'язків для $\overline{\lambda}^{(2)}$, що приводить до розбіжності інтегралів за $\sigma = \xi \sqrt{\overline{\lambda}^{(2)}}$ (див. (5.2)).

Навпаки, для тривимірних ізінгівських моделей з короткодією при описі термодинамічних властивостей може бути застосовано (крім вузького околу t_c) метод, пов'язаний із сумуванням багатохвосток.

Тепер коротко зупинимося на результатах, які одержано на основі (5.13б). Залежність вільної енергії від параметра порядку m у даному випадку для цих же наближень, що і для (5.13а), подібна до наведеної на рис. 1. З ростом r_0 ($r_0 = [r_{\text{Бр}}, \infty]$, $r_{\text{Бр}} = q_{\text{Бр}}^{-1} \simeq 0{,}257$) криві для вільної енергії переходять у результати НМП. На рис. 3 для різних наближень і значень r_0 наведені температурні залежності стаціонарних за m точок вільної енергії. Зазначимо, що при малих значеннях r_0 криві на рис. 3 подібні до відповідних кривих на рис. 2. З ростом r_0 стрибки намагніченості в однопетлевому наближенні і з урахуванням двохвосток швидко зменшуються і криві для температурного ходу $m(t)$ в цих наближеннях практично зливаються.

Отже, на основі проведених нами числових розрахунків показано, що для тривимірної моделі Ізінга в наближенні, яке враховує двохвостки, має місце фазовий перехід першого роду для обох типів взаємодій (5.13а) і (5.13б). Щоб виправити цю некоректність, необхідно брати до уваги більш високі порядки наближень (трихвостки і т. ін.). І справді, у праці [34] на основі дослідження рівняння для намагніченості аналітично показано, що при врахуванні трихвосток для далекодіючої взаємодії (5.13б) має місце фазовий перехід другого роду.

Таким чином, розрахунки термодинамічних характеристик моделі Ізінга з унарним базисом у випадку далеко- і короткодіючих взаємодій (ННС) і аналіз літературних джерел [12—20, 33—35] дозволяють зробити відповідні висновки щодо коректності і актуальності розробки базисного підходу для опису квазіспінових систем з суттєвими короткодіючими кореляціями і далекодіючими взаємодіями.

1. *Тябликов С. В.* Квантовая теория магнетизма.— М. : Наука, 1975.— 527 с.
2. *Изюмов Ю. А., Кассан-оглы Ф. А., Скрябин Ю. Н.* Полевые методы в теории ферромагнетизма.— М. : Наука, 1974.— 224 с.
3. *Изюмов Ю. А., Скрябин Ю. Н.* Статистическая механика магнитоупорядоченных систем.— М. : Наука, 1987.— 264 с.
4. *Барьяхтар В. Г., Криворучко В. Н., Яблонский Д. А.* Функции Грина в теории магнетизма.— Киев : Наук. думка, 1984.— 336 с.
5. *Вакс В. Г.* Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков.— М. : Наука, 1973.— 327 с.
6. *Вакс В. Г., Зиненко В. И., Шнейдер В. J.* Микроскопические теории структурных фазовых переходов типа порядок — беспорядок // УФН.— 1983.— **141**, вып. 4.— С. 629—673.
7. *Steiner M., Villain E., Windzor C. G.* Theoretical and experimental studies on one-dimensional magnetic systems // Adv. Phys.— 1976.— **25**, N 2.— P. 87—209.
8. *Стасюк И. В., Левицкий Р. Р.* Об элементарных возбуждениях в сегнетоэлектриках с водородной связью // УФЖ.— 1969.— **14**, № 7.— С. 1097—1105.
9. *Vujicic G. M., Aksenov V. L., Plakida V. M., Stamenkovic S.* On the role of the quasilocal excitations in the lattice of high-T_c superconductors // Phys. Lett A.— 1979.— **73**, N 5.— P. 439—441.
10. *Вакс В. Г., Ларкин А. И., Пикин С. А.* Термодинамика идеального ферромагнетика // ЖЭТФ.— 1967.— **53**, вып. 1.— С. 281—299. Спиновые волны и корреляционные функции в ферромагнетике / Там же.— 1967.— **53**, вып. 3.— С. 1089—1106.
11. *Левицкий Р. Р., Стасюк И. В.* Приближение самосогласованного поля в модели де Жена // УФЖ.— 1974.— **19**, № 8.— С. 1331—1338.
12. *Horwitz G., Callen H. B.* Diagrammatic expansion for the Ising modelwith arbitrary spin and range interaction // Phys. Rev.— 1961.— **124**, N 6.— P. 1757—1785.
13. *Englert F.* Linked cluster expansions in the statistical theory of ferromagnetism // Ibid.— 1963.— **129**, N 2.— P. 567—577.

