

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-01-06U

М.П.Козловський

ПРО РОЗРАХУНОК НЕУНІВЕРСАЛЬНИХ
ХАРАКТЕРИСТИК ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДУ ДРУГОГО РОДУ

УДК: 532; 533; 533.9:530.182; 536.75; 536-12.01.

PACS: 05.60.+w, 05.70.Ln, 05.20.Dd, 52.25.Dg, 52.25.Fi

Про розрахунок неуніверсальних характеристик фазового переходу другого роду

М.П.Козловський

Анотація. Робота присвячена розвитку прямого аналітичного методу розрахунку неуніверсальних характеристик $3D$ ізінгоподібної моделі фазового переходу. Розрахунок температури фазового переходу та величини критичної області температур виконаний без введення до розгляду будь-яких феноменологічних параметрів. В якості математичного апарату використаний метод колективних змінних.

On calculation of the nonuniversal characteristics of the second order phase transition

M.P.Kozlovskii

Abstract. The direct analytic method is developed for calculation the nonuniversale characteristics $3D$ Ising-like model in the vicinity of the critical point. The values of the second order phase transitions temperature and the critical region size are calculated without using any adjustale parameters. Mathematical description is performed with the collective variables method.

Вступ

Метою роботи є розвиток теоретичного методу опису термодинамічних властивостей $3D$ граткових систем, в яких мають місце фазові переходи (ФП). На даний час (див. [1]) існує цілий ряд методів і підходів до опису критичної поведінки статистичних систем. Переважна більшість цих методів спрямована на дослідження універсальних характеристик систем, як обчислення критичних показників та відношень критичних амплітуд. Використання методів пересумування асимптотичних рядів, які виникають при обчисленні універсальних характеристик системи, дозволяє з високою точністю знайти значення як критичних показників, так і універсальних відношень критичних амплітуд [2,3]. Однак, в більшості підходів виникають суттєві труднощі при розрахунку неуніверсальних характеристик системи, зокрема температури фазового переходу, самих критичних амплітуд теплоємності, сприйнятливості та інших величин). Методи пересумування рядів виявилися неефективними для розрахунку неуніверсальних величин, зокрема, явних аналітичних виразів для термодинамічних функцій та інших характеристик системи поблизу точки фазового переходу (ТФП).

Для розрахунку неуніверсальних величин, зокрема температури фазового переходу використовуються числові методи. Ці методи дозволяють з великою точністю отримати значення температури фазового переходу для багатьох моделей ФП [4,5], однак не дають можливості описати повну картину фазового переходу.

Описаний нижче метод розрахунку дозволяє в рамках єдиного підходу отримати як універсальні, так і неуніверсальні характеристики фазового переходу. Обчислення проводяться в рамках єдиної схеми і дозволяють дослідити залежність спостережувальних величин від мікроскопічних параметрів моделі.

Розглянемо однокомпонентну систему спінів на простій кубічній гратці з періодом c . Гамільтоніан такої системи записується у вигляді

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} \tilde{\Phi}(r_{ij}) S_i S_j. \quad (1)$$

Потенціал взаємодії $\tilde{\Phi}(r_{ij})$, де $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$, виберемо у вигляді експонентно спадної функції віддалі між частинками r_{ij}

$$\tilde{\Phi}(r_{ij}) = A \exp(-r_{ij}/b), \quad (2)$$

де b - радіус дії потенціалу.

Фур'є образ (2) має вигляд [6]

$$\Phi_N(k) = \Phi(0)(1 + b^2 \mathbf{k}^2)^{-2}, \quad \Phi(0) = A_0 8\pi \left(\frac{b}{c}\right)^3. \quad (3)$$

Простій кубічній гратці з періодом c відповідає зона Бріллюена ¹

$$B = \left\{ \mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) \mid k_i = -\frac{\pi}{C} + \frac{2\pi}{c} \frac{\alpha_i}{N_i}; \alpha_i = 1, 2, \dots, N_i \right\}, \quad (4)$$

де Λ - блок з періодичними умовами на границі

$$\Lambda = \{ \mathbf{l} = (l_x, l_y, l_z) \mid l_i = c \cdot n_i, n_i = 1, 2, \dots, N_i \},$$

де $i = x, y, z$, а N - загальне число частинок ($N = N_x N_y N_z$).

В області малих значень хвильового вектора \mathbf{k} для (3) будемо використовувати параболічну апроксимацію

$$\Phi(k) = \Phi(0)(1 - 2b^2 \mathbf{k}^2), \quad (5)$$

яка справедлива при $k \leq B'$, де $k = |\mathbf{k}|$. Величина B' знаходиться із умови $\Phi(k) = 0$ і рівна

$$B' = \frac{1}{b\sqrt{2}}. \quad (6)$$

Введемо параметр S_0 , який визначає величину інтервалу $(B', B]$

$$S_0 = B/B' = \pi\sqrt{2} \left(\frac{6}{\pi}\right)^{1/3} \frac{b}{c}. \quad (7)$$

¹Розрахунок (3) виконаний з використанням сферичної системи координат. Для граткової системи має виконуватися умова

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \in B} 1 = 1.$$

При переході до сферичної системи координат ця умова переписується у вигляді

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \in B} 1 = \frac{1}{N} \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{B'} k^2 dk;$$

При цьому

$$B = \frac{\pi}{C} \left(\frac{6}{\pi}\right)^{1/3}.$$

Відповідно до означення (6) маємо, що $S_0 \geq 1$, а отже $b \geq b_{min}$, де

$$b_{min} = \frac{c}{\pi\sqrt{2}} \left(\frac{\pi}{6}\right)^{1/3} \approx 0.181413c. \quad (8)$$

В переважній більшості моделей статистичної фізики величина b є суттєво більшою від b_{min} .

Запишемо статистичну суму моделі (1) в представленні колективних змінних [6]

$$Z = \int \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{k \leq B} \beta \Phi(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}\right) J(\rho_l) (d\rho)^N, \quad (9)$$

де $(d\rho)^N = d\rho_0 \prod'_{\mathbf{k} \in B} (d\rho_{\mathbf{k}}^c d\rho_{\mathbf{k}}^s)$, штрих біля знаку суми означає, що $k \neq 0$ і змінюється в додатньому півпросторі зони Бріллюена B . Хвильовий вектор \vec{k} змінюється в інтервалі $(-B, B]^2$, $J(\rho_l)$ - якобіан переходу. Змінні $\rho_{\mathbf{k}}$ та ρ_l пов'язані співвідношеннями

$$\rho_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{l} \in \Lambda} \rho_l e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}}, \quad \rho_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in B} \rho_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{l}}. \quad (10)$$

Величини $\rho_{\mathbf{k}}$, які входять до (7), слід розуміти як функції змінної ρ_l . В подальших розрахунках будемо вважати, що

$$J(\rho_l) = \prod_{\mathbf{l} \in \Lambda} J_l(\rho_l), \quad J_l(\rho_l) = \frac{1}{2} [\delta(\rho_l + 1) + \delta(\rho_l - 1)], \quad (11)$$

як це має місце для ізінгоподібних систем.

