

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

На правах рукопису

БАРАН Остап Романович

УДК 538.9

**КЛАСТЕРНИЙ ПІДХІД В ДОСЛІДЖЕННІ
ПСЕВДОСПІНОВИХ МОДЕЛЕЙ**

01.04.02 – теоретична фізика

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

ЛЬВІВ – 2002

Дисертацією є рукопис

Роботу виконано в Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України

- Науковий керівник – доктор фізико-математичних наук, професор **Левицький Роман Романович**, Інститут фізики конденсованих систем НАН України, м. Львів, завідувач відділу теорії модельних спінових систем.
- Офіційні опоненти – доктор фізико-математичних наук **Кориневський Микола Антонович**, провідний науковий співробітник, Інститут фізики конденсованих систем НАН України, м. Львів;
- кандидат фізико-математичних наук **Бугрій Анатолій Іванович**, старший науковий співробітник, Інститут теоретичної фізики ім. М.М.Боголюбова НАН України, м. Київ.
- Провідна організація – Чернівецький національний університет ім. Ю.Федьковича, м. Чернівці.

Захист відбудеться “25” грудня 2002 року о “15³⁰” на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01 при Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України за адресою: 79011, м. Львів, вул. Свенціцького, 1.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту фізики конденсованих систем НАН України за адресою: 79026, м. Львів, вул. Козельницька, 4.

Автореферат розіслано “22” листопада 2002 року.

Вчений секретар

спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01,

кандидат фіз.-мат. наук

Т.Є.Крохмальський

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Псевдоспінові моделі мають широке застосування в сучасній теоретичній фізиці, оскільки за їх допомогою можна описати певні фізичні властивості цілого класу реальних об'єктів: магнетиків, сегнетоелектриків, сплавів, сумішей і т.д. Лише дуже обмежене число таких моделей може бути розв'язане точно. Тому актуальною є проблема розвинення та вдосконалення наближених методів опису псевдоспінових моделей. З цієї точки зору великий інтерес представляє кластерне наближення. В даному наближенні задачу взаємодіючих псевдоспінів в кластері розв'язують точно, що дозволяє частково врахувати короткосяжні кореляції, а взаємодію граничних вузлів кластера з їх найближчими сусідами, які не належать даному кластеру, враховують в дусі наближення молекулярного поля. Такий підхід виявляється досить ефективним при дослідженні термодинамічних характеристик псевдоспінових систем з короткосяжними взаємодіями. Для більш точного врахування короткосяжних кореляцій необхідно враховувати поправки, пов'язані із взаємодією кластерів. Кубо (Kubo P. J. *Phys. Soc. Japan*, 1962, **17**) було запропоновано метод кластерних розвинень, який дозволяє систематично отримувати поправки до вільної енергії, пов'язані із взаємодією кластерів, і в рамках якого кластерне наближення отримується у першому порядку. Нам відомо лише декілька робіт, в яких використовували вищі від першого порядку кластерного розвинення. Проте, автори цих робіт обмежилися лише розглядом вузького температурного інтервалу в околі температури фазового переходу і показали збіжність результатів до точного з ростом порядку розвинення.

При наявності в системі поряд з короткосяжними взаємодіями також суттєвих далекосяжних кореляцій, що є характерним для широкого класу матеріалів, серед яких особливо слід виділити сегнетоактивні сполуки з водневими зв'язками та низькорозмірні магнетики, необхідний теоретичний підхід, який дозволив би використовувати різну техніку для адекватного врахування цих взаємодій. Юхновським, Левицьким та Сороковим (Юхновський І.Р., Левицький Р.Р., Сороков С.І. *Condens. Matter Phys.*, 1993, No 1) було запропоновано для псевдоспінових моделей теорію базисного врахування короткосяжних кореляцій. Одним з наближень в рамках даного підходу може бути кластерне наближення за короткосяжними взаємодіями при врахуванні далекосяжних кореляцій в наближенні молекулярного поля (НМП) для термодинамічних характеристик або в наближенні хаотичних фаз (НХФ) для динамічних властивостей.

Хоча кластерне наближення досить широко застосовується при дослідженні псевдоспінових систем, на сьогоднішній день не існує чіткого критерію можливості застосування цього наближення для різних моделей при різних наборах їх мікроскопічних параметрів.

В останні роки інтенсивно досліджуються ізінгівські моделі із спіном більшим від S. Це пов'язано як з відносною простотою проведення та тестування на їх основі наближених і

чисельних розрахунків, так і з можливістю моделювання ними широкого класу реальних об'єктів. Крім того, наявність в гамільтоніанах тензорних членів, а також багаті фазові діаграми зумовлюють і суто теоретичний інтерес до цих моделей. Зокрема, в роботі (Iwashita T., Угуы N. *phys.stat.sol.(b)*, 1986, **137**) в кластерному наближенні досліджувалась модель Блюма-Емері-Гріфітса (БЕГ) із спінами 1, 3/2 та 2. Однак у ній не враховувались залежності кластерних полів від величини псевдоспіна.

Варто зазначити, що у більшості сучасних робіт, присвячених дослідженню псевдоспінових моделей, використовуються методи комп'ютерного моделювання. Такі роботи служать добрим тестом для підходів, в яких використовуються аналітичні методи. Дисертація присвячена розвиненню цього другого напрямку, який, на відміну від комп'ютерного експерименту, дозволяє глибше проаналізувати фізичну суть отриманих результатів.

В даній дисертаційній роботі в рамках методу кластерних розвинень будуть розв'язані базисні задачі для ізінгівських моделей з довільним значенням спіна, для XXZ -моделі, а також для моделі Ізінга в поперечному полі. Також буде вивчено вплив далекосяжних взаємодій на властивості цих моделей в НМП (для термодинамічних властивостей) або в НХФ (для динамічних властивостей).

Дисертаційну роботу виконано в Інституті фізики конденсованих систем НАН України згідно з планами робіт за темами: N 0194022990 "Розробка мікроскопічної теорії релаксаційних явищ і термодинамічних властивостей неупорядкованих систем у кластерному підході"; N 0199U000667 "Дослідження впливу зовнішніх полів і безладу на фазовий перехід і фізичні властивості псевдоспінових систем з суттєвими короткосяжними і далекосяжними взаємодіями".

Мета і задача дослідження. Метою є теоретичний опис модельних псевдоспінових систем в кластерному наближенні за короткосяжними взаємодіями при врахуванні далекосяжних кореляцій в НМП для термодинамічних або в НХФ для динамічних характеристик, зокрема:

- проведення та тестування в широкому температурному інтервалі вищих порядків кластерного розвинення;
- реалізація наближення двочастинкового кластера (НДК) для базисних ізінгівських моделей із довільним значенням спіна та отримання рівняння типу рівняння Орнштейна-Церніке для парних кореляційних функцій;
- дослідження термодинамічних характеристик та парних кореляційних функцій моделі Блюма-Емері-Гріфітса;

- реалізація НДК для базисних квантових псевдоспінових моделей (XXZ -моделі та моделі Ізінга в поперечному полі) та застосування отриманих результатів для тестування кластерного наближення при базисному врахуванні короткосяжних кореляцій.

