ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ НАН УКРАЇНИ

на правах рукопису

ВАТАМАНЮК ОСТАП ЗИНОВІЙОВИЧ

Овр

ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ ФУНКЦІОНАЛЬНОГО ІНТЕГРУВАННЯ ДО ДОСЛІДЖЕННЯ СИСТЕМ З ДИПОЛЬНОЮ І КВАДРУПОЛЬНОЮ ВЗАЄМОДІЯМИ

Спеціальність 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 - 1996

Дисертація є руко[...]

Робота виконана на кафедрі вищої математики Державного університету "Львівська політехніка"

Науковий керівник:	доктор фізико-математичних наук, професор Рудавський Юрій Кирилович
Офіційні опоненти:	доктор фізико-математичних наук Гончар Микола Семенович
	доктор фізико-математичних наук Левицький Роман Романович
Провідна організація:	Львівський державний університет імені І.Франка

Захист відбудеться 25.12.1996 р. о 15 год. 30 хв. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 04.18.01 в Інституті фізики конденсованих систем НАН України за адресою: 290011, м.Львів, вул. Свенціцького 1.

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

Автореферат розіслано: ...22.11... 1996 р.

Вчений секретар
спеціалізованої Ради Д 04.18.01 Крохмальський Т.Є.
кандидат фіз.-мат.наук

АВ 36.178

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ.

Актуальність проблеми. Протягом декількох останніх десятиліть прогрес у багатьох областях теоретичної фізики пов'язаний з використанням методу континуального інтегрування. У статистичній фізиці такий підхід відіграв важливу роль у розвитку теорії неідеального бозе-газу і рідкого гелію, теорії заряджених частинок, при дослідженні проблем надпровідності, магнетизму і критичних явищ.

Важлива особливість методу функціонального інтегрування полягає в можливості отримати замкнені вирази для вільної енергії та функцій Гріна, що забезпечує такому підходу особливе місце серед різноманітних спроб виходу за межі теорії збурень. Наочність методу континуального інтегрування дозволяє порівняно швидко одержувати результати, отримання яких за допомогою традиційних підходів вимагає значних зусиль, пов'язаних з розрахунками складних комутаторів, класифікацією і вибірковим сумуванням нескінченної кількості діаграм чи перенормуванням вихідної взаємодії.

У роботах І.Вакарчука, Ю.Рудавського та Г.Понеділка метод функціонального інтегрування було застосовано до дослідження спінових систем. Запропонований формалізм зарекомендував себе зручним і ефективним засобом для дослідження термодинаміки широкого спектру систем, зокрема моделей Ізинга, Гайзенберга, де Жена та інших. Надалі цей підхід було узагальнено і для випадку аморфних та рідких магнетиків, що стало важливим внеском у розвиток теорії структурно невпорядкованих магнітних систем.

Одним з найцікавіших актуальних завдань статистичної фізики протягом останніх 10-15 років є вивчення моделей, що враховують обмін вищих порядків по спіну, зокрема біквадратичний. Для систем з порівняно слабкою білінійною обмінною взаємодією часто неможливо отримати навіть якісні результати без розгляду біквадратичного обміну. Врахування біквадратичної обмінної взаємодії допомогло зрозуміти цілий ряд експериментально виявлених особливостей поведінки різноманітних магнітних систем, зокрема багатьох сполук рідкісноземельних елементів. Важливим завданням сучасної статистичної фізики можна вважати дослідження таких систем у вищому, ніж молекулярного поля, наближенні, зокрема, отримання виразів для вільної енергії та температур фазових переходів і встановлення залежності останніх від співвідношення констант білінійного і біквадратичного обмінів. Ще важливіше, можливо, вивчити структурно невпорядковані системи такого типу.

Дана дисертація присвячена розвитку методу континуального інтегрування для вивчення систем з врахуванням біквадратичного обміну. Досліджується модель Ізинга з білінійною /"дипольною"/ та біквадратичною /"квадрупольною"/ взаємодіями для випадку величини спіна S=1.

Метою даної роботи є:

- побудова функціонального зображення і розрахунок вільної енергії моделі у наближенні двох сум по хвильовому вектору;
- одержання і аналіз виразів для температур фазових переходів, що відбуваються у системі, в наближенні хаотичних фаз;
- розгляд структурно невпорядкованої моделі і визначення впливу структурної невпорядкованості на температури фазових переходів;
- обгрунтування можливості розвитку пропонованого формалізму для дослідження складніших спінових моделей.

Методика дослідження: метод функціонального інтегрування в теорії спінових систем, кумулянтні розклади, розклад Ландау вільної енергії, "рідинне наближення" при моделюванні структурного безладу.

Наукова новизна роботи.

Формалізм функціонального інтегрування розвинуто для кристалічних та структурно невпорядкованих моделей, що враховують крім білінійної ще і біквадратичну обмінну взаємодію спінів; зокрема, досліджено модель Ізинга з білінійною та біквадратичною взаємодіями для S=1.

Проведено детальний аналіз розкладу Ландау вільної енергії згаданої кристалічної моделі як функції двох параметрів порядку.

У наближенні хаотичних фаз отримано вирази для температур фазових переходів і для трикритичної точки феромагнітного переходу.

