

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ЛЕГКООСНОЙ АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ ЦЕПОЧКИ В КВАНТОВОМ МЕТОДЕ МОНТЕ-КАРЛО

С. Г. Овчинников, О. Г. Петраковский

Излагается квантовый метод Монте-Карло для спиновой цепочки $S=1$. Матричные элементы экспоненциальных операторов вычислены с использованием операторов Хаббарда. Показано квантовое сокращение спина при низких температурах. Рассчитаны магнитная восприимчивость и намагниченность АФМ в магнитном поле с анизотропией типа легкая ось, перпендикулярной направлению поля.

Хорошо известно, что существует целый ряд задач физики твердого тела, для которых невозможно или крайне трудно построить теорию возмущений. С другой стороны, теория возмущений не всегда адекватно отражает физическую сущность явлений. Существуют решения «невозмущенческой» природы. Примером этому могут служить солитоны. Поэтому возможность исследования нелинейных систем и систем с сильными квантовыми флуктуациями невозмущенческими методами представляет большой интерес. Одним из таких методов является метод Монте-Карло, введенный Метрополисом (см. в [1]) для классических систем. Он основан на идее «выборки по важности» [2]. В соответствии с этой идеей вероятность перехода из состояния 1 в состояние 2 определяется следующим образом:

$$W(1 \rightarrow 2) = \begin{cases} \exp(-\beta(E_2 - E_1)), & E_2 - E_1 > 0, \\ 1, & E_2 - E_1 \leq 0. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь E_1 и E_2 — энергии системы в состояниях 1 и 2, $\beta=1/kT$. При переборке состояний системы организуется движение в параметрическом пространстве к состояниям, соответствующим термодинамическому равновесию.

В [1] указано, что такой метод может применяться и в квантовой статистике, если найдены собственные состояния гамильтониана, как например, в модели Изинга.

В случае квантовой XY модели или модели Гейзенберга, для которых даже двухчастичные состояния вычислить затруднительно, применение данного метода невозможно. Кроме этого, классическое рассмотрение низкомерных и других систем с сильными квантовыми флуктуациями дает качественно неверные результаты как для свойств основного состояния, так и для термодинамики. Таким образом, очевидна необходимость развития квантового метода Монте-Карло. Такой метод был развит Сузуки [3, 4]. В работе [5] квантовый метод Монте-Карло (КМК-метод) применен к исследованию легкоплоскостного ферромагнетика. В настоящей работе моделируется легкоосный АФМ во внешнем магнитном поле. Получена зависимость намагниченности и восприимчивости от температуры.

Идея КМК-метода состоит в том, что « d -мерная квантовая система отображается на $(d+1)$ -мерную классическую систему», используя следующее разложение экспоненциального оператора [6]:

$$e^{A_1+A_2+\dots+A_p} = \lim_{m \rightarrow \infty} (e^{A_1/m} e^{A_2/m} \dots e^{A_p/m})^m. \quad (2)$$

Здесь m — целое число, называемое числом Троттера. В [3] была доказана теорема эквивалентности о соответствии статсуммы d -мерной квантовой системы и $(d+1)$ -мерной классической системы. Пусть рассматриваемый гамильтониан \mathcal{H} представляется собой сумму p слагаемых

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \dots + \mathcal{H}_p. \quad (3)$$

Тогда, используя (2), запишем

$$e^{-\beta \mathcal{H}} = \lim_{m \rightarrow \infty} \text{Tr} \left[e^{-\beta \frac{\mathcal{H}_1}{m}} e^{-\beta \frac{\mathcal{H}_2}{m}} \dots e^{-\beta \frac{\mathcal{H}_p}{m}} \right]^m. \quad (4)$$

Теперь мы можем представить статсумму в виде

$$\begin{aligned} Z &= \lim_{m \rightarrow \infty} \text{Tr} \left[e^{-\beta \frac{\mathcal{H}_1}{m}} e^{-\beta \frac{\mathcal{H}_2}{m}} \dots e^{-\beta \frac{\mathcal{H}_p}{m}} \right]^m = \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{\{\alpha_i\}} \langle \alpha_1 | \left[e^{-\beta \frac{\mathcal{H}_1}{m}} e^{-\beta \frac{\mathcal{H}_2}{m}} \dots e^{-\beta \frac{\mathcal{H}_p}{m}} \right]^m | \alpha_1 \rangle = \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{\{\alpha_1\}} \sum_{\{\alpha_2\}} \dots \sum_{\{\alpha_{mp}\}} \langle \alpha_1 | e^{-\beta \frac{\mathcal{H}_1}{m}} | \alpha_2 \rangle \langle \alpha_2 | e^{-\beta \frac{\mathcal{H}_2}{m}} \dots e^{-\beta \frac{\mathcal{H}_p}{m}} | \alpha_1 \rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

