

ВПЛИВ ЗОВНІШНЬОГО ПОЛЯ НА ФАЗОВИЙ ПЕРЕХІД ДРУГОГО РОДУ: МЕТОД ОПИСУ КРИТИЧНОЇ ПОВЕДІНКИ ТРИВИМІРНИХ СИСТЕМ

М.П. КОЗЛОВСЬКИЙ

УДК 123.123
©2009

Інститут фізики конденсованих систем НАН України
(Вул. Свенцицького, 1, Львів 76011; e-mail: mpk@ph. icmp. lviv. ua)

Здійснено короткий огляд сучасного стану щодо вивчення поведінки основних характеристик моделей поблизу точки фазового переходу другого роду. Наведено методи теоретичного опису їхньої критичної поведінки. Серед них – метод молекулярного поля, теорія Ландау, метод ренормалізаційної групи та ін. Основну частину роботи присвячено викладу аналітичного методу опису критичної поведінки 3D ізінгоподібної системи в зовнішньому полі. Він є розвитком теорії фазових переходів, запропонованої І.Р. Юхновським з використанням методу колективних змінних. Узагальнення стосується вивчення впливу зовнішнього поля на поведінку таких фізичних характеристик, як параметр порядку, сприйнятливості, теплоємності тощо. В межах спрощеної моделі проведено розрахунок як значень критичних показників, так і критичних амплітуд низки фізичних величин. Запропоновано узагальнену форму запису скейлінгової форми вільної енергії системи поблизу точки фазового переходу. Отримано кросверне рівняння стану, яке передбачає явну залежність параметра порядку від відносної температури та зовнішнього поля.

тичними явищами будемо розуміти особливості поведінки спостережувальних характеристик системи при наближенні до точки фазового переходу (ТФП). Для феромагнетиків ТФП визначається певним значенням температури та нульовим значенням зовнішнього поля, зокрема, для системи Fe маємо $T_c = 1044$ К. Критична точка рідина–газ, яка відповідає фазовому переходу другого роду, досягається за фіксованих значень температури та тиску. Так, для H_2O такими значеннями є $T_c = 647$ К та $p_c = 218$ атм. Однією з основних характеристик фазового переходу є параметр порядку. Ця величина характеризує як фазові переходи другого, так і першого роду. При фазових переходах першого роду параметр порядку змінюється стрибкоподібно при переході через точку переходу. Для переходів другого роду він є неперервною функцією температури та зовнішнього поля. Саме ця залежність носить назву “рівняння стану”, що є предметом численних досліджень. Для різних фізичних систем параметром порядку є певна спостережувальна величина. Зокрема, для магнетиків – це намагніченість, для системи рідина–газ в околі критичної точки – це густина, для фeroелектрика – поляризація тощо. Надалі зосередимо увагу на магнетиках, оскільки критичні явища, що мають місце поблизу різних видів точок фазових переходів мають багато спільних рис. Дослідженню явищ при фазових переходах присвячено цілу низку монографій [1–8]. Цей перелік далеко неповний, однак, дозволяє прослідкувати розвиток уявлень про способи опису критичних явищ.

При дослідженні критичних явищ використовуються як аналітичні підходи, так і числові методи розрахунку різних фізичних характеристик, як правило, модельних систем. Дані числових розрахунків використовуються як тестові для перевірки результатів аналітичних підходів. Побудовані на сьогодні методи опису фазових переходів містять цілий ряд припущень, які приводять до неконтрольованих наближень. Критерієм застосовності того чи іншого ана-

ЗМІСТ

1. Вступ
2. Передбачення класичних теорій та успіхи скейлінгового підходу
3. Метод розрахунку статистичної суми 3D ізінгоподібної моделі поблизу ТФП за наявності поля
4. Визначення точки виходу із критичного режиму флуктуацій параметра порядку за наявності поля
5. Схема розрахунку вільної енергії для області температур $T > T_c$
6. Виділення макроскопічної частини параметра порядку
7. Вільна енергія системи в зовнішньому полі поблизу точки фазового переходу при $T > T_c$
8. Розрахунок параметра порядку та сприйнятливості спінової системи поблизу ТФП у зовнішньому полі при $T > T_c$
9. Розрахунок ентропії та теплоємності поблизу ТФП в зовнішньому полі при $T > T_c$
10. Висновки

1. Вступ

Дану роботу присвячено побудові теорії критичних явищ при фазових переходах другого роду. Під кри-

літичного методу розрахунку є порівняння отриманих результатів із даними числових методів. Серед них високо- та низькотемпературні розклади, метод Монте-Карло тощо. Проводиться також порівняння з даними реального експерименту. Зокрема, робота [9] присвячена використанню моделі Ізінга для опису реальних магнітних матеріалів. Основну увагу дослідників зосереджено останнім часом на проведенні порівняння з даними числових експериментів. Серед теоретичних підходів до опису критичних явищ розрізняють “класичні” теорії та методи, які ґрунтуються на використанні підходу ренормалізаційної групи [10, 11]. Класичні методи опису, такі як теорія середнього поля [1], теорія Ландау [12] та інші (див. [3, 4]), передбачають так звані “класичні” значення критичних показників. Під “критичними показниками” розуміють числа, які визначають степеневу поведінку таких фізичних величин, як намагніченість M , сприйнятливість χ , теплоємність C та інших величин по відношенню до відносної температури $\tau = (T - T_c)/T_c$ та зовнішнього поля \mathcal{H} поблизу ТФП. На жаль, значення класичних критичних показників відрізняються від експериментально визначених величин. Незважаючи на це, класичні теорії не втратили своєї актуальності до сьогодні, оскільки дозволяють отримувати повні вирази для фізичних величин в широкому околі точки фазового переходу (включаючи критичні показники). Більше того, якщо не наближатися надто близько до точки фазового переходу, то класичні теорії дають задовільний опис [6, 13, 14].

Інша група методів опису критичної поведінки ґрунтується на використанні ренормгрупового підходу. В їх основі знаходиться гіпотеза масштабної інваріантності [15–18]. Остання тісно пов’язана з поняттям кореляційної довжини, яка характеризує великомасштабні флуктуації параметра порядку поблизу ТФП. По мірі наближення до цієї точки кореляційна довжина зростає і стає безмежною в самій точці. Це і зумовлює сингулярності в макроскопічних спостережувальних характеристиках системи.

Прямуювання до безмежності таких величин, як кореляційна довжина, сприйнятливість, теплоємність тощо, характерне лише для модельних систем із безмежно великим числом частинок. Для реальних систем в експерименті спостерігається лише їх аномальне зростання до певної скінченної величини. Це зумовлюється як скінченністю реальних зразків, так і наявністю зовнішніх полів. Саме впливу зовнішніх полів на критичну поведінку і присвячено дану роботу.

У розділі 2 розглянуто вплив зовнішнього поля на фазовий перехід із точки зору як класичних теорій, так і скейлінгової теорії критичних явищ. Він містить загальновідомі положення, які при подальших викладках будуть порівнюватися із граничними випадками більш загального підходу.

Розділ 3 присвячено викладу суті методу, який використовується надалі при розрахунку фізичних характеристик ізінгоподібної системи поблизу точки фазового переходу. Основні положення цього методу було запропоновано в роботах І.Р. Юхновського [19–28] та розвинуто пізніше в [29–34] на випадок наявності зовнішнього поля.

Розділ 4 містить визначення точки виходу системи із критичного режиму флуктуацій параметра порядку за наявності зовнішнього поля. Ця величина визначає по суті розміри скейлінгової області. Як показують результати розрахунків, розміри цієї області залежать від відносної температури, величини поля та пропорційні до кореляційної довжини системи [34–36].

У п’ятому розділі наведено схему розрахунку вільної енергії системи для діапазону температур більших за T_c [37–42]. Важливим елементом такого розрахунку є виділення внеску до вільної енергії, пов’язаного із макроскопічною частиною параметра порядку. Далеко від точки фазового переходу такі внески асоціюються із вільною енергією Ландау як розкладом вільної енергії за ступенями параметра порядку. Однак, поблизу ТФП ситуація змінюється, і подібні внески містять нетривіальну залежність від зовнішнього поля \mathcal{H} та відносної температури τ , що є предметом розгляду шостого розділу.

Розділ 7 присвячено методу розрахунку явних виразів для вільної енергії, параметра порядку, сприйнятливості системи поблизу ТФП при наявності зовнішнього поля. Розрахунки виконано без введення ззовні будь-яких феноменологічних параметрів, хоча є наближеними. Однак, навіть використання наближеного підходу дозволяє знайти для вільної енергії системи більш загальний вираз, ніж це відомо на сьогодні із скейлінгової теорії. Цей вираз містить явну залежність від поля та температури й переходить у граничних випадках у добре відомі залежності: $F_1 \sim |\tau|^{d\nu} f_s$ (при $\mathcal{H} = 0$) та $F_2 \sim h^{\frac{d\nu}{\beta\delta}} f'_s$ при наявності поля $h = \mathcal{H}/kT$ та поблизу T_c . Тут d – вимірність простору, ν, β, δ – значення критичних показників, f_s, f'_s – скейлінгові функції. Поєднання залежностей F_1 та F_2 в єдину формулу – один із результатів даної роботи. Оскільки спостережувальні фізичні величини обчислюються в даній роботі як похідні

від вільної енергії, то очевидно, що і рівняння стану буде поєднувати внески від температури та поля в явному вигляді, а не лише через скейлінгову змінну $z = \tau/h^{1/\beta\delta}$.

У заключних розділах наведено явні вирази для параметра порядку, сприйнятливості та теплоємності поблизу ТФП. Отримано загальну форму рівняння стану. Як впливає із результатів роботи, розрахунок критичного стану повинен включати як скейлінгову теорію, так і проведення розрахунку статистичної суми чи вільної енергії системи. Скейлінгова складова теорії дозволяє обчислювати числові значення критичних показників. На даний час вона розвинута досить добре і ґрунтується на використанні наявної поблизу ТФП ренормгрупової симетрії. Загальна теорія критичних явищ полягає у визначенні вигляду вільної енергії та фізичних характеристик моделі. Вона знаходиться сьогодні на етапі розвитку і передбачає прямий розрахунок вільної енергії. Зрозуміло, що такий розрахунок має включати ренормгруповий підхід. Точніше, в процесі прямого розрахунку фізичних величин поблизу ТФП природним чином повинна виникати ситуація, яка передбачає використання апарату ренормалізаційної групи як етапу загального розрахунку. Це дозволяє провести розрахунок критичних показників. Загальний вираз для вільної енергії системи включає в себе внески як від скейлінгової області, так і внески від інших флуктуаційних процесів. Останні є визначальними при формуванні виразів для спостережуваних величин.

2. Передбачення класичних теорій та успіхи скейлінгового підходу

Історично першою серед класичних теорій фазових переходів є добре відома теорія Ван-дер-Ваальса. Вона використовується для опису фазових переходів рідина-газ. З точки зору фазових переходів другого роду важливим є рівняння Ван-дер-Ваальса поблизу критичної точки. Критичні показники в цій теорії набувають класичних значень:

$$\beta = \frac{1}{2}, \quad \gamma = 1, \quad \alpha = 0, \quad (2.1)$$

де β визначає поведінку параметра порядку як функції температури, γ описує температурну поведінку стислості, α – теплоємності. У теорії магнітних фазових переходів до даного моменту актуальною є теорія молекулярного поля Вейса. В її основі лежить припущення, що взаємодія спінів може бути описана, використовуючи поняття молекулярного поля H_m , яке

пропорційне до намагніченості $M(T, H)$

$$H_m = \lambda M(T, H), \quad (2.2)$$

де λ – параметр молекулярного поля. Рівняння стану в теорії середнього (молекулярного) поля для моделі Ізінга має простий вигляд

$$M = M_0 t h \left[\frac{1}{2} \beta \bar{\mu} (H + \lambda M) \right]. \quad (2.3)$$

Тут $M_0 = M(T=0, H=0)$, $\beta = \frac{1}{kT}$, $\bar{\mu} = g\mu_B$ (k – стала Больцмана, g – фактор Ланде, μ_B – магнетон Бора). Характерною особливістю згаданих вище підходів є те, що для фізичних характеристик системи отримуються явні аналітичні вирази. Вони є наближеними, оскільки отримані без урахування флуктуаційних ефектів. Класичні теорії передбачають універсальні значення критичних показників (2.1), які в літературі називають класичними. Зауважимо, що вони не залежать від параметрів моделі.

Яскравим прикладом класичної теорії фазових переходів є теорія Ландау [12]. Суть цієї теорії полягає в тому, що вільна енергія поблизу ТФП зображається у вигляді ряду за степенями параметра порядку $\bar{\sigma}$:

$$F = N (a_0 + a_2 \bar{\sigma}^2 + a_4 \bar{\sigma}^4 + a_6 \bar{\sigma}^6 + \dots - h \bar{\sigma}). \quad (2.4)$$

Відомо, що у випадку відсутності зовнішнього поля параметр порядку відсутній при $T > T_c$ та є малим при $T \leq T_c$. Складається враження, що такий розклад може бути корисним під час розрахунку фізичних величин поблизу ТФП. Величини a_{2n} є невизначеними, однак повинні бути гладкими функціями температури. Особливий інтерес являє випадок $a_2 = 0$, що спостерігається при температурі $T = T_c$. Оскільки згідно з припущенням теорії функції a_{2n} є гладкими, то очевидно, що

$$a_2 = a'_2 (T - T_c), \quad (2.5)$$

де a'_2 – деяка стала величина. Це є друге припущення теорії Ландау. Маючи вільну енергію, можемо отримати вирази для параметра порядку $\bar{\sigma}$, сприйнятливості χ , ентропії S , теплоємності C та інших величин, використовуючи відомі співвідношення:

$$\bar{\sigma} = - \left(\frac{\partial F}{\partial h} \right)_T, \quad \chi = \left(\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial h} \right)_T, \\ S = - \frac{\partial F}{\partial T}, \quad C = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2}. \quad (2.6)$$

Обмежимося у розкладі (2.4) доданками, пропорційними до $\bar{\sigma}^4$. Для випадку $a_4 > 0$ отримуємо

$$\bar{\sigma} = \begin{cases} h/2a_2, & T > T_c, \\ m_0 + h/(8m_0^2 a_4), & T < T_c, \end{cases} \quad (2.7)$$

де

$$m_0 = (-a_2/2a_4)^{1/2}. \quad (2.8)$$

Сприйнятливість системи має вигляд

$$\chi = \begin{cases} [2a_2'(T - T_c)]^{-1}, & T > T_c, \\ [4a_2'(T_c - T)]^{-1}, & T < T_c. \end{cases} \quad (2.9)$$

Теплоємність системи залишається сталою величиною і при переході через значення $T = T_c$ має стрибок:

$$\Delta C = T_c^2 a_2'^2 / 2a_4. \quad (2.10)$$

Теорія Ландау дозволяє також знайти залежність параметра порядку $\bar{\sigma}$ від поля h при $T = T_c$. Тут $a_2 = 0$, і тому

$$\bar{\sigma}^3 = h/4a_4. \quad (2.11)$$

Використовуючи вирази (2.7)–(2.11), бачимо, що теорія Ландау приводить до класичних значень критичних показників (2.1), однак, поряд із значеннями критичних показників дозволяє отримати повні вирази для $\bar{\sigma}$, χ , C тощо. З фізичної точки зору теорія Ландау не бере до уваги флуктуацій параметра порядку, і це є однією з її вад. У більш глобальному плані такий підхід є математично хибним при прямованні температури T до T_c . Добре відомо, що ряд (2.4) поблизу ТФП є некоректним, оскільки коефіцієнти розкладу a_2 , a_4 , a_6 є неаналітичними функціями температури. Припущення про можливість розкладу в ряд поблизу ТФП вільної енергії виявляється неефективним поблизу точки фазового переходу. Незважаючи на такі обмеження, теорія Ландау і зараз відіграє суттєву роль в описі фазових переходів. Перш за все, це стосується об'єктів (надпровідники, деякі феромагнітні та фероелектричні матеріали) з малим числом Гінзбурга [43]. Флуктуації відіграють суттєву роль в діапазоні $|\tau| \leq \xi_T$, де

$$\tau = \frac{T - T_c}{T_c}, \quad (2.12)$$

а величина ξ_T залежить від типу системи. Так, для критичної точки надпровідника $\xi_T \sim 10^{-15}$. Для λ -точки He^4 маємо $\xi_T \sim 0,3$ [4]. Для одних систем

вплив флуктуацій спостерігається в дуже вузькому діапазоні температур поблизу T_c . Для інших систем, зокрема, магнетиків, вплив флуктуацій є суттєвим у порівняно широкій області температур. У зв'язку з цим виникає необхідність вдосконалення методів опису фазового переходу. Він здійснюється, як правило, з використанням модельних гамільтоніанів. Загальний вигляд такого гамільтоніана було запропоновано в роботах Г. Стенлі [5]:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^{(N)} S_j^{(N)} - \sum_i \mathcal{H} S_i^{(N)}, \quad (2.13)$$

де спіни $S_i^{(N)}$ – N -вимірні одиничні вектори, J – енергія взаємодії найближчих сусідів. Скалярний добуток в (2.13) має вигляд $\sum_{n=1}^N S_{in} S_{jn}$. Ця модель і сьогодні використовується під час опису фазових переходів. При значенні $N = 1$ отримуємо модель Ізінга, яка добре описує критичну поведінку однокомпонентної рідини, бінарного сплаву чи суміші. У випадку $N = 2$ отримуємо модель плоского ротатора або відомою модель Вакса–Ларкіна [44]. Така модель описує λ -перехід в бозе-рідині. При $N = 3$ маємо класичну модель Гайзенберга, яка придатна для опису феромагнетиків та антиферомагнетиків. Звичайно, що при $N > 3$ гамільтоніан (2.13) також описує певні модельні системи, однак залишається питання про аналог відповідної фізичної системи. Проте, виявилось [45], що у випадку $N \rightarrow \infty$ модель (2.13) має досить простий розв'язок навіть для тривимірної ґратки. У цьому відношенні існуючий розв'язок близький до сферичної моделі Берліна–Каца [46], яка також має розв'язок при $d = 3$, однак не відповідає вимогам до реальних фізичних систем. Про це свідчать, зокрема, значення критичних показників згаданих вище точних розв'язків.

Невідповідність класичних значень критичних показників і даних експерименту зумовило інтенсивні дослідження критичних явищ, починаючи з 70-х років минулого століття. З цього часу було розвинуто низку підходів до уточнення їхніх значень. Одним із перших став метод ϵ -розкладу ($\epsilon = 4 - d$, d – вимірність простору) [47–49]. Ідея цього методу зрозуміла і проста. Відомо, що для моделей, вимірність яких $d > 4$, ряд теорії збурень в гаусовому наближенні спинових флуктуацій не є розбіжним. Тому для значень d , близьких до 4, параметр ϵ набуває малих значень, і є надія отримати добрі результати для таких систем. Провівши відповідні розрахунки, вважаючи $\epsilon \ll 1$, в остаточних результатах формально можна покласти $\epsilon = 1$ і отримати значення критичних показників для

тривимірної системи. У роботі [50] було отримано розклад до доданків, які пропорційні до ϵ^3 , а в [51] ці ряди були продовжені до ϵ^5 . Отримані результати продемонстрували асимптотичний характер ϵ -ряду. Використання процедури пересумовування за допомогою техніки Паде–Бореля в [52] дозволило отримати досить точні значення критичних показників.

Метод ϵ -розкладу залишається і нині надзвичайно продуктивним для цілої низки моделей статистичної фізики. Він використовує гамільтоніан Гінзбурга–Ландау:

$$H = \int d^d x \left[\frac{1}{2} (\nabla \varphi(x))^2 + \frac{1}{2} m \varphi^2(x) + \frac{1}{4} g \varphi^4(x) - \mathcal{H} \varphi(x) \right] \quad (2.14)$$

для моделі n -компонентних спінів в d -вимірному просторі. По суті, тут записано розклад у ряд за степенями параметрів $\varphi(x)$ та $\nabla \varphi(x)$, і до уваги взято декілька членів розкладу. Коефіцієнт m біля $\varphi^2(x)$ вважається пропорційним до τ (як і в теорії Ландау), а g – деяка стала величина. Останній доданок в (2.14) враховує наявність зовнішнього поля \mathcal{H} . Вважається, що гамільтоніан (2.13) еквівалентний представленню (2.14) з точки зору опису критичних явищ. Слід відзначити два основних моменти стосовно (2.14). Перший з них пов'язаний із компонентністю параметра порядку n , другий – із вимірністю системи d . Як встановлено на сьогодні, саме від цих величин залежать значення критичних показників. Крім того, на їхню величину впливає симетрія гамільтоніана (наявність крім $\varphi^4(x)$ доданків $(\varphi^2(x))^2$ або присутність в магнітній матриці немагнітних включень [53, 54]. Кожна з таких систем належить до певного класу універсальності, в межах якого критичні показники є незмінними. Так, до класу універсальності моделі Ізінга належить також критична точка рідина–газ, точка розшарування бінарних сумішей тощо. Наведемо для ілюстрації методу ϵ -розкладу значення деяких критичних показників для систем з однокомпонентним параметром порядку:

$$\begin{aligned} \gamma &= 1 + \frac{1}{6} \epsilon + \frac{25}{324} \epsilon^2 + 0(\epsilon^3), \\ 2\beta &= 1 - \frac{1}{3} \epsilon + \frac{1}{81} \epsilon^2 + 0(\epsilon^3), \\ \delta &= 3 \left(1 + \frac{1}{3} \epsilon + \frac{25}{162} \epsilon^2 \right) + 0(\epsilon^3). \end{aligned} \quad (2.15)$$

Легко бачити, що при $\epsilon = 1$ (що відповідає випадку $d = 3$) маємо суттєве відхилення значень γ , β та δ від їхніх класичних значень і наближення до даних експерименту. Крім критичних показників цей метод дозволяє отримати вираз для рівняння стану [55–57], знайти відношення критичних амплітуд [58], розрахувати деякі інші універсальні характеристики багатьох моделей. Схема розрахунку критичних показників у вигляді ϵ -розкладу носить назву безмасової теорії поля. Така назва пов'язана з тим, що ренормування відбувається при $m = 0$ та при ненульовому значенні імпульсу. Кінцеві результати не залежать від значення імпульса, що свідчить про наявність масштабної інваріантності. Безмасова теорія поля працює безпосередньо при $T = T_c$, оскільки обернена сприйнятливості, яка є аналогом маси в теорії поля, обертається на нуль. Ця теорія, однак, має серйозні проблеми, на які звернув увагу Симанзік [59]. Мова йде про інфрачервоні сингулярності певних діаграм, усунення яких вимагає введення додаткових гіпотез. Як вдосконалення цієї теорії Парізі було запропоновано так звану масивну теорію поля [60]. Вона не має вказаної вище проблеми і використовує фіксовану вимірність простору $d = 3$. У цій теорії ренормування відбувається при нульових значеннях імпульсу та відмінній від нуля масі. Це означає, що виникає можливість вести опис в околі температури T_c . Отримання остаточного результату досягається під час прямування маси (оберненої сприйнятливості) до нуля. На сьогодні даний метод дозволяє отримувати значення критичних показників із великою ступінню точності. Так, в [61] наведено результати розрахунку критичних показників у шестипетлевого наближенні для вимірності параметра порядку $n = 0; 1; 2; 3$. На жаль, ряди масивної теорії мають також асимптотичний характер. Ця проблема вирішується шляхом їхнього пересумовування за допомогою методу Паде–Бореля, що успішно було здійснено в роботі [62].