Наукова новизна одержаних результатів. В дисертаційній роботі вперше послідовно проведено НДК для базисних ізінгівських моделей з довільним значенням спіна, а також поширено на такі моделі запропонований Юхновським, Левицьким та Сороковим (Юхновский И.Р., Левицкий Р.Р., Сороков С.И. Препр. АН УССР, ИТФ-86-142Р) для спін-1/2 моделі Ізінга метод розрахунку кореляційних функцій в \mathbf{q} -просторі. Для парних кореляційних функцій отримано в загальному вигляді рівняння типу рівняння Орнштейна-Церніке. На основі цього розраховано у явному вигляді парні кореляційні функції в \mathbf{q} -просторі моделі БЕГ з короткосяжними та далекосяжними взаємодіями.

Для XXZ -моделі вперше проведено наближення двочастинкового кластера з двома варіаційними параметрами за короткосяжними взаємодіями при врахуванні далекосяжних кореляцій в НМП. Для різних типів ґраток вивчено температурні межі застосовності такого підходу в залежності від величин магнітної анізотропії та далекосяжних взаємодій. В кластерному наближенні хаотичних фаз (кластерне наближення за короткосяжними взаємодіями та наближення хаотичних фаз за далекосяжними) отримано поздовжню та поперечну спектральні густини і проведено числове дослідження спектра елементарних збуджень XXZ -моделі з анізотропією типу легка вісь.

Вперше в НДК за короткосяжними та НМП за далекосяжними взаємодіями розраховано в широкому температурному інтервалі термодинамічні характеристики моделі Ізінга в поперечному полі на різних типах ґраток. Вивчені межі коректності такого підходу в залежності від температури та мікроскопічних параметрів моделі. Шляхом порівняння результатів НДК для кластерних мод і їх інтегральних інтенсивностей з результатами чисельного методу для дійсної частини функції релаксації (Derzhko O., Krokhmalskii T. *Phys.Rev.B*, 1997, **56**) встановлено межі застосовності цього наближення для дослідження динамічних властивостей одновимірної моделі Ізінга в поперечному полі (МПП) лише з короткосяжними взаємодіями.

Вперше проведено тестування на основі спін-1/2 моделі Ізінга вищих від першого порядків кластерного розвинення в усьому температурному інтервалі. Встановлено, що при низьких температурах, у зв'язку з порушенням точних співвідношень між матрицями густини різних порядків, вищі від першого порядки кластерного розвинення дають некоректні результати.

Практичне і наукове значення одержаних результатів. Проведене числове дослідження моделі Ізінга на основі методу кластерних розвинень з точністю до четвертого порядку включно показало, що вищі від першого порядки кластерного розвинення доцільно застосовувати лише при температурах вищих та незначно нижчих від температури фазового переходу. Порівняння результатів вищих від першого порядків кластерного розвинення на основі двочастинкового кластера із результатами кластерного наближення з більшим розміром кластера дозволяє зробити висновок, що доцільніше збільшувати розмір кластера (при умові оптимального розбиття ґратки на кластери) і обмежуватися першим порядком розвинення (тобто кластерним наближенням).

Реалізація НДК та отримане рівняння типу рівняння Орнштейна-Церніке для парних кореляційних функцій ізінгівських моделей з довільним значенням спіна дозволяє отримати вирази для термодинамічних характеристик та парних кореляційних функцій ізінгівської моделі з будь-яким значенням спіна.

Отримані вирази для ряду термодинамічних характеристик та парних кореляційних функцій в q -просторі для ізінгівської моделі зі спіном 1 можуть бути застосовані при вивченні різних реальних об'єктів, що описуються даною моделлю.

Проведене для XXZ -моделі та МППІ кластерне наближення за короткосяжними взаємодіями при врахуванні далекосяжних кореляцій в НМП для термодинамічних або в НХФ для динамічних характеристик дозволяє описати ряд сегнетоактивних та магнітних матеріалів. Встановлені межі доцільності застосування такого підходу при різних значеннях мікроскопічних параметрів моделей на різних типах ґраток.

Особистий внесок здобувача. Автор брав безпосередню участь у проведенні вищих від першого порядків кластерного розвинення для моделі Ізінга та у числових розрахунках на основі отриманих результатів. Також автор брав участь в отриманні рівняння типу рівняння Орнштейна-Церніке для парних кореляційних функцій ізінгівських моделей з довільним значенням спіна. Автором проведено аналіз результатів числових розрахунків для термодинамічних характеристик моделі Блюма-Емері-Гріфітса. Для XXZ -моделі автором проведено НДК з двома варіаційними параметрами. Особисто автором розраховано поздовжню статичну сприйнятливість МППІ. Встановлення меж коректності НДК за короткосяжними взаємодіями при врахуванні далекосяжних кореляцій в НМП для дослідження термодинамічних характеристик XXZ -моделі та МППІ, розрахунок динамічних характеристик XXZ -моделі з анізотропією типу легка вісь, аналіз числових результатів для динамічних властивостей двох вищезгаданих квантових моделей в кластерному наближенні хаотичних фаз проведено разом із співавторами.

Апробація роботи. Основні результати дисертації доповідались і обговорювались на таких конференціях: Україно-Французький симпозиум "Конденсовані системи: наука та індустрія" (Львів, 1993 р.), Міжнародна конференція з магнетизму (Польща, Варшава, 1994 р.), 6-та Європейська конференція з магнітних матеріалів і їх застосуванню (Австрія, Відень, 1995 р.), Міжнародна нарада з статистичної фізики і теорії конденсованих систем (Львів, 1995 р.), Європейська конференція з магнетизму (Польща, Познань, 1996 р.), Науковий семінар з статистичної теорії конденсованих систем (Львів, 1997 р.), Нарада з фізики конденсованих систем (Львів, 1998 р.), Перша Українська школа-семінар з фізики сегнетоелектриків та споріднених матеріалів (Львів, 1999 р.), Нарада з сучасних проблем теорії рідин (Львів, 2000 р.), а також на семінарах Інституту фізики конденсованих систем Національної академії наук України та відділу теорії модельних спінових систем цього Інституту.

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 25 робіт, в тому числі 8 статей, 5 препринтів та 12 тез конференцій. Перелік основних публікацій подано в кінці автореферату.

Структура та об'єм дисертації. Дисертаційна робота складається із вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел та двох додатків. Робота викладена на 174 сторінках (разом із літературою і додатками - 198 сторінок), включає бібліографічний список, що містить 186 найменувань у вітчизняних та закордонних виданнях.

ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обґрунтовано актуальність досліджень, викладених у дисертації, сформульовано мету роботи, відзначено її наукову новизну.

У першому розділі приведено приклади фізичних об'єктів, при дослідженні яких використовується псевдоспіновий формалізм. В основному увага зосереджена на фізичних реалізаціях спін-1 ізінгівської моделі. Подано короткий огляд основних методів дослідження псевдоспінових систем. Приведено огляд публікацій, що відповідають темі дисертації.

Другий розділ називається "Дослідження ізінгівських псевдоспінових моделей в рамках методу кластерних розвинень". В ньому для спін-1/2 моделі Ізінга проведено кластерне розвинення на основі двочастинкового кластера з точністю до четвертого порядку по зв'язках включно. Отримано у явному вигляді ряд термодинамічних характеристик моделі. У випадку квадратної ґратки реалізовано також наближення чотиричастинкового кластера з різним способом розбиття ґратки на кластери (шаховим та повним). На основі отриманих результатів у випадку моделі Ізінга на квадратній ґратці здійснено тестування методу кластерних розвинень у широкому

температурному інтервалі. Показано, що збіжність результатів з ростом порядку розвинення до точного відбувається лише при температурах вищих і незначно нижчих від температури фазового переходу (за виключенням околу самої температури фазового переходу, оскільки кластерне наближення є наближенням типу НМП). У низькотемпературній ж області вищі від першого порядки кластерного розвинення виявляються некоректними (рис. 1). Така некоректність пов'язана з тим, що у вищих від першого порядках кластерного розвинення порушуються точні співвідношення між матрицями густини різних порядків. У першому порядку розвинення забезпечується виконання цих точних співвідношень. Наближення чотиричастинкового кластера при шаховому розбитті квадратної ґратки передбачає результат суттєво ближчий до точного, аніж наближення двочастинкового кластера, а при повному розбитті – значно гірший. Це пов'язано з тим, що повне розбиття ґратки на чотиричастинкові кластери є неоптимальним, оскільки при цьому взаємодії між вузлами враховуються двічі.