В последнем равенстве в (5) между экспонентами вставлены единичные операторы $\sum_{\{\alpha_i\}} |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i|$, где суммирование идет по всем состояниям. Отметим, что состояния $|\alpha_1\rangle$ и $|\alpha_i\rangle$ не обязательно должны быть собственными, они должны образовывать полный ортогональный набор векторов состояний. С другой стороны, статсумма классической изинговской $(d+1)$ -мерной системы также может быть приведена к виду (5) [3, 7], что доказывает эквивалентность d -мерной квантовой и $(d+1)$ -мерной изинговской статсумм. Дополнительная размерность обуславливает квантовые эффекты. Реально ограничиваются конечным значением числа Троттера m . Можно показать [6], что точность вычисления при этом $\sim 1/m^2$. Заметим, что мы сразу закладываем в (5) периодические граничные условия по дополнительной размерности. Развитый квантовый метод Монте-Карло активно используется как в «чистом» виде [5, 6, 8], так и в комбинациях с методом ренормализационной группы [9], методами трансфер матрицы и термополевой динамики [10, 11]. Общность подхода позволяет распространить метод КМК как на спиновые, так и на фермионные системы [12].

2. Гейзенберговская цепочка

Рассмотрим гейзенберговский АФМ со спином $S=1$ во внешнем магнитном поле H , направленном вдоль оси z , и анизотропией типа легкая ось

$$\mathcal{H} = I \sum_f \mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f+1} - H \sum_f S_f^z - D \sum_f (S_f^y)^2. \quad (6)$$

Значения $I=15$ К, $D=1.5$ К взяты для CsNiBr_3 [13], $H=1$ К. Мы будем моделировать систему с параметрами реального вещества с целью

найти зависимость намагниченности и восприимчивости от температуры и сопоставить полученные результаты с экспериментальными [13].

В основу нашего рассмотрения положена модификация метода, развитого в [5]. Как и в [5], разбиваем гамильтониан (6) на две части

$$\mathcal{H} = \sum_{f=\text{odd}} \mathcal{H}_{f, f+1} + \sum_{f=\text{even}} \mathcal{H}_{f, f+1}. \quad (7)$$

Разбиение (7) точное и соответствует отдельному суммированию по четным и нечетным узлам решетки (так называемое «шахматно-клеточное разложение»). Теперь в каждом из двух членов (7) отдельные слагаемые коммутируют друг с другом и разложение типа (2) является точным для каждой суммы в отдельности. Разумеется, эти суммы не коммутируют друг с другом. Способ представления (5) обусловлен умением считать необходимые матричные элементы в (4). Исходя из этого, разбиваем каждую сумму в (7) еще на два члена

$$\mathcal{H}_{f, f+1} = \mathcal{H}_{f, f+1}^0 + V_{f, f+1}, \quad (8)$$

где

$$\mathcal{H}_{f, f+1}^0 = IS, S_{f+1}, \quad V_{f, f+1} = G_f + G_{f+1}, \quad G_f = -\frac{D}{2}(S_f^y)^2 - \frac{H}{2}S_f^z. \quad (9)$$

Теперь статсумма представима в виде

$$Z^m = \sum_{\{\alpha_1, \dots, \alpha_{2m}\}} \langle \alpha_1 | L_{\text{odd}} | \alpha_2 \rangle \langle \alpha_2 | L_{\text{even}} \dots \langle \alpha_{2m} | L_{\text{even}} | \alpha_1 \rangle. \quad (10)$$

Здесь $|\alpha_i\rangle$ — собственные состояния оператора S^z , образующие полный набор,

$$L_{\text{odd}}^{(\text{even})} = \prod_{\text{odd}(\text{even})} (e^{-\beta V_{f, f+1}/2m} e^{-\beta \mathcal{H}_{f, f+1}/m} e^{-\beta V_{f, f+1}/2m}) = \prod_{\text{odd}(\text{even})} e_{f, f+1}. \quad (11)$$

