НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

На правах рукопису

ВЕРХОЛЯК Тарас Михайлович

УДК 538.955-405

ВПЛИВ БЕЗЛАДУ ТА ВЗАЄМОДІЙ РІЗНИХ ТИПІВ НА ТЕРМОДИНАМІЧНІ ТА ДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МОДЕЛЬНИХ СПІНОВИХ СИСТЕМ

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 – 1999

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, професор Ткач Микола Васильович, Чернівецький державний університет, м.Чернівці, завідувач кафедри теоретичної фізики
	–	доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник Головач Юрій Васильович, Інститут фізики конденсованих систем НАН України, м.Львів, старший науковий співробітник.
Провідна організація	–	Інститут теоретичної фізики ім. М.М.Боголюбова НАН України, відділ математичного моделювання, м.Київ

Захист відбудеться “___” __________ 1999 року о “______”' на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01 при Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України за адресою: 290011 м. Львів, вул.Свєнціцького, 1.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту фізики конденсованих систем НАН України за адресою: 290026 м.Львів, вул.Козельницька, 4.

Автореферат розіслано “___” _______________ 1999 року.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01,
кандидат фіз.-мат. наук Т.Є.Крохмальський

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Спінові моделі широко використовуються для опису сегнетоелектричних та магнітних матеріалів, в яких можна виділити дискретні стани, що локалізовані на вузлах. При цьому фізичні властивості таких систем можуть різко мінятися із зміною взаємодії чи порушенням однорідності в системі. Зокрема, врахування антисиметричної взаємодії Дзялошинського-Морія у квантових спінових системах приводить до виникнення неспівмірної фази, а зміна радіуса дії обмінної взаємодії може привести до зміни характеру поведінки структурного фактора моделі. Задача суттєво ускладнюється при розгляді випадкових неоднорідностей, які моделюються випадковим розподілом значень параметрів гамільтоніана. Оскільки число точних результатів для невпорядкованих систем є невеликим, кожна нова модель, фізичні характеристики якої можна отримати без використання наближень, містить важливу інформацію про специфічні властивості невпорядкованих систем.

В даній дисертаційній роботі розглядається одновимірна ізотропна спін-1/2 *XY* модель із взаємодією Дзялошинського-Морія у випадковому лоренцовому поперечному полі та отримуються точні результати для її термодинамічних функцій. Формулюється числовий метод, що дозволяє вивчити властивості найзагальніших спін-1/2 анізотропних *XY* ланцюжків скінченного розміру з довільним типом невпорядкованості. Невпорядкована двокомпонентна модель Ізінґа з рівноважним типом безладу розглядається в методі розвинень за оберненим радіусом взаємодії. З іншого боку, в рамках методу ефективного поля вияснено вплив типу взаємодії на характеристики моделі Ізінґа.

Дисертаційну роботу виконано в Інституті фізики конденсованих систем НАН України згідно з планами робіт за темами: шифр 1.4.8.12 № 0194022989 “Дослідження неоднорідних та невпорядкованих електронних псевдоспінових систем методом комп'ютерного моделювання”; шифр 1.4.8.11 № 0194022990 “Розробка мікроскопічної теорії релаксаційних явищ і термодинамічних властивостей невпорядкованих систем у кластерному підході”.

Мета і задачі дослідження. Метою роботи є теоретичний опис модельних спінових систем з випадковою неоднорідністю та різними взаємодіями, а саме:

- отримання точних результатів для ідеалізованих випадкових одновимірних спін-1/2 моделей із взаємодією між найближчими сусідами;

- формулювання методу розкладів за оберненим радіусом взаємодії для рівноважно невпорядкованої моделі Ізінґа з базисним врахуванням короткосяжних взаємодій;
- поширення методу ефективного поля на модель Ізінґа з довільною взаємодією та дослідження впливу взаємодій різних типів на поведінку термодинамічних та динамічних характеристик системи.

Наукова новизна одержаних результатів: В дисертаційній роботі вперше отримано точні результати для термодинамічних функцій невпорядкованого ізотропного спін-1/2 *XY* ланцюжка із взаємодією Дзялошинського-Морія у випадковому лоренцовому поперечному полі. Ґрунтуючись на отриманих точних результатах, з'ясовано межі застосовності наближення комутаційних співвідношень Бозе, наближення Тяблікова та наближення когерентного потенціалу.

Запропоновано числовий метод дослідження невпорядкованої узагальненої одновимірної спін-1/2 *XY* моделі у поперечному полі. Розраховано поперечну динамічну сприйнятливість одновимірної моделі Ізінґа з взаємодією Дзялошинського-Морія у випадковому поперечному полі. Детально вивчено термодинамічні та кореляційні функції одновимірної моделі Ізінґа у випадкому поперечному полі.

Запропоновано базисний підхід з врахуванням короткосяжних та далекосяжних взаємодій для двокомпонентної невпорядкованої моделі Ізінґа.

Здійснено узагальнення методу ефективного поля на випадок моделі Ізінґа з довільною взаємодією. Розраховано фізичні характеристики моделі з різними взаємодіями, обчислено функцію розподілу локальних полів та встановлено, як виникає скінченна ширина ліній у ній із взаємодією між всіма спінами.

Практичне і наукове значення одержаних результатів. Отримані в роботі точні результати дозволяють встановити межі застосовності наближення комутаційних співвідношень Бозе, наближення типу Тяблікова та наближення когерентного потенціалу для моделей з діагональним безладом. Числові результати отримані для одновимірної моделі Ізінґа у випадковому поперечному полі виявили специфічні особливості поведінки цих систем. Зокрема, у даній моделі при певних умовах виникають елементарні збудження з близькими до нуля енергіями, що приводить до зміни низькотемпературного ходу теплоємності. Крім того, *zz*-кореляційна довжина цих систем зростає при слабому включенні в систему випадкової неоднорідності.

Запропонований метод розкладу за оберненим радіусом далекосяжної взаємодії при одночасному базисному врахуванні короткосяжних кореляцій для двокомпонентної невпорядкованої моделі Ізінґа дозволяє здійснити коректний опис обох типів кореляцій для реальних систем. Зокрема, цю теорію можна застосувати для опису квазіодновимірних невпорядкованих сегнетоелектриків з водневими зв'язками.

Метод ефективного поля застосований до моделі Ізінґа з довільною взаємодією, що дозволяє отримати скінченну ширину ліній поглинання магнітного резонансу, яка виникає в реальних системах внаслідок далекосяжного характеру міжвузлових взаємодій.