Для ізінгівських моделей з довільним значенням спіна ($S=S^z = -\mu, -\mu+1, \dots, \mu-1, \mu$), які описуються гамільтоніаном

$$H = -\sum_{n=1}^{2\mu} \sum_{i=1}^N h_i^{(n)} S_i^n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{2\mu} \sum_{m=1}^{2\mu} \left[\sum_{i,\delta} K^{(nm)} S_i^n S_{i+\delta}^m + \sum_{i,j} J_{ij}^{(nm)} S_i^n S_j^m \right] \quad (1)$$

($K^{(nm)}$ - короткосяжні, $J_{ij}^{(nm)}$ - далекосяжні взаємодії) реалізовано наближення двочастинкового кластера за короткосяжними взаємодіями при врахуванні далекосяжних кореляцій в наближенні молекулярного поля у випадку неоднорідних полів $h_i^{(n)}$. Отримано в загальному вигляді вільну енергію такої моделі

$$F = (1-z) \sum_i F_i + \frac{1}{2} \sum_{i,r} F_{ir} + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{2\mu} \sum_{m=1}^{2\mu} \sum_{i,j} J_{ij}^{(nm)} \langle S_i^n \rangle \langle S_j^m \rangle, \quad (2)$$

де F_i, F_{ir} – одно- та двочастинкова внутрішньокластерні вільні енергії:

$$F_i = -k_B T \ln \text{Sp} e^{-\beta H_i}, \quad H_i = -\sum_{n=1}^{2\mu} \tilde{\kappa}_1^{(n)} S_i^n, \quad (3)$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\kappa}_1^{(n)} &= \kappa_1^{(n)} + \sum_{r \in \pi_1}^r \varphi_1^{(n)}, & \kappa_i^{(n)} &= h_i^{(n)} + \sum_{m=1}^{2\mu} \sum_{j=1}^N J_{ij}^{(nm)} \langle S_i^m \rangle, \\
F_{12} &= -k_B T \ln \text{Spe}^{-\beta H_{12}}, & H_{12} &= -\sum_{n=1}^{2\mu} \left[2 \tilde{\kappa}_1^{(n)} S_1^n + \tilde{\kappa}_2^{(n)} S_2^n + \sum_{m=1}^{2\mu} K^{(nm)} S_1^n S_2^m \right], \\
{}^2 \tilde{\kappa}_1^{(n)} &= \kappa_1^{(n)} + \sum_{\substack{r \in \pi_1 \\ r \neq 2}}^r \varphi_1^{(n)}.
\end{aligned} \tag{4}$$

Тут z – число найближчих сусідів, $r = \pi_1$ означає, що вузол r є найближчим сусідом вузла 1. Кластерні поля ${}^r \varphi_1^{(n)}$ введені таким чином, що оператор $\sum_{n=1}^{2\mu} {}^r \varphi_1^{(n)} S_1^n$ є оператором ефективного поля, яке діє на вузол 1 зі сторони вузла r , що є його найближчим сусідом. Дані поля є варіаційними параметрами, що знаходяться з умови мінімуму вільної енергії по них. В результаті отримується система $(z+1)2\mu N$ рівнянь для унарних функцій розподілу і кластерних полів

$$\langle S_i^n \rangle = \frac{\partial F_i}{\partial \tilde{\kappa}_i^{(n)}}, \quad \frac{\partial F_i}{\partial \tilde{\kappa}_i^{(n)}} = \frac{\partial F_{ir}}{\partial {}^r \tilde{\kappa}_i^{(n)}}. \tag{5}$$

Поширюючи запропонований Юхновським, Левицьким та Сороковим (Юхновский И.Р., Левицкий Р.Р., Сороков С.И. Препр. АН УССР, ИТФ-86-142Р) метод отримання та розв'язування рівняння типу рівняння Орнштейна-Церніке для спінів-1/2 моделі Ізінга на ізінгівські моделі з довільним значенням спіна, нами отримано вирази для парних кореляційних функцій у випадку однорідних полів у імпульсному просторі.

$$\begin{aligned}
& \left(\begin{array}{ccc} \langle S_q S_{-q} \rangle^c & \langle S_q S_{-q}^2 \rangle^c & \dots & \langle S_q S_{-q}^{2\mu} \rangle^c \\ \vdots & & & \\ \langle S_q^{2\mu} S_{-q} \rangle^c & \langle S_q^{2\mu} S_{-q}^2 \rangle^c & & \langle S_q^{2\mu} S_{-q}^{2\mu} \rangle^c \end{array} \right) = \\
& \frac{1}{z} \left[\mathbf{F}^{(+)} \right]^{-1} + \left(\frac{1}{z} - 1 \right) \left(\mathbf{F}^{(2)} \right)^{-1} + \left(\mathbf{F}^{(+)} \right)^{-1} \mathbf{F}^{(2)} \left(\mathbf{F}^{(-)} \right)^{-1} - 1 \mathbf{G}(\mathbf{q}) \right]^{-1}
\end{aligned} \tag{6}$$

Тут $\mathbf{G}(\mathbf{q})$ у випадку ґраток з гіперкубічною симетрією має вигляд: $\mathbf{G}(\mathbf{q}) = \frac{2}{d} \sum_{i=1}^d \sin^2 \left(\frac{q_i a}{2} \right)$, d – розмірність ґратки, a – стала ґратки. $\mathbf{F}^{(\pm)} = \mathbf{F}^{(2)} \pm \mathbf{F}^{(1)}$, а елементами матриць $\mathbf{F}^{(2)}$ та $\mathbf{F}^{(1)}$ є парні одночастинкові та двочастинкові внутрішньокластерні функції розподілу:

$$\mathbf{F}^{(2)} = \left(\begin{array}{ccc} \langle (S_1)^2 \rangle_{\rho_1} & \langle S_1 S_1^2 \rangle_{\rho_1} & \dots & \langle S_1 S_1^{2\mu} \rangle_{\rho_1} \\ \vdots & & & \\ \langle S_1^{2\mu} S_1 \rangle_{\rho_1} & \langle S_1^{2\mu} S_1^2 \rangle_{\rho_1} & & \langle (S_1^{2\mu})^2 \rangle_{\rho_1} \end{array} \right), \tag{7}$$

$$\mathcal{F}^{(11)} = \begin{pmatrix} \langle S_1 S_2 \rangle_{\rho_{12}} & \langle S_1 S_2^2 \rangle_{\rho_{12}} & \dots & \langle S_1 S_2^{2\mu} \rangle_{\rho_{12}} \\ \vdots & & & \\ \langle S_1^{2\mu} S_2 \rangle_{\rho_{12}} & \langle S_1^{2\mu} S_2^2 \rangle_{\rho_{12}} & & \langle S_1^{2\mu} S_2^{2\mu} \rangle_{\rho_{12}} \end{pmatrix}. \quad (8)$$