Такое симметричное представление L необходимо для того, чтобы матрица L была эрмитовой. Из (10) видно, что размеры соответствующей двумерной системы $N \times 2m$, где N — число узлов исходной цепочки, m — введенное выше число Троттера. Статсумму (10) можно представить в виде

$$Z^{(m)} = \sum_{\{\alpha\}} \prod_{f, g} e^{-\beta E(f, g)}, \quad (12)$$

$$e^{-\beta E(f, g)} = \langle S_{f, g} S_{f, g+1} | e_{f, f+1} | S_{f+1, g} S_{f+1, g+1} \rangle.$$

Задача теперь состоит в нахождении матричных элементов в (12), число которых $(2S+1)^4 = 81$ для $S=1$. Таким образом, в общем случае рассматривается 81 вершинная модель.

3. Вычисление матричных элементов

Матричные элементы в (12) можно найти, вычислив отдельно матричные элементы для каждого из трех сомножителей в (11). Начнем с матричных элементов для $\exp(-\beta V_{f, f+1}/2m)$. Разложим эту экспоненту в ряд

$$e^{-\beta \frac{V_{f, f+1}}{2m}} = e^{-\beta G_f/2m} e^{-\beta G_{f+1}/2m} = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{p!} G_f^p \sum_{p'=0}^{\infty} \frac{1}{p'!} G_{f+1}^{p'}, \quad (13)$$

G_f и G_{f+1} — одноузельные операторы, поэтому $[G_f, G_{f+1}] = 0$. Мы сохраняем обозначения [6], где $K = \beta I/m$, $a = \beta D/4m$, $b = \beta H/4m$. Способ получить G_f^p предлагается следующий:

$$G^p = \frac{1}{2} \{G, G^{p-1}\}, \quad (14)$$

где $\{ \dots \}$ означает антикоммутатор и мы опустили индекс f . Пусть G^p определяется некоторыми k векторами Q_k

$$G^p = \sum_k c_k(p) Q_k. \quad (15)$$

Сопоставляя (15) и (14), видим, что необходимо существование замкнутой системы антикоммутаторов вида $\{Q_k, G\}$. Имеется в виду, что антикоммутаторы $\{Q_k, G\}$ выражаются через конечное число операторов Q_k . Будем вычислять антикоммутаторы, пока система не замкнется. В [5] операторы Q_k составлены из операторов S^x и S^y , что приводит к громоздкости из-за высоких степеней этих операторов. Кроме того, приведенные в [5] операторы Q_k не удовлетворяют приведенным там же антикоммутационным соотношениям.

В отличие от [5] мы будем работать в базисе операторов Хаббарда $X_f^{m, n} = |m\rangle \times |n\rangle$, описывающих переход из состояния $|n\rangle$ в состояние $|m\rangle$ на узле f . В этом представлении [7]

$$S_f^z = \sum_M \gamma(M) X_f^{M+1, M}, \quad S_f^z = \sum_M M X_f^{M, M}, \quad \gamma(M) = \sqrt{(S-M)(S+M+1)}, \quad (16)$$

где S — величина спина, M — его проекция на ось квантования. Преимущество операторов Хаббарда в их законе перемножения

$$X_f^{m, n} X_g^{pq} = \delta_{fg} \delta_{np} X_f^{mq}.$$

Займемся теперь вычислением базиса $X_f^{m, n}$. Используя (14), получим

$$G^{p+1} = \frac{1}{2} \{G, G^p\} = \frac{1}{2} \left\{ G, \sum_k C_k(p) Q_k \right\} = \frac{1}{2} \sum_k C_k(p) Q_k. \quad (17)$$

Таким образом, существует рекуррентное преобразование $AG^p = G^{p+1}$. Легко видеть, что операторы

$$Q_1 = \hat{1}, \quad Q_2 = X_f^{11} - X_f^{-1-1}, \quad Q_3 = X_f^{11} + X_f^{-1-1}, \quad Q_4 = X_f^{+1-1} + X_f^{-11} \quad (18)$$

