

УДК 541.64

© 1990

## МЕТОД КЛАСТЕРНЫХ ПОЛЕЙ. НЕКОТОРЫЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ ВОЗМОЖНОСТИ

*Д. Я. Кац, А. С. Штейнберг*

Для модели неупорядоченного решеточного газа с дальнодействующим взаимодействием в рамках метода кластерных полей получены точные решения и быстро сходящиеся разложения для вариационных параметров теории. Полученные выражения могут быть применены для аналитического расчета статистико-термодинамических средних. Возможности теории проиллюстрированы вычислением критической точки распада эквиатомного ГЦК твердого раствора с разными радиусами взаимодействия.

Для расчета статистико-термодинамических величин в решеточных моделях наряду с приближением среднего поля (ПСП) широкое распространение получили кластерные методы, из которых наиболее известным является кластерно-вариационный метод (КВМ) [1-3]. В отличие от ПСП кластерные методы позволяют точным образом описать эффекты ближней корреляции между атомами, входящими в кластер, и тем самым качественно улучшить теорию. Сравнительно недавно в серии работ [4-6] был развит метод кластерных полей (МКП), который является обобщением хорошо известного квазихимического метода [7]. При одинаковых размерах кластера МКП является менее точным, чем КВМ. Однако МКП значительно проще, гибче и допускает сравнительно несложное увеличение базисных кластеров, что в КВМ является серьезной проблемой. В отличие от КВМ МКП содержит в себе некоторые аналитические возможности, изложение которых является целью настоящей работы.

### 1. Краткая формулировка МКП

Следуя работам [4-6], дадим сводку основных формул МКП для модели решеточного газа с парным дальнодействующим взаимодействием (модель изоморфна магнитной модели Изинга и двойному твердому раствору замещения), гамильтониан которой записывается в виде

$$H = \sum_{i < j} V_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j - \mu \sum_i \hat{n}_i, \quad (1)$$

где  $V_{ij}$  — потенциал взаимодействия  $i$ -го и  $j$ -го узла;  $\mu$  — химический потенциал, равный разности химических потенциалов компонентов  $\mu = \mu_A - \mu_B$ ;  $\hat{n}_i$  — оператор числа заполнения  $i$ -го узла.

В МКП гамильтониан (1) представляется в виде линейной комбинации гамильтонианов кластеров

$$H = \sum_k \lambda_k H_k, \quad (2)$$

где  $H_k$  — гамильтониан  $k$ -го кластера, который учитывает взаимодействие внутри кластера точно;  $\lambda_k$  — числовые коэффициенты, удовлетворяющие определенным условиям нормировки.

Взаимодействие атомов кластера с окружением учитывается с помощью вариационных параметров эффективных кластерных полей. Таким образом, гамильтониан  $k$ -го кластера запишется в виде

$$H_k = \sum'_{i < j} V_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j + \sum'_{i} (\psi_k^i - \mu) \hat{n}_i, \quad (3)$$

где приведенные суммы обозначают суммирование по узлам  $k$ -го кластера. Поле  $\psi_k^i$  учитывает взаимодействие  $i$ -го узла  $k$ -го кластера со всеми внешними узлами.

Главное приближение МКП состоит в аппроксимации матрицы плотности  $k$ -го кластера выражением

$$\rho_k = \exp(-\beta H_k + \beta \Omega_k), \quad (4)$$

где  $\beta = 1/T$  — обратная температура.

Термодинамический потенциал кластера  $\Omega_k$  дается выражением

$$\Omega_k = -T \ln Z_k = -T \ln S \exp(-\beta H_k). \quad (5)$$

Неизвестное поле  $\psi_k^i$  находится из условий согласования равенства всех средних  $\langle \hat{n}_i \rangle$  (в неупорядоченной системе) концентрации  $c$ :

$$c = \langle \hat{n}_i \rangle = y_k^i (\partial / \partial y_k^i) \ln Z_k, \quad (6)$$