Досліджено вплив структурної невпорядкованості на температури фазових переходів.

Вірогідність основних наукових результатів забезпечена:
- використанням апробованих методів та обгрунтованих наближень, які підтвердили свою адекватність в багатьох наукових дослідженнях;
- добрим узгодженням результатів у наближенні молекулярного поля з результатами, отриманими раніше іншими методами.

Практична цінність роботи. Одержані в роботі результати є певним внеском в розвиток теорії спінових систем зі складними обмінними взаємодіями і можуть використовуватися при поясненні експериментально виявлених особливостей кристалічних і структурно невпорядкованих систем, що описуються відповідними гамільтоніанами.

Результати для структурно невпорядкованої моделі можуть надалі бути використані для побудови адекватних моделей квадрупольного скла.

На захист виносяться наступні положення:
1. Функціональне зображення та вирази для вільної енергії у наближенні двох сум по хвильовому вектору кристалічної та структурно невпорядкованої моделей Ізинга з білінійною та біквадратичною взаємодіями для S=1.
2. Аналіз розкладу Ландау вільної енергії кристалічної моделі як функції двох параметрів порядку.
3. Одержання та аналіз виразів для температур фазових переходів і для трикритичної точки феромагнітного переходу кристалічної моделі у наближенні хаотичних фаз.
4. Дослідження впливу структурної невпорядкованості на температури фазових переходів моделі.
5. Функціональне зображення та вираз для вільної енергії у наближенні хаотичних фаз спін-обмінної моделі Шредингера для S=1.

Апробація результатів. Основні положення та результати дисертаційної роботи були представлені на українсько-французькому симпозіумі "Конденсована речовина: наука та індустрія" /Львів, 1993 р./, ювілейній науковій конференції, присвяченій 40-річчю фізичного ф-ту ЛДУ /Львів, 1993 р./, міжнародній конференції "Фізика в Україні" /Київ, 1993 р./, міжнародній науковій конференції, присвяченій 150-річчю І.Пулюя /Львів, 1995 р./, Міжнародній нараді з статистичної фізики та теорії конденсованого стану /Львів, 1995 р./ та на наукових семінарах Інституту фізики конденсованих систем НАН України у Львові.

Публікації. Зміст дисертаційної роботи відображений у 10 статтях і тезах доповідей наукових конференцій. У спільних публікаціях дисертантові належать: розвиток формалізму; одержання виразів для вільної енергії кристалічної та структурно невпорядкованої моделей; розрахунок коефіцієнтних функцій; отримання виразів для температур фазових переходів та трикритичної точки; аналіз Ландау розкладу вільної енергії; числові розрахунки для кристалічної моделі; одержання та розв'язання рівнянь для кореляційних функцій.

Структура та обсяг роботи. Дисертаційна робота складається з вступу, п'яти глав, додатку та списку цитованої літератури. Робота містить 136 сторінок машинописного тексту, з-поміж них 21 рисунок. Бібліографічний список складається з 108 назв.

КОРОТКИЙ ЗМІСТ РОБОТИ.

У вступі обгрунтовано актуальність проблем, дослідженню яких присвячена дисертація, сформульовано мету роботи, наукову новизну та основні положення, що їх виноситься на захист.

У першій главі наведено короткий огляд літератури, що стосується обраної теми. Показано важливість врахування взаємодій вищих порядків по спіну, зокрема, біквадратичної, для адекватного опису багатьох систем, у тому числі і магнітних. Розглянуто можливі механізми появи біквадратичного обміну та його роль у поясненні низки експериментально виявлених особливостей спінових систем.

У <u>другій главі</u> отримано функціональне зображення статистичної суми досліджуваної моделі і вільну енергію у наближенні двох сум по хвильовому вектору **k**.

Вивчається система, гамільтоніан якої має вигляд:

$$H = H_0 + H_{int} \quad , \tag{1}$$

$$H_{int} = -\frac{\lambda_1}{2}\sum_{\substack{i=1 \\ i\neq j}}^{N}\sum_{j=1}^{N} J(|R_i-R_j|)S_i^z S_j^z - \frac{\lambda_2}{2}\sum_{\substack{i=1 \\ i\neq j}}^{N}\sum_{j=1}^{N} J(|R_i-R_j|)Q_i^0 Q_j^0 \, , \tag{2}$$

$$H_0 = -h\sum_{i=1}^{N} S_i^z - \Omega\sum_{i=1}^{N} Q_i^0 \quad , \tag{3}$$

де $\lambda_1 J(|R_i-R_j|)$ і $\lambda_2 J(|R_i-R_j|)$ – відповідно білінійна та біквадратична обмінні взаємодії двох атомів з спінами S^z, розміщених у вузлах кристалічної гратки з координатами R_i та R_j; $i,j = 1,\ldots N$, де N – кількість вузлів гратки. Квадрупольний оператор Q_i^0 у випадку величини спіна $S=1$:

$$Q_i^0 = \sqrt{3}\,[(S_i^z)^2 - {}^2/_3] \quad . \tag{4}$$

Гамільтоніан системи відліку H_0 описує взаємодію ідеальної системи спінів і квадруполів з зовнішним магнітним полем h, спрямованим вздовж осі Oz та полем типу одноіонної анізотропії Ω, яке діє на квадруполі.