Розрахунок (7) будемо проводити відповідно методики розрахунку запропонованої в [6]. В її основі лежить підхід К.Вільсона [7], який полягає в поетапному розрахунку статсуми шляхом послідовного виключення з розгляду короткохвильових флуктуацій. Це наглядна реалізація ідеї Л.Каданова [8] побудови ефективних блочних структур, яка була достатньо детально описана в [9]. Суть розрахунку (9) зводиться до певної апроксимації $\Phi(k)$ шляхом заміни його набором постійних величин Φ_n - різних для кожного з інтервалів $k \in [B_{n+1}, B_n)$. Така процедура дозволяє обчислити вільну енергію системи в наближенні негаусової міри і описати критичну поведінку

²При розрахунках будемо використовувати "сферичний аналог" зони Бріллюена, де хвильовий вектор \mathbf{k} (на відміну від (4)) буде записаний в сферичній системі координат.

системи без використання традиційних методів, зокрема ϵ - розкладу. При цьому в рамках єдиної схеми вдається провести розрахунок повних виразів для термодинамічних функцій, а отже отримати як універсальні характеристики моделі, так і неуніверсальні (значення критичних амплітуд, температуру фазового переходу, величину критичної області і т.д.).

1. Розрахунок статистичної суми поблизу T_c

Основну роль в визначенні критичних властивостей моделі відіграють довгохвильові флуктуації, які відповідають малим значенням хвильового вектора \vec{k} . У зв'язку з цим фур'є образ потенціалу $\Phi_N(k)$ може бути замінений його параболічною апроксимацією (5). Однак, значення температури фазового переходу T_c залежить від того, наскільки точно врахований вплив $\Phi(k)$ (зі всіма значеннями хвильового вектора) на результати обчислення термодинамічних характеристик системи, зокрема вільної енергії. Тут ми не можемо обмежити розгляд малими значеннями \mathbf{k} . У зв'язку з цим використаємо наступне наближення для потенціалу взаємодії

$$\Phi(k) = \begin{cases} \Phi(0)(1 - 2b^2 k^2), & \text{при } \mathbf{k} \in B_0 \\ \Phi(0)\bar{\Phi} = \Phi_0, & \text{при } \mathbf{k} \in B \setminus B_0 \end{cases}. \quad (1.1)$$

Причому, зона Бріллюена B_0 визначається наступним чином

$$B_0 = \left\{ k_0 = (k_0^{(1)}, \dots, k_0^{(d)}) \mid k_0^\nu = \frac{2\pi}{C} \frac{\alpha^\nu}{N_\nu}; \alpha_0^\nu = 1, 2, \dots, N_\nu \right\}, \quad (1.2)$$

і відповідає ефективній кристалічній ґратці із періодом c' ($c' = cS_0$) та числом вузлів N' ($N' = NS_0^{-3}$) в об'ємі періодичності

$$\Lambda_0 = \left\{ l_0 = (l_0^{(1)}, \dots, l_0^{(d)}) \mid l_0^\nu = c \cdot n^\nu, n^\nu = 1, 2, \dots, N_0^\nu \right\}$$

з періодичними граничними умовами. Тут $\bar{\Phi} = const$. Надалі будемо вважати, що величина $\bar{\Phi}$ складається з двох частин

$$\bar{\Phi} = \langle \Phi \rangle + \Phi_\infty, \quad (1.3)$$

де значення величин $\langle \Phi \rangle$ (середнє значення $\Phi_N(k)$ на інтервалі $k \in (B', B]$) та Φ_∞ (постійна нормування) приведені в Додатку 1.

Виконаємо інтегрування по змінних $\rho_{\mathbf{k}}$ в (9) для значень $k \in (B', B]$. Для цього запишемо Z в виді

$$Z = \int \exp \left[\frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{k} \in B_0} (\Phi(k) - \Phi_0) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + \right]$$

$$+\frac{1}{2}\beta\Phi_0\sum_{\mathbf{k}\in\mathcal{B}}\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}}\left]\prod_{\mathbf{l}\in\Lambda}J(\rho_{\mathbf{l}})(d\rho)^N.\quad(1.4)$$

Зауважимо, що змінні $\rho_{\mathbf{l}}$ слід розуміти, як функції $\rho_{\mathbf{k}}$ із (10). Перейдемо від змінних $\rho_{\mathbf{k}}$ (в першому доданку (1.4)) до інших змінних $\eta_{\mathbf{k}}$ з допомогою перетворення

$$\begin{aligned} & \exp\left[\frac{\beta}{2}\sum_{\mathbf{k}\in\mathcal{B}_0}(\Phi(\mathbf{k})-\Phi_0)\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}}\right]= \\ & =\int_{R_1}d\eta_{\mathbf{k}}\delta(\eta_{\mathbf{k}}-\rho_{\mathbf{k}})\exp\left[\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\in\mathcal{B}_0}(\Phi(\mathbf{k})-\Phi_0)\eta_{\mathbf{k}}\eta_{-\mathbf{k}}\right], \end{aligned}\quad(1.5)$$

та використаємо для дельта функції $\delta(\eta_{\mathbf{k}}-\rho_{\mathbf{k}})$ інтегральне представлення

$$\delta(\eta_{\mathbf{k}}-\rho_{\mathbf{k}})=\int_{R_1}\exp\left[2\pi i\sum_{\mathbf{k}\in\mathcal{B}_0}(\eta_{\mathbf{k}}-\rho_{\mathbf{k}})\omega_{\mathbf{k}}\right]d\omega_{\mathbf{k}}.\quad(1.6)$$

Інтегрування в (1.5) та (1.6) виконується по N' змінних, де $N'=\prod_{i=1}^dN'_i$. Приймаючи до уваги (1.5) та (1.6) із (1.4) знаходимо

$$\begin{aligned} Z & =\int_Rd\rho_{\mathbf{l}}\int_{R_1}d\eta_{\mathbf{k}}\int_{R^{N'}}d\omega_{\mathbf{k}}\exp\left[\frac{1}{2}\beta\sum_{\mathbf{k}\in\mathcal{B}}(\Phi(\mathbf{k})-\Phi_0)\eta_{\mathbf{k}}\eta_{-\mathbf{k}}+\right. \\ & \left.+2\pi i\sum_{\mathbf{k}\in\mathcal{B}_0}(\eta_{\mathbf{k}}-\rho_{\mathbf{k}})\omega_{\mathbf{k}}\right]\prod_{\mathbf{l}\in\Lambda}J_1(\rho_{\mathbf{l}}). \end{aligned}\quad(1.7)$$

Тут введено позначення

$$J_1(\rho_{\mathbf{l}})=\exp\left[\frac{1}{2}\beta\Phi_0\rho_{\mathbf{l}}^2\right]J(\rho_{\mathbf{l}}).\quad(1.8)$$

Слід зауважити, що використання перетворення типу (1.5) було здійснене вперше в роботі [11].