образуют замкнутую систему

$$\frac{1}{2} \{Q_1, G\} = -\frac{a}{4} (2Q_1 - Q_3 - Q_4) + \frac{b}{2} Q_2,$$

$$\frac{1}{2} \{Q_2, G\} = -\frac{a}{4} Q_2 + \frac{b}{2} Q_3,$$

$$\frac{1}{2} \{Q_3, G\} = \frac{b}{2} Q_2 + \frac{a}{4} (Q_4 - Q_3),$$

$$\frac{1}{2} \{Q_4, G\} = \frac{a}{4} (Q_3 - Q_4). \quad (19)$$

В базисе $\{Q_k\}$ имеем

$$\begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \end{bmatrix}_{p+1} = \begin{vmatrix} -\frac{a}{2}, & 0, & 0, & 0, \\ \frac{b}{2}, & -\frac{a}{2}, & \frac{b}{2}, & 0, \\ \frac{a}{2}, & \frac{b}{2}, & -\frac{a}{4}, & \frac{a}{4}, \\ \frac{a}{4}, & 0, & \frac{a}{4}, & \frac{a}{4} \end{vmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \end{bmatrix}_p. \quad (20)$$

Идея состоит в том, чтобы найти собственные векторы матрицы преобразования, в базисе которых легко получить функциональную зависимость

коэффициентов в (20). Собственные значения матрицы преобразования в (20) равны

$$\lambda_1 = -\frac{a}{4}, \quad \lambda_2 = -\frac{a}{2}, \quad \lambda_{3,4} = -\frac{a}{4} \pm c, \quad (21)$$

где $c = (1/2)\sqrt{a^2/4 + b^2}$. Этим собственным значениям соответствуют собственные векторы

$$Y_1 = \left(0, -\frac{a}{2b}, 0, 1\right), \quad Y_2 = (1, 0, -1, 0),$$

$$Y_3 = \left(0, 1, \frac{2c}{b}, \frac{a}{2b}\right), \quad Y_4 = \left(0, 1, -\frac{2c}{b}, \frac{a}{2b}\right). \quad (22)$$

В базисе собственных векторов рекуррентное соотношение (20) запишется

$$\begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \end{bmatrix}_{p+1} = \sum_k A_k (\lambda_k)^{p-1} Y_k, \quad (23)$$

где A_k — некоторые коэффициенты, которые находятся из начального условия $G = (1/2)(Q_1, G)$. Окончательно получаем

$$C_1(p) = (-a/2)^p,$$

$$C_2(p) = \left(-\frac{a}{4} + c\right)^p \frac{b}{4c},$$

$$C_3(p) = -\left(-\frac{a}{2}\right)^p + \frac{b}{4c} \left(-\frac{a}{4} + c\right)^p \frac{2c}{b} - \frac{b}{4c} \left(\frac{a}{4} + c\right)^p \frac{2c}{b},$$

$$C_4(p) = \frac{b}{4c} \left(-\frac{a}{4} + c\right)^p \frac{a}{2b} + \frac{b}{4c} \left(\frac{a}{4} + c\right)^p \frac{a}{2b}. \quad (24)$$

Подставляя (24) в (13) и суммируя ряды, получаем точное соотношение

$$\exp\left(-\frac{\beta G_f}{2m}\right) = 1 + (e^{-a/2} - 1) Q_1 + \frac{b}{2c} \operatorname{sh} ce^{-a/4} Q_2 (\operatorname{ch} ce^{-a/4} - e^{-a/2}) Q_3 +$$

$$+ \frac{a}{4} e^{-a/4} \operatorname{sh} c Q_4. \quad (25)$$

Аналогичная процедура проводится для оператора $\exp(-\beta \mathcal{H}_{f, f+1}/m)$. В этом случае базисные операторы O_i строятся как билинейные комбинации операторов Хаббарда на соседних узлах. Явный вид этих операторов приведен в Приложении. В результате приходим к следующей формуле:

$$\exp(-\beta \mathcal{H}_{f, f+1}^0/m) = 1 + \operatorname{sh} K (O_1 + O_7) + (\operatorname{ch} K - 1) (O_2 + O_8) -$$

$$-\frac{1}{3} (e^K - e^{-2K}) O_3 + \left(\frac{1}{6} e^K - \frac{1}{2} e^{-K} + \frac{1}{3} e^{-2K}\right) (O_6 - O_4) +$$

$$+ \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{6} e^K - \frac{1}{2} e^{-K} + \frac{1}{6} e^{-2K}\right) O_5. \quad (26)$$

Используя (25), (26), легко вычислить необходимые матричные элементы (12). Число ненулевых матричных элементов в данной задаче равно 41, их явный вид ввиду громоздкости здесь не приводится (см. [16, 17]).