Особистий внесок здобувача. У спільних публікаціях авторові належать узагальнення моделі Нішіморі (Nishimori H., Phys.Lett.A, 1984, **100**, 239-243) на випадок наявності взаємодії Дзялошинського-Морія і обговорення результатів порівняння наближених методів з точними результатами. Автор брав безпосередню участь у розробці числового методу для узагальненої одновимірної спін-1/2 *XY* моделі та у розробці методу розвинень за оберненим радіусом взаємодії з базисним врахуванням короткосяжних взаємодій для невпорядкованих ізінґових систем. Автором також проведено аналіз результатів розрахунку термодинамічних та статичних спінових кореляційних функцій одновимірної моделі Ізінґа у поперечному полі. Автор брав участь у роботі над узагальненням методу ефективного поля для моделі Ізінґа з довільною взаємодією. Обговорення та інтерпретація отриманих результатів проведена разом із співавторами.

Апробація роботи. Основні результати дисертації доповідались і обговорювались на таких конференціях: Міжнародна конференція, присвячена 150-річчю від дня народження І.Пулюя (Львів, 1995 р.), Міжнародна робоча нарада “Статистична фізика та теорія конденсованого стану” (Львів, 1995 р.), 9-та міжнародна конференція з швидкозагартованих та метастабільних матеріалів (Братислава, Словаччина, 1996 р.), Літня школа з сильнокорельованих електронних систем (Дебрецен, Угорщина, 1996 р.), Науковий семінар з статистичної теорії конденсованих систем (Львів, 1997 р.), Міжнародна конференція студентів-фізиків (Відень, Австрія, 1997 р.), Міжнародний семінар “Фазові переходи та критичні явища” (Познань, Польща, 1997 р.), Міжнародна робоча нарада з фізики конденсованих систем INTAS-Україна (Львів, 1998 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 21 роботу, в тому числі 7 статей в наукових журналах, 6 препринтів та 8 тез конференцій. Перелік основних публікацій подано в кінці автореферату.

Структура та об'єм дисертації. Дисертаційна робота складається із вступу, п'ятьох розділів, висновків, списку використаних джерел; кожен розділ дисертації починається із вступу та завершується висновками. Робота викладена на 133 сторінках (разом з літературою - 149 сторінок), включає бібліографічний список, що містить 160 найменувань у вітчизняних та закордонних виданнях.

ЗМІСТ РОБОТИ

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

У **першому розділі** подано короткий огляд основних методів дослідження спінових систем та розглянуто проблеми, які виникають при розгляді невпорядкованих систем, приведено огляд публікацій, що відповідають темі дисертації.

Другий розділ називається "Одновимірна ізотропна спін-1/2 *XY* модель з взаємодією Дзялошинського-Морія у випадковому лоренцовому поперечному полі". У вступі до розділу подано короткий огляд відомих точних результатів для невпорядкованих квантових моделей та огляд основних робіт, що стосуються природи взаємодії Дзялошинського-Морія та ефектів, які вона спричиняє в однорідному ізотропному спін-1/2 *XY* ланцюжку.

Розглядається ланцюжок N спінів s=1/2 з ізотропною *XY* взаємодією і взаємодією Дзялошинського-Морія між найближчими сусідами у поперечному полі з випадковою складовою, розподіленою за законом Лоренца. Гамільтоніан моделі має такий вигляд:

$$H=\sum_{j=1}^{N}\left(\Omega_0+\Omega_j\right)s_j^z+J\sum_{j=1}^{N-1}\left(s_j^x s_{j+1}^x+s_j^y s_{j+1}^y\right)+D\sum_{j=1}^{N-1}\left(s_j^x s_{j+1}^y-s_j^y s_{j+1}^x\right), \qquad (1)$$

де J та D — константи симетричної та антисиметричної взаємодій, Ω_0 — постійна, а Ω_j — випадкова складова поперечного поля, що задається лоренцовим розподілом імовірності, центрованим навколо нуля з шириною Г. Після перетворення Йордана-Віґнера приходимо до гамільтоніана у вигляді квадратичної форми за фермі-операторами, в якому на відміну від відомої задачі Ллойда (Lloyd P. J.Phys.C, 1969, **2**, 1717-1725) коефіцієнти є комплексними.

Для дослідження термодинаміки моделі з гамільтоніаном (1) використовується формалізм функцій Ґріна і розглядаються запізнена та випередна температурні двочасові функції Ґріна, означені як $G_{nm}^{\mp}(t)\equiv\mp i\Theta(\pm t)\langle\{c_n(t),c_m^+(0)\}\rangle$. Мета подальшого розгляду — знайти усереднену функцію Ґріна $\overline{G_{nm}^{\mp}(t)}$, де риска зверху означає усереднення за всіма можливими випадковими конфіґураціями.

Оскільки перетворений гамільтоніан описує систему невзаємодіючих безспінових ферміонів, рівняння руху для $\overline{G^{\mp}_{nm}(t)}$ не містить складніших функцій Ґріна. Завдяки особливості лоренцового розподілу рівняння руху вдається усереднити точно. Усереднене за випадковими полями рівняння для функції Ґріна є просторово однорідним, отриманий для нього розв'язок має такий вигляд:

$$\overline{G^{\mp}_{k}(\omega \pm i\varepsilon)} = \frac{1}{\omega - \left[\Omega_0 + \sqrt{J^2 + D^2}\cos(k+\varphi)\right] \pm i(\varepsilon + \Gamma)}, \tag{2}$$

де $\cos(\varphi) = J\big/\sqrt{J^2 + D^2}$. Отриманий результат дає можливість обчислити усереднену спектральну щільність елементарних збуджень $\overline{\rho(E)} = -\frac{1}{\pi}\operatorname{Im}\overline{G^{-}_{nn}(E)}$, яка використовується для дослідження термодинамічних властивостей моделі (1). Всі термодинамічні характеристики невпорядкованої системи можна виразити через інтеґрал від щільності елементарних збуджень $\overline{\rho(E)}$, оскільки вільна енергія Гельмгольца на вузол є $\overline{f} = -\frac{1}{\beta}\int dE\,\overline{\rho(E)}\ln\left(2\operatorname{ch}\frac{\beta E}{2}\right)$.

В роботі проведено числовий аналіз щільності елементарних збуджень, поперечної намагніченості, статичної сприйнятливості при різних значенннях параметра *D*. Показано, що взаємодія Дзялошинського-Морія приводить до перенормування звичайної ізотропної взаємодії $J^2 \to J^2 + D^2$, а випадкове лоренцове поле — до зникнення квантового фазового переходу, який існує для цієї моделі при *T*=0.