Використання теоретико-польових методів розрахунку передбачає використання гамільтоніанів типу (2.14), в яких вважається, що коефіцієнт поблизу $\varphi^2(x)$ є пропорційним до τ . Це без сумніву елемент феноменології, оскільки сама модель включає температуру фазового переходу T_c . Більш послідовний підхід передбачає розрахунок T_c як деякої особливої температури, при якій спонтанно виникає параметр порядку, чи має місце аномальний ріст сприйнятливості, теплоємності чи іншої фізичної величини. Крім того, в теоретико-польових підходах до опису критичних явищ виникає ще одна проблема. Всі вони, як і метод ϵ -розкладу, ґрунтуються на використанні

Т а б л и ц я 1. Значення критичних показників $O(N)$ моделей з методу ϵ -розкладу [77]

| N | 0 | 1 | 2 | 3 |
|-----------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|
| $\gamma(\text{free})$ | $1,1575 \pm 0,0060$ | $1,2355 \pm 0,0050$ | $1,3110 \pm 0,0070$ | $1,3820 \pm 0,0090$ |
| $\gamma(\text{bc})$ | $1,1571 \pm 0,0030$ | $1,2380 \pm 0,0050$ | 1,317 | 1,392 |
| $\nu(\text{free})$ | $0,5875 \pm 0,0025$ | $0,6290 \pm 0,0025$ | $0,6680 \pm 0,0035$ | $0,7045 \pm 0,0055$ |
| $\nu(\text{bc})$ | $0,5878 \pm 0,0011$ | $0,6305 \pm 0,0025$ | 0,671 | 0,708 |
| $\eta(\text{free})$ | $0,0300 \pm 0,0050$ | $0,0360 \pm 0,0050$ | $0,0380 \pm 0,0050$ | $0,0375 \pm 0,0045$ |
| $\eta(\text{bc})$ | $0,0315 \pm 0,0035$ | $0,0365 \pm 0,0050$ | 0,0370 | 0,0355 |
| $\beta(\text{free})$ | $0,3025 \pm 0,0025$ | $0,3257 \pm 0,0025$ | $0,3465 \pm 0,0035$ | $0,3655 \pm 0,0035$ |
| $\beta(\text{bc})$ | $0,3032 \pm 0,0014$ | $0,3265 \pm 0,0015$ | | |
| ω | $0,828 \pm 0,023$ | $0,814 \pm 0,018$ | $0,802 \pm 0,018$ | $0,794 \pm 0,018$ |
| θ | $0,486 \pm 0,016$ | $0,512 \pm 0,013$ | $0,536 \pm 0,015$ | $0,559 \pm 0,017$ |

в ролі базового гаусового розподілу флуктуації параметра порядку. Наявні в цих теоріях розклади є асимптотичними при наближенні температури до T_c , оскільки відомо [5], що дисперсія гаусового розподілу прямує до безмежності при наближенні до критичної точки. Використання під час побудови теорії негаусових розподілів флуктуацій дозволяє уникнути різного роду неаналітичностей, пов'язаних із вибором методу розрахунку, а не з фізикою задачі. Тому в останній час розвинувся ще один альтернативний до теорії збурень напрямок. Він отримав назву непертурбативного підходу до опису фазових переходів. Ідея такого підходу була запропонована у роботі [63]. Він не потребує використання якихось малих параметрів, що необхідні в теорії збурень. Суть непертурбативного підходу полягає в поетапному огрубленні шкали далекосяжних взаємодій. Відбувається поступовий перехід від мікроскопічної вільної енергії системи до її макроскопічного аналога. В основі методу є інтегродиференціальне рівняння [64, 65]. Складність отримання розв'язків цього (точного) рівняння спонукала до пошуку низки наближень. Найпростішим з них є так зване наближення локального потенціалу [66, 67], яке передбачає квадратичну залежність від хвильового вектора ефективного гамільтоніана системи. Сам гамільтоніан має вигляд поліноміального ряду за скалярними полями, які не залежать від хвильового вектора. Наслідком такого наближення є нульове значення критичного показника для кореляційної функції ($\eta = 0$). Залежно від порядку наближення (кількості членів поліноміального ряду) значення критичного показника кореляційної довжини ν змінюється від 0,527 до 0,759 [68]. У межах цього підходу здійснювалося також врахування імпульсної залежності ефективного гамільтоніана. При цьому $\eta \neq 0$, однак таке уточнення породжує ряд додаткових параметрів, які не мають на сьогодні строгого фізичного чи математичного обґрунтування [69].

Наявність поля в цьому підході приводить до виникнення асиметричної частини в поліномі ефективного гамільтоніана [70]. Найбільш повний огляд робіт, присвячених непертурбативному підходу, можна знайти в [71, 72]. Слід, однак, зауважити, що поряд із суттєвими успіхами цей підхід має низку недоліків. Серед них – присутність різного роду параметрів, відносно вільна процедура вибору способу обрізання хвильового вектора. Відкритим залишається питання про збіжність розкладів за змінною хвильового вектора. Основним моментом є те, що розв'язки можна знайти лише за допомогою числових методів, що ускладнює розуміння фізики процесу фазового переходу. На даний час відомі результати числових розрахунків значень критичних показників різноманітних модельних систем. Це високо- та низькотемпературні розклади [73, 74], дані методу Монте-Карло [75, 76] та ряд інших. Усі вони приводять до результатів для критичних показників, які добре узгоджуються між собою.

Для ілюстрації наведемо значення деяких критичних показників для $O(N)$ моделей фазового переходу (N -вимірність параметра порядку) із роботи [77] під час використання методу ϵ -розкладу (табл. 1) та результатів теоретико-польового підходу при фіксованій $d = 3$ вимірності простору (табл. 2). Як легко зауважити, дані цих таблиць узгоджуються з високою ступінню точності. Експериментальні дані суттєво поступаються точності наведених розрахунків.

Актуальною на сьогодні проблемою при описі критичних явищ є розвиток загальної теорії, яка б (поряд із розрахунком значень критичних показників та деяких інших універсальних характеристик моделей) дозволила отримати явні вирази для фізичних величин подібно до класичних теорій. Найбільш розвинутою в цьому відношенні є скейлінгова теорія, яка суттєво використовується при розрахунку критичних показників. В основі скейлінгової теорії лежить гіпотеза подібності, запропонована в роботах [15–18], та

Т а б л и ц я 2. Значення критичних показників $O(N)$ моделей з теоретико-польового підходу при $d = 3$ [77]

| N | 0 | 1 | 2 | 3 |
|----------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|
| γ | $1,596 \pm 0,0020$ | $1,2396 \pm 0,0013$ | $1,3169 \pm 0,0020$ | $1,3895 \pm 0,0050$ |
| ν | $0,5882 \pm 0,0011$ | $0,6304 \pm 0,0013$ | $0,6703 \pm 0,0015$ | $0,7073 \pm 0,0035$ |
| η | $0,0284 \pm 0,0025$ | $0,0335 \pm 0,0025$ | $0,0354 \pm 0,0025$ | $0,0355 \pm 0,0025$ |
| β | $0,3024 \pm 0,0008$ | $0,3258 \pm 0,0014$ | $0,3470 \pm 0,0016$ | $0,3662 \pm 0,0025$ |
| α | $0,235 \pm 0,003$ | $0,109 \pm 0,004$ | $-0,011 \pm 0,004$ | $-0,122 \pm 0,010$ |
| ω | $0,812 \pm 0,016$ | $0,799 \pm 0,011$ | $0,789 \pm 0,011$ | $0,782 \pm 0,0013$ |
| $\theta = \omega\nu$ | $0,478 \pm 0,010$ | $0,504 \pm 0,008$ | $0,529 \pm 0,009$ | $0,553 \pm 0,012$ |

схема побудови ефективних спінових блоків Каданова [17]. Вона полягає в такому. Розглядається проста кубічна ґратка в моделі Ізінга (2.13), де c – стала ґратки. Вихідна ґратка розбивається на блоки з лінійними розмірами $s \cdot c$, де s – довільне число ($s > 1$). Тоді замість N -вихідних вузлів із періодом c отримуємо N_1 вузлів ($N_1 = Ns^{-d}$) з періодом c_1 ($c_1 = c \cdot s$), кожен з яких містить s^d спінів. Якщо система знаходиться поблизу ТФП, то кореляційна довжина такої системи ξ є великою і $\xi \gg s \cdot c$. Кожен ефективний спін поводитиме себе подібно до початкового спіну (буде орієнтований “вгору” або “вниз”). Така поведінка буде спостерігатися лише за умови $sc \ll \xi$, тобто поблизу ТФП. Тоді гамільтоніан системи ефективних спінів не змінює своєї форми, а іншими в (2.13) стають лише параметри J та h . Нехай для блочної ґратки мають місце ефективні параметри \tilde{J} та \tilde{h} , чому відповідають деякі перенормовані температура $\tilde{\tau}$ та поле \tilde{h} . Якщо однакову форму мають гамільтоніани, то це ж стосується також термодинамічних функцій обох моделей. Так, для вільної енергії F маємо

$$F_s(\tilde{\tau}, \tilde{h}) = s^d F(\tau, h). \quad (2.16)$$

У лівій частині рівності маємо вільну енергію блочної ґратки $F_s(\tilde{\tau}, \tilde{h})$. Величина $F(\tau, h)$ описує вільну енергію початкової ґратки. Величини $\tilde{\tau}$ та \tilde{h} пов’язані з τ та h співвідношеннями

$$\tilde{\tau} = s^{y_\tau} \tau, \quad \tilde{h} = s^{y_h} h, \quad (2.17)$$

де y_τ та y_h – довільні числа, які пов’язані з критичними показниками

$$y_t = \frac{1}{\nu}, \quad y_h = \frac{1}{\mu}. \quad (2.18)$$

Тут ν – критичний показник кореляційної довжини при відсутності поля

$$\xi = \xi^\pm |\tau|^{-\nu}, \quad (2.19)$$

а μ – критичний показник цієї ж величини при $T = T_c$:

$$\xi = \xi^{(c)} h^{-\mu}. \quad (2.20)$$

Відомо, що $\mu = \nu/\beta\delta$, де β та δ – критичні показники (температурний та польовий) параметра порядку M . При $\mathcal{H} = 0$ та $T < T_c$ маємо співвідношення

$$M = B(-\tau)^\beta, \quad (2.21)$$

яке визначає температурну поведінку параметра порядку, а у випадку $T = T_c$ маємо критичний показник δ :

$$M = B^{(c)} h^{1/\delta}, \quad (2.22)$$

який характеризує польову залежність параметра порядку при температурі $T = T_c$. Величини B та $B^{(c)}$ носять назву критичних амплітуд. Наведені вище вирази дозволяють записати скейлінгову форму запису сингулярної частини вільної енергії поблизу ТФП у вигляді

$$F(\tau, h) = s^{-d} F_s(s^{y_t} \tau, s^{y_h} h). \quad (2.23)$$

Параметр теорії s є довільним, однак не може перевищувати кореляційної довжини системи. Тому, поблизу ТФП, як правило, розглядається два характерних значення величини s . Перше з них передбачає виконання умови $|s^{y_t} \tau| = 1$, що еквівалентне до значення параметра $s = s_\tau$:

$$s_\tau = |\tau|^{-1/y_t} = |\tau|^{-\nu}. \quad (2.24)$$

У цьому випадку рівність (2.23) набуває вигляду

$$F(\tau, h) = |\tau|^{d\nu} f_s \left(1, \frac{h}{|\tau|^{1/\beta\delta}} \right). \quad (2.25)$$

Перший множник описує поведінку вільної енергії системи у випадку малих значень поля, вірніше при малих значеннях величини:

$$\alpha_0 = \frac{h}{|\tau|^{1/\beta\delta}}. \quad (2.26)$$

Другий множник f_s носить назву скейлінгової функції вільної енергії. Він залежить лише від відношення приведенного магнітного поля h до температурного поля:

$$h'_c = |\tau|^{1/\beta\delta}. \quad (2.27)$$

Прямі залежності від τ чи h функція f_s не має. Друге характерне значення параметра s пов'язане із умовою $s^{y_h} h = 1$. Це відповідає значенню $s = s_h$, де

$$s_h = h^{-\frac{1}{y_h}} = h^{-\mu}. \quad (2.28)$$

При такому виборі параметра s для вільної енергії (2.23) отримуємо вираз

$$F(\tau, h) = h^{\frac{dy}{\beta\delta}} f_s \left(\frac{\tau}{h^{1/\beta\delta}}, 1 \right). \quad (2.29)$$

Очевидно, що таке представлення справедливе для великих значень поля, точніше для малих значень аргументу:

$$z = \frac{\tau}{h^{1/\beta\delta}}. \quad (2.30)$$

Легко зауважити, що величини z та α_0 є взаємнооберненими $z = \alpha_0^{-1/\delta\beta}$.

Представлення вільної енергії (2.25) та (2.29) є базовими в скейлінговій теорії. Залежно від співвідношення між величинами τ та h використовується одне або інше. Зокрема, у випадку відсутності зовнішнього поля має місце залежність (2.25). За наявності поля ($h \neq 0$) по мірі наближення до T_c представлення (2.29) є більш перспективним, оскільки будь-яке мале поле при наближенні T до T_c стає суттєвим (величина z прямує до нуля).

Тут описано загальноживані значення параметра s , які, однак, є дещо специфічними. Як легко бачити із (2.24) та (2.28), кожне з них пропорційне до кореляційної довжини системи. Перше s_τ відповідає випадку $h = 0$, хоча система формально перебуває в зовнішньому полі. Про це свідчить наявність в (2.25) величини α_0 . Друге значення s_h також пропорційне до кореляційної довжини при $T = T_c$, хоча знову ж таки система розглядається як функція τ ($z \neq 0$). Як буде показано нижче, величина s_τ перевищує кореляційну довжину системи за умови $h \neq 0$. Величина s_h є також більшою за кореляційну довжину, якщо $\tau \neq 0$. Тому вибір параметра s із умов (2.24) та (2.28) є, взагалі-то, проблематичним.

Актуальною у зв'язку з цим стає задача розрахунку більш загального виразу для статистичної суми (вільної енергії), де би залежності (2.25) та (2.29) об'єднувалися і не передбачали б порушення умов $s_\tau > \xi$ та $s_h > \xi$, як це було розглянуто вище. Як легко переконатися із (2.23), не існує такого значення s , яке б дозволило записати вирази (2.25) та (2.29) сумісно. Вони отримані для діаметрально протилежних граничних випадків. Виявляється, що використовуючи

певні спрощення в розрахунках, можна знайти явний вигляд для вільної енергії 3D ізінгоподібної моделі за наявності поля, який справедливий при довільних значеннях поля. Він є певною комбінацією виразів (2.25) та (2.29) і отримується на мікроскопічному рівні строгості. Одним із наслідків такого підходу є можливість отримання явного вигляду скейлінгової функції f_s .

Ще одним досягненням скейлінгової теорії є розрахунок рівняння стану. На сьогодні відомо декілька представлень такого рівняння для 3D ізінгоподібних систем [78–80]. Найпростіше з них має вигляд

$$H = D_c M^\delta. \quad (2.31)$$

Воно відповідає виразу (2.22) та описує випадок $T = T_c$. Критичні амплітуди $B^{(c)}$ та D_c пов'язані між собою простим співвідношенням $D_c = (B^{(c)})^{-\delta}$. Для випадку $T \neq T_c$ рівняння стану (2.31) має бути змінено. Узагальненням займалися три групи дослідників [7]. Серед них Відом [81], Домб та Хантер [82], Паташинський та Покровський [18]. Результати досліджень були узагальнені в роботі [83] як рівняння стану феромагнетика:

$$H = M^\delta f(x), \quad (2.32)$$

де $f(x)$ – деяка аналітична функція аргументу

$$x = \tau M^{-1/\beta}. \quad (2.33)$$

Для скейлінгової функції $f(x)$ мають місце стандартні граничні умови:

$$f(0) = 1, \quad f(-1) = 0. \quad (2.34)$$

Перша з них відповідає випадку $T = T_c$ та приводить до залежності (2.22), друга описує випадок $H = 0$ та трансформує рівняння (2.32) в залежність (2.21) внаслідок умови $x = -1$. Зауважимо, що рівняння стану (2.32) є, по суті, нелінійним рівнянням для величини M , яке містить невідому функцію $f(x)$. Така форма рівняння стану відповідає феноменологічному підходу, оскільки містить намагніченість M як незалежну змінну. З мікроскопічної точки зору величина M є функцією температури та поля. У зв'язку з цим більш коректно записувати рівняння стану у вигляді

$$M = h^{1/\delta} f_G(z), \quad (2.35)$$

де використовуються такі позначення [80]:

$$\bar{h} = \mathcal{H}/H_0, \quad \bar{\tau} = \tau \frac{T_c}{T_0}, \quad z = \frac{\bar{\tau}}{\bar{h}^{1/\beta\delta}}. \quad (2.36)$$

Тут $H_0 = D_c$, $T_0 = B^{-1/\beta} T_c$, $f_G(z)$ – деяка скейлінгова функція, яка не залежить від намагніченості системи. Аргумент цієї функції z залежить від співвідношення між відносною температурою τ та значенням зовнішнього поля. Величини H_0 та T_0 є деякими сталими нормування.

Умови нормування скейлінгової функції $f(x)$ із (2.32) можна переписати для функції $f_G(x)$. Вони мають вигляд

$$f_G(0) = 1 \quad (2.37)$$

для випадку $T = T_c$, та

$$\lim_{z \rightarrow -\infty} f_G(z) = (-z)^\beta \quad (2.38)$$

для випадку $h \rightarrow 0$, якщо $T < T_c$. Вигляд самої скейлінгової функції обчислюється за допомогою як теоретичних, так і числових методів. Серед теоретичних методів вивчення рівняння стану слід відзначити метод ϵ -розкладу [57], використання теоретико-польових підходів [79, 84]. Слід згадати так звану параметричну форму запису рівняння стану. Така форма відома ще з роботи [85]. Дослідження останніх років [84] показали добре узгодження цього рівняння з даними числових розрахунків [80]. Згадані вище методи ґрунтуються на використанні рівняння (2.32) чи (2.35) як найбільш загальної форми запису цього рівняння. Основне завдання цих розрахунків полягає у вивченні поведінки тієї чи іншої скейлінгової функції.

Актуальним залишається прямий спосіб розрахунку рівняння стану. Результатом такого підходу передбачається отримання загального вигляду скейлінгової функції $f_G(z)$, а не її розкладів за прямими чи оберненими степенями аргументу z . Крім того, прямий метод розрахунку приводить (як це показано нижче) до більш загального вигляду рівняння стану, ніж (2.35). Останнє є лише граничним випадком загального рівняння, що відповідає великим значенням поля.

3. Метод розрахунку статистичної суми $3D$ ізінгоподібної моделі поблизу ТФП за наявності поля

На даний час існує декілька підходів до опису критичної поведінки систем. Серед них аналітичні методи, що приводять до класичних значень критичних показників. Такі методи не описують фізичних величин поблизу точки фазового переходу, оскільки в той чи інший спосіб не враховують флуктуаційних ефектів. Переваги цих методів полягають у тому, що

вони дозволяють проводити розрахунки, починаючи із гамільтоніана системи, зокрема, використовуючи (2.13). В результаті отримуємо інформацію про поведінку системи з певним розміщенням частинок та визначеними взаємодіями між ними. В теоретико-польовому підході, де вдається отримати правильні значення критичних показників, вихідним є гамільтоніан Гінзбурга–Ландау (2.14). Його зв'язок із (2.13) характеризується коефіцієнтами m та g . Для розрахунку значень критичних показників абсолютно неважливо, яких початкових значень набувають величини m та g . Щоб вираз (2.14) описував фазовий перехід, достатньо припустити, що $m \sim \tau$. При більш детальному розгляді виявляється, що вирази (2.13) та (2.14) пов'язані між собою цілком конкретними співвідношеннями. Міркування стосовно цього можна знайти в [5, 49]. Подібний перехід пов'язаний із розрахунком якобіана переходу від спінових змінних s_i до польових (колективних) змінних $\varphi(x)$. Вперше розрахунок такого якобіана з використанням строгого математичного підходу виконано І.Р. Юхновським та учнями [19, 20]. Як було показано в цих роботах, розподіл флуктуацій параметра порядку зображається у вигляді полінома за колективними змінними (КЗ) $\rho_{\mathbf{k}}$ в показнику експоненти з цілком визначеними значеннями коефіцієнтів. Ідея цього підходу була використана згодом для опису фазового переходу в бінарних розчинах [86, 87], при побудові квантово-статистичної теорії неупорядкованих систем [88], для опису фазового переходу в сегнетоелектричних сполуках [89].

Використовуючи результати робіт [29–32], запишемо функціональне представлення моделі Ізінга в зовнішньому полі h :

$$Z = Z_0 \int (d\eta)^{N_0} \exp \left[a_1 \sqrt{N_0} \eta_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in B_0} d(\mathbf{k}) \eta_{\mathbf{k}} \eta_{-\mathbf{k}} - \frac{a_4}{4!} N_0^{-1} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_i \in B_0}} \eta_{\mathbf{k}_1} \dots \eta_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right]. \quad (3.1)$$

Тут використано наближення моделі η^4 , хоча це не принципово. Узагальнення на випадок вищих моделей η^{2m} можна виконати подібно до [28]. Інтегрування в (3.1) відбувається за N_0 колективними змінними (КЗ) ($N_0 = N s_0^{-d}$, N – число частинок, s_0 – параметр моделі ($s_0 > 1$) [29, 33]) $\eta_{\mathbf{k}} = \eta_{\mathbf{k}}^c - i\eta_{\mathbf{k}}^s$, дійсна та уявна частини яких набувають значень із області дійсних чисел [5]. Тут змінні $\eta_{\mathbf{k}}$ пов'язані з модами

коливань спінового моменту та містять змінну η_0 , середнє значення якої безпосередньо пов'язане з намагніченістю в моделі Ізінга [5]. Завдяки цьому фазовий простір КЗ є природним для опису фазового переходу. Надалі під флуктуаціями параметра порядку будемо розуміти розподіл за змінними інтегрування в (3.1). Зауважимо, що опис подій поблизу точки фазового переходу другого роду передбачає використання негаусового розподілу флуктуацій. На відміну від часто вживаного гаусового розподілу негаусовий розподіл дозволяє уникнути розбіжних внесків суто математичного характеру до фізичних величин. Природа цієї розбіжності пов'язана із прямуванням до безмежності дисперсії гаусового розподілу при наближенні до точки фазового переходу [8]. Елемент об'єму фазового простору КЗ має вигляд

$$(d\eta)^{N_0} = d\eta_0 \prod_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_0} d\eta_{\mathbf{k}}^c d\eta_{\mathbf{k}}^s,$$

де штрих біля знака добутку означає, що $k > 0$. Величина $d(k)$ включає фур'є-образ $\Phi(k)$ деякого короткосяжного потенціалу взаємодії [32, 33]:

$$d(k) = \tilde{a}_2 - \beta\Phi(k), \quad (3.2)$$

тут β – обернена температура, $\tilde{a} = a_2 + \beta\Phi(0)\bar{\Phi}$, а $\bar{\Phi}$ – параметр потенціалу взаємодії [8, 28]. Для коефіцієнтів a_n в [29, 41] отримано вирази

$$\begin{aligned} a_1 &= s_0^{d/2} h, \\ a_2 &= 1 - \epsilon' + \frac{2}{3}\epsilon'^2, \\ a_4 &= 2\epsilon'(1 - 3\epsilon'), \end{aligned} \quad (3.3)$$

де $h = \beta\mathcal{H}$, $\epsilon' = s_0^{-d}$. Розглядається випадок $d = 3$. Величина ϵ' використовується як малий параметр, оскільки параметр s_0 набуває великих значень ($s_0 \geq 2$). Зауважимо, що опис фазового переходу суттєво залежить від вимірності простору. Так, при $d \geq 4$ у ролі базового можна використовувати гаусовий розподіл флуктуацій. При $d = 3$ базовим є четвертий розподіл типу (3.1). Для вимірності простору $d = 2$ не існує базового розподілу флуктуацій типу (3.1) навіть при включенні доданків пропорційних вищим степеням змінної $\eta_{\mathbf{k}}$ [5]. Лише використання безмежного поліноміального ряду за степенями змінної $\eta_{\mathbf{k}}$ відповідає коректному базисному розподілу. Це означає [5], що у випадку $d = 2$ задача повинна мати точний

розв'язок. Такий розв'язок для моделі Ізінга за відсутності зовнішнього поля знайдено Онзагером.

Для фур'є-образу потенціалу взаємодії $\Phi(k)$ використовується така апроксимація:

$$\Phi(k) = \begin{cases} \Phi(0)(1 - 2b^2k^2), & \mathbf{k} \in \mathcal{B}_0, \\ \Phi_0 = \Phi(0)\bar{\Phi}, & \mathbf{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0, \end{cases} \quad (3.4)$$

де стала величина $\bar{\Phi} \leq 1$. Діапазон значень хвильового вектора $\mathbf{k} \in \mathcal{B}$ визначає першу зону Бріллюена простої кубічної ґратки з періодом c :

$$\begin{aligned} \mathcal{B} &= \left\{ \mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) \mid k_i = -\frac{\pi}{c} + \frac{\pi}{c} \frac{n_i}{N_i}, \right. \\ &\left. n_i = 1, 2, \dots, 2N_i, \quad i = x, y, z \right\}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

де $N = N_x N_y N_z$ – загальне число вузлів ґратки, а область значень

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_0 &= \left\{ \mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) \mid k_i = -\frac{\pi}{c_0} + \frac{\pi}{c_0} \frac{n_i}{N_{0i}}, \right. \\ &\left. n_i = 1, 2, \dots, 2N_{0i}, \quad i = x, y, z \right\}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

де $N_0 = N_{0x} N_{0y} N_{0z}$ – відповідає першій зоні Бріллюена для такої ж ґратки з періодом $c_0 = cs_0$. Параметр s_0 вибирається з умови, яка забезпечує параболічну апроксимацію фур'є-образу деякого короткосяжного потенціалу $\Phi_G(k)$ в області значень $\mathbf{k} \in \mathcal{B}_0$ типу $\Phi(0)(1 - \text{const } k^2)$. Так, для експонентно-спадного потенціалу $\Phi(r) = A \exp(-r/b)$ маємо такий фур'є-образ:

$$\Phi_G(k) = \Phi(0)(1 + b^2k^2)^{-2}, \quad (3.7)$$

де $\Phi(0) = A8\pi(b/c)^3$. При достатньо малих значеннях $\mathbf{k} \in \mathcal{B}_0$ вираз (3.7) досить добре описується параболічною апроксимацією. Подібна ситуація спостерігається для потенціалу взаємодії найближчих сусідів, який традиційно використовується під час опису фазових переходів. Зрозуміло, що для цього потенціалу $s_0 > 2$.

Основний внесок у фізичні характеристики системи поблизу точки фазового переходу здійснюється за рахунок врахування довгохвильових флуктуацій параметра порядку. Тому врахування явної залежності від хвильового вектора особливо важливе для діапазону $\mathbf{k} \in \mathcal{B}_0$. Що стосується великих значень хвильових векторів $\mathbf{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0$, то для опису критичної поведінки системи тут достатньо обмежитись для $\Phi(k)$ деяким постійним значенням Φ_0 .