Статистична сума моделі Z зображається у вигляді континуального інтегралу:

$$Z = exp(-\beta F_0)\int(d\varphi)\, exp\left[\,F[\varphi]\,\right] \quad , \tag{5}$$

$$F[\varphi] = -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}}\hat{\varphi}_{\mathbf{k}}\hat{\varphi}_{-\mathbf{k}} + \sum_{l\geq 1}\frac{N^{1-l/2}}{l!}\sum_{\mathbf{k}_1\alpha_1}\ldots\sum_{\mathbf{k}_l\alpha_l}\mathfrak{M}_{\alpha_1\ldots\alpha_l}(\mathbf{k}_1\ldots\mathbf{k}_l)\times$$
$$\times\sqrt{\beta\nu(\mathbf{k}_1)\ldots\beta\nu(\mathbf{k}_l)}\;\varphi_{\mathbf{k}_1}^{(\alpha_1)}\ldots\varphi_{\mathbf{k}_l}^{(\alpha_l)} \quad , \tag{6}$$

де β - обернена температура, F_0 - вільна енергія системи відліку. $F[\varphi]$ - функціонал вільної енергії, залежний від функціональних змінних $\hat{\varphi}_{\mathbf{k}} = (\varphi_{\mathbf{k}}^{(1)}, \varphi_{\mathbf{k}}^{(2)})$, спряжених до спінових змінних

$$\hat{L}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} \hat{L}_j e^{-i\mathbf{k}R_j}, \quad \hat{L}_i = (L_i^{(1)}, L_i^{(2)}),$$

$$L_i^{(1)} = \sqrt{\lambda_1}\, S_i^z, \quad L_i^{(2)} = \sqrt{\lambda_2}\, Q_i^0, \tag{7}$$

$\mathbf{k}$ - хвильовий вектор - набуває значень з першої зони Бриллюена, $\nu(\mathrm{k})$ - фур'є-образ обмінного інтегралу $J(|R|)$. Коефіцієнти функціонального ряду $\mathfrak{M}_{\alpha_1..\alpha_l}(\mathbf{k}_1 \ldots \mathbf{k}_l)$ виражаються через незвідні середні операторів $L_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}$ по ідеальній системі спінів та квадруполів:

$$\mathfrak{M}_{\alpha_1 \ldots \alpha_l}(\mathbf{k}_1 \ldots \mathbf{k}_l) = \delta(\mathbf{k}_1 + \ldots + \mathbf{k}_l) \left\langle L_{j_1}^{(\alpha_1)} \ldots L_{j_l}^{(\alpha_l)} \right\rangle_0^c, \tag{8}$$

наприклад,

$$\left\langle S_{i_1}^z Q_{i_2}^0 \right\rangle_0^c = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial}{\partial h_{i_1}} \frac{\partial}{\partial \Omega_{i_2}} \left[-\beta F_0[h_i, \Omega_i]\right]\Big|_{h_i \equiv h,\, \Omega_i \equiv \Omega} = M_{12}(h,\Omega)\delta_{i_1, i_2}$$

$$\left\langle S_{i_1}^z S_{i_2}^z Q_{i_3}^0 \right\rangle_0^c = \frac{1}{\beta^3} \frac{\partial}{\partial h_{i_1}} \frac{\partial}{\partial h_{i_2}} \frac{\partial}{\partial \Omega_{i_3}} \left[-\beta F_0[h_i, \Omega_i]\right]\Big|_{h_i \equiv h,\, \Omega_i \equiv \Omega} =$$

$$= M_{112}(h,\Omega)\delta_{i_1, i_2}\delta_{i_3, i_4}, \tag{9}$$

Вважаючи негаусову частину функціоналу (6) малим збуренням, знайдено вираз для вільної енергії системи у наближенні двох сум по $\mathbf{k}$, яке відповідає другому порядку теорії збурень за кубом оберненого ефективного радіуса обмінної взаємодії. У наближенні хаотичних фаз:

$$F = \frac{N}{\beta} \frac{2y_2}{\sqrt{3}} - \frac{N}{\beta} \ln\left\{ 2\exp(y_2\sqrt{3})\, \mathrm{ch}\, y_1 + 1 \right\} + \frac{N}{\beta} \frac{(y_1 - \beta h)^2}{2\alpha_1(0)} +$$

$$+ \frac{N}{\beta}\frac{(y_2-\beta\Omega)^2}{2\alpha_2(0)} + \frac{1}{2\beta}\sum_k \ln\Big[(1-\alpha_1(k)M_{11}(y_1,y_2)) \times \tag{10}$$

$$\times (1-\alpha_2(k)M_{22}(y_1,y_2)) - \alpha_1(k)\alpha_2(k)M_{12}^2(y_1,y_2))\Big] \; ,$$

де здійснено перехід до самоузгоджених полів

$$y_1 = \beta h + \beta\lambda_1\nu(0)\langle S^z\rangle \; , \tag{11}$$

$$y_2 = \beta\Omega + \beta\lambda_2\nu(0)\langle Q^0\rangle \; ,$$

а $\langle\ldots\rangle$ -статистичне усереднення по розподілу Гіббса з повним гамільтоніаном (1), $\alpha_1(k) \equiv \lambda_1\beta\nu(k)$, $\alpha_2(k) \equiv \lambda_2\beta\nu(k)$.

У третій главі на основі виразу для вільної енергії досліджуються термодинамічні властивості моделі.

Картина можливих фазових переходів визначається співвідношенням між величинами білінійної та біквадратичної взаємодій $l = \lambda_2/\lambda_1$. У випадку $\lambda_1 > \lambda_2$ відбувається перехід з парамагнітної /$\langle S^z\rangle=0$, $\langle Q^0\rangle=0$/ у феромагнітну /$\langle S^z\rangle\neq 0$, $\langle Q^0\rangle\neq 0$/ фазу; для $\lambda_1 < \lambda_2$ – з парамагнітної фази у квадрупольну /$\langle S^z\rangle=0$, $\langle Q^0\rangle\neq 0$/. У наближенні молекулярного поля /в (10) слід залишити чотири перших члени/, для температур фазових переходів у феромагнітну T_d^0 та квадрупольну T_Q^0 фази відповідно маємо:

$$T_d^0 = {}^2/_3\, \lambda_1\nu(0) \; , \qquad T_Q^0 = {}^2/_3\, \lambda_2\nu(0) \; . \tag{12}$$

Отримано температурні залежності $\langle S^z\rangle$ і $\langle (S^z)^2\rangle$ у феромагнітній фа..., ...их чітко видно, що при переході через точку $l=0,5$ / $\lambda_1=2\lambda_2$ / змінюється рід фазового переходу, а також температурну залежність $\langle Q^0\rangle$ у квадрупольній фазі.

Детальний аналіз областей стійкості різних фаз і характеру фазових переходів проведено за допомогою розкладу Ландау вільної енергії системи як функції двох параметрів порядку $m\equiv\langle S^z\rangle$ і $Q\equiv\langle Q^0\rangle$ в околі температур фазових переходів. У наближенні молекулярного поля маємо:

$$\frac{F}{N} = a_2(T)m^2 + b_2(T)Q^2 + a_3(T)m^2Q + b_3(T)Q^3 + a_4(T)m^4 + \\ + b_4(T)m^2Q^2 + c_4(T)Q^4 \quad . \tag{13}$$

Отримано графіки залежностей від l межі стійкості феромагнітної фази та точки фазового переходу першого роду у феромагнітну фазу. З умов стабільності фаз знайдено точку $T/\lambda_1\nu(0) = 20/27 = 0.741$, в якій відбуваються переходи першого роду у феромагнітну /при $l<1$/ та квадрупольну /при $l>1$/ фази.

Проаналізовано поведінку системи у наступному після молекулярного поля наближенні - наближенні хаотичних фаз /гаусовому/. Знайдено поправки до відповідних коефіцієнтів розкладу Ландау. Для температур переходів маємо:

$$T^*_d = 1 - \frac{3}{4N}\left[\left[1-\frac{2}{3}\frac{l}{1-l}\right]\sum_k \frac{\gamma_k}{1-\gamma_k} + \left[1+\frac{2}{3}\frac{l}{1-l}\right]\sum_k \frac{l\gamma_k}{1-l\gamma_k}\right],$$
$$T^*_Q = 1 - \frac{3}{4N}\left[\left[1+\frac{2}{3}\frac{1}{1-l}\right]\sum_k \frac{\gamma_k}{1-\gamma_k} + \left[1-\frac{2}{3}\frac{1}{1-l}\right]\sum_k \frac{\gamma_k}{l-\gamma_k}\right], \tag{14}$$

де $T^*_d = T^G_d/T^0_d$, $T^*_Q = T^G_Q/T^0_Q$, $\gamma_k = \nu(k)/\nu(0)$.

Проведено числові розрахунки T^*_d та T^*_Q для модельного потенціалу взаємодії

$$J(r) = J\,exp\left[-\alpha\,(r/a - 1)\right], \quad \nu(k) = \frac{\alpha^4}{(\alpha^2+k^2a^2)^2}. \tag{15}$$

Отримано залежності $T^*_d(l)$, $T^*_d(\alpha^{-1})$, $T^*_Q(l)$, $T^*_Q(\alpha^{-1})$ /рис.1-3/. Наближення хаотичних фаз, як і слід було очікувати, понижує температури фазових переходів. Для l достатньо далеких від $l=1$, T^*_d і T^*_Q фактично не залежать від l. Поведінка $T^*_d(l)$ і $T^*_Q(l)$ при $l\to1$, ймовірно, визначається взаємодією малих величин α^3 та $1-l$.