Застосоване до моделі наближення комутаційних співвідношень Бозе для операторів Паулі $[s^{-}_{j}, s^{+}_{m}] \approx \delta_{jm}$ ($s^{\pm}_{j} = s^{x}_{j} \pm i s^{y}_{j}$) дозволяє зобразити модель у вигляді невзаємодіючого бозе-газу. І хоча вираз для двочасової функції Ґріна, збудованої на операторах Бозе $D^{\mp}_{nm}(t) \equiv \mp i\Theta(\pm t)\langle\{s^{-}_{n}(t), s^{+}_{m}(0)\}\rangle$, збігається з точним, через різну статистику цей метод виявляється незастосовним для моделі з лоренцовим безладом, оскільки поява елементарних збуджень з як завгодно великою від'ємною енергією робить систему нестійкою. Розрахунок функцій Ґріна $D^{\mp}_{nm}(t)$, та термодинамічних властивостей моделі проведено в наближенні типу Тяблікова, коли для функцій Ґріна вищих порядків, що виникають в рівнянні руху застосовують таке розщеплення кореляційних функцій $\langle s^{z}_{n}(t) s^{\pm}_{k}(t) s^{\pm}_{l}\rangle \approx \overline{\langle s^{z}\rangle}\langle s^{\pm}_{k}(t) s^{\pm}_{l}\rangle$. Дане наближення кількісно дещо покращує числові результати для термодинамічних функцій в порівнянні з наближенням комутаційних співвідношень Бозе.

На основі отриманих точних результатів перевірено точність наближення когерентного потенціалу. Розв'язок рівняння Дайсона для функції Ґріна невпорядкованої моделі можна зобразити у вигляді розкладу за функціями Ґріна ${}^{a}G^{\mp}_{gm}(\omega)$ однорідної системи у когерентному полі $\breve{\Omega}$ та t-матриці:

$$G^{\mp}_{gm}(\omega)={}^{a}G^{\mp}_{gm}(\omega)+{}^{a}G^{\mp}_{gn}(\omega)t_n{}^{a}G^{\mp}_{nm}(\omega)+\ldots, \tag{3}$$

де $t_n = \dfrac{W_{nn}}{1-{}^{a}G^{\mp}_{nn}(\omega)W_{nn}}$ — t-матриця моделі, W_{nr} — деяка матриця, що описує невпорядкованість в моделі, в нашому випадку вона діагональна: $W_{nr} = (\Omega_n - \breve{\Omega})\delta_{nr}$. Одновузлове наближення когерентного потенціалу полягає в тому, що ми вибираємо таке значення поперечного поля $\breve{\Omega}$, щоб усереднена за випадковими конфіґураціями t-матриця була рівна нулю. В цьому випадку функції Ґріна випадкової та однорідної системи співпадатимуть. В роботі виявлено, що наближення когерентного потеціалу для моделі в випадковому лоренцовому поперечному полі містить точний результат для усередненої функції Ґріна. У випадку, коли поперечне поле задається дискретним розподілом $p(\Omega_1,\ldots,\Omega_N) = \prod_{j=1}^{N}\left[x\delta(\Omega_j) + (1-x)\delta(\Omega_j - \Omega)\right]$, $0 \le x \le 1$, рівняння для когерентного потенціалу зводиться до алгебричного рівняння 3-го порядку. Воно розв'язується, а його підстановка у вираз для функції Ґріна дозволяє обчислити усереднену щільність елементарних збуджень. Порівняння з результатами числового підходу для скінченних ланцюжків доводить високу точність методу когерентного потенціалу, хоча він і не відтворює тонкої структури функції щільності елементарних збуджень, яка притаманна точним результатам (рис.1).

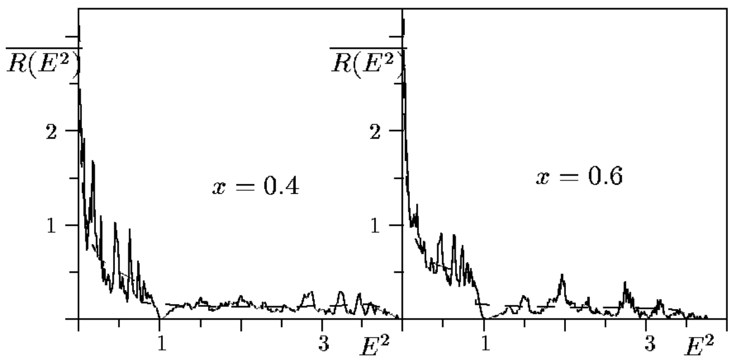

Рис. 1. Усереднена спектральна щільність $\overline{R(E^2)} = \frac{\overline{\rho(E)}+\overline{\rho(-E)}}{2|E|}$ як функція E^2: точні результати числового методу (суцільні лінії), результати наближення когерентного потенціалу (штриховані лінії) Ω_0=0, Ω=1, J=1, D=0.

В останньому параграфі розділу розглянута одновимірна спін-1/2 *XXZ* модель Гайзенберґа із взаємодією Дзялошинського-Морія у випадковому лоренцовому поперечному полі. Вона відповідає включенню в гамільтоніан (1) доданку $J^z\sum_{j=1}^{N-1} s_j^z s_{j+1}^z$, який після перетворення Йордана-Віґнера породжуватиме у ферміонізованому гамільтоніані член, що описує взаємодію ферміонів $J^z\sum_{j=1}^{N-1} c_j^+ c_j c_{j+1}^+ c_{j+1}$. Для функцій Ґріна вищих порядків, які виникають у рівнянні руху, застосовується наближення типу Хартрі-Фока. В результаті розв'язок для невідомої функції Ґріна міститиме невідомі середні типу $\langle c_i^+ c_j \rangle$, які потрібно знайти самоузгоджено. Подібний підхід до розгляду однорідного гайзенберґового ланцюжка розглядався Булаєвським (Булаевский Л.Н., ЖЭТФ, 1962, **43**, 968-973).

<u>Третій розділ</u> називається "Рівноважна статистична механіка неоднорідного спін-1/2 *XY* ланцюжка". Тут запропоновано числовий метод для неоднорідної одновимірної *XY* моделі у поперечному полі, яка складається з *N* спінів величиною 1/2 у вузлах одновимірної ґратки з гамільтоніаном

$$H=\sum_{j=1}^{N}\Omega_j s_j^z+\sum_{j=1}^{N-1}\left(J_j^{xx}s_j^x s_{j+1}^x+J_j^{yy}s_j^y s_{j+1}^y+J_j^{xy}s_j^x s_{j+1}^y+J_j^{yx}s_j^y s_{j+1}^x\right), \qquad (4)$$

де Ω_j — значення поперечного поля на j-му вузлі, а $J_j^{\alpha\beta}$ — обмінна взаємодія між компонентами спіна s_j^α, s_{j+1}^β $(\alpha,\beta=x,y)$. Подібно до попереднього розділу здійснено перетворення Йордана-Віґнера, після якого отримано квадратичну за фермі-операторами форму

$$H=-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\Omega_j+\sum_{i,j=1}^{N}\left(c_i^+A_{ij}c_j+\tfrac{1}{2}\left(c_i^+B_{ij}c_j^+-c_iB_{ij}^*c_j\right)\right), \qquad (5)$$

