НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

РОМАНІК Роман Васильович

УДК 537.6, 538.9

УЗАГАЛЬНЕНЕ РІВНЯННЯ СТАНУ ТРИВИМІРНОЇ ІЗІНГОПОДІБНОЇ МОДЕЛІ В КРИТИЧНІЙ ОБЛАСТІ

01.04.02 – теоретична фізика

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Львів – 2013

Дисертацією є рукопис.
Робота виконана в Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України.

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор **Козловський Михайло Павлович**, завідувач відділу статистичної теорії конденсованих систем Інституту фізики конденсованих систем Національної академії наук України (м. Львів)

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор **Ваврух Маркіян Васильович**, завідувач кафедри астрофізики Львівського національного університету ім. Івана Франка (м. Львів)

доктор фізико-математичних наук, професор **Лукіянець Богдан Антонович**, професор кафедри прикладної фізики і наноматеріалознавства Національного університету "Львівська політехніка" (м. Львів)

Захист відбудеться “ 25 ” вересня 2013 р. о 15 год. 30 хв. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01 при Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України за адресою:
79011 м. Львів, вул. Свєнціцького, 1.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту фізики конденсованих систем НАН України за адресою:
79026 м. Львів, вул. Козельницька, 4.

Автореферат дисертації розісланий “___” серпня 2013 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01,
кандидат фіз.-мат. наук Т.Є. Крохмальський

Актуальність теми. Розвиток аналітичних методів розрахунку фізичних величин, які описують макроскопічну поведінку (термодинаміку) багаточастинкової системи, на основі інформації про мікроскопічну структуру (гамільтоніан) є однією з фундаментальних задач рівноважної статистичної фізики. Ця задача особливо актуальна в фізиці критичних явищ, оскільки деякі величини характеризуються сингулярностями в критичній точці – точці фазового переходу другого роду (за іншою класифікацією, неперервний фазовий перехід). Важливими є першопринципні розрахунки не лише універсальних, але й неуніверсальних характеристик критичної поведінки, вивчення впливу зовнішнього поля і мікроскопічних параметрів моделі.

Універсальне рівняння стану для тривимірних моделей фазових переходів другого роду з $O(N)-$симетричним параметром порядку до цього часу викликає значний інтерес [Pelissetto A., Vicari E. *Phys. Rep.* 2002, **368**, 549; Zinn-Justin J. *Phys. Rep.* 2001, **344**, 159]. Його розрахунок із перших принципів є набагато складнішою задачею, ніж розрахунок інших універсальних величин, таких як критичні показники чи певні відношення критичних амплітуд. Причина цієї проблеми лежить в тому, що рівняння стану має відтворювати три різні асимптотичні режими в критичній області – коли система наближається до критичної точки вздовж критичної ізохори, вздовж критичної ізотерми чи вздовж кривої співіснування. Як зазначено в [O'Connor D., Santiago S., Stephens C. *J. Phys. A: Math. Theor.* 2007, **40**, 901], отримання рівняння стану зі збереженням всіх необхідних аналітичних властивостей не є можливим, якщо виходити лише з першопринципних розрахунків на основі теоретико-польового мікроскопічного гамільтоніану. На сьогоднішній день найінтенсивніше використовується параметричне представлення рівняння стану – феноменологічна "конструкція" запропонована Скофілдом [Schofield P. *Phys. Rev. Lett.* 1969, **22**, 606], що задовільняє правильну асимптотичну поведінку фізичних величин. В конкретних застосуваннях, мікроскопічна природа досліджуваної системи чи моделі використовується для фіксації певного набору вільних параметрів, що присутні в параметричному рівнянні.

Моделлю, що, напевно, найінтенсивніше вивчається в фізиці фазових переходів і критичних явищ, є модель Ізінга. Точний її розв'язок для двовимірного випадку при відсутності зовнішнього поля був знайдений Онзагером [Onsager L. *Phys. Rev.* 1944, **65**, 117]. В тривимірному випадку модель не розв'язана до сьогодні. Значний інтерес до моделі Ізінга пов'язаний з тим, що вона є прототипом фізичних систем, в яких може відбуватися неперервний фазовий перехід і які характеризуються скалярним параметром порядку. Сюди відносяться, крім уже згаданих одновісних магнетиків, також системи рідина-газ , бінарні сплави і багатокомпонентні плини, іонні і міцелярні системи поблизу відповідних критичної точок. Важливе значення ця модель має також у фізиці високих енергій. В той же час, модель Ізінга є однією з найпростіших для розуміння на рівні формулювання.

В даній роботі за допомогою аналітичних методів статистичної фізики досліджується критична поведінка тривимірної ізінгоподібної моделі в зовнішньому полі. Як математичний апарат використовується метод колективних змінних із застосуванням оригінального способу поетапного інтегрування статистичної суми, запропонованого Юхновським [Юхновский И.Р. Фазовые переходы второго рода. Метод коллективных переменных, Наукова думка, Киев, 1985]. Метод дозволяє проводити розрахунки, виходячи із гамільтоніана системи і закінчуючи повними виразами для фізичних величин; в явному вигляді одержуються як універсальні, так і неуніверсальні характеристики критичної поведінки.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконана в Інституті фізики конденсованих систем НАН України згідно з планами робіт в рамках держбюджетних тем "Аналітичні та чисельні дослідження скейлінгових властивостей та фазових переходів у багаточастинкових системах" (2008-2012 рр., номер державної реєстрації 0108U001152), "Розвиток теоретичних методів опису флюїдних, граткових та складних системи поблизу точок фазового переходу" (2013-2017 рр., номер державної реєстрації 0112U007763).

Мета і завдання дослідження. *Метою даної дисертації* є отримання явних аналітичних виразів для вільної енергії, рівняння стану та сприйнятливості ізінгоподібної моделі в критичній області як функцій температури, зовнішнього поля і мікроскопічних параметрів моделі. Для досягнення мети необхідно було виконати такі завдання: провести процедуру поетапного інтегрування функціоналу статистичної суми моделі; знайти наближений розвязок трансцендентного рівняння на умову виходу системи із критичного режиму флуктуацій параметра порядку для того, щоб отримати остаточні результати в аналітичній формі; розрахувати внески до фізичних величин від різних режимів флуктуацій; дослідити залежність отриманих остаточних виразів від їх аргументів і від мікроскопічних парметрів моделі. *Об'єктом дослідження* виступає тривимірна модель Ізінга із експонентно спадним потенціалом взаємодії в зовнішньому магнітному полі поблизу критичної точки. *Предметом дослідження* є критична поведінка, що спостерігається в моделі за наявності зовнішнього магнітного поля для таких фізичних величин, як вільна енергія, параметр порядку, сприйнятливість.

Методи дослідження. Методом дослідження є аналітичний спосіб розрахунку фізичних характеристик тривимірних систем в області їх критичності, в основі якого лежить представлення статистичної суми моделі в термінах колективних змінних і поетапне відінтегровування короткохвильових мод флуктуацій параметра порядку.

Наукова новизна отриманих результатів. Вперше отримані аналітичні вирази для вільної енергії, параметра порядку і сприйнятливості тривимірної ізінгоподібної системи поблизу критичної точки як функції температури і поля, причому температурна змінна і польова змінна входять у вирази як рівноправні величини.

Внаслідок цього не виникає потреби в розділенні полів на сильні і слабкі при виконанні аналітичних розрахунків фізичних величин.

Вперше розраховані скейлінгові функції параметра порядку і сприйнятливості в явній формі на основі виключно аналітичних методів розрахунку без використання розкладів за сильними чи слабкими полями. Проведені порівняння з результатами одержаними в рамках методу Монте-Карло і параметричного представлення рівняння стану показують добре якісне узгодження.

Вперше запропоновано новий аналітичний вираз для точки виходу як функції поля і температури і встановлено, що на його основі здійснюється адекватний опис критичної поведінки розглянутої моделі.

