

# Описание критического поведения изинговского ферромагнетика в приближении модели $\rho^6$ с учетом конфлуентной поправки. I. Область выше точки фазового перехода

И. В. Пылюк

*Институт физики конденсированных систем НАН Украины, Украина, 290011, г. Львов, ул. Свенцицкого, 1  
E-mail: piv@icmp.lviv.ua*

Статья поступила в редакцию 15 декабря 1998 г., после переработки 9 июня 1999 г.

Изучено поведение трехмерной изинговской системы при температурах выше  $T_c$  в приближении шестерного распределения мод колебаний спиновой плотности (модель  $\rho^6$ ). В рамках этого высшего негауссова приближения развит оригинальный метод расчета термодинамических характеристик трехмерной модели Изинга вблизи  $T_c$  с учетом первой конфлуентной поправки. Отдельно рассмотрены вклады в термодинамические функции изинговского ферромагнетика (свободную энергию, энтропию, внутреннюю энергию, теплоемкость) коротковолновых и длинноволновых мод колебаний плотности спинового момента. В выражениях для основных критических амплитуд и амплитуд конфлуентной поправки выделен неуниверсальный множитель, зависящий от микроскопических параметров системы. Численные оценки размера критической области, температуры фазового перехода, ведущих критических амплитуд и амплитуд поправки к скейлингу теплоемкости и восприимчивости системы приводятся для различных значений радиуса эффективного действия экспоненциально убывающего потенциала взаимодействия.

Вивчено поведінку тривимірної ізінгівської системи при температурах вищих від  $T_c$  в наближенні шестирного розподілу мод коливань спінової густини (модель  $\rho^6$ ). В рамках цього вищого негаусова наближення розвито оригінальний метод розрахунку термодинамічних характеристик тривимірної моделі Ізинга поблизу  $T_c$  з врахуванням першої конфлуентної поправки. Окремо розглянуто внески в термодинамічні функції ізінгівського феромагнетика (вільну енергію, ентропію, внутрішню енергію, теплоємність) короткохвильових та довгохвильових мод коливань густини спінового моменту. У виразах для основних критичних амплітуд та амплітуд конфлуентної поправки виділено неуніверсальний множник, який залежить від мікроскопічних параметрів системи. Чисельні оцінки розміру критичної області, температури фазового переходу, ведучих критичних амплітуд та амплітуд поправки до скейлінгу теплоємності і сприйнятливості системи приводяться для різних значень радіуса ефективно дії експоненціально спадного потенціалу взаємодії.

PACS: 05.50.+q, 05.70.Ce, 64.60.Fr, 75.10.Nk

## Введение

Проблема описания фазовых переходов и критических явлений, построения микроскопической теории фазовых переходов относится к одной из фундаментальных проблем физики. Она включает в себя довольно широкий круг вопросов, связанных с исследованием таких физических систем, как жидкости, ферромагнетики и сегнетоэлектрики, бинарные сплавы, полимеры, жидкие кристаллы и др. Явления фазовых переходов проникают в область физики низких температур,

физики твердого тела, физической химии, металлургии, биологии. Они находят широкое применение в технике. Исключительное значение для современной технологии, сложность явлений вблизи точки фазового перехода, трудности теоретического описания и экспериментального исследования этих явлений, связанные с возрастанием роли крупномасштабных флуктуаций, большими временами релаксации, вызывают постоянный научный интерес к указанной проблеме и стимулируют ее дальнейшее изучение.

В результате широких и интенсивных исследований фазовых переходов в последнее время были сформулированы новые концепции, связанные с пониманием сути критических явлений, создан мощный математический аппарат их описания. Вышеуказанной проблеме посвящен целый ряд монографий, обзорных статей. В большинстве работ по теории фазовых переходов основное внимание уделялось определению класса универсальности систем, исследованию симметричных свойств безотносительно к параметрам исходного гамильтониана, типов решений рекуррентных соотношений (РС) и вычислению значений критических показателей. Получены важные экспериментальные результаты. Рассчитаны универсальные отношения и комбинации критических амплитуд термодинамических характеристик спиновых систем, в частности трехмерной модели Изинга, являющейся одной из ключевых моделей фазового перехода. Проблема зависимости самих же критических амплитуд от микроскопических параметров системы требовала последовательного изучения и могла быть успешно разрешена вместе с решением основного вопроса теории фазовых переходов — получением явных выражений термодинамических характеристик системы вблизи точки фазового перехода как функций температуры и микроскопических параметров. Существенный прогресс в решении этой проблемы был достигнут методом коллективных переменных (КП), обобщенным И. Р. Юхновским [1–4] на случай спиновых систем. Коллективные переменные — это собирательное название особого класса переменных, специфических для каждой отдельной физической системы. Множество КП содержит переменные, связанные с параметрами порядка. Благодаря этому фазовое пространство КП является наиболее естественным для описания фазового перехода. Для магнитных систем КП  $\rho_k$  — это переменные, связанные с модами колебаний плотности спинового момента, а с параметром порядка связана переменная  $\rho_0$ , индекс 0 которой отвечает максимуму фурье-образа потенциала взаимодействия.

Настоящая статья посвящена статистическому описанию методом КП основных свойств трехмерного изинговского ферромагнетика с учетом микроскопических параметров системы. Полученные в работе результаты могут найти применение при интерпретации экспериментальных данных по изучению поведения реальных веществ вблизи точки фазового перехода второго рода, а предложенная методика расчета термодинамических характеристик может быть использована для вычисления

их термодинамических функций в критической области. Разработанная в данной работе оригинальная методика расчета для однокомпонентной спиновой системы может быть обобщена на случай системы с  $n$ -компонентным параметром порядка (см., например, [3]). Такая  $n$ -компонентная модель при  $n = 2$  полезна при описании бозе-жидкости (фазового перехода в жидком  $^4\text{He}$ ), плоского ротатора.

## 1. Основные положения

Рассматривается трехмерная модель Изинга на простой кубической решетке с периодом  $c$ . Гамильтониан модели имеет вид

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{j,l} \Phi(|j-l|) \sigma_j \sigma_l, \quad (1)$$

где  $\Phi(|j-l|)$  — потенциал взаимодействия частиц, находящихся в узлах  $j$  и  $l$ ;  $\sigma_j$  — оператор  $z$ -компоненты спина в  $j$ -ом узле, имеющий два собственных значения  $+1$  и  $-1$ . Потенциал взаимодействия представляется экспоненциально убывающей функцией

$$\Phi(r_{jl}) = A \exp\left(-\frac{r_{jl}}{b}\right). \quad (2)$$

Здесь  $A$  — постоянная,  $r_{jl}$  — расстояние между частицами,  $b$  — радиус эффективного взаимодействия. Для фурье-образа потенциала взаимодействия используется аппроксимация

$$\tilde{\Phi}(k) = \begin{cases} \tilde{\Phi}(0)(1 - 2b^2k^2), & k \leq B', \\ 0, & B' < k \leq B, \end{cases} \quad (3)$$

где  $B$  — граница полузоны Бриллюэна ( $B = \pi/c$ ),  $B' = (b\sqrt{2})^{-1}$ ,  $\tilde{\Phi}(0) = 8\pi A(b/c)^3$ .

В работе используется метод КП [3], позволяющий провести приближенный расчет выражения для статистической суммы, получить, кроме универсальных величин (критических показателей), полные выражения для термодинамических функций вблизи температуры фазового перехода  $T_c$ .

В представлении КП для статистической суммы трехмерной модели Изинга имеем

$$Z = \int \exp\left[\frac{1}{2} \sum_k \beta \tilde{\Phi}(k) \rho_k \rho_{-k}\right] J(\rho) (d\rho)^N. \quad (4)$$

Здесь суммирование по волновым векторам  $k$  производится в пределах первой зоны Бриллюэна;  $\beta = 1/(kT)$  — обратная термодинамическая температура; КП  $\rho_k$  вводятся с помощью соотношений

типа аналитического функционала для операторов мод колебаний спиновой плотности  $\hat{\rho}_{\mathbf{k}} = (\sqrt{N})^{-1} \sum_1 \sigma_1 \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{l})$ ;

$$J(\rho) = 2^N \int \exp \left[ 2\pi i \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} + \sum_{n=1}^{\infty} (2\pi i)^{2n} N^{1-n} \times \right. \\ \left. \times \frac{\mathcal{M}_{2n}}{(2n)!} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}} \omega_{\mathbf{k}_1} \dots \omega_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}} \right] (d\omega)^N \quad (5)$$

— якобиан перехода от множества  $N$  спиновых переменных  $\sigma_1$  к множеству КП  $\rho_{\mathbf{k}}$ ;  $\delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}}$  — символ Кронекера. Переменные  $\omega_{\mathbf{k}}$  сопряжены с  $\rho_{\mathbf{k}}$ , а кумулянты  $\mathcal{M}_{2n}$  принимают постоянные значения (см. [3]). Выражение для статистической суммы (4) вследствие присутствия в экспоненте (5) бесконечного числа слагаемых точно рассчитать нельзя. Поэтому используют приближения, связанные с ограничением числа слагаемых в экспоненте подынтегрального выражения (5). Определенная аппроксимация подынтегральной функции в выражении для  $J(\rho)$  при вычислении явного вида якобиана перехода определяет выбор модели (модель  $\rho^4$ ,  $\rho^6$  и т.д.). При  $n = 1$  получаем гауссово приближение. Оно приводит к классическим значениям критических показателей. Важным условием описания критических свойств модели Изинга является использование негауссовых плотностей мер. Простейшее приближение, позволяющее выйти за рамки классического поведения, соответствует  $n = 2$  и основывается на использовании четверной плотности меры (модель  $\rho^4$ ). Для него осуществлен расчет основных критических показателей термодинамических характеристик, полных выражений для этих характеристик с учетом конфлуентных поправок, проанализированы соотношения для критических амплитуд (см., например, [5–7]). Из-за приближенности расчета статистической суммы в связи с ограничением моделью  $\rho^4$  полученные результаты (критические показатели, амплитуды, термодинамические функции) содержат определенную зависимость от параметра ренормализационной группы (РГ)  $s$ . Данная зависимость существенно уменьшается в процессе усложнения формы негауссовой плотности меры (перехода к более сложным моделям  $\rho^6$  ( $n = 3$ , см. (5)),  $\rho^8$ ,  $\rho^{10}$ ). Об этом свидетельствуют исследование поведения критического показателя корреляционной длины  $\nu$  для моделей  $\rho^{2m}$  ( $m = 3, 4, 5$ ) [8–12], а также непосредственное сопоставление графиков температурных зависимостей термодинамических харак-

теристик, рассчитанных для моделей  $\rho^4$  и  $\rho^6$  при разных значениях параметра  $s$  [13,14]. Зависимость результатов вычислений от параметра  $s$  изучена и вполне контролируема. Для каждой из моделей  $\rho^{2m}$  существует выделенное значение параметра  $s = s^*$  ( $s^* = 3,5862$  для модели  $\rho^4$ ,  $s^* = 2,7349$  для модели  $\rho^6$ ,  $s^* = 2,6511$  для модели  $\rho^8$ ,  $s^* = 2,6108$  для модели  $\rho^{10}$ ), связанное с обращением в нуль в фиксированной точке среднего значения коэффициента при второй степени переменной эффективной плотности меры. Значения  $s$ , близкие к  $s^*$ , являются оптимальными для данной методики расчета. Разностная форма РС между коэффициентами эффективных негауссовых плотностей мер (разложения для входящих в эти соотношения функций) хорошо работает именно в этой области  $s$ . Для таких определенных способов деления фазового пространства КП на слои (значения  $s$ , близкие к  $s^*$ ) получаем достоверные результаты, согласующиеся с данными экспериментальных и теоретических исследований [3,13,14]. В настоящей статье результаты расчетов в приближении модели  $\rho^6$ , предусматривающей при интегрировании статистической суммы учет шестерной плотности меры, приводятся для значений  $s$ , равных 2; 2,7349; 3 (т.е. оптимальных для данного способа вычислений).

В приближении указанной модели  $\rho^6$  в [15] предложен новый метод расчета на микроскопическом уровне уравнения состояния трехмерной изинговской системы, которое и в последнее время вызывает большой научный интерес (см., например, [16], где уравнение состояния для систем класса универсальности трехмерной модели Изинга исследуется в рамках теоретико-полевого подхода с использованием технических приемов РГ). В пользу избранной для исследования модели  $\rho^6$  свидетельствует и работа [17], в которой изучается эффективный потенциал для скалярной теории поля в трех размерностях в симметрической фазе. При этом используются полученные с помощью метода Монте-Карло вероятностные распределения средней намагниченности трехмерной модели Изинга во внешнем поле. В этой работе показано, что член с шестой степенью переменной в эффективном потенциале играет важную роль. Вычислены значения универсальных четырех- и шеститочечных констант связи. Безразмерные шести- и восьмиточечные эффективные константы связи рассчитываются в трехпетлевом приближении в [18].

В настоящей работе на основе модели  $\rho^6$  разработан способ расчета выражений для термодинамических функций трехмерной изинговской сис-

темы с учетом слагаемых, определяющих поправку к скейлингу. Расчеты осуществлены для температур выше температуры фазового перехода  $T_c$  (высокотемпературная область). Полученные выражения для основных критических амплитуд и амплитуд первой конфлуентной поправки позволяют исследовать их зависимость от микроскопических параметров системы (радиуса действия потенциала  $b$ , постоянной решетки  $c$ ).

Будем исходить из выражения для статистической суммы в приближении модели  $\rho^6$ . Полагая в (5)  $n = 3$  и осуществляя в (4) интегрирование по переменным  $\rho_{\mathbf{k}}$  и  $\omega_{\mathbf{k}}$  с индексами  $B' < k \leq B$ , а затем еще по  $N'$  переменным  $\omega_{\mathbf{k}}$ , получаем

$$Z = 2^N 2^{(N'-1)/2} e^{a'_0 N'} \int \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B'} d'(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \sum_{l=2}^3 \frac{a'_{2l}}{(2l)!(N')^{l-1}} \sum_{k_1, \dots, k_{2l} \leq B'} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_{2l}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2l}} \right] (d\rho)^{N'}. \quad (6)$$

Здесь  $N' = N s_0^3$ ,  $s_0 = B/B' = \pi \sqrt{2} b/c$ ,

$$d'(k) = a'_2 - \beta \tilde{\Phi}(k). \quad (7)$$

Коэффициенты  $a'_{2l}$  определяются соотношениями

$$\begin{aligned} a'_0 &= \ln Q(\mathcal{M}), \quad Q(\mathcal{M}) = (12s_0^3)^{1/4} \pi^{-1} I_0(\eta', \xi'), \\ a'_2 &= (12s_0^3)^{1/2} F_2(\eta', \xi'), \\ a'_4 &= 12s_0^3 C(\eta', \xi'), \\ a'_6 &= (12s_0^3)^{3/2} N(\eta', \xi') \end{aligned} \quad (8)$$

и являются функциями  $s_0$ , т.е. отношения  $b/c$  (см. табл. 1).

Таблица 1

Значения коэффициентов  $a'_{2l}$  для разных  $b$

$b$	$a'_0$	$a'_2$	$a'_4$	$a'_6$
$b_I$	-1,0196	0,7023	0,2212	0,4379
$b_{II}$	-0,9863	0,7820	0,2163	0,3895
$b_{III}$	-0,9764	0,8083	0,2086	0,3547
$c$	-0,9218	0,9887	0,0220	0,0031
$2c$	-0,9193	0,9986	0,0028	0,0000
$5c$	-0,9190	0,9999	0,0002	0,0000
$7c$	-0,9189	1,0000	0,0000	0,0000

Здесь в качестве аргументов выступают величины

$$\eta' = \sqrt{3} s_0^{3/2}, \quad \xi' = \frac{8\sqrt{3}}{15 s_0^{3/2}}. \quad (9)$$

Специальные функции  $C(\eta', \xi')$  и  $N(\eta', \xi')$  имеют вид

$$C(\eta', \xi') = -F_4(\eta', \xi') + 3F_2^2(\eta', \xi'), \quad (10)$$

$$N(\eta', \xi') = F_6(\eta', \xi') - 15F_4(\eta', \xi')F_2(\eta', \xi') + 30F_2^3(\eta', \xi'),$$

где

$$F_{2l}(\eta', \xi') = I_{2l}(\eta', \xi')/I_0(\eta', \xi'), \quad (11)$$

$$I_{2l}(\eta', \xi') = \int_0^\infty t^{2l} \exp(-\eta' t^2 - t^4 - \xi' t^6) dt.$$

Как видим из табл. 1, при  $b \gg c$   $a'_2 \rightarrow 1$ ,  $a'_{2l} \rightarrow 0$  для  $l \geq 2$  и подынтегральная функция выражения (6) по своей форме приближается к гауссову распределению. В случае соразмерности радиуса действия потенциала и постоянной решетки коэффициенты  $a'_{2l}$  для всех значений  $l \geq 0$  являются ненулевыми величинами и в показателе экспоненты подынтегрального выражения (6) необходимо принимать во внимание, кроме гауссовых, слагаемые, пропорциональные высшим степеням переменной  $\rho_{\mathbf{k}}$ . В дальнейшем будем иметь в виду именно этот случай. Величина  $b = b_I = c/(2\sqrt{3})$  соответствует взаимодействию ближайших соседей,  $b = b_{II} = 0,3379c$  — первых и вторых соседей,  $b = b_{III} = 0,3584c$  — первых, вторых и третьих соседей [19].

Увеличение числа слагаемых в выражениях (5), (6) соответствует усложнению формы негауссовой плотности меры (усложнению модели). Количественно критические явления трехмерного изинговского ферромагнетика в рамках метода КП могут быть описаны уже в приближении модели  $\rho^6$ . Ограничение в формулах (5), (6) четверным приближением позволяет выйти за пределы классического рассмотрения и описать все качественные стороны фазового перехода второго рода, а шестерное приближение обеспечивает более адекватное количественное описание критических свойств спиновой системы. Это подтверждается расчетом, а также анализом поведения коэффициентов исходного выражения для статистической суммы и критического показателя корреляционной длины  $\nu$  для последовательности моделей  $\rho^4$ ,

$\rho^6, \rho^8, \rho^{10}$  [3,8–12], вычислением и сравнением термодинамических функций для моделей  $\rho^4$  и  $\rho^6$  [13,14], сравнением результатов проведенных исследований с другими литературными данными (см., например, [13,14]). Рассмотрение вышеуказанной последовательности моделей было необходимо для оценки сходимости процедуры вычисления критического показателя  $\nu$ , выяснения вопроса о зависимости от параметра РГ  $s$  и целесообразности использования более высоких плотностей мер. При этом было установлено, что в процессе усложнения формы плотности меры зависимость критического показателя  $\nu$  от параметра РГ  $s$  постепенно уменьшается и, начиная с шестерной плотности меры, происходит незначительное изменение значения показателя  $\nu$ , имеющего тенденцию к насыщению с ростом величины  $m$ , которая характеризует порядок модели  $\rho^{2m}$  или определяет предел суммирования в формуле (5) ( $m = 2, 3, 4, 5$ ). Интересным является и тот факт, что при  $m \geq 3$  численные значения коэффициентов  $a'_{2l}$ , входящих в статистическую сумму (соотношения, аналогичные (8) и (6)), слабо изменяются с повышением порядка плотности меры, т.е. с увеличением числа слагаемых в (5).

Одно из преимуществ метода КП при описании фазового перехода состоит в наличии среди КП  $\rho_k$  переменной, связанной с параметром порядка. Для модели Изинга такой переменной является  $\rho_0$ . Мы не можем выделить в выражении (6) вклад только  $\rho_0$ , поскольку все переменные  $\rho_k$  связаны между собой. Воспользуемся предложенным в [3] методом «послойного» интегрирования (6) по переменным  $\rho_k$ . Интегрирование начинается от переменных  $\rho_k$  с большими значениями  $k$  (порядка границы полужоны Бриллюэна) и заканчивается  $\rho_k$  с  $k \rightarrow 0$ . Для этого фазовое пространство КП  $\rho_k$  разбивается на слои с параметром деления  $s$ . В каждом  $n$ -м слое (соответствующая область волновых векторов  $B_{n+1} < k \leq B_n$ ,  $B_{n+1} = B_n/s$ ,  $s > 1$ ) фурье-образ потенциала  $\tilde{\Phi}(k)$  заменяется его средним значением (в данной работе средним арифметическим). В результате поэтапного вычисления статистической суммы число переменных интегрирования в выражении для нее постепенно уменьшается. После интегрирования по  $n+1$  слоям пространства КП получаем

$$Z = 2^{N_0} 2^{(N_{n+1}-1)/2} Q_0 Q_1 \dots Q_n [Q(P_n)]^{N_{n+1}} \times \int \mathcal{W}_6^{(n+1)}(\rho) (d\rho)^{N_{n+1}}. \quad (12)$$

Здесь  $N_{n+1} = N's^{-3(n+1)}$ ,

$$Q_0 = [e^{a'_0} Q(d)]^{N'}, \quad Q_1 = [Q(P)Q(d_1)]^{N_1}, \dots,$$

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

$$Q(d_n) = 2(24/a_4^{(n)})^{1/4} I_0(h_n, \alpha_n),$$

$$Q(P_n) = \pi^{-1} [s^3 a_4^{(n)} / C(h_n, \alpha_n)]^{1/4} I_0(\eta_n, \xi_n). \quad (13)$$

Основные аргументы

$$h_n = d_n(B_{n+1}, B_n) \left( \frac{6}{a_4^{(n)}} \right)^{1/2}, \quad \alpha_n = \frac{\sqrt{6}}{15} \frac{a_6^{(n)}}{(a_4^{(n)})^{3/2}} \quad (14)$$