где

$$y_k^i \equiv \exp(\beta \mu - \beta \psi_k^i). \quad (7)$$

Таким образом, для расчета средних необходимо для каждого кластера из (2) решить систему уравнений (6) относительно величин  $y_k^i$ . Нахождение  $y_k^i$  позволяет рассчитать термодинамический потенциал кластера  $\Omega_k$  и термодинамический потенциал системы  $\Omega$ , который в МКП линейно связан с  $\Omega_k$ :

$$\Omega = \sum_k i_k \Omega_k. \quad (8)$$

## 2. Расчет величин $y_k^i$

Пусть кластер  $\Gamma$  состоит из  $n$  узлов. Назовем кластер  $\Gamma$  симметричным, если для любых  $i$  и  $j \in \Gamma$  выполняется условие

$$V_{ij} = \text{const} = V. \quad (9)$$

Для симметричных кластеров  $\Gamma$   $y_\Gamma^i$  не зависит от  $i$  и система уравнений (6) вырождается в единственное алгебраическое уравнение  $n$ -го порядка. Ясно, что в общем случае простое аналитическое решение (6) возможно только для двухчастичных кластеров.

Рассмотрим статистическую сумму симметричного кластера  $\Gamma$ , которая имеет вид

$$Z_\Gamma = \sum_{k=0}^n C_n^k y^k e^{[k(k-1)]/2}, \quad (10)$$

где

$$y \equiv y_n, e \equiv e^{-\beta V}. \quad (11)$$

Условие (6) запишется в виде

$$c = \frac{1}{n} \frac{y (d/dy) Z_\Gamma}{Z_\Gamma}. \quad (12)$$

При  $c = 1/2$  уравнение (12) имеет простое аналитическое решение для любого  $n$ . Чтобы показать это, запишем уравнение (12) при  $c = 1/2$  в явном виде

$$n \sum_{k=0}^{\infty} C_n^k y^k e^{[(k-k-1)/2]} \left(1 - \frac{2k}{n}\right) = 0. \quad (13)$$

Заметим, что (13) становится тождеством, если для любого  $k$  выполняется

$$y^k e^{[(k-k-1)/2]} = y^{n-k} e^{[(n-k)(n-k-1)/2]}. \quad (14)$$

Положив в (14)  $k=0$ , получим

$$y_n = e^{-(n-1)/2} \equiv \exp [\beta V (n-1)/2], \quad (15)$$

(15) удовлетворяет (13) и, таким образом, найден явный вид  $y_n$  при  $c=1/2$ .

Используя (15), можно найти быстро сходящееся разложение для  $y_n$  при произвольной концентрации. Если  $\beta V=0$ , то (6) имеет решение

$$y_n = c/(1-c). \quad (16)$$

Это означает, что атомы в кластере не взаимодействуют друг с другом.

Будем искать решение (12) в виде ряда по обратной температуре:

$$y_n = [c/(1-c)] \exp [\alpha_1(\beta V) + \alpha_2(\beta V)^2 + \dots]. \quad (17)$$

Подставляя (17) в (6) найдем с точностью до членов порядка

$$y_n = \frac{c}{1-c} \exp \left[ (n-1) \beta V c - \frac{n-1}{2} \beta^2 V^2 c (1-c) (1-2c) \right]. \quad (18)$$

Оценим теперь сходимость выражения (18) для реальных  $\beta V$ . Так, для 3-кластера выражение для  $y_3$  с точностью до членов  $\beta^3 V^3$  будет иметь вид

$$y_3 = \frac{1}{1-c} \exp \left[ 2\beta V c - c (1-c) (1-2c) \beta^2 V^2 + \frac{1}{3} c (1-c) (1-2c) (3c^2 - 3c + 1) \beta^3 V^3 \right]. \quad (19)$$

Максимальный вклад третий член в экспоненте дает при  $c=1/4$ . Если положить  $\beta V=1$ , то  $y_3$  будет иметь вид

$$y_3 = 1/3 \exp [1/2 - 8/32 + 8/32 \cdot 5/48], \quad (20)$$

т. е. поправочный коэффициент, возникающий при учете членов  $\sim \beta^3 V^3$ , равен 1.009

$$y_3^{(3)} = y_3^{(2)} \cdot 1.009, \quad (21)$$

где  $y_3^{(k)}$  — величина, рассчитанная с точностью до членов  $(\beta V)^k$ . Относительная ошибка, связанная с определением  $y_3$  при  $\beta V=1$  и  $c=1/4$ , равна

$$\Delta = (y_t - y_{\text{апр}})/y_{\text{апр}} = 0.013, \quad (22)$$

где  $y_t$  — точное значение, рассчитанное на ЭВМ;  $y_{\text{апр}}$  — аппроксимационное значение, вычисленное при помощи формулы (18).