4. Детали КМК

Мы видели (см. (2), (3)), что одномерная квантовая задача свелась к двумерной изингоподобной. Разложение (5) становится точным при $\tau = mT \rightarrow \infty$, при конечных m отбрасываются члены $\sim 1/\tau^2$ [6]. Для

того чтобы точность вычислений была постоянной, необходимо, чтобы $m = \tau/T$ при $\tau = \text{const}$. В нашей работе число узлов цепочки N равно 16, $10 \text{ К} \leq T \leq 50 \text{ К}$. Мы выбираем $\tau = 60$ для $10 \text{ К} \leq T \leq 20 \text{ К}$, $\tau = 120$ для $30 \text{ К} \leq T \leq 40 \text{ К}$ и $\tau = 200$ для $T = 50 \text{ К}$. Размер решетки в троттеровском направлении равен $2m$ и соответственно имеет значение $6 \leq 2m \leq 12$. Теперь, зная матричные элементы, можно применить идею Метрополиса выборки по важности. Как обычно, задается некоторое начальное состояние. Затем по определенному правилу создается новое состояние и применяется схема Метрополиса в соответствии с (1). Специфика квантовой задачи проявляется в правилах создания состояний.

1) Так как состояния определяются собственными значениями, т. е. $S^z = \{1, 0, -1\}$, то при движении по решетке вдоль некоторой траектории нужно изменять значения S^z на узлах.

2) Траектории для 41 вершинной модели должны быть замкнутыми, т. к. незамкнутые траектории дают нулевой вклад вследствие возникно-

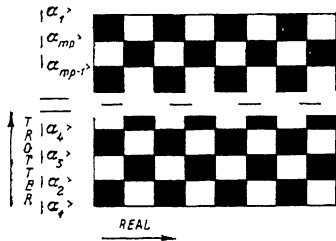


Рис. 1. Эффективная двумерная решетка.

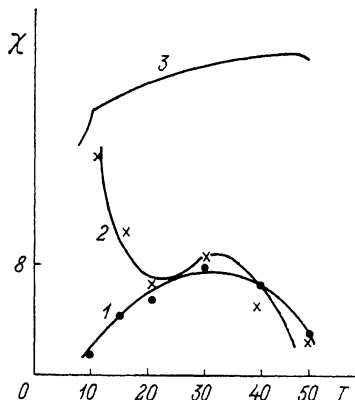


Рис. 2. Температурные $\chi_1(T)$ (1), $\chi_2(T)$ (2) и экспериментальная M/H (3) [13] зависимости.

вения нулевых матричных элементов, не входящих в состав 41 вершины (30) [14].

3) Так как ненулевые вершины имеют четное число состояний $|0\rangle$, то при движении по траекториям четность или нечетность числа нулей $|0\rangle$ в парах ближайших узлов должна сохраняться. Таким образом, либо а) все нули остаются нулями, а $|1\rangle \rightarrow |\pm 1\rangle$ с равной вероятностью, либо б) все нули $\rightarrow |\pm 1\rangle$ с равной вероятностью, а $|\pm 1\rangle \rightarrow$ нуль.

Если N_0 — число нулей вдоль траектории, а p — число узлов на этой траектории, то вероятность варианта «а» равна $2^{p-N_0}/(2^{N_0} + 2^{p-N_0})$, а варианта «б» $2^{N_0}/(2^{N_0} + 2^{p-N_0})$ [5].

4) Существуют траектории, меняющие и не меняющие общую намагниченность [14, 15].

В нашей работе траектории выбраны по сторонам светлых клеток на рис. 1. Нижний ряд клеток соответствует $\langle \alpha_1 | L_{\text{odd}} | \alpha_2 \rangle$, следующий $\langle \alpha_2 | L_{\text{even}} | \alpha_3 \rangle$ и т. д. Начальное состояние задавалось $\{S^z\} = 0$ всеми нулями. Монте-Карло шагом считался цикл из $2mN$ случайных траекторий по решетке. Для достижения равновесия делалось 60 000 Монте-Карло шагов, для усреднения 120 000.

5. Результаты и обсуждение

Мы вычисляли зависимость намагниченности M и восприимчивости χ от T . Легко показать [4], что

$$\langle S^z \rangle = \left\langle \sum_{f,g} S_{f,g}^z / mN \right\rangle_{MK}, \quad (27)$$

где

$$\langle A \rangle_{MK} = \sum_{i=1}^{120\,000} A_i / 120\,000.$$

Восприимчивость вычислялась двумя способами:

$$1) \chi_1 = M/H,$$

как в эксперименте [13], и

$$2) \chi_2 = \partial M / \partial H = \beta \mu (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad [11]. \quad (28)$$

Соотношение (28) легко получить из определения термодинамического среднего намагниченности

$$\chi_2 = \frac{\partial M}{\partial H} = \frac{\partial}{\partial H} \left\{ \frac{\text{Sp} \sum_i S_i^z e^{-\beta \mathcal{H}}}{\text{Sp} e^{-\beta \mathcal{H}}} \right\} = \beta \mu \left\{ \text{Sp} \sum_i S_i^z e^{-\beta \mathcal{H}} \sum_i S_i^z \text{Sp} e^{-\beta \mathcal{H}} - \left(\text{Sp} \sum_i S_i^z e^{-\beta \mathcal{H}} \right)^2 \right\} / (\text{Sp} e^{-\beta \mathcal{H}})^2 = \beta \mu (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2). \quad (29)$$

На рис. 2 приведены результаты расчета $\chi(T)$, а также данные эксперимента на CsNiF_3 [13]. Для наглядности кривые сдвинуты по вертикали. Пологий максимум восприимчивости характерен для одномерных цепочек. В частности, для ферромагнитной цепочки [5] он также существует. Температура достиже-

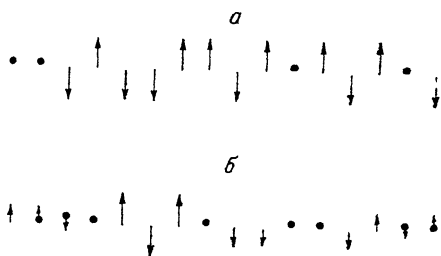


Рис. 3. Типичные спиновые конфигурации. $T=50$ (а) и 10 К (б).

ния максимума $kT_m \simeq 2I$, где множитель 2 возникает от числа ближайших соседей.

Отметим отличие χ_2 от χ_1 в области низких T . Минимум χ_2 при $T=20$ К и последующий рост с понижением T являются предсказанием нашего расчета.

Вообще говоря, из-за анизотропии возможно появление поперечных компонент намагниченности. В данном случае

$$2 \langle S^y \rangle = \frac{\text{Sp}(S_i^y + S_{i+1}^y) e^{-\beta \mathcal{H}}}{Z}. \quad (30)$$

Поскольку

$$S_i^y = \frac{1}{\sqrt{2}i} \{ X_i^{10} + X_i^{0-1} - X_i^{01} - X_i^{-10} \},$$

то любой матричный элемент в (30) равен нулю, так как в него входят вершины с нечетным числом «нулей» (нарушается правило «3»).

Интересные выводы получаются из рассмотрения равновесных конфигураций спинов. Следует отметить, что для обсуждения конфигурации спинов в реальном пространстве необходимо сначала усреднить по троттеровскому направлению

$$\langle S_f^z \rangle_T = \sum_{g=1}^{2m} S_{fg}^z / 2m. \quad (31)$$

На рис. 3 приведены две типичные конфигурации спинов при разных температурах. Длина стрелки соответствует величине $\langle S_f^z \rangle_T$, точка означает $\langle S_f^z \rangle_T = 0$. При высоких температурах большая часть спинов имеет $\langle S_f^z \rangle_T = \pm 1$. При низких температурах большая часть спинов имеет нуле-

вые или малые величины проекции спина. Поскольку $\langle S^x \rangle = \langle S^y \rangle = 0$, то уменьшение $\langle S^z \rangle$ есть отражение эффекта квантового сокращения спина, возникающего в данном случае по двум причинам: и антиферромагнитное обменное взаимодействие, и комбинация анизотропии с поперечным магнитным полем дают нулевые колебания.

В заключение авторы благодарят С. С. Аплеснина за консультации в процессе работы.