Умовою застосовності параболічної апроксимації для (3.7) є співвідношення

$$\Phi(B_0) = \Phi(0)(1 - 2b^2 B_0^2) \geq \alpha' \Phi(0), \quad (3.8)$$

де $B_0 = B/s_0$ (тут $B = \pi/c$ – границя півзони Бріллюена \mathcal{B} , а параметр α' змінюється в інтервалі $0 \leq \alpha' \leq \bar{\Phi}$). Для величини $\bar{\Phi}$ маємо

$$\bar{\Phi} = \langle \Phi_G(k) \rangle + \Phi_\infty, \quad (3.9)$$

де $\langle \Phi_G(k) \rangle$ – середнє значення (3.7) для $\mathbf{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0$, а стала Φ_∞ визначає асимптотику температури фазового переходу в границі $b/c \rightarrow \infty$. Величина Z_0 із (3.1) має вигляд [29]:

$$Z_0 = 2^N (chh)^N \exp\left(\frac{1}{2} N \beta \Phi(0) \bar{\Phi}\right). \quad (3.10)$$

Розрахунок (3.1) здійснюватимемо, використовуючи ідею конструювання блочних ґраток [17], відповідно до гіпотези Каданова [90]. Першу реалізацію цієї гіпотези на мікроскопічному рівні було здійснено в роботах К. Вільсона [49, 91]. Шляхом послідовного виключення з розгляду змінних $\eta_{\mathbf{k}}$ із великими значеннями хвильових векторів (так звана процедура згладжування) йому вдалося в такий спосіб побудувати послідовність ефективних блочних ґраток та встановити закон їхньої еволюції. Основною ланкою проведених розрахунків стали рекурентні співвідношення (РС) між коефіцієнтами розподілів флуктуацій параметра порядку двох суміжних блочних структур. Поряд із безсумнівним успіхом підходу Вільсона він мав суттєвий недолік. Виконання процедури згладжування здійснювалося з використанням гаусового розподілу флуктуацій. У даний час достовірно встановлено [5], що такий підхід не дозволяє виконати коректний розрахунок статистичної суми тривимірної статистичної системи з реалістичним потенціалом взаємодії поблизу точки фазового переходу. Використання гаусового розподілу флуктуацій у ролі базисного дає незадовільний опис фазового переходу другого роду (вільна енергія та термодинамічні характеристики, сприйнятливість тощо), як це показано, зокрема, у роботі [8].

Реалізований у даній роботі підхід ґрунтується, на відміну від підходу Вільсона, на використанні негаусових базисних розподілів флуктуацій параметра порядку, як це було запропоновано в методі Юхновського [25]. Це дозволяє усунути з розгляду сингулярності математичного характеру та описати фізичні особливості поведінки системи при наближенні до точки фазового переходу $h \rightarrow 0$, $\tau \rightarrow 0$.

Виконаємо поетапний розрахунок виразу для статистичної суми (3.1). Використаємо для цього результати робіт [22, 28], де запропоновано аналітичний спосіб виключення з розгляду змінних $\eta_{\mathbf{k}}$ з великими значеннями хвильових векторів. На першому етапі інтегрування виключається множина змінних $\eta_{\mathbf{k}}$ із $\mathbf{k} \in \mathcal{B}_0 \setminus \mathcal{B}_1$, де

$$\mathcal{B}_1 = \left\{ \mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) \mid k_i = -\frac{\pi}{c_1} + \frac{\pi}{c_1} \frac{n_i}{N_{1i}}, \right. \\ \left. n_i = 1, 2, \dots, 2N_{1i}, \quad i = x, y, z \right\}. \quad (3.11)$$

Тут $c_1 = c_0 s$, де параметр $s (s > 1)$ визначає період ефективної блочної ґратки з періодом $c_1 > c_0$, $N_1 = N_{1x} N_{1y} N_{1z}$ – число вузлів цієї ґратки, $N_1 = N_0 s^{-d}$. Зауважимо, що значення параметра s відрізняється від s_0 тим, що він може набувати довільних значень, більших від одиниці. На відміну від s параметр s_0 є фіксованим для кожної конкретної фізичної системи і визначається виглядом фур'є-образу потенціалу взаємодії.

Подальший опис процедури виключення з розгляду “несуттєвих” змінних $\eta_{\mathbf{k}}$ здійснюється схематично, оскільки це детально описано в [5]. Основну увагу звернуто на модифікацію підходу [8], пов'язану із відмінністю від нуля величини $\bar{\Phi}$ із (3.4).

Загальна методика інтегрування за $\eta_{\mathbf{k}}$ із $\mathbf{k} \in \mathcal{B}_0 \setminus \mathcal{B}_1$ передбачає заміну величини $\Phi(k)$ із (3.4) деяким середнім значенням $\Phi(B_1, B)$. При цьому для величини $d(k)$ із (3.2) маємо

$$\langle d(k) \rangle_{\mathcal{B}_0 \setminus \mathcal{B}_1} = a_2 - \beta \Phi(0)(1 - \bar{\Phi}) + 2\beta \Phi(0) b^2 \langle k^2 \rangle. \quad (3.12)$$

Для простоти подальшого розгляду визначимо $\langle k^2 \rangle$ як середнє арифметичне значення k^2 в діапазоні хвильових векторів $\mathbf{k} \in \mathcal{B}_0 \setminus \mathcal{B}_1$. Маємо

$$\langle k^2 \rangle = \frac{\pi^2}{c^2} s_0^{-2} \frac{1}{2} (1 + s^{-2}).$$

Тоді

$$d(B_1, B_0) = \tilde{d}(0) + q, \quad (3.13)$$

де

$$\tilde{d}(0) = \tilde{a}_2 - \beta \Phi(0), \quad \tilde{a}_2 = a_2 + \beta \Phi(0) \bar{\Phi},$$

$$q = \beta \Phi(0) \bar{q}, \quad \bar{q} = \frac{1}{2} (1 + s^{-2}) (1 - \alpha'). \quad (3.14)$$

Величина α' із (3.8) є додатною сталою. При виконанні числових оцінок виберемо α' таким, щоб виконувалася рівність

$$\bar{q} = 0, 5. \quad (3.15)$$

Для виконання (3.15) необхідно, щоб $\alpha' = s^{-2}/(1 + s^{-2})$. Відповідно до виконаного вище усереднення (3.12) коефіцієнт $d(k)$ має вигляд

$$d(k) = \begin{cases} d(k), & \mathbf{k} \in \mathcal{B}_1, \\ d(B_1, B_0), & \mathbf{k} \in \mathcal{B}_0 \setminus \mathcal{B}_1. \end{cases} \quad (3.16)$$

Наближення (3.16) має позитивні та негативні наслідки. З одного боку воно дозволяє виконати в (3.1) інтегрування за змінними η_k із $\mathbf{k} \in \mathcal{B}_0 \setminus \mathcal{B}_1$, не використовуючи розкладу в ряд доданка, пропорційного до четвертого степеня η_k , як це виконується в методі ϵ -розкладу та теоретико-польових підходах, а залишаючи його в показнику експоненти. Це дозволяє уникнути появи нефізичних розбіжностей, які наявні у випадку використання теорії збурень за гаусовим розподілом, оскільки в ТФП коефіцієнт біля другого степеня змінної η_k обертається на нуль, а при $T < T_c$ стає від'ємним, що і є причиною виникнення таких розбіжностей.

З іншого боку, наближення (3.16) приводить до обертання на нуль критичного показника кореляційної функції. Така ж ситуація спостерігається в методі пертурбативної ренормгрупи при використанні наближення локального потенціалу [67]. Щоб отримати в межах даного підходу значення $\eta \neq 0$, необхідно врахувати поправки на усереднення потенціалу. Така методика описана в роботах [5, 8]. Надалі обмежимося випадком $\eta = 0$, оскільки основна увага в даних дослідженнях приділяється вивченню принципів моментів схеми опису поведінки магнетика в зовнішньому полі поблизу ТФП.

Результатом поетапного розрахунку статистичної суми (3.1) для послідовності n_p ефективних блочних структур є вираз

$$Z = Z_0 [Q(d)]^{N_0} \left(\prod_{n=1}^{n_p} Q_n \right) Z_{LGR}, \quad (3.17)$$

де відповідно до [8] маємо

$$Q(d) = (2\pi)^{1/2} (3/a_4)^{1/4} \exp\left(\frac{x^2}{4}\right) U(0, x). \quad (3.18)$$

Аргумент x функції параболічного циліндра Вебера $U(0, x)$ має вигляд

$$x = d(B_1, B_0) (3/a_4)^{1/2}, \quad (3.19)$$

а для самих функцій має місце інтегральне представлення

$$U(a, x) = \frac{2}{\Gamma(a + \frac{1}{2})} \exp\left(-\frac{x^2}{4}\right) \int_0^\infty t^{2a} \times \\ \times \exp\left(-xt^2 - \frac{1}{2}t^4\right) dt. \quad (3.20)$$

Величини Q_n являють собою парціальні статистичні суми n -го рівня:

$$Q_n = [Q(P_{n-1})Q(d_n)]^{N_n}, \quad (3.21)$$

де $N_n = N_0 s^{-3n}$, s – параметр поділу простору КЗ на підпростори ($s \geq 1$),

$$Q(d_n) = (2\pi)^{1/2} \left(3/a_4^{(n)}\right)^{1/4} \exp\left(\frac{x_n^2}{4}\right) U(0, x_n),$$

$$Q(P_n) = (2\pi)^{-1/2} \left(\frac{a_4^{(n)}}{\varphi(x_n)}\right)^{1/4} s^{3/4} \times \\ \times \exp\left(\frac{y_n^2}{4}\right) U(0, y_n). \quad (3.22)$$

Для аргументів x_n та y_n маємо вирази

$$x_n = d_n(B_{n+1}, B_n) \left(\frac{3}{a_4^{(n)}}\right)^{1/2}, \\ y_n = s^{3/2} U(x_n) \left(\frac{3}{\varphi(x_n)}\right)^{1/2}, \quad (3.23)$$

де

$$d_n(B_{n+1}, B_n) = a_2^{(n)} - \beta \Phi(B_{n+1}, B_n). \quad (3.24)$$

Величина $\Phi(B_{n+1}, B_n)$ є середнім значенням фур'є-образу потенціалу (3.4) для значень $\mathbf{k} \in \mathcal{B}_n \setminus \mathcal{B}_{n+1}$. Тут

$$\mathcal{B}_n = \left\{ \mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) \mid k_i = -\frac{\pi}{c_n} + \frac{2\pi}{c_n} \frac{n_i}{N_{ni}}, \right. \\ \left. n_i = 1, 2, \dots, N_{ni}, \quad i = x, y, z \right\}, \quad (3.25)$$

де $c_n = c_0 s^n$, $N_n = N_{nx} N_{ny} N_{nz}$ – число вузлів n -ої ефективної блочної структури, причому $N_n = N_0 s^{-3n}$. Для спеціальних функцій $U(t)$ та $\varphi(t)$ маємо

$$U(t) = U(1, t)/U(0, t),$$

$$\varphi(t) = 3U^2(t) + 2tU(t) - 2. \quad (3.26)$$

Для величин $d_n(B_{n+1}, B_n)$ та $a_4^{(n)}$ спостерігаються рекурентні співвідношення (РС). Їхній явний вигляд отримано в роботі [29]. Якщо ввести позначення

$$d_n(B_{n+1}, B_n) = d_n(0) + qs^{-2n}, \quad q = \beta\Phi(0)\bar{q},$$

$$a_1^{(n)} = s^{-n}w_n, \quad d_n(0) = s^{-2n}r_n, \quad a_4^{(n)} = s^{-4n}u_n,$$

тоді отримуємо РС:

$$w_{n+1} = s^{\frac{d+2}{2}} w_n,$$

$$r_{n+1} = s^2 [-q + (r_n + q)N(x_n)],$$

$$u_{n+1} = su_n E(x_n), \quad (3.27)$$

де

$$N(x_n) = \frac{y_n U(y_n)}{x_n U(x_n)}, \quad E(x_n) = s^{2d} \frac{\varphi(y_n)}{\varphi(x_n)}.$$

Для початкових значень величин w_n , r_n та u_n (при $n = 0$) маємо

$$w_0 = s_0^{d/2} h, \quad r_0 = a_2 - \beta\Phi(0)(1 - \bar{\Phi}), \quad u_0 = a_4, \quad (3.28)$$

де значення величин a_2, a_4 наведено в (3.3).

Рекурентні співвідношення (3.27) відрізняються від РС, отриманих в роботах [5, 8], наявністю додаткового рівняння для величини w_n , що відображає факт наявності зовнішнього поля.

У виразі (3.17) залишилась невизначеною величина Z_{LGR} . Вона має вигляд

$$Z_{LGR} = 2^{(N_{n_p}-1)/2} Q(P_{n_p})^{N_{n_p}+1} Z_{n_p+1}, \quad (3.29)$$

де

$$Z_{n_p+1} = \int (d\eta)^{N_{n_p}+1} \times \exp \left(a_1^{(n_p+1)} N_{n_p+1}^{1/2} \eta_0 - \frac{1}{2} \sum_{k \in B_{n_p+1}} d_{n_p+1}(k) \eta_k \eta_{-k} - \frac{a_4^{(n_p+1)}}{4!} N_{n_p+1}^{-1} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \in B_{n_p+1}}} \eta_{k_1} \dots \eta_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} \right). \quad (3.30)$$

Номер n_p характеризує ефективну блочну структуру спінів із періодом ґратки c_{n_p} , де

$$c_{n_p} = c_0 s^{n_p}. \quad (3.31)$$

Представлення статистичної суми у вигляді (3.17) пов'язане із наявністю поблизу ТФП нового масштабу відстані. Якщо далеко від цієї точки характерною відстанню є стала ґратки c , то поблизу неї таку роль відіграє кореляційна довжина $\xi = c_{n_p}$, для якої при $h = 0$ маємо рівність (2.19).

Якщо величина періоду c_n ефективної блочної ґратки менша за c_{n_p} , то в системі наявна ренормгрупова симетрія [8], і для всіх $n < n_p$ загальні РС (3.27) можуть бути замінені наближеними РС, які відповідають їхній лінеаризації поблизу нерухомої точки. Процедура лінеаризації описано в роботі [29]. У випадку, коли $c_n > c_{n_p}$, ренормгрупова симетрія порушується, і при розрахунку внеску до вільної енергії системи слід використовувати загальні, а не лінеаризовані поблизу фіксованої точки рекурентні співвідношення.

Зауважимо, що виконані нижче розрахунки стосуються діапазону температур $|\tau| < \tau^*$, де $\tau^* \sim 10^{-2}$. Якихось обмежень на величину поля h накладати не будемо.

4. Визначення точки виходу із критичного режиму флуктуацій параметра порядку за наявності поля

Важливою характеристикою при описі фазових переходів є величина n_p , яка визначає число ітерацій, за яких система ефективних блочних спінів залишається в скейлінговій області. Під час проведення розрахунків параметр ренормгрупи s може набувати довільних значень. У цьому випадку проведення двох ітерацій із цим параметром (які відповідають укрупненню початкової ґратки з періодом c_0) еквівалентні одній ітерації з параметром ренормгрупи s^2 . Така операція може бути повторена n_p разів. У зв'язку з цим вибір характерних значень параметра s у вигляді (2.24) або (2.28) вважається справедливим для довільного значення s . Слід, однак, пам'ятати, що величина c_{n_p} із (3.31) не може перевищувати кореляційної довжини системи. Тому на величину n_p необхідно накласти обмеження. З точки зору мікроскопічного підходу слід знайти залежність величини n_p від температури і поля та використати отриманий вираз для розрахунку виразу (3.17).

Зауважимо, що в принципі, результат обчислення (3.17) не залежить від вибору значення n_p . Фактично величина n_p розділяє статистичну суму на дві

частини. Перша з них враховує внески від КЗ $\eta_{\mathbf{k}}$ із $\mathbf{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_{n_p+1}$. Друга частина відповідає внескам від КЗ $\eta_{\mathbf{k}}$ із $\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{n_p+1}$, включаючи внески від “макроскопічної” змінної η_0 . Зменшення чи збільшення величини n_p приводить лише до перенесення внесків із однієї частини статистичної суми до іншої, що в принципі, не повинно впливати на загальний результат розрахунку. Метою введення величини n_p є оптимізація математичних розрахунків поблизу ТФП, оскільки під час їхнього виконання будуть здійснюватися певні наближення. Якщо би розрахунки проводилися точно, то вибір величини n_p був би довільним. Однак, вже лінеаризація загальних РС (3.27) поблизу фіксованої точки передбачає певні обмеження на величину n_p .

Як було показано в роботі [8] для випадку $h = 0$, внески до першої частини статистичної суми (3.17) (ділянка критичного режиму флуктуацій параметра порядку) відповідають за формування критичних показників. Тут мають місце негаусові розподіли флуктуацій параметра порядку. Для внесків другого типу (змінні $\eta_{\mathbf{k}}$ із $\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{n_p+1}$) характерні гаусові розподіли флуктуацій. Саме такого типу розподіли спостерігаються для всіх $\eta_{\mathbf{k}}$ при віддаленні системи від ТФП ($\tau > \tau^*, h > h^*$), оскільки в цьому випадку кореляційна довжина стає порядку сталої ґратки.

Таким чином, умова на знаходження величини n_p збігається з умовою застосовності лінеаризованої форми рекурентних співвідношень по відношенню до їх загального вигляду (3.27). Для всіх $n \leq n_p$ співвідношення (3.27) можуть бути замінені лінеаризованою формою поблизу фіксованої точки. При $n > n_p$ відбувається зміна форми розподілу флуктуацій з негаусового на гаусовий. Флуктуації параметра порядку стають незалежними, і подальше інтегрування за змінними $\eta_{\mathbf{k}}$ із $\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{n_p+1}$ не приводить до перенормування ефективних взаємодій.

Величина n_p визначає період деякої особливої ефективної блочної ґратки (3.25), період якої розділяє флуктуаційні процеси на короткохвильові та довгохвильові. Для всіх ефективних блочних ґраток (при заданих τ та h) із періодом, меншим за c_{n_p} , має місце перенормування ефективних взаємодій. Коли $c_n > c_{n_p}$, то таке перенормування припиняється. Це дозволяє ототожнити величину c_{n_p} із кореляційною довжиною системи при заданих τ та h .

Дослідимо властивості РС (3.27). Їхня фіксована точка знайдена в загальному випадку в роботі [8]. Зокрема, було показано, що величина y_n із (3.23) набуває великих значень. Беручи це до уваги, співвідношення (3.27) можна записати в спрощеному вигляді

ді [42]:

$$w_{n+1} = s^{\frac{d+2}{2}} w_n,$$

$$r_{n+1} = s^2 \left[-q + \frac{\sqrt{u_n}}{\sqrt{3}} \frac{1}{U(x_n)} - \frac{1}{2s^3} \frac{\sqrt{u_n}}{\sqrt{3}} \frac{\varphi(x_n)}{U^3(x_n)} \right],$$

$$u_{n+1} = s u_n \frac{\varphi(x_n)}{3U^4(x_n)} \left[1 - \frac{7}{2} s^{-3} \frac{\varphi(x_n)}{U^2(x_n)} \right]. \quad (4.1)$$

Використання РС у формі (4.1) є особливо зручним, коли аргумент

$$x_n = \sqrt{3}(r_n + q)/\sqrt{u_n} \quad (4.2)$$

набуває малих значень поблизу нерухомої точки (w^*, r^*, u^*) .

В загальному випадку величина аргументу в фіксованій точці x^* залежить від параметра ренормгрупи s . Як показано в роботі [42] при $s = s^*$ ($s^* = 3,5977$), величина $x^* = 0$. При цьому координати нерухомої точки є такими:

$$w^* = 0, \quad r^* = -f_0 \beta \Phi(0), \quad u^* = \varphi_0 (\beta \Phi(0))^2, \quad (4.3)$$

де

$$f_0 = \bar{q} = \frac{1}{2}, \quad \varphi_0^{1/2} = f_0 (1 - s^{-2}) \sqrt{3} U(0) \left(1 + \frac{3}{2} \frac{1}{y_0^2} \right).$$

Тут

$$y_0 = s^{3/2} y_0^{(0)}, \quad y_0^{(0)} = U(0) \left(\frac{3}{\varphi(0)} \right)^{1/2}.$$

Таким чином, вибираючи в ролі параметра РГ значення $s = s^*$ для координат фіксованої точки РС (3.27), знаходимо

$$f_0 = 0,5, \quad \varphi_0 = 0,5939. \quad (4.4)$$

Зауважимо, що сталі f_0 та φ_0 не залежать від мікроскопічних параметрів системи та присутності зовнішнього поля.

Запишемо розв'язки РС (4.1) в околі фіксованої точки (w^*, r^*, u^*) у вигляді розкладу за власними векторами матриці \mathcal{R} лінеаризованого перетворення:

$$\begin{pmatrix} w_{n+1} - w^* \\ r_{n+1} - r^* \\ u_{n+1} - u^* \end{pmatrix} = \mathcal{R} \begin{pmatrix} w_n - w^* \\ r_n - r^* \\ u_n - u^* \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Вони мають вигляд

$$w_n = s_0^{d/2} h E_1^n,$$

$$r_n = r^* + c_1 E_2^n + c_2 R E_3^n,$$

$$u_n = u^* + c_1 R_1 E_2^n + c_3 E_3^n, \quad (4.6)$$

де E_l – власні значення матриці \mathcal{R} . При $s = s^*$ отримуємо такі числові значення:

$$E_1 = s^{\frac{d+2}{2}} = 24,551, \quad E_2 = 8,308, \quad E_3 = 0,374. \quad (4.7)$$

Величини R та R_1 із (4.6) мають вигляд

$$R = R^{(0)}(u^*)^{-1/2}, \quad R_1 = R_1^{(0)}(u^*)^{1/2}.$$

Тут $R^{(0)}$ та $R_1^{(0)}$ – універсальні сталі (наведені в роботі [42]), які при $s = s^*$ набувають значення

$$R^{(0)} = -0,530, \quad R_1^{(0)} = 0,162.$$

Коефіцієнти c_1 та c_2 є функціями температури

$$c_1 = [a_2 + \beta\Phi(0)(\bar{\Phi} - 1) - r^* - R(a_4 - u^*)] \mathcal{D}^{-1},$$

$$c_2 = [a_4 - u^* - R_1(a_2 - \beta\Phi(0)(1 - \bar{\Phi})) + r^* R_1] \mathcal{D}^{-1}, \quad (4.8)$$

де $\mathcal{D} = (E_2 - E_3)/(R_{22} - E_3) = 1,086$. Присутність зовнішнього постійного поля змінює тип фіксованої точки РС (4.1). Із однократно нестійкої (при $h = 0$) вона перетворюється на двократно нестійку ($E_1 > 1$, $E_2 > 1$, $E_3 < 1$). Із ростом n кожна з величин w_n, r_n та u_n із (4.6) буде віддалятися від свого фіксованого значення. Відхилення величини w_n пов'язане із власним значенням E_1 , а відхилення величин r_n та u_n відбувається за рахунок E_2 .

Легко бачити, що існує температура $T = T_c$, при якій

$$c_1(T_c) = 0. \quad (4.9)$$

Випадок $h \neq 0$ та $T = T_c$ відповідає однократно нестійкій фіксованій точці РС (3.27). Відхилення від фіксованої точки пов'язане лише із значенням $E_1 > 1$, оскільки $c_1(T_c) E_2^n = 0$.

Єдиний випадок, коли всі три величини w_n, r_n та u_n при $n \rightarrow \infty$ прямують до своїх фіксованих значень, відповідає умові

$$h = 0; \quad T = T_c. \quad (4.10)$$

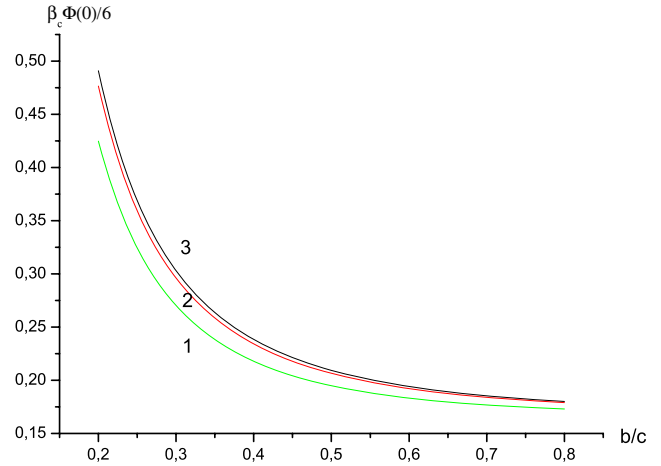


Рис. 1. Залежність оберненої температури фазового переходу (нормованої на число найближчих сусідів $z = 6$ від радіуса дії потенціалу b при різних значеннях параметра s_0 : крива 1 відповідає значенню $s_0 = 2,0$; крива 2 – $s_0 = 3,0$; крива 3 – $s_0 = 4,0$

Це і є визначення координат точки фазового переходу другого роду в запропонованому нижче підході.