В подальших розрахунках буде використовуватися модифікація цього перетворення, запропонована в [12]. Слідуючи цій роботі, введемо змінну

$$\bar{\omega}_{\mathbf{k}}=\begin{cases} \omega_{\mathbf{k}}, & \mathbf{k}\in\mathcal{B}_0 \\ 0, & \mathbf{k}\in\mathcal{B}\setminus\mathcal{B}_0 \end{cases}\quad(1.9)$$

Для $\bar{\omega}_{\mathbf{k}}$ мають місце співвідношення

$$\bar{\omega}_{\mathbf{k}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{l}\in\Lambda}\bar{\omega}_{\mathbf{l}}e^{-i\mathbf{k}\mathbf{l}};\quad\bar{\omega}_{\mathbf{l}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}\in\mathcal{B}}\bar{\omega}_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}}.\quad(1.10)$$

Приймаючи до уваги (1.9), можемо записати

$$\sum_{\mathbf{k}\in\mathcal{B}_0}\omega_{\mathbf{k}}\rho_{\mathbf{k}}=\sum_{\mathbf{k}\in\mathcal{B}}\bar{\omega}_{\mathbf{k}}\rho_{\mathbf{k}}=\sum_{\mathbf{l}\in\Lambda}\bar{\omega}_{\mathbf{l}}\rho_{\mathbf{l}}.\quad(1.11)$$

Виконаємо в (1.7) інтегрування по змінних $\rho_{\mathbf{l}}$. Введемо позначення:

$$Q(\bar{\omega}_{\mathbf{l}})=\int_{R^N}d\rho_{\mathbf{l}}e^{-2\pi i\sum_{\mathbf{l}\in\Lambda}\bar{\omega}_{\mathbf{l}}\rho_{\mathbf{l}}}\prod_{\mathbf{l}\in\Lambda}J_1(\rho_{\mathbf{l}}).$$

Приймаючи до уваги (9), знаходимо

$$Q(\bar{\omega}_{\mathbf{l}})=\exp\left(\frac{1}{2}\beta\Phi_0N\right)\prod_{\mathbf{l}\in\Lambda}\cos(2\pi\bar{\omega}_{\mathbf{l}}).\quad(1.12)$$

Відомо, що $\cos(2\pi\bar{\omega}_{\mathbf{l}})$ є фур'є зображенням ймовірнісної міри $\delta(\rho_{\mathbf{l}}-1)$. Відповідно до теореми Марцинкевича [13], функція типу $\exp[P(\omega)]$, де $P(\omega)$ поліном за степенями ω , може бути точним фур'є перетворенням ймовірнісної міри у випадку, коли $P(\omega)$ є поліномом гаусового типу, тобто $P(\omega)=P_2(\omega)=-a^2\omega^2$. Використання поліному вищого порядку $P_n(\omega)$ приводить до того, що функція $\exp(P_n(\omega))$ не є точним фур'є перетворенням ймовірнісної міри.

З іншого боку доведено, що поблизу ТФП розподіли гаусового типу не дозволяють адекватно описати поведінку тривимірних систем в критичній області [6,14]. Суттєва роль поблизу T_c належить кореляційним функціям вищого порядку і опис фізичних процесів слід проводити з використанням негаусових розподілів флуктуацій.

В даній роботі використовується певне наближення при обчисленні статистичної суми системи поблизу точки ФП, яке стосується фур'є зображення міри, а не міри як такої.

Запишемо для фур'є зображення ймовірнісної міри $\delta(\rho_{\mathbf{l}}-1)$ розклад для малих значень $\omega_{\mathbf{l}}$. Маємо

$$\cos(2\pi\bar{\omega}_{\mathbf{l}})=\lim_{m\rightarrow\infty}\exp[P_m(\omega_{\mathbf{l}})],\quad(1.13)$$

де для полінома m -тої степені змінної $\omega_{\mathbf{l}}$ маємо

$$P_m(\omega_{\mathbf{l}})=\sum_{n=0}^m(2\pi i)^n\frac{1}{n!}\mathcal{M}_n\bar{\omega}_{\mathbf{l}}^n.$$

Для кумулянтів \mathcal{M}_n ьзнаходимо: $\mathcal{M}_0=\mathcal{M}_{2l+1}=0$; $\mathcal{M}_2=1$, $\mathcal{M}_4=-2$, $\mathcal{M}_6=16$, $\mathcal{M}_8=-272$, і т.д. Співвідношення (1.13) є

точним для малих значень $\bar{\omega}_l$. При малих значеннях $\bar{\omega}_l$ фур'є зображення ймовірнісної міри $\delta(\rho_1 - 1)$ записується в виді експоненти від негаусового полінома $P_{2m}(\omega)$ безмежного порядку. Забудемо тепер про спосіб отримання функції $\exp(P_{2m}(\bar{\omega}_1))$. Виконаємо аналітичне продовження цієї функції на всю область зміни $\bar{\omega}_1$. В показнику експоненти (1.13) коефіцієнти при всіх степенях $\bar{\omega}_1$ мають знак мінус. Така функція є аналітичною, скінченною і достатньо швидко спадає з ростом $\bar{\omega}_1$. Виберемо функцію

$$\bar{Q}(\bar{\omega}_1) = \exp\left(\sum_{n=0}^{m_0} (2\pi i)^{2n} \frac{\mathcal{M}_{2n} \bar{\omega}_1^{2n}}{(2n)!}\right) \quad (1.14)$$

в якості фур'є зображення деякої міри. Будемо вважати, що сама міра відповідає деякій тривимірній ґратковій системі з однокомпонентним параметром порядку.

Виконане вище наближення є неконтрольованим, оскільки фур'є образ (1.14) не відповідає мірі моделі Ізінга. Однак, відомо, що при малих значеннях $\bar{\omega}_1$ вираз (1.14) є точним фур'є образом міри $\delta(\rho_1^2 - 1)$. При інших значеннях $\bar{\omega}_1$ вираз $\bar{Q}(\bar{\omega}_1)$ відповідає деякій змінній мірі. Будемо вважати цю зміну такою, що не впливає на критичну поведінку моделі.

Наближення такого типу неявним чином виконувалося в ряді робіт, зокрема в [6,10-12]. Подібним проблемам присвячена робота [15].

Використаємо в якості фур'є образу міри вираз (1.14) та запишемо статистичну суму (1.7) у вигляді

$$Z = C \int_{R_1} d\eta_{\mathbf{k}} \exp\left[\beta/2 \sum_{\mathbf{k} \in B_0} (\Phi(k) - \Phi_0) \eta_{\mathbf{k}} \eta_{-\mathbf{k}} \int_{R_1}\right] \times \\ \times d\bar{\omega}_{\mathbf{k}} e^{2\pi i \sum_{\mathbf{k} \in B} \bar{\omega}_{\mathbf{k}} \bar{\eta}_{\mathbf{k}}} \prod_{\mathbf{l} \in \Lambda} \exp\left(\sum_{n=1}^{m_0} \frac{(2\pi i)^{2n}}{(2n)!} \mathcal{M}_{2n} \bar{\omega}_1^{2n}\right). \quad (1.15)$$

Тут $C = \exp(\frac{1}{2}\beta\Phi_0 N)$, $\bar{\omega}_1$ знаходиться із (1.9), (1.10), а для $\bar{\eta}_{\mathbf{k}}$ мають місце такого ж типу співвідношення. Виконаємо деякі перетворення

$$\sum_{\mathbf{l} \in \Lambda} \bar{\omega}_1^2 = \sum_{\mathbf{k} \in B_0} \omega_{\mathbf{k}} \omega_{-\mathbf{k}} \\ \sum_{\mathbf{l} \in \Lambda} \bar{\omega}_1^{2n} = \frac{1}{N^{n-1}} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n} \in B_0} \bar{\omega}_{\mathbf{k}_1} \dots \bar{\omega}_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}}^B. \quad (1.16)$$

Тут $\delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}}^B$ - символ Кронекера на ґратці з зоною Бріллюена B . Виконаємо наближення

$$\delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}}^B = \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}}^{B_0}, \quad (1.17)$$

яке дозволяє здійснити перехід на нову (блочну) ґратку з зоною Бріллюена B_0 (1.2). Це традиційне наближення, яке виконувалося в [6,7,12] і є реалізацією ідеї Каданова [8] про утворення блочних структур поблизу точки ФП. В результаті виконання описаних вище перетворень статистична сума представляється у вигляді

$$Z = C \int_{R_1} d\eta_{\mathbf{k}} e^{\beta/2 \sum_{\mathbf{k} \in B_0} (\Phi(k) - \Phi_0) \eta_{\mathbf{k}} \eta_{-\mathbf{k}}} \int_{R^{N'}} d\omega_{\mathbf{k}} e^{2\pi i \sum_{\mathbf{k} \in B_0} \omega_{\mathbf{k}} \eta_{\mathbf{k}}} \times \\ \times \exp\left[-\sum_{n=1}^{m_0} (2\pi)^{2n} \frac{1}{(2n)!} (N')^{1-n} \mathcal{M}'_{2n} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n} \\ \mathbf{k}_i \in B_0}} \omega_{\mathbf{k}_1} \dots \omega_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}}^{B_0}\right],$$

де

$$\mathcal{M}'_2 = \mathcal{M}_2, \quad \mathcal{M}'_4 = -\mathcal{M}_4 S_0^{-d}, \quad \mathcal{M}'_6 = \mathcal{M}_6 S_0^{-2d}, \\ \mathcal{M}'_8 = -\mathcal{M}_8 S_0^{-3d} \quad \text{і т.д.} \quad (1.18)$$

Обчислимо інтеграл за змінними ω . Для цього перейдемо до ω_l представлення

$$\omega_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N'}} \sum_{\mathbf{l} \in \Lambda} \omega_l e^{-i\mathbf{k}\mathbf{l}}; \quad \omega_l = \frac{1}{\sqrt{N'}} \sum_{\mathbf{k} \in B_0} \omega_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}}. \quad (1.19)$$

Маємо

$$\prod_{l \in \Lambda_0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_l \exp(2\pi i \omega_l \eta_l) \exp(-(2\pi)^2 \frac{\mathcal{M}'_2}{2!} \omega_1^2 - (2\pi)^4 \frac{\mathcal{M}'_4}{4!} - \\ -(2\pi)^6 \frac{\mathcal{M}'_6}{6!} \omega_1^6 - (2\pi)^8 \frac{\mathcal{M}'_8}{8!} \omega_1^8). \quad (1.20)$$

Інтеграли такого типу обчислені в [6]. Вираз (1.21) може бути представлений у вигляді³

$$e^{a'_0 N'} \prod_{\mathbf{l} \in \Lambda} \exp\left[-\frac{1}{2} a'_2 \rho_1^2 - \frac{1}{4!} a'_4 \rho_1^4 - \frac{a'_6}{6!} \rho_1^6\right], \quad (1.21)$$

³В подальших розрахунках будемо обмежуватися наближенням моделі ρ^6 , хоча насправді в показнику експоненти містяться доданки пропорційні до вищих степенів ρ_1 .

де

$$e^{a'_0} = \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega_1) d\omega_1; \quad f(\omega_1) = \exp\left(-\sum_{n=1}^4 (2\pi)^{2n} \frac{\mathcal{M}'_{2n}}{(2n)!} \omega_1^{2n}\right) \quad (1.22)$$

для коефіцієнтів a'_{2n} знаходимо

$$\begin{aligned} a'_2 &= (2\pi)^2 Q_2; & a'_4 &= (2\pi)^4 [-Q_4 + 3Q_2^2], \\ a'_6 &= (2\pi)^6 [Q_6 - 15Q_4Q_2 + 30Q_2^3]. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Тут

$$Q_{2n} = \int_{-\infty}^{\infty} \omega^{2n} f(\omega) d\omega / \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega) d\omega. \quad (1.24)$$

Коефіцієнти a'_{2n} є функціями відношення b/c , оскільки залежать від значень перенормованих кумулянтів \mathcal{M}'_{2n} . По мірі збільшення b/c ($b > 2c$) маємо:

$$a'_0 = -0.918939, \quad a'_2 = 1.000,$$

а всі a'_{2n} при $n \geq 2$ обертаються в нуль.

При великих значеннях радіуса взаємодії b замість функції $f(\omega_1)$ із (1.16) зручніше зображати функцію $f(\omega_1)$ із (1.16) у вигляді

$$f'(\omega_1) = \exp(-\omega_1^2 - g\omega_1^4 - f\omega_1^6 - k\omega_1^8), \quad (1.25)$$

де

$$\begin{aligned} g &= g_0 S_0^{-d}, & g_0 &= \frac{-\mathcal{M}'_4}{6\mathcal{M}'_2}, \\ f &= f_0 S_0^{-2d}, & f_0 &= \frac{\mathcal{M}'_6}{90\mathcal{M}'_2}, \\ k &= k_0 S_0^{-3d}, & k_0 &= \frac{-\mathcal{M}'_8}{2520\mathcal{M}'_2}. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Для моделі, яка розглядається в даній роботі величини g_0 , f_0 та k_0 є постійними величинами. Скориставшись значеннями для кумулянтів \mathcal{M}_n із (1.13), знаходимо $g = 1/3$, $f_0 = 8/45$, $k_0 = 34/315$. Величина S_0 приведена в (6). Для коефіцієнтів a'_{2n} знаходимо

$$\begin{aligned} a'_0 &= \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2}{\mathcal{M}_2}} T_0; & a'_2 &= \frac{2}{\mathcal{M}_2} T_2 \\ a'_4 &= \frac{4}{\mathcal{M}_2^2} [-T_4 + 3T_2^2], & a'_6 &= \frac{8}{\mathcal{M}_2^3} [T_6 - 15T_4T_2 + 30T_2^3], \end{aligned} \quad (1.27)$$

де

$$T_{2n} = \int_{-\infty}^{\infty} \omega_1^{2n} f'(\omega_1) d\omega_1 / T_0; \quad T_0 = \int_{-\infty}^{\infty} f'(\omega_1) d\omega_1. \quad (1.28)$$

Формули (1.28) і (1.24) повністю еквівалентні. Перевагою використання (1.28) є наявність в них малого параметра S_0^{-d} (для великих значень b/c).

Проведемо наближений розрахунок коефіцієнтів a'_{2n} із (1.17), приймаючи до уваги малість величини S_0^{-d} . Маємо

$$J_{2n} = \left(\frac{2}{\mathcal{M}_2}\right)^{n+\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{(2\pi)^2}\right)^{n+\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-x^2 - gx^4 - fx^6 - kx^8} dx.$$

Для малих значень S_0 (великі b/c , $b/c > 0.5$) знаходимо

$$\begin{aligned} J_{2n} &= \left(\frac{2}{(2\pi)^2 \mathcal{M}_2}\right)^{n+\frac{1}{2}} \left[\Gamma\left(\frac{2n+1}{2}\right) - g\Gamma\left(\frac{2n+5}{2}\right) + \right. \\ &+ \frac{1}{2}g^2\Gamma\left(\frac{2n+9}{2}\right) - f\Gamma\left(\frac{2n+7}{2}\right) - \\ &- \frac{1}{6}g^3\Gamma\left(\frac{2n+13}{2}\right) + gf\Gamma\left(\frac{2n+11}{2}\right) - \\ &\left. - k\Gamma\left(\frac{2n+9}{2}\right) + \dots 0(S_0^{-2d}) \right]. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Введемо позначення

$$Q_{2n} = J_{2n}/J_0. \quad (1.30)$$

Маємо (з точністю до $0(S_0^{-4d})$)

$$\begin{aligned} Q_2 &= (2\pi)^{-2} \left[1 - 3g + 24g^2 - \frac{45}{4}f - 297g^3 + \frac{1125}{4}gf - \frac{105}{2}k \right], \\ Q_4 &= (2\pi)^{-4} \left[1 - 8g + 99g^2 - \frac{75}{4}f - 1632g^3 + 1335gf - 210k \right], \\ Q_6 &= (2\pi)^{-6} \left[1 - 15g + 267g^2 - \frac{339}{4}f - \right. \\ &\left. - 5706g^3 + \frac{16407}{4}gf - \frac{1113}{2}k \right] \end{aligned} \quad (1.31)$$

Відповідно до (1.24) знаходимо

$$a_{2s} = 1 - S_0^{-d} + \frac{2}{3}S_0^{-2d} + 0(S_0^{-4d}),$$

$$\begin{aligned} a_{4s} &= 2S_0^{-d}(1 - 3S_0^{-d} + 4S_0^{-2d}) + 0(S_0^{-4d}), \\ a_{6s} &= 24S_0^{-2d}(1 - 5S_0^{-d}) + 0(S_0^{-4d}). \end{aligned} \quad (1.32)$$

Значення коефіцієнтів a_{2s} можуть бути обчислені для кожного із значень S_0 , а отже і від відношення b/c .

В таблиці 1 приведені значення для коефіцієнтів a'_{2s} із (1.19), а також їх значення отримані із загальних співвідношень (1.18).

Таблиця 1.

b	a_{2s}	a_{4s}	a_{6s}	a'_2	a'_4	a'_6
0.200000	0.624568	2.961750	—	0.586520	0.207385	0.424144
0.250000	0.624568	2.961750	—	0.586520	0.207385	0.424144
0.300000	0.715424	0.435715	—	0.723583	0.235174	0.462759
0.350000	0.811503	0.246542	-0.759899	0.815973	0.215523	0.355297
0.400000	0.873682	0.185498	0.040187	0.875252	0.176854	0.225781
0.450000	0.912515	0.141203	0.090953	0.913029	0.138264	0.132073
0.500000	0.937343	0.107616	0.064275	0.937514	0.106562	0.075758
0.550000	0.953758	0.082734	0.040262	0.953817	0.082342	0.044024
0.600000	0.964973	0.064421	0.024909	0.964995	0.64270	0.026281
0.650000	0.972869	0.050869	0.015643	0.972877	0.050808	0.016183
0.700000	0.978575	0.040728	0.010049	0.978578	0.040702	0.010276
0.750000	0.982796	0.033038	0.006614	0.982797	0.033026	0.006714
0.800000	0.985981	0.027125	0.004456	0.985982	0.027120	0.004502
0.850000	0.988430	0.022519	0.003068	0.988430	0.022516	0.003090
0.900000	0.990341	0.018884	0.002156	0.990341	0.018883	0.002167
0.950000	0.991855	0.015982	0.001543	0.991855	0.015981	0.001548
1.000000	0.993069	0.013639	0.001123	0.993069	0.013639	0.001126
1.050000	0.994053	0.011729	0.000830	0.994053	0.011728	0.000831
1.100000	0.994860	0.010156	0.000622	0.994860	0.010156	0.000623
1.150000	0.995528	0.008851	0.000472	0.995528	0.008851	0.000473
1.200000	0.996085	0.007759	0.000363	0.996085	0.007759	0.000363

Як бачимо, навіть при відносно малих значеннях b/c ($b/c > 0.4$) наближені формули (1.19) дозволяють отримати ці коефіцієнти з достатньою точністю. Тому для всіх $b/c > 0.5$ можемо використовувати для обчислення коефіцієнтів a_{2n} наближені формули (1.19).

Статистична сума записується у вигляді

$$\begin{aligned} Z &= e^{-\frac{1}{2}\beta\Phi_0 N} \int_{R_1} d\eta_{\mathbf{k}} e^{\beta/2 \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_0} (\Phi(\mathbf{k}) - \Phi_0) \eta_{\mathbf{k}} \eta_{-\mathbf{k}}} e^{a'_0 N'} \times \\ &\times \exp \left[- \sum_{n \geq 1} \frac{a'_{2n}}{(2n)!} (N')^{1-n} \sum_{\mathbf{k}_i \in \mathcal{B}_0} \eta_{\mathbf{k}_1} \dots \eta_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}}^{\mathcal{B}_0} \right], \end{aligned} \quad (1.33)$$

де коефіцієнти a'_{2n} визначаються формулами (1.17) або (1.18). При $b/c > 0.5$ коефіцієнти a'_{2n} можна обчислювати з допомогою наближених формул (1.19).

2. Розрахунок температури фазового переходу

Використаємо отримані вище результати для коефіцієнтів a'_{2n} для розрахунку температури фазового переходу. Скористаємося з результатів роботи [10], в якій статистична сума була записана в наближенні моделі ρ^4

$$\begin{aligned} Z &= C' e^{a'_0 N'} \int \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_0} d(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \right. \\ &\left. - \frac{1}{4!} \frac{a'_4}{N'} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}_0}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right) (d\rho)^{N'}, \end{aligned} \quad (2.1)$$

де $d(\mathbf{k}) = a_2 - \beta\Phi(\mathbf{k})$.

Коефіцієнти a'_{2n} , отримані в [10], є функціями температури (див. ф-ли (14)-(16) із [10]). Це зобумовлено використаним в [10] певному способі розрахунку. Приведена в роботі [10] константа C' також мала температурну залежність.

Запропонований в даній роботі спосіб розрахунку коефіцієнтів a'_{2n} дозволяє перенести температурну залежність в коефіцієнт a_2 . Всі решта коефіцієнтів a'_{2n} із $n = 0$ та $n \geq 2$ від температури не залежать. Цей результат вдалося досягнути завдяки розширенню фазового простору колективних змінних (співвідношення (1.5)), яке вперше було запропоноване в роботі [11], а також його модифікації (1.9) із роботи [12].

Використаємо значення початкових коефіцієнтів a_2 , a'_4 виразу (2.1) для розрахунку температури фазового переходу. Величини, що входять до (2.1), мають вигляд

$$\begin{aligned} C' &= \exp \left(-\frac{1}{2} \beta \Phi_0 N \right) \exp(a'_0 N'), \\ a_2 &= a'_2 + \beta \Phi_0, \\ a'_4 &= a'_4, \end{aligned} \quad (2.2)$$

де a'_2 та a'_4 визначаються формулами (1.18), або (1.19). Розглянемо більш детально коефіцієнт a_2 . Відповідно до (1.1) та (1.3) маємо

$$a_2 = a'_2 + \beta\Phi(0)\bar{\Phi} = a'_2 + \beta\Phi(0)[\langle \Phi \rangle + \Phi_\infty]. \quad (2.3)$$

Для розрахунку температури фазового переходу скористаємося рівнянням, записаним в [10].

$$a_2 - \beta_c \Phi(0) - r^*(T_c) - R(T_c)(a'_n - u^*(T_c)) = 0. \quad (2.4)$$

Тут r^* та u^* - координати фіксованої точки рекурентних співвідношень між коефіцієнтами $a_{2n}^{(l)}$ двох послідовних блочних структур l -тої та $(l+1)$ -ої [10].

$$r^* = -f_0 \beta_c \Phi(0), \quad u^* = \varphi_0 (\beta_c \Phi(0))^2, \quad (2.5)$$

де величини f_0 та φ_0 обчислені в [10]. При $\alpha' = 1.00$ знаходимо

$$f_0 = 0.5426, \quad \varphi_0 = 0.6894. \quad (2.6)$$

В цій же роботі знайдено, що

$$R = R^{(0)}(u^*)^{-1/2}, \quad (2.7)$$

а $R^{(0)} = -0.5333$. Приймаючи до уваги (2.5) та (2.7) для $\beta_c \Phi(0)$ знаходимо рівняння

$$A(\beta_c \Phi(0))^2 + B\beta_c \Phi(0) + D = 0, \quad (2.8)$$

де

$$\begin{aligned} A &= 1 - f_0 - R^{(0)} \sqrt{\varphi_0} - \bar{\Phi}, \\ B &= -a'_2, \\ D &= a'_4 R^{(0)} \varphi_0^{-1/2}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Знайдемо параметр Φ_∞ ($\bar{\Phi} = \langle \Phi \rangle + \Phi_\infty$). З умови, що $\beta_c \Phi(0) = 1$ при $b/c \rightarrow \infty$ маємо

$$A = a'_2. \quad (2.10)$$

Оскільки при $b/c \rightarrow \infty$ величина $a'_2 = 1$, $a < \Phi \rangle \rightarrow 0$ знаходимо

$$\Phi_\infty = -f_0 - R^{(0)} \sqrt{\varphi_0} \quad (2.11)$$

Підставляючи значення величин f_0, φ_0 , та $R^{(0)}$ в (2.11) маємо, що $\Phi_\infty = 0.1971$

Використовуючи (2.11), для коефіцієнта A із (2.9), маємо

$$A = 1 - \langle \Phi \rangle, \quad (2.12)$$

де значення для $\langle \Phi \rangle$ розраховані в Додатку 1.

Розв'язок рівняння (2.8) дає значення температури $\beta_c \Phi(0)$, як функції відношення b/c . Результати такого розрахунку приведені на Рис.1.

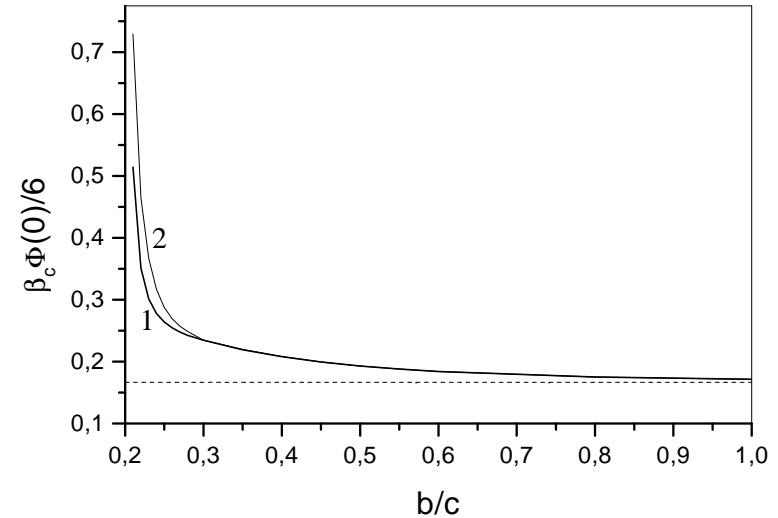


Рис. 1. Значення температури фазового переходу у випадку використання формули для a'_{2n} із (1.18) (крива 1) та при використанні їх наближених значень (1.19) (крива 2).

3. Визначення величини критичної області

Слід зауважити, що поряд з температурою фазового переходу важливою характеристикою моделі є величина критичної області. Її розміри залежать від відношення радіуса дії потенціалу b до постійної ґратки c . Оцінку величини критичної області $(0, \tau^*)$, де $\tau^* = (T^* - T_c)/T_c$, можна зробити використовуючи явний розв'язок рекурентних співвідношень. Відповідно до [10] маємо

$$r_{n_0} - r^* + c_1 E_1^{n_0} + c_2 R E_2^{n_0}, \quad (3.1)$$

де E_1, E_2 - власні значення лінеаризованої поблизу фіксованої точки (r^*, u^*) матриці переходу

$$\begin{pmatrix} r_{n+1} - r^* \\ u_{n+1} - u^* \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} r_n - r^* \\ u_n - u^* \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

Тут $r_n = s^{2n}(a_2^{(n)} - \beta_c \Phi(0))$, $u_n = s^{4n} a_4^{(n)}$, де n - номер блочної структури, s - параметр ренормгрупового перетворення. Величина R визначена в (2.7). Для коефіцієнта c_1 знаходимо:

$$c_1 = \tilde{c}_{11} \tau, \quad (3.3)$$

де

$$\tilde{c}_{11} = (c_{10} + c_{11}) - c_{10}\tau. \quad (3.4)$$

Для c_{10} та c_{11} маємо:

$$\begin{aligned} c_{10}\tau &= \beta_c \Phi(0)(1 - \langle \Phi \rangle) / D \\ c_{11} &= -R^{(0)} a'_4 \varphi_0^{-1/2} \frac{1}{\beta_0 \Phi(0)} \frac{1}{D}, \quad D = \frac{E_1 - E_2}{R_{11} - E_2}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Для коефіцієнта c_2 отримуємо

$$c_2 = c_{20} + \frac{c_{21}}{(1 + \tau)} + \frac{c_{22}}{(1 + \tau)^2}, \quad (3.6)$$

де

$$\begin{aligned} c_{20} &= a'_4 / D, \\ c_{21} &= -a'_2 R_1^{(0)} \varphi_0^{1/2} \beta_c \Phi(0) / D, \\ c_{22} &= -\varphi_0 + R_1^{(0)} \varphi_0^{1/2} (1 - \langle \Phi \rangle) / D. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Для знаходження величини критичної області температур використовуємо рівняння із [10]

$$|c_1| E_1^{n_0} = |c_2 R| E_2^{n_0}, \quad (3.8)$$

яке виражає рівність за абсолютною величиною частків "входу" і "виходу" системи r^* із критичного режиму флуктуацій. Приймаючи до уваги (3.2)-(3.5), знаходимо

$$\tau^* = A_k \left(\frac{E_2}{E_1} \right)^{n_0}. \quad (3.9)$$

Тут

$$A_k = \frac{c_{20} + c_{21} + c_{22}}{c_{10} + c_{11}} R^{(0)} (\varphi_0)^{-1/2}, \quad (3.10)$$

а E_1, E_2 - власні значення матриці перетворення (2.14).

Коефіцієнт A_k обчислюється відповідно до формули (2.22). Його значення для різних b/c в області $b > b_{min}$ змінюються в інтервалі

$$0.34 < A_k < 0.40, \quad (3.11)$$

а отже, при оцінці величини A_k вважається постійною. Показник n_0 суттєвим чином залежить від b/c .

Оцінимо порядок величини n_0 , як функції b/c . У випадку ($b/c < 1$) значення коефіцієнтів a'_{2n} є близькими до координат фіксованої точки і тому величина n_0 , відповідно до результатів роботи [10], є порядку одиниці. Для $b < c$ розміри критичної області обчислюються за формулою (3.6) при $n_0 = 1$.

Для знаходження величини n_0 при $b > c$ скористаємося співвідношенням

$$u_{n_0} = s^{4n_0} a_4^{(n_0)}, \quad (3.12)$$

яке пов'язує коефіцієнти якобіану переходу $J(\rho_l)$ та змінні r_n, u_n , які входять до складу рекурентних співвідношень. Покладаючи $a_4^{(n_0)} = a'_4$, та приймаючи до уваги, що при $b > c$ $a'_n \approx 2 \cdot S_0^{-3}$, маємо

$$u_{n_0} = S^{4n_0} \cdot 2S_0^{-3}. \quad (3.13)$$

Номер кроку n_0 має досягати такого значення, при якому

$$u_{n_0} \approx u^* = (\beta_c \Phi(0))^2 \cdot \varphi_0. \quad (3.14)$$

Сумісний розв'язок (3.8) та (3.9) приводить до виразу

$$n_0 = n_1 + \frac{3 \ln(b/c)}{4 \ln S}. \quad (3.15)$$

Тут

$$n_1 = \frac{1}{4} \ln \left((\beta_c \Phi(0))^2 6\pi\sqrt{2} \cdot \varphi_0 \right) / \ln S. \quad (3.16)$$

Величина S визначає величину ефективних спінових блоків і відповідно до [10] маємо $S = S^* = 3.4252$. Область зміни величини n_1 є

$$0.82 < n_2 < 1.2 \quad (3.17)$$

Тому для оцінки величини τ^* прийемо, що $n_1 = 1.0$. При $b = c$ маємо $n_0 = n_1 = 1$, тобто "вхід" системи до участку КРФ відбувається після однієї ітерації в рекурентних співвідношеннях. При $b > c$ другий доданок в (2.27) починає відігравати суттєву роль і збільшення b/c приводить до росту n_0 . Можна отримати явну залежність величини τ^* від (b/c) . Для цього скористуємося із відомих (див., напр., [10]) співвідношень

$$\nu = \frac{\ln S}{\ln E_1}; \quad \Delta = -\frac{\ln E_2}{\ln E_1}. \quad (3.18)$$

Тоді для τ^* отримуємо

$$\tau^* = \tau_0 (b/c)^p, \quad (3.19)$$

де

$$\tau_0 = A_k E_2 / E_1, \quad (3.20)$$

а для p знаходимо

$$p = -\frac{3(1+\Delta)}{4\nu}. \quad (3.21)$$

Використовуючи результати розрахунку критичних показників кореляційної довжини ν та поправки до скейлінгу Δ із [10] (наближення моделі ρ^4), отримуємо $p \approx -7.26$.

Величина критичної області температур τ^* залежить від мікроскопічних параметрів моделі. З ростом b/c ширина критичної області зменшується і в границі $b/c \rightarrow \infty$ прямує до нуля. Границя $b/c \rightarrow \infty$ відповідає моделі фазового переходу з "класичною" критичною поведінкою. Температура фазового переходу в такій моделі $\beta_c \Phi(0) = 1$. Однак область температур $(0, \tau^*)$, де має місце неklasична поведінка прямує до нуля, оскільки $\tau^* \rightarrow 0$. Тому у випадку $b \gg c$ відсутня область критичного режиму флуктуацій. Приходимо до висновку про "класичний" характер поведінки системи спінів з потенціалом взаємодії (2) в границі $b/c \rightarrow \infty$.

Додаток 1

Запишемо явні вирази для величин $\langle \Phi \rangle$ та Φ_∞ , які визначають середнє значення фур'є образу потенціалу взаємодії $\bar{\Phi}$ із (1.3). Це значення моделює фур'є образ $\Phi(k)$ на інтервалі значень $k \in (B', B)$ і складається із двох доданків

$$\bar{\Phi} = \langle \Phi \rangle + \Phi_\infty, \quad (Д.1)$$

де

$$\langle \Phi \rangle = \int_{B'}^B \Phi_N(k) dk / \int_{B'}^B dk. \quad (Д.2)$$

$\Phi_N(k)$ визначене формулою (3) і відповідає фур'є образу потенціалу взаємодії $\tilde{\Phi}(r) = A \cdot \exp(-r/b)$. Величина Φ_∞ є постійною, яка буде означена нижче. Для першого інтегралу із (Д.2) маємо

$$f_1 = \int_{B'}^B \frac{k^2 dk}{(1+b^2 k^2)^2} = b^{-3} \left[-\frac{x}{2(1+x^2)} + \frac{1}{2} \operatorname{arctg} x \right] \int_{\frac{1}{\sqrt{2}}}^{\pi \alpha_c \frac{b}{c}} \quad (Д.3)$$

Тут $\alpha_c = (\frac{6}{\pi})^{1/3}$, для нормуючого множника знаходимо

$$f_0 = b^{-3} \frac{1}{3} \left[\pi^3 \alpha_c^3 \left(\frac{b}{c} \right)^3 - \frac{1}{2\sqrt{2}} \right] \quad (Д.4)$$

Знаходячи частку f_1 та f_0 маємо

$$\begin{aligned} \langle \Phi_p \rangle = & 3 \left[-\frac{\pi}{2} \alpha_c \frac{b}{c} \left(1 + \pi^2 \alpha_c^2 \left(\frac{b}{c} \right)^2 \right)^{-1} + \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \left(\pi \alpha_c \frac{b}{c} \right) + \right. \\ & \left. + \frac{1}{3\sqrt{2}} - \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \frac{1}{\sqrt{2}} \right] \left[\pi^3 \alpha_c^3 \left(\frac{b}{c} \right)^3 - \frac{1}{2\sqrt{2}} \right]^{-1} \quad (Д.5) \end{aligned}$$

Величина Φ_∞ знаходиться із рівняння (2.8) з умови $\beta_c \Phi(0) = 1$ при $b/c \rightarrow \infty$ і рівна

$$\Phi_\infty = -f_0 - R^{(0)} \sqrt{\varphi_0} \quad (Д.6)$$

де f_0, φ_0 - координати фіксованої точки, $R^{(0)} = -0.5333$ для однокомпонентної системи (при $s = s^* = 3.4252$ [10]).

Інший спосіб обчислення $\langle \Phi \rangle$ полягає в знаходженні величини

$$\langle \Phi_1 \rangle = (t_1 - t_2) / \int_{B'}^B d\vec{k} \quad (Д.7)$$

де

$$t_1 = \int_0^B \Phi_N(k) dk, \quad t_2 = \int_0^{B'} \Phi(k) dk. \quad (Д.8)$$

Тут береться різниця площ між повним фур'є образом потенціалу взаємодії (3) та його параболичною апроксимацією (5). Маємо

$$\begin{aligned} t_1 = & b^{-3} \left[-\frac{\pi}{2} \alpha_c \frac{b}{c} \left(1 + \pi^2 \alpha_c^2 \left(\frac{b}{c} \right)^2 \right)^{-1} + \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \left(\pi \alpha_c \frac{b}{c} \right) \right], \\ t_2 = & b^{-3} (15\sqrt{2})^{-1}. \quad (Д.9) \end{aligned}$$

В таблиці Д.1 приведено порівняння значень $\langle \Phi_p \rangle = f p s$ із (Д.5) та $\Phi_i = F_i$ із (Д.7) для різних значень параметра b/c , а також значення величин f_1 і f_0 із (Д.3) та (Д.4) відповідно та $t_{12} = t_1 - t_2$ із (Д.8). Порівнюючи значення величин $\langle \Phi_p \rangle = f p s$ та $\langle \Phi_1 \rangle = F_i$ із

(Д.5) та (Д.7) знаходимо, що вони є близькими для великих значень параметра b/c , та відрізняються між собою, коли $b/c < 0.4$. Це пов'язано з тим, що в границі, коли $S_0 \rightarrow 1$ величина f_0 прямує до нуля. При цьому f_1 із (Д.3) також обертається в нуль і відношення f_1/f_2 прямує до постійної величини $\frac{4}{9}$, яка отримується, як результат підстановки в величину $\Phi_N(k)$ значення $k = B' (\Phi_N(B') = \frac{4}{9}\Phi(0))$. Для другого способу визначення середнього значення $\langle \Phi_1 \rangle$ величина $t_1 - t_2 = t_{12}$ із (Д.7) прямує до деякої постійної, в той час, як $f_0 \rightarrow 0$ (див. табл. 1). В результаті цього, необхідно знайти асимптотику прямування до нуля (у випадку $S_0 \rightarrow 1$) величини f_0 і вилучити її з нормування F_i . Легко бачити, що

$$f_0 = b^{-3} \frac{S_0^3}{6\sqrt{6}}(1 - S_0^{-3}) \quad (\text{Д.10})$$

Тому для того, щоб величина $\langle \Phi_i \rangle$ із (Д.7) мала правильну асимптотику при $S_0 \rightarrow 1$ виконаємо перетворення:

$$\langle \Phi_{is} \rangle = \langle \Phi_i \rangle (1 - S_0^{-3})(1 + S_0^{-3}) \quad (\text{Д.11})$$

Зрозуміло, що величини $\langle \Phi_i \rangle$ та $\langle \Phi_{is} \rangle$ будуть мало відрізнятися для великих значень b/c , що можна бачити з результатів табл. Д1. Для малих S_0 значення $\langle \Phi_{is} \rangle$ є близькими до $\langle \Phi_p \rangle$.

В подальших розрахунках в якості величини $\langle \Phi \rangle$ із (Д.1) будемо використовувати $\langle \Phi_{is} \rangle$ задану в (Д.11). Саме ця величина є оптимальною, як з точки зору фізики явища, так і має правильну границю при $S_0 \rightarrow 1$.

Література

1. Пылюк М.В. // ТМФ, т.117, N 3, 1998, с.442-470.
2. Fisher M. // Rev. Mod. Phys., 1998, vol. 70, p.653-681.
3. Baker G.A.Jr., Nickel B.G., Meiron D.I. // Phys. Rev. B, 1978, vol. 17, p. 1365-1374.
4. Le Guillon J.C., Zinn-Justin J. // Phys. Rev. B, 1980, vol. 21, p. 3976-3998.
5. Landau D.P., Ferrenberg A.M. // J. Kor. Phys. Soc. 1993, vol. 26, p. S371-S377.
6. Yukhnovskii I.R. // Rivista del Nuovo Cimento. V.12, N1, p.1-120 (1989).
7. Wilson K.G. // Phys. Rev. B, v.4. p. 3184-3205 (1971).
8. Kadanoff L. // Physics. V.2., p.263. (1966).

9. Wilson K.G. and Kogut J.J. // Phys. Rev. C. V.12, p.75. (1974).
10. Козловський М.П., Юхновський І.Р. Препринт ІФКС-97-25U, Львів, 1997, 96с.
11. Юхновский И.Р. // ТМФ, т.36. N 3, с.373-399 (1978).
12. Козицкий Ю.В., Юхновский И.Р. // ТМФ, т.51, N 2, с.268-277 (1982).
13. Ширяев А.Н. Вероятность. - М., "Наука", 1989ю - (с. 307) с. 640.
14. Юхновский И.Р., Рудаковский Ю.К. // Докл. АН СССР, т.233, N 4, с.579-582 (1977).
15. Griffiths R.B. // Com. in Mat. Phys. v.33, p.145 (1973).

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Михайло Павлович Козловський

ПРО РОЗРАХУНОК НЕУНІВЕРСАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДУ ДРУГОГО РОДУ

Роботу отримано 12 квітня 2001 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу статистичної теорії конденсованих систем

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені