

МЕТОД ТЕОРЕТИЧНОГО ОПИСУ КРИТИЧНОЇ ПОВЕДІНКИ 3D МОДЕЛІ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДУ В ЗОВНІШНЬОМУ ПОЛІ

Михайло КОЗЛОВСЬКИЙ

Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
вул. Свенціцького 1, м. Львів, 76011, Україна,
e-mail: mpk@icmp.lviv.ua

Редакція отримала статтю 10 січня 2011 р.

Робота присвячена викладу та розвитку аналітичного методу опису поведінки основних характеристик системи поблизу точки фазового переходу, запропонованого І.Р. Юхновським. Узагальнення стосується вивчення впливу зовнішнього поля на поведінку таких фізичних характеристик як вільна енергія, параметр порядку, сприйнятливості тощо. В рамках спрощеної моделі проведено розрахунок як значень критичних показників, так і критичних амплітуд ряду фізичних величин. Запропонована узагальнена форма запису скейлінгової форми вільної енергії системи поблизу точки фазового переходу. Отримано кросоверне рівняння стану, яке передбачає явну залежність параметра порядку від відносної температури та зовнішнього поля.

1. ВСТУП

Особлива увага при вивченні поведінки статистичних систем належить таким значенням її параметрів, при яких стрибком змінюються її властивості. Розрізняють два типи такої зміни. Перший з них пов'язаний із виникненням при певних умовах якісно нової фази речовини, властивості якої відмінні від початкової. Його називають фазовим переходом (ФП) першого роду. Він супроводжується розшаруванням на фази і характеризується стрибком деяких перших похідних відповідного термодинамічного потенціалу. Як відомо [1], точка фазового переходу (ТФП) першого роду являє собою лише точку перетину термодинамічних потенціалів кожної із фаз. Якщо розглядати при цьому потенціал кожної з фаз окремо, то точка фазового переходу не є для кожного з них особливою точкою. Однак перехід із однієї гілки термодинамічного потенціалу (фаза 1) на іншу гілку (фаза 2) зумовлює стрибки перших похідних саме в точці перетину цих потенціалів. Другий тип поведінки характеризується появою нової якості у всьому об'ємі системи. Тут нема вкрапельнь іншої фази, а має місце процес

глобальної зміни. На відміну від фазових переходів першого роду тут виключаються перегріті чи переохолоджені стани. Натомість одночасне виникнення у всьому об'ємі нової якості передбачає аномально великий ріст кореляційного радіуса при наближенні до ТФП другого роду. З точки зору термодинамічного потенціалу маємо справжню особливість, оскільки єдиний потенціал має описувати як стару так і нову якість при переході через точку фазового переходу. Термін фазові переходи другого роду пов'язаний із виникненням особливостей його других похідних в той час, як сам термодинамічний потенціал чи його перші похідні залишаються неперервними функціями температури. Проблеми теоретичного опису ФП другого роду пов'язані, перш за все, із аномальним ростом кореляційної довжини та відсутністю малого параметра, який можна було б використати при побудові теорії [2-4].

Іншим важливим питанням дослідження властивостей системи поблизу ТФП є вплив зовнішніх полів. Відомо, що наявність в системі зовнішнього поля спряженого до параметра порядку призводить до зникнення фазового переходу як такого [5-7]. Разом з тим, наявність аномальної поведінки других похідних термодинамічного потенціалу поблизу температури ФП T_c залишається навіть при наявності достатньо малого зовнішнього поля. Такі особливості спостерігаються на експерименті й до цього часу не мають належного обґрунтування на рівні мікроскопічного теоретичного опису. Важливим граничним випадком наявності поля при ФП є температура $T = T_c$, де як відомо [6-8], має місце особлива залежність сприйнятливості, теплоємності та інших других похідних термодинамічного потенціалу як функцій поля. Вона характеризується польовими критичними показниками на відміну від температурних показників, які мають місце поблизу ТФП при відсутності поля.

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 фероелектрика – 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 ряд монографій [1-9]. Цей перелік далеко не повний, однак дає змогу прослідкувати розвиток уявлень про способи опису критичних явищ.

При вивченні фазових переходів використовуються експериментальні та аналітичні підходи, а також числові методи розрахунку різних фізичних характеристик, як правило модельних систем. 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, 6]), перед-

бачають так звані “класичні” значення критичних показників. Під критичними показниками розуміються числа, які визначають степеневу поведінку таких фізичних величин як намагніченість M , сприйнятливність χ , теплоємність C та інших величин стосовно 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. Не зважаючи 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].

Інша група методів опису критичної поведінки ґрунтується на використанні ренормгрупового підходу. В їх основі знаходиться гіпотеза масштабної інваріантності [14–17]. Остання тісно пов’язана з поняттям кореляційної довжини, яка характеризує великомасштабні флуктуації параметра порядку поблизу ТФП. В міру наближення до цієї точки кореляційна довжина зростає і при відсутності поля стає безмежною в самій точці. Це і зумовлює сингулярності в макроскопічних спостережувальних характеристиках системи.

Прямуювання до безмежності таких величин як кореляційна довжина, сприйнятливність, теплоємність тощо характерна лише для модельних систем з безмежно великим числом частинок. Для реальних систем на експерименті спостерігається лише їх аномальний ріст до певної скінченної величини. Це зумовлюється як скінченністю реальних зразків, так і наявністю зовнішніх полів. Саме впливу зовнішніх полів на критичну поведінку і присвячено цю роботу. Вона в значній мірі доповнює роботу [18], узагальнюючи отримані там результати на область температур нижчих від температури фазового переходу.

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

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

Розділ 4 містить визначення точки виходу системи із критичного режиму флуктуацій параметра порядку при наявності зовнішнього поля. Ця величина визначає розміри скейлінгової області, які залежать від відносної температури, величини поля та пропорційні до кореляційної довжини системи [34–36].

У п’ятому розділі приведена схема обчислення вільної енергії системи для області температур більших за T_c [36–42]. Тут важливим елементом є виділення вкладу до вільної енергії, пов’язаного із макроскопічною частиною параметра порядку. Далеко від точки ФП переходу такі вклади асоціюються із вільною енергією Ландау як розкладом за степенями параметра порядку. Однак поблизу ТФП ситуація змінюється і подібні вклади містять нетривіальну залежність від зов-

нішнього поля \mathcal{H} та відносної температури τ .

Розділ 6 присвячено викладу методу обчислення явного виразу для вільної енергії системи поблизу ТФП при наявності зовнішнього поля. Це зроблено без введення ззовні будь-яких феноменологічних параметрів, хоча є наближеними. Однак навіть використання наближеного підходу дає змогу знайти для вільної енергії системи F більш загальний вираз, ніж це відомо на сьогодні із скейлінгової теорії.

Розділ 7 присвячений обчисленню вільної енергії при наявності зовнішнього поля в області температур $T < T_c$. Ця область характеризується наявністю відмінного від нуля параметра порядку навіть у випадку відсутності поля. Фізичним виявом цієї ситуації є виникнення деякого внутрішнього поля поряд з зовнішнім полем, що зумовлює відмінність виразу для вільної енергії в області $T < T_c$ порівняно з випадком $T > T_c$.

У заключному, восьмому розділі подано результати обчислення виразів для параметра порядку та сприйнятливості поблизу ТФП. Отримана загальна форма рівняння стану. Скейлінгова складова теорії дає змогу обчислювати значення критичних показників. На сьогодні вона розвинута достатньо добре і базується на використанні наявної поблизу ТФП ренормгрупової симетрії. Загальна теорія критичних явищ полягає у визначенні вигляду вільної енергії та фізичних характеристик моделі. Сьогодні вона перебуває на етапі становлення і передбачає пряме обчислення вільної енергії. Одним із напрямків такого підходу є метод Юхновського, який базується на використанні простору колективних змінних і полягає в прямому обчисленні вільної системи поблизу ТФП. У процесі прямого обчислення фізичних величин поблизу ТФП природним чином виникає ситуація, яка передбачає використання апарату ренормалізаційної групи як одного із етапів загального обчислення. Це дає змогу як порахувати критичні показники, так і отримати загальний вираз для вільної енергії системи, що включає внески від скейлінгової області та від інших флуктуаційних процесів. Останні є визначальними при формуванні виразів для спостережувальних величин.

2. СУЧАСНІ ТЕОРЕТИЧНІ МЕТОДИ ОПИСУ ФАЗОВИХ ПЕРЕХОДІВ

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 значень $\beta = 0.5$, $\gamma = 1$, $\alpha = 0$, де β визначає поведінку параметра порядку як функції температури, γ – описує температурну поведінку стисливості, α – теплоємності. В теорії магнітних фазових переходів досі актуальною є теорія молекулярного поля Вейса. В її основі лежить припущення, що взаємодія спінів може бути описана з використанням поняття молекулярного поля H_m , яке пропорційне до намагніченості $M(T, H)$, тобто $H_m = \lambda M(T, H)$, де λ – параметр молекулярного поля. Рівняння стану в теорії середнього (молекулярного) поля для моделі

Ізінга має простий вигляд

$$M = M_0 th \left[\frac{1}{2} \beta \bar{\mu} (H + \lambda M) \right]. \quad (2.1)$$

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 врахування флуктуаційних ефектів.

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 $\bar{\sigma}$.

$$F = N (a_0 + a_2 \bar{\sigma}^2 + a_4 \bar{\sigma}^4 + a_6 \bar{\sigma}^6 + \dots - h \bar{\sigma}). \quad (2.2)$$

Особливий інтерес становить випадок $a_2 = 0$, що має місце при температурі $T = T_c$. Оскільки за припущенням теорії функції a_{2n} є гладкими, то вважається, що $a_2 = a'_2 (T - T_c)$, де a'_2 – деяка стала величина. Це є друге припущення теорії Ландау. Маючи вільну енергію, можемо отримати вирази для параметра порядку M , сприйнятливості χ , ентропії S , теплоємності C та інших величин, використовуючи відомі співвідношення

$$M = - \left(\frac{\partial F}{\partial h} \right)_T, \quad \chi = \left(\frac{\partial M}{\partial h} \right)_T, \quad S = - \frac{\partial F}{\partial T}, \quad C = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2}. \quad (2.3)$$

Обмежимося у розкладі (2.2) доданками, пропорційними до $\bar{\sigma}^4$. Тоді для випадку $a_4 > 0$ отримуємо значення

$$M = \begin{cases} h/2a_2, & T > T_c, \\ m_0 + h/(8m_0^2 a_4), & T < T_c, \end{cases} \quad (2.4)$$

де $m_0 = (-a_2/2a_4)^{1/2}$. Сприйнятливість системи має вигляд

$$\chi = \begin{cases} [2a'_2 (T - T_c)]^{-1}, & T > T_c, \\ [4a'_2 (T_c - T)]^{-1}, & T < T_c. \end{cases} \quad (2.5)$$

Теплоємність системи залишається сталою величиною і при переході через значення $T = T_c$ має стрибок $\Delta C = T_c^2 a_2'^2 / 2a_4$. Теорія Ландау призводить до класичних значень критичних показників, однак поряд із цим вона дає змогу отримати повні вирази для M , 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 прямуванні температури T до T_c . Добре відомо, що розклад (2.2) поблизу ТФП є некоректним, оскільки коефіцієнти розкладу a_2 , a_4 , a_6 є неаналітичними функціями температури. Припущення про можливість розкладу в ряд вільної енергії виявляється неефективним поблизу точки фазового переходу.

Незважаючи на такі обмеження теорія Ландау й зараз відіграє суттєву роль в описі фазових переходів. Передусім це стосується об'єктів (надпровідники, деякі феромагнітні та фєроелектричні матеріали) з малим числом Гінзбурга [43]. Флуктуації відіграють суттєву роль в області $|\tau| \leq \xi_T$, де

$$\tau = \frac{T - T_c}{T_c}, \quad (2.6)$$

а величина ξ_T залежить від типу системи. Так для критичної точки надпровідника $\xi_T \sim 10^{-15}$ і вплив флуктуацій спостерігається в дуже вузькій області температур поблизу T_c . Для λ -точки He^4 маємо $\xi_T \sim 0.3$ [4]. Для 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 гамільтоніану було запропоновано в роботах Г.Стенлі [3]

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^{(N)} S_j^{(N)} - \sum_i \mathcal{H} S_i^{(N)}, \quad (2.7)$$

де спіни $\vec{S}_i^{(N)}$ – N -вимірні одиничні вектори, J – енергія взаємодії найближчих сусідів. Скалярний добуток в (2.7) має вигляд $\sum_{n=1}^N S_{in} S_{jn}$. Ця модель і сьогодні використовується при описі 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 відому 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 (2.7) також описує певні модельні системи, однак залишається питання про аналог відповідної фізичної системи. Виявляється [45], що у випадку $N \rightarrow \infty$ ця модель 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 точний 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 даним експерименту зумовило інтенсивні дослідження критичних явищ, починаючи з середини 70-х років минулого століття. З цього часу було розвинуто ряд підходів щодо уточнення їхніх значень. Одним з перших в цьому плані став метод ϵ -розкаду ($\epsilon = 4 - d$, 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 спінових флуктуацій не є розбіжним [5]. Тому для значень d , близьких до 4, параметр ϵ набуває малі значення і є надія отримати добрі результати для таких систем. Тому відповідні обчислення проводяться за умови $\epsilon \ll 1$, а в остаточних результатах формально покладається $\epsilon = 1$ і отримуються значення критичних показників

ніби для тривимірної системи. В роботі [50] 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 пересумування за допомогою техніки Паде-Бореля [52] дало змогу отримати досить точні значення критичних показників.

Метод ϵ -розкладу залишається і зараз надзвичайно продуктивним для цілого ряду моделей статистичної фізики. Він використовує гамільтоніан Гінзбурга-Ландау

$$H = \int d^d x \left[\frac{1}{2} (\nabla \varphi(x))^2 + \frac{1}{2} m \varphi^2(x) + \frac{1}{4} g \varphi^4(x) - \mathcal{H} \varphi(x) \right] \quad (2.8)$$

для n -компонентних спінів в d -вимірному просторі. По суті, тут записаний розклад в ряд за степенями величин $\varphi(x)$ 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 постійна величина. Останній доданок в (2.8) враховує наявність зовнішнього поля \mathcal{H} . Вважається, що гамільтоніан (2.7) еквівалентний представленню (2.8) з точки зору опису критичних явищ.

Слід зазначити два основних моменти стосовно виразу (2.8). Перший із 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 гамільтоніану (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. Крім критичних показників на сьогодні відомі вирази для рівняння стану [55-57], відношення критичних амплітуд [58]. Схема обчислення критичних показників у вигляді ϵ -розкладу носить назву безмасової теорії поля. Така назва пов'язана з тим, що ренормування відбувається при $m = 0$ та за ненульового значення імпульсу. Кінцеві результати не залежать від значення імпульсу, що свідчить про наявність масштабної інваріантності. Безмасова теорія поля працює безпосередньо при $T = T_c$, оскільки обернена сприйнятливість, яка є аналогом маси в теорії поля, стає нульовою. 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 була запропонована т.зв. масивна теорія поля [60]. Вона не має вказаної вище проблеми і використовує фіксовану вимірність простору $d = 3$. На сьогодні цей метод дає змогу отримувати значення критичних показників з великою ступінню точності. Так, в [61,62] приведені результати обчислення критичних показників у шестипетлевому наближенні для вимірності параметра порядку $n = 0; 1; 2; 3$. На жаль, ряди масивної теорії мають також асимптотичний характер.

Використання теоретико-польових методів обчислення передбачає використання гамільтоніанів типу (2.8), в яких вважається, що ко-

ефіцієнт біля $\varphi^2(x)$ 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, нижче якої спонтанно виникає параметр порядку, чи має місце аномальний ріст сприйнятливості, теплоємності або ж іншої фізичної величини.

Крім цього в теоретико-польових підходах до опису критичних явищ виникає ще одна проблема. Всі вони, як і метод ϵ -розкладу, ґрунтуються на використанні як 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 при побудові теорії негаусових розподілів флуктуацій дає змогу уникнути різного роду неаналітичностей, пов'язаних з вибором методу обчислення, а не з фізикою задачі. Тому за останній час розвинувся ще один альтернативний до теорії збурень напрямок, що 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 далекоюсяжних взаємодій. Відбувається поступовий перехід від мікроскопічної вільної енергії системи до її макроскопічного аналогу. В основі методу є інтегро-диференціальне рівняння [64, 65]. Складність отримання розв'язків цього (точного) рівняння спричинила до пошуку низки наближених розв'язків. Найпростішим з них є так зване наближення локального потенціалу [66, 67], яке передбачає квадратичну залежність від хвильового вектора ефективного гамільтоніану 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 рамках цього підходу здійснювалося також врахування імпульсної залежності ефективного гамільтоніану. 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 призводить 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 ряд недоліків. Серед них – присутність різного роду параметрів. Відкритим залишається питання про збіжність розкладів за змінною хвильового вектора. Основним моментом є те, що розв'язки можна знайти лише з допомогою числових методів, що ускладнює розуміння фізики процесу фазового переходу.

Зауважимо, що будь-яка система має поблизу точки ФП другого роду дві якісно різні критичні поведінки. Перша з них відповідає відсутності зовнішнього поля. При цьому фізичні величини характеризуються певною температурною залежністю і відповідно критичними

показниками, які надалі називатимемо температурними (див. Табл. 1).

Таблиця 1. Асимптотична поведінка фізичних величин поблизу ТФП при $h = 0$.

Фізична величина	Закон зміни	Значення для моделі Ізінга [77]
Параметр порядку	$M = M_{0t} \tau ^\beta$	$\beta = 0.326$
Кореляційна довжина	$\xi = \xi_{0t} \tau ^{-\nu}$	$\nu = 0.630$
Сприйнятливість	$\chi = \chi_{0t} \tau ^{-\gamma}$	$\gamma = 1.240$
Теплоємність	$C = C_{0t} \tau ^{-\alpha}$	$\alpha = 0.109$

Інший тип критичної поведінки має місце при $T = T_c$. Він характеризується залежністю основних термодинамічних величин від поля і описується польовими критичними показниками. Набір польових критичних показників приведено в Табл. 2.

Таблиця 2. Асимптотична поведінка фізичних величин поблизу ТФП при $T = T_c$.

Фізична величина	Закон зміни	Значення для моделі Ізінга
Параметр порядку	$M = M_{0h}h^{1/\delta}$	$\delta = (d+2-\eta)/(d-2+\eta)$
Кореляційна довжина	$\xi = \xi_{0h}h^{-\mu}$	$\mu_\alpha = \nu/(\beta + \gamma)$
Сприйнятливість	$\chi = \chi_{0h}h^{1/\delta-1}$	$1/\delta - 1 = \frac{-4 + 2\eta}{d + 2 - \eta}$
Теплоємність	$C = C_{0h}h^{-\varphi}$	$\varphi = \alpha/(\beta\delta)$

На сьогодні 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. Всі вони призводять до результатів для критичних показників, які добре узгоджуються між собою [77].

Актуальною проблемою при описі критичних явищ є розвиток загальної теорії, яка б, поряд із знаходженням значень критичних показників, дозволила б отримати явні вирази для фізичних величин як це є в класичних теоріях. Найбільш розвинутою в цьому плані є скейлінгова теорія, яка суттєво використовується при згаданому вище обчисленні критичних показників. В основі скейлінгової теорії лежить гіпотеза подібності, запропонована в [14-17] та схема побудови ефективних спінових блоків Каданова [16]. Так для вільної енергії F маємо

$$F_s(\tilde{\tau}, \tilde{h}) = s^d F(\tau, h). \quad (2.9)$$

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 $\tilde{\tau} = s^{y_\tau} \tau$, $\tilde{h} = s^{y_h} h$, де y_τ та y_h – довільні числа, які пов'язані з критичними показниками $y_t = 1/\nu$, $y_h = 1/\mu$. Критичний показник ν характеризує кореляційну довжину при відсутності поля

$$\xi = \xi^\pm |\tau|^{-\nu}, \quad (2.10)$$

а при $T = T_c$ ця ж величина описується критичним показником μ :

$$\xi = \xi^{(c)} h^{-\mu}. \quad (2.11)$$

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

$$M = B(-\tau)^\beta, \quad (2.12)$$

яке визначає температурну поведінку параметра прядку, а у випадку $T = T_c$ його поведінка описується критичним показником δ

$$M = B^{(c)} h^{1/\delta}, \quad (2.13)$$

який характеризує польову залежність параметра порядку. Величини B та $B^{(c)}$ називаються критичними амплітудами. Наведені вище вирази дають змогу представити скейлінгову форму сингулярної частини вільної енергії поблизу ТФП у вигляді

$$F(\tau, h) = s^{-d} F_s(s^{y_t} \tau, s^{y_h} h). \quad (2.14)$$

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 еквівалентно до значення параметра $s_\tau = |\tau|^{-1/y_t} = |\tau|^{-\nu}$. У цьому випадку рівність (2.14) набуває вигляду

$$F(\tau, h) = |\tau|^{d\nu} f_s(1, \alpha_0). \quad (2.15)$$

Перший множник описує поведінку вільної енергії системи у випадку малих значень поля, точніше при малих значеннях величини $\alpha_0 = h/|\tau|^{\beta\delta}$. Другий множник f_s носить назву скейлінгової функції вільної енергії. Він залежить лише від відношення приведенного магнітного поля h до температурного поля

$$h'_c = |\tau|^{\beta\delta}. \quad (2.16)$$

Прямої залежності від τ чи h функція f_s не має, з чим і пов'язана назва – скейлінгова функція.

Друге характерне значення параметра s пов'язане із умовою $s^{y_h} h = 1$. Це відповідає значенню $s = s_h$, де $s_h = h^{-\frac{1}{y_h}} = h^{-\mu}$. При такому виборі параметра s для вільної енергії (2.14) отримуємо вираз

$$F(\tau, h) = h^{\frac{d\nu}{\beta\delta}} f_s(z, 1). \quad (2.17)$$

Очевидно, що таке представлення доцільно використовувати для великих значень поля, точніше для малих значень аргумента $z = \frac{\tau}{h^{1/\delta\beta}}$. Легко зауважити, що величини z та α_0 є взаємнооберненими $z = \alpha_0^{-1/\delta\beta}$.

Вирази (2.15) та (2.17) справджуються при довільних співвідношеннях між τ та h . Водночас, представлення (2.15) зручніше при малих значеннях поля, оскільки множник $|\tau|^{d\nu}$ максимально повно відтворює поведінку вільної енергії, а функція $f_s(1, \alpha_0)$ призводить до незначної корекції цієї залежності. По мірі збільшення поля вплив $f_s(1, \alpha_0)$ зростає і при великих значеннях поля залежність (2.15) замінюється на (2.17), де вже функція $f_s(z, 1)$ лише незначно корегує залежність вільної енергії $h^{d\nu/\beta\delta}$.

З цієї точки зору постає важливе завдання пошуку залежності

$$F = f_a(\tau, h)F_s(z, \alpha_0), \quad (2.18)$$

де б для функції $f_a(\tau, h)$ був відомий явний аналітичний вигляд і в граничних випадках функція $f_a(\tau, h)$ переходила б в $|\tau|^{d\nu}$ при малих значеннях поля і в вираз $h^{\frac{d\nu}{\beta\delta}}$ при великих значеннях h . При цьому нова скейлінгова $F_s(z, \alpha_0)$ мала б бути малою поправкою при довільних значеннях поля і не впливати на асимптотику вільної енергії.

Ще одним досягненням скейлінгової теорії є форма рівняння стану. На сьогодні відомі декілька представлень такого рівняння для 3D ізінгоподібних систем [78-80]. Найпростіше з них має вигляд $H = D_c M^\delta$. Воно відповідає виразу (2.13) 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 $T \neq T_c$ це рівняння стану має бути змінено. Узагальненням займалися три групи дослідників [7]. Серед них Відом [81], Домб та Хантер [82], Паташинський та Покровський [17]. Результати досліджень були узагальнені в [83] як рівняння стану феромагнетика $H = M^\delta f(x)$, де $f(x)$ деяка аналітична функція аргумента $x = \tau M^{-1/\beta}$. Для скейлінгової функції $f(x)$ мають місце стандартні граничні умови $f(0) = 1$; $f(-1) = 0$. Перша з них відповідає випадку $T = T_c$ та призводить до залежності (2.13), друга описує випадок $H = 0$ та трансформує це рівняння в залежність (2.12) внаслідок умови $x = -1$. З мікроскопічної точки зору величина M є функцією температури та поля. У зв'язку з цим більш коректно записувати рівняння стану у вигляді

$$M = h^{1/\delta} f_G(z), \quad (2.19)$$

де використовуються наступні позначення [80]

$$\bar{h} = \mathcal{H}/H_0, \quad \bar{\tau} = \tau \frac{T_c}{T_0}, \quad z = \frac{\bar{\tau}}{\bar{h}^{1/\beta\delta}}. \quad (2.20)$$

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 $f(x)$ можна переписати для функції $f_G(x)$. Вони мають вигляд $f_G(0) = 1$ для випадку $T = T_c$, та $\lim_{z \rightarrow -\infty} f_G(z) = (-z)^\beta$ для випадку $h \rightarrow 0$, якщо $T < T_c$. Вигляд самої скейлінгової функції обчислюється з використанням як теоретичних, так і числових методів. Серед теоретичних методів вивчення рівняння стану слід відзначити метод ϵ -розкладу [57], використання теоретико-польових підходів [79-84]. Заслуговує на увагу так звана параметрична форма запису рівняння стану. Вона відома ще з роботи [85]. Дослідження недавніх років [84] показали добре узгодження цього рівняння з даними числових розрахунків [80].

3. ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДУ КОЛЕКТИВНИХ ЗМІННИХ ДЛЯ ОПИСУ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДУ ДРУГОГО РОДУ

На сьогодні існує декілька підходів до вивчення критичної поведінки систем. Серед них аналітичні методи обчислення основних характеристик ряду модельних систем, що приводять до класичних значень критичних показників. Такі методи в повній мірі не описують поведінки фізичних величин поблизу точки фазового переходу, оскільки в той чи інший спосіб не враховують флуктуаційних ефектів. Переваги цих методів полягають у тому, що вони дають змогу проводити прямі обчислення загальних виразів, починаючи з гамільтоніану системи, зокрема, використовуючи (2.7). У 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 (2.8). Його зв'язок із (2.7) характеризується коефіцієнтами m та g . Для обчислення значень критичних показників абсолютно не важливо, яких початкових значень набувають величини m та g . Щоб вираз (2.8) описував фазовий перехід достатньо припустити, що $m \sim \tau$. При більш детальному розгляді виявляється, що вирази (2.7) та (2.8) пов'язані між собою цілком конкретними співвідношеннями. Міркування з цього приводу можна знайти в [5,49]. Подібний перехід пов'язаний з обчисленням якобіану переходу від спінових змінних s_i до польових (колективних) змінних $\varphi(x)$. Вперше розрахунок такого якобіану з використанням строгого математичного підходу був запропонований І.Р. Юхновським [19, 20]. Як було показано в цих роботах, розподіл флуктуацій параметра порядку зображається у вигляді поліному за колективними змінними (КЗ) $\rho_{\vec{k}}$ 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].

Опис поведінки тривимірних систем поблизу точки фазового переходу другого роду будемо виконувати на прикладі моделі Ізінга. Гамільтоніан такої системи за наявності зовнішнього поля \mathcal{H} має ви-

гляд

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} \Phi(r_{ij}) \sigma_i \sigma_j - \mathcal{H} \sum_l \sigma_l.$$

Тут $\Phi(r_{ij})$ – короткосяжний потенціал взаємодії, що описується експонентно спадною функцією віддалі $\Phi(r_{ij}) = A \exp(-r_{ij}/b)$. Сумування відбувається по вузлах простої кубічної ґратки з періодом c . Спінова змінна σ_i приймає два значення ± 1 . Статистична сума моделі записується в представленні колективних змінних (КЗ)

$$Z = \int \exp \left(\frac{1}{2} \sum_{k \in \mathcal{B}} \beta \Phi(k) \rho_{\vec{k}} \rho_{-\vec{k}} \right) J_h(\rho) (d\rho)^N,$$

де $J_h(\rho)$ є якобіан переходу від спінових σ_i до КЗ $\rho_{\vec{k}}$, $\Phi(k)$ – фур'є-образ потенціалу взаємодії. Обчислення якобіану переходу виконано вперше І.Р. Юхновським в [5]. Узагальнення результатів на випадок наявності зовнішнього поля здійснено в [18].