Вперше грунтуючись на принципах статистичної фізики запропоновано спосіб отримання некласичної форми петлі Ван дер Ваальса на площині “поле – намагніченість” і досліджено її форму. Проведені порівняння з відповідними результатами тригонометричної параметричної моделі показують добре узгодження.

Вперше запропоновано метод розрахунку та оцінено величини областей стабільності, метастабільності і нестабільності в координатах “параметр порядку – температура” в рамках наближення ρ^4- моделі.

Практичне значення одержаних результатів. Метод розрахунку статистичної суми, розвинутий в даній роботі, застосовний до дослідження різних моделей фазових переходів другого роду, що належать до класу універсальності моделі Ізінга. В рамках єдиної схеми можна розглядати системи, які перебувають одночасно в ненульових температуроподібному полі (для моделі Ізінга – відносне відхилення температури від критичного значення) і полі впорядкування (для моделі Ізінга – зовнішнє магнітне поле). При цьому не потрібно робити жодних припущень щодо величини цих полів. Такі задачі є важливими в фізиці критичних явищ і в фізиці високих енергій.

Особистий внесок здобувача. В спільних публікаціях автору дисертації належить:

- обчислення явних виразів для вільної енергії і параметра порядку для впорядкованої фази однокомпонентної спінової тривимірної системи при наявності поля, а також об’єднане представлення результатів для високо- і низькотемпературних областей [1];
- розрахунок самоузгодженого наближеного виразу для фур’є-потенціалу взаємодії і дослідження впливу мікроскопічних параметрів моделі на неуніверсальні характеристики фазових переходів [2];
- пропозиція нової аналітичної форми для точки виходу системи із критичного режиму флуктуацій параметра порядку і розрахунок термодинамічних величин моделі з використанням такої форми [2, 3];
- дослідження впливу зовнішнього поля на критичну поведінку параметра по-

рядку [3];

- узагальнення методу на випадок зміни напрямку зовнішнього поля; дослідження двофазної області розглядуваної моделі [4, 5];
- проведення порівнянь отриманих оригінальних результатів з результатами інших авторів [1, 2, 5].

Всі результати, представлені в даній дисертаційній роботі, отримані за безпосередньої участі здобувача, що полягала в виконанні розрахунків, аналізі, інтерпретації і представленні результатів.

Апробація результатів дисертації. Апробація роботи здійснена під час доповідей і обговорення результатів на семінарах відділу СТеКС і ІФКС. Результати були представлені і обговорювалися на таких міжнародних і всеукраїнських конференціях: Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики "Еврика 2009" (Львів, 20-22 травня 2009р.) [6]; III міжнародна конференція зі Статистичної фізики: "Сучасні напрямки і застосування" (Львів, 23-25 червня 2009р.) [7]; V міжнародна конференція "Фізика рідкої матерії: сучасні проблеми" (Київ, 21–24 травня 2010р.) [8]; XXXVI конференція Середньоєвропейської співпраці зі статистичної фізики (Львів, 5-7 квітня 2011р.) [9]; 11-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, 1–3 червня 2011р.) [10]; Всеукраїнська школа-семінар з кристалооптики (Львів, 29-30 серпня 2011р.) [11]; III конференція молодих науковців "Сучасні проблеми теоретичної фізики" (Київ, 21–23 грудня 2011р.) [12]; 12-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, 30 травня – 1 червня 2012р.) [13]; II Українсько-Польсько-Литовська зустріч з фізики сегнетоелектриків (Львів, 9–13 вересня, 2012р.) [14]; Всеукраїнська наукова конференція "Актуальні проблеми теоретичної, експериментальної та прикладної фізики" (Тернопіль, 20–22 вересня 2012р.) [15]; 13-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, 5 – 7 червня 2013р.) [16].

Публікації. Результати, представлені в дисертаційній роботі, були опубліковані у п'яти статтях [1–5] у реферованих, фахових журналах, трьох препринтах [17–19] і в збірках тез та матеріалів одинадцяти міжнародних та всеукраїнських конференцій [6–16].

Структура та об'єм дисертації. Дисертація складається зі вступу, огляду літератури, трьох основних розділів, які висвітлюють результати досліджень проведених дисертантом, висновків і списку цитованих літературних джерел, до якого входить 121 посилання. Робота викладена на 110 сторінках (з врахуванням переліку посилань – 126 сторінок). Дисертація містить 25 рисунків і 4 таблиці.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** сформульована мета роботи, наукове і практичне значення роботи, обгрунтовано її актуальність. Стисло переданий зміст оригінальної частини і визначений особистий внесок здобувача в даній роботі.

У першому розділі представлено короткий зміст ідей, які привели до формування сучасної теорії критичних явищ, сформульовано гіпотези скейлінгу і універсальності, схематично представлено метод ренормалізаційної групи; проведено огляд результатів отриманих для систем, які належать до класу універсальності тривимірної моделі Ізінга.

У **другому** розділі досліджено термодинаміку тривимірної ізінгоподібної моделі у впорядкованій фазі поблизу критичної точки за допомогою аналітичного методу, який раніше був застосований до опису невпорядкованої фази. Тому, перша частина розділу присвячена висвітленню основних моментів використаного методу.

В *підрозділі* 2.1 вводиться строге означення моделі Ізінга. Зазвичай, в літературі під терміном модель Ізінга розуміється система однокомпонентних спінів у вузлах гратки, з взаємодією найближчих сусідів. В даній роботі, по-перше, досліджується система спінів з експонентно-спадним потенціалом взаємодії, для фур'є-образу якого використовуються ще додаткові наближення. По-друге, для точного представлення статистичної суми моделі в термінах колективних змінних як кумулянтного ряду за цими змінними, обмежуємося лише членами до четвертого степеня. Ці наближення приводять до дещо модифікованої моделі, для якої в роботі використовується термін ізінгоподібна модель, і яка є об'єктом дослідження даної дисертації.

Вихідною точкою проведених в роботі розрахунків є гамільтоніан моделі Ізінга в зовнішньому полі

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{l},\mathbf{j}} \Phi(r_{\mathbf{lj}})\sigma_{\mathbf{l}}\sigma_{\mathbf{j}} - h'\sum_{\mathbf{l}} \sigma_{\mathbf{l}}, \tag{1}$$

де $\Phi(r_{\mathbf{lj}})$ – потенціал короткосяжної взаємодії між спінами, які розміщені у вузлах $\mathbf{l}$ і $\mathbf{j}$ кристалічної (в даній роботі – простої кубічної) гратки, $r_{\mathbf{lj}} = |\mathbf{l}-\mathbf{j}|$ – відстань між цими вузлами. Величина $\sigma_{\mathbf{l}}$ відповідає власним значенням оператора проекції спіна на вісь z і приймає значення ± 1. За напрамок осі z обрано напрямок однорідного зовнішнього магнітного поля $\mathcal{H}$, $h' = \mu_{\mathrm{B}}\mathcal{H}$, де μ_{B} – магнетон Бора. В термінах колективних змінних статистична сума моделі приймає наступний вигляд

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H} = \int \exp\,(\sqrt{N} h\rho_0 + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\in\mathcal{B}} \beta\tilde{\Phi}(k)\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}})\mathcal{J}(\rho)(\mathrm{d}\rho)^N, \tag{2}$$

де $\mathcal{J}(\rho)$ – якобіан переходу до колективних змінних $\rho_{\mathbf{k}}$, $\beta = (k_{\mathrm{B}}T)^{-1}$ – обернена температура, N – кількість вузлів гратки, $\tilde{\Phi}(k)$ – фур'є-образ потенціала взаємодії.

Сумування проводиться за всіма значеннями хвильового вектора $\mathbf{k}$ в межах першої зони Брілюена $\mathcal{B}$. Розрахунок якобіана не проводиться в роботі явно, оскільки був виконаний раніше в працях інших авторів. Приймаючи до уваги ці результати, в *підрозділі* 2.2 записується вихідний функціональний вираз для статистичної суми

$$\begin{aligned} Z &= j_0 Z_0 \int (\mathrm{d}\rho)^{N_0} \exp\left\{ \sqrt{N_0} a_1 \rho_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, k<B_0} d(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \right. \\ & \left. - \frac{a_4}{4!} \frac{1}{N_0} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \ldots, \mathbf{k}_4 \\ k_i \le B_0}} \rho_{\mathbf{k}_1} \ldots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \ldots + \mathbf{k}_4} \right\}, \end{aligned} \tag{3}$$

де j_0 і Z_0 – величини, які залежать лише від параметрів моделі. На цьому етапі зроблено перехід до сферичного наближення для зони Брілюена так, що хвильовий вектор змінюється в межах сфери радіуса B_0 оберненого простору. Величина $d(k)$ включає в себе фурє-образ потенціалу взаємодії $\tilde{\Phi}(k)$

$$d(k) = \tilde{a}_2 - \beta \tilde{\Phi}(k), \tag{4}$$

де $\tilde{a}_2 = a_2 + \Phi_0$, причому для $\tilde{\Phi}(k)$ приймається параболічна форма в області малих значень хвильового вектора, а в області великих значень – деяке усереднене значення Φ_0. Для коефіцієнтів a_n справедливі такі наближені вирази

$$a_1 = s_0^{d/2} h, \qquad a_2 = 1 - s_0^{-d}, \qquad a_4 = 2 s_0^{-d}, \tag{5}$$

де розмірність простору $d = 3$. Параметр s_0 визначає межі застосування параболічної апроксимації для $\tilde{\Phi}(k)$. В другому розділі фіксується значення $s_0 = 2$.

Розрахунок статистичної суми (3) здійснюється з використанням методу Юхновського поетапного інтегрування за підпросторами колективних змінних починаючи з великих значень хвильового вектора. Після кожного етапу інтегрування кількість ще невідінтегрованих змінних зменшується в s разів, де s – так званий параметр ренормалізаційної групи. В результаті приходимо до наступного виразу для статистичної суми

$$Z = Z_0 [Q(d)]^{N_0} \left(\prod_{n=1}^{n'_p} Q_n \right) Z_{IGR}. \tag{6}$$

Величини Q_n є парціальними статистичними сумами підпросторів колективних змінних, за якими проведено інтегрування, а величина Z_{IGR} – ще не проінтегрована частина статистичної суми. Остання величина має таку ж структуру, як і вихідний функціональний вираз (3), але з перенормованими коефіцієнтами. Поетапне інтегрування переводить початкову систему спінів в деяку ефективну блочну структуру через послідовність проміжних структур, кожна з яких характеризується своїм набором коефіцієнтів. Для коефіцієнтів двох суміжних блочних гамільтоніанів виконуються рекурентні співвідношення, які мають складну нелінійну форму і не можуть бути розв'язані аналітично, однак мають своїм частковим розв'язком нетривіальну фіксовану точку. Розглядаючи систему в критичній області, для опису її поведінки використовуються лінеаризовані поблизу фіксованої точки рекурентні співвідношення. Їх розв'язок записується у вигляді розкладів за власними значеннями матриці ренормгрупового перетворення.

В даному розділі використовуються наближення, при яких $s = s^* = 3.5977$, а для власних значень матриці лінеаризованого ренормгрупового преретворення знайдено: $E_1 = 24.551, \quad E_2 = 8.308, \quad E_3 = 0.374$. Опис моделі проводиться в околі критичної температури, яка також розраховується в рамках даного підходу. Для величини n'_p в цьому розділі використовується вираз

$$n'_p = -\frac{\ln(\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)}{2\ln E_1} - 1, \tag{7}$$

де $\tilde{h} = s_0^{3/2} h/h_0$ – перенормоване зовнішнє поле, $h_{cm} = \tau_1^{\beta\delta}$ – температуроподібне поле, $\tau_1 = -\tau \frac{c_{1k}}{f_0} E_2^{n_0}$, числові значення для констант h_0, f_0 і c_{1k} приведені в дисертаційній роботі, $\beta = 0.302$ і $\delta = 5$ – критичні показники відповідно температурної і польової поведінки параметра порядку. Тут $n_0 = n_p - n'_p$ – різниця між числовими значеннями точки виходу для $\tau > 0$ і $\tau < 0$ при відсутності поля.

В *підрозділі* 2.3, на основі рівності (6), вільна енергія системи представлена у вигляді трьох доданків

$$F = F_0 + F_{\mathrm{CR}}^{(-)} + F_{\mathrm{IGR}}, \tag{8}$$

кожен з яких відповідає внеску від певних множників в виразі для статистичної суми. Так, F_0 відповідає множнику $Z_0[Q(d)]^{N_0}$, $F_{\mathrm{CR}}^{(-)}$ – добутку n'_p парціальних статистичних сум Q_n, а F_{IGR} – множнику Z_{IGR}, внеску від інверсного гаусового режиму флуктуацій параметра порядку.

Внесок до вільної енергії від інверсного гаусового режиму флуктуацій розраховується в *підрозділі* 2.4 з використанням процедури виділення вкладу від макроскопічної частини параметра порядку. Внаслідок цього, в *підрозділі* 2.5 вільна енергія записується в такій формі

$$F^{(-)} = F_a + F_s^{(-)} + F_0^{(-)}, \tag{9}$$

де перший внесок має аналітичну залежність від температури та поля і не впливає на критичну поведінку системи. Для інших двох внесків отримані наступні вирази:

$$F_s^{(-)} = -k_{\mathrm{B}} T N \gamma_s^{(-)} (\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)^{\frac{d}{d+2}} \tag{10}$$

та

$$F_0^{(-)} = -k_{\mathrm{B}} T N (h e_0^{(-)} (\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)^{\frac{1}{2(d+2)}} - e_2^{(-)} (\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)^{\frac{d}{d+2}}). \tag{11}$$

Явні вирази для функцій γ_s, e_0 і e_2 приведені в дисертації. Тут лише варто зауважити, що всі вони не залежать окремо від температури чи поля, а є функціями одного аргументу, а саме скейлінгової змінної $\alpha = \tilde{h}/h_{cm}$.

Таким чином, знайдені вирази для вільної енергії тривимірної ізінгоподібної моделі в області нижче температури T_c фазового переходу другого роду, разом з результатами роботи [Kozlovskii M., Condens. Matter Phys., 2009, **12**, 151], де розраховано аналогічні вирази в області вище T_c, розв'язують задачу розрахунку аналітичних виразів для вільної енергії моделі в усій температурній області поблизу T_c при наявності зовнішнього поля $h \geq 0$.

В *підрозділі* 2.6 розраховується намагніченість системи на основі виразів для вільної енергії за допомогою прямого диференціювання за зовнішнім полем. Результат зводиться до наступної компактної форми

$$M = \sigma_{00}(\tilde{h}^2 + {h_c^{(\pm)}}^2)^{\frac{1}{2(d+2)}}, \tag{12}$$

де σ_{00} – скейлінгова функція параметра порядку в такому представленні, змінна $h_c^{(\pm)}$ відповідає величині h_{cm} у випадку температур нижчих за критичну, або ж величині $h_c = |\tilde{\tau}|^{\beta\delta}$ (тут $\tilde{\tau} = \tau c_{1k}/f_0$) у випадку температур вищих за критичну. Вираз (12) є рівнянням стану досліджуваної моделі. Порівняно з відомими скейлінговими формами запису рівняння стану, його форма є більш загальною, оскільки дозволяє описувати як області слабких чи сильних значень полів по відношенню до величини відносного відхилення температури від критичного значення, так і проміжну область, коли вплив польової і температурної змінних співмірний.

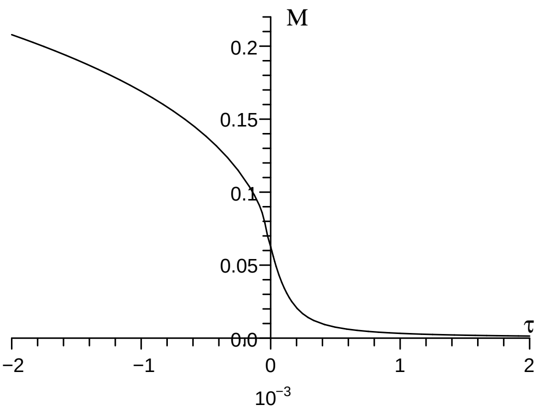

Рис. 1: Намагніченість спінової системи в зовнішньому магнітному полі як функція приведеної температури τ. Значення поля $h = 10^{-6}$, значення параметра $b/c = 0.3$.

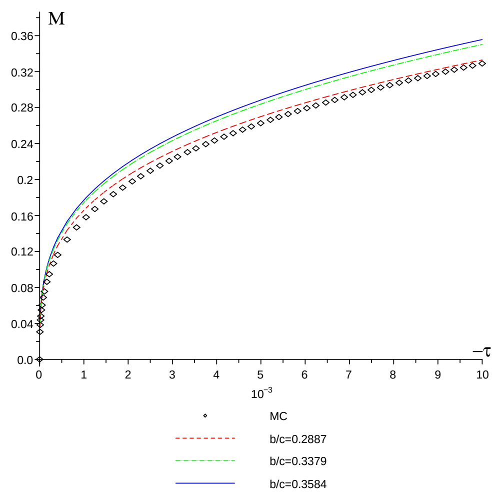

Рис. 2: Намагніченість спінової системи при відсутності зовнішнього поля для різних значень відношення b/c як функція приведеної температури τ. MC – результати роботи [Engels J., Fromme L., Seniuch M., Nuclear Physics B, 2003, **655**, 277].

На рисунку 1 показана залежність намагніченості від приведеної температури в зовнішньому полі $h = 10^{-5}$ при $b/c = 0.3$. При відсутності поля, але при різних значеннях параметра b/c намагніченість веде себе зі зміною температури так, як це показано на рисунку 2. Тут потрібно зазначити, що зміна значення намагніченості зі зміною значення відношення ефективного радіуса дії b потенціала до сталої c гратки не узгоджується, для прикладу, з результатами робіт [Luijten E., Blöte H.W.J., Binder K., Phys.Rev.E, 1996, **54**, 4626; Yukhnovskii I., Kozlovskii M., Pylyuk I., Phys.Rev.B, 2002, **66**, 134410]. Це пов'язано з неналежним врахуванням впливу мікроскопічних параметрів моделі на початкових етапах розрахунків, а саме з тим, що величина s_0, яка визначає межі застосовності параболічного наближення для фур'є-образу потенціалу міжспінової взаємодії, фіксувалася для всіх значень b/c. В наступному розділі дисертації цей недолік усунено.

В третьому розділі здійснюється розрахунок таких фізичних величин ізінгоподібної моделі, як вільна енергія, параметр порядку і сприйнятливість, використовуючи методику, описану в попередньому розділі. Основна увага приділяється отриманню і дослідженню скейлінгових функцій даних величин, а також впливу на їхні значення мікроскопічних параметрів моделі.

Особливістю даного розділу є, по-перше, те, що розрахунок параболічного наближення для фур'є-образу потенціалу взаємодії проводиться самоузгоджено, внаслідок чого параметр s_0 є функцією від відношення b/c, де b – ефективний радіус дії потенціалу, c – стала гратки. Цьому питанню присвячений *підрозділ* 3.1. Таким чином, на відміну від попереднього розділу, де s_0 просто покладався рівним деякому числу, тепер ця величина однозначно визначається параметрами моделі.

Зокрема, як наслідок самоузгодженого усереднення потенціалу взаємодії, отримується залежність намагніченості від відношення b/c, яка якісно узгоджується з результатами інших авторів. Зі зростанням числового значення цього відношення, абсолютна величина параметра порядку зменшується, чого не спостерігалося в підході з фіксованим значенням s_0.

По-друге, в *підрозділі* 3.2 для розрахунку фізичних характеристик тривимірної ізінгоподібної моделі було використано інший (в порівнянні з попереднім розділом) вираз для точки виходу

$$n_p' = -\frac{\ln(\tilde{h} + h_{cm})}{\ln E_1} - 1, \tag{13}$$

– величини, яка визначає спосіб розділення флуктуацій параметра порядку на довгохвильові і короткохвильові. Отримані повні вирази і скейлінгові функції таких величин, як вільна енергія, намагніченість і сприйнятливість. Вираз для сингулярної частини вільної енергії має форму

$$\Delta F_s = -k_B T N \left[e_0^{(\pm)} h \big(\tilde{h} + h_c^{(\pm)}\big)^{\frac{1}{\delta}} + e_4^{(\pm)} \big(\tilde{h} + h_c^{(\pm)}\big)^{\frac{d\nu}{\beta\delta}} \right], \tag{14}$$

де величини $e_0^{(\pm)}$ і $e_4^{(\pm)}$ є функціями скейлінгової змінної, а явні вирази для них приведені в дисертації. Сингулярний внесок ΔF_s відіграє вирішальну роль при визначенні поведінки системи поблизу критичної точки ($T = T_c$, $h = 0$) і є джерелом сингулярностей різних фізичних характеристик системи, що виникають в критичній точці. Рівняння для вільної енергії у формі (14) зводиться до відомих представлень степеневої поведінки вільної енергії

$$\Delta F_s = f_{st}\tau^{3\nu}, \quad \text{або} \quad \Delta F_s = f_{sh}h^{\frac{3\nu}{\beta\delta}}, \tag{15}$$

де ν – критичний показник кореляційної довжини. Для скейлінгових функцій f_{st} і f_{sh} в *пункті* 3.3.1 *підрозділу* 3.3 знайдені явні аналітичні вирази.

Вираз для параметра порядку, отриманий на основі рівняння (14) прямим диференціюванням за полем, зводиться до форми

$$M = \sigma_{00}^{(\pm)}\big(\tilde{h} + h_c^{(\pm)}\big)^{\frac{1}{\delta}}, \tag{16}$$

де σ_{00} – функція скейлінгової змінної, а явний вираз для цієї скейлінгової функції приведений в *пункті* 3.3.2 *підрозділу* 3.3. Рівняння стану (16) в граничних випадках зводиться до загальноприйнятих представлень. При відсутності зовнішнього поля, $h = 0$, ненульове значення параметра порядку існує лише при $T < T_c$ і залежить від температури як

$$M = B|\tau|^{\beta}, \tag{17}$$

де величина B називається критичною амплітудою параметра порядку і має вигляд $B = (c_{1k}E_2^{n_0}/f_0)^{\beta}\sigma_{00}^{(-)}|_{h=0}$. У випадку, коли $\tau \neq 0$, $h \neq 0$, але система знаходиться поблизу критичної точки, рівняння стану зазвичай записується в скейлінговій формі

$$M = h^{1/\delta}f_G(z). \tag{18}$$

Отримане в дисертації рівняння стану (16) має більш загальну форму і може бути природнім чином переписане у формі (18) з метою порівняння результатів для скейлінгової функції $f_{\mathrm{G}}(z)$, що отримана в даній роботі, з результатами робіт [Engels J., Fromme L., Seniuch M., Nucl. Phys. B, 2003, **655**, 277; Zinn-Justin J., Phys. Rep., 2001, **344**, 159], в яких також проводився розрахунок $f_{\mathrm{G}}(z)$. В межах розглянутого підходу, $f_{\mathrm{G}}(z)$ виражається як

$$f_G = \sigma_{00}^{(\pm)}(1 + \alpha^{-1})^{1/\delta}(s_0^{3/2}/h_0)^{1/\delta}. \tag{19}$$

На рисунку 3 приведена залежність цієї скейлінгової функції від її аргумента при різних значеннях параметра b/c.

В *пункті* 3.3.3 *підрозділу* 3.3 проведено розрахунок сприйнятливості і отримано такий вираз

$$\frac{\chi}{\beta} = \chi_{00}^{(\pm)}(\tilde{h} + h_c^{(\pm)})^{\frac{1}{\delta}-1}. \tag{20}$$

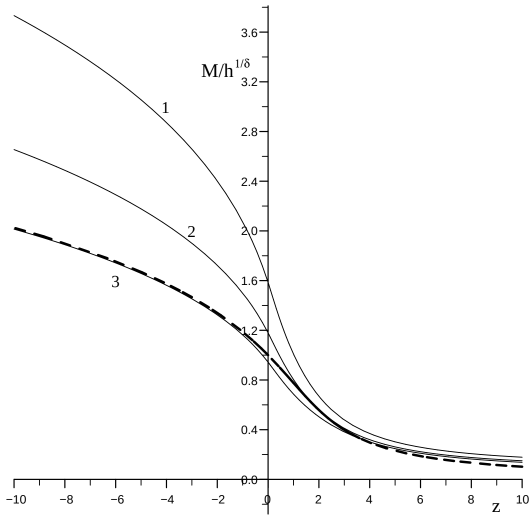

Рис. 3: Скейлінгова функція параметра порядку f_G як функція z для різних значень b/c. 1 – $b/c = 0.3$, 2 – $b/c = 0.4$, 3 – $b/c = 0.5$. Товста штрихована лінія показує параметризацію з робіт [Engels J., Fromme L., Seniuch M., Nucl. Phys. B, 2003, **655**, 277; Zinn-Justin J., Phys. Rep., 2001, **344**, 159].

Для скейлінгової функції $\chi_{00}^{(\pm)}$ в роботі знайдено явні вирази. На рисунку 4 сприйнятливість зображається графічно як функція температури при $h = 10^{-5}$.

Вираз (20) відрізняється від представлення сприйнятливості в роботах [Engels J., Fromme L., Seniuch M., Nucl. Phys. B, 2003, **655**, 277; Guida R., Zinn-Justin J., Nucl. Phys. B, 1997, **489**, 626]. В цих роботах, сприйнятливість поблизу критичної точки записувалася у формі

$$\frac{\chi}{\beta} = h^{1/\delta - 1} f_\chi(z), \tag{21}$$

де величина $f_\chi(z)$ – скейлінгова функція сприйнятливості. Для підходу, запропонованого в дисертації, f_χ приймає форму

$$f_\chi = \chi_{00}^{(\pm)} (1 + \alpha^{-1})^{1/\delta - 1} \left(\frac{s_0^{3/2}}{h_0} \right)^{1/\delta - 1}. \tag{22}$$

Порівняння результатів розрахунку скейлінгової функції для різних значень мікроскопічних параметрів приведено на рисунку 5. Тут же показано порівняння з результатами Монте Карло розрахунків.

В четвертому розділі метод, використаний в попередніх розділах, узагальнюється на випадок зміни напрямку поля на протилежний. Виділено внесок до вільної енергії системи, який дає основний вклад до параметра порядку. Цей внесок має вигляд

$$F_0^{(\pm)}(\tau, h) = -kTNE_0(\sigma_\pm), \tag{23}$$

де

$$E_0(\sigma_\pm) = h\sigma_\pm - \frac{1}{2} d_{n_p+2}(0)\sigma_\pm^2 - \frac{s_0^3 s^{3(n_p+2)}}{4!} a_4^{(n_p+2)} \sigma_\pm^4. \tag{24}$$

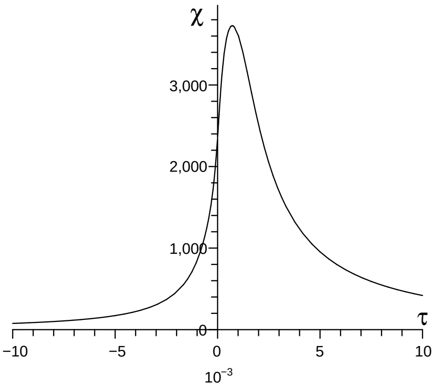

Рис. 4: Сприйнятливість як функція приведеної температури $\tau = (T - T_c)/T_c$ в сталому зовнішньому полі $h = 10^{-5}$ при $b/c = 0.4$.

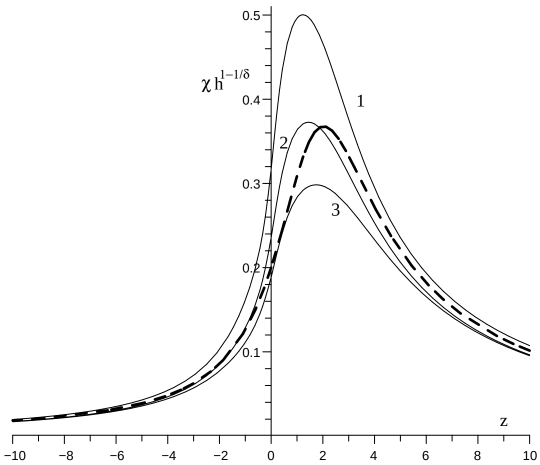

Рис. 5: Скейлінгова функція сприйнятливості f_χ як функція скейлінгової змінної $z = \tau/h^{1/\beta\delta}$: при $b/c = 0.3$ (крива 1), при $b/c = 0.4$ (крива 2) і при $b/c = 0.5$ (крива 3). Товста штрихована лінія показує параметричне представлення із [Zinn-Justin J., Phys. Rep., 2001, **344**, 159].

Величина $\sigma_\pm$ шукається з умови

$$\frac{\partial E_0(\sigma_\pm)}{\partial \sigma_\pm} = 0 \tag{25}$$

у формі

$$\sigma_\pm = \sigma_0^{(\pm)} s^{-(n_p+2)/2}. \tag{26}$$

В результаті приходимо до кубічного рівняння для $\sigma_0^{(\pm)}$

$$\sigma_0^3 + p\sigma_0 + q = 0 \tag{27}$$

з коефіцієнтами

$$\begin{aligned} p &= 6s_0^{-3} r_{n_p+2}/u_{n_p+2}, \\ q &= -6s_0^{-9/2} s^{5/2} \frac{h_0}{u_{n_p+2}} \frac{\tilde{h}}{(\tilde{h}^2 + {h_c^{(\pm)}}^2)^{1/2}}, \end{aligned} \tag{28}$$

де величини r_{n_p+2} і u_{n_p+2} знаходяться із рекурентних співвідношень. Розв'язки рівняння демонструються графічно на рисунку 6.

Встановлено, що $F_0^{(\pm)}$ є виділеним в певний спосіб внеском до вільної енергії від колективної змінної $\rho_{\mathbf{k}=0}$. Середнє значення цієї змінної, як відомо, пов'язане з параметром порядку і тому величина $F_0^{(\pm)}$ названа вільною енергією впорядкування. При відсутності зовнішнього поля, $F_0^{(\pm)}$ є аналогом вільної енергії Ландау феноменологічної теорії фазових переходів другого роду. Оскільки ми працюємо

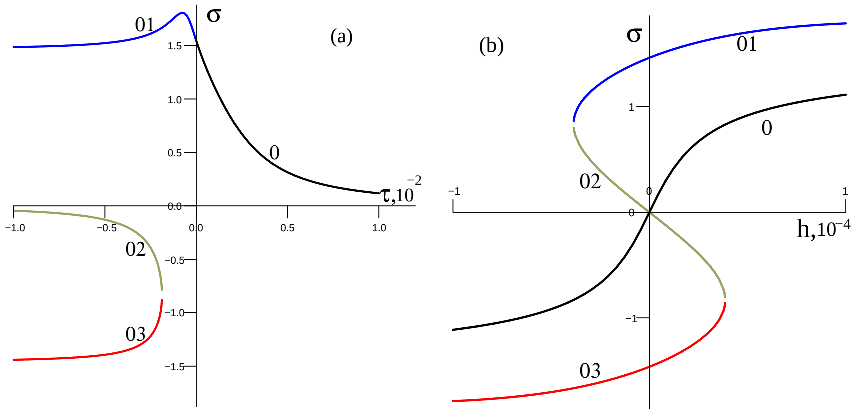

Рис. 6: Розв'язки кубічного рівняння (27) (a) як функції температури при $h = 10^{-4}$; (b) як функції поля при $\tau = \pm 10^{-3}$. Крива з позначкою "0"відповідає дійсному розв'язку при $\tau \geq 0$; Криві позначені з допомогою "01 "02 і "03"відповідають різним дійсним розв'язкам при $\tau < 0$. В зв'язку з цим, будемо позначати різні розв'язки як $\sigma_0^{(+)}$ і $\sigma_{0i}^{(-)}$ $(i = 1, 2, 3)$.

в ансамблі з N частинок (спінів), і незалежними термодинамічними змінними є магнітне поле h і температура τ, ця аналогія не є прямою. Статистичній сумі в змінних h і τ повинна відповідати вільна енергія Гіббса. Інакшими словами, термодинамічний потенціал $F(\tau, h)$, для якого "природними" змінними є поле і температура, будемо називати вільною енергією Гіббса. Якщо ж роль незалежних змінних відводиться параметру порядку (тут, намагніченість на один спін) і температурі, тоді відповідним термодинамічним потенціалом буде вільна енергія Гельмгольца. Вільна енергія Ландау є по суті вільною енергією Гельмгольца.

Отже, вираз $F_0^{(\pm)}$ є внеском до вільної енергії Гіббса. Щоб одержати мікроскопічний аналог енергії Ландау, виконується перетворення Лежандра

$$\mathcal{A}_0(\tau, M) = F_0 + M_0 \mathcal{H}, \tag{29}$$

де $M_0^{(\pm)}$ – намагніченість:

$$M_0 = -\frac{1}{N}\frac{\partial F_0}{\partial \mathcal{H}} = \frac{\partial E_0}{\partial h}, \tag{30}$$

або в явній формі:

$$\begin{aligned} M_0 = \ & (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{\frac{1}{2(d+2)}} \Bigg[e_0^{(\pm)} \left(1 + \frac{1}{5} \frac{\tilde{h}^2}{\tilde{h}^2 + {h_c^{(\pm)}}^2} \right) - \frac{6}{5} e_2^{(\pm)} \frac{s_0^{3/2}}{h_0} \frac{\tilde{h}}{(\tilde{h}^2 + {h_c^{(\pm)}}^2)^{1/2}} - \\ & - \left(\frac{\mathrm{d}e_2^{(\pm)}}{\mathrm{d}h} \right)_\sigma (\tilde{h}^2 + {h_c^{(\pm)}}^2)^{1/2} \Bigg]. \end{aligned} \tag{31}$$

Основні результати *підрозділу* 4.1 приведені на рисунках 7-9 і отримані на основі внеску $F_0^{(\pm)}$ до вільної енергії. Тут характерним є наявність так званої петлі Ван дер Ваальса в координатах "поле – намагніченість". Форма цієї петлі досліджується

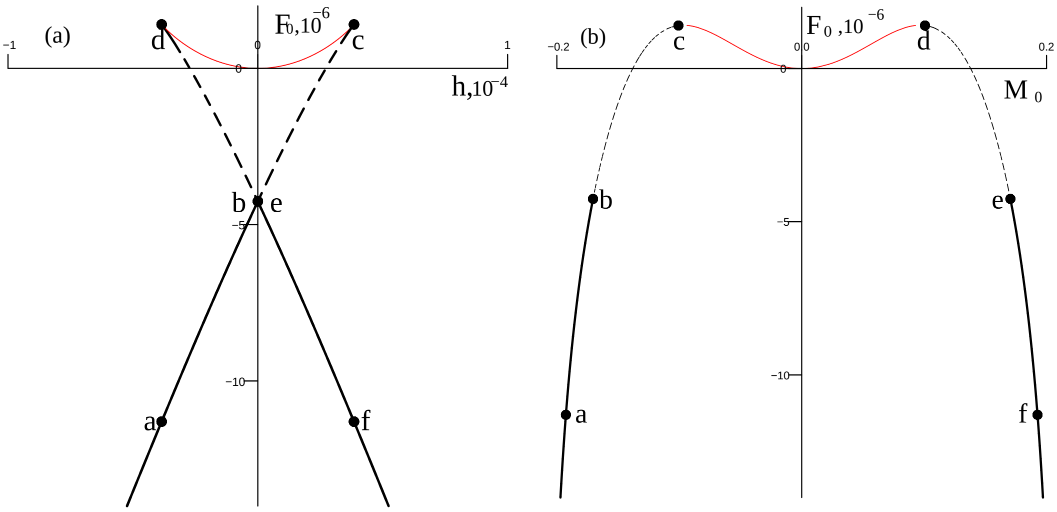

Рис. 7: Лівий графік показує польову залежність вільної енергії Гіббса $F_0^{(-)}$. На правому графіку приведена залежність $F_0^{(-)}$ від M_0. Значення енергій нормовані на $k_{\mathrm{B}}TN$. Точки a, b, c, d, e і f на графіках відповідають певним визначеним станам системи в різних координатах. Графіки побудовані при $\tau = -0.001$.

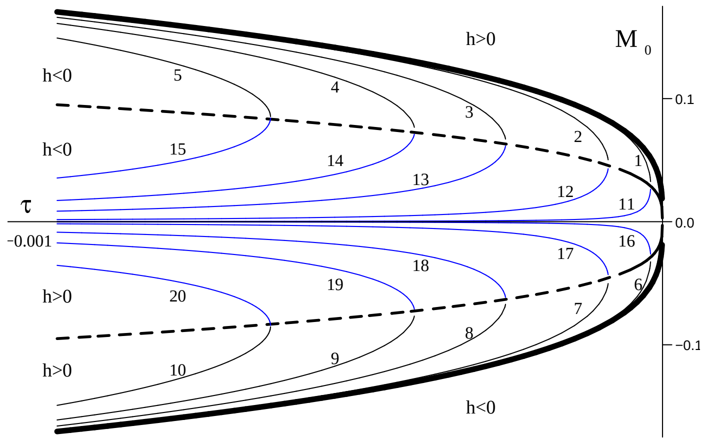

Рис. 8: Температурна залежність намагніченості розрахованої при різних розв'язках рівняння (27). Товста лінія – спонтанна намагніченість, що відповідає кривій співіснування (бінодалі). При від'ємних значеннях змінної h розв'язок σ_{01} дає криві 1-5. При додатніх значеннях h, σ_{03} дає криві 6-10. Криві 11-20, що відповідають розв'язку σ_{02}, інтерпретуються як не фізичні. Товста штрихована лінія відповідає кривій насичення (спінодалі). Для того, щоб її отримати, потрібно обчислити намагніченість, взявши при цьому розв'язок σ_{01} при $h < 0$ і $\tau_0 = \tau_0(|h|)$ (верхня вітка) або ж σ_{03} при $h > 0$ і $\tau_0 = \tau_0(h)$ (нижня вітка). Значення полів, при яких отримані приведені криві: $|h| = 0$ (крива співіснування), 10^{-7} (криві 1, 6, 11, 16), 10^{-6} (криві 2, 7, 12, 17), 5×10^{-6} (криві 3, 8, 13, 18), 10^{-5} (криві 4, 9, 14, 19), $2 \cdot 10^{-5}$ (криві 5, 10, 15, 20).

в підрозділі 4.2. Перш за все, вона є некласичною в тому сенсі, що описується некласичними значеннями критичних показників (див. Таблицю 4.2 в дисертації), на відміну від середньопольових теорій критичних явищ. На рисунку 10 приведена форма цієї кривої в перенормованих змінних

$$\tilde{M} = M/M_0(T), \qquad \tilde{H} = h/[M_0(T)/\chi_0^+(T)], \tag{32}$$

де $M_0(T)$ – спонтанна намагніченість, а $\chi_0^+(T)$ – сприйнятливість вище T_c при відсутності поля, $\chi_0^+(T) \approx C^+\tau^{-\gamma}$, де C^+ і γ – критична амплітуда і критичний показник сприйнятливості, відповідно.

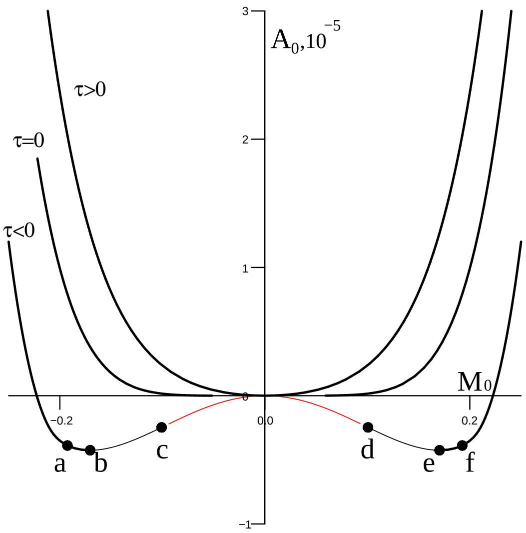

Рис. 9: Вільна енергія Гельмгольца A_0 як функція параметра порядку для трьох різних температур $T < T_c$ ($\tau = -0.001$), $T = T_c$ ($\tau = 0$), і $T > T_c$ ($\tau = 0.001$). Значення нормовані на kTN. Точки a, $b, ...$ відповідають таким самим станам, як і на рисунку 7.

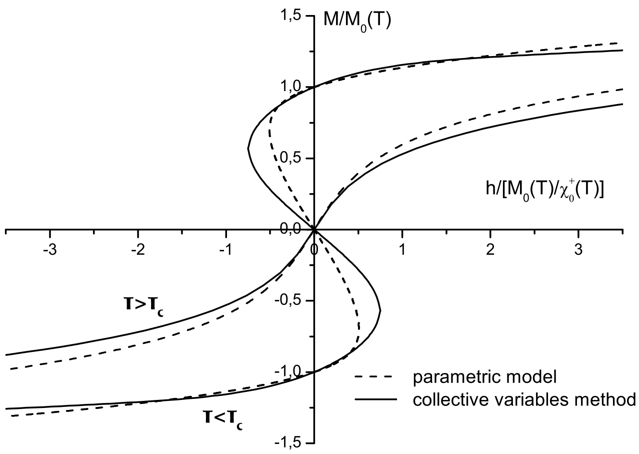

Рис. 10: Перенормована намагніченість як функція перенормованого поля. Результати приведені для двох температур – $T > T_c$ і $T < T_c$. Штрихована крива – результати одержані в рамках розширеної синус-моделі [Fisher M.E., Zinn S.-y., J.Phys A:Math.Gen., 1999, **31**, L629]. Суцільна крива – результати одержані в методі колективних змінних, рівняння (31).

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

1. В рамках мікроскопічного непертурбативного підходу отримано аналітичні вирази для вільної енергії і параметра порядку тривимірної ізінгоподібної моделі поблизу критичної точки при наявності зовнішнього поля, в яких температурна і польова змінні входять рівноправно, та досліджено вплив поля на критичну поведінку параметра порядку.
2. Запропонована узагальнена форма скейлінгового рівняння стану, яка дозволяє прямий перехід до стандартних скейлінгових форм і до двох граничних випадків: відсутності поля чи критичного значення температури.

3. Розраховано вираз для магнітної сприйнятливості системи і досліджено вплив поля на її критичну поведінку; підтверджено, що при збільшенні значення зовнішнього поля максимум сприйнятливості зміщується у високотемпературну область.
4. Побудовані скейлінгові функції для вільної енергії, параметра порядку і сприйнятливості, показано їх добре узгодження з даними числових розрахунків та результатами параметричного представлення рівняння стану.
5. Досліджено вплив мікроскопічних параметрів моделі на критичні амплітуди параметра порядку і сприйнятливості, що дозволяє встановлювати їхню залежність від радіуса ефективної дії потенціалу взаємодії.
6. На основі знайденого мікроскопічного аналога енергії Ландау, запропоновано спосіб визначення областей стабільності, метастабільності і нестійкості для ізінгоподібної моделі поблизу критичної точки в координатах "параметр порядку – температура" та побудовано криві бінодалі і спінодалі, які розділяють ці області.
7. Запропоновано спосіб отримання некласичної форми петлі Ван дер Ваальса на площині "поле – намагніченість"; для розрахованої петлі показано добре узгодження із аналогічними результатами, отриманими в рамках параметричної тригонометричної моделі критичної поведінки.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ

1. *Kozlovskii, M. P.* The equation of state of a three-dimensional Ising-like system / M. P. Kozlovskii, R. V. Romanik // *J. Phys. Stud.* — 2009. — Vol. 13, no. 4. — P. 4007.
2. *Kozlovskii, M. P.* The order parameter and susceptibility of the 3D Ising-like system in an external field near the phase transition point / M. P. Kozlovskii, R. V. Romanik // *Condens. Matter Phys.* — 2010. — Vol. 13, no. 4. — P. 43004.
3. *Kozlovskii, M.* Influence of an external field on the critical behavior of the 3D Ising-like model / M. Kozlovskii, R. Romanik // *Journal of Molecular Liquids.* — 2012. — March. — Vol. 167. — Pp. 14 – 17.
4. *Kozlovskii, M. P.* Gibbs free energy and Helmholtz free energy for a three dimensional Ising-like model / M. P. Kozlovskii, R. V. Romanik // *Condens. Matter Phys.* — 2011. — Vol. 14, no. 4. — P. 43002.
5. *Romanik, R. V.* A non-classical van der Waals loop: Collective variables method / R. V. Romanik, M. P. Kozlovskii // *Condens. Matter Phys.* — 2013. — Vol. 16, no. 1. — P. 14001.
6. *Романік, Р.* Вплив зовнішнього поля на параметер порядку 3D моделі Ізінга / Р. Романік, М. Козловський // Міжнародна конференція студентів і молодих

науковців з теоретичної та експериментальної фізики “Еврика 2009”. — Львів: 2009. — 20-22 травня.

7. *Kozlovskii, M. P.* The equation of state three dimensional Ising-like system. / M. P. Kozlovskii, R. V. Romanik // 3-th Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications. Book of abstracts. — Lviv, Ukraine: 2009. — 23-25 June. — P. 207.
8. *Kozlovskii, M. P.* Influence of an external field on the critical behavior for 3D Ising-like model / M. P. Kozlovskii, R. V. Romanik // International conference “Physics of Liquid Matter: Modern Problems”. Abstracts. — Kyiv, Ukraine: 2010. — May 21-24. — P. 131.
9. *Romanik, R. V.* The order parameter and susceptibility of a 3D Ising-like system in an external field. / R. V. Romanik, M. P. Kozlovskii // The 36-th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics. Programme and Abstracts. — Lviv, Ukraine: 2011. — 5-7 April. — P. 143.
10. *Романік, Р.* Вплив зовнішнього поля на фазовий перехід другого роду в ізінгівському магнетику. / Р. Романік, М. Козловський // 11-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. Збірка тез. — Львів: 2011. — 1-3 червня. — С. 30.
11. *Козловський, М.* Мікроскопічна теорія фазових переходів. / М. Козловський, Р. Романік // Всеукраїнська школа-семінар з кристалооптики. — Львів, Україна: 2011. — 29-30 серпня. — С. 51.
12. *Romanik, R. V.* Critical behavior of a three-dimensional Ising-like model in an external field / R. V. Romanik, M. P. Kozlovskii // III Young Scientists Conference “Modern Problems of Theoretical Physics.” Program and Abstracts. — Kyiv, Ukraine: 2011. — December 21-23. — P. 112.
13. *Романік, Р.* Петля Ван дер Ваальса в класичних і некласичних теоріях / Р. Романік, М. Козловський // 12-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. Збірка тез. — Львів: 2012. — 30 травня – 1 червня. — С. 61.
14. *Romanik, R. V.* Critical behavior of a one-component order parameter in an external field / R. V. Romanik, M. P. Kozlovskii // II Ukrainian-Polish-Lithuanian Meeting on Ferroelectrics Physics (UPL MFP-2). — Lviv, Ukraine: 2012. — 09-13 September. — P. 31.
15. *Романік, Р.* Термодинамічні функції тривимірної ізінгоподібної моделі в зовнішньому полі / Р. Романік, М. Козловський // Матеріали всеукраїнської наукової конференції “Актуальні проблеми теоретичної, експериментальної та прикладної фізики”. — Тернопіль: 2012. — 20-22 вересня. — С. 151.
16. *Романік, Р.* Непертурбативний підхід до опису критичної поведінки моделі Ізінга в зовнішньому полі / Р. Романік, М. Козловський // 13-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії

конденсованої речовини. Збірка тез. — Львів: 2013. — 5 – 7 червня. — С. 19.
17. *Kozlovskii, M. P.* The equation of state 3D Ising-like system / M. P. Kozlovskii, R. V. Romanik. — Lviv, 2009. — P. 24. — (Prepr. / National Academy of Sciences of Ukraine. Inst. for Condens. Matter Phys.; ICMP-09-07E).
18. *Kozlovskii, M. P.* Gibbs free energy and Helmholtz free energy for a three-dimensional Ising-like model / M. P. Kozlovskii, R. V. Romanik // *ArXiv e-prints.* — 2012. — February.
19. *Romanik, R. V.* A non-classical van der Waals loop: Collective variables method / R. V. Romanik, M. P. Kozlovskii // *ArXiv e-prints.* — 2012. — October.

АНОТАЦІЯ

Романік Р.В. Узагальнене рівняння стану тривимірної ізінгоподібної моделі в критичній області. — На правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 — теоретична фізика, Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України, Львів, 2013.

Дисертаційна робота присвячена дослідженню критичної поведінки тривимірної ізінгоподібної моделі (модель Ізінга з експонентно спадним потенціалом взаємодії). Використовуючи концепцію колективних змінних, метод поетапного відінтегровування короткохвильових мод флуктуацій параметра порядку і теорію ренормалізаційної групи, проводено розрахунок статистичної суми моделі з врахуванням присутності зовнішнього поля.

Розраховано явні аналітичні вирази для вільної енергії як функції температури, зовнішнього поля і мікроскопічних параметрів моделі для всієї критичної області: для температур вищих і нижчих за критичну, і для додатніх та від'ємних значень польової змінної.

Отримано рівняння стану у загальній формі, яке включає в себе, як часткові граничні випадки, степеневу поведінку параметра порядку як відносно температурної, так і відносно польової змінних. Таке представлення рівняння стану дозволяє описати три різні асимптотичні режими в критичній області – коли система наближається до критичної точки вздовж критичної ізохори, вздовж критичної ізотерми чи вздовж кривої співіснування.

Знайдено повний вираз для сприйнятливості як функції температури і поля. Проведено порівняння отриманих аналітичних результатів з результатами чисельних методів розрахунку.

Ключові слова: *модель Ізінга, критична поведінка, параметр порядку, рівняння стану, зовнішнє поле.*

АННОТАЦИЯ

Романик Р.В. Обобщенное уравнение состояния трехмерной изингоподобной модели в критической области. — На правах рукописи.
Диссертация на соискание научной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 — теоретическая физика, Институт физики конденсированных систем Национальной академии наук Украины, Львов, 2013.

Диссертация посвящена исследованию критического поведения трехмерной изингоподобной модели (модель Изинга с экспоненциально убывающим потенциалом взаимодействия). Используя концепцию коллективных переменных, метод поэтапного отинтегрирования коротковолновых мод флуктуаций параметра порядка и теорию ренормализационной группы, проведено расчет статистической суммы модели с учетом присуствия внешнего поля.

Рассчитаны явные аналитические выражения для свободной энергии как функции температуры, внешнего поля и микроскопических параметров модели во всей критической области: для температур выше и ниже критической, и для значений полевой переменной больше и меньше ноля.

Получено уравнение состояния в общей форме, которая включает в себя, в качестве частичных граничных случаев, степенное поведение параметра порядка как относительно температурной, так и относительно полевой переменной. Такое представление уравнения состояния дает возможность описывать три разные асимптотические режимы в критической области – при приближении системы к критической точке вдоль критической изохоры, вдоль критической изотермы или вдоль кривой сосуществования. Найдено полное выражение для восприимчивости как функции температуры и поля. Сделано сравнение полученных аналитических результатов с результатами чисельных методов расчета.

Ключевые слова: *модель Изинга, критическое поведение, параметр порядка, уравнение состояния, внешнее поле.*

ABSTRACT

Romanik R.V. Generalized equation of state for three-dimensional Ising-like model in criticality. — Manuscript.
Thesis submitted for the scientific degree of candidate of physical and mathematical sciences, specialization 01.04.02 — theoretical physics, Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2013.

The thesis is devoted to the investigation of the critical behaviour in three-dimensional Ising-like model (Ising model with an exponentially decreasing potential of interaction). Using the concept of collective variables, a method of step-by-step integrating over the short wave-length fluctuations of the order parameter, and the

renormalization-group theory, calculation is performed of the partition function of the model with taking into account the presence of an external field. The simplest non-Gaussian distribution of fluctuations, the so-called ρ^4-model, is used as a basic one. Peculiar feature of the calculations carried out is the analytical expression for the exit point – the quantity that determines the condition for splitting the fluctuation processes present in the system into short-wavelength and long-wavelength ones – that depends on two thermodynamic variables: temperature and field. The final expressions are valid for any value of the ratio of the field variable to temperature one.

The explicit expressions for free energy are computed as functions of temperature, the external field and microscopic parameters of the model in the whole critical region – for both temperature domains higher and lower than the critical value T_c, as well as for the values of field variable either higher or lower than zero.

The general form of the equation of state is obtained, which contains as particular cases the power behaviour of order parameter with respect to temperature variable as well as with respect to the field variable. Such a representation of the equation of state makes it possible to describe three different asymptotic regimes in the critical region by one tool – when the system is approaching the critical point along the critical isochore, along the critical isotherm, or along the coexistence curve. The effect of both the magnetic field and parameters of the model on the critical behaviour of the magnetization is studied. The scaling function of the order parameter is computed and compared with appropriate results received by numerical methods. The satisfactory agreement is observed.

The magnetic susceptibility is calculated in explicit form. The influence of both the external field and the microscopic parameters of the model on the critical behaviour of susceptibility is investigated. The scaling function of susceptibility is calculated. It is shown that the results obtained in the thesis are in accord with corresponding results of other methods.

A contribution to the whole free energy is found that is a microscopic, non-classical analog of Landau free energy. It is shown that the analog of Landau energy makes a main contribution to the order parameter of the system in the stable states. The two-phase domain of the phase diagram is investigated on the basis of the analog of Landau energy. The approach is proposed of determining the regions of stable, metastable and unstable states for the Ising-like model in the plane "order parameter – temperature" and the binodal and spinodal – the curves that separate those regions – are found. As a consequence, a non-classical van der Waals loop is obtained on the plane "field – order parameter". The universal form of the loop is constructed in terms of renormalized field and magnetization and a good qualitative agreement is shown with results of a trigonometric parametric model of critical behaviour.