На основі отриманих результатів розраховано у явному вигляді ряд термодинамічних характеристик і парні кореляційні функції в \mathbf{q} -просторі моделі Блюма-Емері-Гріфітса:

$$H = -\sum_{i=1}^N \left[S_i + D S_i^2 \right] - \frac{1}{2} \sum_{i,\delta} \left[K S_i S_{i+\delta} + K' S_i^2 S_{i+\delta}^2 \right] + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left[J_{ij} S_i S_j + J'_{ij} S_i^2 S_j^2 \right]. \quad (9)$$

Тут, якщо використовувати термінологію магнетизму, Γ - зовнішнє поле, D – однойонна анізотропія, K та K' – білінійна та біквдратна короткосяжні взаємодії, J_{ij} та J'_{ij} – білінійна та біквдратна далекосяжні взаємодії, а $S = S^z = -1, 0, 1$. На основі моделі Блюма-Капеля, в якій ненульовими є лише параметри K та D , та на основі моделі з ненульовими лише K та K' проведено тестування, як кластерне наближення реагує на зміну величин D/K та K'/K для різних типів ґраток. Показано, що у першому випадку НДК передбачає якісно правильні результати, значно ближчі до результатів моделювання Монте-Карло, аніж НМП за короткосяжними взаємодіями. У другому випадку НДК передбачає результати, які, на відміну від результатів НМП, якісно узгоджуються з результатами числових методів. Це дає певні підстави сподіватися, що кластерне наближення є застосовним для дослідження спін-1 ізінгівських моделей.

У випадках різних типів ґраток досліджено спін-1 ізінгівську модель магнетика з диполь-ними та квадрупольними взаємодіями, що є частковим випадком моделі БЕГ при $D = -2/3zK'$. Для такої моделі виявлено наявність критичної точки (див. рис. 2), яка не передбачається НМП, що часто використовується для дослідження магнітних систем, які описуються спін-1 спіновими моделями.

У випадку моделі БЕГ на простій кубічній ґратці при нульових значеннях параметрів Γ , J_{ij} та J'_{ij} та при феромагнітних K , K' і довільних D проведено детальне дослідження парних кореляційних функцій при $\mathbf{q}=0$. Показано, що при певних наборах параметрів моделі в

парамагнітній фазі статична сприйнятливість може бути немонотонною функцією температури. Така поведінка сприйнятливості в парафазі є можливою лише при наборах K' та D , при яких відбувається фазовий перехід першого роду з феромагнітної або квадрупольної фаз у парамагнітну.

У випадку $z=6$, $\Gamma=0$, $J_{ij}=J'_{ij}=0$, при $K>0$, $-1<K'/K<0$ побудовано проекцію фазової діаграми на площину $(K'/K, D/K)$. Детально досліджено термодинамічні характеристики моделі при наборах K'/K та D/K , при яких в системі мають місце каскади температурних фазових переходів вхід-вихід та подвійний вхід-вихід з парамагнітної у феромагнітну фазу. Показано, що середній фазовий перехід може бути і першого, і другого роду (див. рис. 3). Аналогічна задача розглядалася в роботі Касоно та Оно (Kasano K., Ono I. *Z.Phys.B*, 1992, **88**), але у ній були допущені неточності при числових розрахунках і, як наслідок, зроблено висновок, що середній фазовий перехід може бути лише другого роду.

Третій розділ називається “Дослідження XXZ-моделі в наближенні двочастинкового кластера”. В даному розділі для спин-1/2 XXZ-моделі

$$H = -\sum_{i=1}^N \left[S_i^x S_i^x + h^z S_i^z \right] - \frac{1}{2} \sum_{i,\delta} K \left[S_i^z S_{i+\delta}^z + \alpha (S_i^x S_{i+\delta}^x + S_i^y S_{i+\delta}^y) \right] - \frac{1}{2} \sum_{i,\delta} J_{ij} \left[S_i^z S_j^z + \alpha (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) \right] \quad (10)$$

з довільним значенням магнітної анізотропії α/γ проведено НДК за короткосяжними взаємодіями з двома, z - та x -компонентами кластерного поля. Далекосяжні взаємодії J_{ij} враховано при цьому в НМП. Вільна енергія моделі отримується на основі одночастинкового

$$H_1 = -\tilde{\kappa}^z S_1^z - \tilde{\kappa}^x S_1^x \quad (11)$$

та двочастинкового

$$H_{12} = -\tilde{\kappa}^z (S_1^z + S_2^z) - \tilde{\kappa}^x (S_1^x + S_2^x) - K[\gamma S_1^z S_2^z + \alpha(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y)] \quad (12)$$

кластерних гамільтоніанів (поля $\tilde{\kappa}^a$ та $\tilde{\kappa}^a$ створені зовнішніми полями, далекосяжними взаємодіями, врахованими в наближенні молекулярного поля, та кластерними полями φ^a , які є

варіаційними параметрами; $\tilde{\kappa}^a = \kappa^a + z\varphi^a$, $\tilde{\tilde{\kappa}}^a = \kappa^a + (z-1)\varphi^a$, $\kappa^z = h^z + \gamma J_0 m^z$, $\kappa^x = h^x + \alpha J_0 m^x$, $m^a = \langle S^a \rangle$, $J_0 = \sum_j^N J_{ij}$).

$$F = -k_B T N \left\{ (1-z) \ln \left[\text{ch} \left(\sqrt{(\tilde{\kappa}^z)^2 + (\tilde{\tilde{\kappa}}^x)^2} \right) \right] + \frac{z}{2} \ln \left[e^{-\beta K(\gamma/4 + \alpha/2)} + \sum_{n=1}^3 e^{-\beta(E_{12})_n} \right] \right\} + \frac{N}{8} \sum_{j=1}^N J_{ij} \left[(m^z)^2 + \alpha (m^x)^2 \right] \quad (13)$$

Вираз для F маємо у неявному вигляді: три з чотирьох власних значень E_{12} двочастинкового гамільтоніану H_{12} є коренями кубічного рівняння

$$\left(\gamma K - E_{12} \right)^2 + \left(\gamma K - \frac{1}{4} \alpha K + E_{12} \right)^2 - \left(\gamma K - \frac{1}{4} \alpha K + E_{12} \right) \left(\tilde{\kappa}^z \right)^2 + \left(\gamma K - E_{12} \right) \left(\tilde{\tilde{\kappa}}^x \right)^2 = 0. \quad (14)$$

Числове дослідження вільної енергії при нульових зовнішніх полях h^x , h^z , різних температурах і значеннях параметра магнітної анізотропії γ/α показало, що при $h^x=0$, $h^z=0$ у випадку анізотропії типу легка вісь ($\alpha/\gamma \in [0,1]$) достатньо проводити кластерне наближення лише з поперечною компонентою кластерного поля, а у випадку анізотропії типу легка площина ($\gamma/\alpha \in [0,1]$) – лише з поздовжньою компонентою. В зв'язку з цим проведено два різні варіанти НДК, що суттєво спростило аналітичні розрахунки, оскільки в даних випадках вільні енергії отримуються у явному вигляді.

