

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-03-13U

М.П.Козловський

ВПЛИВ ЗОВНІШНЬОГО ПОЛЯ НА КРИТИЧНУ
ПОВЕДІНКУ ТРИВИМІРНОГО МАГНЕТИКА. III. ВІЛЬНА
ЕНЕРГІЯ ДЛЯ ВИПАДКУ ГРАНИЧНОГО ЗНАЧЕННЯ ПОЛЯ
($h \neq 0$ ТА $\tau \neq 0$)

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

Вплив зовнішнього поля на критичну поведінку тривимірного магнетика. III. Вільна енергія для випадку граничного значення поля ($h \neq 0$ та $\tau \neq 0$)

М.П.Козловський

Анотація. Розрахований вираз для вільної енергії однокомпонентного магнетика поблизу критичної точки як функції температури та зовнішнього поля. Знайдена сприйнятливості системи та досліджена її залежність від параметрів гамільтоніану системи та потенціалу взаємодії у випадку граничного зовнішнього поля \tilde{h}_c .

Influence of an external field on the critical behaviour of the three-dimensional magnet. III. The Free energy for the limited external field ($h \neq 0$ and $\tau \neq 0$).

M.P.Kozlovskii

Abstract. The expression for free energy of the one component magnet near critical point as function of temperature and external field is calculated. The susceptibility of the system is founded and its dependence on parameters of System Hamiltonian and interaction potential is investigated in case of the boundary external field \tilde{h}_c .

Вступ

Досліджується поведінка моделі, яка описується гамільтоніаном ізінгівського типу

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{i}\vec{j}} \Phi(r_{\vec{i}\vec{j}}) \sigma_{\vec{i}} \sigma_{\vec{j}} - h \sum_{\vec{i}} \sigma_{\vec{i}}, \quad (1)$$

де сумування відбувається за вузлами простої кубічної ґратки з періодом c . Тут h - зовнішнє поле, а $\Phi(r_{\vec{i}\vec{j}})$ - потенціал попарної взаємодії. Як і в роботах [1,2] будемо вважати, що $\Phi(r_{\vec{i}\vec{j}})$ має вигляд експонентно-спадної функції віддалі $\Phi(r) = Ae^{-r/b}$. При проведенні конкретних розрахунків скористаємося дещо зміненим виглядом для фур'є-образу $\Phi(r)$. Покладемо, що

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

При малих значеннях хвильового вектора фур'є-образ (2) має властивості короткосяжного потенціалу між частинками. Це дозволяє правильно описати далекосяжні кореляції, які є важливі при описі фазових переходів. Взаємодія на малих відстанях є менш суттєва при вивченні критичної поведінки і усереднення $\Phi(k)$ для великих значень хвильового вектора не повинна суттєво вплинути на події поблизу критичної точки. У виразі (2) через \mathcal{B} позначена перша зона Бріллюена, а \mathcal{B}_0 - область хвильових векторів, де має місце параболічна апроксимація фур'є-образу потенціалу взаємодії

$$\mathcal{B}_0 = \left\{ \vec{k} = (k_x, k_y, k_z) \mid k_i = -\frac{\pi}{c_0} + \frac{2\pi}{c_0} \frac{n_i}{N_{0i}}; \right. \\ \left. n_i = 1, 2, \dots, N_{0i}; i = x, y, z \right\}. \quad (3)$$

Тут величина $c_0 = s_0c$ визначає період ефективної блочної ґратки ($s_0 > 1$), $N_{0x} \cdot N_{0y} \cdot N_{0z} = N_0$.

Статистична сума моделі (1) з потенціалом (2) в представленні колективних змінних записується у вигляді

$$Z = 2^N \exp\left(\frac{1}{2}\beta\Phi_0 N\right) e^{N\mathcal{M}_0(h')} \int (d\eta)^{N_0} (d\omega)^{N_0} \times \\ \times \left[\frac{1}{2}\beta \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_0} (\Phi(k) - \Phi_0) \eta_{\vec{k}} \eta_{-\vec{k}} + 2\pi i \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_0} \eta_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} \right] \times$$

$$\times \exp \left[\sum_{n=1}^{n_0} \frac{(-2\pi i)^n}{n!} s_0^{d(1-n/2)} N_0^{d(1-n/2)} \mathcal{M}_n(h') \sum_{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_n} \omega_{\vec{k}_1} \dots \omega_{\vec{k}_n} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_n} \right], \quad (4)$$

де $N_0 = Ns_0^{-3}$, N - загальне число частинок, а для кумулянтів $\mathcal{M}_n(h')$ маємо

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_0(h') &= \ln ch(h'), & \mathcal{M}_1(h') &= thh', \\ \mathcal{M}_2 &= 1 - \mathcal{M}_1^2(h'), & \mathcal{M}_3 &= -2\mathcal{M}_1(h')\mathcal{M}_2(h'), \\ \mathcal{M}_4 &= -2\mathcal{M}_2^2(h') + 4\mathcal{M}_1^2(h')\mathcal{M}_2(h'), \end{aligned} \quad (5)$$

де $h' = \beta h$, $\beta = (k_B T)^{-1}$ - обернена температура.

Величина n_0 в (4) визначає порядок моделі. При $n_0 = 4$ маємо модель ρ^4 , при $n_0 = 6$ - модель ρ^6 і т.д. Для проведення точного розрахунку слід спрямувати $n_0 \rightarrow \infty$.

В даній роботі обмежимося випадком $n_0 = 4$. Підкреслимо, що формула (4) містить крім інтегрування за основними змінними $\eta_{\vec{k}}$ також інтеграли за проміжними змінними $\omega_{\vec{k}}$. Введення так званого проміжного інтегрування (див. [3]) є принциповим моментом при розрахунку вільної енергії тривимірних систем поблизу критичної точки. Такий прийом вперше був використаний в працях І.Р. Юхновського (див., наприклад, [4]). Розширення фазового простору дозволило математично строго сформулювати задачу про фазовий перехід у тривимірних системах і запропонувати метод розрахунку основних термодинамічних функцій поблизу критичної точки при $h = 0$. Дана робота присвячена узагальненню цього методу на випадок, коли зовнішнє поле відмінне від нуля і приймає деякі фіксовані значення, які не можна віднести ні до великих, ні до малих значень поля.

1. Представлення вільної енергії системи поблизу критичної точки

Розрахунок виразу для статистичної суми (4) проводимо шляхом поетапного інтегрування відповідно до методу, який був запропонований в [4]. Спочатку інтегруємо за змінними $\omega_{\vec{k}}$, де $\vec{k} \in \mathcal{B}_0$. отримуємо початковий функціонал для статистичної суми

$$Z = Z_0 j_0 e^{\tilde{a}_0 N_0} \int (d\eta)^{N_0} \exp \left[-a_1 \sqrt{N_0} \eta_0 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_0} d(k) \eta_{\vec{k}} \eta_{-\vec{k}} - \right]$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{3!}a_3N_0^{-1/2} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_3 \\ \vec{k}_i \in \mathcal{B}_0}} \eta_{\vec{k}_1} \dots \eta_{\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_3} - \\
& \left. -\frac{1}{4!}a_4N_0^{-1} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_4 \\ \vec{k}_i \in \mathcal{B}_0}} \eta_{\vec{k}_1} \dots \eta_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_4} \right], \quad (1.1)
\end{aligned}$$

де

$$Z_0 = 2^N \exp \left[\frac{1}{2} \beta \Phi_0 N \right] e^{N\mathcal{M}_0}. \quad (1.2)$$

Тут $j_0 = \sqrt{2}^{N_0-1}$ - якобіан переходу від змінних $\omega_{\vec{k}}$ до вузлових змінних $\omega_{\vec{l}}$, де \vec{l} приймає значення в об'ємі періодичності $V = N_0 c_0^3$

$$\Lambda_0 = \left\{ \vec{l} = (l_x, l_y, l_z) | l_i = c_0 n_i; n_i = 0, 1, \dots, N_{0i}, i = x, y, z \right\} \quad (1.3)$$

з циклічними граничними умовами.

Для коефіцієнтів a_l в [1] отримані вирази

$$\begin{aligned}
e^{a_0} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \cos(a'x - b'x^3) e^{-x^2 - gx^4}, \\
a_1 &= -\mu_2 e^{-a_0} \int_{-\infty}^{\infty} dx x \sin(a'x - b'x^3) e^{-x^2 - gx^4}, \\
a_2 &= a_1^2 + \mu_2^2 e^{-a_0} \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 \cos(a'x - b'x^3) e^{-x^2 - gx^4}, \\
a_3 &= 3a_1 a_2 - a_1^3 + \mu_2^3 e^{-a_0} \int_{-\infty}^{\infty} dx x^3 \sin(a'x - b'x^3) e^{-x^2 - gx^4}, \\
a_4 &= 4a_1 a_3 + 3a_2^2 - 6a_1^2 a_2 + a_1^4 + \\
&+ \mu_2^4 e^{-a_0} \int_{-\infty}^{\infty} dx x^4 \cos(a'x - b'x^3) e^{-x^2 - gx^4}, \quad (1.4)
\end{aligned}$$

які відповідають наближенню моделі ρ^4 . Тут введені позначення

$$\begin{aligned}
a' &= s_0^{d/2} \mathcal{M}_1(h') \mu_2, \quad \mu_2 = (2/\mathcal{M}_2(h'))^{1/2}, \\
b' &= s_0^{-d/2} \mathcal{M}_3(h') \mu_2^3/6, \quad g = \frac{1}{6} s_0^{-d} (-\mathcal{M}_4(h')) \mathcal{M}_2^{-2}(h'). \quad (1.5)
\end{aligned}$$

Для коефіцієнта \tilde{a}_0 маємо

$$e^{\tilde{a}_0} = \frac{\mu_2}{2\pi} e^{a_0}, \quad (1.6)$$

а величина $d(k)$ із (1.1) має вигляд

$$d(k) = \tilde{a}_2 - \beta \Phi(0) + 2\beta \Phi(0) b^2 k^2, \quad (1.7)$$

де

$$\tilde{a}_2 = a_2 + \beta \Phi_0. \quad (1.8)$$

В роботі [1] отримані наближені вирази для коефіцієнтів a_l . Використовуючи наближення першого непарного кумулянта¹ маємо

$$\begin{aligned}
e^{\tilde{a}_0} &= (2\pi \mathcal{M}_2(h'))^{-1/2} e^{-a'^2/4} \left[1 - \frac{3}{4} g (1 - a'^2) \right], \\
a_1 &= -\frac{1}{2} a' \mu_2 (1 - 3g), \\
a_2 &= \frac{1}{2} \mu_2^2 \left[1 - 3g \left(1 - \frac{a'^2}{2} \right) \right], \\
a_3 &= -\frac{3}{2} \mu_2^3 a' g, \\
a_4 &= \frac{3}{2} \mu_2^4 g. \quad (1.9)
\end{aligned}$$

В подальшому, для розрахунку (1.1), вводимо послідовність зон Бріллюена

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}_n &= \left\{ \vec{k} = (k_x, k_y, k_z) | k_i = -\frac{\pi}{c_n} + \frac{2\pi n_i}{c_n N_{n,i}}; \right. \\
&\left. n_i = 1, 2, \dots, N_{n,i}; i = x, y, z \right\}, \quad (1.10)
\end{aligned}$$

які відповідають ефективним блочним ґраткам з періодом $c_n = c_0 s^{-n}$, де s - параметр розбиття ($s \geq 1$). Параметр s регулює величину росту блочних структур. Для n -тої блочної структури вводимо об'єм періодичності

$$\Lambda_n = \left\{ \vec{l} = (l_x, l_y, l_z) | l_i = c_n n_i; n_i = 1, 2, \dots, N_{n,i}, i = x, y, z \right\} \quad (1.11)$$

із циклічними граничними умовами, де $N_n = N_{nx} N_{ny} N_{nz}$. Поетапний розрахунок (1.1) проводимо відповідно до методики, яка описана в [3,4] і передбачає поетапне інтегрування в (1.1) за змінними

¹Це наближення було запропоноване в [1] і передбачає, що в ході розрахунків величина b' із (1.5) покладається рівною нулеві та здійснюються розклади за степенями g .