определяются средним значением коэффициента  $d_n(k)$  в  $n$ -м слое фазового пространства КП, т.е.  $d_n(B_{n+1}, B_n)$ , и величинами  $a_4^{(n)}$ ,  $a_6^{(n)}$ . Эффективная шестерная плотность меры  $(n+1)$ -й блочной структуры  $\mathcal{W}_6^{(n+1)}(\rho)$  имеет следующий вид:

$$\mathcal{W}_6^{(n+1)}(\rho) = \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{n+1}} d_{n+1}(k) \rho_k \rho_{-k} - \sum_{l=2}^3 \frac{a_{2l}^{(n+1)}}{(2l)! N_{n+1}^{l-1}} \sum_{k_1, \dots, k_{2l} \leq B_{n+1}} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_{2l}} \delta_{k_1 + \dots + k_{2l}} \right]. \quad (15)$$

Здесь  $B_{n+1} = B's^{-(n+1)}$ ,  $d_{n+1}(k) = a_2^{(n+1)} - \tilde{\beta}\Phi(k)$ ,  $a_{2l}^{(n+1)}$  — перенормированные значения коэффициентов  $a'_{2l}$  после интегрирования по  $n+1$  слоям фазового пространства КП. Промежуточные переменные  $\eta_n$ ,  $\xi_n$  являются функциями  $h_n$  и  $\alpha_n$ . Они задаются выражениями

$$\eta_n = (6s^3)^{1/2} F_2(h_n, \alpha_n) [C(h_n, \alpha_n)]^{-1/2}, \quad (16)$$

$$\xi_n = \frac{\sqrt{6}}{15} s^{-3/2} N(h_n, \alpha_n) [C(h_n, \alpha_n)]^{-3/2},$$

где вид специальных функций  $C(h_n, \alpha_n)$ ,  $N(h_n, \alpha_n)$  определен в (10). Коэффициенты  $d_n(B_{n+1}, B_n)$ ,  $a_4^{(n)}$ ,  $a_6^{(n)}$  связаны с коэффициентами  $(n+1)$ -го слоя рекуррентными соотношениями [11,20,21], решения которых [15,21] используются при вычислении свободной энергии системы.

Основная идея расчета на микроскопическом уровне явных выражений для свободной энергии и других термодинамических функций системы вблизи  $T_c$  ( $\tau < \tau^* \sim 10^{-2}$ ,  $\tau = (T - T_c)/T_c$ ) состоит в раздельном учете вкладов коротковолновых и

длинноволновых мод колебаний плотности спинового момента [3,5,22].

Коротковолновые моды характеризуются наличием РГ симметрии и описываются негауссовой плотностью меры. Они соответствуют области критического режима (КР), имеющей место как выше, так и ниже  $T_c$ . Здесь используется метод РГ (см., например, [23]). Расчет выражения для вклада в свободную энергию коротковолновых мод колебаний спиновой плотности связан с суммированием парциальных свободных энергий по слоям фазового пространства КП до точки выхода системы из участка КР. Важной задачей при этом является получение явной зависимости от номера слоя. Для этой цели используются решения РС. Учет в них большего собственного значения ( $E_1 > 1$ ) матрицы линейного преобразования РГ позволяет описать вблизи  $T_c$  основную сингулярность для теплоемкости. Меньшие собственные значения ( $E_2 < 1$ ,  $E_3 < 1$ ) отвечают за возникновение поправок к скейлингу. За счет учета коротковолновых мод колебаний плотности спинового момента происходит перенормировка дисперсии распределения, описывающего длинноволновые моды. Последним при  $T > T_c$  соответствует область предельного гауссова режима (ПГР). Способ учета вклада длинноволновых мод колебаний в свободную энергию системы качественно отличается от методики вычисления коротковолновой части статистической суммы. Расчет этого вклада основан на использовании гауссовой плотности меры в качестве базисной. Здесь развит прямой метод расчета. Исходными данными для него являются результаты, полученные при учете коротковолновых мод.

Отметим, что проводимые расчеты справедливы в узкой окрестности  $T_c$ . Решения РС позволяют оценить размер этой критической области. Действительно, используя эти решения и условие существования КР (выход из него при  $n \rightarrow 1$ , описываемый слагаемыми, пропорциональными  $E_1^n$ , не превышает вход в КР, описываемый слагаемыми, пропорциональными  $E_2^n$ ,  $E_3^n$ ), можно определить область температур  $\tau < \tau^*$ , в которой имеет место КР, соответствующий наличию сильноскоррелированных спиновых блоков. Величина  $\tau^*$  будет равна меньшему по модулю из корней трех уравнений, полученных на основе решений РС. Найденное таким образом значение  $\tau^*$  в случае соразмерности  $b$  и  $c$  порядка сотых. Для больших  $b$  важно корректно учесть вход в КР. В этом случае  $\tau^*$  получаем, если наложить условие, чтобы вход в КР превалировал над выходом из

него при  $n \rightarrow n_0$ , где номер слоя  $n_0$  как функцию  $b$  можно определить из РС [11,20,21], например, исходя из соотношения для  $a_4^{(n)}$  (см. табл. 2).

Таблица 2

Величины  $n_0$  и  $\tau^*$  для больших значений радиуса действия потенциала взаимодействия  $b$  и параметра РГ  $s = 3$

$b$	$n_0$	$\tau^*$
$4c$	7	$0,8266 \times 10^{-8}$
$5c$	8	$0,6274 \times 10^{-9}$
$7c$	9	$0,4680 \times 10^{-10}$

Из данных табл. 2 видно, что для больших значений  $b$  критическая область практически отсутствует. Так и должно быть, ибо условие  $b \gg c$  отвечает переходу к модели с дальнедействующим взаимодействием, основанной на использовании гауссова распределения мод колебаний спиновой плотности (см. (6) и табл. 1) и проявляющей классическое критическое поведение.

Рассчитав отдельно вклады при  $T > T_c$  в свободную энергию коротковолновых  $F_{CR}$  и длинноволновых  $F_{LGR}$  мод колебаний спиновой плотности, можно найти полное выражение для свободной энергии системы

$$F = F_0 + F_{CR} + F_{LGR} \quad (17)$$

Здесь  $F_0 = -kTN \ln 2$  — свободная энергия  $N$  невзаимодействующих спинов. Приступим к вычислению вышеуказанных вкладов  $F_{CR}$  и  $F_{LGR}$ .

## 2. Расчет вклада коротковолновых мод колебаний спиновой плотности в термодинамические функции системы

Статистическую сумму модели удобно представить в виде [13,14,24]

$$Z = 2^N Z_{CR} Z_{LGR} \quad (18)$$

где первый множитель соответствует невзаимодействующим спином. Величина  $Z_{CR}$  описывает вклад коротковолновых флуктуаций  $\rho_k$  с  $k \in [B_{m_\tau}, B']$  (область КР). Входящий в выражение  $B_{m_\tau} \equiv B' s^{-m_\tau}$  номер слоя пространства КП  $m_\tau$ , который характеризует точку выхода системы из КР, будет определен ниже. Множитель  $Z_{LGR}$  содержит вклады длинноволновых флуктуаций с  $k \in [0, B_m)$  и соответствует ПГР.

Рассмотрим величину  $Z_{CR}$ . Для нее имеем

$$Z_{CR} = \prod_{n=0}^{m_\tau} \left[ \frac{2}{\pi} \left( \frac{24}{C(\eta_{n-1}, \xi_{n-1})} \right)^{1/4} I_0(h_n, \alpha_n) I_0(\eta_{n-1}, \xi_{n-1}) \right]^{N_n} \quad (19)$$

Расчет  $Z_{CR}$  связан с представлением правой части формулы (19) в виде явной функции от номера слоя  $n$ . Следует отметить, что в (19) при  $n=0$   $\eta_{-1} \equiv \eta'$ ,  $\xi_{-1} \equiv \xi'$ . В области КР основные  $h_n$ ,  $\alpha_n$  и промежуточные  $\eta_n$ ,  $\xi_n$  аргументы близки к своим значениям в фиксированной точке  $h^{(0)}$ ,  $\alpha^{(0)}$  и  $\eta^{(0)}$ ,  $\xi^{(0)}$ . Поэтому функции от этих аргументов здесь можно аппроксимировать степенными рядами относительно отклонений аргументов от их фиксированных значений [25]. Промежуточные аргументы и функции от них представляются через отклонения основных аргументов от их значений в фиксированной точке. Используя соотношения для  $I_0(h_n, \alpha_n)$ ,  $I_0(\eta_{n-1}, \xi_{n-1})$ ,  $C(\eta_{n-1}, \xi_{n-1})$  с учетом квадратов отклонений основных аргументов [13,25], из (19) определяем свободную энергию, соответствующую  $n$ -му фазовому слою:

$$F_n = -kTN_n [f_{CR}^{(0)} + \varphi_1(h_{n-1} - h^{(0)}) + \varphi_2(\alpha_{n-1} - \alpha^{(0)}) + \varphi_3(h_n - h^{(0)}) + \varphi_4(\alpha_n - \alpha^{(0)}) + \varphi'_1(h_{n-1} - h^{(0)})^2 + \varphi'_2(\alpha_{n-1} - \alpha^{(0)})^2 + \varphi'_3(h_n - h^{(0)})^2 + \varphi'_4(\alpha_n - \alpha^{(0)})^2 +$$

$$F_n = -kTN's^{-3n} [f_{CR}^{(0)} + f_{CR}^{(1)}(u^{(0)})^{-1/2} c_1 E_1^n + f_{CR}^{(2)}(u^{(0)})^{-1} c_2 E_2^n + f_{CR}^{(3)}(u^{(0)})^{-3/2} c_3 E_3^n + f_{CR}^{(4)}(u^{(0)})^{-3/2} c_1 c_2 E_1^n E_2^n + f_{CR}^{(5)}(u^{(0)})^{-5/2} c_1 c_2^2 E_1^n E_2^{2n} + f_{CR}^{(6)}(u^{(0)})^{-2} c_2^2 E_2^{2n} + f_{CR}^{(7)}(u^{(0)})^{-1} c_1^2 E_1^{2n} + f_{CR}^{(8)}(u^{(0)})^{-2} c_1^2 c_2 E_1^{2n} E_2^n + f_{CR}^{(9)}(u^{(0)})^{-3} c_1^2 c_2^2 E_1^{2n} E_2^{2n}]. \quad (21)$$

Здесь

$$f_{CR}^{(k)} = H_k(\varphi_3 + \varphi_1/E_k) + L_k(\varphi_4 + \varphi_2/E_k), \quad k = 1, 2, 3,$$

$$f_{CR}^{(4)} = H_4[\varphi_3 + \varphi_1/(E_1 E_2)] + L_4[\varphi_4 + \varphi_2/(E_1 E_2)] + 2H_1 H_2 [\varphi'_3 + \varphi'_1/(E_1 E_2)] + 2L_1 L_2 [\varphi'_4 + \varphi'_2/(E_1 E_2)] + (H_1 L_2 + H_2 L_1) [\varphi'_6 + \varphi'_5/(E_1 E_2)],$$

$$f_{CR}^{(5)} = H_5[\varphi_3 + \varphi_1/(E_1 E_2^2)] + L_5[\varphi_4 + \varphi_2/(E_1 E_2^2)] + 2(H_1 H_6 + H_2 H_4) [\varphi'_3 + \varphi'_1/(E_1 E_2^2)] + 2(L_1 L_6 + L_2 L_4) \times [\varphi'_4 + \varphi'_2/(E_1 E_2^2)] + (H_1 L_6 + H_6 L_1 + H_2 L_4 + H_4 L_2) [\varphi'_6 + \varphi'_5/(E_1 E_2^2)],$$

$$f_{CR}^{(6)} = H_6(\varphi_3 + \varphi_1/E_2^2) + L_6(\varphi_4 + \varphi_2/E_2^2) + H_2^2(\varphi'_3 + \varphi'_1/E_2^2) + L_2^2(\varphi'_4 + \varphi'_2/E_2^2) + H_2 L_2(\varphi'_6 + \varphi'_5/E_2^2),$$

$$+ \varphi'_5(h_{n-1} - h^{(0)})(\alpha_{n-1} - \alpha^{(0)}) + \varphi'_6(h_n - h^{(0)})(\alpha_n - \alpha^{(0)}], \quad (20)$$

$$f_{CR}^{(0)} = \ln \left( \frac{2(24)^{1/4}}{\pi} \right) - 1/4 \ln P_{40} + \ln I_0^* + \ln I_0^{**},$$

$$\varphi_k = b_k + P_{4k}/4, \quad k = 1, 2,$$

$$\varphi_3 = -F_2^*, \quad \varphi_4 = -F_6^*,$$

$$\varphi'_k = b'_k - \frac{1}{2} b_k^2 - P'_{4k}/4 + P_{4k}^2/8,$$

$$\varphi'_3 = F_4^*/2 - F_2^{*2}/2, \quad \varphi'_4 = F_{12}^*/2 - F_6^{*2}/2,$$

$$\varphi'_5 = b'_3 - b_1 b_2 - P'_{43}/4 + P_{41} P_{42}/4,$$

$$\varphi'_6 = F_8^* - F_2^* F_6^*.$$

Величины, входящие в  $f_{CR}^{(0)}$ ,  $\varphi_i$ ,  $\varphi'_j$ , в конечном итоге являются функциями значений основных аргументов в фиксированной точке. Они приведены в вышеупомянутых работах [13,25].

Парциальная свободная энергия  $n$ -го слоя фазового пространства КП с учетом явной зависимости от  $n$  запишется в виде

$$\begin{aligned}
f_{CR}^{(7)} &= H_7(\Phi_3 + \Phi_1/E_1^2) + L_7(\Phi_4 + \Phi_2/E_1^2) + H_1^2(\Phi_3' + \Phi_1'/E_1^2) + L_1^2(\Phi_4' + \Phi_2'/E_1^2) + H_1L_1(\Phi_6' + \Phi_5'/E_1^2), \\
f_{CR}^{(8)} &= H_8[\Phi_3 + \Phi_1/(E_1^2E_2)] + L_8[\Phi_4 + \Phi_2/(E_1^2E_2)] + 2(H_1H_4 + H_2H_7)[\Phi_3' + \Phi_1'/(E_1^2E_2)] + 2(L_1L_4 + L_2L_7) \times \\
&\quad \times [\Phi_4' + \Phi_2'/(E_1^2E_2)] + (H_1L_4 + H_4L_1 + H_2L_7 + H_7L_2) [\Phi_6' + \Phi_5'/(E_1^2E_2)], \\
f_{CR}^{(9)} &= H_9[\Phi_3 + \Phi_1/(E_1E_2)^2] + L_9[\Phi_4 + \Phi_2/(E_1E_2)^2] + (2H_1H_5 + 2H_2H_8 + H_4^2 + 2H_6H_7)[\Phi_3' + \Phi_1'/(E_1E_2)^2] + \\
&\quad + (2L_1L_5 + 2L_2L_8 + L_4^2 + 2L_6L_7)[\Phi_4' + \Phi_2'/(E_1E_2)^2] + (H_1L_5 + H_5L_1 + H_2L_8 + H_8L_2 + H_4L_4 + H_6L_7 + \\
&\quad + H_7L_6)[\Phi_6' + \Phi_5'/(E_1E_2)^2]. \tag{22}
\end{aligned}$$

Выражения для величин  $H_i$  и  $L_i$  приводятся в [13,14,26], для трех координат фиксированной точки (в том числе для  $u^{(0)}$ ), коэффициентов решений РС

$$c_1 = \tilde{c}_1 \beta \tilde{\Phi}(0) \tau, \quad c_2 = c_{20} (\beta \tilde{\Phi}(0))^2, \quad c_3 = c_{30} (\beta \tilde{\Phi}(0))^3,$$

$$\text{где } \tilde{c}_1 = \tilde{c}_1^{(0)} + \tilde{c}_1^{(1)} \tau, \quad c_{20} = c_{20}^{(0)} + c_{20}^{(1)} \tau + c_{20}^{(2)} \tau^2, \quad c_{30} = c_{30}^{(0)} + c_{30}^{(1)} \tau + c_{30}^{(2)} \tau^2,$$

— в работах [21,24,26]. Подчеркнем, что характерной особенностью решений РС является специфическая зависимость коэффициента  $c_1$  от температуры. На основе выражения для  $c_1$  получаем уравнение для величины  $\beta_c \tilde{\Phi}(0)$ , определяющей температуру фазового перехода (см. [21]). Зависимость  $\beta_c A$  ( $A$  — постоянная, входящая в потенциал взаимодействия (2)) от отношения радиуса действия потенциала  $b$  к постоянной решетки  $c$  для случая  $s = 3$  показана на рис. 1.

Таким образом, парциальная свободная энергия  $n$ -го слоя  $F_n$  состоит из не зависящей от

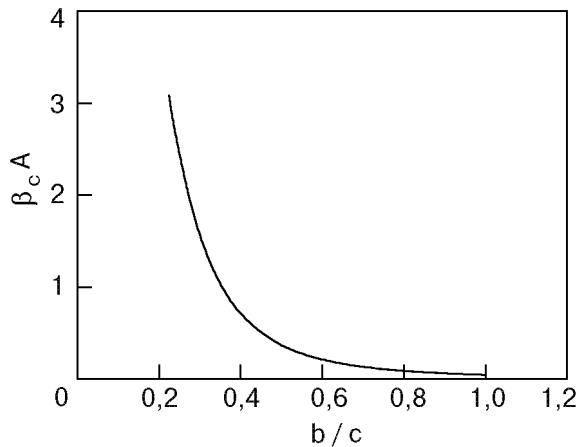


Рис. 1. Зависимость обратной температуры фазового перехода от отношения радиуса действия потенциала взаимодействия к постоянной решетки.

номера слоя  $n$  части  $f_{CR}^{(0)}$ , которая является универсальной величиной, и слагаемых, содержащих зависимость от  $n$ . В отличие от  $f_{CR}^{(0)}$  они зависят от микроскопических параметров гамильтониана системы.

Осуществляя суммирование выражения для  $F_n$  (21) по слоям фазового пространства КП, вычисляем  $F_{CR}$ :

$$F_{CR} = F_0' + F_{CR}', \tag{23}$$

$$F_0' = -kTN' [\ln Q(\mathcal{M}) + \ln Q(d)],$$

$$F_{CR}' = \sum_{n=1}^{m_\tau} F_n.$$

Номер слоя  $m_\tau$ , определяющий точку выхода системы из участка КР при  $T > T_c$ , находим из условия [15,26]

$$\frac{r_{m_\tau+1} - r^{(0)}}{r^{(0)}} = -\delta, \tag{24}$$

где  $\delta$  — постоянная величина ( $\delta \leq 1$ );  $r^{(0)}$  — одна из координат фиксированной точки;  $r_n$  характеризует коэффициент шестерной плотности меры  $n$ -й блочной структуры при второй степени переменной и определяется с помощью решений РС (см., например, [26]). При численных расчетах будем полагать  $\delta = 1$ . Тогда  $r_{m_\tau+1} = 0$  или  $d_{m_\tau+1}(0) = r_{m_\tau+1} s^{-2(m_\tau+1)} = 0$  и кривые  $d_n(k)$  для всех  $n > m_\tau$  будут находиться над осью абсцисс. На основании (24) получаем явный вид уравнения для  $m_\tau$ :



$$\tilde{c}_1 \tau E_1^{m_\tau+1} = f_0 \delta - c_{20} w_{12}^{(0)} \Phi_0^{-1/2} E_2^{m_\tau+1} - c_{30} w_{13}^{(0)} \Phi_0^{-1} E_3^{m_\tau+1}. \quad (25)$$

Не зависящие от температуры величины  $w_{12}^{(0)}$ ,  $w_{13}^{(0)}$ , а также  $f_0$ ,  $\Phi_0$ , характеризующие координаты фиксированной точки  $r^{(0)}$ ,  $u^{(0)}$ , приводятся в [26]. В области  $\tau \ll 1$  при решении уравнения (25) удобно использовать метод последовательных приближений, принимая во внимание, что  $E_2^{m_\tau+1} \ll 1$ ,  $E_3^{m_\tau+1} \ll 1$ . В нулевом приближении (25) представляется в виде уравнения

$$\tilde{c}_1 \tau E_1^{m_\tau+1} = f_0 \delta, \quad (26)$$

решением которого является выражение

$$m_\tau^{(0)} = -\frac{\ln \tau}{\ln E_1} + m_0 - 1. \quad (27)$$

Здесь

$$m_0 = m_c, \quad m_c = \frac{\ln(f_0 \delta / \tilde{c}_1^{(0)})}{\ln E_1}. \quad (28)$$

Первое приближение записывается с учетом малости слагаемых, пропорциональных величинам  $E_2^{m_\tau+1}$ ,  $E_3^{m_\tau+1}$ , для которых используется нулевое приближение, т.е. правая часть уравнения (25) включает члены, пропорциональные  $E_2^{m_\tau+1} = E_2^{m_0} \tau^{\Delta_1}$ ,  $E_3^{m_\tau+1} = E_3^{m_0} \tau^{\Delta_2}$ :

$$\begin{aligned} \tilde{c}_1 \tau E_1^{m_\tau+1} = & f_0 \delta - c_{20} w_{12}^{(0)} \Phi_0^{-1/2} E_2^{m_\tau+1} - \\ & - c_{30} w_{13}^{(0)} \Phi_0^{-1} E_3^{m_\tau+1}. \end{aligned} \quad (29)$$

Заметим, что в правой части уравнения (29) мы будем пренебрегать слагаемым, пропорциональным  $E_3^{m_\tau+1}$ , поскольку в данных расчетах учитывается только первая конфлюэнтная поправка (определяется слагаемым, пропорциональным  $\tau^{\Delta_1}$ ,  $\Delta_1 = -\ln E_2 / \ln E_1$ ) и не принимается во внимание вторая конфлюэнтная поправка (определяется слагаемым, пропорциональным  $\tau^{\Delta_2}$ ,  $\Delta_2 = -\ln E_3 / \ln E_1$ ). Это связано с тем, что вклад

первой конфлюэнтной поправки в термодинамические функции модели вблизи  $T_c$  является более существенным по сравнению с незначительным вкладом второй поправки ( $\tau \ll 1$ ,  $\Delta_1$  порядка 0,5,  $\Delta_2 > 2$ , см. [13,14]). Решая (29), получаем

$$m_\tau = m_\tau^{(0)} + m_{\Delta_1} \tau^{\Delta_1}, \quad (30)$$

$$m_{\Delta_1} = \frac{m_2}{\ln E_1}, \quad m_2 = -c_{\Delta_1} \Phi_0,$$

$$c_{\Delta_1} = c_{20}^{(0)} \left( \frac{\tilde{c}_1^{(0)}}{f_0 \delta} \right)^{\Delta_1}, \quad \Phi_0 = \frac{w_{12}^{(0)}}{f_0 \delta \sqrt{\Phi_0}}.$$

Подчеркнем, что в высшем приближении уравнение (25) приводит к решению типа (30), где дополнительно появляются слагаемые, пропорциональные  $\tau^{2\Delta_1}$  и т.д., которыми в настоящих вычислениях будем также пренебрегать.

Теперь, имея выражение для  $m_\tau$  (30), возвращаемся к расчету  $F_{CR}$  (23). Учитывая (30), а также соотношения

$$E_1^{m_\tau+1} = \frac{f_0 \delta (1 + m_2 \tau^{\Delta_1})}{\tilde{c}_1 \tau}, \quad E_2^{m_\tau+1} = \left( \frac{\tilde{c}_1^{(0)}}{f_0 \delta} \right)^{\Delta_1} \tau^{\Delta_1},$$

$$s^{-3(m_\tau+1)} = s^{-3(m_\tau^{(0)}+1)} (1 + \mathcal{N}_1 \tau^{\Delta_1}),$$

$$s^{-3(m_\tau^{(0)}+1)} = s^{-3m_0} \tau^{3\nu}, \quad s^{-3m_0} = c_v^3,$$

$$c_v = \left( \frac{\tilde{c}_1^{(0)}}{f_0 \delta} \right)^\nu, \quad \nu = \frac{\ln s}{\ln E_1},$$

$$\mathcal{N}_1 = -3\nu m_2 = 3\nu c_{\Delta_1} \Phi_0, \quad (31)$$

находим

$$F_{CR} = -kTN'[\gamma_0 + \delta_0 - \gamma_3^{(CR)(0)+} \tau^{3\nu} - \gamma_3^{(CR)(1)+} \tau^{3\nu+\Delta_1}], \quad (32)$$

где

$$\begin{aligned} \gamma_0 = & s^{-3} \left[ \frac{f_{CR}^{(0)}}{1-s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(1)} \Phi_0^{-1/2} \tilde{c}_1 \tau E_1}{1-E_1 s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(2)} \Phi_0^{-1/2} c_{20} E_2}{1-E_2 s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(3)} \Phi_0^{-3/2} c_{30} E_3}{1-E_3 s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(4)} \Phi_0^{-3/2} \tilde{c}_1 \tau c_{20} E_1 E_2}{1-E_1 E_2 s^{-3}} + \right. \\ & \left. + \frac{f_{CR}^{(5)} \Phi_0^{-5/2} \tilde{c}_1 c_{20}^2 \tau E_1 E_2^2}{1-E_1 E_2^2 s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(6)} \Phi_0^{-2} c_{20}^2 E_2^2}{1-E_2^2 s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(7)} \Phi_0^{-1} \tilde{c}_1^2 \tau^2 E_1^2}{1-E_1^2 s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(8)} \Phi_0^{-2} \tilde{c}_1^2 c_{20}^2 \tau^2 E_1^2 E_2^2}{1-E_1^2 E_2^2 s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(9)} \Phi_0^{-3} \tilde{c}_1^2 c_{20}^2 \tau^2 E_1^2 E_2^2}{1-E_1^2 E_2^2 s^{-3}} \right], \end{aligned} \quad (33)$$

$$\delta_0 = \ln Q(\mathcal{M}) + \ln Q(d), \quad \gamma_{11}^+ = \frac{f_{CR}^{(1)}\Phi_0^{-1/2}f_0\delta}{1 - E_1s^{-3}} + \frac{2f_{CR}^{(7)}\Phi_0^{-1}(f_0\delta)^2}{1 - E_1^2s^{-3}}. \quad (34)$$

$$\gamma_3^{(CR)(l)+} = c_{\Delta_1}^3 c_{\Delta_1}^l \bar{\gamma}_3^{(CR)(l)+}, \quad l = 0, 1,$$

Выделим явно в  $\gamma_0$  и  $\delta_0$  (33) температуру. В результате для коэффициента  $\gamma_0$  запишем

$$\bar{\gamma}_3^{(CR)(0)+} = \gamma^+, \quad \bar{\gamma}_3^{(CR)(1)+} = \gamma_{\Delta_1}^+ - \Phi_0(\gamma_{11}^+ - 3v\gamma^+). \quad (35)$$

Здесь

$$\gamma^+ = \frac{f_{CR}^{(0)}}{1 - s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(1)}\Phi_0^{-1/2}f_0\delta}{1 - E_1s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(7)}\Phi_0^{-1}(f_0\delta)^2}{1 - E_1^2s^{-3}},$$

$$\gamma_{\Delta_1}^+ = \frac{f_{CR}^{(2)}\Phi_0^{-1}}{1 - E_2s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(4)}\Phi_0^{-3/2}f_0\delta}{1 - E_1E_2s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(8)}\Phi_0^{-2}(f_0\delta)^2}{1 - E_1^2E_2^2s^{-3}},$$

$$\gamma_0^{(0)} = s^{-3} \left[ \frac{f_{CR}^{(0)}}{1 - s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(2)}\Phi_0^{-1}c_{20}^{(0)}E_2}{1 - E_2s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(3)}\Phi_0^{-3/2}c_{30}^{(0)}E_3}{1 - E_3s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(6)}\Phi_0^{-2}(c_{20}^{(0)})^2E_2^2}{1 - E_2^2s^{-3}} \right],$$

$$\gamma_0^{(1)} = s^{-3} \left[ \frac{f_{CR}^{(1)}\Phi_0^{-1/2}\tilde{c}_1^{(0)}E_1}{1 - E_1s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(2)}\Phi_0^{-1}c_{20}^{(1)}E_2}{1 - E_2s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(3)}\Phi_0^{-3/2}c_{30}^{(1)}E_3}{1 - E_3s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(4)}\Phi_0^{-3/2}\tilde{c}_1^{(0)}c_{20}^{(0)}E_1E_2}{1 - E_1E_2s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(5)}\Phi_0^{-5/2}\tilde{c}_1^{(0)}(c_{20}^{(0)})^2E_1E_2^2}{1 - E_1E_2^2s^{-3}} + \frac{2f_{CR}^{(6)}\Phi_0^{-2}c_{20}^{(0)}c_{20}^{(1)}E_2^2}{1 - E_2^2s^{-3}} \right],$$

$$\gamma_0^{(2)} = s^{-3} \left[ \frac{f_{CR}^{(1)}\Phi_0^{-1/2}\tilde{c}_1^{(1)}E_1}{1 - E_1s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(2)}\Phi_0^{-1}c_{20}^{(2)}E_2}{1 - E_2s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(3)}\Phi_0^{-3/2}c_{30}^{(2)}E_3}{1 - E_3s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(4)}\Phi_0^{-3/2}(\tilde{c}_1^{(0)}c_{20}^{(1)} + \tilde{c}_1^{(1)}c_{20}^{(0)})E_1E_2}{1 - E_1E_2s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(5)}\Phi_0^{-5/2}[2\tilde{c}_1^{(0)}c_{20}^{(0)}c_{20}^{(1)} + \tilde{c}_1^{(1)}(c_{20}^{(0)})^2]E_1E_2^2}{1 - E_1E_2^2s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(6)}\Phi_0^{-2}[(c_{20}^{(1)})^2 + 2c_{20}^{(0)}c_{20}^{(2)}]E_2^2}{1 - E_2^2s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(7)}\Phi_0^{-1}(\tilde{c}_1^{(0)})^2E_1^2}{1 - E_1^2s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(8)}\Phi_0^{-2}(\tilde{c}_1^{(0)})^2c_{20}^{(0)}E_1^2E_2}{1 - E_1^2E_2^2s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(9)}\Phi_0^{-3}(\tilde{c}_1^{(0)})^2(c_{20}^{(0)})^2E_1^2E_2^2}{1 - E_1^2E_2^2s^{-3}} \right].$$

Для  $\delta_0$  получаем

$$\delta_0 = \delta_0^{(0)} + \delta_0^{(1)}\tau + \delta_0^{(2)}\tau^2, \quad (36)$$

$$\delta_0^{(0)} = \ln Q(\mathcal{M}) + \ln Q(d; T_c),$$

$$\delta_0^{(1)} = -\frac{\sqrt{6}}{(a'_4)^{1/2}}(1 - \bar{q})\beta_c \tilde{\Phi}(0)F_2(h_c, \alpha),$$

$$\delta_0^{(2)} = -\frac{3}{a'_4}(1 - \bar{q})^2(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^2[F_2^2(h_c, \alpha) - F_4(h_c, \alpha)] +$$

$$+ \frac{\sqrt{6}}{(a'_4)^{1/2}}(1 - \bar{q})\beta_c \tilde{\Phi}(0)F_2(h_c, \alpha), \quad \bar{q} = \frac{1 + s^{-2}}{2},$$

$$h_c = \frac{\sqrt{6}}{(a'_4)^{1/2}}[a'_2 - \beta_c \tilde{\Phi}(0)(1 - \bar{q})], \quad \alpha = \frac{\sqrt{6}}{15} \frac{a'_6}{(a'_4)^{3/2}}.$$

Таким образом, для свободной энергии КР имеем

$$F_{CR} = -kTN \left[ \gamma_0^{(CR)} + \gamma_1\tau + \gamma_2\tau^2 - \gamma_3^{(CR)(0)+}\tau^{3v} - \right.$$

$$- \gamma_3^{(CR)(1)+} \tau^{3v+\Delta_1} \Big], \quad (37)$$

$$\gamma_0^{(CR)} = \gamma_0^{(0)} + \delta_0^{(0)}, \quad \gamma_k = \gamma_0^{(k)} + \delta_0^{(k)}, \quad k = 1, 2.$$

Коэффициенты  $\gamma_0^{(CR)}$ ,  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  (см. (37)), как и  $m_2$ ,  $\mathcal{A}_1^+$  (см. (30), (31)), являются неуниверсальными, поскольку в них входят величины  $\tilde{c}_1^{(l)}$ ,  $c_{20}^{(i)}$ ,  $c_{30}^{(i)}$  ( $l = 0, 1$ ;  $i = 0, 1, 2$ ), зависящие от микроскопических параметров гамильтониана. Коэффициенты  $\gamma_3^{(CR)(l)+}$  ( $l = 0, 1$ ) приведены в (33). Здесь величины  $\bar{\gamma}_3^{(CR)(l)+}$  не зависят от микроскопических параметров, т.е. универсальные по отношению к этим параметрам.

Используя  $F_{CR}$ , вычислим другие термодинамические функции системы в области КР при  $T > T_c$ . Для энтропии  $S_{CR} = -\partial F_{CR} / \partial T$ , внутренней энергии  $U_{CR} = F_{CR} + TS_{CR}$  и теплоемкости  $C_{CR} = T \partial S_{CR} / \partial T$  находим

$$S_{CR} = kN' \left[ s^{(CR)(0)} + c_0 \tau + u_3^{(CR)(0)+} \tau^{1-\alpha} + u_3^{(CR)(1)+} \tau^{1-\alpha+\Delta_1} \right],$$

$$U_{CR} = kTN' \left[ \gamma_1 + u_1 \tau + u_3^{(CR)(0)+} \tau^{1-\alpha} + u_3^{(CR)(1)+} \tau^{1-\alpha+\Delta_1} \right], \quad (38)$$

$$C_{CR} = kN' \left[ c_0 + c_3^{(CR)(0)+} \tau^{-\alpha} + c_3^{(CR)(1)+} \tau^{\Delta_1-\alpha} \right],$$

где

$$s^{(CR)(0)} = \gamma_0^{(CR)} + \gamma_1, \quad c_0 = 2(\gamma_1 + \gamma_2),$$

$$u_3^{(CR)(l)+} = c_v^3 c_{\Delta_1}^l \bar{u}_3^{(CR)(l)+}, \quad l = 0, 1,$$

$$\bar{u}_3^{(CR)(0)+} = -3v \bar{\gamma}_3^{(CR)(0)+}, \quad (39)$$

$$\bar{u}_3^{(CR)(1)+} = -(3v + \Delta_1) \bar{\gamma}_3^{(CR)(1)+},$$

$$u_1 = \gamma_1 + 2\gamma_2, \quad c_3^{(CR)(l)+} = c_v^3 c_{\Delta_1}^l \bar{c}_3^{(CR)(l)+},$$

$$\bar{c}_3^{(CR)(0)+} = -3v(3v-1) \bar{\gamma}_3^{(CR)(0)+},$$

$$\bar{c}_3^{(CR)(1)+} = -(3v + \Delta_1)(3v + \Delta_1 - 1) \bar{\gamma}_3^{(CR)(1)+},$$

$$\alpha = 2 - 3v.$$

### 3. Расчет вклада длинноволновых мод колебаний плотности спинового момента в термодинамические характеристики системы

Вычисление вклада в свободную энергию трехмерной модели Изинга длинноволновых мод колебаний спиновой плотности ( $k < B's^{-m\tau}$ ) с учетом первой конфлуентной поправки осуществляется по схеме, предложенной в [3,13,14,24]. После выхода из КР система переходит в ПГР. Здесь при расчете части статистической суммы  $Z_{LGR}$  из (18) удобно выделить две области значений волновых векторов. Первая — переходная область (ПО), отвечающая значениям  $\mathbf{k}$ , близким к  $B_{m\tau}$ , другая — гауссова область, относящаяся к малым значениям волнового вектора ( $k \rightarrow 0$ ). После интегрирования статистической суммы в нескольких слоях фазового пространства КП, которые следуют за точкой выхода из КР и определяют величину ПО, система описывается гауссовой плотностью меры. Таким образом, имеем

$$Z_{LGR} = Z_{LGR}^{(1)} Z_{LGR}^{(2)}. \quad (40)$$

*Переходная область*

Эта область соответствует  $\tilde{m}_0$  слоям фазового пространства КП. Нижняя граница ПО определяется точкой выхода системы из участка КР ( $n = m_\tau + 1$ ). Верхняя граница соответствует слою  $m_\tau + \tilde{m}_0 + 1$ . Последняя определяет начало гауссовой области, где справедливо гауссово распределение мод колебаний плотности спинового момента. Переход системы в область ПГР сопровождается ростом величины  $h_n$  как функции  $n$  [24]. Поэтому условием для получения  $\tilde{m}_0$  служит равенство

$$\left| h_{m_\tau + \tilde{m}_0} \right| = \frac{A_0}{1 - s^{-3}}, \quad (41)$$

где  $A_0$  — большое число ( $A_0 \geq 10$ ). Найденное из (41)  $\tilde{m}_0'$  и определяет число  $\tilde{m}_0$  (см. [26]).

Вычислим вклад  $F_{LGR}^{(1)}$  в свободную энергию от слоев фазового пространства КП непосредственно после точки выхода из КР, который соответствует вкладу  $Z_{LGR}^{(1)}$  в статистическую сумму от ПО. Он имеет вид

$$F_{LGR}^{(1)} = -kTN_{m_\tau+1} \sum_{m=0}^{\tilde{m}_0} s^{-3m} f_{LGR_1}(m), \quad (42)$$

$$f_{LGR_1}(m) = \ln \left( \frac{2}{\pi} \right) + \frac{1}{4} \ln 24 - \frac{1}{4} \ln C(\eta_{m_\tau+m}, \xi_{m_\tau+m}) +$$

$$+ \ln I_0(h_{m_\tau+m+1}, \alpha_{m_\tau+m+1}) + \ln I_0(\eta_{m_\tau+m}, \xi_{m_\tau+m}) .$$

Из работ [3,27–30], содержащих результаты численного расчета статистической суммы модели Изинга и исследования РС, следует, что в ПО эволюцию коэффициентов эффективных плотностей мер с ростом номера слоя достаточно хорошо описывают решения РГ типа. Поэтому  $F_{LGR}^{(1)}$  рассчитывается с использованием решений РС. На основании приведенных в [13,25] разложений для функций, входящих в выражения для промежуточных аргументов  $\eta_{m_\tau+m}$ ,  $\xi_{m_\tau+m}$  и  $f_{LGR_1}(m)$  (42), можно получить с точностью до  $\tau^{\Delta_1}$  следующее соотношение [26]:

$$f_{LGR_1}(m) = f_{LGR_1}^{(0)}(m) + f_{LGR_1}^{(1)}(m)\tau^{\Delta_1}, \quad (43)$$

$$f_{LGR_1}^{(0)}(m) = \ln\left(\frac{2}{\pi}\right) + \frac{1}{4}\ln 24 - \frac{1}{4}\ln C(\eta_{m_\tau+m}^{(0)}, \xi_{m_\tau+m}^{(0)}) + \\ + \ln I_0(h_{m_\tau+m+1}^{(0)}, \alpha_{m_\tau+m+1}^{(0)}) + \ln I_0(\eta_{m_\tau+m}^{(0)}, \xi_{m_\tau+m}^{(0)}),$$

$$f_{LGR_1}^{(1)}(m) = \Phi_1^{(m_\tau+m)} h_{m_\tau+m}^{(0)} h_{m_\tau+m}^{(1)} + \Phi_2^{(m_\tau+m)} \alpha_{m_\tau+m}^{(0)} \alpha_{m_\tau+m}^{(1)} + \\ + \Phi_3^{(m_\tau+m+1)} h_{m_\tau+m+1}^{(0)} h_{m_\tau+m+1}^{(1)} + \Phi_4^{(m_\tau+m+1)} \alpha_{m_\tau+m+1}^{(0)} \alpha_{m_\tau+m+1}^{(1)},$$

$$\Phi_k^{(m_\tau+m)} = b_k^{(m_\tau+m)} + P_{4k}^{(m_\tau+m)}/4, \quad k = 1, 2,$$

$$\Phi_3^{(m_\tau+m+1)} = -F_2^{*(m_\tau+m+1)}, \quad \Phi_4^{(m_\tau+m+1)} = -F_6^{*(m_\tau+m+1)}.$$

Величины  $b_k^{(m_\tau+m)}$ ,  $P_{4k}^{(m_\tau+m)}$  зависят как от  $F_{2l}^{*(m_\tau+m)} = I_{2l}^{*(m_\tau+m)}/I_0^{*(m_\tau+m)}$ , где

$$I_{2l}^{*(m_\tau+m)} = \int_0^\infty x^{2l} \exp(-h_{m_\tau+m}^{(0)} x^2 - x^4 - \alpha_{m_\tau+m}^{(0)} x^6) dx, \quad (44)$$

так и от  $F_{2l}^{***(m_\tau+m)} = I_{2l}^{***(m_\tau+m)}/I_0^{***(m_\tau+m)}$ , где

$$I_{2l}^{***(m_\tau+m)} = \int_0^\infty x^{2l} \exp(-\eta_{m_\tau+m}^{(0)} x^2 - x^4 - \xi_{m_\tau+m}^{(0)} x^6) dx. \quad (45)$$

Входящие в (43) коэффициенты

$$h_{m_\tau+m} = h_{m_\tau+m}^{(0)}(1 + h_{m_\tau+m}^{(1)} \tau^{\Delta_1}), \quad (46)$$

$$\alpha_{m_\tau+m} = \alpha_{m_\tau+m}^{(0)}(1 + \alpha_{m_\tau+m}^{(1)} \tau^{\Delta_1})$$

определены в [26], а  $\eta_{m_\tau+m}^{(0)}$ ,  $\xi_{m_\tau+m}^{(0)}$  в (45) выражаются через  $F_{2l}^{*(m_\tau+m)}$ . Важным моментом при расчете  $f_{LGR_1}(m)$  явилось представление специальных функций в виде рядов по степеням малых отклонений основных аргументов  $h_{m_\tau+m}$  и  $\alpha_{m_\tau+m}$  от их значений в нулевом приближении, т.е. от  $h_{m_\tau+m}^{(0)}$  и  $\alpha_{m_\tau+m}^{(0)}$  из (46). Напомним, что в области КР учитывались отклонения основных аргументов  $h_n$  и  $\alpha_n$  ( $n \leq m_\tau$ ) от их значений в фиксированной точке  $h^{(0)}$  и  $\alpha^{(0)}$ . При суммировании по  $m$  в  $F_{LGR}^{(1)}$  (42) в качестве значения  $\tilde{m}_0$  следует использовать ближайшее к  $\tilde{m}'_0$  целое число. Конечный результат для  $F_{LGR}^{(1)}$  приобретает форму

$$F_{LGR}^{(1)} = -kTN' [f_{TR}^{(0)} \tau^{3v} + f_{TR}^{(1)} \tau^{3v+\Delta_1}], \quad (47)$$

$$f_{TR}^{(l)} = c_v^3 c_{\Delta_1}^l \bar{f}_{TR}^{(l)}, \quad l = 0, 1,$$

$$\tilde{m}_0$$

$$\bar{f}_{TR}^{(0)} = \sum_{m=0}^{\tilde{m}_0} s^{-3m} f_{LGR_1}^{(0)}(m), \quad \bar{f}_{TR}^{(1)} = \bar{f}_{TR_1}^{(1)} + 3v\Phi_0 \bar{f}_{TR}^{(0)},$$

$$\tilde{m}_0$$

$$\bar{f}_{TR_1}^{(1)} = c_{\Delta_1}^{-1} \sum_{m=0}^{\tilde{m}_0} s^{-3m} f_{LGR_1}^{(1)}(m).$$

Приступим к вычислению вклада в свободную энергию системы длинноволновых мод колебаний в области волновых векторов

$$k \leq B's^{-m'_\tau}, \quad m'_\tau = m_\tau + \tilde{m}_0 + 2. \quad (48)$$

Область малых значений волнового вектора ( $k \rightarrow 0$ )

Вводя в рассмотрение бесконечно малое внешнее магнитное поле  $\mathcal{H}$  (или  $h = \mu_B \mathcal{H}$ ,  $\mu_B$  — магнетон Бора), для части свободной энергии, соответствующей  $Z_{LGR}^{(2)}$  из (40), получаем

$$F_{LGR}^{(2)} =$$

$$= \frac{1}{2} kT \left[ N_{m'_\tau} \ln P_2^{(m'_\tau-1)} + \sum_{k=0}^{B_{m'_\tau}} \ln \tilde{d}_{m'_\tau}(k) - \frac{\beta^2 N h^2}{\tilde{d}_{m'_\tau}(0)} \right]. \quad (49)$$

Здесь

$$P_2^{(m'_\tau-1)} = 2h_{m'_\tau-1} F_2(h_{m'_\tau-1}, \alpha_{m'_\tau-1}) [d_{m'_\tau-1}(B_{m'_\tau}, B_{m'_\tau-1})]^{-1}, \quad (50)$$

$$\tilde{d}_{m'_\tau}(k) = [P_2^{(m'_\tau-1)}]^{-1} + \beta \tilde{\Phi}(B_{m'_\tau}, B_{m'_\tau-1}) - \beta \tilde{\Phi}(k).$$

Для  $d_{m'_\tau-1}(B_{m'_\tau}, B_{m'_\tau-1})$  имеем стандартное представление [3,6,26]

$$d_{m'_\tau-1}(B_{m'_\tau}, B_{m'_\tau-1}) = s^{-2(m'_\tau-1)}(r_{m'_\tau-1} + q). \quad (51)$$

Величина  $q = \bar{q}\beta\tilde{\Phi}(0)$  определяет среднее значение потенциала в  $n$ -ом слое  $\beta\tilde{\Phi}(B_{n+1}, B_n) = \beta\tilde{\Phi}(0) - q/s^{2n}$  (в данной работе  $\bar{q} = 1/2(1 + s^{-2})$  соответствует среднему арифметическому значению  $k^2$  на интервале  $(1/s, 1)$ ).

Рассчитывая  $P_2^{(m'_\tau-1)}$  и  $\tilde{d}_{m'_\tau}(k)$  с использованием для  $F_2(h_{m'_\tau-1}, \alpha_{m'_\tau-1})$  разложения из [25], а затем сумму  $1/2 \sum_{k=0}^{B_{m'_\tau}} \ln \tilde{d}_{m'_\tau}(k)$  с помощью перехода к сферической зоне Бриллюэна и интегрирования по  $k$ , приходим к окончательной формуле для  $F_{LGR}^{(2)}$  (см. [26]):

$$F_{LGR}^{(2)} = -kTN' [f^{(0)'} \tau^{3v} + f^{(1)'} \tau^{3v+\Delta_1}] - \beta N \gamma_4^+ h^2 \tau^{-2v} (1 + a_\chi^+ \tau^{\Delta_1}), \quad (52)$$

$$f^{(l)'} = c_v^3 c_{\Delta_1}^l \bar{f}^{(l)'}, \quad l = 0, 1, \quad \bar{f}^{(0)'} = s^{-3(\tilde{m}_0+1)} f^{(0)},$$

$$\bar{f}^{(1)'} = \bar{f}_{1'} + 3v\Phi_0 \bar{f}^{(0)'}, \quad \bar{f}_{1'} = c_{\Delta_1}^{-1} s^{-3(\tilde{m}_0+1)} f^{(1)},$$

$$\gamma_4^+ = c_v^{-2} \bar{\gamma}_4^+ / (\beta \tilde{\Phi}(0)), \quad \bar{\gamma}_4^+ = s^{2\tilde{m}_0} / (2g_0),$$

$$a_\chi^+ = -g_1 - 2vc_{\Delta_1} \Phi_0,$$

где

$$f^{(0)} = -\frac{1}{2} \ln \left( \frac{s^{-2} + g_0}{g_0 + \bar{q}} \right) + \frac{1}{3} - g'_0 \left[ 1 - \sqrt{g'_0} \operatorname{arctg} \left( \frac{1}{\sqrt{g'_0}} \right) \right], \quad (53)$$

$$f^{(1)} = \frac{1}{2} \left( \frac{g_0 g_1}{g_0 + \bar{q}} - \frac{g_1}{(g'_0)^{-1} + 1} - \frac{g'_0 g_1}{(g'_0)^{-1} + 1} \right) - g'_0 g_1 \left[ 1 - \frac{3}{2} \sqrt{g'_0} \operatorname{arctg} \left( \frac{1}{\sqrt{g'_0}} \right) \right],$$

$$g'_0 = s^2 g_0,$$

а  $g_0, g_1$  входят в  $\tilde{d}_{m'_\tau}(k)$  и приведены в работе [26].

Для общего выражения  $F_{LGR} = F_{LGR}^{(1)} + F_{LGR}^{(2)}$ , отвечающего вкладу в свободную энергию длинноволновых мод колебаний плотности спинового момента, на основе (47), (52) имеем

$$F_{LGR} = -kTN' [f_{LGR}^{(0)} \tau^{3v} + f_{LGR}^{(1)} \tau^{3v+\Delta_1}] - \beta N \gamma_4^+ h^2 \tau^{-2v} (1 + a_\chi^+ \tau^{\Delta_1}), \quad (54)$$

$$f_{LGR}^{(l)} = c_v^3 c_{\Delta_1}^l \bar{f}_{LGR}^{(l)}, \quad \bar{f}_{LGR}^{(l)} = \bar{f}_{TR}^{(l)} + \bar{f}^{(l)'}, \quad l = 0, 1.$$

При  $\mathcal{H} = 0$  энтропия, внутренняя энергия и теплоемкость системы, соответствующие ПГР, определяются следующими соотношениями:

$$S_{LGR} = kN' [u_3^{(LGR)(0)} \tau^{1-\alpha} + u_3^{(LGR)(1)} \tau^{1-\alpha+\Delta_1}],$$

$$U_{LGR} = kTN' [u_3^{(LGR)(0)} \tau^{1-\alpha} + u_3^{(LGR)(1)} \tau^{1-\alpha+\Delta_1}], \quad (55)$$

$$C_{LGR} = kN' [c_3^{(LGR)(0)} \tau^{-\alpha} + c_3^{(LGR)(1)} \tau^{\Delta_1-\alpha}],$$

где

$$u_3^{(LGR)(l)} = c_v^3 c_{\Delta_1}^l \bar{u}_3^{(LGR)(l)}, \quad l = 0, 1,$$

$$\bar{u}_3^{(LGR)(0)} = 3v \bar{f}_{LGR}^{(0)},$$

$$\bar{u}_3^{(LGR)(1)} = (3v + \Delta_1) \bar{f}_{LGR}^{(1)}, \quad (56)$$

$$c_3^{(LGR)(l)} = c_v^3 c_{\Delta_1}^l \bar{c}_3^{(LGR)(l)},$$

$$\bar{c}_3^{(LGR)(0)} = 3v(3v-1) \bar{f}_{LGR}^{(0)},$$

$$\bar{c}_3^{(LGR)(1)} = (3v + \Delta_1)(3v + \Delta_1 - 1) \bar{f}_{LGR}^{(1)}.$$

Теперь в результате последовательного учета коротко- и длинноволновых мод колебаний спи-

новой плотности найдем полные выражения для свободной энергии и других термодинамических функций трехмерной модели Изинга вблизи точки фазового перехода.

#### 4. Термодинамические характеристики модели при $T > T_c$ с учетом первой конфлуентной поправки

При отсутствии внешнего поля свободная энергия системы согласно (17) с учетом (37) и (54) принимает вид

$$F = -kTN' [\gamma_0 + \gamma_1 \tau + \gamma_2 \tau^2 + \gamma_3^{(0)+} \tau^{3v} + \gamma_3^{(1)+} \tau^{3v+\Delta_1}], \quad (57)$$

$$\gamma_0 = s_0^3 \ln 2 + \gamma_0^{(CR)}, \quad \gamma_3^{(l)+} = c_{v\Delta_1}^3 c_{\Delta_1}^l \bar{\gamma}_3^{(l)+},$$

$$\bar{\gamma}_3^{(l)+} = -\bar{\gamma}_3^{(CR)(l)+} + \bar{\gamma}_{LGR}^{(l)}, \quad l = 0, 1.$$

Коэффициенты  $\gamma_1, \gamma_2$  заданы в (37). Слагаемые, пропорциональные целым степеням  $\tau$  в (57), появляются исключительно вследствие учета коротковолновых мод колебаний. Члены, пропорциональные  $\tau^{3v}, \tau^{3v+\Delta_1}$  (неаналитическая часть свободной энергии), формируются в результате учета как коротко-, так и длинноволновых мод колебаний. Причем первая конфлуентная поправка возникает при учете в решениях РС меньшего собственного значения  $E_2$  матрицы линейного преобразования РГ.

Основным достоинством выражения для  $F$  является наличие соотношений, связывающих его коэффициенты с микроскопическими параметрами системы и координатами фиксированной точки РС. Коэффициенты  $\gamma_3^{(l)+}$  ( $l = 0, 1$ ) представлены в виде произведения универсальной части  $\bar{\gamma}_3^{(l)+}$  и неуниверсального множителя, зависящего посредством  $\tilde{c}_1^{(0)}, c_{20}^{(0)}$  от микроскопических параметров (см. (57)). Подобным образом представляются основные критические амплитуды и амплитуды конфлуентной поправки теплоемкости и других термодинамических характеристик системы. Величины  $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2$  приведены в табл. 3 для разных значений параметра  $s$  и радиуса эффективно действия потенциала  $b$ , а  $\bar{\gamma}_3^{(l)+}$  — в табл. 4. При  $s = 2,7349$  значение основной переменной в фиксированной точке удовлетворяет условию  $h^{(0)} \approx 0$  (см., например, [25]).

Коэффициенты  $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2$  в выражении для свободной энергии  $F$  (57)

$b$	$\gamma_0$	$\gamma_1$	$\gamma_2$
$s = 2,0000$			
$b_I$	1,8758	-0,8032	-4,4816
$b_{II}$	2,7464	-0,7759	-3,9551
$b_{III}$	3,1962	-0,7651	-3,7548
$c$	61,1798	-0,6734	-2,0482
$2c$	486,699	-0,6701	-1,9599
$s = 2,7349$			
$b_I$	1,8776	-0,7063	-4,6948
$b_{II}$	2,7496	-0,6952	-4,1735
$b_{III}$	3,2000	-0,6913	-3,9764
$c$	61,1930	-0,6924	-2,2672
$2c$	486,713	-0,6978	-2,1665
$s = 3,0000$			
$b_I$	1,8789	-0,6867	-4,5304
$b_{II}$	2,7516	-0,6795	-4,0342
$b_{III}$	3,2023	-0,6773	-3,8466
$c$	61,1999	-0,7020	-2,1971
$2c$	486,720	-0,7100	-2,0936

Таблица 4

Универсальные составляющие коэффициентов для неаналитической части свободной энергии

$s$	$\bar{\gamma}_3^{(0)+}$	$\bar{\gamma}_3^{(1)+}$
2,0000	0,9699	0,6508
2,7349	1,8654	0,7263
3,0000	2,1770	0,7162

Коэффициенты в выражениях для энтропии, внутренней энергии, теплоемкости выражаются через коэффициенты для свободной энергии. Для энтропии, внутренней энергии, теплоемкости системы при  $\mathcal{H} = 0$  с учетом первой конфлуентной поправки получаем

$$S = kN' [s^{(0)} + c_0 \tau + u_3^{(0)+} \tau^{1-\alpha} + u_3^{(1)+} \tau^{1-\alpha+\Delta_1}],$$

$$U = kTN' [\gamma_1 + u_1 \tau + u_3^{(0)+} \tau^{1-\alpha} + u_3^{(1)+} \tau^{1-\alpha+\Delta_1}], \quad (58)$$

$$C = kN' [c_0 + c_3^{(0)+} \tau^{-\alpha} + c_3^{(1)+} \tau^{\Delta_1-\alpha}].$$

Здесь

$$s^{(0)} = \gamma_0 + \gamma_1, \quad u_3^{(l)+} = c_{v\Delta_1}^3 \bar{u}_3^{(l)+}, \quad l = 0, 1, \quad (59)$$

$$\bar{u}_3^{(0)+} = 3v\bar{\gamma}_3^{(0)+}, \quad \bar{u}_3^{(1)+} = (3v + \Delta_1)\bar{\gamma}_3^{(1)+},$$

$$c_3^{(l)+} = c_v^3 c_{\Delta_1}^l \bar{c}_3^{(l)+}, \quad \bar{c}_3^{(0)+} = 3v(3v-1)\bar{\gamma}_3^{(0)+},$$

$$\bar{c}_3^{(1)+} = (3v + \Delta_1)(3v + \Delta_1 - 1)\bar{\gamma}_3^{(1)+}.$$

Коэффициенты  $c_0, u_1$  приведены в (39).

Формулу для теплоемкости (см. (58)) исследуемой модели можно переписать в виде [31,32]

$$\frac{C}{kN'} = \frac{A^+}{\alpha} \tau^{-\alpha} (1 + \alpha a_c^+ \tau^{\Delta_1}) + B^+, \quad (60)$$

$$A^+ = c_v^3 \alpha \bar{c}_3^{(0)+}, \quad a_c^+ = \frac{c_{\Delta_1} \bar{c}_3^{(1)+}}{\alpha \bar{c}_3^{(0)+}}, \quad B^+ = c_0.$$

Такую важную характеристику системы, как восприимчивость на одну частицу

$$\chi = -\frac{1}{N} \frac{\partial^2 F_{LGR}}{\partial \mathcal{H}^2}, \quad (61)$$

можно вычислить, используя (54). При бесконечно малых значениях внешнего поля  $\mathcal{H}$  вблизи  $T_c$  она задается выражением

$$\chi = \Gamma^+ \tau^{-\gamma} (1 + a_\chi^+ \tau^{\Delta_1}) \frac{\mu_B^2}{\tilde{\Phi}(0)}, \quad \Gamma^+ = 2c_v^{-2} \bar{\gamma}_4^+, \quad (62)$$

$$a_\chi^+ = c_{\Delta_1} \bar{a}_\chi^+, \quad \bar{a}_\chi^+ = -\bar{g}_1 - 2v\Phi_0,$$

$$\bar{g}_1 = \frac{g_1}{c_{\Delta_1}}, \quad \gamma = 2v.$$

Здесь величина  $\bar{g}_1$  не зависит от микроскопических параметров и получается в результате исключения из  $g_1$  неуниверсального фактора  $c_{\Delta_1} = c_0^{(0)} [\bar{c}_1^{(0)}/(f_0 \delta)]^{\Delta_1}$ . Коэффициент  $\bar{\gamma}_4^+$  приведен в (52).

Коэффициенты для теплоемкости  $C/kN'$  (60) и восприимчивости  $\chi$  (62) приведены в табл. 5. Следует подчеркнуть, что вычисленные амплитуды конфлуентных поправок  $a_c^+, a_\chi^+$  согласуются с результатами работы [33], в которой рассматриваются ведущие поправки к скейлинговым амплитудам для моделей Изинга со взаимодействием между ближайшими соседями на простой кубической, ОЦК и ГЦК решетках. В [33] показано, что амплитуды указанных поправок для восприимчивости, корреляционной длины, теплоемкости и спонтанной намагниченности имеют отрицательный знак для всех трех решеток. Там же отмечается согласие полученных результатов с результа-

тами высокотемпературных разложений и данными теоретико-полевого анализа.

Таблица 5

Значения коэффициентов в выражениях для теплоемкости  $C/kN'$  (60) и восприимчивости  $\chi$  (62)

$b$	$A^+$	$a_c^+$	$B^+$	$\Gamma^+$	$a_\chi^+$
$s = 2,0000$					
$b_I$	1,0876	-1,2609	-10,5696	1,8711	-0,0691
$b_{II}$	0,9960	-1,8262	-9,4620	1,9842	-0,1001
$b_{III}$	0,9609	-2,0389	-9,0397	2,0321	-0,1118
$c$	0,6620	-3,7773	-5,4430	2,6052	-0,2071
$2c$	0,6471	-3,8634	-5,2601	2,6450	-0,2118
$s = 2,7349$					
$b_I$	0,8113	-2,3816	-10,8022	2,1659	-0,1177
$b_{II}$	0,7439	-2,7420	-9,7375	2,2948	-0,1355
$b_{III}$	0,7184	-2,8773	-9,3355	2,3488	-0,1422
$c$	0,5050	-3,9838	-5,9193	2,9709	-0,1969
$2c$	0,4944	-4,0397	-5,7286	3,0134	-0,1996
$s = 3,0000$					
$b_I$	0,7238	-2,6494	-10,4343	2,4427	-0,1291
$b_{II}$	0,6644	-2,9650	-9,4274	2,5860	-0,1445
$b_{III}$	0,6420	-3,0832	-9,0478	2,6459	-0,1502
$c$	0,4558	-4,0460	-5,7981	3,3248	-0,1971
$2c$	0,4465	-4,0947	-5,6074	3,3710	-0,1995

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Государственного фонда фундаментальных исследований Министерства науки Украины (проект № 2.4/173).

1. И. Р. Юхновский, *ДАН СССР* **232**, 312 (1977).
2. И. Р. Юхновский, *ТМФ* **36**, 373 (1978).
3. И. Р. Юхновский, *Фазовые переходы второго рода. Метод коллективных переменных*, Наукова думка, Киев (1985).
4. I. R. Yukhnovskii, *Riv. Nuovo Cim.* **12**, 1 (1989).
5. I. R. Yukhnovskii, M. P. Kozlovskii, and I. V. Pylyuk, *Z. Naturforsch.* **46a**, 1 (1991).
6. М. П. Козловский, И. В. Пылюк, И. Р. Юхновский, *ТМФ* **87**, 293 (1991).
7. М. П. Козловский, И. В. Пылюк, И. Р. Юхновский, *ТМФ* **87**, 434 (1991).
8. И. В. Пылюк, М. П. Козловский, *Препринт ИТФ АН УССР*, ИТФ-87-31Р, Киев (1987).
9. И. В. Пылюк, *Препринт ИТФ АН УССР*, ИТФ-88-107Р, Киев (1988).
10. М. П. Козловский, И. В. Пылюк, *Труды Всесоюз. конф. «Современные проблемы статистической физики»*, Львов, 3-5 февраля 1987 г., т. 2, Наукова думка, Киев (1989), с. 50.
11. М. П. Козловский, *ТМФ* **78**, 422 (1989).
12. М. П. Козловский, И. В. Пылюк, *УФЖ* **35**, 146 (1990).
13. М. П. Козловский, И. В. Пылюк, *Препринт ИТФ АН УССР*, ИТФ-90-81Р, Киев (1990).
14. М. Р. Kozlovskii, I. V. Pylyuk, and V. V. Dukhovii, *Cond. Matt. Phys. (Lvov)* **11**, 17 (1997).

15. В. В. Духовый, М. П. Козловский, И. В. Пылюк, *ТМФ* **107**, 288 (1996).
16. R. Guida and J. Zinn-Justin, *Nucl. Phys.* **B489** [FS], 626 (1997).
17. M. M. Tsypin, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2015 (1994).
18. A. I. Sokolov, V. A. Ul'kov, and E. V. Orlov, *J. Phys. Stud. (Lvov)* **4**, 362 (1997).
19. M. P. Kozlovskii, I. V. Pylyuk, and Z. E. Usatenko, *Phys. Status Solidi* **B197**, 465 (1996).
20. М. П. Козловский, *Препринт ИТФ АН УССР*, ИТФ-82-104Р, Киев (1982).
21. М. П. Козловский, *Препринт ИТФ АН УССР*, ИТФ-84-35Р, Киев (1984).
22. M. P. Kozlovsky and I. V. Pylyuk, *Preprint ITP Acad. Sci. Ukr. SSR*, ITP-85-23E, Kiev (1985).
23. Ш. Ма, *Современная теория критических явлений*, Мир, Москва (1980).
24. М. П. Козловский, И. В. Пылюк, *Препринт ИТФ АН УССР*, ИТФ-87-9Р, Киев (1987).
25. И. В. Пылюк, *УФЖ* **41**, 885 (1996).
26. И. В. Пылюк, М. П. Козловский, *Препринт ИФКС НАН Украины*, ISMP-97-06U, Львов (1997).
27. И. Р. Юхновский, М. П. Козловский, В. А. Коломиец, *УФЖ* **27**, 925 (1982).
28. И. Р. Юхновский, М. П. Козловский, В. А. Коломиец, *УФЖ* **27**, 930 (1982).
29. И. Р. Юхновский, М. П. Козловский, В. А. Коломиец, *УФЖ* **27**, 1399 (1982).
30. М. П. Козловский, И. В. Пылюк, В. А. Коломиец, *Препринт ИТФ АН УССР*, ИТФ-84-177Р, Киев (1984).
31. C. Bagnuls and C. Bervillier, *Phys. Rev.* **B24**, 1226 (1981).
32. J. F. Nicoll and P. C. Albright, *Phys. Rev.* **B34**, 1991 (1986).
33. A. J. Liu and M. E. Fisher, *J. Stat. Phys.* **58**, 431 (1990).

Description of the critical behavior of the Ising ferromagnet in  $\rho^6$  model approximation taking into account the confluent correction.

I. Region above the phase transition point

I. V. Pylyuk

The behavior of the 3D Ising system at temperatures above  $T_c$  is studied in the approximation of the sextic distribution for modes of the spin density oscillations ( $\rho^6$  model). In this higher non-Gaussian approximation, an original technique has been developed to calculate the thermodynamic characteristics of the 3D Ising model near  $T_c$  taking into account the first confluent correction. The contributions to the thermodynamic functions of the Ising ferromagnet (the free energy, entropy, internal energy, specific heat) from the short-wave length and long-wave length modes of the spin moment density oscillations are considered separately. The non-universal factor depending on microscopic parameters of the system is separated in the expressions for the leading critical amplitudes and confluent correction amplitudes. The critical region size, phase transition temperature, leading critical amplitudes and correction-to-scaling amplitudes for the specific heat and susceptibility of the system are calculated for different numerically effective radii of the exponentially decreasing interaction potential.