Використаємо рівність (4.9) для розрахунку температури фазового переходу T_c . Беручи до уваги (4.8), отримуємо рівняння

$$Ax^2 + Bx + D = 0, \quad (4.11)$$

де $x = \beta_c \Phi(0)$, а для коефіцієнтів маємо

$$A = 1 - f_0 - R^{(0)} \varphi_0^{1/2} - \bar{\Phi},$$

$$B = -a_2, \quad D = a_4 R^{(0)} \varphi_0^{-1/2}. \quad (4.12)$$

У ролі величини $\bar{\Phi}$ використовується вираз (3.9), де стала Φ_∞ знаходиться з умови $\beta_c \Phi(0) = 1$ при $b/c \rightarrow \infty$. Останнє приводить до рівності

$$\Phi_\infty = \bar{q}(1 + R^{(0)} \varphi_0^{1/2}). \quad (4.13)$$

Як видно із (4.12), (4.13), значення температури фазового переходу залежить від параметра s_0 , який визначає фур'є-образ потенціалу взаємодії для великих значень хвильового вектора, а також від відношення b/c (b – радіус дії вихідного потенціалу взаємодії, c – стала простої кубічної ґратки). Розв'язки (4.11) як функції b/c при деяких фіксованих значеннях s_0 наведено на рис. 1.

По осі ординат наведено величину оберненої температури $J_c = \beta_c \Phi(0)/6$. Її значення перенормоване на число найближчих сусідів для простої кубічної ґратки. Легко бачити, що з ростом радіуса дії

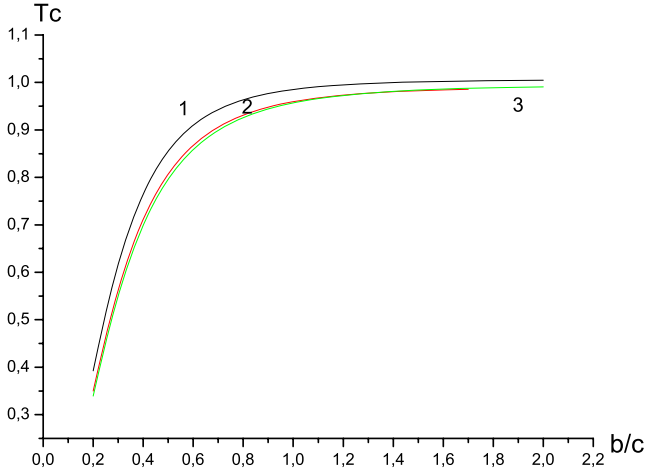


Рис. 2. Залежність температури фазового переходу T_c від радіуса дії потенціалу b : крива 1 відповідає значенню $s_0 = 2, 0$; крива 2 – $s_0 = 3, 0$; крива 3 – $s_0 = 4, 0$

потенціалу b величина J_c спадає і має слабку залежність від параметра s_0 . Числові розрахунки температури фазового переходу 3D моделі Ізінга з потенціалом взаємодії найближчих сусідів дають значення $J_c = 0, 221655 \pm 0, 00002$ [92]. Для модифікованої моделі Ізінга [78] значення J_c отримано шляхом числового розрахунку при виборі параметра $\lambda = 1, 1$ (яке мінімізує поправки до скейлінгу) набуває значення $J_c = 0, 3750966(4)$. Очевидно, що зі зміною λ значення J_c також зміниться.

На рис. 2 наведено залежність прямої температури фазового переходу T_c (в одиницях $\Phi(0)/k$, де $\Phi(0)$ – значення фур'є-образу потенціалу взаємодії при нульовому значенні хвильового вектора, а k – стала Больцмана) від радіуса дії потенціалу. Як свідчать результати розрахунку, при $b > c$ значення T_c вже не залежить від b та прямує до величини, яка збігається із даними інших теорій (молекулярне поле, гаусове наближення тощо). Однак, в області значень $b < c$ маємо суттєву залежність T_c від радіуса дії потенціалу для всіх значень $s_0 \geq 2$. Наведений вище спосіб розрахунку температури фазового переходу дозволяє встановити її залежність від радіуса дії потенціалу (параметр b/c). Крім того, значення T_c залежить від вигляду типу потенціалу взаємодії (3.4), в якому закладений параметр s_0 . Розрахунок значення T_c , а не введення зверху до гамільтоніана задачі величини τ , є важливим елементом теорії.

Обчислене вище значення температури фазового переходу T_c дозволяє записати розв'язки (4.6) як функції відносної температури $\tau = (T - T_c)/T_c$, так і

поля h . Маємо

$$w_n = s_0^{d/2} \beta h E_1^n, \quad (4.14)$$

$$r_n = \beta \Phi(0) \left[-f_0 + c_{1T} \tau E_2^n + R^{(0)} \varphi_0^{-1/2} c_{2T} E_3^n \right],$$

$$u_n = (\beta \Phi(0))^2 \left[\varphi_0 + c_{1T} \tau \varphi_0^{1/2} R_1^{(0)} E_2^n + c_{2T} E_3^n \right].$$

Тут використано рівності

$$c_1 = \beta \Phi(0) \tau c_{1T}, \quad c_2 = (\beta \Phi(0))^2 c_{2T}, \quad (4.15)$$

де

$$c_{1T} = c_{1k} + \tau c_{1k1}, \quad (4.16)$$

а для c_{1k} та c_{1k1} маємо

$$c_{1k} = [c_{11} + c_{12} (\beta_c \Phi(0))^{-2}] \mathcal{D}^{-1},$$

$$c_{1k1} = c_{12} (\beta_c \Phi(0))^{-2} \mathcal{D}^{-1}, \quad (4.17)$$

причому

$$c_{11} = 1 + \bar{\Phi} - f_0 - R^{(0)} \varphi_0^{1/2}, \quad c_{12} = -a_4 R^{(0)} \varphi_0^{-1/2}.$$

Для величини c_{2T} отримуємо

$$c_{2T} = c_{2k} + c_{2k1} \tau + c_{2k2} \tau^2. \quad (4.18)$$

Тут

$$c_{2k} = [c_{23} + c_{22} (\beta_c \Phi(0))^{-1} + a_4 (\beta_c \Phi(0))^{-2}] \mathcal{D}^{-1},$$

$$c_{2k1} = [c_{22} (\beta_c \Phi(0))^{-1} + 2a_4 (\beta_c \Phi(0))^{-2}] \mathcal{D}^{-1},$$

$$c_{2k2} = a_4 (\beta_c \Phi(0))^{-2} \mathcal{D}^{-1}. \quad (4.19)$$

Для скорочення запису (4.19) введено позначення

$$c_{22} = -a_2 R_1^{(0)} \varphi_0^{1/2},$$

$$c_{23} = R_1^{(0)} \varphi_0^{1/2} (1 - f_0 + \bar{\Phi}) - \varphi_0.$$

Розв'язки РС (4.14) дозволяють отримати значення $n = n_p$, при якому величини w_n, r_n та u_n починають відрізнятися від їхніх значень у фіксованій точці. Очевидно, що в точці фазового переходу ($\tau = 0$,

$h = 0$) значення $n_p \rightarrow \infty$, оскільки $E_3 < 1$. При відхиленні від ТФП можливі три різні типи поведінки величини n_p .

Перший з них відповідає умові відсутності зовнішнього поля. Він був детально досліджений у роботі [8], де використовувалося позначення $n_p = m_\tau$, причому

$$m_\tau = -\frac{\ln |\tilde{\tau}|}{\ln E_2} - 1. \quad (4.20)$$

Для зручності тут використано перенормовану відносно температуру:

$$\tilde{\tau} = \tau(c_{1k}/f_0). \quad (4.21)$$

Умова на визначення величини m_τ сформульована у роботі [5] і має вигляд

$$r_{n_p+1} - r^* = \frac{-\tau}{|\tau|} r^*. \quad (4.22)$$

Інший тип критичної поведінки спостерігається для випадку $\tau = 0$ при $h \rightarrow 0$. Величини r_n та u_n у цьому випадку прямують до фіксованих значень, а точка виходу системи із критичного режиму флуктуацій параметра порядку (позначимо її через n_h) визначається із умови

$$w_{n_h+1} - w^* = h_0, \quad (4.23)$$

де h_0 – деякий параметр, який задає умову нормування критичної амплітуди кореляційної довжини (при $T = T_c$) і визначається з умови нормування намагніченості M при $T = T_c$ [79, 80]. Беручи до уваги (4.14), отримуємо

$$n_h = -\frac{\ln \tilde{h}}{\ln E_1} - 1. \quad (4.24)$$

Тут введено позначення

$$\tilde{h} = s_0^{d/2} (h/h_0). \quad (4.25)$$

Найбільш загальний тип критичної поведінки властивий для випадку $\tau \neq 0$ та $h \neq 0$. Виявляється, що точка виходу n_p в загальному випадку залежить від співвідношення між величинами τ та h . Як було встановлено в роботах [40, 93], існує деяке граничне (температурне) поле h_c , яке розділяє область значень полів на сильні та слабкі. Таке значення знаходимо із умови

$$m_\tau = n_h.$$

Використовуючи (4.20) та (4.24), отримуємо

$$h_c = |\tilde{\tau}|^{p_0}, \quad (4.26)$$

де для критичного показника p_0 маємо

$$p_0 = \frac{\ln E_1}{\ln E_2} = \nu/\mu, \quad \mu = \frac{2}{d+2}. \quad (4.27)$$

Тут ν – критичний показник кореляційної довжини, який характеризує її поведінку при $h = 0$ і обчислюється із співвідношення

$$\nu = \frac{\ln s^*}{\ln E_2}. \quad (4.28)$$

Критичний показник μ – описує польову поведінку кореляційної довжини при $T = T_c$. Він залежить лише від вимірності простору і визначається відповідними рекурентними співвідношеннями. В загальному випадку, крім критичних показників ν та μ , система характеризується також критичним показником кореляційної функції η . Для тривимірної моделі Ізінга він набуває значення $\eta = 0,04$.

З метою спрощення подальшого викладу величина η покладається рівною нулеві. Для критичного показника ν надалі використовуватимемо значення $\nu = 0,605$, яке впливає із наближених РС (4.1) та власних значень (4.7) матриці лінеаризованого ре-нормгрупового перетворення (4.5). Воно дещо відрізняється від значення $\nu_c = 0,630$, що відповідає стандартній моделі Ізінга. Відмінність критичних показників пов'язана з використанням у даній роботі найпростішого наближення для якобіана переходу від спінових до КЗ. Із ростом наближення значення ν зростають (див. [8, 28]) і наближаються до ν_c .

Беручи до уваги (4.26), рівність (4.20) можна записати у вигляді

$$m_\tau = -\frac{\ln h_c}{\ln E_1} - 1. \quad (4.29)$$

Порівнюючи (4.24) та (4.29), знаходимо їхню функціональну подібність. Загальний вираз для точки виходу системи із критичного режиму флуктуацій параметра порядку при $T > T_c$ запишемо у вигляді [35]:

$$n_p = -\frac{\ln(\tilde{h}^2 + h_c^2)}{2 \ln E_1} - 1. \quad (4.30)$$

У граничних випадках він переходить у відомі вирази (в (4.20) при $h = 0$ та в (4.24) при $\tau = 0$). Саме цей вираз будемо використовувати надалі в (3.17) при розрахунку статистичної суми поблизу ТФП при $T > T_c$.

Для температур $T < T_c$ формула (4.30) має дещо інший вигляд. Це пов'язано з наявністю в системі відмінного від нуля параметра порядку. Спонтанний спіновий момент індукує деяке внутрішнє магнітне поле, на яке треба зважити при визначенні n'_p -точки виходу системи з відрізка КРФ при $T < T_c$. Як відомо з роботи [8], наявність відмінного від нуля параметра порядку (а, отже, спряженого до нього поля) спричиняє зменшення точки виходу з КРФ. При $T > T_c$ таким полем є лише зовнішнє поле, і точка виходу n_p має вигляд (4.30). При $T < T_c$ крім зовнішнього поля h в системі наявне внутрішнє поле (впорядкування), що неодмінно приводить до зменшення точки виходу n'_p з відрізка КРФ. Даний ефект проявляється в "чистому вигляді" при $h = 0$, де має місце співвідношення

$$n'_p = n_p - n_0, \quad (4.31)$$

тут n_0 – стала величина ($n_0 \geq 0$). Використовуючи (4.29), знаходимо для діапазону температур $T < T_c$ величину n'_p при $h = 0$ (позначимо її через μ_τ):

$$\mu_\tau = -\frac{\ln h_c}{\ln E_1} - n_0 - 1 = -\frac{\ln h_{cm}}{\ln E_1} - 1, \quad (4.32)$$

де

$$h_{cm} = \tau_1^{p_0}, \quad (4.33)$$

а величина τ_1 пов'язана з відносною температурою τ співвідношенням

$$\tau_1 = -\tau \frac{c_{1k}}{f_0} E_2^{n_0}. \quad (4.34)$$

За наявності зовнішнього поля точка виходу системи з КРФ при $T < T_c$ має вигляд

$$n'_p = -\frac{\ln(\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)}{2 \ln E_1} - 1. \quad (4.35)$$

Вирази (4.30) та (4.35) визначають точку виходу системи з КРФ при $T > T_c$ та $T < T_c$ відповідно. Вони мають однаковий функціональний вигляд і співпадають при $T = T_c$. Відрізняються масштабом виміру температури для діапазонів температур, вищих та нижчих за T_c , які пов'язані між собою співвідношенням $\tau_1 = -\tilde{\tau} E_2^{n_0}$.

У подальших розрахунках будемо використовувати в ролі точки виходу з критичного режиму флуктуацій параметра порядку формулу (4.30) для діапазону температур $T \geq T_c$, а також формулу (4.35) при $T \leq T_c$. Наголосимо, що для випадку $T = T_c$ ці формули співпадають.

Процедура поетапного виключення з розгляду змінних η_k в (3.1) відповідає переходу в координатному просторі до ефективних блочних спінів у дусі гіпотези Каданова [17, 49]. Величина періоду ефективної блочної ґратки $c_n = c_0 s^n$ ($c_0 = c s_0$) зростає із збільшенням номера ітерації n . Поблизу ТФП у системі виникає особливий негаусовий режим флуктуацій параметра порядку для ефективних блочних ґраток із $n \leq n_p$, де спостерігається ренормгрупова симетрія. Як випливає із (4.14), для всіх $n \leq n_p$ величини w_n , r_n та u_n є близькими до їхніх значень у фіксованій точці (4.3). Для $n > n_p$ ці величини відхиляються від їхніх значень у нерухомій точці, і система переходить у гаусовий (невзаємодіючий) режим флуктуацій. При цьому величина n_p (або n'_p при $T < T_c$) визначає величину періоду ґратки c_{n_p} , яка є співвимірною із кореляційною довжиною системи ξ . Розглянемо поведінку величини

$$\xi = c_{n_p} \quad (4.36)$$

як функції температури і поля. Для температур $T \geq T_c$ в ролі n_p використаємо (4.30). Маємо

$$\xi/c = \xi_0 \left(\tilde{h}^2 + \tilde{\tau}^{(d+2)\nu} \right)^{-\frac{1}{d+2}}. \quad (4.37)$$

Тут $\xi_0 = (s_0/s)$, де c – період початкової ґратки, s_0 – параметр фур'є-образу потенціалу (3.4), s – параметр ренормгрупи, \tilde{h} – перенормоване поле (4.25), а $\tilde{\tau}$ – перенормована відносна температура (4.21).

Легко бачити, що у випадку $T = T_c$ формула (4.37) переходить у рівність

$$\xi/c = \xi_c (h)^{-\mu}, \quad (4.38)$$

де μ – критичний показник із (4.27), а для критичної амплітуди ξ_c із урахуванням (4.25) знаходимо

$$\xi_c = \xi_0 \left(\frac{h_0}{s_0^{3/2}} \right)^\mu = \frac{1}{s} (s_0 h_0)^\mu. \quad (4.39)$$

Абсолютне значення ξ_c визначається мікроскопічними параметрами моделі s та s_0 й величиною h_0 , яка відповідно до (4.25) визначає нормування величини \tilde{h} . З іншого боку, значення ξ_c відоме з числових розрахунків. Порівнюючи величину ξ_c із значенням $\xi^c = 0,3048(9)$ із роботи [80], знаходимо, що для значень $s = s^*$ та $s_0 = 2$ параметр h_0 із (4.23) є порядку одиниці, а точніше

$$h_0 \approx 0,760. \quad (4.40)$$

В іншій границі ($h = 0$) формула (4.37) переходить у рівність

$$\xi/c = \xi^+ |\tau|^{-\nu}, \quad (4.41)$$

де

$$\xi^+ = \frac{s_0}{s} \left(\frac{f_0}{c_{1k}} \right)^\nu. \quad (4.42)$$

Для області температур $T < T_c$ формула (4.36) записується у вигляді

$$\xi' = c'_{np}, \quad (4.43)$$

де величина n'_p має вигляд (4.35). Тому для всіх $T \leq T_c$

$$\xi'/c = \xi_0 \left(\tilde{h}^2 + \tau_1^{(d+2)\nu} \right)^{-\frac{1}{d+2}}. \quad (4.44)$$

Єдина відмінність (4.44) від (4.37) полягає в зміні масштабу виміру температури. Очевидно, що при $T = T_c$ формула (4.44) переходить у (4.38). Коли $h = 0$, ця формула описує область $T \leq T_c$ та набуває вигляду

$$\xi'/c = \xi^- |\tau|^{-\nu}, \quad (4.45)$$

де

$$\xi^- = \xi_0 \left(\frac{f_0}{c_{1k}} E_2^{-n_0} \right)^\nu. \quad (4.46)$$

Критична амплітуда ξ^- містить параметр n_0 , який характеризує зміщення точки виходу системи з режиму КРФ при $T > T_c$ та $T < T_c$ (формула (4.31)). Величину цього параметра знаходимо з порівняння відношення

$$\xi^+/\xi^- = E_2^{\nu n_0}, \quad (4.47)$$

яке впливає із виразів (4.42) та (4.46) із даними числового розрахунку $\xi^+/\xi^- = 1,896(10)$ [79, 80]. Беручи до уваги, що $\nu = \ln s / \ln E_2$, знаходимо

$$n_0 = \frac{\ln(\xi^+/\xi^-)}{\ln s}. \quad (4.48)$$

Для випадку $s = s^*$ маємо $n_0 = 0,50$. Легко бачити, що при збільшенні параметра s величина n_0 зменшується. Загалом, маємо $0 \leq n_0 \leq 1$.

Таким чином, використовуючи відомі експериментальні факти (як відношення критичних амплітуд)

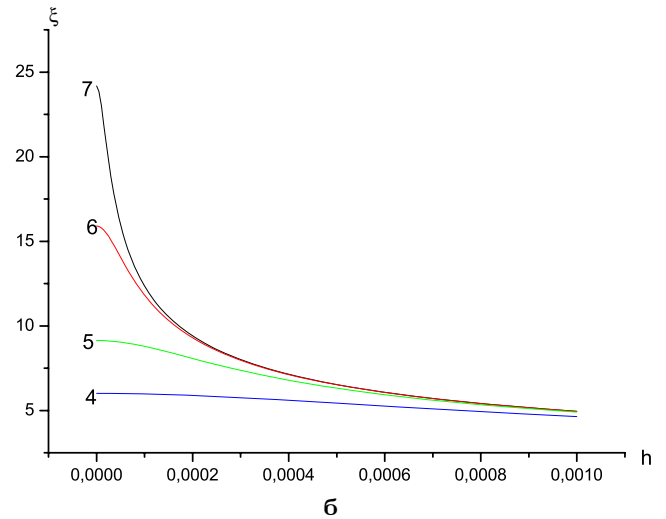
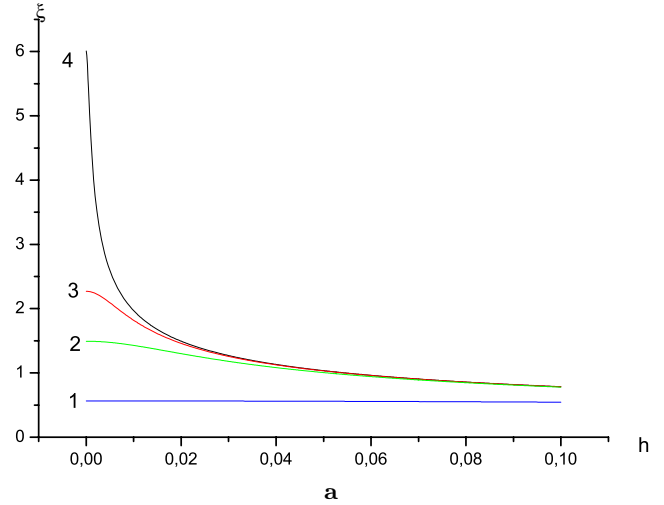


Рис. 3. Залежність кореляційної довжини від зовнішнього поля h при деяких фіксованих значеннях температури τ при $s_0 = 2$ та $b/c = 0,5$: а – $\tau_1=0,5$, $\tau_2=0,1$, $\tau_3=0,05$, $\tau_4=0,01$; б – $\tau_4=0,01$, $\tau_5=0,005$, $\tau_6=0,002$, $\tau_7=0,001$

та дані числового розрахунку [80], можна стверджувати, що при $s = s^*$ та $s_0 = 2$ параметри h_0 із (4.23) та n_0 із (4.31) набувають значень

$$h_0 = 0,760, \quad n_0 = 1/2. \quad (4.49)$$

Саме такі значення будемо використовувати нижче для ілюстрації критичної поведінки тривимірної спінової моделі з однокомпонентним параметром порядку.

На рис. 3 зображено залежність величини ξ як функції поля h при фіксованому значенні температури τ (при $s_0 = 2$ та $b/c = 0,5$). Випадок, наведений на рис. 3, а, відповідає великим значенням τ ,

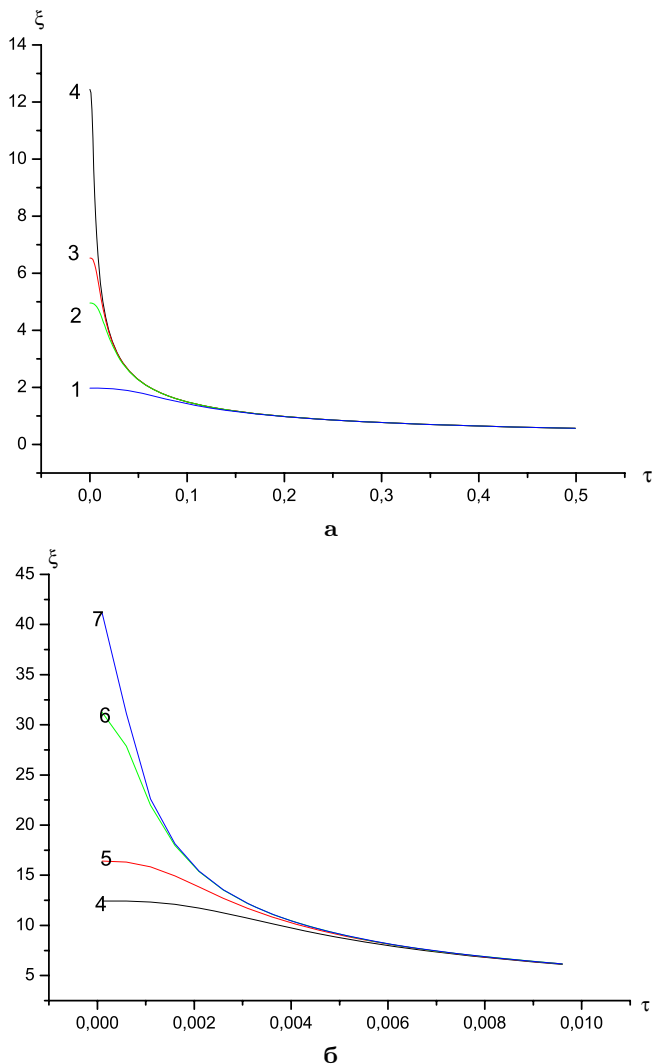


Рис. 4. Залежність кореляційної довжини від температури τ при фіксованому зовнішньому полі h ($s_0 = 2$ та $d/c = 0,5$): а - $h_1=0,01$, $h_2=0,001$, $h_3=0,0005$, $h_4=0,0001$; б - $h_4=0,0001$, $h_5=0,00005$, $h_6=0,00001$, $h_7=0,000005$

які не належать до критичного діапазону температур. Випадок, наведений на рис. 3,б, демонструє зростання ξ при зменшенні величини поля для значень τ із критичного діапазону температур. Легко бачити, що при великих значеннях відносної температури $\tau \approx 0,1$ кореляційна довжина є порядку сталої ґратки. Зростання ξ із зменшенням поля спостерігається лише для $\tau < 0,1$, причому при $\tau^* = 10^{-2}$ (що відповідає границі критичного діапазону температур $|\tau| \leq 10^{-2}$) знаходимо, що $\xi \sim 6s$, при $\tau = 10^{-3}$ маємо $\xi \sim 25s$, якщо $h = 0$. У випадку $\tau = \text{const} \neq 0$ та $h \neq 0$ величина ξ є суттєво

меншою, ніж $\xi(h = 0)$, як це видно із рис. 3. Результати проведених розрахунків свідчать про проблематичність вибору параметрів s_τ із (2.24) та s_h із (2.28), оскільки вони явно перевищують значення кореляційної довжини для випадку $\tau \neq 0$ та $h \neq 0$.

Подібна ситуація спостерігається при фіксованих значеннях поля h із зменшенням τ . На рис. 4 зображено температурну залежність кореляційної довжини ξ (в одиницях сталої ґратки c) для деяких значень поля h (при $s_0 = 2$ та $b/c = 0,5$). Легко бачити, що для значень $h \geq 0,01$ кореляційна довжина залишається порядку сталої ґратки c навіть при $\tau = 0$. Значення ξ при $\tau = 10^{-2}$ та $h = 0$, що відповідає границі критичного діапазону температур (за відсутності поля) досягається при $\tau = 0$ та $h \sim 5 \cdot 10^{-4}$. Із ростом τ маємо зменшення ξ .

Таким чином, величина критичного діапазону для даної моделі ($s_0 = 2, b/c = 0,5$) залежить як від поля h , так і від відносної температури τ . Однак, ці значення не можуть перевищувати величин

$$\tau^* \approx 10^{-2}; \quad h^* \approx 0,5 \cdot 10^{-3}. \quad (4.50)$$

Використовуючи формулу (4.37) та беручи до уваги нормування величин $\tilde{\tau}$ та \tilde{h} (формули (4.21) і (4.25)), легко отримати значення τ^* та h^* для інших значень мікроскопічних параметрів гамільтоніана s_0 та b/c .

Формула (4.37) дозволяє знайти залежність кореляційної довжини в часткових випадках. Так, при $h = 0$ із неї отримуємо відому залежність (4.41). При цьому значення критичного показника ν визначається для кожного значення вимірності простору d конкретним виглядом РС. Використані в роботі РС (4.6) при $d = 3$, дають значення $\nu = 0,605$. У випадку $d = 4$ РС (4.1) набувають спрощеної форми [8] і дають значення $\nu = 0,5$. Для двовимірної задачі $\nu = 1$, як це впливає із точного розв'язку. Для $d = 2$ РС (4.1) суттєво ускладнюються і потребують окремого дослідження [5].

Значення польового критичного показника кореляційної довжини μ із (4.27) визначається виключно вимірністю простору. Очевидно, що при $d = 3$ маємо $\mu = 0,4$. Для випадку $d = 4$ отримуємо $\mu = 1/3$, що збігається із результатом розрахунку теорії Ландау. Для двовимірної задачі (4.27) дає значення $\mu = 0,5$, що незначно відрізняється від $\mu = 8/15$, знайденого із співвідношення скейлінгу $\mu(\beta + \gamma) = \nu$, де при $d = 2$ відомі точні значення величин β, γ та ν ($\beta = 0,125, \gamma = 1,75, \nu = 1,0$).

5. Схема розрахунку вільної енергії для діапазону температур $T > T_c$

Розрахунок вільної енергії системи однокомпонентних спінів поблизу ТФП будемо здійснювати із використанням виразу для статистичної суми (3.17). Основною відмінністю такого розрахунку у випадку наявності поля (від його відсутності [8]) є необхідність використання узагальненої точки виходу системи із критичного режиму флуктуацій параметра порядку. У випадку $T > T_c$ координати цієї точки (на площині поле – відносна температура) задаються виразом (4.30). Зобразимо вільну енергію у вигляді декількох доданків:

$$F = F_0 + F_{CR}^{(+)} + F_{LGR}. \quad (5.1)$$

Кожен із цих доданків – внесок певного множника виразу (3.17). Так,

$$F_0 = -kTN[\ln 2 + \ln \operatorname{ch} h] - \frac{1}{2}N\Phi(0)\bar{\Phi} \quad (5.2)$$

відповідає виразу Z_0 і описує вільну енергію “невзаємодіючих” спінів.

Доданок $F_{CR}^{(+)}$ відповідає внеску до вільної енергії від ділянки критичного режиму флуктуацій. Відповідно до (3.17) він має вигляд

$$F_{CR}^{(+)} = -kT \sum_{n=1}^{n_p} N_n f_n, \quad (5.3)$$

де $N_n = N_0 s^{-3n}$, а для функції $f_n(x_n, y_{n-1})$ справедливий вираз

$$f_n = \frac{1}{4} \ln(3/\varphi(y_{n-1})) + \frac{1}{4}(x_n^2 + y_{n-1}^2) + \ln U(0, x_n) + \ln U(0, y_{n-1}). \quad (5.4)$$

Відмінність (5.3) від аналогічної формули, що використовувалася у випадку відсутності поля [28], полягає у використанні більш загального виразу для точки виходу з ділянки критичного режиму флуктуацій n_p . Величини x_n та y_n , що входять до (5.4), наведені в (3.23).

Доданок F_{LGR} має вигляд

$$F_{LGR} = -kT \ln Z_{LGR}, \quad (5.5)$$

де вираз для Z_{LGR} наведений в (3.29). Зауважимо, що Z_{n_p+1} із (3.30) може бути зображено у вигляді, подібному до внеску від ділянки критичного режиму

флуктуацій, тобто через добуток парціальних статистичних сум. Тоді для (5.5) маємо

$$F_{LGR} = F_{TR}^{(+)} + F'. \quad (5.6)$$

Тут

$$F_{TR}^{(+)} = -kTN_0 s^{-3(n_p+1)} \sum_{m=1}^{m_0} s^{-3(m-1)} f_{n_p+m}, \quad (5.7)$$

де для f_{n_p+m} маємо (5.4) при $n = n_p + m$, а для F' отримуємо

$$F' = -kTN \ln Z'. \quad (5.8)$$

Тут

$$Z' = 2^{(N_{n'+1}-1)/2} [Q(P_{n'})]^{N_{n'+1}} Z_{n'+1}, \quad (5.9)$$

де величина $n' = n_p + m_0$ є номером деякої блочної структури спінів, причому $n' > n_p$. Величина $Q(P_{n'})$ збігається із (3.22) при $n = n'$, а для $Z_{n'+1}$ маємо вираз (3.30), в якому замість n_p слід підставити n' .

Зауважимо принципову різницю між $F_{CR}^{(+)}$ із (5.3) та $F_{TR}^{(+)}$ із (5.7). Хоч вони мають однаковий функціональний вигляд, значення аргументів x_n та y_n у цих виразах різні за величиною. Якщо для $F_{CR}^{(+)}$ (діапазон $n < n_p$) ці величини є близькими до їхніх значень поблизу фіксованої точки ($x_n \approx x^*$, $y_n \approx y^*$), то при розрахунку $F_{TR}^{(+)}$ (діапазон $n_p < n \leq n_p + m_0$) слід зважувати на їхнє відхилення від фіксованої точки.

Знайдемо величину $F_{CR}^{(+)}$ із (5.3). Для цього слід виділити явну залежність величини f_n від n . Такі розрахунки виконано у роботі [8]. Було встановлено, що аргумент y_n для будь-яких значень температури набуває великих значень. Тому для функцій параболічного циліндра $U(0, y_n)$ та їхніх комбінацій $U(y_n)$ й $\varphi(y_n)$ із (3.26) використовуються асимптотичні розклади:

$$U(0, y_n) = y_n^{-1/2} e^{-y_n^2/4} \left(1 - \frac{3}{8} y_n^{-2} + \frac{105}{108} y_n^{-4} \right),$$

$$U(y_n) = y_n^{-1} \left(1 - \frac{3}{2} y_n^{-2} + 6 y_n^{-4} \right),$$

$$\varphi(y_n) = 3 y_n^{-4} \left(1 - \frac{21}{2} y_n^{-2} + \frac{447}{4} y_n^{-4} \right). \quad (5.10)$$

Маємо спрощений вираз для f_n із (5.4):

$$f_n = \frac{1}{2} \ln y_{n-1} + \frac{9}{4} y_{n-1}^{-2} + \frac{x_n^2}{4}$$

$$+ \ln U(0, x_n) + 0(y_{n-1})^{-4}. \quad (5.11)$$

Обмежимося надалі випадком, коли значення величини x_n у фіксованій точці обертається на нуль ($x^* = 0$). Він реалізується при певному значенні параметра ренормалізаційної групи $s = s^*$, де $s^* = 3,5977$. У цьому випадку для всіх $n \leq n_p$ маємо $x_n \ll 1$, і величину (5.11) можна зобразити у вигляді

$$f_n = f_{CR}^{(0)} + A_1 x_{n-1} + A_3 x_n, \quad (5.12)$$

де

$$f_{CR}^{(0)} = \frac{1}{2} \ln y_0 + \frac{9}{4} y_0^{-2} + \ln U(0, 0),$$

$$y_0 = s^{3/2} y_0^{(0)}, \quad y_0^{(0)} = U(0) (3/\varphi(0))^{1/2}, \quad (5.13)$$

а для коефіцієнтів A_l маємо

$$A_1 = \frac{1}{2} r_1 (1 - 9(y_0^{(0)})^{-2}), \quad A_3 = -\frac{1}{2} U(0), \quad (5.14)$$

де коефіцієнт r_1 виражається через функції параболічного циліндра $U(0)$, $\varphi(0)$ та їхні похідні. У формулі (5.12) обмежимося врахуванням доданків, лінійних за величиною x_n . Врахування квадратичних доданків детально описано у роботі [8]. Беручи до уваги результати роботи [42], знаходимо

$$f_{CR}^{(0)} = 1,496, \quad A_1 = 0,115, \quad A_3 = -0,478. \quad (5.15)$$

Використавши явні розв'язки РС (4.12) в діапазоні $n \leq n_p$, отримаємо вираз для x_n :

$$x_n = c_{1T} B_3 \tau E_2^n + c_{1T}^2 B_6 \tau^2 E_3^{2n}. \quad (5.16)$$

Тут не зважають на доданки, пропорційні до E_3^n ($E_3 < 1$), а для коефіцієнтів B_l маємо

$$B_3 = \sqrt{3} \varphi_0^{-1/2}, \quad B_6 = -\frac{\sqrt{3}}{2} R_1^{(0)} \varphi_0^{-1}.$$

Беручи до уваги (5.16), із (5.11) знаходимо

$$f_n = f_{CR}^{(0)} + d_1 c_{1T} \tau E_2^n + d_3 c_{1T}^2 \tau^2 E_2^{2n}, \quad (5.17)$$

де

$$d_1 = B_3 (A_3 + A_1/E_2), \quad d_3 = B_6 (A_3 + A_1/E_2^2).$$

Використаємо (5.17) для розрахунку (5.3). Зауважимо, що завдяки (4.30) існують рівності

$$s^{-(n_p+1)} = (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{\frac{1}{d+2}}, \quad E_1^{n_p+1} = (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{-1/2},$$

$$\tilde{\tau} E_2^{n_p+1} = H_c, \quad H_c = \tilde{\tau} (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{-1/2p_0},$$

$$E_3^{n_p+1} = H_3, \quad H_3 = (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{\Delta/2p_0}. \quad (5.18)$$

Тут використано позначення

$$\nu = \frac{\ln s^*}{\ln E_2}, \quad \Delta = -\frac{\ln E_3}{\ln E_2}, \quad p_0 = \frac{\ln E_1}{\ln E_2} = \frac{d+2}{2} \nu, \quad (5.19)$$

де ν – критичний показник кореляційної довжини, Δ – критичний показник поправки до скейлінгу, p_0 – кросоверний критичний показник. Для моделі ρ^4 при $s = s^*$ вони мають значення¹

$$\nu = 0,605, \quad \Delta = 0,465, \quad p_0 = 1,512.$$

Результат розрахунку (5.3) має вигляд

$$F_{CR}^{(+)} = -kTN_0 (\gamma_{01} + \gamma_{02} \tau + \gamma_{03} \tau^2) + F_{CR}^{(s)}, \quad (5.20)$$

де для коефіцієнтів γ_{0l} знайдено вирази у роботі [42]:

$$\gamma_{01} = s^{-3} f_{CR}^{(0)} (1 - s^{-3})^{-1},$$

$$\gamma_{02} = s^{-3} d_1 c_{1k} E_2 (1 - E_2 s^{-3})^{-1},$$

$$\gamma_{03} = s^{-3} d_3 c_{1k}^2 E_2^2 (1 - s^{-3} E_2^2)^{-1} +$$

$$+ s^{-3} c_{1k1} d_1 E_2 (1 - E_2 s^{-3})^{-1}, \quad (5.21)$$

які збігаються із результатами аналогічних обчислень у випадку відсутності поля [8]. Сингулярна частина $F_{CR}^{(s)}$ виразу (5.20) має вигляд

$$F_{CR}^{(s)} = kTN_0 \bar{\gamma}^+ s^{-3(n_p+1)}. \quad (5.22)$$

Коефіцієнт $\bar{\gamma}^+$ є функцією H_c і зображається у вигляді

$$\bar{\gamma}^+ = \bar{\gamma}_1 + \bar{\gamma}_2 H_c + \bar{\gamma}_3 H_c^2, \quad (5.23)$$

де $\bar{\gamma}_l$ – сталі величини

$$\bar{\gamma}_1 = f_{CR}^{(0)} (1 - s^{-3})^{-1},$$

¹ Занижене значення ν у порівнянні з даними методу МК [76] пов'язане із використанням недостатньо високого наближення для якобіана переходу від спінових до КЗ. Використання вищих наближень [28] приводить до зближення цих значень.

$$\begin{aligned}\bar{\gamma}_2 &= d_1 f_0 (1 - E_2 s^{-3})^{-1}, \\ \bar{\gamma}_3 &= d_3 f_0^2 (1 - E_2^2 s^{-3})^{-1},\end{aligned}\quad (5.24)$$

які при $s = s^*$ набувають значень: $\bar{\gamma}_1 = 1,529$, $\bar{\gamma}_2 = -0,635$, $\bar{\gamma}_3 = -0,058$. Сингулярна частина внеску $F_{CR}^{(s)}$ суттєво відрізняється від аналогічної величини при $h = 0$. Зауважимо, що за відсутності поля маємо $H_c = 1$, а тому

$$\bar{\gamma}^+(h = 0) = \gamma^+ = \bar{\gamma}_1 + \bar{\gamma}_2 + \bar{\gamma}_3. \quad (5.25)$$

При $h \neq 0$ величина $H_c < 1$, причому для $\tilde{h} \gg h_c$ маємо $H_c \rightarrow 0$, і основний внесок до $\bar{\gamma}^+$ дає величина $\bar{\gamma}_1$.

Внесок до вільної енергії F_{LGR} , відповідно до (5.6), містить два доданки. Для розрахунку першого з них $F_{TR}^{(+)}$ із (5.7) необхідно знайти явну залежність величини f_{n_p+m} від m . Використаємо розв'язки РС (4.14), які при врахуванні (5.18) набувають вигляду

$$\begin{aligned}w_{n_p+m} &= h_0 E_1^{m-1} \tilde{h} (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{-1/2}, \\ r_{n_p+m} &= \beta \Phi(0) f_0 [-1 + H_c E_2^{m-1} + \\ &+ R^{(0)} f_0^{-1} \varphi_0^{-1/2} c_{2T} E_3^{m-1} H_3],\end{aligned}\quad (5.26)$$

$$u_{n_p+m} = (\beta \Phi_f(0))^2 \varphi_0 [1 + \Phi_f H_c E_2^{m-1} + c_{2T} E_3^{m-1} H_3].$$

Тут $\Phi_f = f_0 \varphi_0^{-1/2} R_1^{(0)}$. Доданками, які пропорційні до $H_3 E_3^{m-1}$, будемо нехтувати, оскільки поблизу ТФП величина H_3 із (5.18) є малою, а E_3^{m-1} при $m \gg 1$ прямує до нуля ($E_3 < 1$). Таке наближення відповідає нехтуванню поправками до скейлінгу. За необхідності такі поправки можна обчислювати, використовуючи метод, запропонований у роботі [8].

Беручи до уваги (5.26), із (3.23) знаходимо

$$x_{n_p+m} = \bar{x} E_2^{m-1} H_c (1 + \Phi_f E_2^{m-1} H_c)^{-1/2}, \quad (5.27)$$

де введено позначення

$$\bar{x} = f_0 \varphi_0^{-1/2} \sqrt{3}. \quad (5.28)$$

Аргумент x_{n_p+m} зі зростанням m зростає та залежить від значення H_c . Легко переконатися, що величина H_c для кожного значення \tilde{h} однозначно визначається параметром

$$\alpha = \tilde{h}/h_c. \quad (5.29)$$

Для малих значень полів величина H_c наближається до одиниці, а з ростом α – прямує до нуля. Така поведінка H_c приводить до різного характеру залежності величини x_{n_p+m} із (5.27) від m для малих та великих значень полів. Зважаючи на розв'язки (5.26), легко переконатися, що значення величини $m_0 = 1$ приводить до досить великих значень аргументу $x_{n_p+m_0+1}$, що є достатньою умовою використання гаусового розподілу флуктуацій для всіх $\rho_{\mathbf{k}}$ із $|\mathbf{k}| \in \mathcal{B}_{n_p+2}$. Отже, внесок до вільної енергії системи (5.7) від перехідної області флуктуацій містить лише один доданок, який має вигляд

$$F_{TR}^{(+)} = -k T N_0 f_{n_p+1} (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{\frac{d}{d+2}}, \quad (5.30)$$

де для коефіцієнта f_{n_p+1} маємо вираз

$$f_{n_p+1} = \frac{1}{2} \ln y_{n_p} + \frac{9}{4} y_{n_p}^{-2} + \frac{1}{4} x_{n_p+1}^2 + \ln U(o, x_{n_p+1}). \quad (5.31)$$

Для розрахунку останнього внеску до вільної енергії системи F' із (5.6) слід обчислити вираз для Z' із (5.8). При $m_0 = 1$ маємо

$$Z' = 2^{(N_{n_p+2}-1)/2} [Q(P_{n_p+1})]^{N_{n_p+2}} Z_{n_p+2}, \quad (5.32)$$

де

$$\begin{aligned}Z_{n_p+2} &= \int (d\rho)^{N_{n_p+2}} \times \\ &\times \exp \left(h \sqrt{N} \rho_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{n_p+2}} d_{n_p+2}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \right. \\ &\left. - \frac{a_4^{(n_p+2)}}{24} N_{n_p+2}^{-1} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \in \mathcal{B}_{n_p+2}}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} \right).\end{aligned}\quad (5.33)$$

Для коефіцієнтів d_{n_p+2} та $a_4^{(n_p+2)}$ маємо

$$d_{n_p+2}(\mathbf{k}) = d_{n_p+2}(0) + 2\beta \Phi(0) b^2 k^2,$$

$$d_{n_p+2}(0) = s^{-2(n_p+2)} r_{n_p+2},$$

$$a_4^{(n_p+2)} = s^{-4(n_p+2)} u_{n_p+2}. \quad (5.34)$$

Зауважимо, що методику розрахунку (5.33) у випадку $h = 0$ розвинуто в роботі [8]. Вона ґрунтується на тому факті, що величина $r_{n_p+2}(h = 0) \gg$

$u_{n_p+2}(h = 0)$, а отже, дозволяє використати для обчислення (5.33) гаусове наближення. Однак, за наявності поля коефіцієнт r_{n_p+2} зменшується під час росту поля і набуває від'ємних значень при достатньо великих полях. Тому розроблена раніше методика обчислення потребує розвитку.

6. Виділення макроскопічної частини параметра порядку

Розрахунок явного виразу величини Z_{n_p+2} із (5.33) суттєво залежить як від наявності поля, так і від того, вище чи нижче температури фазового переходу T_c знаходиться система. Така ситуація зумовлена поведінкою коефіцієнтів r_{n_p+2} та u_{n_p+2} , для яких маємо такі вирази:

$$r_{n_p+2} = \beta\Phi(0)f_0(-1 + E_2H_c),$$

$$u_{n_p+2} = (\beta\Phi(0))^2\varphi_0(1 + \Phi_f E_2H_c). \quad (6.1)$$

Коефіцієнт u_{n_p+2} залишається додатним для довільних значень τ та h , що забезпечує збіжність інтегрування в (5.33). Коефіцієнт r_{n_p+2} є додатним і значно перевищує u_{n_p+2} при малих значеннях поля ($h_c \gg \tilde{h}$). Для цієї області температур під час розрахунку (5.33) можна обмежитись гаусовим наближенням, що детально обговорено у роботі [8]. Однак, для великих значень поля ($h_c \ll \tilde{h}$) коефіцієнт r_{n_p+2} зменшується і при подальшому зниженні температури стає від'ємним. У цій температурній області використання гаусового наближення є безпідставним.

Ситуація змінюється, якщо в (5.33) виконати заміну змінних, а саме:

$$\rho_{\mathbf{k}} = \eta_{\mathbf{k}} + \sqrt{N}\sigma_+\delta_{\mathbf{k}}, \quad (6.2)$$

де σ_+ – деяка стала величина. У випадку $T < T_c$ підставою для зміщення змінної ρ_0 (середнє значення якої пов'язане з параметром порядку [5]) є наявність в системі спонтанного параметра порядку. Подібна ситуація відбувається також при температурах, вищих за T_c , за наявності зовнішнього поля. У цьому випадку в системі існує індукований полем параметр порядку. У результаті заміни (6.2) вираз (5.33) набуває вигляду

$$Z_{n_p+2} = e^{NE_0(\sigma_+)} \int (d\eta)^{N_{n_p+2}} \times$$

$$\times \exp \left[A_0 \sqrt{N} \eta_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{n_p+2}} \bar{d}(k) \eta_{\mathbf{k}} \eta_{-\mathbf{k}} - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{6} \bar{b} N_{n_p+2}^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_3} \eta_{\mathbf{k}_1} \dots \eta_{\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_3} - \frac{1}{24} \bar{a}_4 N_{n_p+2}^{-1} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4} \eta_{\mathbf{k}_1} \dots \eta_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right]. \quad (6.3)$$

Тут

$$E_0(\sigma_+) = h\sigma_+ - \frac{1}{2} d_{n_p+2}(0) \sigma_+^2 - \frac{1}{24} a_4^{(n_p+2)} \frac{N}{N_{n_p+2}} \sigma_+^4, \quad (6.4)$$

а для коефіцієнтів A_0 , $\bar{d}(k)$, \bar{b} та \bar{a}_4 маємо вирази

$$A_0 = h - d_{n_p+2}(0) \sigma_+ - \frac{1}{6} a_4^{(n_p+2)} s_0^3 s^{3(n_p+2)} \sigma_+^3,$$

$$\bar{d}(k) = \bar{d}(0) + 2\beta\Phi(0)b^2k^2,$$

$$\bar{d}(0) = d_{n_p+2}(0) + \frac{1}{2} a_4^{(n_p+2)} s_0^3 s^{3(n_p+2)} \sigma_+^2,$$

$$\bar{b} = a_4^{(n_p+2)} s_0^{3/2} s^{3/2(n_p+2)} \sigma_+, \quad \bar{a}_4 = a_4^{(n_p+2)}. \quad (6.5)$$

Для проведення подальших розрахунків слід конкретизувати величину σ_+ . Оскільки вирази (6.3)–(6.5) справедливі при довільних значеннях σ_+ , знайдемо цю величину із умови

$$\frac{\partial E_0(\sigma_+)}{\partial \sigma_+} = 0.$$

Беручи до уваги (6.4), отримуємо рівняння

$$A_0 = 0, \quad (6.6)$$

розв'язок якого шукатимемо у вигляді

$$\sigma_+ = \sigma_0 s^{-(n_p+2)/2}. \quad (6.7)$$

Для величини σ_0 отримуємо кубічне рівняння

$$\sigma_0^3 + p\sigma_0 + q = 0, \quad (6.8)$$

де для коефіцієнтів p та q маємо вирази

$$p = 6s_0^{-3} \frac{r_{n_p+2}}{u_{n_p+2}},$$

$$q = -6s_0^{-9/2} s^{5/2} \frac{h_0}{u_{n_p+2}} \frac{\tilde{h}}{(\tilde{h}^2 + h_c^2)^{1/2}}. \quad (6.9)$$

У загальному випадку величини p та q є функціями температури та поля. Форма розв'язків (6.8) залежить від знака дискримінанта:

$$Q = (p/3)^3 + (q/2)^2.$$

Як відомо, для додатних Q маємо один дійсний розв'язок, а для $Q < 0$ рівняння (6.8) має три дійсні розв'язки. Легко переконатися, що при $T > T_c$ величина Q є додатною при будь-яких значеннях поля.

Розглянемо деякі часткові випадки розв'язків (6.8). Нехай $h = 0$. Тоді $q = 0$ для всіх $\tau \neq 0$, і розв'язки (6.8) мають вигляд

$$\sigma_0^{(1)} = 0, \quad \sigma^{(2,3)} = \pm\sqrt{-p}. \quad (6.10)$$

Знак величини p залежить від того, вищою чи нижчою за T_c є температура системи. Зважаючи на рівності (5.18) та (6.1), для випадку $T > T_c$ знаходимо

$$r_{n_p+2}^{(+)} = \beta\Phi(0)f_0(E_2 - 1),$$

$$u_{n_p+2}^{(+)} = (\beta\Phi(0))^2\varphi_0(1 + \Phi_f E_2). \quad (6.11)$$

Використовуючи рівності (6.11), із (6.9) знаходимо, що значення величини

$$p^{(+)} = 6s_0^{-3} \frac{f_0}{\varphi_0} \frac{1}{\beta\Phi(0)} \frac{E_2 - 1}{1 + \Phi_f E_2} \quad (6.12)$$

є додатними. У цьому випадку ($h = 0, T > T_c$) рівняння (6.8) не має дійсних розв'язків.