Проведене числове дослідження при $h^x=0$, $h^z=0$ показало, що у випадку анізотропії типу легка вісь використовуване нами наближення передбачає якісно правильні фазові діаграми в площині $(T, \alpha/\gamma)$ для різних типів ґраток при різних значеннях далекосяжної взаємодії. Не передбачається феромагнітне впорядкування при ненульових температурах у випадку нульових далекосяжних взаємодій для одновимірної XXZ-моделі при довільних значенням анізотропії та для ізотропної моделі Гейзенберга ($\alpha/\gamma=1$) на двовимірних ($z=3,4$) ґратках, що є точним результатом. Для термодинамічних характеристик (намагніченості, статичної магнітної сприйнятливості, ентропії та теплоємності) передбачаються якісно правильні температурні залежності в усьому температурному інтервалі при будь-яких значеннях магнітної анізотропії та далекосяжної взаємодії, за виключенням значень α/γ , коли модель є близькою до ізотропної моделі Гейзенберга. При $\alpha/\gamma > (\alpha/\gamma)_n$ передбачаються фізично некоректні результати при низьких температурах. Значення $(\alpha/\gamma)_n$ є незначно меншим від одиниці і залежить від типу ґратки та величини далекосяжної взаємодії. Вже навіть при досить малих значеннях далекосяжної взаємодії $(\alpha/\gamma)_n \rightarrow 1$. Низькотемпературна ж ділянка, на якій некоректне врахування квантових флуктуацій в кластерному наближенні приводить до нефізичних результатів є тим меншою, чим більшими є далекосяжна взаємодія, анізотропія та кількість найближчих сусідів у ґратці.

У випадку XXZ-моделі з анізотропією типу легка площина НДК за короткосяжними взаємодіями при врахуванні далекосяжних кореляцій в НМП при певних значеннях параметрів моделі передбачає окрім фазових переходів з парамагнітної у феромагнітну фазу (з пониженням температури) також нефізичний низькотемпературний фазовий перехід з феромагнітної фази у парамагнітну. Але навіть при наборах параметрів моделі, коли цей низькотемпературний перехід відсутній, передбачаються некоректні температурні залежності термодинамічних характеристик на низькотемпературній ділянці. Детальний аналіз результатів дозволяє зробити висновок, що кластерне наближення у випадку моделі з анізотропією типу легка площина доцільно використовувати для тривимірних ґраток при температурах вищих і незначно нижчих від температури фазового переходу. Для одновимірної та двовимірних ґраток даний підхід доцільно використовувати лише при досить високих температурах, при яких квантові ефекти несуттєві.

У випадку моделі з анізотропією типу легка вісь проведено також вивчення впливу поздовжнього магнітного поля на термодинамічні характеристики моделі. Показано, що навіть при не дуже великих значеннях поля результати НДК добре кількісно узгоджуються з результатами моделювання Монте-Карло на всьому температурному проміжку (рис. 4).

Для дослідження динамічних властивостей XXZ-моделі з анізотропією типу легка вісь ми скористалися результатами роботи Левицького та Сорокова (Левицький Р.Р., Сороков С.И. Препр. АН УССР, ИТФ-87-28Р), в якій в кластерному наближенні хаотичних фаз було отримано вирази для парних температурних функції Гріна в частотно-імпульсному просторі спінів-1/2 квантової псевдоспінової моделі з короткосяжними та далекосяжними взаємодіями, які виражаються через парні температурні функції Гріна базисної системи, а останні - через парні одночастинкові $\left(\left\langle T_{\tau} S_1^a(\tau) S_1^b(0) \right\rangle_{\rho_1}^c \right)_{\omega_n}$ та двочастинкові $\left(\left\langle T_{\tau} S_1^a(\tau) S_2^b(0) \right\rangle_{\rho_{12}}^c \right)_{\omega_n}$, $\left(\left\langle T_{\tau} S_1^a(\tau) S_1^b(0) \right\rangle_{\rho_{12}}^c \right)_{\omega_n}$ внутрішньо-кластерні функції Гріна. Тут a та b координати в спіновому просторі, а усереднення проводяться з одно- та двочастинковим кластерними гамільтоніанами. Нами були розраховані ці парні внутрішньокластерні функції розподілу XXZ-моделі з магнітною анізотропією типу легка

вісь та отримані поперечна та поздовжня парні температурні функції Гріна моделі в частотно-імпульсному просторі. На їх основі розраховано поздовжня $J^{zz}(\mathbf{q}, E)$ та поперечна $J^{xx}(\mathbf{q}, E)$ спектральні густини ($J^{ab}(\mathbf{q}, E) = \frac{2\hbar}{e^{\beta E} - 1} \text{Im} G^{ab}(q, -iE + \varepsilon)|_{\varepsilon \rightarrow 0}$, $G^{ab}(\mathbf{q}, \omega_n)$ – температурна кумулянтна функція Гріна $\langle T_\tau S_i^a(\tau_1) S_j^b(\tau_2) \rangle^c$ в частотно-імпульсному просторі). Показано, що в спектрі збуджень XXZ -моделі в кластерному наближенні хаотичних фаз на основі двочастинкового кластера у випадку феромагнітної фази наявні три незатухаючі моди.

Проведено числове дослідження перерозподілу інтенсивностей кластерних мод із зміною температури, параметра анізотропії та величини квазіімпульсу у випадку моделі лише з короткосяжними взаємодіями на простій кубічній ґратці. Показано, що при $q \rightarrow \pi$ ($q_x = q_y = q_z = q$) найбільш інтенсивними є кластерні моди з найнижчими частотами. При $q \rightarrow 0$ найбільші інтегральні інтенсивності мають кластерні моди з середніми або низькими частотами. Розрахунок залежності поперечної парної статичної кореляційної функції $\langle S_{\mathbf{R}}^x S_0^x \rangle^c$ від відстані між вузлами показав, що кластерне наближення хаотичних фаз коректно реагує на зміну температури та магнітної анізотропії. Чим меншою є анізотропія (більшим є параметр α/γ) та чим ближчою є температура до температури фазового переходу, тим сильнішими є поперечні кореляції $\langle S_{\mathbf{R}}^x S_0^x \rangle^c$ (див. рис. 5). Також виявлено, що на невеликих відстанях кореляції залежать від напрямку. У напрямку (1,0,0) вони є сильнішими, аніж у напрямку (1,1,0), а останні сильніші, аніж у напрямку (1,1,1). На великих відстанях між вузлами такий ефект вже не спостерігається.

Четвертий розділ називається “Дослідження моделі Ізінга в поперечному полі в наближенні двочастинкового кластера”. У ньому проведено дослідження спінів-1/2 моделі Ізінга в поперечному полі Γ з короткосяжними K та далекосяжними J_{ij} взаємодіями

$$H = -\sum_{i=1}^N \Gamma S_i^x - \frac{1}{2} \sum_{i,\delta} K S_i^z S_{i+\delta}^z - \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} S_i^z S_j^z \quad (15)$$

в НДК за короткосяжними взаємодіями при врахуванні далекосяжних кореляцій в НМП для термодинамічних характеристик або в наближенні хаотичних фаз для динамічних властивостей. Вільну енергію моделі в даному наближенні маємо у неявному вигляді (Левицкий Р.Р., Сороков С.И. Препр. АН УССР, ИТФ-88-34Р):

$$\frac{1}{N} F = (1-z)F_1 + \frac{z}{2} F_{12} + \frac{1}{2} J_0 m^2 \quad (16)$$

$$F_1 = -k_B T \ln \frac{1}{2} \left[\text{ch} \left[\beta \sqrt{(\tilde{\kappa}^z)^2 + (\tilde{\kappa}^x)^2} \right] \right] \quad F_{12} = -k_B T \ln \left[e^{-\beta K} + \sum_{n=1}^3 e^{\beta(E_{12})_n} \right] \quad (17)$$

$$\tilde{\kappa}^z = J_0 m + z \varphi^z, \quad \tilde{\kappa}^x = \Gamma + z \varphi^x, \quad J_0 = \sum_{j=1}^N J_{ij} \quad m = \langle S^z \rangle.$$