Для трикритичної точки переходу у феромагнітну фазу маємо:

$$T^{*} = 1 + \frac{1 - \dfrac{9}{4N}\left[\left[1+\dfrac{10}{9}\,\dfrac{1}{1-l}\right]\sum\limits_{k}\dfrac{\gamma_k}{1-\gamma_k} + \left[1-\dfrac{10}{9}\,\dfrac{1}{1-l}\right]\sum\limits_{k}\dfrac{l\gamma_k}{1-l\gamma_k}\right]}{1 + \dfrac{1}{24N}\left[\,p_1(l)\sum\limits_{k}\dfrac{\gamma_k}{1-\gamma_k} + P_2(l)\sum\limits_{k}\dfrac{l\gamma_k}{1-l\gamma_k}\right]} \qquad (16)$$

де

$$p_1(l) = 81 + \frac{3}{1-l} + 177\,\frac{l}{1-l}\,, \quad p_2(l) = 171 + \frac{3}{1-l} + 177\,\frac{l}{1-l}\,.$$

Одержано залежність $T^{*}(\alpha^{-1})$ /рис. 4/; T^{*} значно чутливіша до змін α у порівнянні з $T^{*}_{d}(\alpha^{-1})$ та $T^{*}_{Q}(\alpha^{-1})$.

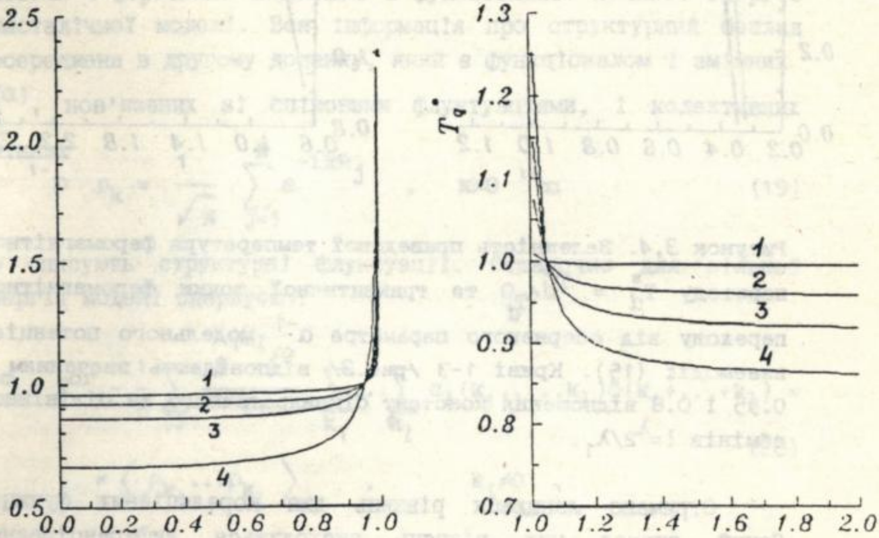

Рисунок 1,2. Залежність приведеної температури феромагнітного $T^{*}_{d} = T^{G}_{d}/T^{O}_{d}$ та квадрупольного $T^{*}_{Q} = T^{G}_{Q}/T^{O}_{Q}$ переходів від відношення констант біквадратичного та білінійного обмінів $l = \lambda_2/\lambda_1$. Криві 1-4 відповідають значенням 1, 1.25, 1.5 і 2 /рис.1/ та 0.5, 1.0, 1.25 і 1.5 /рис.2/ параметра α модельного потенціалу взаємодії (15).

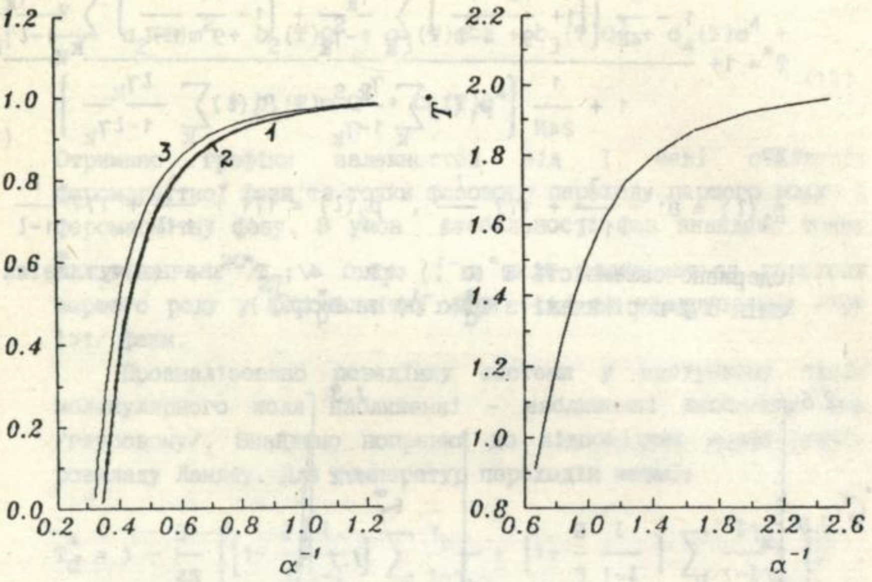

Рисунок 3,4. Залежність приведеної температури феромагнітного переходу $T_d^* = T_d^G/T_d^0$ та трикритичної точки феромагнітного переходу від оберненого параметра α^{-1} модельного потенціалу взаємодії (15). Криві 1-3 /рис.3/ відповідають значенням 0, 0.55 і 0.8 відношення констант біквадратичного та білінійного обмінів $l=\lambda_2/\lambda_1$.

Отримано ланцюжок рівнянь для кореляційних функцій. Явний вигляд цих рівнянь знаходиться диференціюванням функціоналу вільної енергії по функціональних змінних. Робота зводиться до розв'язання системи рівнянь для середніх від добутків функціональних змінних, через які виражаються парні кореляційні функції. Розрахунки проведено у наближенні хаотичних фаз.

У четвертій главі розглянуто структурно невпорядковану модель. Тепер гамільтоніан моделі $H = H[\{R^N\}]$, залежить від конфігурації $(R_i \ldots R_N) \equiv \{R^N\}$ магнітних атомів. Величина $J(|R_i-R_j|)$ розглядається як параметр теорії, що вибирається зручним чином, виходячи з фізичних міркувань. Хвильовий вектор $\mathbf{k}$ змінюється в нескінченому $\mathbf{k}$-просторі.

Функціональне зображення для статистичної суми системи набуває вигляду:

$$Z[\{R^N\}] = exp(-\beta F_0) \int (d\varphi)\ exp\left[F[\varphi;\{R^N\}] \right] \quad . \tag{17}$$

Функціонал $F[\varphi;\{R^N\}] \equiv F[\varphi;\rho]$ складається з двох доданків:

$$F[\varphi;\rho] = F[\varphi] + \Delta F[\varphi;\rho] \quad , \tag{18}$$

перший з яких не залежить явним чином від конфігурації системи і формально співпадає з функціоналом вільної енергії кристалічної моделі. Вся інформація про структурний безлад зосереджена в другому доданку, який є функціоналом і змінних $\varphi_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}$, пов'язаних зі спіновими флуктуаціями, і колективних змінних

$$\rho_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \quad , \quad \mathbf{k} \neq 0 \tag{19}$$

що описують структурні флуктуації. Остаточно для вільної енергії моделі одержуємо:

$$F^{am} = F^{or} - \frac{1}{\beta} \sum_{l \geq 1} \frac{N^{1-l/2}}{l!} \sum_{\mathbf{k}_1} \ldots \sum_{\mathbf{k}_l} a_l(\mathbf{k}_1,\ldots,\mathbf{k}_l)\delta(\mathbf{k}_1+\ldots+\mathbf{k}_l) \times \\ \times \left\langle \rho_{\mathbf{k}_1} \ldots \rho_{\mathbf{k}_l} \right\rangle_{av} \quad , \quad \mathbf{k}_i \neq 0 \quad , \tag{20}$$

де F^{or} - вільна енергія кристалічної моделі, $a_l(\mathbf{k}_1,\ldots,\mathbf{k}_l)$ - коефіцієнти розкладу в ряд по $\rho_{\mathbf{k}}$ величини $ln\ \overline{exp(\Delta F[\varphi;\rho])}$, $\overline{\langle\ldots\rangle}$ - функціональне усереднення по розподілу Гіббса з конфігураційно незалежним функціоналом $F[\varphi]$; $\left\langle (\ldots) \right\rangle_{av}$ означає конфігураційне усереднення. Структурний безлад системи описується за допомогою l-частинкових незвідних структурних функцій:

$$S_l^{am}(\mathbf{k}_1,\dots,\mathbf{k}_l)\delta(\mathbf{k}_1+\dots+\mathbf{k}_l) = N^{l/2-1}\left\langle \rho_{\mathbf{k}_1}\cdots\rho_{\mathbf{k}_l}\right\rangle_{av}^{c} . \quad (21)$$

Такий підхід /"рідинне наближення"/ дозволяє виражати термодинамічні і динамічні характеристики системи через експериментально спостережувані величини, серед яких найважливішу роль відіграє парний структурний фактор $S_2^{am}(\mathbf{k}) \equiv S_2^{am}(\mathbf{k},-\mathbf{k})$. $S_l^{am}(\mathbf{k}_1,\dots,\mathbf{k}_l)$ можна розглядати як феноменологічні параметри, значення яких вибирають, виходячи з експериментальних даних для конкретної аморфної системи. З іншого боку, їх можна апроксимувати відповідними структурними функціями системи твердих сфер з вдало підібраними числовими параметрами.

У наближенні хаотичних фаз

$$F_G^{am} = F_G^{or} - \frac{1}{2\beta}M_1^2(y_1,y_2)\sum_{\mathbf{k}} g_1(\mathbf{k})S_2^{am}(\mathbf{k},-\mathbf{k}) - \frac{1}{2\beta}M_2^2(y_1,y_2)\sum_{\mathbf{k}} g_2(\mathbf{k})S_2^{am}(\mathbf{k},-\mathbf{k}) , \quad (22)$$

де $g_\alpha(\mathbf{k})$ - перенормовані взаємодії. Розв'язавши рівняння, отримані з відповідних коефіцієнтів $a_2(T)$ і $b_2(T)$ розкладу Ландау, знаходимо для температур переходів:

$$T_d^* = 1 - \frac{3}{4N}\left[\sum_{\mathbf{k}}\left[1 - \frac{2}{3}\frac{l}{1-l} - \frac{4}{3}S_2^{am}(\mathbf{k})\right]\frac{\gamma_{\mathbf{k}}}{1-\gamma_{\mathbf{k}}} + \left[1+\frac{2}{3}\frac{l}{1-l}\right]\sum_{\mathbf{k}}\frac{l\gamma_{\mathbf{k}}}{1-l\gamma_{\mathbf{k}}}\right]$$

$$T_Q^* = 1 - \frac{3}{4N}\left[\sum_{\mathbf{k}}\left[1 + \frac{2}{3}\frac{1}{1-l} - \frac{4}{3}S_2^{am}(\mathbf{k})\right]\frac{\gamma_{\mathbf{k}}}{1-\gamma_{\mathbf{k}}} + \left[1-\frac{2}{3}\frac{1}{1-l}\right]\sum_{\mathbf{k}}\frac{\gamma_{\mathbf{k}}}{l-\gamma_{\mathbf{k}}}\right], \quad (23)$$

як і у випадку кристалічного магнетика, $T_d^* = T_d^G/T_d^0$, $T_Q^* = T_Q^G/T_Q^0$. Проведено числові розрахунки T_d^* та T_Q^* для модельного потенціалу взаємодії (15), як $S_2^{am}(\mathbf{k})$ використано структурні фактори системи твердих сфер. Отримано залежності $T_d^*(l)$, $T_Q^*(l)$, $T_d^*(\alpha^{-1})$, $T_Q^*(\alpha^{-1})$ /рис. 5-6/. Врахування НХФ менш суттєво у порівнянні з кристалічним випадком змінює результати наближення молекулярного поля. Аномальна поведінка

$T_d^*(l)$ і $T_Q^*(l)$, виявлена раніше для кристалічної моделі, спостерігається для l, віддаленіших від $l=1$. Поведінку $T_d^*(\alpha^{-1})$ для $l>0{,}5$ і $T_Q^*(\alpha^{-1})$ для $l<1{,}3$ з огляду на розміри цих областей не можна пояснити лише взаємодією малих величин α^3 та $1-l$.

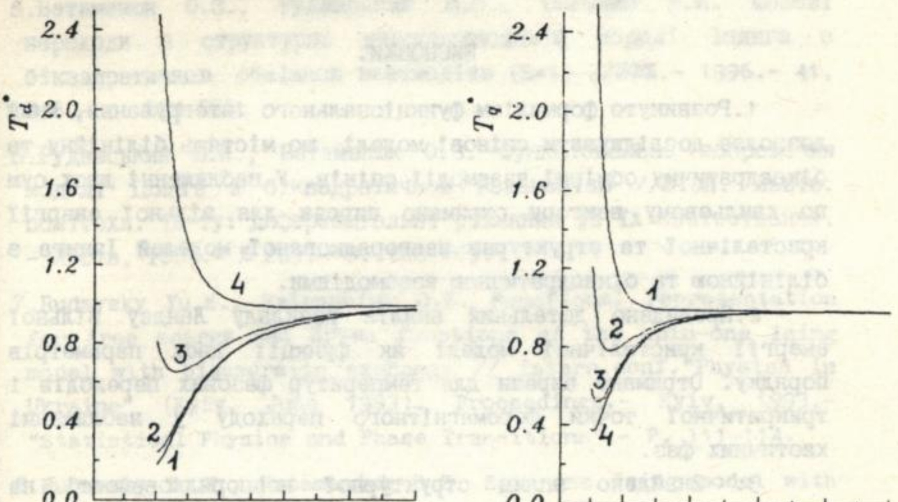

Рисунок 5,6. Залежність приведеної температури феромагнітного $T_d^* = T_d^G/T_d^0$ та квадрупольного $T_Q^* = T_Q^G/T_Q^0$ переходів у структурно невпорядкованій системі від оберненого параметра α^{-1} модельного потенціалу взаємодії (15). Криві 1-4 відповідають значенням 0, 0.4, 0.7 і 0.9 /рис.5/ та 1.1, 1.3, 1.6 і 1.9 /рис.6/ відношення констант біквадратичного та білінійного обмінів $l=\lambda_2/\lambda_1$.

У <u>п'ятій главі</u> показано можливість використання формалізму, розвинутого у главі 2, для дослідження деяких складніших моделей. Розглядається модель, що описується гамільтоніаном Гайзенберга з врахуванням біквадратичної взаємодії при рівних значеннях констант біквадратичного та білінійного обмінів /"спін-обмінна модель Шредингера " для S=1/. Отримано функціональне зображення вільної енергії моделі, розраховано коефіцієнти функціоналу і знайдено вираз для вільної енергії у наближенні хаотичних фаз.

ВИСНОВКИ.

1.Розвинуто формалізм функціонального інтегрування, який дозволяє досліджувати спінові моделі, що містять білінійну та біквадратичну обмінні взаємодії спінів. У наближенні двох сум по хвильовому вектору отримано вирази для вільної енергії кристалічної та структурно невпорядкованої моделей Ізинга з білінійною та біквадратичною взаємодіями.

2.Проведено детальний аналіз розкладу Ландау вільної енергії кристалічної моделі як функції двох параметрів порядку. Отримано вирази для температур фазових переходів і трикритичної точки феромагнітного переходу у наближенні хаотичних фаз.

3. Знайдено вплив структурної невпорядкованості на температури фазових переходів, що відбуваються у системі.

4.Продемонстровано можливість розвитку запропонованого формалізму для дослідження складніших спінових систем.

Основні результати дисертації викладено у роботах:

1. Vatamaniuk O., Rudavskii Yu. Spin-one Ising model with biquadratic exchange interaction within functional integration method. Random phase approximation //Phys. Stat. Sol(b).- 1996.- 197.-№1.- P. 199-210.

2. Rudavskii Yu., Vatamaniuk O., Savenko V. Disordered spin-one Ising model with biquadratic exchange interaction within functional integration method // Phys. Stat. Sol(b).- 1996.- 197.-№2.- P. 479-486.

3.Rudavsky Yu.K., Vatamaniuk O.Z., Savenko V.P. Investigation of the spin-one Ising model with biquadratic exchange interaction within functional integration method //Cond. Matt.Phys.- 1995.- 5.- P. 143-160.

4.Ватаманюк О.З., Рудавський Ю.К. Наближення хаотичних фаз для температур фазових переходів у моделі Ізинга з біквадратичною обмінною взаємодією (S=1) //УФЖ.- 1996.- 41, № 4.- с. 469-470.

5.Ватаманюк О.З., Рудавський Ю.К., Савенко В.П. Фазові переходи в структурно невпорядкованій моделі Ізинга з біквадратичною обмінною взаємодією (S=1) //УФЖ.- 1996.- 41, № 5.- с. 554-555.

6.Рудавський Ю.К., Ватаманюк О.З. Функціональне зображення моделі Ізинга з біквадратичною взаємодією //Вісн. Львів. політехн. ін-ту: Диференціальні рівняння та їх застосування. - Львів, 1993.- № 269.- С. 166-169.

7.Rudavsky Yu.K., Vatamaniuk O.Z. Functional representation for free energy and Green functions of the spin-one Ising model with biquadratic exchange // intern.conf."Physics in Ukraine" (Kyiv, June 1993). Proceedings.- Kyiv, 1993.- "Statistical Physics and Phase Transitions".- P. 111-114.

8.Rudavsky Yu.K., Vatamaniuk O.Z. Spin-one Ising model with biquadratic exchange interaction. Free energy representation as the functional integral.- Lviv, 1993.- 20 p. (Preprint /Ukr Acad.Sci. Inst.Con.Mat.Phys.; ICMP-93-9E).

9.Rudavsky Yu.K., Vatamaniuk O.Z. Spin-one Ising model with biquadratic exchange interaction. Free energy of disordered system.- Lviv, 1993.- 20 p. (Preprint /Ukr.Acad.Sci. Inst. Con. Mat.Phys.; ICMP-93-10E).

10.Рудавський Ю.К., Ватаманюк О.З. Фазові переходи в моделі Ізинга з біквадратичною взаємодією для S=1 //міжн.наук. конф. до 150-річчя І.Пулюя (Львів, травень 1995 р.). тези доповідей. - Львів, 1995.- с.123-124.

Ватаманюк О.З. Применение метода функционального интегрирования к исследованию систем с дипольным и квадрупольным взаимодействиями. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02- теоретическая физика. Институт физики конденсированных систем НАН Украины, Львов, Украина, 1996.

Модель Изинга с биквадратным обменным взаимодействием для S=1 изучается в рамках метода функционального интегрирования. Фазовая диаграмма анализируется при помощи разложения Ландау свободной энергии. В приближении хаотических фаз получены выражения для температур фазовых переходов и трикритической точки ферромагнитного перехода. Рассмотрена структурно неупорядоченная модель. Свободная энергия представлена в виде функционального разложения в ряд по Фурье-образам флуктуаций плотности. Найдены изменения температур фазовых переходов, обусловленные структурной неупорядоченностью. Беспорядок учитывается при помощи структурных факторов системы жестких сфер.

Vatamaniuk O.Z. Application of the functional integration approach to the investigation of systems with dipolar and quadrupolar interactions. Ph.D. Thesis (physics and mathematics), 01.04.02- theoretical physics. Institute for Condensed Matter Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, Ukraine, 1996.

A spin-one Ising model with biquadratic exchange interaction is investigated within functional integration approach. The phase diagram is analyzed by means of Landau's free energy expansion. In the random phase approximation expressions for phase transition temperatures and the tricritical point for ferromagnetic transition are obtained. Structurally disordered model is considered. The free energy is presented in the form of a functional expansion in series over the Fourier-transformed density fluctuations. Phase transition temperatures changes caused by structural disorder are found. The structural disorder is simulated by means of hard core system structural factors.

Ключові слова: функціональний інтеграл, модель Ізинга, біквадратична взаємодія, розклад Ландау вільної енергії, фазовий перехід, наближення хаотичних фаз, кумулянтні розклади, структурний безлад.

Підписано до друку 15.11.96. Формат 60х84/16.
Друк офсетний. Ум. друк. арк. 1,0. Тираж 100. Зам. 255.
Друк ВКРД ЛОУС. Львів, вул. 700-річчя Львова, 4