14. *Garanin D. A., Lutovinov V. S.* An aguation of the state of Ising model // Solid State Communs.— 1984.— **49**, N 11.— P. 1049—1054.
15. *Garanin D. A., Lutovinov V. S.* Phase transition in classical vector model // Ibid.— 1984.— **50**, N 3.— 219—222.
16. *Гаранин Д. А., Лутовинов В. С.* Квазитейлоровские ряды в теории магнетизма // ТМФ.— 1985.— **62**, № 2.— С. 263—271.
17. *Onyczkiewicz Z.* On new approach to the Heisenberg ferromagnet // Phys. Lett.— 1976.— **57A**, N 5.— P. 480—482.
18. *Стасюк И. В.* Уравнения для спиновых корреляторов в модели Изинга // ФММ.— 1971.— **7**, № 4.— С. 669—704.
19. *Церковников Ю. А.* Вычисление корреляционных функций в модели Изинга с дальнодействием // ТМФ.— 1972.— **11**, № 1.— С. 385—402.
20. *Смарт Дж.* Эффективное поле в теории магнетизма.— М. : Мир, 1968.— 271 с.
21. *Юхновский И. Р.* Применение коллективных переменных и учет короткодействующих сил в теории заряженных частиц // ЖЭТФ.— 1958.— **34**, вып. 2.— С. 379—389.
22. *Юхновский И. Р.* К статистической теории конденсированных систем с дальнодействующими и короткодействующими взаимодействиями.— Киев, 1979.— 34 с.— (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-79-133Р).
23. *Юхновский И. Р., Головко М. Ф.* Статистическая теория классических равновесных систем.— Киев : Наук. думка, 1980.— 372 с.
24. *Golovko M. F., Yukhnowsky I. R.* Approaches to the many-body theory of the dense ion-dipole plasma. Application to ionic solvatation // Chemical Physics of Solvatation. Vol. 1.— Amsterdam: Elsevier, 1985.— P. 138—183.
25. *Юхновский И. Р.* Метод смещений и коллективных переменных.— Киев, 1971.— 82 с.— (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-71-26Р).
26. *Ваврух М. В.* *n*-Частичные корреляционные функции взаимодействующего электронного газа // ТМФ.— 1987.— **50**, № 3.— С. 430—432.
27. *Ваврух М. В., Крохмальский Т. Е.* Эффективные многочастичные взаимодействия ионов в металлах // Там же.— 1987.— **51**, № 3.— С. 130—141.
28. *Ваврух М. В.* Базисный учет короткодействующих корреляций в многочастичных электронных системах.— Киев, 1987.— 36 с.— (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физики, ИТФ-87-56Р).
29. *Юхновский И. Р., Левицкий Р. Р., Сороков С. И.* Теория квазиспиновых систем с базисным учетом короткодействующих взаимодействий. Разложение по обратному радиусу дальнодействующего взаимодействия.— Киев, 1986.— 48 с. — (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-86-132Р).
30. *Юхновский И. Р., Сороков С. И., Левицкий Р. Р.* Теория квазиспиновых систем с базисным учетом короткодействующих взаимодействий. Суммирование приводимых диаграмм.— Киев, 1986.— 48 с.— (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-86-154Р).
31. *Юхновский И. Р., Левицкий Р. Р., Сороков С. И.* Теория квазиспиновых систем с базисным учетом короткодействующих взаимодействий // Современные проблемы статистической физики. Тр. Всесоюз. конф. Т. 1.— Киев : Наук. думка, 1989.— С. 392—398.
32. *Юхновский И. Р., Левицкий Р. Р., Сороков С. И., Держко О. В.* Теория квазиспиновых систем, описываемых квазиодномерной моделью Изинга в поперечном поле, с базисным учетом короткодействующих взаимодействий // Изв. АН СССР. Сер. физ.— 1991.— **55**, № 3.— С. 481—490.
33. *Silva P. R., Sa Barreto F. C.* Transition temperature for effective field Ising model // Phys. status soliole (b).— 1982.— **113**, N 1.— P. 67—72.
34. *Попов М. А.* Гауссово приближение в модели Изинга с дальнодействием // ТМФ.— 1990.— **83**, № 3.— С. 455—461.
35. *Рюэль Д.* Статистическая механика. Строгие результаты.— М. : Мир, 1971.— 367 с.

Інститут фізики конденсованих систем
АН України, Львів

Одержано 9.07.92

УДК 538.945

І. В. СТАСЮК, А. М. ШВАЙКА

ЕЛЕКТРОННИЙ СПЕКТР ТА ЕФЕКТИВНА ОБМІННА ВЗАЄМОДІЯ В МОДЕЛІ МЮЛЛЕРА У ТЕОРІЇ ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНОЇ НАДПРОВІДНОСТІ

Для моделі Хаббарда при врахуванні взаємодії з локальними ангармонічними коливаннями (так звана модель Мюллера) проведено самоузгоджений розрахунок спектра одноелектронних збуджень у наближенні Хаббард-I і дослідження ефективної обмінної взаємодії між електронами. Використано підхід, що грунтується на точному розв'язку