Використовуючи результати робіт [29-32], запишемо функціональне представлення моделі Ізінга в зовнішньому полі $h = \beta H$

$$Z = Z_0 \int (d\eta)^{N_0} \exp \left[a_1 \sqrt{N_0} \eta_0 - \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathcal{B}_0} d(k) \eta_{\vec{k}} \eta_{-\vec{k}} - \frac{a_4}{4!} N_0^{-1} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_4 \\ \vec{k}_i \in \mathcal{B}_0}} \eta_{\vec{k}_1} \dots \eta_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_4} \right]. \quad (3.1)$$

Тут використане 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) ($N_0 = N \cdot s_0^{-d}$, N – число частинок, s_0 – параметр моделі ($s_0 > 1$) [29,33] $\eta_{\vec{k}} = \eta_{\vec{k}}^c - i\eta_{\vec{k}}^s$ – дійсна та уявна частини яких набувають значення із області дійсних чисел. Тут змінні η_k пов'язані з модами коливань спінового моменту та містять змінну η_0 , середнє значення якої безпосередньо пов'язане з намагніченістю. Зауважимо, що опис подій поблизу точки фазового переходу другого роду передбачає використання негаусового розподілу флуктуацій. На відміну від часто вживаного гаусового розподілу, негаусовий розподіл дає змогу уникнути розбіжних вкладів до фізичних величин чисто математичного характеру. Природа цієї розбіжності пов'язана з прямуванням до безмежності дисперсії гаусового розподілу при наближенні до точки ФП [8]. Елемент об'єму фазового простору КЗ має вигляд $(d\eta)^{N_0} = d\eta_0 \prod_{k \in \mathcal{B}_0} d\eta_k^c d\eta_k^s$, де штрих біля знаку добутку означає, що $k > 0$. Величина $d(k)$ включає фур'є-образ $\Phi(k)$ деякого короткодіючого потенціалу взаємодії

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

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

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

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 при $d = 2$ є особливим серед інших вимірностей простору. Так при $d \geq 4$ в якості базового можна використовувати гаусовий розподіл флуктуацій. При $d = 3$ базовим є четвірний 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 $\eta_{\vec{k}}$ [5]. Лише використання безмежного поліноміального ряду за степенями змінної $\eta_{\vec{k}}$ відповідає коректному базисному розподілу. Це означає [5], що у випадку $d = 2$ задача повинна мати точний розв'язок. Такий розв'язок для моделі Ізінга при відсутності зовнішнього поля був знайдений Онзагером.

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

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

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

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

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

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

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

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

де $\Phi(0) = A \cdot 8\pi(b/c)^3$. При достатньо малих значеннях $\vec{k} \in \mathcal{B}_0$ вираз (3.7) достатньо добре описується параболічною апроксимацією.

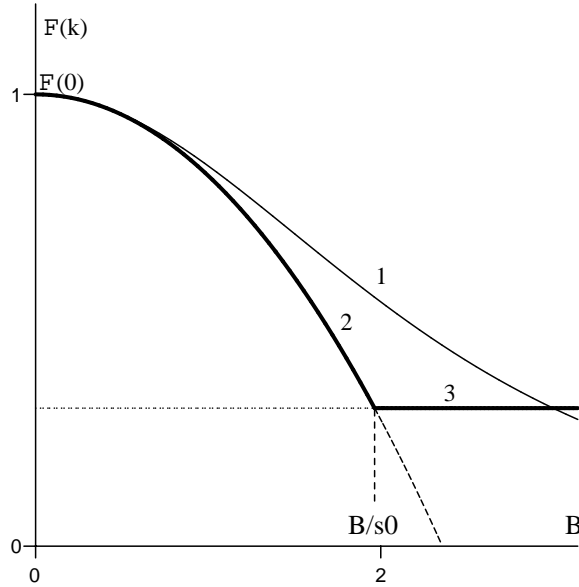


Рис. 1. Схематичне зображення фур'є-образу потенціалу взаємодії (3.7) (крива 1) та його параболічної апроксимації (3.4) (крива 2). Крива 3 відповідає величині $\bar{\Phi} = \Phi(0)\bar{\Phi}$ із $\bar{\Phi}$ як у (3.9).

Подібна ситуація має місце для потенціалу взаємодії найближчих сусідів, який традиційно використовується при описі фазових переходів. Зрозуміло, що для цього потенціалу $s_0 > 2$ (рис.1).

Основний вклад в 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 області $\vec{k} \in \mathcal{B}_0$. Що стосується великих значень хвильових векторів $\vec{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0$, то для опису критичної поведінки системи тут достатньо обмежитись для $\Phi(k)$ деяким сталим значенням $\bar{\Phi}$. 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 $\vec{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0$, а постійна 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 [16] відповідно до гіпотези Каданова [90]. Перша реалізація цієї гіпотези на мікроскопічному рівні була здійснена в роботах К. Вільсона [49,91].

Реалізований в цій роботі підхід базується, на відміну від підходу Вільсона, на використанні негаусових базисних розподілах флуктуацій параметра порядку, як це було запропоновано в методі Юхновського [25]. Це дає змогу 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 поетапне обчислення виразу для статистичної суми (3.1). Скористаємося для цього результатами робіт [22,29], де запропонований аналітичний спосіб виключення з розгляду змінних $\eta_{\vec{k}}$ з великими значеннями хвильових векторів. На першому етапі інтегрування виключається множина змінних $\eta_{\vec{k}}$ із $\vec{k} \in \mathcal{B}_0 \setminus \mathcal{B}_1$, де

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

Тут $c_1 = c_0 \cdot s$, 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 приймати довільні значення більші 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 $\eta_{\vec{k}}$ 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).

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

$$Z = Z_0 [Q(d)]^{N_0} \left(\prod_{n=1}^{n_p} Q_n \right) Z_{LGR}, \quad (3.12)$$

де відповідно до [8] маємо

$$Q(d) = (2\pi)^{1/2} (3/a_4)^{1/4} \exp\left(\frac{x^2}{4}\right) U(0, x). \quad (3.13)$$

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

$$x = d(B_1, B_0) (3/a_4)^{1/2}, \quad (3.14)$$

а для самих функцій має місце інтегральне представлення

$$U(a, x) = \frac{2}{\Gamma\left(a + \frac{1}{2}\right)} \exp\left(-\frac{x^2}{4}\right) \int_0^\infty t^{2a} \exp\left(-xt^2 - \frac{1}{2}t^4\right) dt. \quad (3.15)$$

Величини Q_n є парціальними статистичним сумами n -того рівня

$$Q_n = [Q(P_{n-1})Q(d_n)]^{N_n}, \quad (3.16)$$

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

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

$$Q(P_n) = (2\pi)^{-1/2} \left(\frac{a_4^{(n)}}{\varphi(x_n)}\right)^{1/4} s^{3/4} \exp\left(\frac{y_n^2}{4}\right) U(0, y_n). \quad (3.17)$$

Для аргументів x_n та y_n маємо вирази

$$x_n = d_n(B_{n+1}, B_n) \left(\frac{3}{a_4^{(n)}}\right)^{1/2}, \quad y_n = s^{3/2} U(x_n) \left(\frac{3}{\varphi(x_n)}\right)^{1/2}, \quad (3.18)$$

де

$$d_n(B_{n+1}, B_n) = a_2^{(n)} - \beta\Phi(B_{n+1}, B_n). \quad (3.19)$$

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

$$\mathcal{B}_n = \left\{ \vec{k} = (k_x, k_y, k_z) \mid k_i = -\frac{\pi}{c_n} + \frac{2\pi}{c_n} \frac{n_i}{N_{ni}}; n_i = 1, 2, \dots, N_{ni}; i = x, y, z \right\}, \quad (3.20)$$

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

$$U(t) = U(1, t)/U(0, t); \quad \varphi(t) = 3U^2(t) + 2tU(t) - 2. \quad (3.21)$$

Для величин $d_n(B_{n+1}, B_n)$ та $a_4^{(n)}$ мають місце рекурентні співвідношення (РС). Їхній явний вигляд отримано в [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

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

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

$$u_{n+1} = s u_n E(x_n), \quad (3.22)$$

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

$$w_0 = s_0^{d/2} h, \quad r_0 = a_2 - \beta \Phi(0)(1 - \bar{\Phi}), \quad u_0 = a_4, \quad (3.23)$$

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

Рекурентні співвідношення (3.22) відрізняються від РС, отриманих в [5, 8], наявністю додаткового рівняння для величини w_n , що відображає факт наявності зовнішнього поля.

У виразі (3.12) залишилась невизначеною величина Z_{LGR} . Вона має вигляд

$$Z_{LGR} = 2^{(N_{n_p}-1)/2} Q(P_{n_p})^{N_{n_p+1}} Z_{n_p+1}, \quad (3.24)$$

де

$$Z_{n_p+1} = \int (d\eta)^{N_{n_p+1}} \exp \left(a_1^{(n_p+1)} N_{n_p+1}^{1/2} \eta_0 - \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathcal{B}_{n_p+1}} d_{n_p+1}(k) \eta_{\vec{k}} \eta_{-\vec{k}} - \frac{a_4^{(n_p+1)}}{4!} N_{n_p+1}^{-1} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_4 \\ \vec{k}_i \in \mathcal{B}_{n_p+1}}} \eta_{\vec{k}_1} \dots \eta_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_4} \right). \quad (3.25)$$

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

$$c_{n_p} = c_0 s^{n_p}. \quad (3.26)$$

Представлення статистичної суми у вигляді (3.12) пов'язане із наявністю поблизу ТФП нового масштабу віддалі. Якщо далеко від цієї точки характерною віддаллю є стала ґратки c , то поблизу неї таку роль відіграє кореляційна довжина $\xi = c_{n_p}$ для якої при $h = 0$ маємо рівність (2.10). Якщо величина періоду c_n ефективної блочної ґратки менша за c_{n_p} , то в системі має місце ренормгруппова симетрія [8] і для всіх $n < n_p$ загальні РС (3.22) можуть бути замінені наближеними РС, які відповідають їхній лінеаризації поблизу нерухомої точки. Процедура лінеаризації описана в [29]. У випадку, коли $c_n > c_{n_p}$ ренормгруппова симетрія порушується і при обчисленні вкладу до вільної енергії системи слід використовувати загальні, а не лінеаризовані поблизу фіксованої точки рекурентні співвідношення.

4. ВИЗНАЧЕННЯ ВЕЛИЧИНИ ОБЛАСТІ КОРЕЛЯЦІЙНОЇ ДОВЖИНИ ЗА НАЯВНОСТІ ПОЛЯ

Зауважимо, що, в принципі, результат обчислення (3.12) не залежить від вибору значення n_p . Фактично величина n_p розділяє статистичну суму на дві частини. Перша з них враховує вклади від КЗ $\eta_{\vec{k}}$ із

$\vec{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_{n_p+1}$. Друга частина відповідає вкладам від КЗ $\eta_{\vec{k}}$ із $\vec{k} \in \mathcal{B}_{n_p+1}$, включаючи вклади від “макроскопічної” змінної η_0 . Зменшення чи збільшення величини n_p призводить лише до перенесення вкладів з однієї частини статистичної суми до іншої, що в принципі не повинно впливати на загальний результат. Метою введення величини n_p є оптимізація математичних розрахунків поблизу ТФП, оскільки при їхньому виконанні будуть здійснюватися певні наближення. Якщо б обчислення проводилися точно, то вибір величини n_p був би довільним. Однак, вже лінеаризація загальних РС (3.22) поблизу фіксованої точки передбачає певні обмеження на величину n_p .

Умова на знаходження величини n_p збігається з умовою застосовності лінеаризованої форми рекурентних співвідношень по відношенню до їх загального виду (3.22). Для всіх $n \leq n_p$ співвідношення (3.22) можуть бути замінені їхньою лінеаризованою формою поблизу фіксованої точки. При $n > n_p$ відбувається зміна форми розподілу флуктуацій з негаусового на гаусовий. Флуктуації параметра порядку стають незалежними і тому подальше інтегрування за змінними $\eta_{\vec{k}}$ із $\vec{k} \in \mathcal{B}_{n_p+1}$ не призводить до перенормування ефективних взаємодій.

Величина n_p визначає період деякої особливої ефективною блочною ґратки (3.20), період якої розділяє флуктуаційні процеси на короткохвильові та довгохвильові. Для всіх ефективних блочних ґраток (при заданих τ та h) з періодом меншим за c_{n_p} має місце перенормування ефективних взаємодій. Коли $c_n > c_{n_p}$, то таке перенормування припиняється. Це дає змогу утотожити величину c_{n_p} із кореляційною довжиною системи при заданих τ та h .

Дослідимо властивості РС (3.22). Їхня фіксована точка знайдена в загальному випадку в [8]. Зокрема, було показано, що величина y_n із (3.18) набуває великих значень. Беручи це до уваги, співвідношення (3.22) можна записати в спрощеному виді [42]

$$\begin{aligned} w_{n+1} &= s^{\frac{d+2}{2}} w_n, \\ r_{n+1} &= s^2 \left[-q + \frac{\sqrt{u_n}}{\sqrt{3}} \frac{1}{U(x_n)} - \frac{1}{2s^3} \frac{\sqrt{u_n}}{\sqrt{3}} \frac{\varphi(x_n)}{U^3(x_n)} \right], \\ u_{n+1} &= s u_n \frac{\varphi(x_n)}{3U^4(x_n)} \left[1 - \frac{7}{2} s^{-3} \frac{\varphi(x_n)}{U^2(x_n)} \right]. \end{aligned} \quad (4.1)$$

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 нерухокої точки (w^*, r^*, u^*) .

У загальному випадку величина аргументу в фіксованій точці x^* залежить від параметра ренормгрупи s . Як показано в [42] при $s = s^*$ ($s^* = 3.5977$) величина $x^* = 0$. При цьому координати нерухокої 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 за параметр РГ значення $s = s^*$ для координат фіксованої точки РС (3.22), знаходимо

$$f_0 = 0.5, \quad \varphi_0 = 0.5939. \tag{4.4}$$

Зауважимо, що постійні f_0 та φ_0 не залежать від мікроскопічних параметрів системи та наявності зовнішнього поля.

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

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

Вони мають вигляд

$$\begin{aligned} w_n &= s_0^{d/2} h E_1^n, \\ r_n &= r^* + c_1 E_2^n + c_2 R E_3^n, \\ u_n &= u^* + c_1 R_1 E_2^n + c_3 E_3^n, \end{aligned} \tag{4.6}$$

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

$$E_1 = s^{\frac{d+2}{2}} = 24,551, \quad E_2 = 8,308, \quad E_3 = 0.374. \tag{4.7}$$

Величини R та R_1 із (4.6) мають вигляд $R = R^{(0)}(u^*)^{-1/2}$, $R_1 = R_1^{(0)}(u^*)^{1/2}$. Тут $R^{(0)}$ та $R_1^{(0)}$ – універсальні сталі (подані в [42]), які при $s = s^*$ набувають значень $R^{(0)} = -0.530$, $R_1^{(0)} = 0.162$. Коефіцієнти c_1 та c_2 є функціями температури

$$\begin{aligned} c_1 &= [a_2 + \beta\Phi(0)(\bar{\Phi} - 1) - r^* - R(a_4 - u^*)] \mathcal{D}^{-1}, \\ c_2 &= [a_4 - u^* - R_1(a_2 - \beta\Phi(0)(1 - \bar{\Phi})) + r^* R_1] \mathcal{D}^{-1}, \end{aligned} \tag{4.8}$$

де $\mathcal{D} = (E_2 - E_3)/(R_{22} - E_3) = 1.086$. Наявність зовнішнього постійного поля змінює тип фіксованої точки РС (4.1). Із однократно нестійкої (при $h = 0$) вона стає двократно нестійкою ($E_1 > 1, E_2 > 1, E_3 < 1$). 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 зауважити, 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 (3.22). 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

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

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

Використаємо рівність (4.9) для обчислення 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

$$A = 1 - f_0 - R^{(0)}\varphi_0^{1/2} - \bar{\Phi}, \quad B = -a_2, \quad D = a_4 R^{(0)}\varphi_0^{-1/2}. \quad (4.12)$$

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

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

Як впливає з (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 подано на рис. 2а.

По осі ординат приведена величина оберненої температури $J_c = \beta_c \Phi(0)/6$. Її значення перенормоване на число найближчих сусідів для простої кубічної ґратки. Легко зауважити, що з ростом радіуса дії потенціалу b величина J_c спадає і має слабку залежність від параметра s_0 . Числові обчислення 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 отримане шляхом числового обчислення при виборі параметра $\lambda = 1.1$ (яке мінімізує поправки до скейлінгу) приймає значення $J_c = 0.3750966(4)$. Очевидно, що зі зміною λ значення J_c також зміниться.

На рис. 2б наведено залежність прямої температури фазового переходу T_c (в одиницях $\Phi(0)/k$, де $\Phi(0)$ – значення фур'є-образу потенціалу взаємодії при нульовому значення хвильового вектора, а k – постійна Больцмана) від радіуса дії потенціалу. Як свідчать результати обчислення, при $b > c$ значення T_c перестає залежати від b

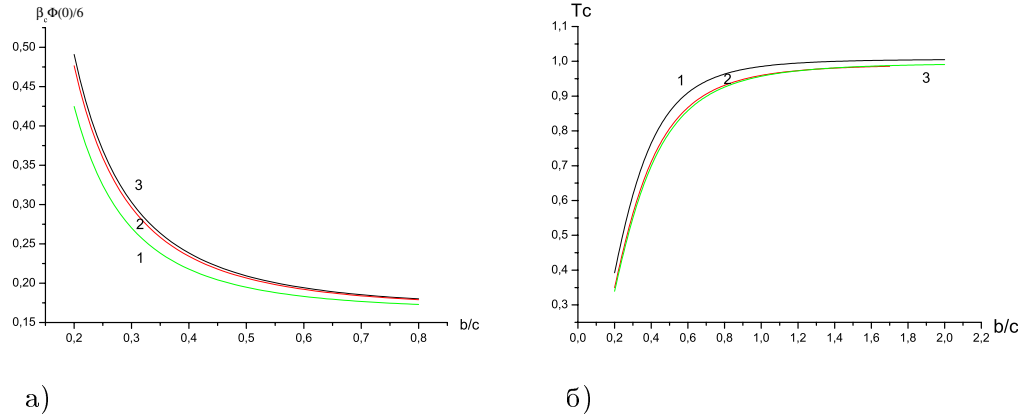


Рис. 2. Залежність оберненої (а) та прямої (б) температури фазового переходу (нормованої на число найближчих сусідів $z = 6$) від радіуса дії потенціалу b при різних значеннях параметра s_0 : крива 1 відповідає значенню $s_0 = 2, 0$; крива 2 – $s_0 = 3, 0$; крива 3 – $s_0 = 4, 0$.

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 обчислення температури фазового переходу дає змогу 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 (див. рис. 1). Обчислення значення T_c , а не введення зверху до гамільтоніана¹ задачі величини τ , є важливим елементом теорії.

Обчислене вище значення температури фазового переходу T_c дає змогу записати розв'язки (4.6) як функції відносної температури $\tau = (T - T_c)/T_c$, так і приведеного поля h . Маємо

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

$$r_n = \beta \Phi(0) \left[-f_0 + c_{1T} \tau E_2^n + R^{(0)} \varphi_0^{-1/2} c_{2T} E_3^n \right], \quad (4.14)$$

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

Розв'язки РС (4.14) дають змогу отримати значення $n = n_p$, при перевищенні якого 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 .

¹Слід зауважити, що теоретико-польовий підхід до опису критичних явищ не дає змоги виконати обчислення температури фазового переходу. Більше того, відносна температура τ включається в цьому підході до гамільтоніану системи. Така дія перетворює цю теорію в феноменологічний підхід, подібно до теорії Ландау.

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

$$m_\tau = -\frac{\ln |\tilde{\tau}|}{\ln E_2} - 1. \quad (4.15)$$

Для зручності тут використана перенормована відносна температура

$$\tilde{\tau} = \tau(c_{1k}/f_0). \quad (4.16)$$

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

$$r_{n_p+1} - r^* = \frac{-\tau}{|\tau|} r^*. \quad (4.17)$$

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

$$w_{n_h+1} - w^* = h_0, \quad (4.18)$$

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

$$n_h = -\frac{\ln \tilde{h}}{\ln E_1} - 1. \quad (4.19)$$

Тут введено позначення

$$\tilde{h} = s_0^{d/2} (h/h_0). \quad (4.20)$$

Найбільш загальний тип критичної поведінки має місце для випадку $\tau \neq 0$ та $h \neq 0$. Виявляється, що точка виходу n_p у загальному випадку залежить від співвідношення між величинами τ та h . Як було встановлено в [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 (4.15) та (4.19), отримуємо

$$h_c = |\tilde{\tau}|^{p_0}, \quad (4.21)$$

де для критичного показника p_0 маємо

$$p_0 = \frac{\ln E_1}{\ln E_2} = \nu/\mu, \quad \mu = \frac{2}{d+2}. \quad (4.22)$$

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

$$\nu = \frac{\ln s^*}{\ln E_2}. \quad (4.23)$$

Критичний показник μ описує польову поведінку кореляційної довжини при $T = T_c$. Він залежить лише від вимірності простору і визначається відповідними рекурентними співвідношеннями. У загальному випадку, крім критичних показників ν та μ система характеризується також критичним показником кореляційної функції η . Для тривимірної моделі Ізінга він приймає 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 випливає із наближених РС (4.1) та власних значень (4.7) матриці лінеаризованого ренормгрупового перетворення (4.5). Воно дещо відрізняється від значення $\nu_c = 0.630$, що відповідає класичній моделі Ізінга. Відмінність критичних показників пов'язана з використанням в цій роботі найпростішого негаусового наближення для якобіана переходу від спінових до КЗ. З ростом наближення моделі значення ν зростають (див. [8,28]) і наближаються до ν_c .

Беручи до уваги (4.21), рівність (4.15) можна записати у вигляді

$$m_\tau = -\frac{\ln h_c}{\ln E_1} - 1. \quad (4.24)$$

Порівнюючи (4.19) та (4.24), знаходимо їхню функціональну подібність. Загальний вираз для точки виходу системи із критичного режиму флуктуацій параметра порядку при $T > T_c$ запишемо у вигляді [35]

$$n_p = -\frac{\ln(\tilde{h}^2 + h_c^2)}{2 \ln E_1} - 1. \quad (4.25)$$

У граничних випадках він переходить у відомі вирази (в (4.15) при $h = 0$ та в (4.19) при $\tau = 0$). Саме цей вираз будемо використовувати надалі в (3.12) при обчислення статистичної суми поблизу ТФП при $T > T_c$.

Для температур $T < T_c$ формула (4.25) має дещо інший вигляд. Це пов'язано із наявністю в системі відмінного від нуля параметра порядку. Спонтанний спіновий момент індукує деяке внутрішнє магнітне поле, яке має братися до уваги при визначенні n'_p -точки виходу системи з участку КРФ при $T < T_c$. Як відомо [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 (4.25). При $T < T_c$ крім зовнішнього поля h в системі наявне внутрішнє поле (впорядкування), що неодмінно призводить до зменшення точки виходу n'_p з участку КРФ. Цей ефект проявляється в “чистому вигляді” при $h = 0$, де має місце співвідношення

$$n'_p = n_p - n_0, \quad (4.26)$$

тут n_0 – стала величина ($n_0 \geq 0$). Скориставшись із (4.24), знаходимо для області температур $T < T_c$ величину n'_p при $h = 0$ (позначимо її через μ_τ)

$$\mu_\tau = -\frac{\ln h_c}{\ln E_1} - n_0 - 1 = -\frac{\ln h_{cm}}{\ln E_1} - 1, \quad (4.27)$$

де

$$h_{cm} = \tau_1^{p_0}, \quad (4.28)$$

а величина τ_1 пов'язана з відносною температурою τ співвідношенням

$$\tau_1 = -\tau \frac{c_{1k}}{f_0} E_2^{n_0}. \quad (4.29)$$

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

$$n'_p = -\frac{\ln(\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)}{2 \ln E_1} - 1. \quad (4.30)$$

Вирази (4.25) та (4.30) 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 вони різним 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 обчисленнях як точку виходу з критичного режиму флуктуацій параметра порядку будемо використовувати формулу (4.25) для діапазону температур $T \geq T_c$, а також формулу (4.30) при $T \leq T_c$. Зауважимо, що для випадку $T = T_c$ ці формули збігаються.

Процедура поетапного виключення з розгляду змінних $\eta_{\vec{k}}$ в (3.1) відповідає переходу в координатному просторі до ефективних блочних спінів в дусі гіпотези Каданова [16, 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 в системі виникає особливий негаусовий режим флуктуацій параметра порядку для ефективних блочних ґраток із $n \leq n_p$, де має місце ренормгрупова симетрія. Як впливає 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 в 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

$$\xi = c_{n_p} \quad (4.31)$$

як функції температури і поля. Для температур $T \geq T_c$ як n_p використовуємо (4.25). Маємо

$$\xi/c = \xi_0 \left(\tilde{h}^2 + \tilde{\tau}^{(d+2)\nu} \right)^{-\frac{1}{d+2}}. \quad (4.32)$$

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 (4.20), а $\tilde{\tau}$ – перенормована відносна температура (4.16).

Легко бачити, що у випадку $T = T_c$ формула (4.32) переходить у рівність

$$\xi/c = \xi_c(h)^{-\mu}, \quad (4.33)$$

де μ – критичний показник із (4.22), а для критичної амплітуди ξ_c із врахуванням (4.20) знаходимо $(s_0 h_0)^\mu / s$. Абсолютне значення ξ_c визначається мікроскопічними параметрами моделі s та s_0 та величиною h_0 , яка відповідно до (4.20) визначає нормування величини \tilde{h} . З іншого боку, значення ξ_c відоме з числових обчислень. 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 (4.18) є порядку одиниці, а точніше $h_0 \approx 0.760$.

В іншій границі ($h = 0$) формула (4.32) переходить в рівність

$$\xi/c = \xi^+ |\tau|^{-\nu}, \quad (4.34)$$

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

Для області температур $T < T_c$ величина n'_p має вигляд (4.30), тому

$$\xi'/c = \xi_0 \left(\tilde{h}^2 + \tau_1^{(d+2)\nu} \right)^{-\frac{1}{d+2}}. \quad (4.35)$$

Єдина відмінність (4.35) від (4.32) полягає в зміні масштабу виміру температури. Очевидно, що при $T = T_c$ формула (4.35) переходить в (4.33). При $h = 0$ ця формула описує область $T \leq T_c$ та набуває вигляду

$$\xi'/c = \xi^- |\tau|^{-\nu}, \quad (4.36)$$

де $\xi^- = \xi_0 \left(\frac{f_0}{c_{1k}} E_2^{-n_0} \right)^\nu$. 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 (4.26)). Величину цього параметра знаходимо з порівняння відношення

$$\xi^+ / \xi^- = E_2^{\nu n_0}, \quad (4.37)$$

яке впливає із виразів (4.34) та (4.36) із даними числового обчислення $\xi^+ / \xi^- = 1.896(10)$ [79,80]. Беручи до уваги, що $\nu = \ln s / \ln E_2$ знаходимо

$$n_0 = \frac{\ln(\xi^+ / \xi^-)}{\ln s}. \quad (4.38)$$

Для випадку $s = s^*$ маємо $n_0 = 0.50$. Легко помітити, 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) та дані числового обчислення [80] можна стверджувати, що при $s = s^*$ та $s_0 = 2$ параметри h_0 із (4.18) та n_0 із (4.26) набувають значення

$$h_0 = 0.760, \quad n_0 = 1/2. \quad (4.39)$$

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

5. СХЕМА ОБЧИСЛЕННЯ ВІЛЬНОЇ ЕНЕРГІЇ ПОБЛИЗУ ТОЧКИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДУ

Обчислення вільної енергії системи однокомпонентних спінів поблизу ТФП будемо здійснювати із використанням виразу для статистичної суми (3.12). Основною відмінністю такого обчислення у випадку наявності поля (від його відсутності [8]), є необхідність використання узагальненої точки виходу системи з критичного режиму флуктуацій параметра порядку. У випадку $T > T_c$ координати цієї точки (на площині поле – відносна температура) задаються виразом (4.25). Зобразимо вільну енергію у вигляді декількох доданків

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

Кожен з цих доданків – вклад певного множника виразу (3.12). 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 вкладу до вільної енергії від ділянки критичного режиму флуктуацій. Відповідно до (3.12) він має вигляд

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

де $N_n = N_0 \cdot s^{-3n}$, а для функції $f_n(x_n, y_{n-1})$ справджується 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), подані в (3.18).

Доданок F_{LGR} має вигляд

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

де вираз для L_{LGR} приведений в (3.24). Зауважимо, що Z_{n_p+1} із (3.25) може бути зображено у вигляді, подібному до вкладу 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 $Q(P_{n'})$ співпадає із (3.17) при $n = n'$, а для $Z_{n'+1}$ маємо вираз (3.25), в якому замість n_p слід підставити n' .

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

Знайдемо величину $F_{CR}^{(+)}$ із (5.3). Для цього слід виділити явну залежність величини f_n від n . Такі обчислення виконані в [8]. Результат обчислення (5.3) має вигляд

$$F_{CR}^{(+)} = -kTN_0 (\gamma_{01} + \gamma_{02}\tau + \gamma_{03}\tau^2) + F_{CR}^{(s)}, \quad (5.10)$$

де для коефіцієнтів γ_{0l} знайдені вирази [42]

$$\begin{aligned} \gamma_{01} &= s^{-3} f_{CR}^{(0)} (1 - s^{-3})^{-1}, \quad \gamma_{02} = s^{-3} d_{1k} c_{1k} E_2 (1 - E_2 s^{-3})^{-1}, \\ \gamma_{03} &= s^{-3} d_{3k} c_{1k}^2 E_2^2 (1 - s^{-3} E_2^2)^{-1} + s^{-3} c_{1k1} d_{1k} E_2 (1 - E_2 s^{-3})^{-1}, \end{aligned} \quad (5.11)$$

які збігаються з результатами аналогічних обчислень у випадку відсутності поля [8]. Тут використані позначення

$$\begin{aligned} H_c &= \tilde{\tau} (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{-1/2p_0}, \quad H_3 = (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{\Delta/2p_0}, \\ \nu &= \frac{\ln s^*}{\ln E_2}, \quad \Delta = -\frac{\ln E_3}{\ln E_2}, \quad p_0 = \frac{\ln E_1}{\ln E_2} = \frac{d+2}{2}\nu, \end{aligned} \quad (5.12)$$

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 приймають значення² $\nu = 0.605$, $\Delta = 0.465$, $p_0 = 1.512$. Сингулярна частина $F_{CR}^{(s)}$ виразу (5.10) має вигляд

$$F_{CR}^{(s)} = kTN_0 \tilde{\gamma}^+ s^{-3(n_p+1)}. \quad (5.13)$$

²Занижене значення ν порівняно з даними методу МК [76] пов'язане із використанням недостатньо високого наближення для якобіану переходу від спінових до КЗ. Використання вищих наближень [28] призводить до зближення цих значень.

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

$$\bar{\gamma}^+ = \bar{\gamma}_1 + \bar{\gamma}_2 H_c + \bar{\gamma}_3 H_c^2, \quad (5.14)$$

де $\bar{\gamma}_i$ – постійні величини

$$\bar{\gamma}_1 = f_{CR}^{(0)}(1 - s^{-3})^{-1}, \quad \bar{\gamma}_2 = d_1 f_0(1 - E_2 s^{-3})^{-1}, \quad \bar{\gamma}_3 = d_3 f_0^2(1 - E_2^2 s^{-3})^{-1}, \quad (5.15)$$

які при $s = s^*$ приймають значення: $\bar{\gamma}_1 = 1.529$, $\bar{\gamma}_2 = -0.635$, $\bar{\gamma}_3 = -0.058$. Сингулярна частина вкладу $F_{CR}^{(s)}$ суттєвим чином відрізняється від аналогічної величини при $h = 0$. Зауважимо, що за відсутності поля маємо $H_c = 1$, а тому

$$\bar{\gamma}^+(h = 0) = \gamma^+ = \bar{\gamma}_1 + \bar{\gamma}_2 + \bar{\gamma}_3. \quad (5.16)$$

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

Вклад до вільної енергії F_{LGR} відповідно до (5.6) містить два доданки. Для обчислення першого з них $F_{TR}^{(+)}$ із (5.7) необхідно знайти явну залежність величини f_{n_p+m} від m . Скористаємося із розв'язків РС (4.14), які при врахуванні (5.12) набувають вигляду

$$w_{n_p+m} = h_0 E_1^{m-1} \tilde{h} \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{-1/2},$$

$$r_{n_p+m} = \beta \Phi(0) f_0 \left[-1 + H_c E_2^{m-1} + R^{(0)} f_0^{-1} \varphi_0^{-1/2} c_{2T} E_3^{m-1} H_3 \right], \quad (5.17)$$

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

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 (5.12) є малою, а E_3^{m-1} при $m \gg 1$ прямує до нуля ($E_3 < 1$). Таке наближення відповідає нехтуванню поправками до скейлінгу. При необхідності такі поправки можна обчислювати, використовуючи метод, запропонований в [8].

Беручи до уваги (5.17) із (3.18) знаходимо

$$x_{n_p+m} = \bar{x} E_2^{m-1} H_c (1 + \Phi_f E_2^{m-1} H_c)^{-1/2}, \quad (5.18)$$

де введене позначення

$$\bar{x} = f_0 \varphi_0^{-1/2} \sqrt{3}. \quad (5.19)$$

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

$$\alpha = \tilde{h}/h_c. \quad (5.20)$$

Для малих значень полів величина H_c наближається до одиниці, а з ростом α — прямує до нуля. Така поведінка H_c призводить до різного характеру залежності величини x_{n_p+m} із (5.18) від m для малих та великих значень полів. Беручи до уваги розв'язки (5.17) легко переко-
нати, що значення величини $m_0 = 1$ призводить до доволі великих значень аргумента $x_{n_p+m_0+1}$, що є достатньою умовою використання гаусового розподілу флуктуацій для всіх $\rho_{\vec{k}}$ із $|\vec{k}| \in \mathcal{B}_{n_p+2}$. Отже, вклад до вільної енергії системи (5.7) від перехідної області флуктуацій містить лише один доданок, який має вигляд

$$F_{TR}^{(+)} = -kTN_0 f_{n_p+1} \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{\frac{d}{d+2}}, \quad (5.21)$$

де для коефіцієнта f_{n_p+1} маємо вираз

$$f_{n_p+1} = \frac{1}{2} \ln y_{n_p} + \frac{9}{4} y_{n_p}^{-2} + \frac{1}{4} x_{n_p+1}^2 + \ln U(o, x_{n_p+1}). \quad (5.22)$$

Для обчислення останнього із вкладів до вільної енергії системи F' із (5.6) слід обчислити вираз для Z' із (5.9). Покладаючи $m_0 = 1$, знаходимо

$$F' = -kT (NE_0(\sigma_+) + N_{n_p+2} f_G). \quad (5.23)$$

Тут

$$E_0(\sigma_+) = e_0 h \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{\frac{1}{2(d+2)}} - e_2 \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{\frac{d}{d+2}}, \quad (5.24)$$

де введені позначення

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

$$e_2 = \frac{1}{2} \sigma_0^2 s^{-3} \left(r_{n_p+2} + \frac{1}{12} u_{n_p+2} s_0^3 \sigma_0^2 \right). \quad (5.25)$$

Величина σ_0 є розв'язком рівняння на виділення макроскопічної частини параметра порядку, виконаного в [93,94], а величини r_{n_p+2} , u_{n_p+2} знаходимо із (4.14). Коефіцієнт f_G має вигляд

$$f_G = \frac{1}{2} \ln 2 - \frac{1}{4} \ln 3 + \ln s + \frac{1}{4} \ln u_{n_p+1} - \frac{1}{2} \ln r_R -$$

$$-\frac{1}{2} \ln U(x_{n_p+1}) - \frac{3}{8} y_{n_p+1}^{-2} - \frac{1}{2} f_G''. \quad (5.26)$$

Тут

$$u_{n_p+1} = (\beta\Phi(0))^2 \varphi_0(1 + \Phi_f H_c), \quad x_{n_p+1} = \bar{x} H_c (1 + \Phi_f H_c)^{-1/2}, \quad (5.27)$$

величини r_R та y_{n_p+2} визначені в [94], а для f_G'' маємо вираз

$$f_G'' = \ln(1 + a^2) - \frac{2}{3} + \frac{2}{a^2} - \frac{2}{a^3} \operatorname{arctg} a, \quad (5.28)$$

де

$$a = \frac{\pi b}{s_0 c} \left(\frac{2\beta\Phi(0)}{r_R} \right)^{1/2}, \quad r_R = r_{n_p+2} + \frac{1}{2} u_{n_p+2} s_0^3 \sigma_0^2. \quad (5.29)$$

На цьому етапі завершується обчислення вкладів до вільної енергії (5.1) від різного типу флуктуацій параметра порядку для діапазону температур $T > T_c$.

6. ЯВНИЙ ВИРАЗ ДЛЯ ВІЛЬНОЇ ЕНЕРГІЇ СИСТЕМИ СПІНІВ У ЗОВНІШНЬОМУ ПОЛІ ПОВЛИЗУ ТОЧКИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДУ ПРИ $T > T_c$

Підсумуємо вклади до вільної енергії системи від різних флуктуаційних процесів, які мають місце поблизу точки фазового переходу другого роду. Відповідно до представлення вільної енергії із (5.1), маємо декілька типів вкладів. Вираз F_0 , як випливає із (5.2), містить лише аналітичну залежність від поля h . Такого ж типу є залежність першого доданку F_{CR} виразу (5.10). Об'єднуючи ці вклади, введемо позначення

$$F_a = F_0 + \left(F_{CR}^{(+)} - F_{CR}^s \right). \quad (6.1)$$

Це є аналітична частина вільної енергії. Вона має вигляд

$$F_a = -kTN \left(\ln chh - F_{02} h'^2 \right) - \frac{1}{2} N \Phi(0) \bar{\Phi} - kTN (\gamma_0 + \gamma_1 \tau + \gamma_2 \tau^2), \quad (6.2)$$

де

$$\gamma_0 = \ln 2 + \gamma_{01} s_0^{-3}, \quad \gamma_1 = \gamma_{02} s_0^{-3}, \quad \gamma_2 = \gamma_{03} s_0^{-3}. \quad (6.3)$$

Внески до вільної енергії $F_{CR}^{(s)}$ (5.13), $F_{TR}^{(+)}$ (5.21) та F' (5.23) 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

$$F_0^{(+)} = -kTN \left[e_0 h (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{\frac{1}{2(d+2)}} - e_2 (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{\frac{d}{d+2}} \right]. \quad (6.4)$$

Вирази для коефіцієнтів e_0 та e_2 приведені в (5.25). Другий доданок $F_s^{(+)}$ є сумою решти неаналітичних вкладів і може бути зображений у вигляді

$$F_s^{(+)} = -kTN \gamma_s^{(+)} \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{\frac{d}{d+2}}, \quad (6.5)$$

де

$$\gamma_s^{(+)} = s_0^{-3} (f_{n_p+1} - \bar{\gamma}^+ + f_G/s^3). \quad (6.6)$$

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

$$F = F_a + F_s^{(+)} + F_0^{(+)}, \quad (6.7)$$

де аналітична частина F_a має вигляд (6.2), для $F_s^{(+)}$ маємо (6.5), а для $F_0^{(+)}$ із (6.4). Вираз (6.7) може бути записаний також у вигляді

$$F = F_a + F_N + F_h, \quad (6.8)$$

де F_a наведено в (6.2),

$$F_N = -kTN\gamma_N(\tilde{h}^2 + h_c^2)^{\frac{d}{d+2}}, \quad (6.9)$$

де

$$\gamma_N = \gamma_s^{(+)} - e_2, \quad (6.10)$$

а для F_h знаходимо

$$F_h = -kTNe_0h(\tilde{h}^2 + h_c^2)^{\frac{1}{2(d+2)}}. \quad (6.11)$$

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

7. ВІЛЬНА ЕНЕРГІЯ СИСТЕМИ ОДНОКОМПОНЕНТНИХ СПІНІВ В ЗОВНІШНЬОМУ ПОЛІ ДЛЯ ОБЛАСТІ ТЕМПЕРАТУР $T < T_c$

Зауважимо, що область температур $T < T_c$ суттєво відрізняється від області $T > T_c$ для моделі Ізінга. Справа в тому, що при $T < T_c$ в системі ізінгівських спінів спонтанно виникає параметр порядку, а отже існує спряжене до нього поле. Наявність такого поля слід брати до уваги при визначенні польової залежності точки виходу системи із критичного режиму флуктуацій за наявності постійного зовнішнього поля. Нижче ми скористаємося із результатів роботи [95], де була визначена точка виходу із критичного режиму при $T < T_c$.

Статистична сума такої системи нижче T_c записується у вигляді

$$Z = Z_0[Q(d)]^{N_0} \left(\prod_{n=1}^{n'_p} Q_n \right) Z_{IGR}. \quad (7.1)$$

Тут величина Z_0 означена в (3.10). Величина $Q(d)$ відповідає вкладу до статистичної суми від великих значень хвильового вектора і подана в [95]. У цій же роботі знайдений явний вираз для величини Q_n , яка відповідає парціальній статистичній сумі n -тої блочної структури (3.16). Добуток ведеться до величини n'_p , яка визначає точку виходу системи з критичного режиму флуктуацій параметра порядку. При $T < T_c$ для n'_p маємо формулу (4.30).

Величина Z_{IGR} має вигляд

$$Z_{IGR} = 2^{(N_{n'_p}-1)/2} Q(P_{n'_p})^{N_{n'_p}+1} Z_{n'_p+1}, \quad (7.2)$$

де $N_{n'_p}$ — число вузлів ефективної блочної ґратки з періодом $c_{n'_p} = c_0 s^{n'_p}$ ($c_0 = c \cdot s_0$), величина $Q(P_n)$ означена в (3.17), а для $Z_{n'_p+1}$ маємо вираз

$$Z_{n'_p+1} = \int (d\eta)^{N_{n'_p+1}} \exp \left(a_1^{(n'_p+1)} N_{n'_p+1}^{1/2} \eta_0 - \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathcal{B}_{n'_p+1}} d_{n'_p+1}(k) \eta_{\vec{k}} \eta_{-\vec{k}} - \frac{a_4^{(n'_p+1)}}{4!} N_{n'_p+1}^{-1} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_4} \eta_{\vec{k}_1} \cdots \eta_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \cdots + \vec{k}_4} \right) \quad (7.3)$$

Тут $d_{n'_p+1}(k) = d_{n'_p+1}(0) + 2\beta\Phi(0)b^2k^2$, де b — радіус дії експонентно-спадного потенціалу взаємодії ($\Phi(r_{ij}) = A \exp(-r_{ij}/b)$), а для $a_1^{(n)}$, $d_n(0)$ та $a_4^{(n)}$ мають місце рекурентні співвідношення (РС). Їхній явний вигляд подано в (3.22).

Ренормгрупова симетрія в системі має місце лише для $n < n'_p$, тобто коли величина періоду c_n ефективної блочної ґратки менша за $c_{n'_p}$. У цьому випадку загальні РС можна замінити їх лінеаризованою формою поблизу нерухомої точки та використати їх для обчислення добутку парціальних статистичних сум Q_n виразу (7.1). При $n > n'_p$ РГ симетрія відсутня і множник Z_{IGR} відображає вклад до статистичної суми після виходу системи із критичного режиму флуктуацій параметра порядку. На відміну від КР він був названий в [5] інверсним гаусовим режимом (IGR).

Зобразимо вільну енергію у вигляді декількох доданків

$$F = F_0 + F_{CR}^{(-)} + F_{IGR}. \quad (7.4)$$

Кожен з них — вклад певного множника виразу (7.1). Так перший доданок F_0 , який також є у виразі для вільної енергії при температурах вищих за T_c , має вигляд (5.2).

Доданок $F_{CR}^{(-)}$ відповідає вкладу до вільної енергії від ділянки критичного режиму флуктуацій. Для його обчислення скористаємося методом із розділу 5. Відповідно до (7.1) маємо вираз

$$F_{CR}^{(-)} = -kTN_0(\gamma_{01} + \gamma_{02}\tau + \gamma_{03}\tau^2) + F_{CR}^{(c)} \quad (7.5)$$

де коефіцієнти γ_l подано в (5.11). Зауважимо, що аналітична частина виразу (7.5) співпадає з випадком $T > T_c$. Сингулярна частина цього виразу має вигляд

$$F_{CR}^{(c)} = kTN_0\bar{\gamma}^- s^{-3(n'_p+1)}. \quad (7.6)$$

Коефіцієнт $\bar{\gamma}^-$ зображається у вигляді

$$\bar{\gamma}^- = \bar{\gamma}_1 - \bar{\gamma}_2 H_{cm} + \bar{\gamma}_3 H_{cm}^2, \quad H_{cm} = -\tilde{\tau}(\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)^{-1/2p_0}, \quad (7.7)$$

де $\bar{\gamma}_l$ — сталі величини, подані (5.15).

Доданок F_{IGR} із (7.4) має вигляд

$$F_{IGR} = -kT \ln Z_{IGR}, \quad (7.8)$$

де вираз для Z_{IGR} приведений в (7.2). Зауважимо, що $Z_{n'_p+1}$ із (7.3) можна записати у вигляді добутку парціальних статистичних сум, подібно до того, як це зроблено для вкладу від ділянки критичного режиму флуктуацій. Тоді для внеску до вільної енергії від інверсного гаусового режиму (7.8) (подібно до внеску до вільної енергії від граничного гаусового режиму при $T > T_c$) запишемо

$$F_{IGR} = F_{TR}^{(-)} + F''. \quad (7.9)$$

Вклад до вільної енергії системи (7.9) від перехідної області флуктуацій містить лише один доданок, а саме

$$F_{TR}^{(-)} = -kTN_0 f_{n'_p+1} \left(\tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{\frac{d}{d+2}}, \quad (7.10)$$

де для $f_{n'_p+m}$ маємо (5.4) при $n = n'_p + 1$.

Тепер запишемо вклад до вільної енергії від (7.9), зобразивши її як суму двох доданків

$$F'' = F_0^{(-)} + F_I \quad (7.11)$$

де доданок

$$F_0^{(-)} = -kTN \left(h e_0^{(-)} \left(\tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{\frac{1}{2(d+2)}} - e_2^{(-)} \left(\tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{\frac{d}{d+2}} \right), \quad (7.12)$$

і тут введені позначення

$$e_0^{(-)} = \sigma'_0 s^{-1/2}, \quad e_2^{(-)} = \frac{1}{2} \sigma_0'^2 s^{-3} r_{n'_p+2} + \frac{1}{12} u_{n'_p+2} s^3 \sigma_0'^2. \quad (7.13)$$

відповідає виділенню макроскопічної частини параметра порядку. Величина σ_0 , як і при $T > T_c$, є розв'язком кубічного рівняння на величину зміщення змінної ρ_0 . На рис. 3 подано значення σ_0 як функції τ .

Для F_I маємо вираз

$$F_I = -kTN_0 f_I \left(\tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{\frac{d}{d+2}}, \quad (7.14)$$

де коефіцієнт f_I розрахований нами в [95].

Підсумуємо знайдені вище вклади до вільної енергії системи поблизу точки фазового переходу при $T < T_c$. Відповідно до представлення (7.4), маємо декілька типів доданків. Вираз F_0 містить лише аналітичну залежність від поля h . Оскільки перший доданок у виразі для $F_{CR}^{(-)}$ також лише аналітично залежить від поля, то можна об'єднати ці вклади, ввівши позначення

$$F_a = F_0 + (F_{CR}^{(-)} - F_{CR}^c). \quad (7.15)$$

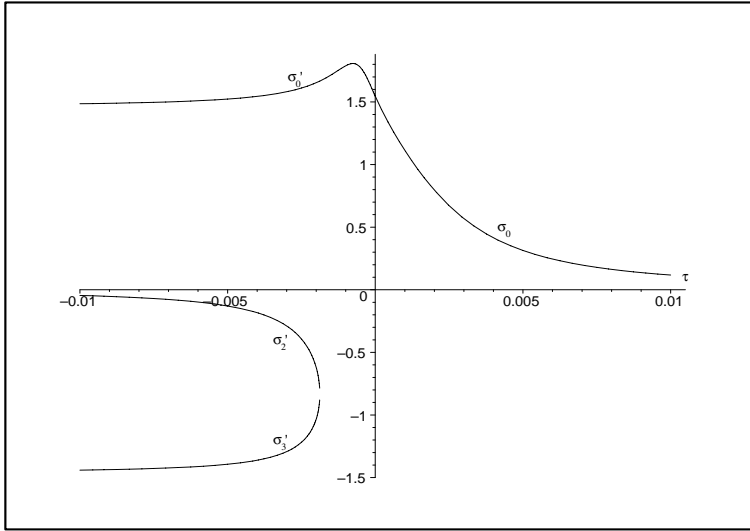


Рис. 3. Залежність розв'язків σ'_0 від температури (область $\tau < 0$), і величина σ_0 , знайдена в [94,95] (область $\tau > 0$). Значення зовнішнього поля $h = 10^{-4}$

Абсолютно однаковий доданок присутній у виразі для вільної енергії при $T > T_c$. Це є аналітична частина вільної енергії. Вона має вигляд

$$F_a = -kTN \ln chh - \frac{1}{2} N \Phi(0) \bar{\Phi} - kTN(\gamma_0 + \gamma_1 \tau + \gamma_2 \tau^2) \quad (7.16)$$

де коефіцієнти γ_i розраховані в роботі [94].

Вклади до вільної енергії від $F_{CR}^{(c)}$ (7.11), $F_{TR}^{(-)}$ (7.10) та F'' (7.11)-(7.13) містять суто неаналітичну залежність від температури τ і поля h . Їх суму можна записати у вигляді

$$F_s^{(-)} = F_{CR}^{(c)} + F_{TR}^{(-)} + F_I,$$

або в явній формі

$$F_s^{(-)} = -kTN \gamma_s^{(-)} \left(\tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{\frac{d}{d+2}} \quad (7.17)$$

де

$$\gamma_s^{(-)} = s_0^{-3} (f_{n'_p+1} - \bar{\gamma}^- + f_I/s^3)$$

Отже, вільну енергію системи можна записати у вигляді

$$F = F_a + F_s^{(-)} + F_0^{(-)} \quad (7.18)$$

де F_a має вигляд (7.16), для $F_s^{(-)}$ маємо (7.17), а для $F_0^{(-)}$ вираз (7.12). Представлення для вільної енергії (7.4) і (7.18) є еквівалентними.

Порівнюючи температурні області вище і нижче від T_c слід зазначити, що вирази для вільної енергії є функціонально подібними між собою. Основна відмінність полягає в тому, що для $T < T_c$ значення точки виходу системи з критичного режиму флуктуацій є дещо меншим, ніж аналогічної величини для випадку $T > T_c$. Це пов'язано з наявністю в системі спонтанного параметра порядку при температурах, нижчих за критичну. З цієї ж причини маємо різний масштаб виміру температури для кожного з діапазонів температур. Між ними маємо наступний зв'язок

$$\tau_1 = -\tilde{\tau} E_2^{n_0}.$$

Тому, використовуючи отримані вище результати, можна записати загальний вираз для вільної енергії

$$F = F_a + F_s + F_0, \quad (7.19)$$

де аналітична частина F_a є спільною для обох діапазонів температур, а вклади F_s та F_0 задаються виразами

$$F_s = \begin{cases} F_s^{(-)}, & T < T_c \\ F_s^{(+)}, & T > T_c \end{cases} \quad (7.20)$$

та

$$F_0 = \begin{cases} F_0^{(-)}, & T < T_c \\ F_0^{(+)}, & T > T_c \end{cases} \quad (7.21)$$

відповідно.

8. ОБЧИСЛЕННЯ РІВНЯННЯ СТАНУ СПІНОВОЇ СИСТЕМИ ПОБЛИЗУ ТФП В ЗОВНІШНЬОМУ ПОЛІ

Використаємо рівняння (7.19) для обчислення температурної та польової залежностей намагніченості системи. Для цього скористаємося означенням

$$M = -\frac{1}{N} \frac{dF}{d\mathcal{H}}. \quad (8.1)$$

Для зручності обчислень запишемо величину M у вигляді трьох доданків

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

які відповідають вкладам від різних доданків ((7.21)) і мають вигляд

$$M_a = -\frac{1}{N} \frac{dF_a}{d\mathcal{H}_T}, \quad M_s^{(\pm)} = -\frac{1}{N} \frac{dF_s}{d\mathcal{H}_T}, \quad M_0^{(\pm)} = -\frac{1}{N} \frac{dF_0}{d\mathcal{H}_T}. \quad (8.3)$$

Тут знак “+” або “-” відповідає області (вище і нище T_c відповідно) в якій знаходиться система. Наступні обчислення докладно проведемо для області температур $T < T_c$, об'єднаємо їх із результатами обчислення для $T > T_c$ та наведемо криві для всієї області температур.

Перший доданок із (8.2), що відповідає аналітичній частині, згідно (7.16) має вигляд

$$M_a = thh \approx h. \quad (8.4)$$

Для області температур $T < T_c$ величина $M_s^{(-)}$ розраховується відповідно до (7.17) і зображається у вигляді

$$M_s^{(-)} = \left(\tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{\frac{1}{2(d+2)}} \left[\frac{d\gamma_s^{(-)}}{dh'} (\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)^{1/2} + \frac{6}{5} \gamma_s^{(-)} \frac{s_0^{3/2}}{h_0} \frac{\tilde{h}}{(\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)^{1/2}} \right]. \quad (8.5)$$

Похідна від величини $\gamma_s^{(-)}$ обчислюється відповідно до (7.17), де для кожного із доданків явний вираз відомий.

Для обчислення $M_0^{(-)}$ використаємо співвідношення (7.12), яке справедливе для $T < T_c$. Маємо

$$M_0^{(-)} = (\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)^{\frac{1}{2(d+2)}} \left[e_0^{(-)} \left(1 + \frac{1}{5} \frac{\tilde{h}^2}{\tilde{h}^2 + h_{cm}^2} \right) - \frac{6}{5} e_2^{(-)} s_0^{3/2} \frac{1}{h_0} \frac{\tilde{h}}{(\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)^{1/2}} - (\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)^{1/2} \frac{de_2^{(-)}}{dh'} \right], \quad (8.6)$$

Використовуючи (8.2) знаходимо сумарний вклад до параметра порядку $M^{(-)}$ за наявності зовнішнього поля

$$M^{(-)} = \sigma_{00}^{(-)} \left(\tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{\frac{1}{2(d+2)}}, \quad (8.7)$$

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

$$\sigma_{00}^{(-)} = e_0^{(-)} \left(1 + \frac{1}{5} \frac{\tilde{h}^2}{\tilde{h}^2 + h_{cm}^2} \right) + e_{00}^{(-)} \frac{\tilde{h}}{(\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)^{1/2}} + e_{02}^{(-)}. \quad (8.8)$$

Тут величина $e_0^{(-)}$ означена в (7.18), а для $e_{00}^{(-)}$ та $e_{02}^{(-)}$ знаходимо вирази

$$e_{00}^{(-)} = \frac{6}{5} \frac{s_0^{3/2}}{h_0} \gamma_s^{(-)} - e_2^{(-)}, \quad e_{02}^{(-)} = \left(\frac{d\gamma_s^{(-)}}{dh'} - \frac{de_2^{(-)}}{dh'} \right) \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \quad . \quad (8.9)$$

Перші два доданки правої частини рівності (8.8) залежать лише від змінної α_m $\alpha_m = \tilde{h}/h_{cm}$. Для того, щоб амплітуда $\sigma_{00}^{(-)}$ була функцією лише α_m , необхідно, щоб такою функцією був коефіцієнт $e_{02}^{(-)}$. В цьому можна перекопатися шляхом прямого обчислення похідних величин $\gamma_s^{(-)}$ та $e_2^{(-)}$. Тоді отримуємо

$$\frac{de_2^{(-)}}{dh'} = -\frac{s_0^{3/2}}{h_0} q'_s \sigma_0'^2 \left(1 + \frac{q_l}{12} \sigma_0'^2 \right) \left(\tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{-1/2} \quad (8.10)$$

де

$$q'_s = -\frac{E_2}{2p_0} \beta \Phi(0) f_0 s^{-3} H_{cm} \frac{\alpha_m}{(1 + \alpha_m^2)^{1/2}}, \quad q_l = \Phi_f s_0^3 \varphi_0 f_0^{-1} \beta \Phi(0).$$

А для похідної від величини $\gamma_s^{(-)}$ із (7.17), яка є сумою доданків до вільної енергії системи від області критичного режиму флуктуацій параметра порядку $\bar{\gamma}^-$, перехідної області $f_{n'_p+1}$ та від області інверсного гаусового режиму, знаходимо

$$\frac{d\gamma_s^{(-)}}{dh'} = \frac{s_0^{d/2}}{h_0} f_{\delta_1} \left(\tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{-1/2}, \quad (8.11)$$

де

$$f_{\delta_1} = s_0^{-3} f_p^- + \gamma_p^- + s^{-3} f_{Iv}.$$

Величини r_p^- , γ_p^- , f_{Iv} залежать лише від α_m і наведені в [95]. У підсумку явний вигляд критичної амплітуди намагніченості $\sigma_{00}^{(-)}$ у низькотемпературній області запишемо

$$\sigma_{00}^{(-)} = e_0^{(-)} \left(1 + \frac{1}{5} \frac{\alpha_m^2}{1 + \alpha_m^2} \right) + e_{00}^{(-)} \frac{\alpha_m}{(1 + \alpha_m^2)^{1/2}} + e_{02}^{(-)}, \quad (8.12)$$

де для величини $e_{02}^{(-)}$ маємо

$$e_{02}^{(-)} = \frac{s_0^{3/2}}{h_0} \left(f_{\delta_1} + q'_s \sigma_0'^2 \left(1 + \frac{q_l}{12} \sigma_0'^2 \right) \right). \quad (8.13)$$

Аналогічно можна провести розрахунки для намагніченості при $T > T_c$. Від сингулярної частини вільної енергії одержимо вираз [94]

$$M^{(+)} = \sigma_{00}^{(+)} \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{\frac{1}{2(d+2)}}, \quad (8.14)$$

де $\sigma_{00}^{(+)}$ залежить лише від змінної α ($\alpha = h/h_c$). Критична амплітуда $\sigma_{00}^{(-)}$ при переході через точку $T = T_c$ неперервно переходить в величину $\sigma_{00}^{(+)}$, яка має той самий зміст але вже для області $T > T_c$. Це дає змогу побудувати вираз для намагніченості системи поблизу точки фазового переходу для обох діапазонів температур $T > T_c$ і $T < T_c$ у загальному вигляді

$$M = \sigma_{00} (\tilde{h}^2 + h_{CR}^2)^{\frac{1}{2(d+2)}}, \quad (8.15)$$

де критична амплітуда σ_{00} задається виразом

$$\sigma_{00} = \begin{cases} \sigma_{00}^{(-)}, & T < T_c \\ \sigma_{00}^{(+)}, & T > T_c \end{cases}. \quad (8.16)$$

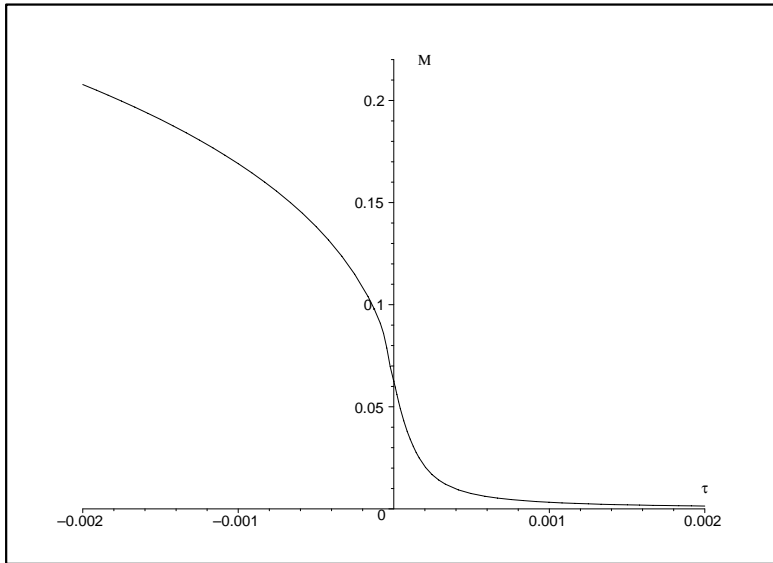


Рис. 4. Намагніченість спінової системи залежно від приведеної температури τ . Значення зовнішнього поля $h = 10^{-6}$

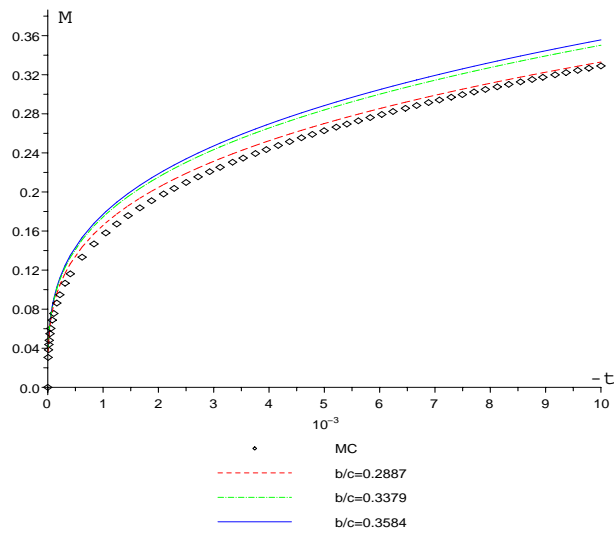


Рис. 5. Намагніченість спінової системи при відсутності зовнішнього поля. MC – результати роботи [80]

Величина h_{CR} рівна h_{cm} при температурах нижчих T_c , і дорівнює h_c при температурах, вищих T_c . Намагніченість системи залежно від величини відносної температури τ показана на рис. 4.

Таким чином, вигляд рівняння стану тривимірної ізінгоподібної системи при наявності поля описується виразом (8.15). Для зручності називатимемо його кросоверним рівнянням стану. Термін кросовер вживається тут з огляду на те, що вираз (8.15) дає змогу природним чином здійснити перехід до випадків, коли одна із змінних (температура чи поле) є визначальною для опису поведінки параметра порядку.

Для малих значень поля будемо мати

$$M = M_{0\tau} |\tau|^\beta, \quad (8.17)$$

де величина $M_{0\tau}$ записується у вигляді

$$M_{0\tau} = \begin{cases} \sigma_{00}^{(-)} (1 + \alpha_m^2)^{\frac{1}{2(d+2)}} \left(\frac{c_{1k}}{f_0} E_2^{n_0} \right)^{\frac{p_0}{d+2}}, & T < T_c \\ \sigma_{00}^{(+)} (1 + \alpha^2)^{\frac{1}{2(d+2)}} \left(\frac{c_{1k}}{f_0} \right)^{\frac{p_0}{d+2}}, & T > T_c \end{cases}, \quad (8.18)$$

а критичний показник $\beta = p_0/(d+2) = 0.302$. Зрозуміло, що при відсутності зовнішнього поля параметр порядку з'являється у точці $T = T_c$ ($\tau = 0$), як це подано на рис. 5. Тут наші результати наведені для різних значень відношення радіуса дії потенціалу до сталої ґратки [8]. Зокрема, $b/c = b_I = 0.2887$ — відповідає наближенню найближчих сусідів, $b/c = b_{II} = 0.3379$ — відповідає врахуванню взаємодії між другими сусідами, $b/c = b_{III} = 0.3584$ — врахування взаємодії третіх сусідів, а також зроблено порівняння з відповідними результатами, отриманими в роботі [80] з використанням числових методів.

У випадку, коли визначальною змінною є зовнішнє поле, рівняння стану записується у вигляді

$$M = M_{0h} h^{1/\delta}, \quad (8.19)$$

де для скейлінгової функції M_{0h} маємо

$$M_{0h} = \sigma_{00}^{(-)} \left(1 + \left(\frac{h_{CR}}{h} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2(d+2)}} \left(\frac{s_0^{3/2}}{h_0} \right)^{\frac{1}{d+2}} \quad (8.20)$$

а критичний показник $\delta = d + 2 = 5$. Польова залежність параметра порядку при температурі $T = T_c$ ($\tau = 0$) наведена на рис. 6. Ці результати отримано для різних значень радіуса дії потенціалу та зроблено порівняння з результатами роботи [80].

Як зазначалося вище, критична амплітуда рівняння стану (8.15) залежить лише від величин α_m ($T < T_c$) або α ($T > T_c$). Однак вони, в свою чергу, є функціями мікроскопічних параметрів гамільтоніану, зокрема залежать від величини s_0 , яка характеризує фур'є-образ потенціалу взаємодії

$$\alpha_m = (s_0^{3/2}/h_0) \left(\frac{f_0}{c_{1k}} E_2^{-n_0} \right)^{p_0} z^{-p_0}, \quad \alpha = (s_0^{3/2}/h_0) \left(\frac{f_0}{c_{1k}} \right)^{p_0} z^{-p_0}. \quad (8.21)$$

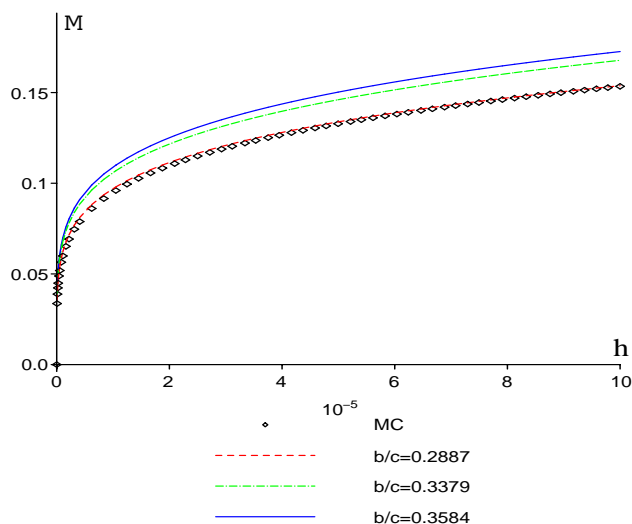


Рис. 6. Польова залежність параметра порядку спінової системи в точці $T = T_c$. МС – результати роботи [80]

Тут змінна z набуває значення $z = \frac{\tau}{h^{1/p_0}}$. Тому більш звичним є залежність критичної амплітуди σ_{00} , або скейлінгових функцій $M_{0\tau}$ і M_{0h} саме від змінної z . Подібна змінна $x = \tau/M^{1/\beta}$ використовується в рівнянні стану, запропонованому Вайдамом [81]. Однак вона включає в себе параметр порядку M , який з точки зору мікроскопічного підходу має бути обчислений, а не введений “зверху”. Тому використання змінної z є більш природним, ніж змінної x , хоча при малих та від’ємних значеннях τ ці величини є еквівалентними. Графік залежності скейлінгової функції рівняння стану від змінної z подано на рис. 7. Тут же є дані обчислення роботи [80].

Сприйнятливості системи поблизу ТФП знаходимо шляхом диференціювання за полем виразу (8.2). Беручи до уваги (8.7) та (8.14), знаходимо залежність сприйнятливості від температури (рис. 8а) та графік критичної амплітуди сприйнятливості від скейлінгової змінної Z для декількох значень мікроскопічних параметрів (рис. 8б).

Подібним чином можна виконати також обчислення ентропії, теплоємності та інших характеристик моделі поблизу точки фазового переходу.

9. ВИСНОВКИ

Запропонований в роботі метод опису критичної поведінки $3D$ ізінгоподібної моделі дає змогу отримувати явні вирази для таких спостережуваних величин як намагніченість, сприйнятливості тощо. Обчислення не передбачають введення жодних феноменологічних параметрів. Завдяки використанню негаусових розподілів параметра порядку вперше отримано загальний вираз для вільної енергії системи

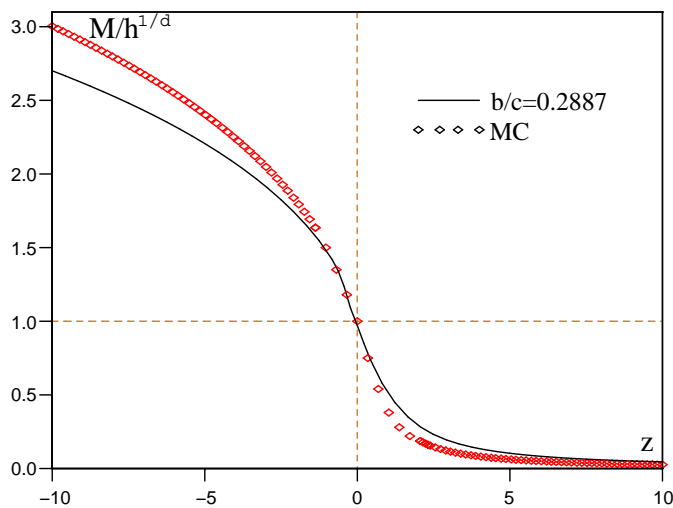


Рис. 7. Скейлінгова функція рівняння стану залежно від z . MC – результати роботи [80].

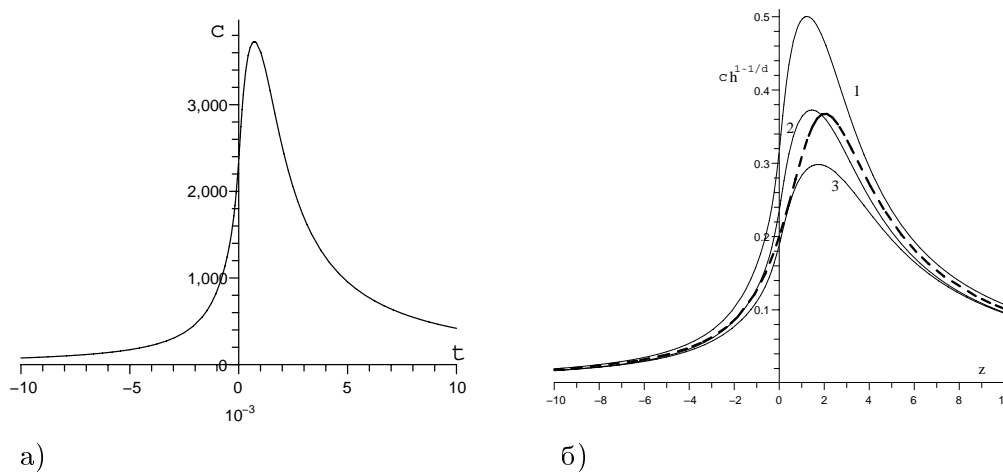


Рис. 8. а) Сприйнятливість як функція приведеної температури при значенні поля $h = 10^{-5}$ при $b/c = 0,4$; б) Залежність скейлінгової функції сприйнятливості від змінної z : при $b/c = 0,3$ (крива 1), при $b/c = 0,4$ (крива 2) і при $b/c = 0,5$ (крива 3), штрихована крива відповідає параметричному представленню із [84].

поблизу ТФП за наявності поля, який справджується при будь-яких значеннях останнього.

Показано, що при обчисленні 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. В цій флуктуаційній області має місце ренормгруппова симетрія. Вона є відповідальною за формування (некласичних) значень критичних показників.

Таблиця 3. Загальний випадок асимптотичної поведінки фізичних величин поблизу ТФП.

Фізична величина	Закон зміни
Параметр порядку	$M = M_0 (\tilde{h} + \tau^{\beta\delta})^{1/\delta}$
Кореляційна довжина	$\xi = \xi_0 (\tilde{h} + \tau^{\beta\delta})^{-2/\delta}$
Сприйнятливість	$\chi = \chi_0 (\tilde{h} + \tau^{\beta\delta})^{-4/\delta}$
Теплоємність	$C = C_0 (\tilde{h} + \tau^{\beta\delta})^{-\alpha/\beta\delta}$

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 вклад до вільної енергії системи.

Отримано явну функціональну залежність сингулярної частини вільної енергії від температури та поля. Вона складається із виразів (7.20) та (7.21), які є узагальненням формул (2.15) та (2.17). В області малих чи великих значень поля вираз (7.19) є еквівалентним до скейлінгових форм (2.15) та (2.17) відповідно. Однак в області проміжних значень поля ($z \approx 1$) наближені представлення перестають описувати поведінку системи. Тут має місце більш загальна форма залежності від температури та поля.

У цій роботі знайдено фактично загальну форму критичної поведінки фізичних величин поблизу ТФП. Залежність цих величин від температури та поля наведена в Табл. 3. Легко зауважити що залежності, наведені в Табл. 3, переходять в дані Табл. 1 у випадку $\mathcal{H} = 0$, а при $T = T_c$ – в дані Табл. 2. Тут τ – відносна температура із (2.6), а перенормоване поле \tilde{h} із (4.20).

ЛІТЕРАТУРА

- [1] Браут Р. Фазовые переходы. М.:Мир, 1967, 288 с.
- [2] Фишер М. Природа критического состояния. М.:Мир, 1968. 222 с.

- [3] *Стенли Г.* Фазовые переходы и критические явления. М.: Мир, 1973. 419 с.
- [4] *Ма Ш.* Современная теория критических явлений. М.: Мир, 1980. 298 с.
- [5] *Юхновский И.Р.* Фазовые переходы второго рода. Метод коллективных переменных. К.: Наук. думка, 1985. 224 с.
- [6] *Исюмов Ю.А., Сыромятников В.Н.* Фазовые переходы и симметрия кристаллов. М.: Наука, 1984. 248 с.
- [7] *Domb C.* The critical point. Taylor & Francis, 1996. 376 p.
- [8] *Юхновський І.Р., Козловський М.П., Пиллюк І.В.* Мікроскопічна теорія фазових переходів у тривимірних системах. Львів: Євросвіт, 2001. 592 с.
- [9] *Стасюк І.В.* Польові та деформаційні ефекти у складних сегнетоактивних сполуках. – Ужгород: Гражда, 2009. 392 с.
- [10] *Боголюбов Н.Н., Широков Д.В.* Введение в теорию квантованных полей. М.: Наука, 1984. 597 с.
- [11] *Amit D.J.* Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena. World Scientific, Singapore, 1984. 392 p.
- [12] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика М.: Наука, 1976. 584 с.
- [13] *Блинц Р., Жеки Б.* Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. М.: Мир, 1975, 400 с.
- [14] *Widom B. J.* Chem. Phys. 1965. **43**. 3898–3905.
- [15] *Domb C., Hunter D.L.* Proc. Phys. Soc. 1965. **86**. 1147–1151.
- [16] *Kadanoff L.P.* Physics. 1966. **2**. 263–273.
- [17] *Паташинский А.В., Покровский В.Л.* ЖЭТФ. 1966. **50**. 439–447.
- [18] *Козловський М.П.* УФЖ. Огляди. 2009. **5**. № 1. 61–99.
- [19] *Юхновский И.Р.* ДАН СССР. 1977. **232**. 312–315.
- [20] *Юхновский И.Р., Рудаковский Ю.К.* УФЖ. 1977. **22**. 50–59.
- [21] *Юхновский И.Р., Козловский М.П.* УФЖ. 1977. **22**. 1125–1134.
- [22] *Юхновский И.Р.* ТМФ. 1978. **36**. 373–399.
- [23] *Юхновский И.Р., Козловский М.П.* ДАН СССР. 1977. **236**. 846–849.
- [24] *Юхновский И.Р., Козловский М.П., Коломиец В.А.* УФЖ. 1982. **27**. 1399–1403.

- [25] *Yukhnovskii I.R.* Riv. Nuovo Cim. 1989. **12**. 1–119.
- [26] *Козловський М.П.* ТМФ. 1989. **78**. 422–433.
- [27] *Usatenko Z.E., Kozlovskii M.P.* Phys.Rev.B. 2000. **62**. 9599–9615.
- [28] *Yukhnovskii I.R., Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V.* Phys.Rev.B. 2002. **66**. 134410.
- [29] *Kozlovskii M.P.* Condens. Matter Phys. **8**. 2005. 473–506.
- [30] *Kozlovskii M.P.* Ferroelectrics. 2005. **317**. 25–29
- [31] *Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V., Prytula O.O.* Phys.Rev.B. 2006. **73**. 174406.
- [32] *Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V., Prytula O.O.* Physica A. 2006. **369**. 562–576.
- [33] *Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V., Prytula O.O.* Nucl.Phys.B. 2006. **753**. 242–251.
- [34] *Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V., Prytula O.O.* Ferroelectrics. 2005. **317**. 43–47.
- [35] *Kozlovskii M.P.* Phase Transitions. 2007. **80**. 3–9.
- [36] *Kozlovskii M.P.* Condens. Matter Phys. 2007. **10**. 173–178.
- [37] *Pylyuk I.V.* Phase Transitions. 2007. **80**. 11–16.
- [38] *Козловський М.П.* Вплив зовнішнього поля на критичну поведінку тривимірного магнетика. I. Рекурентні співвідношення (Препринт ІФКС НАН України, ІСМР–02–31U, Львів 2002, 43 с.)
- [39] *Козловський М.П.* 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] *Козловський М.П.* 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] *Козловський М.П., Козак П.Р.* 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] *Козловський М.П.* Аналітичний метод опису критичних властивостей 3D ізінгоподібної моделі в зовнішньому полі (Препринт ІФКС НАН України, ІСМР–08–10U, Львів 2008, 85 с.)
- [43] *Гинзбург В.Л.* ФТТ. 1960. **2**. 2031–2043.

- [44] *Вакс В.Г., Ларкин А.И.* ЖЭТФ. 1965. **49**. 975–989.
- [45] *Stanley H.E.* Phys. Rev. 1968. **176**. 718–722.
- [46] *Berlin T.H., Кас М.* Phys. Rev. 1952. **86**. 821–835.
- [47] *Wilson K.G., Fisher M.E.* Phys. Rev. Lett. 1972. **28**. 240–243.
- [48] *Wilson K.G.* Phys. Rev. Lett. 1972. **28**. 548–551.
- [49] *Вильсон К., Когут Дж.* Ренормализационная группа и ϵ -разложение. М.: Мир, 1975. 256 с.
- [50] *Brezin E., Le Guillou J.C., Zinn-Justin J., Nickel B.G.* Phys. Lett. A. 1973. **44**. 227–228.
- [51] *Gorishny S.G., Larin S.A., Tkachov F.V.* Phys. Lett. A. 1984. **101**. 120–123.
- [52] *Le Guillou J.C., Zinn-Justin J.* J. Phys. Lett (Fr.) 1985. **46**. L137–L141.
- [53] *Доценко В.С.* УФН. 1995. **165**. 481–528.
- [54] *Фольк Р., Головач Ю., Яворский Т.* УФН. 2003. **173**. 175–200.
- [55] *Авдеева Г.М., Муздал А.А.* Письма в ЖЭТФ. 1972. **16**. 253–255.
- [56] *Bresin E., Wallace D.J., Wilson K.G.* Phys. Rev. Lett. 1972. **29**. 591–594.
- [57] *Bresin E., Wallace D.J., Wilson K.G.* Phys. Rev. B. 1973. **7**. 232–239.
- [58] *Chang M.-C., Houghton A.* Phys. Rev. B. **21**. 1980. 1881–1892.
- [59] *Symanzik K.* Lett. Nuovo Cim. 1973. **8**. 771–774.
- [60] *Parisi G.* J. Stat. Phys. 1980. **23**. 49–82.
- [61] *Baker G.A., Nickel B.G., Mairon D.I.* Phys. Rev. B. 1978. **17**. 1365–1374.
- [62] *Le Guillou J.C., Zinn-Justin J.* Phys. Rev. B. 1980. **21**. 3976–3998.
- [63] *Wilson K.G.* Phys. Rev. D. 1971. **6**. 419–426.
- [64] *Wegner F.J., Houghton A.* Phys. Rev. A. 1973. **8**. 401–412.
- [65] *Wetterich C.* Nucl. Phys. B. 1991. **352**. 529–584.
- [66] *Nicoll J.F., Chang T.S.* Phys. Rev. Lett. 1974. **33**. 540–543.
- [67] *Nicoll J.F., Chang T.S., Stanley H.E.* Phys. Rev. A. 1976. **13**. 1251–1264.
- [68] *Margaritis A., Oder G., Patkos A.* Z. Phys. C. 1988. **39**. 109–114.
- [69] *Tetradis N., Wetterich C.* Nucl. Phys. B. 1994. **422**. 541–592.

- [70] *Tsypin M.M.* Nucl. Phys. B. 2002. **636**. 601–610.
- [71] *Bagnuls C., Bervillier C.* Phys. Rept. **348**. 2001. 91–156.
- [72] *Berges J., Tetradis N., Wetterich C.* Phys. Rept. 2002. **363**. 223–386.
- [73] *Campostrini M., Pelissetto A., Rossi P., Vicari E.* Phys. Rev. E. 1999. **60**. 3526–3563.
- [74] *Butera P., Comi M.* Phys. Rev. B. 1999. **60**. 6749–6760.
- [75] *Knak Jensen S.J., Mouristen O.G.* J. Phys. A. 1982. **15**. 2631–2636.
- [76] *Ferrenberg A.M., Landau D.P.* Phys. Rev. B. 1991. **44**. 5081–5091.
- [77] *Guida R., Zinn-Justin J.* J. Phys. A. 1998. **31**. 8102–8121.
- [78] *Hasenbusch M.* J. Phys. A. 1995. **32**. 4851–4865.
- [79] *Guida R., Zinn-Justin J.* Nucl. Phys. B. 1977. **489**. 626–652.
- [80] *Engels J., Fromme L., Seniuch M.* Nucl. Phys. B. 2003. **655**. 277–299.
- [81] *Widom B.J.* Chem. Phys. 1965. **43**. 3898.
- [82] *Domb C., Hunter D.L.* Proc. Phys. Soc. 1965. **86**. 1147.
- [83] *Griffiths R.B.* Phys. Rev. 1967. **158**. 176–187.
- [84] *Zinn-Justin J.* Phys. Rept. 2001. **344**. 159–178.
- [85] *Schofield P.* Phys. Rev. Lett. 1969. **22**. 606–608.
- [86] *Yukhnovskii I.R.* Physica A. 1990. **168**. 999–1020.
- [87] *Пацаган О.В., Юхновский И.Р.* ТМФ. 1990. **83**. 72–82.
- [88] *Юхновский И.Р., Гурский З.А.* Квантово-статистическая теория неупорядоченных систем. К.: Наукова думка, 1991. 288 с.
- [89] *Кориневский Н.А.* Изв. АН СССР. Сер. физ. 1991. **5**. 420–426.
- [90] *Kadanoff L.P.* Rev. Mod. Phys. 1967. **39**. 395–431.
- [91] *Wilson K.G.* Phys. Rev. B. 1971. **4**. 3174–3205.
- [92] *Zinn S.Y., Fisher M.E.* Physica A. 1996. **226**. 168–180.
- [93] *Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V., Prytula O.O.* Condens. Matter Phys. 2004. **7**. 361–382. **519**. 626–660.
- [94] *Kozlovskii M.P.* Condens Matter Phys. 2009. **12**. 151.
- [95] *Козловський М.П., Романік Р.В.* ЖФД. 2009.

**METHOD FOR THEORETICAL DESCRIPTION
OF THE CRITICAL BEHAVIOR
OF 3D MODEL IN AN EXTERNAL FIELD**

Mykhajlo KOZLOVSKII

Institute for Condensed Matter Physics
76011 Lviv, Svientsitskoho str. 1
e-mail: mpk@icmp.lviv.ua

The paper is devoted to the presentation of the analytic method describing the critical behavior of the 3D Ising model in the external field. It is a continuation of the phase transition theory proposed by I.R. Yukhnovkii which uses the Collective Variables method. The generalization concerns the investigation of the external field effect on the behaviour of such characteristics as order parameter, susceptibility, heat capacity, etc. Within the framework of a simple model, the evaluation of critical exponents as well as critical amplitudes for different physical quantities is carried out. The general scaling form for 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 external field.