Іншим частковим випадком розв'язків рівняння (6.8) є умова $T = T_c$. Легко переконатися, що тоді величини p та q із (6.9) перестають залежати від поля. Дійсно, при $T = T_c$ маємо $H_c = 0$, а отже,

$$r_{n_p+2}^{(c)} = -\beta\Phi(0)f_0,$$

$$u_{n_p+2}^{(c)} = (\beta\Phi(0))^2\varphi_0. \quad (6.13)$$

Тоді із (6.9) отримуємо

$$p^{(c)} = -6s_0^{-3} (f_0/\varphi_0) (\beta_c\Phi(0))^{-1},$$

$$q^{(c)} = -6s_0^{-9/2} s^{5/2} \frac{h_0}{\varphi_0} (\beta_c\Phi(0))^{-2}. \quad (6.14)$$

Величина $Q^{(c)} = Q(\tau = 0)$ має вигляд

$$Q^{(c)} = Q^{(0)} \left[1 - \frac{8}{9} \frac{f_0^3}{\varphi_0 h_0^2} s^{-5} \beta_c \Phi(0) \right], \quad (6.15)$$

де

$$Q^{(0)} = 9s_0^{-9} s^5 (h_0/\varphi_0)^2 (\beta_c\Phi(0))^{-4}. \quad (6.16)$$

Знак $Q^{(c)}$ визначається квадратною дужкою виразу (6.15), і завдяки наявності малого множника s^{-5} величина $Q^{(c)}$ завжди набуває додатних значень. Зауважимо також, що $Q^{(c)}$ не залежить від величини поля і визначається мікроскопічними параметрами системи. Для значень параметрів

$$s_0 = 2, \quad b/c = 0, 3, h_0 = 0, 760 \quad (6.17)$$

знаходимо

$$p^{(c)} = -0, 389, \quad q^{(c)} = -2, 790, \quad Q^{(c)} = 1, 944. \quad (6.18)$$

Легко переконатися, що для інших значень параметрів s_0 та b/c величина $Q^{(c)}$ завжди додатна. При $T = T_c$ розв'язки рівняння (6.8) мають вигляд

$$\sigma_c = A_c + B_c, \quad (6.19)$$

де

$$A_c = \left(-q^{(c)}/2 + (Q^{(c)})^{1/2} \right)^{1/3},$$

$$B_c = - \left(q^{(c)}/2 + (Q^{(c)})^{1/2} \right)^{1/3}.$$

Для випадку (6.17) знаходимо

$$A_c = 1, 408, \quad B_c = 0, 092, \quad \sigma_c = 1, 500. \quad (6.20)$$

Величина зміщення σ_+ із (6.2) має вигляд

$$\sigma_+ = \tilde{h}^{1/5} \sigma_c. \quad (6.21)$$

У загальному випадку розв'язок рівняння (6.8) залежатиме як від величини поля, так і від температури. Розв'язок (6.8) для всіх $\tau > 0$ при $h \neq 0$ шукаємо за допомогою методу Кардано $\sigma_0 = A + B$, де

$$A = \left(-q/2 + Q^{1/2} \right)^{1/3}, \quad B = - \left(q/2 + Q^{1/2} \right)^{1/3}.$$

Криві залежності $\sigma_0(\tau)$ наведено на рис. 5 для декількох значень поля.

Зауважимо, що значення $\sigma_0 = 1, 500$ при $\tau = 0$ не залежить від величини поля.

Вирази для перенормованих коефіцієнтів (6.5) запишемо у вигляді

$$\bar{d}(0) = s^{-2(n_p+2)} r_R,$$

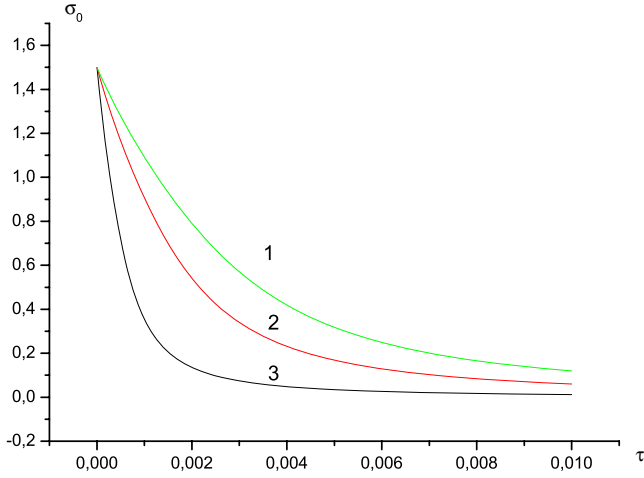


Рис. 5. Залежність розв'язку σ_0 рівняння (6.8) від температури. Крива 1 відповідає значенню $h = 0,0001$; крива 2 – $h = 0,00005$; крива 3 – $h = 0,00001$

$$\bar{b} = s^{-3(n_p+2)} v_R,$$

$$\bar{a} = s^{-4(n_p+2)} u_R.$$

Тут

$$r_R = r_{n_p+2} + \frac{1}{2} u_{n_p+2} s_0^3 \sigma_0^2,$$

$$v_R = u_{n_p+2} s_0^{3/2} \sigma_0, \quad u_R = u_{n_p+2}. \quad (6.23)$$

Під час розрахунку виразу (6.3) використовувати-
мемо гаусове наближення. Це пов'язано з малістю ко-
ефіцієнтів v_r та u_r по відношенню до r_R . Виконавши
в (6.3) заміну змінних

$$\eta_{\mathbf{k}} = \rho_{\mathbf{k}} s^{(n_p+2)} \sqrt{2/r_R},$$

отримаємо

$$Z_{n_p+2} = e^{NE_0(\sigma)} s^{(n_p+2)N_{n_p+2}} (2/r_R)^{N_{n_p+2}/2} Z_G, \quad (6.24)$$

де

$$Z_G = \int (d\rho)^{N_{n_p+2}} \times$$

$$\times \exp \left[- \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{n_p+2}} \left(1 + 2\beta\Phi(0) b^2 k^2 s^{2(n_p+2)} / r_R \right) \times \right.$$

$$\left. \times \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - x_3 N_{n_p+2}^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_3} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_3} - \right]$$

$$- x_4 N_{n_p+2}^{-1} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \left. \right]. \quad (6.25)$$

Величини x_n мають вигляд

$$x_3 = \frac{\sqrt{2}}{3} v_r / (r_R)^{3/2}, \quad x_4 = \frac{1}{6} u_r / r_R^2 \quad (6.26)$$

та є малими, порівняно з одиницею, і зменшуються
із зростанням $T \rightarrow T_c$. Тому (6.25) зводиться до
добутку однократних інтегралів:

$$Z_G = \prod_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{n_p+2}} \int d\rho_{\mathbf{k}} \times \exp \left(- \left(1 + 2\beta\Phi(0) \frac{b^2}{r_R} k^2 s^{2(n_p+2)} \right) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right). \quad (6.27)$$

Внесок до вільної енергії системи від (6.24) має ви-
гляд

$$F_{n_p+2} = -kTN E_0(\sigma) - \frac{1}{2} kTN_{n_p+2} \ln \pi - kTN_{n_p+2} (n_p + 2) \ln s + \frac{1}{2} kTN_{n_p+2} \ln r_R + \frac{1}{2} kT \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{n_p+2}} \ln \left(1 + 2\beta\Phi(0) b^2 k^2 s^{2(n_p+2)} / r_R \right). \quad (6.28)$$

Тут

$$E_0(\sigma_+) = e_0 h \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{\frac{1}{2(d+2)}} - e_2 \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{\frac{d}{(d+2)}}, \quad (6.29)$$

де введено позначення

$$e_0 = \sigma_0 s^{-1/2},$$

$$e_2 = \frac{1}{2} \sigma_0^2 s^{-3} \left(r_{n_p+2} + \frac{1}{12} u_{n_p+2} s_0^3 \sigma_0^2 \right). \quad (6.30)$$

Сума за $\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{n_p+2}$ в (6.28) може бути розрахована
шляхом переходу до інтеграла за методикою, вико-
ристаною у роботі [5].

Беручи до уваги вирази (5.32) та (6.24), запишемо
відповідну (5.32) частину вільної енергії як суму двох
внесків:

$$F' = F_0^{(+)} + F'_G,$$

де доданок

$$F_0^{(+)} = -kTN E_0(\sigma_+) \quad (6.31)$$

відповідає виділенню макроскопічної частини параметра порядку, а для F'_G маємо

$$F'_G = -kTN n_{p+2} f_G. \quad (6.32)$$

Коефіцієнт f_G має вигляд

$$f_G = \frac{1}{2} \ln 2 - \frac{1}{4} \ln 3 + \ln s + \frac{1}{4} \ln u_{n_p+1} - \frac{1}{2} \ln r_R - \frac{1}{2} \ln U(x_{n_p+1}) - \frac{3}{8} y_{n_p+1}^{-2} - \frac{1}{2} f''_G. \quad (6.33)$$

Тут

$$u_{n_p+1} = (\beta\Phi(0))^2 \varphi_0(1 + \Phi_f H_c),$$

$$x_{n_p+1} = \bar{x} H_c (1 + \Phi_f H_c)^{-1/2} \quad (6.34)$$

величини r_R та y_{n_p+2} визначені в (6.23) та (3.23), відповідно, а для f''_G маємо вираз

$$f''_G = \ln(1 + a^2) - \frac{2}{3} + \frac{2}{a^2} - \frac{2}{a^3} \operatorname{arctg} a, \quad (6.35)$$

де

$$a = \frac{\pi b}{s_0 c} \left(\frac{2\beta\Phi(0)}{r_R} \right)^{1/2}. \quad (6.36)$$

На цьому етапі завершується розрахунок внесків до вільної енергії (5.1) від різного типу флуктуацій параметра порядку для діапазону температур $T > T_c$. Розрахунок вільної енергії для області температур $T \leq T_c$ виконано в [99].

7. Вільна енергія системи в зовнішньому полі поблизу точки фазового переходу при $T > T_c$

Підсумуємо внески до вільної енергії системи від різних флуктуаційних процесів, які спостерігаються поблизу точки фазового переходу другого роду. Відповідно до представлення вільної енергії із (5.1) маємо декілька типів внесків. Вираз F_0 , як впливає із (5.2), містить лише аналітичну залежність від поля h . Такого ж типу є залежність першого доданка F_{CR} виразу (5.20). Об'єднуючи ці внески, введемо позначення

$$F_a = F_0 + \left(F_{CR}^{(+)} - F_{CR}^s \right). \quad (7.1)$$

Це є аналітична частина вільної енергії. Вона має вигляд

$$F_a = -kTN \left(\ln \operatorname{ch} h - F_{02} h'^2 \right) - \frac{1}{2} N \Phi(0) \bar{\Phi} - kTN (\gamma_0 + \gamma_1 \tau + \gamma_2 \tau^2), \quad (7.2)$$

де

$$\gamma_0 = \ln 2 + \gamma_{01} s_0^{-3}, \gamma_1 = \gamma_{02} s_0^{-3}, \gamma_2 = \gamma_{03} s^{-3}. \quad (7.3)$$

Внески до вільної енергії $F_{CR}^{(s)}$ (5.22), $F_{TR}^{(+)}$ (5.30) та F' (6.31) і (6.32) містять суто неаналітичну залежність від температури τ та поля h . Запишемо їхню суму у вигляді двох типів доданків. Перший з них $F_0^{(+)}$ пов'язаний із зміщенням змінної ρ_0 і має вигляд із (6.31). Другий $F_s^{(+)}$ є сумою решти неаналітичних внесків (діапазон $T > T_c$):

$$F_s^{(+)} = F_{CR}^{(s)} + F_{TR}^{(+)} + F'_G \quad (7.4)$$

і може бути зображений у вигляді

$$F_s^{(+)} = -kTN \gamma_s^{(+)} \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{\frac{d}{d+2}}, \quad (7.5)$$

де

$$\gamma_s^{(+)} = s_0^{-3} (f_{n_p+1} - \bar{\gamma}^+ + f_G/s^3). \quad (7.6)$$

Таким чином, замість представлення вільної енергії у вигляді (5.1) маємо еквівалентне йому представлення

$$F = F_a + F_s^{(+)} + F_0^{(+)}, \quad (7.7)$$

де аналітична частина F_a має вигляд (7.2), для $F_s^{(+)}$ маємо (7.5), а доданок $F_0^{(+)}$ із (6.31) набуває вигляду

$$F_0^{(+)} = -kTN \left[e_0 h (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{\frac{1}{2(d+2)}} - e_2 (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{\frac{d}{d+2}} \right]. \quad (7.8)$$

Вирази для коефіцієнтів e_0 та e_2 наведено в (6.30). Останній доданок виразу (7.8) має той же вигляд, що і вираз F_s . Тому вираз (7.7) може бути записаний також у вигляді

$$F = F_a + F_N + F_h, \quad (7.9)$$

де F_a наведено в (7.2):

$$F_N = -kTN \gamma_N (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{\frac{d}{d+2}}, \quad (7.10)$$

де

$$\gamma_N = \gamma_s^{(+)} - e_2, \quad (7.11)$$

а для F_h знаходимо

$$F_h = -kTN e_0 h (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{\frac{1}{2(d+2)}}. \quad (7.12)$$

Внесок до вільної енергії F_h відіграє основну роль з точки зору впливу зовнішнього поля на критичну поведінку моделі.

8. Розрахунок параметра порядку та сприйнятливості спінової системи поблизу ТФП у зовнішньому полі при $T > T_c$

Вираз (7.7) описує температурну та польову залежності тривимірної моделі Ізінга з експонентно-спадним потенціалом взаємодії між вузлами. Зручність такого представлення дозволяє знаходити різні фізичні характеристики моделі поблизу точки фазового переходу. Поширеними є дослідження теплоємності [94–96] поблизу температури фазового переходу T_c . При певних модифікаціях вираз (7.9) міг би бути використаним для пояснення піків цієї величини в діапазоні T_c . Останнім часом докладаються значні зусилля для дослідження поведінки моделі Ізінга на різних типах ґраток [97, 98], використовуються різні методи теоретичного опису цієї моделі, зокрема, метод точних РГ рівнянь [71]. Особливо цікавими є роботи по вивченню критичних явищ в умовах мікрогравітації [100]. Роль гравітаційного поля на критичну поведінку рідин подібна до впливу зовнішнього магнітного поля на поведінку спінової системи поблизу точки фазового переходу. Ця обставина дозволяє використати після певної модифікації вираз (7.12) для вивчення явища гравітаційного ефекту в рідинах поблизу критичної точки.

Використаємо вираз (7.7) для розрахунку температурних та польових залежностей таких фізичних характеристик, як параметр порядку та сприйнятливості системи.

Для знаходження параметра порядку використаємо означення

$$M^{(+)} = -\frac{1}{N} \left(\frac{dF}{dh} \right)_T. \quad (8.1)$$

Як і в роботі [101], зобразимо для зручності розрахунків величину $M^{(+)}$ у вигляді трьох доданків:

$$M^{(+)} = M_a + M_s^{(+)} + M_0^{(+)}, \quad (8.2)$$

які відповідають внескам від різних доданків (7.7) і мають вигляд

$$M_a = -\frac{1}{N} \left(\frac{dF_a}{dh} \right)_T,$$

$$M_s^{(+)} = -\frac{1}{N} \left(\frac{dF_s^{(+)}}{dh} \right)_T,$$

$$M_0^{(+)} = -\frac{1}{N} \left(\frac{dF_0^{(+)}}{dh} \right)_T. \quad (8.3)$$

Використовуючи формулу (7.2), отримуємо

$$M_a = th(h). \quad (8.4)$$

Для діапазону температур $T > T_c$ величина $M_s^{(+)}$ розраховується відповідно до (7.5) і зображається у вигляді

$$M_s^{(+)} = (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{\frac{1}{2(d+2)}} \left[(\tilde{h}^2 + h_c^2)^{1/2} \frac{d\gamma_s^{(+)}}{dh} + \frac{6}{5} \gamma_s^{(+)} s_0^{3/2} f_0^{-1} \frac{\tilde{h}}{(\tilde{h}^2 + h_c^2)^{1/2}} \right]. \quad (8.5)$$

Похідна величини $\gamma_s^{(+)}$ розраховується відповідно до (7.6), де для кожного із доданків відомий явний вираз.

Для розрахунку $M_0^{(+)}$ використовуємо співвідношення (7.8), яке справедливе для $T > T_c$. Зауважимо, що похідні σ_0 за полем приводять до виразу, що збігається з умовою (6.6), а отже, відповідні внески компенсуються. Тому під час обчислення $M_0^{(+)}$ величина σ_0 вважається незалежною від поля. Отримуємо

$$M_0^{(+)} = (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{\frac{1}{2(d+2)}} \left[e_0 \left(1 + \frac{1}{5} \frac{\tilde{h}^2}{\tilde{h}^2 + h_c^2} \right) - \frac{6}{5} e_2 s_0^{3/2} \frac{1}{f_0} \frac{\tilde{h}}{(\tilde{h}^2 + h_c^2)^{1/2}} - (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{1/2} \frac{de_2}{dh} \right], \quad (8.6)$$

де

$$\frac{de_2}{dh} = \frac{1}{2} \sigma_0^2 s^{-3} \left(\frac{dr_{n_p+2}}{dh} + \frac{1}{12} \sigma_0^2 s_0^3 \frac{du_{n_p+2}}{dh} \right). \quad (8.7)$$

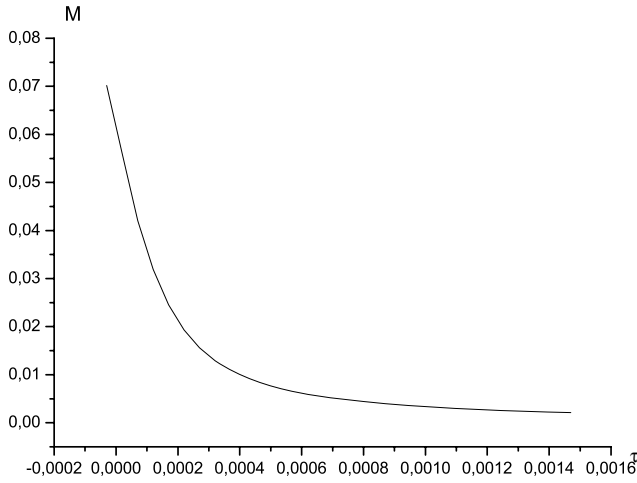


Рис. 6. Залежність намагніченості від температури при величині поля $h = 10^{-6}$ для значення параметрів моделі (6.17)

Беручи до уваги (6.1), знаходимо

$$\frac{dr_{n_p+2}}{dh} = s_0^{3/2} \frac{1}{h_0} \beta \Phi(0) f_0 E_2 \frac{dH_c}{d\tilde{h}},$$

$$\frac{du_{n_p+2}}{dh} = s_0^{3/2} \frac{1}{h_0} (\beta \Phi(0))^2 \varphi_0 \Phi_f E_2 \frac{dH_c}{d\tilde{h}}. \quad (8.8)$$

Похідна величини H_c може бути обчислена із виразу (5.18) і має вигляд

$$\frac{dH_c}{d\tilde{h}} = -\frac{H_c}{p_0} \frac{\tilde{h}}{(\tilde{h}^2 + h_c^2)}. \quad (8.9)$$

Використовуючи вираз (8.2), знаходимо сумарний внесок до параметра порядку $M^{(+)}$ за наявності зовнішнього поля:

$$M^{(+)} = \sigma_{00}^{(+)} (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{\frac{1}{2(d+2)}} + h, \quad (8.10)$$

де для коефіцієнта $\sigma_{00}^{(+)}$ маємо

$$\sigma_{00}^{(+)} = e_0 \left(1 + \frac{1}{5} \frac{\tilde{h}^2}{\tilde{h}^2 + h_c^2} \right) + e_{00} \frac{\tilde{h}}{(\tilde{h}^2 + h_c^2)^{1/2}} + e_{01} (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{1/2}. \quad (8.11)$$

Тут величина e_0 означена в (6.30), а для e_{00} та e_{01} знаходимо вирази

$$e_{00} = \frac{6}{5} \left(s_0^{3/2} / h_0 \right) (\gamma_s^{(+)} - e_2),$$

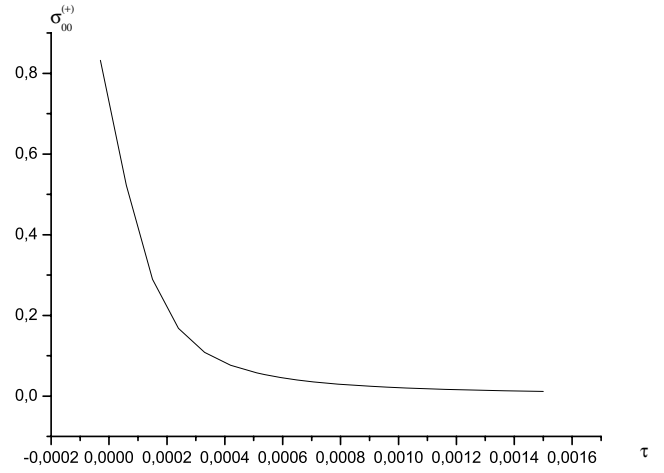


Рис. 7. Залежність критичної амплітуди $\sigma_{00}^{(+)}$ від температури при величині поля $h = 10^{-6}$ для значення параметрів моделі (6.17)

$$e_{01} = \frac{d\gamma_s^{(+)}}{dh} - \frac{de_2}{dh}. \quad (8.12)$$

Графік температурної залежності величини $M^{(+)}$ наведено на рис. 6, а величини $\sigma_{00}^{(+)}$ на рис. 7 для значення поля $h = 10^{-6}$. При цьому прийнята до уваги умова нормування (4.40), а також покладено, що $s_0 = 2$, $b/c = 0, 3$.

Легко переконатися, що коефіцієнт σ_{00} залежить лише від параметра α із (5.29). Як випливає із співвідношень (8.7)–(8.9), справедлива рівність

$$\frac{de_2}{dh} = -\frac{s_0^{d/2}}{h_0} q_s \sigma_0^2 \left(1 + \frac{q_e}{12} \sigma_0^2 \right) (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{-1/2}, \quad (8.13)$$

де сталі q_1 та q_2 можна визначити з формул

$$q_s = \frac{E_2}{2p_0} \beta \Phi(0) f_0 s^{-3} H_c \frac{\alpha}{(1 + \alpha^2)^{1/2}},$$

$$q_e = \Phi_f s_0^3 \varphi_0 f_0^{-1} \beta \Phi(0).$$

Похідна величини $\gamma_s^{(+)}$ за полем має вигляд

$$\frac{d\gamma_s^{(+)}}{dh} = \frac{s_0^{d/2}}{h_0} f \gamma_1 (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{-1/2}, \quad (8.14)$$

де

$$f \gamma_1 = s_0^{-3} (f_p + \gamma_p + f_{gv} / s^3).$$

Величини f_p , γ_p та f_{gv} залежать лише від параметра $\alpha = \tilde{h}/h_c$

$$f_p = \frac{1}{2} r_p g_p \left(1 - 9/y_{n_p}^2 \right) - \frac{1}{2} g_{p+1} U(x_{n_p+1}),$$

$$\gamma_p = H_{cd} (\gamma_2 + 2\gamma_3 H_c),$$

$$f_{gv} = \frac{1}{4} \frac{\varphi_0 \Phi_f}{u_{n_p+1}} H_{cd} (\beta \Phi(0))^2 - \frac{1}{2} (g_R/r_R + g_a a_g) +$$

$$+ g_{p+1} \left(\frac{3}{4} \frac{r_{p+1}}{(y_{n_p+1})^2} - \frac{1}{2} \frac{U'(x_{n_p+1})}{U(x_{n_p+1})} \right).$$

Тут введено позначення

$$r_{p+m} = \frac{U'(x_{n_p+m})}{U(x_{n_p+m})} - \frac{1}{2} \frac{\varphi'(x_{n_p+m})}{\varphi(x_{n_p+m})},$$

$$g_{p+m} = -\bar{x} H_{cd} E_2^{m-1} (1 + \Phi H_c E_2^{m-1})^{-1/2} \times$$

$$\times \left[1 - \frac{\Phi}{2} H_c E_2^{m-1} (1 + \Phi H_c E_2^{m-1})^{-1} \right],$$

де

$$H_{cd} = \frac{H_c}{p_0} \frac{\alpha}{(1 + \alpha^2)^{1/2}}.$$

Коефіцієнт a_g виражається через величину a із (6.36) таким чином:

$$a_g = \frac{2a}{1 + a^2} - \frac{4}{a^3} + \frac{6}{a^4} \arctg a - \frac{2}{a^3} \frac{1}{1 + a^2},$$

а величина g_a має вигляд

$$g_a = -a g_R / 2r_R.$$

Значення r_R наведено в (6.23), а для g_R справедливий вираз

$$g_R = -\beta \Phi(0) f_0 H_{cd} \left(1 + \frac{1}{2} q_e \sigma_0^2 \right) + u_{n_p+2} s_0^3 g_\sigma \sigma_0,$$

причому

$$g_\sigma = \frac{h_0}{s_0^{d/2}} \frac{s_0^{5/2}}{r_R} \frac{1}{1 + \alpha^2} + \frac{\sigma_0}{r_R} H_{cd} \beta \Phi(0) f_0 E_2 \left(1 + \frac{q_l}{6} \sigma_0^2 \right).$$

Зважаючи на записані вище вирази (8.12)–(8.14), знаходимо явний вигляд виразу для критичної амплітуди $\sigma_{00}^{(+)}$ із (8.10):

$$\sigma_{00}^{(+)} = e_0 \left(1 + \frac{1}{5} \frac{\alpha^2}{1 + \alpha^2} \right) + e_{00} \frac{\alpha}{(1 + \alpha^2)^{1/2}} + e_{02}, \quad (8.15)$$

де для коефіцієнта e_{02} маємо вираз

$$e_{02} = \frac{s_0^{d/2}}{h_0} (f \gamma_1 + q_s \sigma_0^2 (1 + q_e \sigma_0^2 / 12)).$$

Отже, критична амплітуда $\sigma_{00}^{(+)}$ не залежить ні від значення температури, ні від поля, а є функцією їхнього відношення

$$\alpha = \frac{\tilde{h}}{h_c} = \left(s_0^{3/2} / h_0 \right) \left(\frac{f_0}{c_{1k}} \right)^{p_0} \alpha_0,$$

де величина α_0 є відношенням вихідних значень h та τ із (2.26).

Таким чином, вигляд рівняння стану тривимірної ізінгоподібної системи за наявності поля описується виразом (8.10). На відміну від загальновідомих представлень цього рівняння, а також параметричного представлення [79], форма (8.10) має низку переваг. Назвемо його кросоверним рівнянням стану. Термін “кросовер” вживається тут з огляду на те, що вираз (8.10) дозволяє природним чином здійснювати перехід до випадків, коли одна із змінних (температура чи поле) є визначальною для опису поведінки параметра порядку.

Дослідимо поведінку скейлінгової функції кросоверного рівняння стану $\sigma_{00}^{(+)}$ при зміні температури та величини поля. Як відзначалося вище, ця величина залежить лише від параметра α . Однак, α є функцією мікроскопічних параметрів гамільтоніана, зокрема, залежить від величини s_0 , яка характеризує фур'є-образ потенціалу взаємодії (3.4). Тому природніше визначати залежність $\sigma_{00}^{(+)}$ від параметра α_0 із (2.26), який є відношенням приведенного поля $h = \beta \mathcal{H}$ та відносної температури $\tau = (T - T_c) / T_c$. Подібні залежності легко отримати із (8.11) для інших значень цих параметрів. Більш звичною є залежність критичної амплітуди $\sigma_{00}^{(+)}$ від змінної $z = \alpha_0^{-1/p_0}$ із (2.30).

Подібна змінна $x = \tau / M^{1/\beta}$ використовується в рівнянні стану (2.32), запропонованому Вайдомом. Величина x включає в себе параметр порядку $M^{(+)}$, який з точки зору мікроскопічного підходу має бути розрахований, а не введений “зверху”. Тому використання змінної z є більш природним, ніж змінної x , хоча при малих та від’ємних значеннях τ величини z та x еквівалентні. Графік залежності $\sigma_{00}^{(+)}$ від z наведений на рис. 8. Причому крива 1 описує ту ж залежність, яку наведено на рис. 7 (лише в інших координатах).

Крива 2 на рис. 8 відповідає критичній амплітуді $\sigma_{01}^{(+)}$ рівняння стану, записаного у вигляді

$$M^{(+)} = \sigma_{01}^{(+)} \tilde{h}^{\frac{1}{d+2}} + h, \quad (8.16)$$

де

$$\sigma_{01}^{(+)} = \sigma_{00}^{(+)} (1 + \alpha^{-2})^{\frac{1}{2(d+2)}}, \quad (8.17)$$

а крива 3 описує критичну амплітуду $\sigma_{02}^{(+)}$ для традиційного рівняння стану

$$M^{(+)} = \sigma_{02}^{(+)} h^{\frac{1}{d+2}} + h, \quad (8.18)$$

де

$$\sigma_{02}^{(+)} = \sigma_{01}^{(+)} \left(\frac{s_0^{3/2}}{h_0} \right)^{\frac{1}{d+2}}. \quad (8.19)$$

Використовуючи рівність $z = (\alpha_0)^{-1/p_0}$, маємо

$$\alpha = \left(\frac{s_0^{3/2}}{h_0} \right) \left(\frac{f_0}{c_{1k}} \right)^{p_0} z^{-p_0}.$$

Тоді залежність критичної амплітуди $\sigma_{01}^{(+)}$ від змінної z набуває вигляду

$$\sigma_{01}^{(+)} = \sigma_{00}^{(+)} \left(1 + h_0^2 s_0^{-3} (c_{1k}/f_0)^{2p_0} z^{2p_0} \right)^{\frac{1}{2(d+2)}}.$$

Очевидно, що для малих значень z величини критичних амплітуд $\sigma_{00}^{(+)}$ та $\sigma_{01}^{(+)}$ збігаються (як це видно із порівняння кривих 1 та 2 на рис. 8), і для цього діапазону області параметра z рівняння стану (8.10) переходить у більш звичну форму (2.35). Використовуючи малість параметра z , можна виконати розклади в ряд за його степенями ($z \ll 1$) та отримати відомі представлення для критичної амплітуди $\sigma_{01}^{(+)}$. Однак, у діапазоні $z \approx 1$ такі розклади несправедливі.

Формула (8.10) дозволяє, зокрема, описати поведінку параметра порядку для деяких граничних випадків. Одним із них є відсутність в системі зовнішнього поля ($h = 0$). Для цього випадку похідні величин γ_s та e_2 обертаються на нуль, а отже, $e_{02}(h = 0) = 0$, і маємо

$$\sigma_{00}(h = 0) = e_0.$$

Тоді із (8.10) отримуємо залежність

$$M^{(+)}(h = 0) = e_0 |\tilde{\tau}|^\beta,$$

де $\beta = \nu/2$. Коефіцієнт e_0 при $h = 0$ відмінний від нуля лише при $T < T_c$. Це пов'язано з тим, що $e_0 = \sigma_0 s^{-1/2}$, а σ_0 є розв'язком рівняння (6.8), яке для всіх $\tau > 0$ та $h = 0$ має лише нульовий дійсний розв'язок.

Іншим граничним випадком є $h \neq 0$ та $T = T_c$. Йому відповідає значення $\alpha \rightarrow \infty$. При цьому $H_c \rightarrow 0$, і

² Зауважимо, що для спрощення розрахунків у даній роботі використовується наближення, при якому $\eta = 0$ (η – критичний показник кореляційної функції).

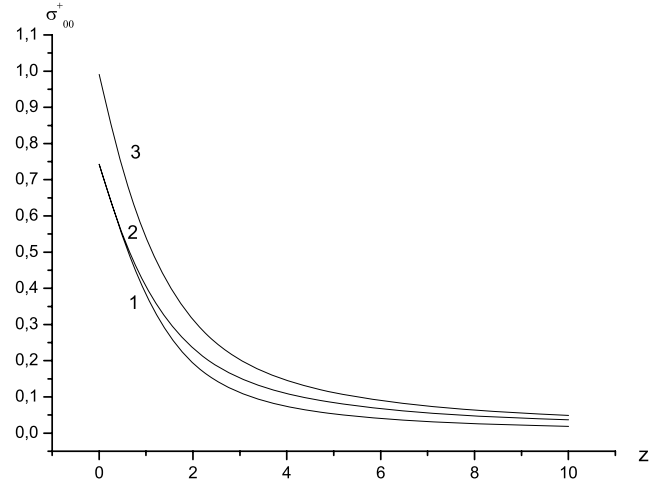


Рис. 8. Залежність від змінної z критичної амплітуди параметра порядку $\sigma_{00}^{(+)}$ рівняння стану (8.10) (крива 1), критичної амплітуди $\sigma_{01}^{(+)}$ спрощеного рівняння стану (8.16) (крива 2) та критичної амплітуди $\sigma_{02}^{(+)}$ нормованого рівняння стану (8.18) (крива 3)

величини r_{n_p+2} , u_{n_p+2} та x_{n_p+2} втрачають залежність від поля. Коефіцієнти σ_0 , e_0 та e_2 обертаються в деякі сталі величини. Параметр порядку $M^{(+)}$ із (8.10) при $T = T_c$ має вигляд

$$M = \tilde{h}^{1/5} \sigma_0(T_c) + h,$$

де

$$\sigma_0(T_c) = \frac{6}{5} \left(e_0 + (\gamma_s^{(+)} - e_2) s_0^{3/2} / h_0 \right).$$

Сприйнятливості системи знаходимо шляхом диференціювання (8.10) за полем. Отримуємо

$$\chi^{(+)} = \beta(1 + \chi_s^{(+)}), \quad (8.20)$$

де

$$\chi_s^{(+)} = (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{\frac{1}{2(d+2)}} \left(\frac{d\sigma_{00}^{(+)}}{dh} + \frac{1}{5} \sigma_{00} \frac{s_0^{3/2}}{h_0} \frac{\tilde{h}}{(\tilde{h}^2 + h_c^2)} \right). \quad (8.21)$$

При обчисленні похідної від $\sigma_{00}^{(+)}$ необхідно врахувати залежність величини σ_0 від поля. Цю похідну зручно зобразити у вигляді

$$\frac{d\sigma_{00}^{(+)}}{dh} = \chi_{01} (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{-1/2}, \quad (8.22)$$

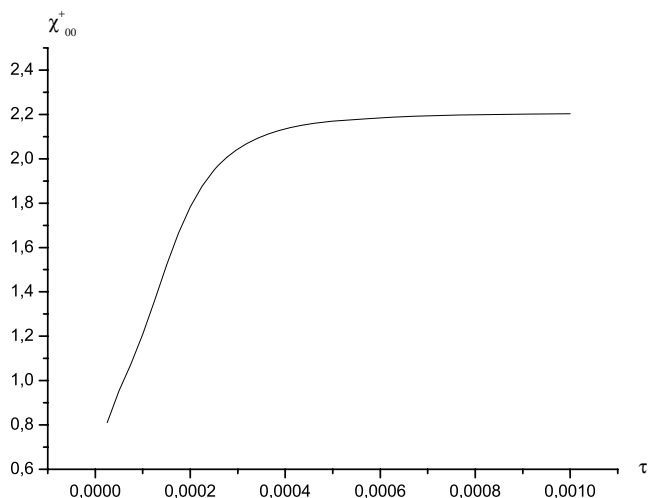


Рис. 9. Залежність критичної амплітуди сприйнятливості $\chi_{00}^{(+)}$ від відносної температури при значенні поля $h = 10^{-6}$

де

$$\chi_{01} = \chi_{011} + \chi_{012} + \chi_{013},$$

причому

$$\chi_{011} = \frac{2}{5} s_0^{3/2} h_0^{-1} (1 + \alpha^2)^{-1} \times$$

$$\times \left[e_0 \frac{\alpha}{(1 + \alpha^2)^{1/2}} + 3(\gamma_s^{(+)} - e_2) s_0^{3/2} h_0^{-1} \right],$$

$$\chi_{012} = (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{1/2} \left[\left(1 + \frac{1}{5} \frac{\alpha^2}{(1 + \alpha^2)} \right) \frac{de_0}{dh} + \right.$$

$$\left. + \frac{11}{5} \frac{s_0^{3/2}}{h_0} \frac{\alpha}{\sqrt{1 + \alpha^2}} \left(\frac{d\gamma_s^{(+)}}{dh} - \frac{de_2}{dh} \right) \right],$$

$$\chi_{013} = (\tilde{h}^2 + h_c^2) \left[\frac{d^2 \gamma_s^{(+)}}{dh'^2} - \frac{d^2 e_2}{dh'^2} \right]. \quad (8.23)$$

Очевидно, що коефіцієнт χ_{011} прямує до нуля у випадку росту h при фіксованому τ або у випадку зменшення τ при фіксованому значенні h , оскільки $\chi_{011} \sim (1 + \alpha^2)^{-1}$.

Беручи до уваги (8.22), знаходимо формулу для сприйнятливості:

$$\chi^{(+)} = \beta + \beta \chi_{00}^{(+)} (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{-\frac{d+1}{2(d+2)}}, \quad (8.24)$$

де

$$\chi_{00}^{(+)} = \chi_{01} + \frac{1}{5} \sigma_{00}^{(+)} s_0^{3/2} h_0^{-1} \frac{\alpha}{(1 + \alpha^2)^{1/2}}. \quad (8.25)$$

Температурну залежність величини критичної амплітуди сприйнятливості $\chi_{00}^{(+)}$ наведено на рис. 9.

Вираз для сприйнятливості (8.24) відрізняється від загальноновживаних виразів у роботах [79, 80]. Вважається, що сприйнятливість системи поблизу критичної точки має вигляд [80]:

$$\chi = h^{1/\delta-1} f_\chi(z), \quad (8.26)$$

де величина $f_\chi(z)$ є скейлінговою функцією сприйнятливості. Саме для такого вигляду χ досліджено залежність $f_\chi(z)$ від величини z . Вона (на відміну від $\chi_{00}^{(+)}$) досягає максимуму при значеннях $z \sim 1$. Для порівняння отриманого вище результату для сприйнятливості (8.24) зведемо його до вигляду (8.26). Для сингулярної частини сприйнятливості знаходимо

$$\chi^{(+)} = \beta \chi_{01}^{(+)} \tilde{h}^{-\frac{d+1}{d+2}}, \quad (8.27)$$

де

$$\chi_{01}^{(+)} = \chi_{00}^{(+)} (1 + \alpha^{-2})^{-\frac{d+1}{d+2}}. \quad (8.28)$$

Якщо в (8.27) величину \tilde{h} замінити на h відповідно до (4.25), отримуємо ще одне представлення для сприйнятливості системи:

$$\chi^{(+)} = \beta \chi_{02}^{(+)} (h)^{-\frac{d+1}{d+2}}, \quad (8.29)$$

де

$$\chi_{02}^{(+)} = \chi_{01}^{(+)} \left(h_0 / s_0^{3/2} \right)^{\frac{d+1}{d+2}}. \quad (8.30)$$

На рис. 10 наведено залежності величин $\chi_{01}^{(+)}$ (крива 2) та $\chi_{02}^{(+)}$ (крива 1) від аргументу z . Як бачимо, наявність максимуму критичної амплітуди сприйнятливості пов'язана із формою представлення самого виразу для неї.

Якщо абстрагуватися від термінології, пов'язаної із введенням критичних амплітуд та зобразити температурну залежність сприйнятливості, то отримуємо криву, зображену на рис. 11. Вона відповідає значенню $h = 10^{-6}$ та не залежить від форми представлення (8.24), (8.27) чи (8.29) і має максимум при деякій температурі $\tau \neq 0$, що відповідає $z \sim 1$.

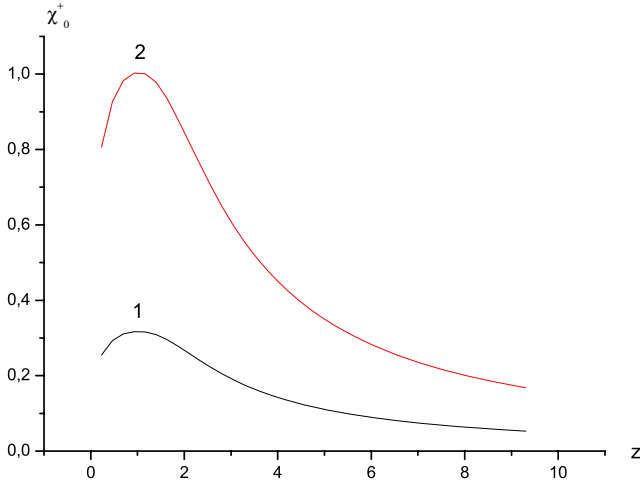


Рис. 10. Залежність від змінної z критичної амплітуди сприйнятливості $\chi^{(+)}$

Формула (8.24) спрощується для граничних випадків. Так, при $h = 0$ маємо

$$\chi^{(+)}(h = 0) = \beta \chi_{00}^{(+)}(h = 0) |\tilde{\tau}|^{-\gamma}. \quad (8.31)$$

Тут $\gamma = 2\nu$, а для критичної амплітуди $\chi_{00}(h = 0)$ знаходимо вираз

$$\chi_{00}^{(+)}(h = 0) = \frac{6}{5} s_0^3 h_0^{-2} (\gamma_s^{(+)} - e_2). \quad (8.32)$$

Зауважимо, що значення $\chi_{00}(h = 0)$ значно залежить від того, вище чи нижче температури фазового переходу знаходиться система. Для всіх $T > T_c$ (та $h = 0$) маємо $e_2 = 0$, однак, при $T < T_c$ $e_2 \neq 0$, і тому значення критичної амплітуди буде іншим для температур, вищих та нижчих від температури фазового переходу.

9. Розрахунок ентропії та теплоємності поблизу ТФП в зовнішньому полі при $T > T_c$

Використаємо вираз для вільної енергії (7.7) для розрахунку ентропії та теплоємності системи. Використаємо відоме співвідношення для ентропії

$$S^{(+)} = - \left(\frac{dF}{dT} \right)_h. \quad (9.1)$$

Відповідно до (7.7) зобразимо його у вигляді

$$S^{(+)} = S_a + S_c^{(+)} + S_0^{(+)}, \quad (9.2)$$

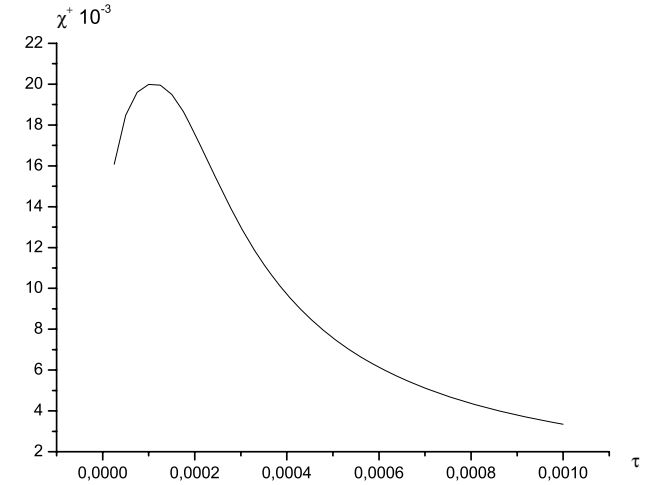


Рис. 11. Залежність від температури сприйнятливості системи

де S_a відповідає внеску аналітичних доданків:

$$S_a = - \left(\frac{dF_a}{dT} \right)_h,$$

S_s – відповідає внеску неаналітичних доданків вільної енергії:

$$S_s^{(+)} = - \left(\frac{dF_s^{(+)}}{dT} \right)_h, \quad (9.3)$$

а $S_0^{(+)}$ – внесок від макроскопічної частини змінної ρ_0 :

$$S_0^{(+)} = - \left(\frac{dF_0^{(+)}}{dT} \right)_h. \quad (9.4)$$

Подальші вирази для ентропії (теплоємності) будемо нормувати на число частинок N . Використовуючи вираз (7.2), із (9.3) знаходимо

$$S_a = k(\ln chh) + k(\gamma_0 + \gamma_1 + 2(\gamma_1 + \gamma_2)\tau). \quad (9.5)$$

Розглянемо внески до ентропії при температурах, вищих за T_c . Для $S_s^{(+)}$ отримуємо

$$S_s^{(+)} = k3\nu \frac{c_1 k}{f_0} \gamma_s^{(+)} \frac{|\tilde{\tau}|^{5\nu-1}}{(\tilde{h}^2 + h_c^2)^{2/5}} + k \frac{d\gamma_s^{(+)}}{d\tau} (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{\frac{d}{d+2}}, \quad (9.6)$$

де знехтувано малими внесками, які пропорційні до $(\tilde{h}^2 + h_c^2)^{3/5}$, а для $S_0^{(+)}$ маємо вираз

$$S_0^{(+)} = kh(\tilde{h}^2 + h_c^2)^{1/10} \left[\frac{de_0}{d\tau} + \frac{\nu}{2} \frac{c_{1k}}{f_0} e_0 \frac{|\tilde{\tau}|^{5\nu-1}}{(\tilde{h}^2 + h_c^2)} \right] - k(\tilde{h}^2 + h_c^2)^{3/5} \left[\frac{de_2}{d\tau} + 3\nu \frac{c_{1k}}{f_0} e_2 \frac{|\tilde{\tau}|^{5\nu-1}}{(\tilde{h}^2 + h_c^2)} \right]. \quad (9.7)$$

Залежність загального виразу для ентропії від температури та поля поблизу точки фазового переходу знаходимо із (9.2) із врахуванням виразів (9.5)–(9.7).

Зауважимо, що похідні по температурі величин e_0 та e_2 спрощуються, оскільки тут (як і у випадку розрахунку внеску до параметра порядку $M_0^{(+)}$) величина σ_0 вважається незалежною від температури. У цьому легко переконатися, розглянувши вираз

$$E_0 = h \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{\frac{1}{2(d+2)}} \frac{de_0}{d\tau} - \frac{de_2}{d\tau} \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{\frac{d}{d+2}}.$$

Звертаючись до виразу (6.30), знаходимо

$$E_0 = \frac{d\sigma_0}{d\tau} E_{0\sigma} - \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{\frac{d}{d+2}} E_{0t}, \quad (9.8)$$

де

$$E_{0\sigma} = s^{-3} \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{\frac{d}{d+2}} \left[s^{5/2} \frac{h}{(\tilde{h}^2 + h_c^2)^{1/2}} - \left(\sigma_0 r_{n_p+2} + \frac{1}{6} \sigma_0^3 u_{n_p+2} s_0^3 \right) \right],$$

$$E_{0t} = \frac{1}{2} \sigma_0^2 s^{-3} \left(\frac{dr_{n_p+2}}{d\tau} + \frac{1}{12} \sigma_0^2 s_0^3 \frac{du_{n_p+2}}{d\tau} \right). \quad (9.9)$$

Вираз $E_{0\sigma}$ обертається на нуль для довільних h та τ , оскільки збігається із рівнянням (6.8) для знаходження σ_0 . Тому

$$S_0^{(+)} = k(S_{01}^{(+)} + S_{02}^{(+)} + S_{03}^{(+)}), \quad (9.10)$$

де

$$S_{01}^{(+)} = e_0 h \frac{\nu}{2} \frac{c_{1k}}{f_0} |\tilde{\tau}|^{5\nu-1} (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{-9/10},$$

$$S_{02}^{(+)} = -e_2 3\nu \frac{c_{1k}}{f_0} |\tilde{\tau}|^{5\nu-1} (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{-2/5},$$

$$S_{03}^{(+)} = -E_{0t} (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{3/5}. \quad (9.11)$$

Величина E_{0t} може бути знайдена в явному вигляді. Використовуючи вираз (6.1), знаходимо

$$\frac{dr_{n_p+2}}{d\tau} = \beta\Phi(0)E_2 \frac{dH_c}{d\tau}, \quad \frac{du_{n_p+2}}{d\tau} = (\beta\Phi(0))^2 \varphi_0 \Phi_f E_2 \frac{dH_c}{d\tau}, \quad (9.12)$$

причому, відповідно до (4.18), маємо

$$\frac{dH_c}{d\tau} = \frac{c_{1k}}{f_0} \frac{\tilde{h}^2}{\tilde{h}^2 + h_c^2} \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{-1/2\rho_0}. \quad (9.13)$$

У результаті підстановки цих виразів у (9.9) знаходимо

$$S_{03}^{(+)} = -E_{0t0} \frac{\tilde{h}^2}{\tilde{h}^2 + h_c^2} \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{\frac{3\nu-1}{5\nu}}. \quad (9.14)$$

Підсумовуючи всі внески до ентропії, отримуємо загальний вираз

$$S^{(+)} = S_a + kS_1 \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{\frac{3\nu-1}{5\nu}} + kS_2 \frac{\tilde{\tau}^{5\nu-1}}{(\tilde{h}^2 + h_c^2)^{2/5}}. \quad (9.15)$$

Тут вираз для S_a наведений в (9.5), а для S_1 та S_2 маємо

$$S_1 = \gamma_{sd}^{(+)} - E_{0t0} \frac{\tilde{h}^2}{\tilde{h}^2 + h_c^2}, \quad S_2 = \frac{c_{1k}}{f_0} \left(3\nu \left(\gamma_s^{(+)} - e_2 \right) + e_0 \frac{\nu}{2} \frac{h}{(\tilde{h}^2 + h_c^2)^{1/2}} \right). \quad (9.16)$$

Для скорочення запису тут введено позначення

$$E_{0t0} = \frac{1}{2} \sigma_0^2 s^{-3} \beta\Phi(0)E_2 c_{1k} \left(1 + \frac{q_e \sigma_0^2}{12} \right), \quad \gamma_{sd}^{(+)} = \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{\frac{1}{5\nu}} \frac{d\gamma_s^{(+)}}{d\tau}. \quad (9.17)$$

У випадку $h = 0$ величина $\gamma_{sd}^{(+)} = \tilde{\tau} \frac{d\gamma_s^{(+)}}{d\tau}$ і прямує до сталої величини при $\tau \rightarrow 0$. Вираз (9.15) відповідає діапазону температур $T \geq T_c$. Для діапазону значень $T \leq T_c$ можна отримати подібний вираз, використовуючи замість $F^{(+)}$ величину $F^{(-)}$ із [99].

Теплоємність системи $C^{(+)}$ будемо розраховувати, враховуючи формулу (9.15). Запишемо

$$C^{(+)} = C_a + C_1^{(+)} + C_2^{(+)}. \quad (9.18)$$

Тут

$$C_a = 2k(\gamma_1 + \gamma_2), \quad (9.19)$$

а для внесків $C_n^{(+)}$ маємо вирази

$$C_1^{(+)} = kT \frac{d}{dT} \left[S_1 \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{\frac{3\nu-1}{5\nu}} \right],$$

$$C_2^{(+)} = kT \frac{d}{dT} \left[S_2 \tilde{\tau}^{5\nu-1} \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{-2/5} \right]. \quad (9.20)$$

Легко переконатися, що

$$C_1^{(+)} = k \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{-\frac{\alpha}{5\nu}} \left[S_{1t} + (3\nu - 1) S_1 \frac{c_{1k}}{f_0} \tau_T \right], \quad (9.21)$$

де $\alpha = 2 - 3\nu$, а S_{1t} має вигляд

$$S_{1t} = \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{\frac{1}{5\nu}} \frac{dS_1}{d\tau}. \quad (9.22)$$

Використовуючи явний вираз для S_1 із (9.16), знаходимо

$$S_{1t} = \frac{c_{1k}}{f_0} \tau_T \left(\gamma_{sd}^{(+)} + 5\nu E_{0t0} \frac{\tilde{h}^2}{\tilde{h}^2 + h_c^2} \right) -$$

$$- c_{1k} \sigma_0 s^{-3} \beta \Phi(0) E_2 \left(1 + \sigma_0^2 q_e / 6 \right) \sigma_{0d} \frac{\tilde{h}^2}{\tilde{h}^2 + h_c^2} + \gamma_{sdd}^{(+)}. \quad (9.23)$$

Тут введено позначення

$$\tau_T = \left(\frac{\tilde{\tau}}{(\tilde{h}^2 + h_c^2)^{1/5\nu}} \right)^{5\nu-1},$$

$$\sigma_{0d} = (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{1/5\nu} \frac{d\sigma_0}{d\tau},$$

$$\gamma_{sdd}^{(+)} = (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{2/5\nu} \frac{d^2 \gamma_s^{(+)}}{d\tau^2}. \quad (9.24)$$

Розрахунок похідної за температурою від величини σ_0 виконується із тієї ж рівності, з якої розраховувалася вище похідна за полем. У результаті такого розрахунку знаходимо

$$\sigma_{0d} = - \frac{c_{1k}}{f_0} \frac{\sigma_0}{r_R} \beta \Phi(0) f_0 E_2 \left(1 + \sigma_0^2 q_e / 6 \right) \frac{\tilde{h}^2}{\tilde{h}^2 + h_c^2} -$$

$$- \frac{c_{1k}}{f_0} \frac{5\nu}{2} \frac{s^{5/2}}{r_R} \tau_T \frac{h}{(\tilde{h}^2 + h_c^2)^{1/2}}. \quad (9.25)$$

Беручи до уваги наведені вище рівності, знаходимо внесок до теплоємності $C_1^{(+)}$. Він має вигляд

$$C_1^{(+)} = k C_{11} \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{-\frac{\alpha}{5\nu}}, \quad (9.26)$$

де

$$C_{11} = \frac{c_{1k}}{f_0} \left[3\nu \tau_T \gamma_{sd}^{(+)} + (2\nu + 1) \tau_T E_{0t0} \frac{\tilde{h}^2}{\tilde{h}^2 + h_c^2} - \right.$$

$$\left. - \sigma_{02} \sigma_{0d} \frac{\tilde{h}^2}{\tilde{h}^2 + h_c^2} + \frac{f_0}{c_{1k}} \gamma_{sdd}^{(+)} \right]. \quad (9.27)$$

Тут

$$\sigma_{02} = \sigma_0 s^{-3} f_0 \beta \Phi(0) E_2 \left(1 + \sigma_0^2 q_e / 6 \right).$$

Внесок до теплоємності $C_2^{(+)}$ із (9.18) має вигляд

$$C_2^{(+)} = k C_{21} \frac{\tilde{\tau}^{5\nu-1}}{(\tilde{h}^2 + h_c^2)^{(2\nu+1)/5\nu}} + k C_{22} \frac{\tilde{\tau}^{5\nu-2}}{(\tilde{h}^2 + h_c^2)^{2/5}}. \quad (9.28)$$

Для коефіцієнтів C_{2n} маємо:

$$C_{21} = \frac{c_{1k}}{f_0} 3\nu \left(\gamma_{sd}^{(+)} - e_{2d} \right) +$$

$$+ \frac{h}{(\tilde{h}^2 + h_c^2)^{1/2}} \left(\frac{\nu}{2} e_{0d} - \frac{c_{1k}}{f_0} \frac{5\nu^2}{4} e_0 \tau_T \right),$$

$$C_{22} = \left(\frac{c_{1k}}{f_0} \right)^2 \left(5\nu - 1 - 2\nu \frac{h_c^2}{\tilde{h}^2 + h_c^2} \right) \times$$

$$\times \left(3\nu \left(\gamma_s^{(+)} - e_2 \right) + \frac{\nu}{2} e_0 \frac{h}{(\tilde{h}^2 + h_c^2)^{1/2}} \right). \quad (9.29)$$

Тут введено позначення

$$e_{2d} = \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{\frac{1}{5\nu}} \frac{de_2}{d\tau}. \quad (9.30)$$

Таким чином, вирази (9.26) та (9.28) описують поведінку теплоємності системи поблизу точки фазового переходу за наявності зовнішнього поля.

При умові $h \rightarrow 0$ вирази (9.20) можна спростити. Для першого з них маємо

$$C_1^{(+)}(h=0) = |\tilde{\tau}|^{-\alpha} C_{1\tau}, \quad (9.31)$$

де $C_{1\tau} = C_{11}(h=0)$ має вигляд

$$C_{1\tau} = k \frac{c_{1k}}{f_0} 3\nu \gamma_{sd}^{(+)} + k \gamma_{sdd}^{(+)}.$$

Для $C_2^{(+)}$ при $h=0$ знаходимо

$$C_2^{(+)}(h=0) = C_{2\tau} |\tilde{\tau}|^{-\alpha}, \quad (9.32)$$

де

$$C_{2\tau} = \frac{c_{1k}}{f_0} 3\nu \left(\gamma_{sd}^{(+)} - e_{2d} \right) + \left(\frac{c_{1k}}{f_0} \right)^2 (3\nu - 1) \left[3\nu \left(\gamma_3^{(+)} - e_2 \right) \right].$$

У границі $\tau \rightarrow 0$ теплоємність залежить від поля. Вираз для $C_2^{(+)}$ при $\tau=0$ дорівнює нулеві. Для $C_1^{(+)}$ маємо

$$C_1^{(+)}(\tau=0) = \tilde{h}^{-\varphi} C_{1h}.$$

Тут

$$C_{1h} = k \frac{c_{1k}}{f_0} \left[-\sigma_{02} \sigma_{0d} + \frac{f_0}{c_{1k}} \gamma_{sdd}^{(+)} \right].$$

Тому поведінка теплоємності при $T = T_c$ має певну особливість з критичним показником:

$$\varphi = \frac{\alpha}{\delta\beta},$$

де у використаному нами наближенні $\alpha = 2 - d\nu$, $\delta = (d+2)$ та $\beta = \nu/2$.

10. Висновки

Запропонований у роботі метод опису критичної поведінки $3D$ ізінгоподібної моделі дозволяє отримувати явні вирази для таких спостережуваних величин, як намагніченість, сприйнятливість, теплоємність тощо. Розрахунки не передбачають введення феноменологічних параметрів. Завдяки використанню негаусових розподілів параметра порядку вперше отримано загальний вираз для вільної енергії системи поблизу ТФП за наявності поля, який справедливий при будь-яких значеннях останнього.

Показано, що під час розрахунку вільної енергії системи поблизу точки фазового переходу до уваги слід брати наявність двох різних за своєю природою флуктуаційних областей. Перша з них формується модами флуктуацій параметра порядку, довжина хвилі яких не перевищує кореляційної довжини системи при заданих температурі та зовнішньому полі. У цій флуктуаційній області має місце ренормгрупова симетрія. Вона є відповідальною за формування (некласичних) значень критичних показників.

Друга флуктуаційна область формується флуктуаціями, довжина хвилі яких перевищує кореляційну довжину. Вона характеризується гаусовим розподілом флуктуацій і не впливає на значення критичних показників. Кожна зі згаданих вище флуктуаційних областей дає відповідний внесок до вільної енергії системи.

Розрахунок виразу для вільної енергії включає також наявність внеску від перехідної області F_{TR} (між областями КР та ГР), а також внеску F_0 від макроскопічної частини середнього значення змінної, пов'язаної з параметром порядку. Внесок F_{TR} формується флуктуаціями параметра, сумірними з кореляційною довжиною, і вводиться виключно для зручності розрахунку. Внесок F_0 є одним із визначальних при описі критичної поведінки системи. Він є, по суті, мікроскопічним аналогом вільної енергії Ландау і дозволяє якісно описати всі характеристики системи поблизу точки фазового переходу. Це є певний варіант розкладу вільної енергії системи за степенями параметра порядку, причому коефіцієнти цього розкладу як функції температури та поля також формуються в областях КР та ТР.

Результати проведених розрахунків дозволяють зробити певні висновки щодо величин ренормгрупового параметра s . Зрозуміло, що $s > 1$. При отриманні виразу (2.25) із (2.23) вважається, що $s = s_\tau$, де $s_\tau = |\tau|^{-\nu}$. Тому під час наближення T до T_c величина s_τ набуває великих значень. Подібну ситуацію визначено при отриманні (2.29), де $s = s_h$, причому $s_h = h^{-\mu}$. Під час зменшення величини поля значення s_h аномально росте. Таким чином, скейлінгові форми виразу для вільної енергії (2.25) чи (2.29) передбачають використання аномально великого значення ренормгрупового параметра s . Із точки зору гіпотези універсальності Каданова величина s може набувати довільних значень ($s > 1$), і в даному випадку маємо справу з однократним укрупненням початкової ґратки з періодом c до блочної ґратки з періодом $c_p = c s_p$, де параметр s_p набуває значення s_τ або s_h . Ідея даної роботи полягає в тому, що ве-

личина $s_p = s^{n_p}$, де s є скінченне число ($s = 2; 3; 4$), однак, величина n_p зростає по мірі наближення до точки фазового переходу. Вона означає число ітерацій при поетапному укрупненні блочних структур і залежить від температури та поля. Замість однократного укрупнення ґратки з метою отримання із (2.23) виразів (2.25) та (2.29) пропонується багатократне (n_p -кратне) укрупнення вихідної ґратки з наперед заданим скінченим параметром s . У ході такого укрупнення виникають рекурентні співвідношення, які дозволяють розрахувати значення критичних показників. Саме такий підхід дозволяє вирішити парадоксальну ситуацію, яка спостерігається при використанні диференціальної форми ренормгрупи. Тут вважається, що параметр $s \rightarrow 1$, з іншого боку, вирази (2.25) та (2.29) вимагають, щоб параметр s (s_h або s_t) прямував до безмежності поблизу точки фазового переходу. Проблема знімається, якщо при отриманні цих виразів в ролі параметра s використовувати величину s_p , а вираз (2.23) замінити на

$$f_s(\tau, h) = s^{-dn_p} f_s(s^{y_t n_p} \tau, s^{y_h n_p} h).$$

У даній роботі отримано явну функціональну залежність сингулярної частини вільної енергії від температури та поля. Вона складається із виразів (7.5) та (7.8), які є узагальненням формул (2.25) та (2.29). В області малих чи великих значень поля вираз (7.7) є еквівалентним до скейлінгових форм (2.25) та (2.29) відповідно. Однак, в області проміжних значень поля ($z \approx 1$) наближені представлення перестають описувати поведінку системи. Тут спостерігається більш загальна форма залежності від температури та поля.

1. Р. Браут, *Фазовые переходы* (Мир, Москва, 1967), 288 с.
2. М. Фишер, *Природа критического состояния* (Мир, Москва, 1968), 222 с.
3. Г. Стенли, *Фазовые переходы и критические явления* (Мир, Москва, 1973), 419 с.
4. Ш. Ма, *Современная теория критических явлений* (Мир, Москва, 1980), 298 с.
5. И.Р. Юхновский, *Фазовые переходы второго рода. Метод коллективных переменных* (Наук. думка, Киев, 1985), 224 с.
6. Ю.А. Изюмов, В.Н. Сыромятников, *Фазовые переходы и симметрия кристаллов* (Наука, Москва, 1984), 248 с.
7. С. Domb, *The critical point* (Taylor & Francis, London, 1996), 376 p.
8. І.Р. Юхновський, М.П. Козловський, І.В. Пилюк, *Мікроскопічна теорія фазових переходів у тривимірних системах* (Євросвіт, Львів, 2001), 592 с.
9. W.P. Wolf, *Braz. J. of Phys.* **30**, 794 (2000).
10. Н.Н. Боголюбов, Д.В. Широков, *Введение в теорию квантованных полей* (Наука, Москва, 1984), 597 с.
11. D.J. Amit, *Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena* (World Scientific, Singapore, 1984), 392 p.
12. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Статистическая физика* (Наука, Москва, 1976), 584 с.
13. Р. Блинц, Б. Жекш, *Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики* (Мир, Москва, 1975), 400 с.
14. М. Лайнс, А. Гласс, *Сегнетоэлектрики и родственные им материалы* (Мир, Москва, 1981), 735 с.
15. В. Widom, *J. Chem. Phys.* **43**, 3898 (1965).
16. С. Domb and D.L. Hunter, *Proc. Phys. Soc.* **86**, 1147 (1965).
17. L.P. Kadanoff, *Physics.* **2**, 263 (1966).
18. А.В. Паташинский, В.Л. Покровский, *ЖЭТФ* **50**, 439 (1966).
19. И.Р. Юхновский, *ДАН СССР* **232**, 312 (1977).
20. И.Р. Юхновский, Ю.К. Рудаковский, *УФЖ* **22**, 50 (1977).
21. И.Р. Юхновский, М.П. Козловский, *УФЖ* **22**, 1125 (1977).
22. И.Р. Юхновский, *ТМФ* **36**, 373 (1978).
23. И.Р. Юхновский, М.П. Козловский, *ДАН СССР* **236**, 846 (1977).
24. И.Р. Юхновский, М.П. Козловский, В.А. Коломиец, *УФЖ* **27**, 1399 (1982).
25. I.R. Yukhnovskii, *Riv. Nuovo Cim.* **12**, 1 (1989).
26. М.П. Козловский, *ТМФ* **78**, 422 (1989).
27. Z.E. Usatenko and M.P. Kozlovskii, *Phys. Rev. B* **62**, 9599 (2000).
28. I.R. Yukhnovskii, M.P. Kozlovskii, and I.V. Pylyuk, *Phys. Rev. B* **66**, 134410 (2002).
29. M.P. Kozlovskii, *Condens. Matter Phys.* **8**, 473 (2005).
30. M.P. Kozlovskii, *Ferroelectrics.* **317**, 25 (2005).
31. M.P. Kozlovskii, I.V. Pylyuk, and O.O. Prytula, *Phys. Rev. B* **73**, 174406 (2006).
32. M.P. Kozlovskii, I.V. Pylyuk, and O.O. Prytula, *Physica A* **369**, 562 (2006).
33. M.P. Kozlovskii, I.V. Pylyuk, and O.O. Prytula, *Nucl. Phys. B* **753**, 242 (2006).
34. M.P. Kozlovskii, I.V. Pylyuk, and O.O. Prytula, *Ferroelectrics.* **317**, 43 (2005).
35. M.P. Kozlovskii, *Phase Transitions* **80**, 3 (2007).

36. M.P. Kozlovskii, *Condens. Matter Phys.* **10**, 173 (2007).
37. I.V. Pylyuk, *Phase Transitions* **80**, 11 (2007).
38. М.П. Козловський, *Вплив зовнішнього поля на критичну поведінку тривимірного магнетика. I. Рекурентні співвідношення* (Препринт ІФКС НАН України, ІСМР-02-31U, Львів 2002), 43 с.
39. М.П. Козловський, *Вплив зовнішнього поля на критичну поведінку тривимірного магнетика. II. Вільна енергія для випадку $T = T_c$* (Препринт ІФКС НАН України, ІСМР-02-32U, Львів 2002), 26 с.
40. М.П. Козловський, *Вплив зовнішнього поля на критичну поведінку тривимірного магнетика. III. Вільна енергія для випадку граничного значення поля* (Препринт ІФКС НАН України, ІСМР-03-13U, Львів 2003), 35 с.
41. М.П. Козловський, П.Р. Козак, *Використання методу колективних змінних для опису критичних властивостей 3D спінової системи в присутності зовнішнього поля* (Препринт ІФКС НАН України, ІСМР-08-07U, Львів 2008), 37 с.
42. М.П. Козловський, *Аналітичний метод опису критичних властивостей 3D ізінгоподібної моделі в зовнішньому полі* (Препринт ІФКС НАН України, ІСМР-08-10U, Львів 2008), 85 с.
43. В.Л. Гинзбург, *ФТТ* **2**, 2031 (1960).
44. В.Г. Вакс, А.И. Ларкин, *ЖЭТФ* **49**, 975 (1965).
45. H.E. Stanley, *Phys. Rev.* **176**, 718 (1968).
46. T.H. Berlin and M. Cas, *Phys. Rev.* **86**, 821 (1952).
47. K.G. Wilson and M.E. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 240 (1972).
48. K.G. Wilson, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 548 (1972).
49. К. Вильсон, Дж. Когут, *Ренормализационная группа и ϵ -разложение* (Мир, Москва, 1975), 256 с.
50. E. Brezin, J.C. Le Guillou, J. Zinn-Justin, and B.G. Nickel, *Phys. Lett. A* **44**, 227 (1973).
51. S.G. Gorishny, S.A. Larin, and F.V. Tkachov, *Phys. Lett. A* **101**, 120 (1984).
52. J.C. Le Guillou and J. Zinn-Justin, *J. Phys. Lett (Fr.)* **46**, L137 (1985).
53. В.С. Доценко, *УФН* **165**, 481 (1995).
54. Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский, *УФН* **173**, 175 (2003).
55. Г.М. Авдеева, А.А. Мигдал, *Письма в ЖЭТФ* **16**, 253 (1972).
56. E. Bresin, D.J. Wallace, and K.G. Wilson, *Phys. Rev. Lett.* **29**, 591 (1972).
57. E. Bresin, D.J. Wallace, and K.G. Wilson, *Phys. Rev. B* **7**, 232 (1973).
58. M.-C. Chang and A. Houghton, *Phys. Rev. B* **21**, 1881 (1980).
59. K. Symanzik, *Lett. Nuovo Cim.* **8**, 771 (1973).
60. G. Parisi, *J. Stat. Phys.* **23**, 49 (1980).
61. G.A. Baker, B.G. Nickel, and D.I. Mairon, *Phys. Rev. B* **17**, 1365 (1978).
62. J.C. Le Guillou and J. Zinn-Justin, *Phys. Rev. B* **21**, 3976 (1980).
63. K.G. Wilson, *Phys. Rev. D* **6**, 419 (1971).
64. F.J. Wegner and A. Houghton, *Phys. Rev. A* **8**, 401 (1973).
65. C. Wetterich, *Nucl. Phys. B* **352**, 529 (1991).
66. J.F. Nicoll and T.S. Chang, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 540 (1974).
67. J.F. Nicoll, T.S. Chang, and H.E. Stanley, *Phys. Rev. A* **13**, 1251 (1976).
68. A. Margaritis, G. Oder, and A. Patkos, *Z. Phys. C* **39**, 109 (1988).
69. N. Tetradis and C. Wetterich, *Nucl. Phys. B* **422**, 541 (1994).
70. M.M. Tsyypin, *Nucl. Phys. B* **636**, 601 (2002).
71. C. Bagnuls and C. Bervillier, *Phys. Rept.* **348**, 91 (2001).
72. J. Berges, N. Tetradis, and C. Wetterich, *Phys. Rept.* **363**, 223 (2002).
73. M. Campostrini, A. Pelissetto, P. Rossi, and E. Vicari, *Phys. Rev. E* **60**, 3526 (1999).
74. P. Butera and M. Comi, *Phys. Rev. B* **60**, 6749 (1999).
75. S.J. Knak Jensen and O.G. Mouristen, *J. Phys. A* **15**, 2631 (1982).
76. A.M. Ferrenberg and D.P. Landau, *Phys. Rev. B* **44**, 5081 (1991).
77. R. Guida and J. Zinn-Justin, *J. Phys. A* **31**, 8102 (1998).
78. M. Hasenbusch, *J. Phys. A* **32**, 4851 (1995).
79. R. Guida and J. Zinn-Justin, *Nucl. Phys. B* **489**, 626 (1977).
80. J. Engels, L. Fromme, and M. Seniuch, *Nucl. Phys. B* **655**, 277 (2003).
81. B.J. Widom, *Chem. Phys.* **43**, 3898 (1956).
82. D.L. Domb C., Hunter, *Proc. Phys. Soc.* **86**, 1147 (1965).
83. R.B. Griffiths, *Phys. Rev.* **158**, 176 (1967).
84. J. Zinn-Justin, *Phys. Rept.* **344**, 159 (2001).
85. P. Schofield, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 606 (1969).
86. I.R. Yukhnovskii, *Physica A* **168**, 999 (1990).
87. O.V. Patsahan, *Physica A* **272**, 358 (1999).

88. И.Р. Юхновский, З.А. Гурский, *Квантово-статистическая теория неупорядоченных систем* (Наукова думка, Киев, 1991), 288 с.
89. Н.А. Кориневский, Изв. АН СССР. Сер. физ. **5**, 420 (1991).
90. L.P. Kadanoff, Rev. Mod. Phys. **39**, 395 (1967).
91. K.G. Wilson, Phys. Rev. B **4**, 3174 (1971).
92. S.Y. Zinn and M.E. Fisher, Physica A **226**, 168 (1996).
93. М.Р. Kozlovskii, I.V. Pylyuk, O.O. Prytula, Condens. Matter Phys. **7**, 361 (2004).
94. M. Tachibana, J. Yamazaki, H. Kawaji, and T. Atake, Phys. Rev. B **72**, 064434 (2005).
95. A.G. Gamzatov, A.M. Aliev, K.Sh. Khizriev *et al.*, Physica B **390**, 155 (2007).
96. А.Г. Гамзатов, К.Ш. Хизриев, А.Б. Батдалов и др., Физика низких температур **35**, 284 (2009).
97. Häggkvist R., A. Rosengren, P.H. Lundow *et al.*, Advances in Physics **56**, 653 (2007).
98. Z.-D. Zhang, Phil. Magazine **87**, 5309 (2007).
99. М.Р. Kozlovskii, R.V. Romanik, *The equation of state 3D Ising-like system* (Препринт ІФКС НАН України, ІСМР-09-07Е, Львів, 2009), 24 с.
100. M. Barmatz, I. Hahn, J.A. Lipa, and R.V. Duncan, Rev. of Mod. Phys. **79**, 1 (2007).
101. М.Р. Kozlovskii, Condens. Matter Phys. **12**, 202 (2009).

Одержано 02.06.09

ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО ПОЛЯ НА ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД ВТОРОГО РОДА: МЕТОД ОПИСАНИЯ КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ СИСТЕМ

М.П. Козловский

Резюме

Выполнен краткий обзор современного состояния по изучению поведения основных характеристик моделей вблизи точки фазового перехода второго рода. Приведены методы теоретического описания их критического поведения. Среди них – метод молекулярного поля, теория Ландау, метод ренорма-

лизационной группы и др. Основная часть работы посвящена изложению аналитического метода описания критического поведения 3D изингоподобной системы во внешнем поле. Он является развитием теории фазовых переходов, предложенной И.Р. Юхновским с использованием метода коллективных переменных. Обобщение посвящено изучению влияния внешнего поля на поведение таких физических характеристик, как параметр порядка, восприимчивость, теплоемкость и др. В рамках упрощенной модели произведен расчет как значений критических показателей, так и критических амплитуд ряда физических величин. Предложена обобщенная форма записи скейлинговой формы свободной энергии системы вблизи точки фазового перехода. Получено кроссоверное уравнение состояния, которое содержит явную зависимость параметра порядка от относительной температуры и внешнего поля.

INFLUENCE OF AN EXTERNAL FIELD ON THE SECOND ORDER PHASE TRANSITION: METHOD FOR DESCRIPTION OF THE CRITICAL BEHAVIOR OF 3D SYSTEMS

M.P. Kozlovskii

Institute of Condensed Matter Physics,
Nat. Acad. of Sci of Ukraine
(1, Svetsits'kyi Str., Lviv 76011; e-mail: mpk@ph.icmp.lviv.ua)

Summary

The review of modern researches of the behavior of systems near the second-order phase transition point is given. The methods a the theoretical description of their critical behavior are presented. For instance, the mean-field method, the Landau theory, the renormalization group method, *etc.* are considered. The main part of the work is devoted to the presentation of an analytic method describing the critical behavior of the 3D Ising model in the external field. It is the continuation of the phase transition theory proposed by I.R. Yukhnov's'kyi and uses the collective variables method. The generalization concerns with the external field influence on the behavior of such characteristics as the order parameter, susceptibility, heat capacity, *etc.* Within the frame of a simple model, the critical exponents and critical amplitudes for various physical quantities are evaluated. The general scaling form for the free energy near the phase transition point is suggested. The crossover equation of state is obtained. It represents the explicit dependence of the order parameter on the reduced temperature and the external field.