ПРИЛОЖЕНИЕ

$$\begin{aligned}
 O_1 &= X_f^{01} X_{f+1}^{10} + X_f^{-10} X_{f+1}^{10} + X_f^{0-1} X_{f+1}^{01} + X_f^{0-1} X_{f+1}^{-10} + (f \leftrightarrow f+1), \\
 O_2 &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2} + X_f^{00} + \frac{1}{2} X_f^{-1-1} X_{f+1}^{-1-1} + \frac{1}{2} X_f^{-11} X_{f+1}^{-11} + X_f^{-11} X_{f+1}^{1-1} + \frac{1}{2} X_f^{00} X_{f+1}^{00} + \right. \\
 &\quad \left. + (f \leftrightarrow f+1) \right\}, \\
 O_3 &= \frac{1}{2} \left\{ X_f^{-11} X_{f+1}^{1-1} - \frac{1}{2} (X_f^{-1-1} X_{f+1}^{-1-1} + X_f^{-11} X_{f+1}^{-11} + X_f^{11} X_{f+1}^{11} + X_f^{-1-1} X_{f+1}^{-1-1}) + \right. \\
 &\quad \left. + X_f^{11} X_{f+1}^{1-1} + (f \leftrightarrow f+1) \right\}, \\
 O_4 &= X_f^{0-1} X_{f+1}^{01} + X_f^{-10} X_{f+1}^{10} + (f \leftrightarrow f+1), \\
 O_5 &= 2X_f^{00} X_{f+1}^{00}, \\
 O_6 &= \frac{1}{2} \left\{ X_f^{-11} X_{f+1}^{1-1} + \frac{1}{2} (X_f^{-1-1} X_{f+1}^{-1-1} + X_f^{-11} X_{f+1}^{-11} + X_f^{11} X_{f+1}^{11} + X_f^{-1-1} X_{f+1}^{-1-1}) + \right. \\
 &\quad \left. + X_f^{11} X_{f+1}^{1-1} + (f \leftrightarrow f+1) \right\}, \\
 O_7 &= -\frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2} (X_f^{-1-1} X_{f+1}^{-1-1} + X_f^{-11} X_{f+1}^{-11} - X_f^{11} X_{f+1}^{11} - X_f^{-1-1} X_{f+1}^{-1-1}) + X_f^{11} X_{f+1}^{1-1} - \right. \\
 &\quad \left. - X_f^{-1-1} X_{f+1}^{-1-1} + (f \leftrightarrow f+1) \right\}, \\
 O_8 &= -\frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2} (X_f^{-1-1} X_{f+1}^{-1-1} + X_f^{-11} X_{f+1}^{-11} - X_f^{11} X_{f+1}^{11} - X_f^{-1-1} X_{f+1}^{-1-1}) - X_f^{11} X_{f+1}^{1-1} + \right. \\
 &\quad \left. + X_f^{-1-1} X_{f+1}^{-1-1} + (f \leftrightarrow f+1) \right\}.
 \end{aligned}$$

Список литературы

- [1] Ермаков С. М. Методы Монте-Карло и смежные вопросы. М.: Наука, 1975.
- [2] Методы Монте-Карло в статистической физике / под ред. Биндера К., М. Мир, 1982.
- [3] Suzuki M. // Prog. Theor. Phys. 1976. V. 56. N 5. P. 1454—1469.
- [4] Suzuki M., Miyashita S., Kuroda A. // Prog. Theor. Phys. 1977. V. 58. № 5. P. 1377—1387.
- [5] Wysin G. M., Bishop A. R. // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. N 5. P. 3377—3387.
- [6] Suzuki M. // J. Stat. Phys. 1986. V. 43. N 5/6. P. 883—909.
- [7] Бакстер П. Точно решаемые модели в статистической механике. М.: Мир, 1986.
- [8] Marcu M., Muller J., Schmatzner F. // J. Phys. A. 1985. V. 18. N 16. P. 3189—3203.
- [9] Gupta R. // Preprint La-UR-86-3618. Los Alamos, 1986.
- [10] Suzuki M. // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. N 5. P. 2957—2965.
- [11] Suzuki M. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 7. P. 3569—3575.
- [12] Hirsh J. E., Sugar R. L., Scalapino D. J., Blancensbecker R. // Phys. Rev. B. 1982. V. 26. N 9. P. 5033—5055.
- [13] Петраковский Г. А., Федосеева Н. В., Аплеснин С. С., Королев В. К. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 8. С. 169—175.
- [14] Gullen J. J., Landay D. P. // Phys. Rev. B. 1983. V. 27. N 1. P. 297—313.
- [15] Fye R. M. // Phys. Rev. B. 1986. V. 33. N 9. P. 6271—6280.
- [16] Вальков В. В., Овчинников С. Г. // ТМФ. 1982. Т. 50. С. 466—476.
- [17] Овчинников С. Г., Петраковский О. Г. Препринт N 614Ф ИФ СО АН СССР. Красноярск. 1990.