Ясно, что сходимость выражения (18) существенно улучшается при уменьшении  $\beta V$  или при стремлении концентрации  $c$  соответственно к 0,  $1/2$  и 1.

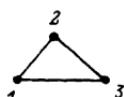
Исследуем теперь случай несимметричных кластеров. Тогда уравнение (6) переходит в систему из  $m$  уравнений, где  $m$  — число неэквивалентных узлов в кластере.

$$\begin{cases} c = y_1 (\partial/\partial y_1) \ln Z_n, \\ \dots \\ c = y_m (\partial/\partial y_m) \ln Z_n. \end{cases} \quad (23)$$

Аналогично рассуждая, можно показать, что для несимметричной модели при  $c=1/2$  точное решение для  $y_n$  дается выражением

$$y_n^i = \exp \left[ 1/2 \beta \sum'_{j \neq i} V_{ij} \right]. \quad (24)$$

Например, для треугольного кластера (123)



$$\begin{aligned} y_3^1 &= \exp [1/2\beta (V_{12} + V_{13})], \\ y_3^2 &= \exp [1/2\beta (V_{21} + V_{23})], \\ y_3^3 &= \exp [1/2\beta (V_{31} + V_{32})]. \end{aligned} \quad (25)$$

Разложение, аналогичное (13), для несимметричного кластера имеет вид

$$y_n^i = \frac{c}{1-c} \exp \left[ \beta c \sum'_{j \neq i} V_{ij} - \frac{1}{2} \beta^2 c (1-c) (1-2c) \sum'_{j \neq i} V_{ij}^2 \right]. \quad (26)$$

Выражение (26) по существу аналитически решает задачу нахождения  $y_n^i$  для произвольного кластера. В случае, когда  $\beta V \leq 1$  и (или)  $c$  близко к 0,  $1/2$  и 1, выражение (26) может быть использовано для расчетов с высокой точностью.

### 3. Выбор базисных кластеров

Найдение величин  $y_n^i$  создает возможность аналитического расчета термодинамического потенциала кластера  $\Omega_k$ . Для расчета термодинамического потенциала системы необходимо выбрать набор базисных кластеров, т. е. тех кластеров, по которым ведутся разложения (2) и (3). Выбор, вообще говоря, неоднозначен. Однако наиболее последовательным является так называемое кумулянтное разложение [6], в котором термодинамический потенциал представляется в виде

$$\Omega = \sum_k \tilde{\Omega}_k = \sum_i \Omega_i + \sum_{i_1, i_2} \tilde{\Omega}_{i_1, i_2} + \dots, \quad (27)$$

где  $\tilde{\Omega}_k$  обозначает кумулянт  $k$ -го кластера. Например,

$$\tilde{\Omega}_{ij} = \Omega_{ij} - \Omega_i - \Omega_j, \quad (28)$$

$$\tilde{\Omega}_{ijk} = \Omega_{ijk} - \Omega_{ij} - \Omega_{ik} - \Omega_{jk} + \Omega_i + \Omega_j + \Omega_k \quad (29)$$

и т. д. Таким образом,  $n$ -й член кумулянтного ряда учитывает вклад только  $n$ -частичных корреляций. Любому кластеру можно по известному правилу поставить в соответствие диаграмму: атомам в кластере отвечают вершины диаграммы, потенциалу взаимодействия  $V_{ij}$   $i$ -го и  $j$ -го атомов в кластере — линия, соединяющая  $i$ -ю и  $j$ -ю вершины. Например, тетраэдру ближайших соседей в ГЦК решетке соответствует диаграмма:



В (27) суммирование, вообще говоря, проводится по всем возможным кластерам. Однако можно показать, что некоторые классы кластеров вклад в (27) не дают. Дадим вначале два определения.

**Определение 1.** Назовем диаграмму, отвечающую данному кластеру, связной, если в ней хотя бы одной вершине, не связанной с другими.

**Определение 2.** Назовем диаграмму, отвечающую данному кластеру, приводимой, если она, будучи разрезана в одной из вершин, распадается на связные части.

Тогда справедлива следующая теорема.

**Теорема.** Приводимые и несвязные диаграммы (кластеры) не дают вклады в статистическую сумму кумулянтного разложения.

Докажем вначале очевидную лемму.

**Лемма.** Если статистическая сумма  $n$ -го кластера разбивается на произведение статистических сумм кластеров меньших размерностей, то кумулянт такого кластера равен нулю.

**Доказательство леммы.** Если статистическая сумма разбивается на произведение двух или более статистических сумм, это означает, что в данном кластере можно выбрать две или более подсистемы, не взаимодействующие друг с другом. Поскольку такие подсистемы нескоррелированы, кумулянт такого кластера равен нулю по определению кумулянта.

Теперь докажем теорему.

**Доказательство теоремы.** Образуем из двух связанных кластеров размерностей  $m$  и  $n$  приводимый кластер размерностью  $k = m + n - 1$



Точка  $A$  является общей вершиной. Ясно, что при образовании такого кластера все  $y_i$  останутся прежними, за исключением  $y_{A'}$  и  $y_{A''}$ . Это обусловлено тем, что остались неизменными поля, действующие на все атомы, кроме  $A$ .

Представим статистическую сумму произвольного кластера в виде

$$Z = X + \alpha y, \quad (30)$$

где  $X$  содержит всевозможные слагаемые, не содержащие  $y$ ;  $\alpha y$  содержит все слагаемые, содержащие  $y$ .

Уравнение для определения  $y$  имеет следующий вид:

$$Zc = y (\partial/\partial y) Z. \quad (31)$$

Выражение  $y (\partial/\partial y) Z$  «вырезает» только те члены, которые содержат  $y$ , следовательно,

$$Zc = Z - X \quad (32)$$

или

$$X = Z (1 - c). \quad (33)$$

Рассуждая аналогично, представим статистические суммы кластеров  $m$ ,  $n$  и  $k$  в виде

$$Z_m = X_m + \alpha_m y_{A'}, \quad Z_n = X_n + \alpha_n y_{A''}, \quad Z_k = X_m X_n + \alpha_k y_A. \quad (34)-(36)$$

$X_k$  мы представили в виде  $X_m X_n$ , так как члены, не содержащие  $y_{A'}$  и  $y_{A''}$ , не взаимодействуют друг с другом. Из уравнения (33) имеем

$$X_m = Z_m (1 - c), \quad X_n = Z_n (1 - c), \quad X_m \cdot X_n = Z_k (1 - c). \quad (37)-(39)$$

Из уравнений (37)–(39) получаем

$$Z_k = Z_m Z_n / Z_1. \quad (40)$$

Если диаграмма является несвязной, то

$$Z_k = Z_m Z_n. \quad (41)$$

В силу только что доказанной леммы такие кластеры не дают вклада в статистическую сумму кумулянтного разложения. Доказанная теорема подтверждает интуитивно ясное соображение о том, что наиболее «важные» кластеры состоят из возможно большего числа сильных связей. Действительно, кумулянт есть непрерывная функция потенциалов  $V_i$ . При  $V_i \rightarrow 0$  соответствующий кумулянт также стремится к нулю, если диаграмма стремится к несвязной.

#### 4. Примеры аналитических расчетов

Приведенные выше результаты применимы для широкого спектра задач статистической термодинамики решеточных систем. Ниже будут приведены несколько конкретных примеров.

# 1. Критическая точка эквиатомного ГЦК раствора с взаимодействием ближайших соседей.

Эта задача хорошо известна и решалась различными методами. В рамках МКП для определения  $|T_c/V_1|$  необходимо решить уравнение

$$\frac{\partial \mu}{\partial c} \Big|_{c=1/2} = 0. \quad (42)$$

Найдем решение (42) в трех приближениях — 2, 3 и 4-частичных кластеров. Любая термодинамическая величина может быть представлена в виде диаграммного разложения

$$\varphi(c, T) = \text{---} + \triangle + \boxtimes + \square + \square$$

При расчете кумулянтов по формуле (27) нам необходимо знать количество кластеров различного типа, проходящих через выбранный атом. В табл. 1 приведены числа таких кластеров, существующих в ГЦК решетке. При этом считалось, что взаимодействуют только ближайшие соседи, и учитывались все кластеры, вплоть до 4-частичных. Приведем числа кластеров различного типа, существующих в ГЦК решетке.

Таблица 1

Тип кластера	Количество
—	12
△	24
☒	8
☒	48
□	0

Таблица 2

Приближение	$T_c/V_1$
ПСП	3
МКП	2.74
2-кластер	2.64
3-кластер	2.62
4-кластер	2.51
КВМ (приближение тетраэдров)	2.45
Ряды	2.45

В уравнение (42) входят величины  $\partial y / \partial c \Big|_{c=1/2}$ , которые могут быть найдены из следующих простых соображений.

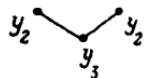
1) Если кластер симметричный, то мы имеем одно нелинейное уравнение для нахождения  $y$ . Например, для 3-кластера это уравнение имеет вид

$$F(y, c) = y^3 e^3 (1 - c) + y^2 e (2 - 3c) + y (1 - 3c) - c = 0. \quad (43)$$

Для нахождения  $\partial y_3 / \partial c$  воспользуемся производной пятивой функции

$$\frac{\partial y_3}{\partial c} = - \left( \frac{\partial F}{\partial c} \right) \left( \frac{\partial F}{\partial y} \right)^{-1} = 4 \frac{(1 + 3e^{-1})}{(1 + 3e)}. \quad (44)$$

2) Если кластер несимметричный, то  $\partial y_i / \partial c$  находится из системы линейных уравнений. Например, в кластере



мы имеем систему из двух уравнений

$$\begin{cases} F_1(y_2, y_3, c) = y_3 y_2^2 e^2 (1 - c) + 2y_2 y_3 e (1 - c) + y_3 (1 - c) - c (1 + y_2)^2 = 0, \\ F_2(y_2, y_3, c) = y_3 y_2^2 e^2 (1 - c) + y_2^2 (1 - c) + y_3 y_2 e (1 - 2c) + y_2 (1 - 2c) - c - y_3 c = 0. \end{cases} \quad (45)$$

Тогда

$$\partial y_3 / \partial c = -\Delta_2 / \Delta_1, \quad (46)$$

где

$$\Delta_2 = \det \begin{pmatrix} \partial F_1 / \partial c & \partial F_1 / \partial y_2 \\ \partial F_2 / \partial c & \partial F_2 / \partial y_2 \end{pmatrix}, \quad (47)$$

$$\Delta_1 = \det \begin{pmatrix} \partial F_2 / \partial y_2 & \partial F_1 / \partial y_2 \\ \partial F_1 / \partial y_3 & \partial F_2 / \partial y_3 \end{pmatrix}. \quad (48)$$

В нашем случае

$$\partial y_3 / \partial c = 4e^{-y_2}. \quad (49)$$

Приведем сводку результатов (табл. 2) для значений  $|T_c/V_1|$  в сравнении с аналогичными данными, полученными другими методами [8-11]. Данные результаты показывают, что уже учет парных корреляций дает существенное уточнение по сравнению с ПСП. Учет корреляций 3-го и 4-го порядков дает несколько завышенное значение по сравнению с КВМ.

2. Исследуем теперь зависимость критической точки  $|T_c/V_1|$  при наличии взаимодействия не только в 1-й, но и во 2-й координационных сферах.

В работах [11-12] было показано, что зависимость  $T_c$  от параметра  $x$ , где  $x = V_2/V_1$ , хорошо описывается линейным законом. Например, в работе [11] с использованием техники Монте-Карло было показано, что

$$T_c = T_{c_1} + 1.14x, \quad (50)$$

где  $T_{c_1}$  — температура распада, вычисленная с учетом ближайших соседей. Для ГЦК решетки  $T_{c_1} = 2.45$ .

В случае сплава эквивалентного состава в приближении парных кластеров эта задача легко решается. Уравнение для нахождения зависимости  $|T_c/V_1|$  от  $x$  имеет вид

$$z_1(e^{1/2\tau} - 1) + z_2(e^{x/2\tau} - 1) + 2 = 0 \quad (51)$$

или

$$x = 2\tau \ln [(z_1 + z_2 - 2 - z_1 e^{1/2\tau})/z_2], \quad (52)$$

где  $\tau \equiv T_c/V_1$ ,  $z_i$  — координационное число в  $i$ -й сфере. При этом  $|\tau| \geqslant 1/2 \ln [(z_1 - 2)/z_1]$ .

Разлагая  $e^{1/2\tau}$  и  $\ln$  в ряд по степеням  $1/2\tau$  и ограничиваясь линейным членом, приходим к уравнению

$$\tau = \frac{1}{2 \ln [(z_2 - 2)/z_2]} \left( \frac{z_1}{z_2 - 2} + x \right). \quad (53)$$

Таким образом, зависимость  $|T_c/V_1|$  от  $x$  удовлетворительно описывается линейным законом. Значение  $\partial \tau / \partial x$  для ГЦК решетки равно 1.23, что близко к значению, полученному методом Монте-Карло.

При учете кластеров больших размерностей, например 3-частичных, анализ зависимости  $|T_c/V_1|$  от  $x$  несколько усложняется. Так, при учете 3-кластеров необходимо учесть кластеры двух типов:



$$V_{12} = V_{13} = V_{23} = V_1 \quad V_{12} = V_{23} = V_1 \\ V_{13} = V_2$$

Возникающее при этом уравнение имеет вид

$$z_1(e_1^{-1/2} - 1) + z_2(e_2^{-1/2} - 1) + 2 + 4N_1 \frac{3 + e_1 - e_1^{-1/2} - 3e_1^{1/2}}{1 + 3e_1} + \\ + N_2 \frac{2e_1^{1/2}e_2^{1/2} + 2e_1^{-1/2}e_2^{1/2} + 2e_1 + 4e_1^{1/2}e_2^{-1/2} - 4e_1^{-1/2} - 6e_1^{1/2} - 4e_2^{1/2} - 2e_1e_2^{-1/2} + 6}{(1 + e_1 + 2e_1^{1/2}e_2^{1/2})} = 0, \quad (54)$$

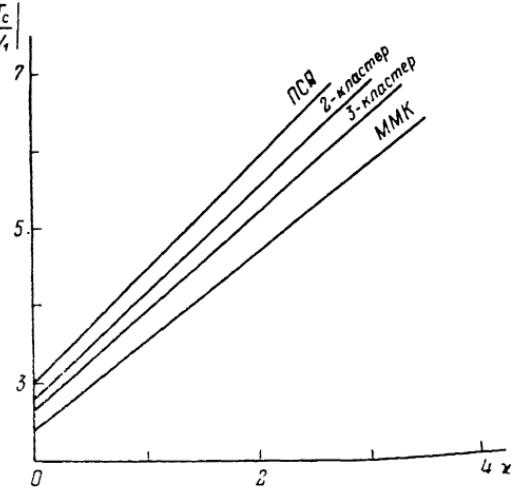
где  $N_1, N_2$  — числа кластеров типа 1 и 2 соответственно. Однако зависимость  $|T_c/V_1|$  от  $\chi$ , вычисленная при помощи (54), также хорошо описывается линейным законом, при этом  $\partial \tau / \partial \chi = 1.20$ .

Таким образом, видно, что учет кластеров больших размерностей дает существенное уточнение по сравнению с ПСП, в котором зависимость  $T_c$  от  $\chi$  дается выражением  $T_c = T_{c_1} [1 + (z_2/z_1) \chi]$  и в пределе стремится к значениям, полученным при помощи техники Монте-Карло (рис. 1).

3. В заключение рассмотрим модель Юри—Вейсса в рамках формализма МКП. Точное решение этой модели дано в работе [10].

**Формулировка модели:**

Существует решетка из  $N$  спинов  $\sigma_i = \pm 1$ , причем энер-



Зависимость приведенной критической температуры  $|T_c/V_1|$  от константы взаимодействий  $\chi = V_2/V_1$ .

тия взаимодействия для данной конфигурации спинов равна

$$E = -\frac{2J}{N} \sum_{i < j} \sigma_i \sigma_j, \quad J > 0. \quad (55)$$

Особенности модели заключаются в следующем.

1) Все спины взаимодействуют друг с другом одинаковым образом.

2) Энергия взаимодействия пропорциональна  $1/N$ . В наших терминах это означает, что все кластеры становятся симметричными, т. е. все атомы взаимодействуют друг с другом одинаковым образом с потенциалом  $V \sim 1/N$  (в нашем случае  $V < 0$ ).

Тогда химический потенциал на 1 атом запишется в виде

$$\mu_i = \mu_1 + C_N^1 \tilde{\mu}_2 + \dots + C_N^N \tilde{\mu}_N, \quad (56)$$

где  $\tilde{\mu}_p$  —  $p$ -й кумулянт.

Например,

$$\tilde{\mu}_1 = \mu_1, \quad \tilde{\mu}_2 = \mu_2 - \mu_1,$$

и т. д. Вообще

$$\tilde{\mu}_p = \sum_{k=1}^p (-1)^{p-k} C_{p-1}^{k-1} \mu_k, \quad (57)$$

где  $\mu_k = \ln y_k$ . Переходя к записи  $\mu_i$  через  $\mu_k$ , имеем

$$\mu_i = \sum_{k=1}^{N+1} a_k \mu_k, \quad (58)$$

где

$$a_k = \sum_{p=1}^{N+1} (-1)^{k-p} C_N^{k-1} C_{p-1}^{k-1}. \quad (59)$$

Из формулы (59) нетрудно видеть, что для всех  $k \neq N+1$   $a_k = 0$ . Для  $k = N+1$  получаем

$$\mu_i = \ln y_{N+1}. \quad (60)$$

В силу выражения (18) представим  $y_{N+1}$  в виде

$$y_{N+1} = \frac{c}{1-c} \exp \left( \beta V N c - \frac{1}{2} N c (1-c) (1-2c) \beta^2 V^2 \right), \quad (61)$$

$$\mu_i = \ln \frac{c}{1-c} + \beta V N c - \frac{1}{2} N c (1-c) (1-2c) \beta^2 V^2. \quad (62)$$

Для нахождения критической температуры  $T_c$  необходимо решить уравнение

$$\partial \mu_i / \partial c \Big|_{c=1/2} = 0. \quad (63)$$

В результате имеем

$$1/c (1-c) + \beta V N + N c (1-c) \beta^2 V^2 = 0. \quad (64)$$

Вводя новую переменную  $J = -VN$ , получаем, что с точностью до членов  $\sim 1/N$

$$T_c = J/4, \quad J > 0. \quad (65)$$

Этот результат совпадает с полученным другим способом в работе [10].

#### Список литературы

- [1] Kikuchi R. // Phys. Rev. 1951. V. 81. N 6. P. 988—1003.
- [2] Sanchez J. M., de Fontaine D. // Phys. Rev. B. 1978. N 7. V. 17. P. 2926—2936.
- [3] Sanchez J. M., de Fontaine D. // Phys. Rev. B. 1980. V. 21. P. 216—228.
- [4] Вакс Б. Г., Зейн Н. Е., Зиненко В. И., Орлов В. Г. // ЖЭТФ. 1984. Т. 87. № 6 (12). С. 2030—2045.
- [5] Вакс Б. Г., Орлов В. Г. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 12. С. 3627—3636.
- [6] Вакс Б. Г., Зейн Н. Е., Камышенко В. В. // Препринт ИАЭ. М., 1987. 28 с.
- [7] Guggenheim E. A. // Proc. Roy. Soc. 1935. V. A148. N 864. P. 304—312.
- [8] Хачатуриян А. Г. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. М., 1974. 384 с.
- [9] Domb C. // J. Roy. St. Soc. 1964. N 1. V. 26. P. 367—375.
- [10] Дайсон Ф., Монтролл Э., Кац М., Фишер М. Устойчивость и фазовые переходы. М., 1973. 373 с.
- [11] Штейнберг А. С., Воликов Ю. К. // ФММ. 1987. Т. 64. № 23. С. 437—441.
- [12] Штейнберг А. С. // ФММ. 1985. Т. 60. № 3. С. 444—448.

Поступило в Редакцию  
21 июня 1989 г.  
В окончательной редакции  
26 сентября 1989 г.