$\eta_{\vec{k}}$, індекси \vec{k} яких належать до $\mathcal{B}_0 \setminus \mathcal{B}_1$, далі $\mathcal{B}_1 \setminus \mathcal{B}_2$ і т.д. При цьому величина $d(k)$ замінюється середнім значенням на кожному етапі інтегрування для $\vec{k} \in \mathcal{B}_n \setminus \mathcal{B}_{n+1}$.

Для $\vec{k} \in \mathcal{B}_0 \setminus \mathcal{B}_1$ маємо

$$d(B_0, B_1) = d(0) + q, \quad (1.12)$$

де

$$q = \bar{q}\beta\Phi(0),$$

$$\bar{q} = 2\beta\Phi(0)b^2 < k^2 >_{B_0, B_1} = \frac{b^2}{c^2}\pi^2 s_0^{-2}(1 + s^{-2}). \quad (1.13)$$

Для $\vec{k} \in \mathcal{B}_n \setminus \mathcal{B}_{n+1}$ отримуємо

$$d_n(B_n, B_{n+1}) = d_n(0) + qs^{-2n}, \quad (1.14)$$

де

$$d_n(0) = \tilde{a}_2^{(n)} - \beta\Phi(0), \quad \tilde{a}_2^{(n)} = a_2^{(n)} + \beta\Phi(B_{n-1}, B_n), \quad (1.15)$$

а для величини $a_2^{(n)}$ мають місце рекурентні співвідношення, які пов'язують її з початковими значеннями коефіцієнтів (1.4), чи їхніх наближених виразів (1.9).

Після проведення n поетапних інтегрувань в (1.1) отримуємо [1]

$$Z = Z_0 Q_0 Q_1 \dots Q_{n_p} [Q(P^{(n_p)})]^{N_{n_p+1}} I_{n_p+1}.$$

$$I_{n_p+1} = \int (d\rho)^{N_{n_p+1}} \exp \left[-\tilde{a}_1^{(n_p+1)} N_{n_p+1}^{1/2} \rho_0 - \right.$$

$$\left. -\frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_{n_p+1}} d_{n_p+1}(k) \rho_{\vec{k}} \rho_{-\vec{k}} - \frac{1}{3!} a_3^{(n_p+1)} N_{n_p+1}^{-1/2} \sum_{\substack{\vec{k}_1 \dots \vec{k}_3 \\ \vec{k}_i \in \mathcal{B}_{n_p+1}}} \rho_{\vec{k}_1} \dots \right.$$

$$\left. \rho_{\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_3} - \frac{1}{4!} a_4^{(n_p+1)} N_{n_p+1}^{-1} \sum_{\substack{\vec{k}_1 \dots \vec{k}_4 \\ \vec{k}_i \in \mathcal{B}_{n_p+1}}} \rho_{\vec{k}_1} \dots \right.$$

$$\left. \rho_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_4} \right]. \quad (1.16)$$

Тут Z_0 приведено в (1.2), для Q_0 маємо

$$Q_0 = [e^{\tilde{a}_0} Q(d)]^{N_0}, \quad (1.17)$$

де

$$Q(d) = (24/a_4)^{1/4} \gamma_1 \left(1 - \gamma h_2^{(0)} + \frac{3}{8} \gamma (h_3^{(0)})^2 \right). \quad (1.18)$$

Ми скористалися позначеннями

$$\gamma = \Gamma\left(\frac{3}{4}\right) / \Gamma\left(\frac{1}{4}\right) \approx 0.337989,$$

$$\gamma_1 = \pi\sqrt{2} / \left(2\Gamma\left(\frac{3}{4}\right) \right) \approx 1.8128. \quad (1.19)$$

Для аргументів $h_2^{(0)}$ та $h_3^{(0)}$ справедливі вирази

$$h_2^{(0)} = h_{2c}^{(0)} + \tau h_{21}^{(0)} + h_{22}^{(0)} \tau^2 + h_{2h}^{(0)} h'^2,$$

$$h_3^{(0)} = h_{30} a_3 a_4^{-3/4} = h_{3h}^{(0)} h', \quad (1.20)$$

де

$$h_{2c}^{(0)} = \sqrt{3} s_0^{d/2} [1 - s_0^{-d} + \beta_c \Phi_0 - \beta_c \Phi(0)(1 - \bar{q})],$$

$$h_{21}^{(0)} = \sqrt{3} s_0^{d/2} [\beta_c \Phi_0(1 - \bar{q}) - \beta_c \Phi(0)], \quad h_{22}^{(0)} = -h_{21}^{(0)},$$

$$h_{2h}^{(0)} = \sqrt{3} s_0^{d/2} (2 + s_0^{-d}).$$

$$h_{3h}^{(0)} = (2 \cdot s_0^{-d})^{1/4} h_{30}, \quad h_{30} = \frac{1}{6} (24)^{3/4}. \quad (1.21)$$

Для всіх Q_n при $n \in [1, n_p]$ маємо

$$\ln Q_n = N_n \left[H_{20} + H_{21} h_2^{(n-1)} - \gamma h_2^{(n)} - \right.$$

$$\left. - H_{22} (h_3^{(n-1)})^2 + \frac{3}{8} \gamma (h_3^{(n)})^2 \right]. \quad (1.22)$$

Для коефіцієнтів H_{ml} маємо [2]

$$H_{20} = -\frac{1}{2} \ln(2\pi\gamma) + \ln \left(1 - \frac{3}{4} s^{-d} G_0 \right) + \ln \gamma_1 + \ln s,$$

$$H_{21} = -\frac{1}{2} t_2 - \frac{3}{4} s^{-d} G_0 G_2 (G'_{00})^{-1} - \frac{1}{4} (G_2 - 2t_2),$$

$$H_{22} = s^d (32\gamma)^{-1}, \quad (1.23)$$

де

$$\begin{aligned} G_0 &= (12\gamma^2 - 1)(24\gamma^2)^{-1} \approx 0.1353, \\ G_2 &= \frac{1}{2\gamma} - 2\gamma + 4\gamma \frac{6\gamma^2 - 1}{12\gamma^2 - 1} \approx -0.3435, \\ t_2 &= \gamma - \frac{1}{4\gamma} = -0.4017, \\ G'_{00} &= 1 - \frac{3}{4}s^{-d}G_0. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Аргументи $h_2^{(n)}$ та $h_3^{(n)}$ мають вигляд

$$h_2^{(n)} = \sqrt{6}(r_n + q)u_n^{-1/2}, \quad h_3^{(n)} = h_{30}v_n u_n^{-3/4}, \quad (1.25)$$

де для визначення величин r_n , v_n , u_n використовуються рекурентні співвідношення (РС). Для всіх значень $n \leq n_p$, де n_p залежна від $\tau = (T - T_c)/T_c$ та від h величина (див. [2]) для РС маємо [1]

$$\begin{aligned} w_n &= -c_{h_1}\mathcal{M}_1(h')E_1^n - c_{h_2}\mathcal{M}_1(h')T_{13}^{(0)}\left(\varphi_0^{1/2}\beta\Phi(0)\right)^{-1}E_3^n, \\ r_n &= r^* + c_{k_1}^{(0)}\beta\Phi(0)\tau E_2^n + c_{k_2}^{(0)}T_{24}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}(\beta\Phi(0))^{-1}E_4^n, \\ v_n &= -c_{h_2}\mathcal{M}_1(h')E_3^n, \\ u_n &= u^* + c_{k_1}^{(0)}\tau T_{42}^{(0)}\varphi_0^{1/2}(\beta\Phi(0))^2 E_2^n + c_{k_2}E_4^n. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Тут

$$\begin{aligned} c_{h_1} &= s_0^{d/2}\mathcal{M}_{20}(h')/\mathcal{M}_2(h'), \\ \mathcal{M}_{20}(h') &= 1 - 3g - 6gT_{13}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}(\beta\Phi(0)\mathcal{M}_2(h'))^{-1}, \\ c_{h_2} &= 6gs_0^{d/2}/\mathcal{M}_2^2(h') = s_0^{-d/2}(-\mathcal{M}_4(h'))/\mathcal{M}_2^{-4}(h'), \\ c_{k_1}^{(0)} &= V_2 \left[1 - f_0 - T_{24}^{(0)}u_0\varphi_0^{-1/2}(\beta\Phi(0))^{-2} - T_{24}^{(0)}\varphi_0^{1/2} \right], \\ c_{k_2} &= V_2 \left[u_0 - \varphi_0(\beta\Phi(0))^2 - T_{42}^{(0)}\varphi_0^{1/2}\beta\Phi(0)[r_0 + f_0\beta\Phi(0)] \right], \\ V_2 &= [1 + (E_2 - R_{22})^2/R_{24}R_{42}]^{-1}. \end{aligned} \quad (1.27)$$

Власні значення E_l матриці ренормгрупового перетворення \mathcal{R}

$$\begin{pmatrix} W_{n+1} - W^* \\ r_{n+1} - r^* \\ V_{n+1} - V^* \\ u_{n+1} - u^* \end{pmatrix} = \mathcal{R} \begin{pmatrix} W_n - W^* \\ r_n - r^* \\ V_n - V^* \\ u_n - u^* \end{pmatrix} \quad (1.28)$$

обчислені в [1]

$$\begin{aligned} E_1 &= s^{(d+2)/2}, \quad E_3 = s^{(d-2)/2}, \\ E_{2,4} &= \frac{1}{2} \left\{ R_{22} + R_{44} \pm [(R_{22} - R_{44})^2 + 4R_{24}R_{42}]^{1/2} \right\}. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Координати фіксованої точки мають вигляд

$$w^* = 0, \quad r^* = -f_0\beta\Phi(0), \quad v^* = 0, \quad u^* = \varphi_0(\beta\Phi(0))^2, \quad (1.30)$$

де

$$\begin{aligned} f_0 &= \bar{q} = \pi^2(b/c)^2 s_0^{-2}(1 + s^{-2}), \\ \varphi_0 &= \bar{q}^2(1 - s^{-2})^2/f_{00}^2. \end{aligned} \quad (1.31)$$

Тут f_{00} - постійна величина

$$f_{00} = (1 - 3s^{-d}G_0)(\gamma\sqrt{24})^{-1}.$$

При значеннях параметрів [1]

$$s = s^*, \quad b/c = 0.3, \quad s_0 = 2.0, \quad s^* = 3.3783 \quad (1.32)$$

знаходимо $f_0 = 0.2415$, $\varphi_0 = 0.1360$.