де A_{ij}, B_{ij} — елементи тридіагональних матриць, значення яких визначається константами взаємодій та поперечних полів. Квадратична форма (5) діагоналізується за допомогою канонічного перетворення Боголюбова. В результаті спектр власних значень ферміонізованого гамільтоніана співпадатиме із спектром власних значень блочної матриці $\begin{pmatrix}\mathbf{A} & \mathbf{B}\\ -\mathbf{B}^* & -\mathbf{A}^*\end{pmatrix}$ розміру $2N\times 2N$, а коефіцієнти канонічного перетворення з її власними векторами. Із спектру власних значень отримується щільність елементарних збуджень моделі, а, отже, і термодинамічні функції. Поперечну намагніченість та статичну поперечну сприйнятливість отримують в однорідному випадку, диференціюючи вільну енергію за поперечним полем. Проте, оскільки ми розв'язуємо задачу чисельно і не знаємо явної залежності щільності розподілу елементарних збуджень від поперечного поля, для обчислення середньої намагніченості та динамічних кореляційних функцій слід користуватись явними виразами середніх від спінових операторів. В результаті, для обчислення середніх від спінових операторів необхідно знати коефіцієнти канонічного перетворення, які є власними векторами блочної матриці.

Дослідження характеристик системи проводиться таким чином: розглядаємо скінченний ланцюжок довжиною *N*, значення полів на вузлах та міжспінової взаємодії вибираються генератором випадкових чисел із заданим розподілом імовірності. Далі задача пошуку власних значень гамільтоніана, вільної енергії, часових кореляційних функцій розв'язується чисельно для кожної конкретної системи. Потім генеруються нові системи з тим самим розподілом імовірності. В кінці процесу всі величини усереднюються за наявними випадковими реалізаціями.

В роботі також розглянуто частинні випадки спін-1/2 анізотропної *XY* моделі без взаємодії Дзялошинського-Морія та ізотропної моделі з взаємодією Дзялошинського-Морія. В ізотропному випадку знайдено явну залежність щільності елементарних збуджень від постійної складової поперечного поля $\rho(E,\Omega_0)=\rho(E-\Omega_0)$, що дозволяє виразити поперечну намагніченість, статичну поперечну сприйнятливість лише через неї. Вирази для цих характеристик мають ту ж саму залежність від щільності елементарних збуджень, що й точні аналітичні вирази, отримані в попередньому розділі для випадку лоренцового безладу.

Результати числового підходу порівнюються з відомими точними аналітичними результатами для однорідних ланцюжків, причому виявлено, що практично вже система з 200 спінами достатньо добре описує всі термодинамічні та динамічні властивості, проте для розрахунку щільності елементарних збуджень потрібно брати ланцюжки порядку 1000 спінів, щоб отримати достатньо гладку її форму. Як приклад роботи методу обчислена динамічна сприйнятливість одновимірної спін-1/2 квантової моделі Ізінґа з взаємодією Дзялошинського-Морія, досліджується її зміна при включенні випадкового поля.

При розгляді простої квантової моделі Ізінґа без взаємодії Дзялошинського-Морія задачу розрахунку характеристик моделі можна звести до діагоналізації дійсної тридіагональної матриці розміром $N\times N$. Модель Ізінґа у випадковому поперечному полі, яке може приймати два значення на вузлі

$$\Omega_j=\Omega c_j\,,\quad p(\ldots,c_j,\ldots)=\prod_{n=1}^{N}\left[x\delta(c_n)+(1-x)\delta(c_n-1)\right],\quad 0\le x\le 1\,, \tag{6}$$

виявляє деякі особливості. Зокрема при $\Omega>J/2$ виникають елементарні збудження з близькими до нуля енергіями. Це можна пояснити як виникнення поверхневих збуджень у ланцюжках з вільними кінцями. Після унітарного перетворення $U=\prod_{k=1}^{N-1}\exp[i\,\frac{1}{4}\pi\, s_k^x s_{k+1}^y]$ ми приходимо до гамільтоніана моделі Ізінґа з випадковою взаємодією Ω_j у поперечному полі *J*. Це дозволяє розглянути модель як сукупність дрібніших ланцюжків, в кожному з яких є локальне поверхневе збудження з низькою енергією. Ця сукупність поверхневих збуджень суттєво змінює низькотемпературну поведінку теплоємності. Досліджуються також поперечна намагніченість, статична сприйнятливість та *zz*-кореляційна функція. У випадку, коли поперечне поле $\Omega\le J/2$,

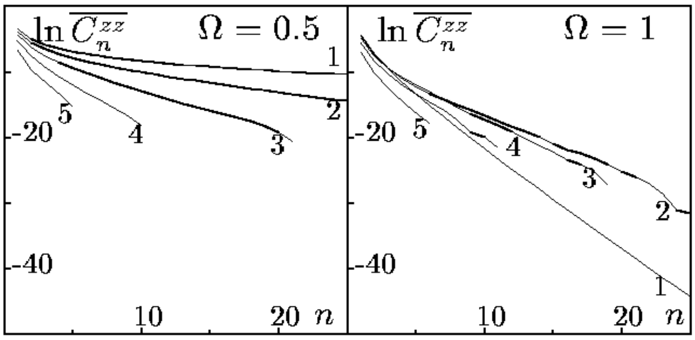

Рис. 2. $\ln\overline{C_n^{zz}}$ як функція відстані між вузлами n при T=0;1 – x=0.00, 2 – x=0.10, 3 – x=0.25, 4 – x=0.50, 5 – x=0.75

включення випадковості зменшує zz-кореляційну функцію. Це можна побачити на прикладі $\Omega = J/2$, коли кореляції найсильніші ($C_n^{zz} = \langle s_j^z s_{j+n}^z \rangle \sim \frac{1}{n^2}$ при T=0) (рис.2). На противагу цьому при Ω=1 та малих x кореляційна довжина випадкової системи несподівано зростає. Якісно це можна зрозуміти як результат ефективного зменшення середнього поперечного поля та його наближення до критичного значення $J/2$, коли кореляції максимальні.

<u>Четвертий розділ</u> називається “Дослідження невпорядкованої моделі Ізінґа в наближенні двохвосток”. На відміну від попередніх розділів він не містить точних розв'язків, а пов'язаний з методом функціонального інтеґрування та відсумовуванням діаграм певного типу, які виникають в цій техніці при наближеному розрахунку функціональних інтеґралів. В розділі розглядається двокомпонентна модель Ізінґа, яку можна описати гамільтоніаном:

$$H = \sum_{\alpha=1}^{2}\sum_{i=1}^{N}\mu_\alpha x_{i\alpha} + \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta=1}^{2}\sum_{i,j=1}^{N}V_{\alpha\beta}(\mathbf{R}_{ij})x_{i\alpha}x_{j\beta} + \sum_{\alpha=1}^{2}\sum_{i=1}^{N}h_\alpha x_{i\alpha}S_{i\alpha} + \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta=1}^{2}\sum_{i,j=1}^{N}I_{\alpha\beta}(\mathbf{R}_{ij})x_{i\alpha}S_{i\alpha}x_{j\beta}S_{j\beta}\,. \quad (7)$$

Перші два доданки відповідають невпорядкованій іонній підсистемі. Тут μ_α — хімічний потенціал іонів сорту α, $V_{\alpha\beta}(\mathbf{R}_{ij})$ — потенціал ефективної міжіонної взаємодії; $x_{i\alpha} = 1$, якщо на вузлі i іон сорту α і 0 в протилежному випадку. Два останні доданки (7) відповідають моделі Ізінґа з N спінами ($S_{i\alpha} = S_{i\alpha}^z = \pm 1$) в зовнішньому полі h_α, які взаємодіють з обмінною взаємодією $I_{\alpha\beta}(\mathbf{R}_{ij})$. Зручно ввести замість x_{i1}, x_{i2} (α =1,2) спінові змінні $S_{i0} = x_{i1} - x_{i2}$. Тоді гамільтоніан (7) формально можна зобразити у такому вигляді:

$$H = E(\mu) + \sum_{\sigma=0,1,2}\sum_{i=1}^{N}\Gamma_\sigma \Theta_{i\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{\sigma,\sigma'}\sum_{i,j=1}^{N} I_{\sigma\sigma'}(\mathbf{R}_{ij})\Theta_{i\sigma}\Theta_{j\sigma'}\,,$$

де $\Theta_{i0} = S_{i0}$, $\Theta_{i1} = x_{i1}S_{i1}$, $\Theta_{i2} = x_{i2}S_{i2}$, $\Gamma_0 = \frac{1}{2}(\mu_1 - \mu_2) + \frac{1}{4}(V_{11} - V_{22})$, $\Gamma_\alpha = h_\alpha$,

$$\hat{I}(\mathbf{R}_{ij}) = \begin{pmatrix} I_{00}(\mathbf{R}_{ij}) & 0 & 0 \\ 0 & I_{11}(\mathbf{R}_{ij}) & I_{12}(\mathbf{R}_{ij}) \\ 0 & I_{12}(\mathbf{R}_{ij}) & I_{22}(\mathbf{R}_{ij}) \end{pmatrix},\; I_{00}(\mathbf{R}_{ij}) = \tfrac{1}{4}(V_{11}(\mathbf{R}_{ij}) + V_{22}(\mathbf{R}_{ij}) - 2V_{12}(\mathbf{R}_{ij}))\,.$$

Твірним функціоналом даної системи є термодинамічний потенціал $\Omega(\mu,\mathbf{h}) = -\beta^{-1}\ln \mathrm{Sp}\, e^{-\beta H} = E(\mu) + \Omega_\Theta(\Gamma)$, а всі кумулянтні кореляційні функції виражатимуться через похідні за відповідними полями:

$$\left\langle \Theta_{i_1\delta_1}, \ldots, \Theta_{i_l\delta_l} \right\rangle^c = \Omega_\Theta^{(l)}(i_1\delta_1, \ldots, i_l\delta_l) = \frac{\delta}{\delta\Gamma_{i_1\delta_1}} \cdots \frac{\delta}{\delta\Gamma_{i_l\delta_l}} \left[-\beta\Omega_\Theta(\Gamma)\right]. \tag{8}$$

В даній системі можливі два типи фазових переходів. Перший пов'язаний з магнітним впорядкуванням, другий — з розшаруванням атомів різних сортів. У роботі виявлено, що у випадку, коли магнітні властивості спінів обох сортів однакові $I_{11} = I_{22}$ та $\Gamma_1 = \Gamma_2$, то фазова діаграма розшарування атомів різних сортів симетрична відносно перестановок компонент c_1 та c_2.

Дослідження характеристик моделі виконувалось методом функціонального інтеґрування, а наближене обчислення функціональних інтеґралів було здійснено з використанням сумування діаграм згрупованих за оберненим радіусом взаємодії. Виділення самоузгодженого поля $ж_0 = \Gamma_0 + I_{00}m_0$, $ж_\alpha = \Gamma_\alpha + \sum_\beta I_{\alpha\beta}m_\beta$ $(\alpha,\beta=1,2)$ в термодинамічному потенціалі

$$-\frac{\beta}{N}\Omega_\Theta(\Gamma) = -\frac{1}{2}\sum_{\delta,\delta'=0,1,2} I_{\delta\delta'}m_\delta m_{\delta'} + f(ж) \tag{9}$$

приводить до зникнення всіх звідних за взаємодією діаграм; сукупність усіх незвідних позначається $f(ж)$. З точністю до однієї суми за q

$$f(ж) = \left\langle F^{(0)}(ж+\sigma)\right\rangle - \frac{1}{2}\sum_{\delta,\delta'=0,1,2}\lambda^{(2)}_{\delta\delta'}\left\langle \hat{F}^{(2)}_{\delta\delta'}(ж+\sigma)\right\rangle - \frac{1}{2N}\sum_q \ln\det\left[1 - \hat{I}(q)\left\langle \hat{F}^{(2)}(ж+\sigma)\right\rangle\right]. \tag{10}$$

Тут введено такі позначення для середніх від довільної функції $y(ж+\sigma)$ за флюктуаційними полями σ з гаусовою функцією розподілу $\rho_2(\sigma)$:

$$\left\langle y(ж+\sigma)\right\rangle = \int d\sigma_0 d\sigma_1 d\sigma_2 \rho_2(\sigma) y(ж+\sigma), \tag{11}$$

$$\rho_2(\sigma) = \left[\det 2\pi\hat{\lambda}^{(2)}\right]^{-1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_{\delta,\delta'}\left[\lambda^{(2)}\right]^{-1}_{\delta\delta'}\sigma_\delta\sigma_{\delta'}\right\},$$

де $\left[\lambda^{(2)}\right]^{-1}$ обернена до $\hat{\lambda}^{(2)}$ матриця. $F^{(l)}_{\delta_1\ldots\delta_l}(ж+\sigma)$ відповідають похідним за флюктуаційними полями σ_l від твірного функціоналу невзаємодіючої системи. На основі співвідношень (8) отримано також вирази для кореляційних функцій моделі.

Сумування всіх звідних за блоком другого порядку діаграм приводить до наближення двохвосток. З умови стаціонарності твірного функціоналу отримують систему 9-ти рівнянь для невідомих варіаційних параметрів. Чисельно досліджуються випадки однокомпонентної моделі Ізінґа, немагнітного бінарного сплаву та ґраткового газу. Для однокомпонентної моделі Ізінґа отримано температурну залежність параметра порядку в різних наближеннях. Відомо, що в наближенні двохвосток виникає фазовий перехід I роду (Garanin D.A., Lutovinov V.S. Sol.St.Com., 1984, **50**, 219-222). На відміну від нього наближення гаусових флюктуацій, яке можна отримати, якщо серед сукупності всіх петлевих діаграм врахувати лише дві перші, хоча й дає менш точний результат для T_c, не містить нефізичних областей. Оскільки наближення двохвосток нефізичне в околі критичної температури числові дослідження для немагнітних бінарного сплаву та ґраткового газу проводяться в наближенні гаусових флюктуацій, а результати порівнюються з наближенням молекулярного поля.

П'ятий розділ називається "Модель Ізінґа з різними типами взаємодій в методі ефективного поля". Тут розглядається модель Ізінґа з довільною міжспіновою взаємодією $J(\mathbf{R}_{ij})$. Теорія ефективного поля, що ґрунтується на тотожності Калена $\left\langle S_k \right\rangle = \left\langle th\left[\beta\left(\sum_j J(\mathbf{R}_{kj}) S_j + \Gamma_k\right)\right]\right\rangle$, застосовувалась до розгляду моделей з взаємодією між найближчими сусідами. Для поширення методу на модель Ізінґа з взаємодією довільного радіуса в роботі розглянута інтеґральна форма цієї тотожності:

$$\left\langle S_k \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{th}(\beta h) P(h) dh, \tag{12}$$

де $S_k=\pm1$ — z-компонента оператора спіну, $P(h) = \left\langle \delta\left(h - \sum_j J(\mathbf{R}_{kj}) S_j - \Gamma_k\right)\right\rangle$ — функція розподілу локальних полів. Вона визначає всі термодинамічні властивості моделі і її обчислення є основним завданням теорії. Метод ефективного поля можна сформулювати таким чином: після фур'є-розкладу функції розподілу

$$P(h) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta e^{i\zeta h} e^{-i\zeta\Gamma_k} \left\langle \prod_j e^{-i\zeta J(\mathbf{R}_{kj}) S_j} \right\rangle \tag{13}$$

проблема зводиться до обчислення середнього від добутку, який містить кореляційні функції як завгодно великого порядку. В наближенні ефективного поля, яке полягає в нехтуванні кореляціями між спінами на різних вузлах $\langle S_{j_1} \ldots S_{j_n} \rangle \approx \langle S_{j_1} \rangle \ldots \langle S_{j_n} \rangle$, виходить, що

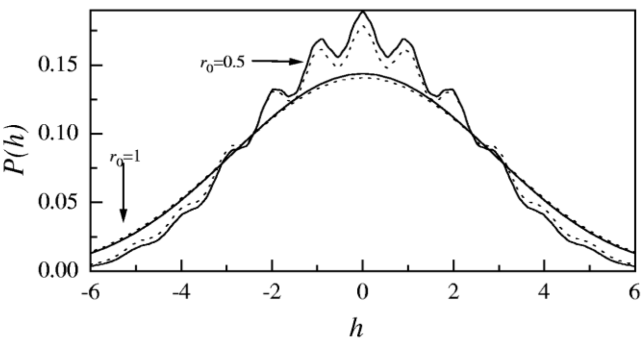

Рис. 3. Функція розподілу локальних полів P(h) для квадратної ґратки та взаємодії $J(R)=\exp\left(-\frac{|\mathbf{R}-1|}{r_0}\right)$ для різних r_0 при T=T_c: наближення ефективного поля — суцільна лінія, кореляційного ефективного поля — штрихована.

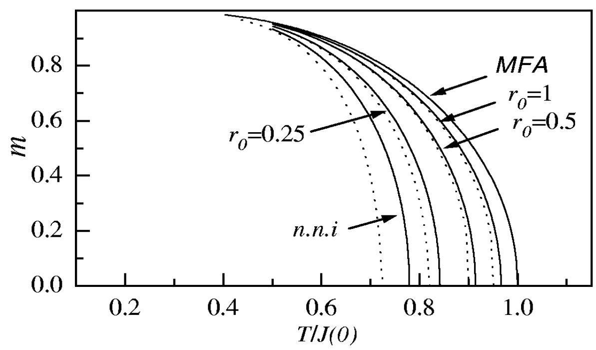

Рис. 4. Температурна залежність намагніченості m моделі на квадратній ґратці для обмінної взаємодії $J(R)=\exp\left(-\frac{|\mathbf{R}-1|}{r_0}\right)$: наближення ефективного поля — суцільна лінія, кореляційного ефективного поля — штрихована.

$\left\langle \prod_j e^{-i\zeta J(\mathbf{R}_{kj})S_j} \right\rangle \approx \prod_j \left\langle e^{-i\zeta J(\mathbf{R}_{kj})S_j} \right\rangle$. Це наближення дозволяє отримати функцію розподілу залежну лише від середнього магнітного моменту, що не відбиває залежності її від температури при T>T_c. Покращенням цього наближення є наближення кореляційного ефективного поля, яке полягає в наближеному зображенні спінових операторів на різних вузлах через спін на виділеному вузлі $S_j \approx m+\lambda_j(S_k-m)$, де λ_j — невідомий кореляційний параметр Це дозволяє уникнути у функції розподілу $P(h)$ (13) кореляційних функцій як завгодно великого порядку. В результаті вона матиме в наближенні кореляційного ефективного поля такий вигляд:

$$P(h)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\zeta e^{i\zeta h} e^{-i\zeta\Gamma_k} \left\langle \prod_j \left(A_j + B_j S_k\right) \right\rangle \tag{14}$$

де $A_j=\cos(\zeta J(\mathbf{R}_{kj}))-im(1-\lambda_j)\sin(\zeta J(\mathbf{R}_{kj}))$, $B_j=-i\lambda_j\sin(\zeta J(\mathbf{R}_{kj}))$.

Метою цього розділу є вивчення впливу величини радіуса взаємодії в межах розглянутих наближень ефективного і кореляційного ефективного поля на поведінку термодинамічних функцій та функції розподілу локальних полів $P(h)$. Через функцію розподілу $P(h)$ можна виразити поперечний динамічний структурний фактор $\left\langle S_i^x S_j^x(t)\right\rangle_{k,\omega}=\frac{N}{2}(P(\omega)+P(-\omega))/(1+\exp(-\beta\omega))$ і дослідити динамічні властивості системи. На прикладі моделі з експоненційно спадною взаємодією між спінами досліджено як форма ліній функції розподілу локальних полів змінюється від гаусової при великих радіусах взаємодії до сукупності піків зі скінченною шириною ліній при зменшенні радіуса взаємодії (рис.3). Застосування наближення кореляційного ефективного поля показує, що врахування міжспінових кореляцій дещо збільшує флюктуації локальних полів, проте якісно не змінює профіль функції розподілу локальних полів. Слід зауважити, що результати для функції розподілу прямують до точних при безмежних температурах. Досліджено також температурні залежності деяких термодинамічних функцій, зокрема намагніченості (рис.4) та статичної сприйнятливості. При великих радіусах взаємодії результати обчислень прямують до результатів наближення молекулярного поля.

Основні результати та висновки

1. В дисертаційній роботі вперше отримано точні результати для термодинамічних функцій одновимірної спін-1/2 ізотропної *XY* моделі з взаємодією Дзялошинського-Морія у випадковому лоренцовому поперечному полі. З'ясовано, що при розрахунках термодинамічних функцій врахування взаємодії Дзялошинського-Морія приводить до перенормування міжвузлової взаємодії.
2. На прикладі такої моделі досліджено межі застосовності наближення комутаційних співвідношень Бозе та наближення типу Тяблікова. Виявлено, що для випадкового лоренцового поперечного поля ці наближення приводять до розбіжності статистичної суми через виникнення бозе-збуджень з від'ємною енергією.
3. На прикладі такої моделі виявлено, що за умови, коли термодинамічне усереднення проведено точно, одновузлове наближення когерентного потенціалу задовільно описує системи, як з неперервним, так і з дискретним розподілом випадкових параметрів гамільтоніана.
4. Запропоновано наближений підхід для опису одновимірної спін-1/2 *XXZ* моделі Гайзенберґа з взаємодією Дзялошинського-Морія у випадковому лоренцовому поперечному полі, який ґрунтується на фермі-зображенні гамільтоніана з наступним використання наближення Хартрі-Фока.
5. Числовий метод для дослідження скінченних спін-1/2 *XY* ланцюжків у поперечному полі застосовано до дослідження моделі Ізінґа у випадковому поперечному полі з взаємодією Дзялошинського-Морія. Показано, як безлад руйнує характерний частотний профіль поперечної динамічної сприйнятливості, зумовленої взаємодією Дзялошинського-Морія.
6. Досліджено термодинамічні та кореляційні функції одновимірної моделі Ізінґа у випадковому поперечному полі. Для моделі у випадковому поперечному полі, яке може приймати два значення, одне з яких 0, встановлено умови, за яких в системі виникають елементарні

збудження з близькими до нуля енергіями, що змінює низькотемпературний хід теплоємності. Показано, що при низьких концентраціях вузлів з нульовим поперечним полем *zz*-кореляційна довжина у випадковій системі зростає в порівнянні з однорідною.

7. Для дослідження термодинаміки невпорядкованої двокомпонентної моделі Ізінґа у рамках розвинень за оберненим радіусом взаємодії сформульовано ряд наближень за далекодією з базисним врахуванням короткосяжних взаємодій. Обчислено термодинамічні функції й побудовано фазові діаграми у випадках немагнітного бінарного сплаву і ґраткового газу.
8. Узагальнено метод ефективного поля на випадок моделі Ізінґа з довільною взаємодією. На прикладі експоненційно спадної міжвузлової взаємодії досліджено залежність форми лінії функції розподілу локальних полів від радіуса взаємодії. Обчислено намагніченість і статичну сприйнятливість для даної моделі з різними взаємодіями.
9. Наближення кореляційного ефективного поля для моделі Ізінґа узагальнено на випадок взаємодії довільного радіуса. Дане наближення, на відміну від наближення ефективного поля, дозволяє дослідити залежність функції розподілу локальних полів при температурах вищих за критичну.

Результати дисертації опубліковано в таких роботах:

1. Derzhko O., Krokhmalskii T., Verkholyak T. Thermodynamical properties of random spin-1/2 *XY* chain with Dzyaloshinskii-Moriya interaction. // JMMM, 1996, vol.157/158, p.421-423.
2. Derzhko O., Verkholyak T. One-dimensional spin-1/2 *XY* model as a test for methods in the spin system theory. // phys.stat.sol. (b), 1997, vol.200, 1, p.255-263.
3. Derzhko O., Krokhmalskii T., Verkholyak T. Thermodynamical and dynamical properties of quenched quantum spin chains. // Material Science & Engineering A, 1997, vol.226-228, p.1049-1052.
4. Derzhko O., Verkholyak T. One exactly solvable magnetic chain with quenched randomness. // Material Science & Engineering A, 1997, vol.226-228, p.745-748.
5. Derzhko O.V., Verkholyak T.M. One exactly solvable random spin-1/2 *XY* chain. // ФНТ, 1997, т.23, 9, p.977-982.
6. Derzhko O., Krokhmalskii T., Verkholyak T. Thermodynamics and spin correlations for Ising chain in random transverse field. // Philosophical Magazine B, 1997, vol.76, 5, p.855-858.
7. Sorokov S.I., Levitskii R.R., Verkholyak T.M. Effective field method for Ising model with arbitrary ferromagnetic interaction. // phys.stat.sol. (b), 1999, vol.211, 2, p.759-769.

8. Derzhko O., Krokhmalskii T., Verkholyak T. Thermodynamical properties of random spin-1/2 *XY* chain with Dzyaloshinskii-Moriya interaction. //Miramare - Trieste, 1995, 7p. (Internal Report / International Centre for Theoretical Physics; IC/95/181).
9. Derzhko O., VerkholyakT. 1D spin-1/2 XY model as a testing ground for spin systems theory methods. //Miramare - Trieste, 1995, 10p. (Internal Report / International Centre for Theoretical Physics; IC/95/182).
10. Derzhko O.V., Verkholyak T.M. Spin-1/2 isotropic XY chain with Dzyaloshinskii-Moriya interaction in random lorentzian transverse field. - Lviv, 1996, 33p. (Preprint / Institute for Condensed Matter Physics; ICMP-96-25E).
11. Sorokov S.I., Levitskii R.R., Verkholyak T.M. Investigation of the annealed disordered Ising systems within two-tail approximation. - Lviv, 1996, 19p. (Preprint / Institute for Condensed Matter Physics; ICMP-96-26E).
12. Sorokov S.I., Levitskii R.R., Verkholyak T.M. Local field method for Ising model with arbitrary interaction. - Lviv, 1997, 15p. (Preprint / Institute for Condensed Matter Physics; ICMP-97-20E).
13. Сороков С.І., Левицький Р.Р., Верхоляк Т.М. Дослідження моделі Ізінґа методом ефективного поля. - Львів, 1999, 25с. (Препринт / Інститут фізики конденсованих систем; ICMP-99-04U).
14. Verkholyak T. Damping of spin correlations in random quantum Ising chains. - In.: International workshop on statistical physics and condensed matter theory (Sept.11-14, 1995, Lviv, Ukraine). Programme and abstracts, p.95.
15. Derzhko O., Verkholyak T. One exactly solvable magnetic chain with quenched randomness. - In: Ninth International Conference on rapidly Quenched and Metastable Materials. Book of abstracts. RQ9, Bratislava, August 25-30, 1996, p.346.
16. Sorokov S.I., Levitskii R.R., Verkholyak T.M. Local field method for Ising model with arbitrary interaction. // International Seminar & Phase Transition and Critical Phenomena, Poznan, Poland, December 4-6, 1997, p.19.
17. Sorokov S.I., Verkholyak T.M. Correlated effective field approximation for Ising model with arbitrary interaction. // In: INTAS-Ukraine Workshop on Condensed Matter Physics. Lviv, May 21-24, 1998, p.114.

Верхоляк Т.М. Вплив безладу та різних типів взаємодії на термодинамічні та динамічні властивості модельних спінових систем. - 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, 1999.

Дисертацію присвячено теоретичному дослідженню впливу безладу та різних типів взаємодії на термодинамічні та динамічні властивості модельних спінових систем. Для випадкових спін-1/2 *XY* ланцюжків запропоновано числовий метод дослідження термодинамічних та кореляційних функцій. У випадку ізотропного ланцюжка задача зведена до задачі Ллойда та розв'язана точно. Для дослідження двокомпонентної невпорядкованої моделі Ізінґа застосовується діаграмна техніка та обгорюються недоліки різних наближень. Досліджені динамічні властивості однорідної моделі Ізінґа в наближенні ефективного поля. Показано як у такій моделі виникає скінченна ширина ліній магнітного резонансу внаслідок далекосяжності взаємодії.

Ключові слова: *спінові моделі, невпорядковані системи, термодинаміка, кореляційні функції*.

Верхоляк Т.М. Влияние беспорядка и взаимодействий разных типов на термодинамические и динамические свойства модельных спиновых систем. - 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, 1999.

Диссертация посвящена теоретическому исследованию влияния беспорядка и разных типов взаимодействий на термодинамические и динамические свойства модельных спиновых систем. Для случайных спин-1/2 *XY* цепочек предложен метод исследования термодинамических и корреляционных функций. В случае изотропной цепочки задача сводится к задаче Ллойда и решается точно. Для исследования двухкомпонентной неупорядоченной модели Изинга применяется диаграммная техника и обсуждаются недостатки разных приближений. Исследованы динамические свойства однородной модели Изинга в приближении эффективного поля. Показано как в данной модели появляется конечная ширина линий магнитного резонанса вследствии дальнодействия взаимодействия.

Ключевые слова: *спиновые модели, неупорядоченные системы, термодинамика, корреляционные функции*.

Verkholyak T.M. Influence of disorder and different types of interactions on the thermodynamic and dynamic properties of the model spin systems. - Manuscript.

Thesis on search of the 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, 1999.

Theoretical study of how disorder and different types of interactions influence the thermodynamic and dynamic properties of spin systems is the subject of the presented thesis. The models with equilibrium and nonequilibrium disorder are considered.

For the one-dimensional spin-1/2 isotropic *XY* model with Dzyaloshynskii-Moriya interaction in random Lorentzian transverse field, the density of elementary excitations and the thermodynamic functions are found exactly using the Jordan-Wigner transformation and mapping the considered model to the model of free fermion on the one dimensional lattice. The average density of elementary excitations, transverse magnetization, static susceptibility are investigated numerically at different values of Dzyaloshinskii-Moriya interaction D. It is found out how this interaction renormalizes the isotropic interaction of the model. It is also shown that the random field causes disappearance of quantum phase transition at T=0. In virtue of the obtained exact results, some well known approximations are tested. It is found out that the Bose commutation rules approximation and the Tyablikov-like approximation cannot be applied to the model in random Lorentzian field because there arise the excitations with negative value of energy and the partition function of the model diverges. The results of the coherent potential approximation for the density of elementary excitations show a good agreement with the exact analytical and numerical results for the model with both continuous and discrete distribution functions of random parameters of the Hamiltonian. With the help of the Jordan-Wigner transformation, the approximate method for the spin-1/2 *XXZ* Heisenberg chain with Dzyaloshynskii-Moriya interaction in random Lorentzian transverse field is proposed. It is based on Hartree-Fock-like approximation for the fermionized spin Hamiltonian.

The exact numerical approach based on the fermionization procedure is applied to the finite spin-1/2 *XY* chains with arbitrary distribution functions of Hamiltonian parameters and with the antisymmetric interaction between x and y components of spin. The Hamiltonian is the quadratic form in fermionic representation, and the calculation of the thermodynamic and dynamic functions is reduced to solving the eigenvalue and eigenvector problem of a certain $2N\times 2N$ matrix. It allows one to consider sufficiently long chains consisting of 1000 spins or even more. The transverse dynamic susceptibility of the quantum Ising chain with Dzyaloshynskii-Moriya interaction in random Gaussian transverse field is calculated. It is demonstrated how the random field destroys the frequency shape of transverse dynamic susceptibility of such a model. The thermodynamic and correlation functions of the Ising chain in random transverse field are studied in details. If the random field can be equal to zero, it is determined the conditions, when the elementary excitations of low energy arise. These excitations cause the change of the specific heat at low temperatures. It is also found that the transverse correlation function for such a random model can increase in comparison with that of the uniform model.

The equilibrium disorder effect on the spin model properties is studied by using the Ising model with the binary disorder. The method of series expansion in inverse interaction radius is generalized for this purpose. The expressions for the thermodynamic potential and correlation functions are obtained within the two-tail and Gaussian fluctuation approximations. Because of two-tail approximation gives non-physical results in the critical temperature vicinity, all calculations are performed within the Gaussian fluctuation approximation. Phase diagrams (binodal and spinodal curves) for non-magnetic binary alloy, and the isoterms and coexistence curves for non-magnetic lattice gas are obtained.

To study the influence of the interaction radius on the physical characteristics of the Ising model, the effective field method is extended for the models with an arbitrary interaction. Using the integral representation of Callen identity the thermodynamic functions are expressed through the local field distribution function $P(h)$ and found within the effective and correlated effective field approximation. $P(h)$ can also describe some dynamic characteristics because the transverse dynamic structure factor is proportional to it. We studied the influence of the interaction radius on the thermodynamic function and the structure of the local field distribution function for the model with exponentially decaying interaction. We investigated how the shape of the local field distribution function changes from the Gaussian-like one for the large interaction radius to the set of peaks with finite linewidth for smaller magnitudes of the radius. It is found that taking into account spin correlations within the correlated effective field approximation does not change the shape of $P(h)$ but only increases the fluctuations of local field.
Key words: *spin models, disordered systems, thermodynamics, correlation functions.*

Підписано до друку 18.08.99. Формат 60x84/16.

Друк офсетний. Ум. друк. арк. 1,0. Тираж 100. Зам. 5052.

Друк ПТУ № 58 290008, Львів, вул. Ів. Федорова, 9.