(18)

(три із чотирьох власні значення E_{12} двочастинкового кластерного гамільтоніана є коренями кубічного рівняння $E_{12}^3 - K E_{12}^2 - [K^2 + 4(\tilde{\kappa}^x)^2 + 4(\tilde{\kappa}^z)^2] E_{12} + K[K^2 + 4(\tilde{\kappa}^x)^2 - 4(\tilde{\kappa}^z)^2] = 0$). Тут використані позначення $\tilde{\kappa}^z = J_0 m + (z-1)\varphi^z$, $\tilde{\kappa}^x = \Gamma + (z-1)\varphi^x$. Поперечне φ^z та поздовжнє φ^x кластерні поля є варіаційними параметрами і знаходяться з умови мінімуму F .

Нами розрахована поздовжня статична сприйнятливість моделі, яка у випадку парафази узгоджується з результатами роботи Левицкий Р.Р., Сороков С.И. Препр. АН УССР, ИТФ-88-34Р.

Числове дослідження термодинамічних характеристик проведено в кластерному наближенні з двома, поперечною та поздовжньою, компонентами кластерного поля і лише з поздовжньою. Таке нехтування φ^x було запропоноване Кориневським (Кориневський М.А. Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фіз.-мат. наук. Львів, 1997) для уникнення антиточки Кюрі. Встановлено межі застосовності обох варіантів наближення для різних типів ґраток.

НДК з двома компонентами кластерного поля у випадках різних типів ґраток коректно описує конкуренцію взаємодій K та J_{ij} з тунелюванням Γ , за виключенням низькотемпературної ділянки. Передбачається спадання температури фазового переходу із збільшенням Γ/K та зменшенням J_0/K . Для одновимірної МПП при $J_0=0$ не передбачається сегнетоелектричне впорядкування при ненульових температурах. Некоректне врахування квантових флуктуацій даним варіантом кластерного наближення приводить до того, що при певних наборах параметрів моделі отримується нефізичний низькотемпературний фазовий перехід (антиточка Кюрі). Але навіть тоді, коли антиточка Кюрі відсутня, при $\Gamma > 0$ передбачаються некоректні результати для термодинамічних характеристик на низькотемпературній ділянці. Низькотемпературний проміжок, на якому кластерне наближення з двома варіаційними параметрами є незастосовним, є тим вузьчим, чим меншими є Γ/K та J_0/K .

Нехтування поперечним кластерним полем у випадку двовимірних та тривимірних ґраток дозволяє уникнути нефізичностей для термодинамічних характеристик при низьких температурах, а при високих – лише незначно погіршує результати. При невеликих значеннях тунелювання $\Gamma < K$, навіть у випадку відсутності далекосяжних взаємодій, результати обох варіантів кластерного наближення при температурах вищих та незначно нижчих від температури фазового переходу практично кількісно не відрізняються. Для моделі на одновимірній ґратці нехтування параметром φ^x приводить до некоректного опису конкуренції взаємодій з тунелюванням. Передбачається зростання температури фазового переходу із збільшенням Γ (див. рис. 6).

Для одновимірної МППІ лише з короткосяжними взаємодіями в НДК проведено числове дослідження спектра елементарних збуджень на основі результатів Левицького та Сорокова (Левицкий Р.Р., Сороков С.И. Препр. АН УССР, ИТФ-88-34Р) для поперечної спектральної густини. Детально проаналізовано перерозподіл інтенсивностей кластерних мод із змінами температури, параметра тунелювання та величини квазіімпульсу. Виявлено, що із збільшенням цих величин відбувається перекачка інтенсивностей від низьких частот до більш високих. Також показано (див. рис. 7), що при значеннях поперечного поля $\Gamma < 2K$ та температурах $k_B T / K > (\Gamma / K)^{1/2}$ зміна положень мод при $\mathbf{q} = 0$ і їх інтегральних інтенсивностей із зміною Γ та T якісно описують зміни частотних залежностей дійсної частини функції релаксації, отриманих чисельним методом (при скінчених T ; Derzhko O., Krokhmal'skii T. *Phys.Rev.B*, 1997, **56**) або точно (при $T \rightarrow \infty$).

Основні результати та висновки

1. Для моделі Ізінга проведено кластерне розвинення (на основі двочастинкового кластера) за короткосяжними взаємодіями до четвертого порядку включно. Далекосяжні взаємодії при цьому враховувались в наближенні молекулярного поля. Встановлено, що в низькотемпературній області вищі порядки кластерного розвинення дають некоректні результати для термодинамічних характеристик, що пов'язано з порушенням точних співвідношень між матрицями густини різних порядків. На прикладах кластерного розвинення по двочастинковому кластеру та наближеннях чотиричастинкового кластера з різним способом розбиття ґратки для моделі Ізінга показано, що доцільніше збільшувати розмір кластера (за умови правильного способу розбиття ґратки на кластери) і обмежуватись кластерним наближенням, аніж проводити вищі від першого порядки розвинення в методі кластерних розвинень.
2. Для ізінгівської моделі з довільним значенням спіна проведено наближення двочастинкового кластера за короткосяжними взаємодіями при врахуванні далекосяжних взаємодій в наближенні молекулярного поля. Отримано рівняння типу рівняння Орнштейна-Церніке для парних кореляційних функцій в \mathbf{q} -просторі в загальному вигляді. Для моделі Блюма-Емері-Гріфітса розраховано парні кореляційні функції в імпульсному просторі.
3. Проведено детальне числове дослідження моделі Блюма-Емері-Гріфітса на різних типах ґраток при різних значеннях її параметрів. Встановлено, що у випадку спін-1 ізінгівської моделі з короткосяжними білінійними та біквдратними взаємодіями кластерне наближення, на відміну від наближення молекулярного поля, коректно описує конкуренцію між феромагнітною білінійною та антиферомагнітною біквдратною взаємодіями. Показано, що при певних наборах параметрів моделі Блюма-Емері-Гріфітса статична сприйнятливість у парафазі може бути немонотонною функцією температури. Також встановлено, що в кластерному наближенні при наборах параметрів моделі Блюма-Емері-Гріфітса, при яких мають місце каскади фазових переходів подвійний вхід-вихід з феромагнітної фази в парамагнітну, середній фазовий перехід може бути і першого і другого роду. Для спін-1 ізінгівської моделі магнетика з дипольними та квадрупольними взаємодіями встановлено наявність критичної точки.
4. Для ХХZ-моделі проведено наближення двочастинкового кластера (за короткосяжними взаємодіями) з x - та z -компонентою кластерного поля при врахуванні далекосяжних взаємодій в наближенні молекулярного поля. Дослідження вільної енергії показало, що для даної моделі достатньо проводити кластерне наближення лише з одною компонентою кластерного поля: для

анізотропії типу легка вісь – з поздовжньою, а для анізотропії типу легка площина – з поперечною.

5. Встановлено, що для XXZ -моделі у випадку анізотропії типу легка вісь, за винятком значень, коли модель близька до ізотропної моделі Гейзенберга, кластерне наближення є коректним на всьому температурному проміжку. При малих значеннях анізотропії типу легка вісь передбачаються нефізичні результати на низькотемпературній ділянці у зв'язку з некоректним врахуванням кластерним наближенням квантових флуктуацій. При анізотропії типу легка площина наближення двочастинкового кластера доцільно застосовувати у випадку тривимірних ґраток лише при температурах вищих і незначно нижчих від температури фазового переходу, а у випадку ланцюжка та двовимірних ґраток лише при досить високих температурах, при яких квантові ефекти несуттєві.
6. В кластерному наближенні хаотичних фаз отримано поперечну та поздовжню спектральні густини XXZ -моделі з анізотропією типу легка вісь. Досліджено перерозподіл інтенсивностей кластерних мод із зміною температури, магнітної анізотропії та величини квазіімпульсу. Показано, що поперечні кореляції у випадку простої кубічної ґратки залежать від напрямку (в напрямку $(1,0,0)$ вони сильніші, аніж в напрямках $(1,1,0)$ та $(1,1,1)$).
7. Досліджено межі застосовності кластерного наближення за короткосяжними взаємодіями з двома, поперечним та поздовжнім, кластерними полями і тільки з поздовжнім при врахуванні далекосяжних кореляцій в наближенні молекулярного поля для дослідження термодинамічних характеристик моделі Ізінга у поперечному полі. Показано, що кластерне наближення з двома варіаційними параметрами дає задовільний опис термодинамічних характеристик цієї моделі на різних типах ґраток, за виключенням низькотемпературної області. Причиною нефізичних результатів при низьких температурах є некоректне врахування кластерним наближенням квантових флуктуацій. Нехтування поперечним кластерним полем у випадку дво- та тривимірних ґраток дозволяє уникнути нефізичних результатів на низькотемпературній ділянці і лише незначно погіршує їх при високих температурах. У випадку ж ланцюжка таке нехтування поперечною компонентою кластерного поля приводить до некоректного опису конкуренції тунелювання із взаємодіями.
8. Дослідження перерозподілу інтенсивностей кластерних мод із зміною температури та величини поперечного поля для одновимірної моделі Ізінга в поперечному полі лише з короткосяжними взаємодіями показало, що при значеннях поперечного поля $\Gamma/K < 2$ та температурах $k_B T/K > (\Gamma/K)^{1/2}$ зміна положень мод і їх інтегральних інтенсивностей із зміною поперечного поля та температури якісно описують зміну частотних залежностей дійсної

частини функції релаксації, отриманих чисельним методом (при скінчених температурах) або точно (при безмежних температурах).

Результати дисертації опубліковано в таких роботах:

1. Сороков С.І., Левицький Р.Р., Баран О.Р. Дослідження ізінгівських моделей з довільним значенням спіна в наближенні двочастинкового кластера. Модель Блюма-Емері-Гріфітса. // УФЖ, 1996, т. 41, № 4, с.490-500.
2. Sorokov S.I., Levitskii R.R., Baran O.R. Two-particle cluster approximation for Ising type model with arbitrary value of spin. Correlation functions of Blume-Emery-Griffiths model. // Condens.Matter Phys., 1997, No 9, p.57-87.
3. Левицький Р.Р., Сороков С.І., Баран О.Р., Пиндзин І.М. Термодинаміка XXZ-моделі в наближенні двочастинкового кластера. // Журнал фізичних досліджень, 1998, т. 2, № 3, с.391-400.
4. Baran O.R., Levitskii R.R. Pair correlation functions of the Ising type model with spin 1 within two-particle cluster approximation. // phys.stat.sol. (b), 2000, vol. 219, p.357-364.
5. Levitskii R.R., Sorokov S.I., Baran O.R. Reference approach in theory of pseudospin systems. // Condens.Matter Phys., 2000, vol. 3, No 3(23), p.515-543.
6. Левицький Р.Р., Баран О.Р. Термодинаміка моделі Ізінга в поперечному полі в кластерному наближенні. // Журнал фізичних досліджень, 2000, т. 4, № 4, с.454-463.
7. Баран О.Р., Левицький Р.Р. Каскади фазових переходів вхід-вихід в моделі Блюма-Емері-Гріфітса на простій кубічній гратці. Наближення двочастинкового кластера. // Журнал фізичних досліджень, 2001, т. 5, № 2, с.157-161.
8. Baran O.R., Levitskii R.R. Reentrant phase transitions in the Blume-Emery-Griffiths model on a simple cubic lattice. The two-particle cluster approximation. // Phys.Rev. B, 2002, vol. 65, p.172407.
9. Сороков С.І., Левицький Р.Р., Баран О.Р. Дослідження моделі Ізінга в методі кластерних розвинень. // Львів, 1992, 47с. (Препринт./АН України. Ін-т фіз. конденс. систем; ІФКС-92-18У).
10. Sorokov S.I., Levitskii R.R., Baran O.R. Two-site cluster approximation for Ising model with arbitrary value of spin. // Ukrainian-French Symposium "Condensed Matter: Science & Industry". Abstracts, Information & Participants. Lviv, 1993, p.214.
11. Sorokov S.I., Levitskii R.R., Baran O.R. Investigation of Ising type model with spin 1 within two-particle cluster approximation. // International conference on magnetism 1994 (22-26 august 1994, Warsaw, Poland), Programme and abstracts, p.673.

12. Sorokov S., Levitskii R., Baran O. Two-particle cluster approximation for Ising type model with spin 1. // In: 6th European Magnetic Materials and Applications Conference (Sept. 4-8, 1995, Wien, Austria), programme and abstracts, p.247.
13. Pyndzyn I., Baran O. Cluster approximation for XXZ-model with spin 1/2. // In: 6th European Magnetic Materials and Applications Conference (Sept. 4-8, 1995, Wien, Austria), programme and abstracts, p.244.
14. Baran O. Blume-Emery-Griffiths model within two-site cluster approximation. // International workshop on statistical physics and condensed matter theory (Sept. 11-14, 1995, Lviv, Ukraine), programme and abstracts, p.76.
15. Baran O., Sorokov S., Levitskii R. Two-particle cluster approximation for Ising type model with spin 1. // In: The European Conference Physics of Magnetism 96, June 24-28, 1996, Poznan, Poland. Abstracts, p.109.
16. Levitskii R., Sorokov S., Pyndzyn I., Baran O. Investigation of XXZ-model with spin 1/2 within two-particle cluster approximation. // In: The European Conference Physics of Magnetism 96, June 24-28, 1996, Poznan, Poland. Abstracts, p.119.
17. Баран О.Р. Дослідження кореляційних функцій моделі Блюма-Емері-Гріфітса в наближенні двочастинкового кластера. // Науковий семінар з статистичної теорії конденсованих систем, програми і тези доповідей, Львів, 14-15 березня 1997, с.54.
18. Sorokov S., Levitskii R., Baran O. Dynamics and thermodynamics of pseudospin models. Two-particle cluster approximation. // In: Workshop on Condensed Matter Physics, Lviv, Ukraine, May 21-24, 1998, p.111.
19. Sorokov S.I., Levitskii R.R., Baran O.R. Reference approach in theory of pseudospin system. // In: Workshop on modern problems of Soft Matter Theory, Lviv, Ukraine, August 27-31, 2000, p.146.

Баран О.Р. Кластерний підхід в дослідженні псевдоспінових моделей. –Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика. Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України, Львів, 2002.

Робота присвячена теоретичному дослідженню псевдоспінових систем з короткосяжними і далекосяжними взаємодіями при базисному врахуванні короткосяжних кореляцій в рамках кластерного підходу. У випадку моделі Ізінга протестовано вищі порядки кластерного розвинення на основі двочастинкового кластера. Для ізінгівських моделей з довільним значенням спіна послідовно проведено наближення двочастинкового кластера за короткосяжними взаємодіями при

врахуванні далекосяжних кореляцій в наближенні молекулярного поля. Отримано в загальному вигляді рівняння типу рівняння Орнштейна-Церніке для парних кореляційних функцій. Для спін-1 ізінгівської моделі отримано у явному вигляді вирази для парних кореляційних функцій в імпульсному просторі. При різних значеннях мікроскопічних параметрів (при яких достатньо розглядати одну підгратку) здійснено дослідження термодинамічних характеристик цієї моделі.

В наближенні двочастинкового кластера за короткосяжними взаємодіями та в наближенні молекулярного поля (для термодинамічних характеристик) або в наближенні хаотичних фаз (для динамічних властивостей) за далекосяжними досліджено спін-1/2 XXZ -модель та модель Ізінга в поперечному полі. Встановлені межі коректності такого підходу для цих моделей на різних типах ґраток при різних значеннях їх мікроскопічних параметрів. Проведено числове дослідження спектру елементарних збуджень XXZ -моделі з анізотропією типу легка вісь на простій кубічній ґратці та одновимірної моделі Ізінга в поперечному полі.

Ключові слова: псевдоспінові моделі, кластерне наближення, кореляційні функції, функції Гріна, спектр елементарних збуджень.

Баран О.Р. Кластерный подход в исследовании псевдоспиновых моделей. –Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика. Институт физики конденсированных систем Национальной академии наук Украины, Львов, 2002.

Работа посвящена теоретическому исследованию псевдоспиновых систем с коротко-действующими и дальнедействующими взаимодействиями при базисном учете короткодействующих корреляций в рамках кластерного подхода. В случае модели Изинга протестировано высшие порядки кластерного разложения на основе двухчастичного кластера. Для изинговских моделей с произвольным значением спина последовательно проведено приближение двухчастичного кластера по короткодействующим взаимодействиям при учете дальнедействующих корреляций в приближении молекулярного поля. Получено в общем виде уравнение типа уравнения Орнштейна-Цернике для парных корреляционных функций. Для спин-1 изинговской модели получено в явном виде выражение для парных корреляционных функций в импульсном пространстве. При различных значениях микроскопических параметров (при которых достаточно рассматривать одну подрешётку) проведено исследование термодинамических характеристик этой модели.

В приближении двухчастичного кластера по короткодействующим взаимодействиям и в приближении молекулярного поля (для термодинамических характеристик) либо в приближении

хаотических фаз (для динамических свойств) по дальнедействующим взаимодействиям исследовано спин-1/2 XXZ -модель и модель Изинга в поперечном поле. Установлены пределы применимости такого подхода для этих квантовых моделей на различных типах решёток при разных значениях их микроскопических параметров. Проведено численное исследование спектра элементарных возбуждений XXZ -модели с анизотропией типа лёгкая ось на простой кубической решётке и одномерной модели Изинга в поперечном поле.

Ключевые слова: псевдоспиновые модели, кластерное приближение, корреляционные функции, функции Грина, спектр элементарных возбуждений.

Cluster approach to investigation of pseudospin models. – Manuscript.

Thesis on search of scientific degree of candidate of physical and mathematical sciences, speciality 01.04.02 – theoretical physics. Institute for Condensed Matter Physics of the Ukrainian National Academy of Sciences, Lviv, 2002.

The work contains theoretical study of pseudospin systems with essential short-range and long-range interactions, with the short-range interactions taken into account within the framework of the cluster approach, as well as testing of the cluster expansion method.

The cluster expansion (two-particle cluster for the Ising model) is performed up to terms of the fourth-order in bonds and sites. For a square lattice different orders of the cluster expansion are tested in a wide temperature range. The obtained results are compared to those of the four-particle cluster approximation at different forms of lattice division into clusters. It is shown that at a proper choice of the form of lattice division, it is more expedient to increase the cluster size and restrict consideration by the cluster approximation, rather than to take into account the higher orders of cluster expansion, which yield unphysical results in the low-temperature region (due to violation of exact relations between density matrices of different orders).

For the Ising model with an arbitrary value of spin, we perform a consistent two-particle cluster approximation for the short-range interactions, with the long-range interactions taken into account in the mean-field approximation. The method of derivation and solution of the Ornstein-Zernike type equation for correlation functions in \mathbf{q} -space is extended to the case of spins greater than 1/2. For the Blume-Emery-Griffiths model, the pair correlation functions in \mathbf{q} -space are obtained. A thorough study of thermodynamic characteristics of the model is performed at those values of the model parameters when it suffices to consider a one-sublattice problem. It is shown that for different lattice types the used approximation adequately describes a competition between ferromagnetic bilinear and antiferromagnetic

biquadratic short-range interactions. A presence of a critical point at the phase diagram of spin-1 Ising model of a magnet with dipole and quadrupole interaction is established.

Within the two-particle cluster approximation with the transverse and longitudinal components of the cluster field for the short-range interactions, the thermodynamic properties of the XXZ spin-1/2 model are explored. The long-range interactions are taken into account in the mean field approximation. It is established that in the case of the easy axis and easy plane type magnetic anisotropy, it suffices to perform a cluster approximation with the longitudinal or transverse cluster field only, respectively. It is shown that at the easy axis type magnetic anisotropy (except for the cases when the model is close to the isotropic Heisenberg model), the cluster approach is applicable at any temperature. In the case of the easy plane type magnetic anisotropy, the cluster approximation is suitable for the three-dimensional lattices at temperatures above and slightly below the phase transition temperature, whereas for the one- and two-dimensional lattices it is suitable at high temperatures only (where the quantum effects are not essential). For the XXZ -model with the easy axis anisotropy, the longitudinal and transverse spectral densities are obtained within the cluster random phase approximation. Elementary excitation spectrum is explored in the case of a simple cubic lattice with the short-range interactions only. It is established that in the center of the Brillouin zone the most intensive are the cluster modes with intermediate or low frequencies, whereas at the zone boundary the most intensive are the cluster modes with low frequencies.

The Ising model in transverse field is studied within the two-particle cluster approximation for the short-range interactions and mean field (for thermodynamic properties) or random phase (for dynamic characteristics) approximation. Applicability limits of the used approximation with transverse and longitudinal cluster fields and with the longitudinal field only are established. It is shown that the cluster approximation with two variational parameters yields a satisfactory description of thermodynamic characteristics of the model on different lattice types, except for the low-temperature region. Neglecting the transverse cluster field in the cases of two- and three-dimensional lattices permits one to avoid unphysical results at low temperatures and only slightly spoils the obtained results at high temperatures. However, in the case of a spin chain, such neglecting the transverse component of cluster field leads to incorrect description of competition between tunneling and interparticle interactions. Numerical analysis of the elementary excitation spectrum is performed in the case of a one-dimensional chain with the short-range interactions only. It is established that with increasing of the tunneling parameter, temperature, and quasimomentum magnitude, a redistribution of the cluster modes intensities from low to higher frequencies takes place.

Key words: pseudospin models, cluster approximation, correlation functions, Green functions, elementary excitation spectrum.