Приймаючи до уваги (1.26), легко бачити, що для $n \leq n_p$ (1.25) можна записати у вигляді

$$\begin{aligned} h_2^{(n)} &= h_{22}c_{k_1}^{(0)}\tau E_2^n - \frac{1}{2}T_{42}^{(0)}h_{22}\varphi_0^{-1/2}\left(c_{k_1}^{(0)}\tau E_2^n\right)^2, \\ h_3^{(n)} &= h_{32}\mathcal{M}_1(h')E_3^n \left(1 - h_{34}c_{k_1}^{(0)}\tau E_2^n\right), \end{aligned} \quad (1.33)$$

де

$$h_{22} = \left(\frac{6}{\varphi_0}\right)^{1/2}, \quad h_{32} = -h_{30}c_{h_2}(u^*)^{-3/4}, \quad h_{34} = \frac{3}{4}T_{42}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}.$$

Вільну енергію системи поблизу критичної точки зручно представляти у вигляді суми декількох доданків [2]

$$F = F_0 + F_{\text{кр}} + F_p + F_I, \quad (1.34)$$

де

$$F_0 = -kTN \left(\ln 2 + \frac{1}{2}\beta\Phi(0)\bar{\Phi} + \mathcal{M}_0(h') \right),$$

$$\begin{aligned}
F_{\text{кр}} &= -kT \ln Q_0 + F'_{\text{кр}}, \\
F'_{\text{кр}} &= -kT \sum_{n=1}^{n_p} \ln Q_n, \\
F_p &= -kT N_{n_p+1} \left[\ln Q_n(P(n_p)) + \frac{1}{2} \ln 2 \right], \\
F_I &= -kT \ln I_{n_p+1}.
\end{aligned} \tag{1.35}$$

Величина Q_0 приведена (1.17). Для Q_n маємо вираз (1.22), де замість $h_2^{(n)}$, $h_3^{(n)}$ слід підставити (1.33). Вираз для $Q(P(n_p))$ має вигляд [2]

$$\begin{aligned}
Q(P(n_p)) &= (2\pi\gamma)^{-1/2} G'_{00} \left(\frac{a_4^{(n_p)}}{24} \right)^{1/4} \times \\
&\times \exp(-H_{22}(h_3^{(n_p)})^2)(1 + H_{211}h_2^{(n_p)}),
\end{aligned} \tag{1.36}$$

а для I_{n_p+1} маємо (1.16).

Зауважимо, що коефіцієнти $a_i^{(n)}$ пов'язані з величинами w_n, r_n, v_n та u_n розв'язків рекурентних співвідношень (1.26) наступним чином

$$\begin{aligned}
\tilde{a}_1^{(n_p+1)} &= s^{-(n_p+1)} w_{n_p+1}, \\
d_{n_p+1}(0) &= s^{-2(n_p+1)} r_{n_p+1}, \\
a_3^{(n_p+1)} &= s^{-3(n_p+1)} v_{n_p+1}, \\
a_4^{(n_p+1)} &= s^{-4(n_p+1)} u_{n_p+1}.
\end{aligned} \tag{1.37}$$

В роботі [2] був знайдений вираз для вільної енергії при $T = T_c$ для $h \neq 0$ ($h \rightarrow 0$). В якості величини n_p там використовувався вираз

$$n_p = n_h = -\frac{\ln \tilde{h}}{\ln E_1} - 1, \tag{1.38}$$

де було введено позначення

$$\tilde{h} = |h'|/f_0. \tag{1.39}$$

В загальному випадку умова $T = T_c$ не виконується. Тому знайдемо вираз для вільної енергії поблизу критичної точки, коли $\tau \neq 0$ та $h \neq 0$. Оскільки нас цікавлять події поблизу критичної точки, то розглянемо випадок, коли $\tau \rightarrow 0$ та $h \rightarrow 0$.

2. Області сильних та слабких значень поля

Для розрахунку вільної енергії та інших термодинамічних функцій поблизу критичної точки будемо використовувати формулу (1.34). Обчислення явних виразів для доданків $F'_{\text{кр}}$, F_p та F_I передбачає визначення величини n_p . В граничних випадках ситуація із визначенням n_p зрозуміла. При $h = 0$, коли $T \rightarrow T_c$ маємо [1,3]

$$n_p = m_\tau = -\frac{\ln \tilde{\tau}}{\ln E_2} - 1. \tag{2.1}$$

У випадку, коли $T > T_c$, та

$$n_p = \mu_\tau = -\frac{\ln \tilde{\tau}_1}{\ln E_2} - 1, \tag{2.2}$$

коли $T < T_c$. Тут введені позначення

$$\tilde{\tau} = \tau c_{k1}^{(0)}/f_0, \tag{2.3}$$

$$\tilde{\tau}_1 = -\tau c_{k1}^{(0)}/f_0. \tag{2.4}$$

На діаграмі рис. 1 зображені траєкторії руху системи до критичної точки. Випадок $h = 0$ відповідає наближенню до критичної точки вздовж температурної осі. Як відомо, параметр порядку при цьому рівний нулю у випадку $T > T_c$, та змінюється за законом $\langle \sigma \rangle = \sigma_0 \tilde{\tau}_1^\beta$ для $T \leq T_c$. Критичний показник $\beta = \nu/2$, де ν - критичний показник кореляційної довжини², який обчислюється відповідно до формули

$$\nu = \frac{\ln s^*}{\ln E_2} = 0.609. \tag{2.5}$$

Інший граничний випадок: $\tilde{\tau} = 0$, $h \rightarrow 0$ був предметом розгляду роботи [2]. В цьому випадку має місце рівність (1.38). Для середнього моменту на мікроскопічному рівні отримана відома формула

$$\langle \sigma \rangle = \sigma_{h,0} \tilde{h}^{1/\delta}, \tag{2.6}$$

де явний вираз для амплітуди $\sigma_{h,0}$ знайдений в [2], а для показника δ отримана формула

$$\delta = \frac{d+2}{d-2}. \tag{2.7}$$

²Слід зауважити, що розрахунки, які виконані в [1,2] і даній роботі відповідають наближенню $\eta = 0$, де η - критичний показник кореляційної функції. Виконання розрахунків, при яких $\eta \neq 0$ можна здійснити за методикою, описаною в [3,4].

При $\tau = 0$ наближення до критичної точки відбувається по польовій осі.

В загальному випадку система може наближатися до критичної точки довільним чином. Існує особлива траєкторія руху до критичної точки, для якої виконуються рівності

$$n_p = m_\tau = n_h. \quad (2.8)$$

Останнє означає, що величина ділянки критичного режиму по температурі і по полю є однаковою. Приймаючи до уваги (1.38) та (2.1), знаходимо що для цієї особливої траєкторії виконується співвідношення

$$\tilde{h}_c = \tilde{\tau}^{p_0}, \quad (2.9)$$

де

$$p_0 = \frac{d+2}{2}\nu. \quad (2.10)$$

Індекс c біля \tilde{h}_c означає, що між величинами $\tilde{\tau}$ та \tilde{h} має місце співвідношення (2.8). Траєкторія руху системи до критичної точки позначена на Рис. 1 кривими 1 для випадку $T > T_c$ та кривими 2 для області температур $T < T_c$.

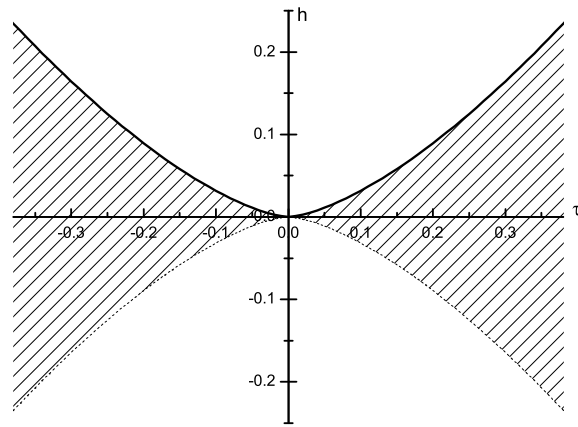


Рис. 1. Діаграма, що визначає значення слабких (заштрихована область) та сильних значень поля поблизу критичної точки ($\tilde{\tau} = 0$, $\tilde{h}=0$).

У випадку $h \ll h_c$, де h_c задане в (2.9), маємо

$$\tilde{h} = \tilde{\tau}^{p_0(1+\Delta)}. \quad (2.11)$$

Траєкторії, що описуються значеннями $\Delta > 0$ проходять між граничними кривими та віссю абсцис і утворюють заштриховану область. Вона відповідає слабким значенням поля.

Від'ємні значення Δ ($-1 < \Delta < 0$) відповідають області, де вплив поля має бути домінуючим. Детальніше до характеристики цих областей повернемося пізніше.

3. Розрахунок вкладу до вільної енергії від ділянки критичного режиму при $h \neq 0$ для високотемпературної області

Проведемо розрахунок вільної енергії системи поблизу критичної точки для випадку граничного значення поля, яке задається рівністю (2.9). Методика таких розрахунків, як було показано в [3] для випадку $h = 0$, є різною для температур вище і нижче від T_c . Це зобумовлено наявністю відмінного від нуля параметра порядку при $T < T_c$. Подібна ситуація має місце і при наближенні до критичної точки, коли $h \neq 0$.

Розглянемо випадок температур $T > T_c$. Скористаємося з представлення $F_{кр}$ із (1.35) у вигляді, отриманому в [2]

$$F'_{кр} = F_{кр}^{(0)} + F_{кр,2} + F_{кр,3}. \quad (3.1)$$

Для першого доданку маємо

$$\begin{aligned} F_{кр}^{(0)} &= -kTN_0 \left(F_{10}s^{-3} - F_{10}s^{-3(n_p+1)} \right), \\ F_{10} &= H_{20}(1 - s^{-3})^{-1}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Другий доданок правої частини рівності (3.1) має вигляд

$$\begin{aligned} F_{кр,2} &= -kTN_0 \left\{ F_{11}s^{-3}E_2\tilde{\tau} + F_{12}s^{-3}E_2^2\tilde{\tau}^2 - \right. \\ &\quad \left. - \left[F_{11}\tilde{\tau}E_2^{n_p+1} + F_{12}(\tilde{\tau}E_2^{n_p+1})^2 \right] s^{-3(n_p+1)} \right\}, \end{aligned} \quad (3.3)$$

де

$$\begin{aligned} F_{11} &= f_0h_{22} \left(\frac{H_{21}}{E_2} - \gamma \right) (1 - s^{-3}E_2)^{-1}, \\ F_{12} &= \frac{1}{2}T_{42}^{(0)}h_{22}\varphi_0^{-1/2} \left(\gamma - \frac{H_{21}}{E_2^2} \right) f_0^2(1 - s^{-3}E_2^2)^{-1}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Для величини $F_{кр,3}$ маємо

$$F_{кр,3} = -kTN_0 \left\{ F_{13}s^{-3}E_3^2\tilde{h}^2 + F_{14}s^{-3}E_3^2E_2\tilde{\tau}\tilde{h}^2 - \left[F_{13}\tilde{h}^2E_3^{2(n_p+1)} + F_{14}\tilde{h}^2E_3^{2(n_p+1)}\tilde{\tau}E_2^{n_p+1} \right] s^{-3(n_p+1)} \right\}. \quad (3.5)$$

Тут

$$F_{13} = h_{32}^2 f_0^2 \left(\frac{3}{8}\gamma - \frac{H_{22}}{E_3^2} \right) (1 - s^{-3}E_3^2)^{-1},$$

$$F_{14} = 2h_{32}^2 f_0^3 \left(\frac{H_{22}}{E_2E_3^2} - \frac{3}{8}\gamma \right) h_{34}(1 - s^{-3}E_2E_3^2)^{-1}. \quad (3.6)$$

Як вказувалося вище, розглядається випадок $\Delta = 0$, де справедливе співвідношення (2.8). При цьому мають місце рівності

$$s^{-3(n_h+1)} = \tilde{h}^{6/5}, \quad (3.7)$$

$$s^{-3(m_\tau+1)} = \tilde{\tau}^{3\nu}. \quad (3.8)$$

Крім того,

$$\tilde{\tau}E_2^{m_\tau+1} = 1, \quad (3.9)$$

$$\tilde{h}E_1^{n_p+1} = 1. \quad (3.10)$$

Скориставшись умовою $n_p = m_\tau$, знаходимо

$$F_{кр}^{(0)} = -kTN_0 [F_{10}s^{-3} - F_{10}\tilde{\tau}^{3\nu}], \quad (3.11)$$

або еквівалентний йому вираз (коли $n_p = n_h$)

$$F_{кр}^{(0)} = -kTN_0 [F_{10}s^{-3} - F_{10}\tilde{h}^{6/5}]. \quad (3.12)$$

Вираз (3.12) може бути отриманий також із (3.11) шляхом використання співвідношення (2.9).

Для доданку $F_{кр,2}$ із (3.3) отримуємо

$$F_{кр,2} = -kTN_0 [F_{11}s^{-3}E_2\tilde{\tau} + F_{12}s^{-3}E_2^2\tilde{\tau}^2 - F_{22}\tilde{\tau}^{3\nu}], \quad (3.13)$$

де

$$F_{22} = F_{11} + F_{12}. \quad (3.14)$$

Або при $n_p = n_h$ маємо

$$F_{кр,2} = -kTN_0 [F_{11}s^{-3}E_2\tilde{\tau} + F_{12}s^{-3}E_2^2\tilde{\tau}^2 - F_{22}\tilde{h}^{6/5}]. \quad (3.15)$$

Перш ніж навести результат розрахунку величини $F_{кр,3}$ зауважимо, що

$$\tilde{h}E_3^{n_h+1} = \tilde{h}E_1^{n_h+1} \left(\frac{E_3}{E_1} \right)^{n_h+1} = \left(\frac{E_3}{E_1} \right)^{n_h+1}. \quad (3.16)$$

Скориставшись із (1.29) та означення величини n_h із (1.38), знаходимо

$$\tilde{h}E_3^{n_h+1} = \tilde{h}^{4/5}. \quad (3.17)$$

Тоді, із врахуванням (3.17), знаходимо

$$F_{кр,3} = -kTN_0 [F_{13}s^{-3}E_3^2\tilde{h}^2 + F_{14}s^{-3}E_3^2E_2\tilde{\tau}\tilde{h}^2 - F_{33}\tilde{h}^{8/5}\tilde{h}^{6/5}], \quad (3.18)$$

де

$$F_{33} = F_{13} + F_{14}. \quad (3.19)$$

При розрахунку (3.18) ми скористалися із рівності (3.9). Останній доданок в (3.18) є малим ($\sim \tilde{h}^{14/5}$) і надалі його не будемо приймати до розгляду. Це ж стосується другого доданку в (3.18).

Таким чином, для $F'_{кр}$ при $\Delta = 0$ маємо вираз

$$F'_{кр} = -kTN_0 [f_{CR}^{(0)} + f_{CR}^{(1)}\tilde{\tau} + f_{CR}^{(2)}\tilde{\tau}^2 + f_{CR}^{(3)}\tilde{h}^2 - f_{CR}\tilde{h}^{6/5}], \quad (3.20)$$

де ми використали (3.7) та ввели позначення

$$f_{CR}^{(0)} = F_{10}s^{-3}, \quad f_{CR}^{(1)} = F_{11}s^{-3}E_2,$$

$$f_{CR}^{(2)} = F_{12}s^{-3}E_2^2, \quad f_{CR}^{(3)} = F_{13}s^{-3}E_3^2,$$

$$f_{CR} = F_{10} + F_{22}. \quad (3.21)$$

Еквівалентний до (3.20) вираз отримуємо, коли $n_p = m_\tau$, шляхом заміни

$$\tilde{h}^{6/5} \rightarrow \tilde{\tau}^{3\nu}. \quad (3.22)$$

Для випадку виконання (1.32) знаходимо

$$f_{CR}^{(0)} = 0.038, \quad f_{CR}^{(1)} = -0.124, \quad f_{CR}^{(2)} = -0.107,$$

$$f_{CR}^{(3)} = -0.081, \quad f_{CR} = 0.748. \quad (3.23)$$

Щоб знайти вираз для $F_{кр}$, відповідно до (1.35) слід врахувати внески від доданку

$$\ln Q_0 = N_0(e''_{c0} + e''_{c1}\tilde{\tau} + e''_{c2T}\tilde{\tau}^2 + e''_{c2}\tilde{h}^2), \quad (3.24)$$

де

$$\begin{aligned} e''_{c0} &= \frac{1}{4} \ln(12s_0^d) + \ln \gamma_1 - \gamma h_{2c}^{(0)} - \frac{1}{2} \left[\ln(2\pi) + \frac{1}{2} s_0^{-d} \right], \\ e''_{c1} &= -\gamma h_{21}^{(0)} f_0 / c_{k1}^{(0)}, \\ e''_{c2T} &= -\gamma f_0^2 h_{22}^{(0)} / (c_{k1}^{(0)})^2, \\ e''_{c2} &= \frac{3}{8} \gamma f_0^2 (h_{3h}^{(0)})^2 - f_0^2 \gamma h_{2h}^{(0)} + f_0^2 \left(1 + \frac{1}{2} s_0^{-d} - \frac{1}{2} s_0^d \right). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Отже,

$$\begin{aligned} F_{кр} &= -kTN_0 \left[e_{0p} + e_{1p}\tilde{\tau} + e_{2p}\tilde{\tau}^2 + e_{3p}\tilde{h}^2 + \right. \\ &\quad \left. + e_{4p}\tilde{h}^{6/5} \right], \end{aligned} \quad (3.26)$$

де

$$\begin{aligned} e_{0p} &= e''_{c0} + f_{CR}^{(0)}, & e_{1p} &= e''_{c1} + f_{CR}^{(1)}, & e_{2p} &= f_{CR}^{(2)} + e''_{c2T}, \\ e_{3p} &= e''_{c2} + f_{CR}^{(3)}, & e_{4p} &= -f_{CR}. \end{aligned} \quad (3.27)$$

У випадку виконання (1.32) знаходимо числові значення

$$\begin{aligned} e_{0p} &= 0.876 & e_{1p} &= -0.461 & e_{2p} &= -0.183 \\ e_{3p} &= 0.016 & e_{4p} &= -0.748. \end{aligned} \quad (3.28)$$

4. Вклади довгохвильових флуктуацій при $T > T_c$

Специфікою поведінки системи при підході із високотемпературної області до критичної точки є наявність так званої перехідної області [3]. Ця область відділяє ділянку критичного режиму флуктуацій та ділянку, яка описується гаусовим режимом флуктуацій. Тому при розрахунку вільної енергії зручно представити її в наступному вигляді

$$F = F_0 + F_{кр} + F_{по} + F_I, \quad (4.1)$$

виділяючи вклади до вільної енергії системи $F_{по}$, пов'язані з перехідною областю. Тут величини F_0 та $F_{кр}$ приведені в (1.34), (3.26).

Вклад $F_{по}$ відповідає перехідній області і має вигляд

$$F_{по} = -kT \left[\ln Q_{m_\tau+1} + N_{m_\tau+2} \left[\ln Q(P_{m_\tau+1}) + \frac{1}{2} \ln 2 \right] \right], \quad (4.2)$$

де

$$\ln Q_{m_\tau+1} = N_{m_\tau+1} [\ln Q(P_{m_\tau}) + \ln Q(d_{m_\tau+1})]. \quad (4.3)$$

Вклад до вільної енергії F_I , пов'язаний з гаусовим характером флуктуацій має вигляд

$$F_I = -kT \ln I_{m_\tau+2}, \quad (4.4)$$

де величина $I_{m_\tau+2}$ співпадає із (1.16) при $n_p = m_\tau + 1$.

Для розрахунку величини $F_{по}$ використаємо як наближені вирази, зокрема для $Q(P_{m_\tau})$, так і загальні вирази (для $Q(d_{m_\tau+1})$ та $Q(P_{m_\tau+1})$). Використання загальних виразів пов'язано з тим, що величина $h_2^{(n)}$ не є малою при $n > m_\tau$, хоча при $n \leq m_\tau$ вона все ще приймає малі значення.

Запишемо явний вигляд величин, які входять до перехідної області. Маємо

$$\ln Q(P_{m_\tau}) = f'_{p0} + \frac{1}{4} \ln a_4^{(m_\tau)} - H'_{211} h_2^{(m_\tau)},$$

де

$$\begin{aligned} f'_{p0} &= -\frac{1}{2} \ln(2\pi\gamma) - \frac{1}{4} \ln 24 + \ln \left(1 - \frac{3}{4} G_0 s^{-d} \right), \\ a_4^{(m_\tau)} &= s^{-4m_\tau} u_{m_\tau}, & u_{m_\tau} &= u^* (1 + f_0 \varphi_0^{-1/2} T_{42}^{(0)} E_2^{-1}), \\ h_2^{(m_\tau)} &= h_{22} f_0 E_2^{-1} \left(1 - \frac{1}{2} T_{42}^{(0)} f_0 \varphi_0^{-1/2} E_2^{-1} \right), \\ H'_{211} &= \frac{1}{2} t_2 + \frac{3}{4} G_0 G_2 s^{-d} \left(1 - \frac{3}{4} G_0 s^{-d} \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Приймаючи до уваги рівності (4.5), знаходимо

$$\ln Q(P_{m_\tau}) = f_{p1} - m_\tau \ln s, \quad (4.6)$$

де

$$f_{p1} = f'_{p0} - H'_{211} h_2^{(m_\tau)} + \frac{1}{4} \ln u_{m_\tau}.$$

Знайдемо вираз для $Q(d_{m_\tau+1})$. Відповідно до [1]

$$\ln Q(d_{m_\tau+1}) = \frac{1}{4} \ln \frac{24}{a_4^{(m_\tau+1)}} + \ln I \left(h_2^{(m_\tau+1)} \right),$$

де

$$I\left(h_2^{(m_\tau+1)}\right) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-h_2^{(m_\tau+1)}x^2 - h_3^{(m_\tau+1)}x^3 - x^4\right).$$

Із розв'язків рекурентних співвідношень [1] знаходимо, що

$$h_2^{(m_\tau+1)} = h_{22}f_0 \left(1 - \frac{1}{2}T_{42}^{(0)}f_0\varphi_0^{-1/2}\right),$$

$$h_3^{(m_\tau+1)} = h_{32}f_0(1 - h_{34}f_0)\tilde{h}^{4/5}.$$

Це свідчить про малість величини $h_3^{(m_\tau+1)}$ в порівнянні із $h_2^{(m_\tau+1)}$. Тому при розрахунку $I\left(h_2^{(m_\tau+1)}\right)$ будемо вважати, що $h_3^{(m_\tau+1)} = 0$. Приймаючи до уваги рівності (4.5), знаходимо

$$\ln Q(d_{m_\tau+1}) = f_d + (m_\tau + 1) \ln s,$$

де

$$f_d = \frac{1}{4} \ln 24 - \frac{1}{4} \ln u_{m_\tau+1} + \ln I\left(h_2^{(m_\tau+1)}\right),$$

$$u_{m_\tau+1} = u^* \left(1 + f_0\varphi_0^{-1/2}T_{42}^{(0)}\right).$$

Таким чином, для $Q_{m_\tau+1}$ із (4.3) знаходимо

$$\ln Q_{m_\tau+1} = N_0 s^{-3(m_\tau+1)} f_{pm}, \quad (4.7)$$

де

$$f_{pm} = f_{p1} + f_d + \ln s. \quad (4.8)$$

Знайдемо вираз для $Q(P_{m_\tau+1})$, який формує вклад до доданка $F_{\text{по}}$ із (4.1). Із результатів роботи [2] маємо

$$Q(P_{m_\tau+1}) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{2}{P_2^{(m_\tau+1)}}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iG_h^{(m_\tau+1)}x - x^2 - G_{m_\tau+1}x^4} dx,$$

де

$$P_2^{(m_\tau+1)} = \left(24/a_4^{(m_\tau+1)}\right)^{1/2} \left[M_2^{(m_\tau+1)} - (M_1^{(m_\tau+1)})^2\right],$$

$$M_l^{(m_\tau+1)} = K_l(h_2^{(m_\tau+1)}, h_3^{(m_\tau+1)})/K_0(h_2^{(m_\tau+1)}, h_3^{(m_\tau+1)}),$$

$$K_l(h_2^{(m_\tau+1)}, h_3^{(m_\tau+1)}) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot x^l \times$$

$$\times \exp(-h_2^{(m_\tau+1)}x^2 - h_3^{(m_\tau+1)}x^3 - x^4). \quad (4.9)$$

Як було показано вище $h_3^{(m_\tau+1)} \ll h_2^{(m_\tau+1)}$, тому надалі при розрахунку будемо покладати $h_3^{(m_\tau+1)} = 0$, що приведе до рівностей

$$M_{2l+1}^{(m_\tau+1)} = 0, \quad K_{2l+1}^{(m_\tau+1)} = 0.$$

Величина $G_h^{(m_\tau+1)}$ пропорційна до $M_1^{(m_\tau+1)}$, а тому також обертається в нуль. Для $G_{m_\tau+1}$ маємо [2]

$$G_{m_\tau+1} = \frac{1}{6} s^{-d} \left[3 - M_4^{(m_\tau+1)} \cdot (M_2^{(m_\tau+1)})^{-2}\right].$$

Приймаючи до уваги записані вище рівності, знаходимо

$$Q(P_{m_\tau+1}) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{2} \left(\frac{a_4^{(m_\tau+1)}}{24}\right)^{1/4} \left(M_2^{(m_\tau+1)}\right)^{-1/2} I_G,$$

де

$$I_G = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2 - G_{m_\tau+1}x^4} dx.$$

Запишемо $Q(P_{m_\tau+1})$ в компактній формі. Приймаючи до уваги (4.5), маємо

$$\ln \left[\sqrt{2}Q(P_{m_\tau+1})\right] = f_{p2} - (m_\tau + 1) \ln s, \quad (4.10)$$

де

$$f_{p2} = -\ln \pi - \frac{1}{4} \ln 24 + \frac{1}{4} \ln u_{m_\tau+1} - \frac{1}{2} \ln M_2^{(m_\tau+1)} + \ln I_G.$$

Вираз для вкладу до вільної енергії від перехідної області (4.2) матиме вигляд

$$F_{\text{по}} = -kTN_0 \left\{s^{-3(m_\tau+1)} f_{pm} + s^{-3(m_\tau+2)} [f_{p2} - (m_\tau + 1) \ln s]\right\}.$$

Приймаючи до уваги температурну залежність величини m_τ маємо

$$F_{\text{по}} = -kTN_0 s^{-3(m_\tau+1)} [f_{pm} + s^{-3} f_{p2} - (m_\tau + 1) s^{-3} \ln s]. \quad (4.11)$$

Розрахуємо вираз для F_I із (4.4). Для $I_{m_\tau+1}$ маємо вираз, який співпадає із (1.16) при $n_p = m_\tau + 1$:

$$I_{m_\tau+2} = \int (d\rho)^{N_{m_\tau+2}} \exp \left[\bar{a}_1^{(m_\tau+2)} N_{m_\tau+2}^{1/2} \rho_0 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_m} d_{m_\tau+2}(k) \times \right.$$

$$\begin{aligned}
& \times \rho_{\vec{k}} \rho_{-\vec{k}} - \frac{1}{3!} a_3^{(m_\tau+2)} N_{m_\tau+2}^{-1/2} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_3 \\ \vec{k}_i \in \mathcal{B}_m}} \rho_{\vec{k}_1} \dots \\
& \dots \rho_{\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_3} - \frac{1}{4!} a_4^{(m_\tau+2)} N_{m_\tau+2}^{-1} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_4 \\ \vec{k}_i \in \mathcal{B}_m}} \rho_{\vec{k}_1} \dots \\
& \dots \rho_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_4} \Big]. \tag{4.12}
\end{aligned}$$

Для коефіцієнтів $a_l^{(m_\tau+2)}$ відповідно до (1.36) маємо

$$\begin{aligned}
\tilde{a}_1^{(m_\tau+2)} &= s^{-(m_\tau+2)} w_{m_\tau+2}, \\
d_{m_\tau+2}(0) &= s^{-2(m_\tau+2)} r_{m_\tau+2}, \\
a_3^{m_\tau+2}(0) &= s^{-3(m_\tau+2)} v_{m_\tau+2}, \\
a_4^{m_\tau+2}(0) &= s^{-4(m_\tau+2)} u_{m_\tau+2}. \tag{4.13}
\end{aligned}$$

Для величин w_n , r_n , v_n та u_n при $n = m_\tau + 2$ із (1.25) знаходимо:

$$\begin{aligned}
w_{m_\tau+2} &\approx -c_{h1} h' E_1^{m_\tau+2} = -c_{h1} f_0 E_1, \\
r_{m_\tau+2} &\approx r^* + c_{k1}^{(0)} \beta \Phi(0) \tau E_2^{m_\tau+2} = f_0 \beta \Phi(0) [E_2 - 1], \\
v_{m_\tau+2} &= -c_{h2} h' E_3^{m_\tau+2} \approx -c_{h2} E_3 \tilde{h}^{4/5}, \\
u_{m_\tau+2} &\approx u^* + c_{k1}^{(0)} T_{42}^{(0)} \varphi_0^{1/2} (\beta \Phi(0))^2 \tau E_2^{m_\tau+2} = \\
&= u^* (1 + T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} f_0 E_2). \tag{4.14}
\end{aligned}$$

Як легко бачити із (4.14) коефіцієнт $a_3^{(m_\tau+2)}$ із (4.12) прямує до нуля за рахунок множника $v_{m_\tau+2} \sim \tilde{h}^{4/5}$, а коефіцієнт при другій степені $d_{m_\tau+2}$ приймає великі значення в порівнянні з $a_4^{(m_\tau+2)}$. Тому при розрахунку (4.12) в якості базового множника можна вибрати гаусовий розподіл. Для цього випадку маємо

$$\begin{aligned}
I_{m_\tau+2} &= \int (d\rho)^{N_{m_\tau+2}} \exp \left(-\tilde{a}_1^{(m_\tau+2)} N_{m_\tau+2}^{1/2} \rho_0 - \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_m} d_{m_\tau+2}(k) \rho_{\vec{k}} \rho_{-\vec{k}} \right). \tag{4.15}
\end{aligned}$$

Зауважимо, що має місце рівність

$$-\tilde{a}_1^{(m_\tau+2)} N_{m_\tau+2}^{1/2} = a_{1m} N^{1/2} \tilde{h},$$

де

$$a_{1m} = f_0 \mathcal{M}_{20} / \mathcal{M}_2, \quad \mathcal{M}_{20} = 1 - 3g - 6g T_{13}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} / (\beta \Phi(0) \mathcal{M}_2).$$

Після інтегрування в (4.15) за всіма змінними $\rho_{\vec{k}}$ із $k \neq 0$ маємо

$$I_{m_\tau+2} = I_{m_\tau+2}^{(0)} \prod_{k \neq 0}^{B_{m_\tau+2}} (\pi / \bar{d}(k))^{1/2}, \tag{4.16}$$

де

$$\bar{d}(k) = s^{-2(m_\tau+2)} r_{m_\tau+2} + 2\beta \Phi(0) b^2 k^2.$$

Представимо $I_{m_\tau+2}^{(0)}$ у вигляді

$$I_{m_\tau+2}^{(0)} = \left(\frac{2}{\bar{d}(0)} \right)^{1/2} \int_0^\infty e^{a_p^2 x - x^2} dx,$$

де

$$\begin{aligned}
a_p^2 &= N^{1/2} \tilde{h} a_{mp} s^{m_\tau+1} \\
a_{mp} &= a_{1m} s (2/r_{m_\tau+2})^{1/2}.
\end{aligned}$$

Тоді

$$I_{m_\tau+2}^{(0)} = \exp \left(N \tilde{h}^2 s^{2(m_\tau+1)} \frac{a_{mp}^2}{4} \right) \left(\frac{2\pi}{\bar{d}(0)} \right)^{1/2}.$$

Використовуючи співвідношення (2.8), знаходимо

$$s^{2(m_\tau+1)} = s^{2(n_h+1)} = \tilde{h}^{-4/5}.$$

Для $I_{m_\tau+2}$ отримуємо вираз

$$I_{m_\tau+2} = \exp \left(N \tilde{h}^{6/5} \frac{a_{mp}^2}{4} \right) \sqrt{2} \prod_{k \in \mathcal{B}_{m_\tau+2}} (\pi / \bar{d}(k))^{1/2}.$$

Для вкладу до вільної енергії F_I із (4.4) маємо

$$F_I = -kTN \left(\tilde{h}^{6/5} \frac{a_{mp}^2}{4} + e_{01} s^{-3(m_\tau+2)} \right) +$$

$$+\frac{1}{2}kT \sum_{k=0}^{B_{m_\tau+2}} \ln \bar{d}(k),$$

де

$$e_{01} = \frac{1}{2}s_0^{-3} \ln \pi.$$

Для розрахунку останнього доданку в виразі для F_I скористаємося із інтегрального представлення

$$I = \frac{I}{N_{m_\tau+2}} \sum_{k=0}^{B_{m_\tau+2}} \ln \bar{d}(k) = \frac{1}{N_{m_\tau+2}} \frac{6}{\pi} \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{B_{m_\tau+2}} dk k^2 \ln \bar{d}(k).$$

Виконуючи обчислення, знаходимо

$$I = -2(m_\tau + 2) \ln s + I'_0,$$

де

$$I'_0 = \ln(D_{0p} + D_{1p}) - \frac{2}{3} + 2\frac{D_{0p}}{D_{1p}} - 2\left(\frac{D_{0p}}{D_{1p}}\right)^2 \times \\ \times \frac{D_{1p}}{\sqrt{D_{0p}D_{1p}}} \operatorname{arctg} \frac{D_{1p}}{\sqrt{D_{0p}D_{1p}}}. \quad (4.17)$$

Тут

$$D_{0p} = \beta\Phi(0)f_0[E_2 - 1], \\ D_{1p} = 2\beta\Phi(0)b^2B_0^2. \quad (4.18)$$

Отже,

$$F_I = -kTN\tilde{h}^{6/5} \left(\frac{1}{4}a_{mp}^2 + e_{01}s^{-3} \right) - \\ -kTN_0s^{-3}s^{-3(m_\tau+1)} \left((m_\tau + 2) \ln s - \frac{1}{2}I'_0 \right). \quad (4.19)$$

Загальний вираз для вільної енергії

$$F = -kTN \left[l_{0p} + \ln chh' + l_{1p}\tilde{h}^{6/5} + l_{2p}\tilde{h}^2 + \right. \\ \left. + l_{3p}\tilde{\tau} + l_{4p}\tilde{\tau}^2 \right], \quad (4.20)$$

де

$$l_{0p} = \ln 2 + \frac{1}{2}\beta_c\Phi(0)\bar{\Phi} + s_0^{-3}e_{0p},$$

$$l_{1p} = \frac{1}{4}a_{mp}^2 + s_0^{-3} \left[e_{4p} + f_{pm} + s^{-3} \left(\frac{1}{2} \ln \pi + f_{p2} + lns - \frac{1}{2}I'_0 \right) \right], \\ l_{2p} = s_0^{-3}e_{3p}, \quad l_{3p} = -\frac{1}{2}\beta_c\Phi(0)\bar{\Phi}f_0/c_{k1}^{(0)} + s_0^{-3}e_{1p}, \\ l_{4p} = \frac{1}{2}\beta_c\Phi(0)\bar{\Phi}(f_0/c_{k1}^{(0)})^2 + s_0^{-3}e_{2p}. \quad (4.21)$$

Для значень параметрів (1.32) ці коефіцієнти рівні:

$$l_{0p} = 0.835, \quad l_{1p} = 0.293, \quad l_{2p} = 0.002, \\ l_{3p} = -0.058, \quad l_{4p} = -0.023. \quad (4.22)$$

5. Розрахунок характеристик системи вище критичної точки

Використаємо (4.20) для знаходження величини

$$\sigma_G^{(+)} = -\frac{1}{N} \left(\frac{\partial F}{\partial h} \right),$$

яка характеризує величину середнього спінового моменту. Маємо

$$\sigma_G^{(+)} = \operatorname{th} h' + (2l_{2p}/f_0^2)h' + \frac{6}{5} \frac{l_{1p}}{f_0} \left(\frac{h'}{f_0} \right)^{1/5}. \quad (5.1)$$

Очевидно, що при $h' \ll 1$ основний вклад дає доданок

$$\sigma_{Gc}^{(+)} = \sigma_{c0}h'^{1/5}, \quad (5.2)$$

де

$$\sigma_{c0} = \frac{6}{5}l_{1p}f_0^{-6/5}. \quad (5.3)$$

На рис.2 зображена залежність величини $\sigma_G^{(+)}$ від значення поля $h' = \beta h$ при виконанні (1.32). Порівнюючи криву для (5.2) із відповідною кривою при $\tau = 0$ [2], знаходимо, що величина $\sigma_G^{(+)}$ із (5.1) за порядком величини співпадає із величиною σ_h , яка відповідає випадку $\tau = 0$. В границі $h \rightarrow 0$ знаходимо $\sigma_h/\sigma_G^{(+)} = 1.0$. Для сприйнятливості системи в напрямку кривої 1 із рис.1 маємо

$$\chi_G^{(+)} = \frac{1}{N}\chi_+k_B T = 1 - th^2(\beta h) + \frac{6l_{1p}}{25f_0^{6/5}}(\beta h)^{-4/5} + \frac{2l_{2p}}{f_0^2}. \quad (5.4)$$

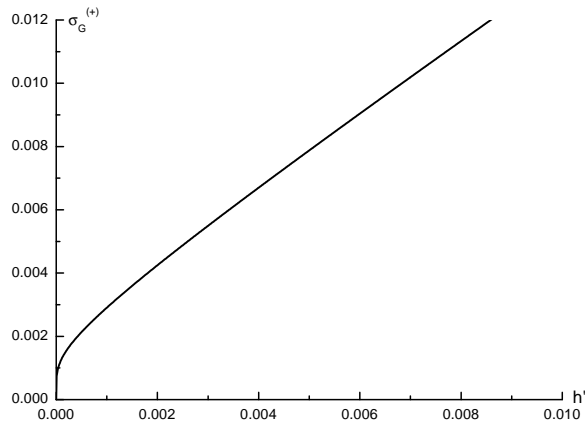


Рис. 2. Величина $\sigma_G^{(+)}$ як функція поля $h' = \beta h$.

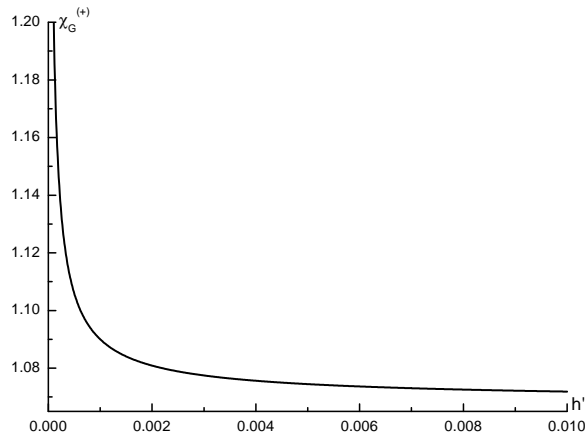


Рис. 3. Сприйнятливість системи в напрямку граничної кривої (2.9) при $T > T_c$ ($s_0 = 2, b/c=0.3$).

Запишемо (5.4) у вигляді

$$\chi_G^{(+)} = \chi_0 + \chi_1(\beta h)^{-4/5}, \quad (5.5)$$

де

$$\begin{aligned} \chi_0 &= 1 + \frac{2l_{2p}}{f_0^2} - th^2\beta h, \\ \chi_1 &= 0.24l_{1p}f_0^{-6/5}. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Крива залежності $\chi_G^{(+)}$ від величини $h' = \beta h$ приведена на рис.3 при $s_0 = 2, b/c = 0.3$. Порівнюючи $\chi_G^{(+)}$ із сприйнятливістю системи при $\tau = 0$ [2] легко бачити, що вони майже не відрізняються. Однак в границі $h \rightarrow 0$ їхнє відношення рівне одиниці.

6. Вільна енергія при граничному значенні поля \tilde{h}_c у випадку $T < T_c$

Розрахунок вільної енергії поблизу критичної точки при $T < T_c$ принципово не відрізняється від випадку $T > T_c$. Отримані вище загальні формули справедливі також у цьому випадку. Відмінність полягає у визначенні точки виходу із критичного режиму. Замість величини m_τ із (2.1) маємо іншу величину μ_τ , яка визначається із умови [3]

$$\frac{r_{\mu_\tau+1} - r^*}{r^*} = \delta, \quad (6.1)$$

де $\delta = 1$. Зауважимо, що при $T > T_c$ має місце рівність $\delta = -1$. Приймаючи до уваги (1.26), знаходимо

$$c_{k1}^{(0)}\beta\Phi(0)\tau E_2^{\mu_\tau+1} = -f_0\beta\Phi(0). \quad (6.2)$$

Тут ми знехтували вкладом доданків, що пропорційні $E_4^{\mu_\tau+1}$, оскільки $E_4 < 1$, а $\mu_\tau \gg 1$ при $\tau \rightarrow 0$. Введемо позначення

$$\tilde{\tau}_1 = -\frac{c_{k1}^{(0)}}{f_0}\tau. \quad (6.3)$$

Тоді (6.2) запишеться у вигляді

$$\tilde{\tau}_1 E_2^{\mu_\tau+1} = 1. \quad (6.4)$$

Рівняння (6.4) є означенням величини

$$\mu_\tau = -\frac{\ln \tilde{\tau}_1}{\ln E_2} - 1. \quad (6.5)$$

Використовуючи (6.5), легко отримати, що

$$s^{-3(\mu_\tau+1)} = \tilde{\tau}_1^{3\nu}. \quad (6.6)$$

Знайдемо вираз для вільної енергії системи, використовуючи загальну формулу (1.35). Величина F_0 із (1.35) має однаковий вигляд як при $T > T_c$, так і при $T < T_c$. Для $F_{\text{кр}}$ із (1.35) перший доданок залишається також без змін, однак другий доданок буде іншим. Позначатимемо його в подальшому через $\tilde{F}'_{\text{кр}}$.

6.1. Розрахунок $\tilde{F}'_{\text{кр}}$

Знайдемо вклад до вільної енергії системи від ділянки критичного режиму при $T < T_c$. Маємо

$$\tilde{F}'_{\text{кр}} = \tilde{F}'_{\text{кр}}(0) + \tilde{F}'_{\text{кр},2} + \tilde{F}'_{\text{кр},3}, \quad (6.7)$$

де

$$\tilde{F}'_{\text{кр}}(0) = -kTN_0 \left(F_{10}s^{-3} - F_{10}s^{-3(n_p+1)} \right). \quad (6.8)$$

Коефіцієнт F_{10} визначений в (3.3). Для $\tilde{F}'_{\text{кр},2}$ маємо

$$\tilde{F}'_{\text{кр},2} = -kTN_0 \left(F_{11}s_0^{-3}E_2\tilde{\tau} + F_{12}s^{-3}E_2^2\tilde{\tau}^2 - \tilde{F}'_{22}s^{-3(n_p+1)} \right). \quad (6.9)$$

Тут коефіцієнти F_{11} та F_{12} наведені в (3.4), а для \tilde{F}'_{22} маємо

$$\tilde{F}'_{22} = -F_{11} + F_{12}. \quad (6.10)$$

Для величини $\tilde{F}'_{\text{кр},3}$ із (6.7) знаходимо

$$\begin{aligned} \tilde{F}'_{\text{кр},3} = & -kTN_0 \left[F_{13}s^{-3}E_2^2\tilde{h}^2 + F_{14}s^{-3}E_2^2\tilde{\tau}\tilde{h}^2 - \right. \\ & \left. - F_{33}\tilde{h}^{8/5}s^{-3(n_p+1)} \right], \end{aligned} \quad (6.11)$$

де коефіцієнти F_{13} , F_{14} приведені в (3.6), а для \tilde{F}'_{33} маємо

$$\tilde{F}'_{33} = F_{13} - F_{14}. \quad (6.12)$$

Зауважимо, що останній доданок в (6.11) є зникаюче малим і надалі не будемо брати його до уваги. Це ж стосується і другого доданку в (6.11). Вираз для $\tilde{F}'_{\text{кр}}$ відповідно до (6.7) приймає вигляд

$$\begin{aligned} \tilde{F}'_{\text{кр}} = & -kTN_0 \left[f_{CR}^{(0)} + f_{CR}^{(1)}\tilde{\tau} + f_{CR}^{(2)}\tilde{\tau}^2 + f_{CR}^{(3)}\tilde{h}^2 + \right. \\ & \left. - \tilde{f}_{CR}s^{-3(n_p+1)} \right], \end{aligned} \quad (6.13)$$

де коефіцієнти $f_{CR}^{(l)}$ співпадають із (3.21), а для \tilde{f}_{CR} маємо

$$\tilde{f}_{CR} = F_{10} + \tilde{F}'_{22}. \quad (6.14)$$

Вираз для

$$\tilde{F}'_{\text{кр}} = -kT \ln Q_0 + \tilde{F}'_{\text{кр}} \quad (6.15)$$

знаходимо із врахуванням (3.24). Отримуємо

$$\begin{aligned} \tilde{F}'_{\text{кр}} = & -kTN_0 \left(e_{0p} + e_{1p}\tilde{\tau} + e_{2p}\tilde{\tau}^2 + e_{3p}\tilde{h}^2 + \right. \\ & \left. + \tilde{e}_{4p}s^{-3(n_p+1)} \right). \end{aligned} \quad (6.16)$$

Коефіцієнти e_{lp} приймають такі ж значення, що і в (3.27), а для \tilde{e}_{4p} маємо

$$\tilde{e}_{4p} = -\tilde{f}_{CR}. \quad (6.17)$$

Зауважимо, що як і у випадку $T > T_c$, тут

$$s^{-3(n_p+1)} = \tilde{h}^{6/5},$$

при $n_p = n_h$, або

$$s^{-3(n_p+1)} = \tilde{\tau}_1^{3\nu}$$

при $n_p = \mu_\tau$.

6.2. Розрахунок вкладів від довгохвильових флуктуацій параметра порядку

Запишемо вираз для

$$\tilde{F}_p = -kTN_{n_p+1} \ln \left[\sqrt{2}Q(P_{n_p}) \right].$$

Маємо

$$\tilde{F}_p = -kTN_0s^{-3(n_p+1)} \left(f_{p0} + \frac{1}{4} \ln a_{4s}^{(n_p)} - H'_{211}h_{2s}^{(n_p)} \right). \quad (6.18)$$

Тут $f_{p0} = f'_{p0} + \frac{1}{2} \ln 2$,

$$\begin{aligned} a_{4s}^{(n_p)} &= s^{-4n_p} u^* (1 - f_0 \varphi_0^{-1/2} T_{42}^{(0)} E_2^{-1}) \\ h_{2s}^{(n_p)} &= -f_0 h_{22} E_2^{-1} \left(1 + \frac{1}{2} T_{42}^{(0)} f_0 \varphi_0^{-1/2} E_2^{-1} \right). \end{aligned} \quad (6.19)$$

Величини (6.19) розраховані із рекурентних співвідношень (1.26) та формули (1.33) із врахуванням умови (6.4).

Зауважимо, що величина $h_{2s}^{(n_p)}$ є від'ємною, в той час як аналогічна їй величина у випадку $T > T_c$ $h_2^{(m\tau)}$ із (4.5) є додатньою. Приймаючи до уваги (6.19) із (6.18) знаходимо

$$\tilde{F}_p = -kTN_0 s^{-3(n_p+1)} \left(\tilde{f}_{p1} - n_p \ln s \right), \quad (6.20)$$

де

$$\tilde{f}_{p1} = f_{p0} - H_{211} h_{2s}^{(n_p)} + \frac{1}{4} \ln \left[u^* (1 - f_0 \varphi_0^{-1/2} T_{42}^{(0)} E_2^{-1}) \right]. \quad (6.21)$$

Розрахунок виразу \tilde{F}_I проводиться відповідно до формули

$$\tilde{F}_I = -kT \ln \tilde{I}_{n_p+1}, \quad (6.22)$$

де

$$\begin{aligned} \tilde{I}_{n_p+1} &= \int (d\rho)^{N_{n_p+1}} \exp \left[-\tilde{a}_1^{(n_p+1)} N_{n_p+1}^{1/2} \rho_0 - \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathcal{B}_{n_p+1}} \tilde{d}_{n_p+1}(k) \times \right. \\ &\quad \left. \times \rho_{\vec{k}} \rho_{-\vec{k}} - \frac{1}{4!} \tilde{a}_4^{(n_p+1)} N_{n_p+1}^{-1} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_4 \\ k_i \in \mathcal{B}_{n_p+1}}} \rho_{\vec{k}_1} \dots \rho_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_4} \right], \end{aligned} \quad (6.23)$$

де

$$\begin{aligned} \tilde{a}_1^{(n_p+1)} &= s^{-(n_p+1)} w_{n_p+1}, \\ \tilde{d}_{n_p+1}(k) &= \tilde{d}_{n_p+1}(0) + 2\beta\Phi(0)b^2 k^2, \\ \tilde{d}_{n_p+1}(0) &= s^{-2(n_p+1)} \tilde{r}_{n_p+1}, \\ \tilde{a}_4^{(n_p+1)} &= s^{-4(n_p+1)} \tilde{u}_{n_p+1}, \end{aligned} \quad (6.24)$$

а величини w_n , r_n та u_n визначені в (1.26). При $n = n_p + 1$ та $T < T_c$ знаходимо

$$\begin{aligned} w_{n_p+1} &= -c_{h1} f_0 = -s_0^{d/2} f_0 \mathcal{M}_{20}(h') / \mathcal{M}_2(h'), \\ \tilde{r}_{n_p+1} &= -2f_0 \beta \Phi(0), \\ \tilde{u}_{n_p+1} &= u^* (1 - f_0 \varphi_0^{-1/2} T_{42}^{(0)}). \end{aligned} \quad (6.25)$$

Зауважимо, що (на відміну від випадку $T > T_c$) при $T < T_c$ величина $\tilde{r}_{n_p+1} \neq 0$. Приймаючи до уваги (6.24) та рівність $N_{n_p+1} = N s_0^{-3} s^{-3(n_p+1)}$ для (6.23) отримуємо

$$\begin{aligned} \tilde{I}_{n_p+1} &= \int (d\rho)^{N_{n_p+1}} \exp \left[f_0 \frac{\mathcal{M}_{20}}{\mathcal{M}_2} \sqrt{N} \tilde{h} \rho_0 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_{n_p+1}} \tilde{d}_{n_p+1}(k) \times \right. \\ &\quad \left. \times \rho_{\vec{k}} \rho_{-\vec{k}} - \frac{1}{4!} \tilde{a}_4^{(n_p+1)} N_{n_p+1}^{-1} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_4 \\ k_i \in \mathcal{B}_{n_p+1}}} \rho_{\vec{k}_1} \dots \rho_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_4} \right]. \end{aligned} \quad (6.26)$$

Для розрахунку (6.26) виконаємо заміну змінних

$$\rho_{\vec{k}} = \eta_{\vec{k}} + \tilde{\sigma} \sqrt{N} \delta_{\vec{k},0}. \quad (6.27)$$

В результаті отримуємо

$$\begin{aligned} \tilde{I}_{n_p+1} &= \exp \left[\tilde{E}_0(\tilde{\sigma}) \right] (d\eta)^{N_{n_p+1}} \exp \left[\tilde{A}_0 N^{1/2} \eta_0 - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_{n_p+1}} \tilde{d}(k) \eta_{\vec{k}} \eta_{-\vec{k}} - \frac{1}{6} \tilde{b} N_{n_p+1}^{-1/2} \sum_{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_3} \eta_{\vec{k}_1} \dots \eta_{\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_3} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{4!} \tilde{a}_4 N_{n_p+1}^{-1} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_4 \\ k_i \in \mathcal{B}_{n_p+1}}} \eta_{\vec{k}_1} \dots \eta_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_4} \right]. \end{aligned} \quad (6.28)$$

Тут введено позначення

$$\begin{aligned} \tilde{E}_0(\tilde{\sigma}) &= f_0 \frac{\mathcal{M}_{20}}{\mathcal{M}_2} N \tilde{h} \tilde{\sigma} + f_0 \beta \Phi(0) s^{-2(n_p+1)} N \tilde{\sigma}^2 - \\ &\quad - \frac{1}{24} \tilde{u}_{n_p+1} s_0^3 s^{-(n_p+1)} N \tilde{\sigma}^4. \end{aligned} \quad (6.29)$$

Для коефіцієнтів \tilde{A}_0 , $\tilde{d}(0)$, \tilde{b} та \tilde{a}_4 маємо вирази

$$\begin{aligned}\tilde{A}_0 &= f_0 \frac{\mathcal{M}_{20}}{\mathcal{M}_2} \tilde{h} + 2f_0 \beta \Phi(0) s^{-2(n_p+1)} \tilde{\sigma} - \frac{1}{6} \tilde{u}_{n_p+1} s_0^3 s^{-(n_p+1)} \tilde{\sigma}^3, \\ \tilde{d}(0) &= -2f_0 \beta \Phi(0) s^{-2(n_p+1)} + \frac{1}{2} s_0^3 \tilde{u}_{n_p+1} s^{-(n_p+1)} \tilde{\sigma}^2, \\ \tilde{b} &= \tilde{u}_{n_p+1} s_0^{3/2} \tilde{\sigma} \tilde{h}, \quad \tilde{a}_4 = \tilde{u}_{n_p+1} s^{-4(n_p+1)}.\end{aligned}\quad (6.30)$$

Величину зміщення $\tilde{\sigma}$ шукаємо із умови екстремуму

$$\frac{\partial \tilde{E}_0(\tilde{\sigma})}{\partial \tilde{\sigma}} = 0.$$

Отримуємо рівняння

$$f_0 \frac{\mathcal{M}_{20}(h')}{\mathcal{M}_2(h')} \tilde{h} + 2f_0 \beta \Phi(0) s^{-2(n_p+1)} \tilde{\sigma} = \frac{1}{6} \tilde{u}_{n_p+1} s_0^3 s^{-(n_p+1)} \tilde{\sigma}^3. \quad (6.31)$$

Зауважимо, що рівняння (6.31) має відмінний від нуля розв'язок навіть при $h = 0$:

$$\tilde{\sigma}^2 = 12f_0 \beta \Phi(0) \tilde{u}_{n_p+1}^{-1} s_0^{-3} s^{-(n_p+1)}. \quad (6.32)$$

У цьому випадку величина $\tilde{d}(0)$ є додатною:

$$\tilde{d}(0) = 4f_0 \beta \Phi(0) s^{-2(n_p+1)}. \quad (6.33)$$

У випадку $h \neq 0$ розв'язок (6.31) будемо шукати у вигляді

$$\tilde{\sigma} = \tilde{\sigma}_0 s^{-\frac{1}{2}(n_p+1)}. \quad (6.34)$$

Підставляючи (6.34) в (6.31), маємо

$$f_0 \tilde{h} \frac{\mathcal{M}_{20}}{\mathcal{M}_2} + 2f_0 \beta \Phi(0) \tilde{\sigma}_0 \tilde{h} = \frac{1}{6} \tilde{u}_{n_p+1} s_0^3 \tilde{\sigma}_0^3 \tilde{h}. \quad (6.35)$$

Якщо $\tilde{h} \neq 0$, то маємо рівняння для $\tilde{\sigma}_0$

$$f_0 \frac{\mathcal{M}_{20}}{\mathcal{M}_2} + 2\beta \Phi(0) f_0 \tilde{\sigma}_0 = \frac{1}{6} \tilde{u}_{n_p+1} s_0^3 \tilde{\sigma}_0^3, \quad (6.36)$$

яке дає залежність $\tilde{\sigma} = \tilde{\sigma}_0(s_0, b/c)$.

В таблиці 1 приведені значення величини $\tilde{\sigma}_0$ для ряду значень параметра s_0 при $b/c = 0.3$.

Табл. 1.

s_0	1.2	1.25	1.50	2.0	2.5	3.0	3.5	5.0
$\tilde{\sigma}_0$	2.116	2.079	1.915	1.691	1.544	1.436	1.352	0.177

Табл. 2.

b/c	0.25	0.28	0.30	0.35	0.40	0.50	0.80	0.90
$\tilde{\sigma}_0$	1.934	1.780	1.691	1.498	1.340	1.092	0.601	0.470

Значення $\tilde{\sigma}_0$ для різних b/c при $s_0 = 2.0$ подані в таблиці 2.

Після обчислення величини $\tilde{\sigma}$ знаходимо величину

$$\tilde{E}_0 = N \tilde{E}_{00} \tilde{h}^{6/5}, \quad (6.37)$$

де

$$\tilde{E}_{00} = f_0 \tilde{\sigma}_0 \frac{\mathcal{M}_{20}}{\mathcal{M}_2} + f_0 \beta \Phi(0) \tilde{\sigma}_0^2 - \frac{\tilde{u}_{n_p+1}}{24} s_0^3 \tilde{\sigma}_0^4, \quad (6.38)$$

а також значення коефіцієнтів із (6.30)

$$\begin{aligned}\tilde{A}_0 &= 0, \\ \tilde{d}(0) &= \tilde{D}_g \tilde{h}^{4/5}, \quad \tilde{b} = \tilde{B}_g \tilde{h}^{6/5}, \quad \tilde{a}_4 = \tilde{A}_g \tilde{h}^{8/5},\end{aligned}\quad (6.39)$$

де $\tilde{A}_0 = 0$ в силу (6.35), а

$$\begin{aligned}\tilde{D}_g &= -2f_0 \beta \Phi(0) + \frac{1}{2} s_0^3 \tilde{\sigma}_0^2 \tilde{u}_{n_p+1}, \\ \tilde{B}_g &= \tilde{\sigma}_0 s_0^{3/2} \tilde{u}_{n_p+1}, \quad \tilde{A}_g = \tilde{u}_{n_p+1}.\end{aligned}\quad (6.40)$$

Шляхом прямого розрахунку можна переконатися, що величина \tilde{D}_g приймає додатні значення для всіх значень параметрів s_0 та b/c . При розрахунку (6.28) обмежуємося гаусовим наближенням. Маємо

$$\tilde{I}_{n_p+1} = \exp(\tilde{E}_0) \sqrt{2} \prod_{\vec{k} \in \mathcal{B}_p} \left(\pi / \tilde{d}(k) \right)^{1/2}. \quad (6.41)$$

Внесок до вільної енергії \tilde{F}_I має вигляд

$$\tilde{F}_I = -kTN \tilde{E}_{02} \tilde{h}^{6/5} + kTN \tilde{E}_{03}, \quad (6.42)$$

де

$$\tilde{E}_{02} = \tilde{E}_{00} + \tilde{E}_{01}, \quad \tilde{E}_{01} = \frac{1}{2} s_0^{-3} \ln \pi. \quad (6.43)$$

Для \tilde{E}_{03} маємо

$$\tilde{E}_{03} = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{B_{n_p+1}} \ln \tilde{d}(k). \quad (6.44)$$

Проводячи обчислення \tilde{E}_{03} аналогічно до того, як це робилося в [2], знаходимо

$$\tilde{E}_{03} = \frac{1}{2} s_0^{-3} s^{-3(n_p+1)} \tilde{I}_0, \quad (6.45)$$

де

$$\tilde{I}_0 = -2(n_p + 1) \ln s + \tilde{I}'_0. \quad (6.46)$$

Тут

$$\begin{aligned} \tilde{I}'_0 &= \ln(\tilde{D}_0 + \tilde{D}_1) - \frac{2}{3} + \\ &+ 2 \frac{\tilde{D}_0}{\tilde{D}_1} - 2 \left(\frac{\tilde{D}_0}{\tilde{D}_1} \right)^2 \frac{\tilde{D}_1}{\sqrt{\tilde{D}_0 \tilde{D}_1}} \arctg \frac{\tilde{D}_1}{\sqrt{\tilde{D}_0 \tilde{D}_1}}, \end{aligned} \quad (6.47)$$

де

$$\begin{aligned} \tilde{D}_0 &= \frac{1}{2} s_0^3 \tilde{\sigma}_0^2 \tilde{u}_{n_p+1} - 2f_0 \beta \Phi(0), \\ \tilde{D}_1 &= 2\beta \Phi(0) s_0^{-2} \pi^2 (b/c)^2. \end{aligned} \quad (6.48)$$

Для \tilde{F}_I знаходимо вираз

$$\tilde{F}_I = -kTN \tilde{E}_{02} \tilde{h}^{6/5} + kTN_0 \tilde{h}^{6/5} \left[-n_p \ln s - \ln s + \frac{1}{2} \tilde{I}'_0 \right]. \quad (6.49)$$

Підсумовуючи отримані вище вирази для $\tilde{F}_{кр}$, \tilde{F}_p та \tilde{F}_I знаходимо

$$\begin{aligned} \tilde{F} &= -kTN \left[\ln chh' + \tilde{l}_0 + \tilde{l}_{10} \tilde{h}^{6/5} + \tilde{l}_2 \tilde{h}^2 + \right. \\ &\left. + \tilde{l}_3 \tilde{\tau} + \tilde{l}_4 \tilde{\tau}^2 + \tilde{l}_{11} s^{-3(n_p+1)} \right], \end{aligned} \quad (6.50)$$

де

$$\begin{aligned} \tilde{l}_0 &= \ln 2 + \frac{1}{2} \beta_c \Phi(0) \bar{\Phi} + s_0^{-3} e_{0p}, \\ \tilde{l}_{10} &= \tilde{E}_{02} + s_0^{-3} \left(\ln s - \frac{1}{2} \tilde{I}'_0 \right), \\ \tilde{l}_2 &= e_{3p} \cdot s_0^{-3}, \\ \tilde{l}_3 &= s_0^{-3} e_{1p} - \frac{1}{2} \beta_c \Phi(0) \bar{\Phi} f_0 / c_{k1}^{(0)}, \\ \tilde{l}_4 &= s_0^{-3} e_{2p} + \frac{1}{2} \beta_c \Phi(0) \bar{\Phi} (f_0 / c_{k1}^{(0)})^2, \\ \tilde{l}_{11} &= s_0^{-3} (\tilde{e}_{4p} + \tilde{f}_{p1}), \quad \tilde{l}_1 = \tilde{l}_{10} + \tilde{l}_{11}. \end{aligned} \quad (6.51)$$

Вираз (6.50) описує вільну енергію тривимірної ґраткової спінової системи поблизу критичної точки при $T < T_c$ для граничного значення поля \tilde{h}_c .

Для набору значень параметрів (1.32) отримуємо

$$\begin{aligned} \tilde{l}_0 &= 0.835, \quad \tilde{l}_{10} = 1.028, \quad \tilde{l}_2 = 0.02, \\ \tilde{l}_3 &= -0.015, \quad \tilde{l}_4 = -0.013, \quad \tilde{l}_{II} = -0.412, \quad \tilde{l}_I = 0.616. \end{aligned} \quad (6.52)$$

7. Сприйнятливість системи при $T < T_c$

Проведемо розрахунок величини $\sigma_G^{(-)}$ та сприйнятливості системи $\chi_G^{(-)}$ для області температур $T < T_c$. Подібно до (5.1) із (6.50) маємо

$$\sigma_G^{(-)} = \text{th } h' + 2\tilde{l}_2 f_0^{-2} h' + \frac{6}{5} \tilde{l}_1 f_0^{-6/5} h'^{1/5}. \quad (7.1)$$

Основний вклад у (7.1), як і у випадку $T > T_c$, дає доданок

$$\sigma_{Gc}^{(-)} = \sigma'_{c0} h'^{1/5}, \quad (7.2)$$

де

$$\sigma'_{c0} = \frac{6}{5} \tilde{l}_1 f_0^{-6/5}. \quad (7.3)$$

Залежність величини $\sigma_G^{(-)}$ від h' при $s_0 = 2$, $b/c = 0.3$ приведена на рис. 4. Порівнюючи значення $\sigma_G^{(-)}$ із значеннями величини $\sigma_G^{(+)}$ (див. рис.2) бачимо, що $\sigma_G^{(-)}$ в три рази перевищує $\sigma_G^{(+)}$. Це зрозуміло, оскільки при $T < T_c$ в системі існує відмінний від нуля параметр порядку навіть коли $h = 0$.

Сприйнятливість системи при $T < T_c$ для граничного поля записується у вигляді

$$\chi_G^{(-)} = \chi'_0 + \chi'_1 (\beta h)^{-4/5}, \quad (7.4)$$

де

$$\begin{aligned} \chi'_0 &= 1 + 2\tilde{l}_2 f_0^{-2} - \text{th}^2(\beta h), \\ \chi'_1 &= 0.24 \tilde{l}_1 f_0^{-6/5}. \end{aligned} \quad (7.5)$$

Залежність $\chi_G^{(-)}$ від поля приведена на рис. 5.

Відношення величини сприйнятливості при $T > T_c$ та $T < T_c$ зображена на рис.6 при $s_0 = 2$ та $b/c = 0.3$.

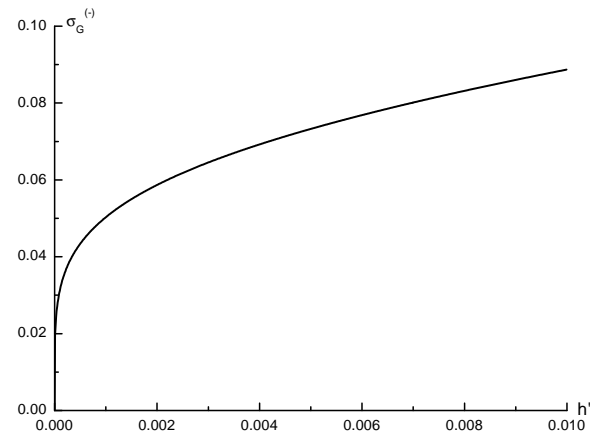


Рис. 4. Залежність величини $\sigma_G^{(-)}$ при $T < T_c$ для $s_0 = 2$, $b/c=0.3$ для граничного значення поля.

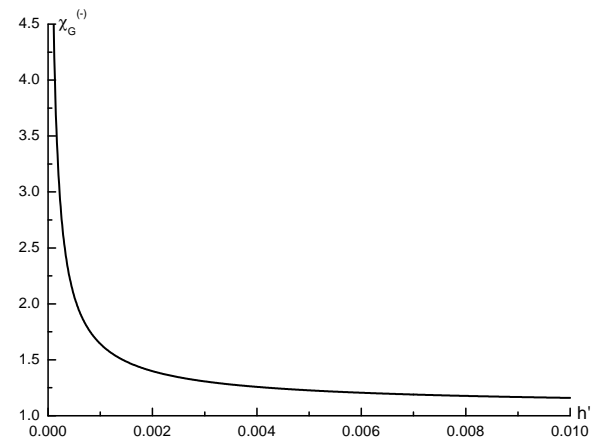


Рис. 5. Залежність величини $\chi_G^{(-)}$ при $T < T_c$ ($s_0 = 2$, $b/c=0.3$) для випадку граничного поля.

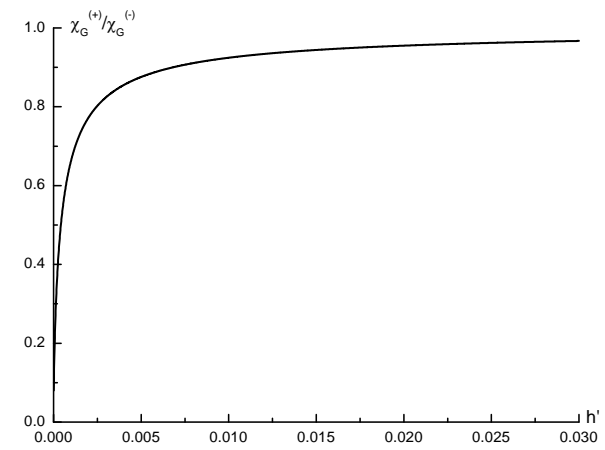


Рис. 6. Відношення сприйнятливості при $T > T_c$ та $T < T_c$ для значення $h = \tilde{h}_c$.

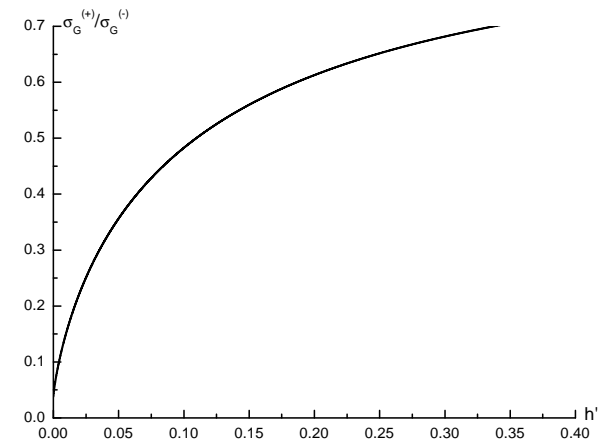


Рис. 7. Відношення величин $\sigma_G^{(+)}$ та $\sigma_G^{(-)}$ при $h = \tilde{h}_c$.

Для значень поля $h' > 0.01$ це відношення близьке до одиниці. При $h' < 0.01$ сприйнятливість системи при $T < T_c$ більша сприйнятливості при $T > T_c$ і в границі $h \rightarrow 0$ стає порядку 3. Відношення $\sigma_G^{(+)}$ до $\sigma_G^{(-)}$ зображено на рис. 7. Як видно, величина $\sigma_G^{(+)}$ індукована на полем значно менша за аналогічну величину $\sigma_G^{(-)}$ при $T < T_c$, де є додатковий вклад до середнього моменту системи, зобумовленого наявністю спонтанного моменту.

Література

1. Козловський М.П. Вплив зовнішнього поля на критичну поведінку тривимірного магнетика. I. Рекурентні співвідношення. Препринт ІСМР-02-06U, Львів, 2002, 42с.
2. Козловський М.П. Вплив зовнішнього поля на критичну поведінку тривимірного магнетика. II. Вільна енергія для випадку $T = T_c$. Препринт ІСМР-02-U, Львів, 2002, 30с.
3. Юхновський І.Р., Козловський М.П., Пилюк І.В. Мікроскопічна теорія фазових переходів у тривимірних системах. - Львів: Євросвіт, 2001. - 592с.
4. Юхновский И.Р. Фазовые переходы второго рода. Метод коллективных переменных. - Киев: Наукова думка, 1985, 224с.

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

Вплив зовнішнього поля на критичну поведінку
тривимірного магнетика. III. Вільна енергія для випадку
граничного значення поля ($h \neq 0$ та $\tau \neq 0$)

Роботу отримано 28 травня 2003 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу СТеКС

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені