

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-04-06U

М.П.Козловський, І.В.Пилюк, О.О.Притула

ТЕРМОДИНАМІЧНІ ФУНКЦІЇ ОДНОКОМПОНЕНТНОЇ
МОДЕЛІ МАГНЕТИКА ПРИ $T < T_c$ ЗА НАЯВНОСТІ
ЗОВНІШНЬОГО ПОЛЯ

УДК: 536.75; 538.9; 548:537.621; 538.955-405

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

Термодинамічні функції однокомпонентної моделі магнетика при $T < T_c$ за наявності зовнішнього поля

М.П.Козловський, І.В.Пилюк, О.О.Притула

Анотація. В областях слабких та сильних полів для $T < T_c$ обчислено внески у вільну енергію тривимірної ізінгоподібної системи від короткохвильових та довгохвильових мод коливань спінової густини. У вказаних областях полів отримано явні вирази для повної вільної енергії. В околі критичної точки досліджено поведінку середнього спінового моменту і сприйнятливості системи як функцій температури та поля. Приведені формули для ентропії та теплоємності системи у випадку сильних полів при $T < T_c$.

Thermodynamic functions of a one-component model of a magnet at $T < T_c$ in the presence of an external field

M.P.Kozlovskii, I.V.Pylyuk, O.O.Prytula

Abstract. The contributions to the free energy of a three-dimensional Ising-like system from the short- and long-wave modes of spin-density oscillations are calculated in the regions of the weak and strong fields for $T < T_c$. Explicit expressions for the total free energy are obtained in these regions. The average spin moment and the susceptibility of the system in the vicinity of the critical point are investigated as functions of the temperature and the field. The formulas for the entropy and the specific heat of the system are given in the case of strong fields at $T < T_c$.

1. Деякі основні співвідношення, характерні для областей слабких та сильних полів при $T < T_c$

Об'єктом дослідження є тривимірна однокомпонентна спінова система у зовнішньому магнітному полі. Такого типу задачі є актуальними в багатьох галузях науки, зокрема в магнітобіології, яка досліджує дію слабких магнітних полів на біосистеми [1]. Гамільтоніан, що описує такі процеси, включає деяку обмінну взаємодію спінів, які знаходяться в слабкому зовнішньому полі. Зовнішнє поле приводить до зникнення фазового переходу другого роду, однак при малих його значеннях залишаються розмиті особливості в поведінці деяких термодинамічних величин, сприйнятливості системи тощо. Саме дослідження ступеня розмиття цих величин в залежності від величини поля та близькості системи до T_c (T_c – температура фазового переходу за відсутності поля) становить предмет подальшого розгляду. Тривимірна модель в зовнішньому полі h розглядається для випадку простої кубічної ґратки та експонентно спадного потенціалу взаємодії. Ґратка характеризується періодом c , а потенціал – деякою постійною A та радіусом ефективної взаємодії b (див., наприклад, [2–4]). При малих значеннях хвильових векторів \mathbf{k} для фур'є-образу потенціалу взаємодії використана параболічна апроксимація. Для значень хвильових векторів, близьких до границі півзони Бріллюена $B = \pi/c$, фур'є-образ потенціалу береться рівним деякій незалежній від \mathbf{k} величині $\Phi_0 = \Phi(0)\bar{\Phi}$. Тут $\Phi(0) = 8\pi A(b/c)^3$ зв'язане із мікроскопічними параметрами b і c , а $\bar{\Phi}$ – постійна.

В даній роботі приведені результати розрахунку термодинамічних характеристик системи для області температур, нижчих від T_c (низькотемпературна область), тобто для малих від'ємних значень $\tilde{\tau} = c_{k1}^{(0)}\tau/f_0$, де $\tau = (T - T_c)/T_c$. Величини $c_{k1}^{(0)}$ та f_0 характеризують відповідно один із коефіцієнтів розв'язків рекурентних співвідношень та одну із координат фіксованої точки [4]. Метою дослідження є отримання і аналіз поведінки вільної енергії, середнього спінового моменту та сприйнятливості тривимірного одновісного магнетика при наближенні до критичної точки ($\tau = 0$, $h = 0$).

Розрахунки проведені в областях полів \tilde{h} , далеких від граничного значення поля \tilde{h}_c , тобто для випадків $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$ та $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$. Тут (див. [5]) $\tilde{h} = h'/f_0$, $h' = \beta h$, $\beta = (kT)^{-1}$ – обернена температура. Величина граничного поля \tilde{h}_c [5] залежить від температури і для $T < T_c$ визначається рівністю $\tilde{h}_c = \tilde{\tau}_1^{p_0}$, де $\tilde{\tau}_1 = -\tilde{\tau}$, $p_0 = (d+2)\nu/2$, d – вимірність простору (у даному випадку $d = 3$), ν – критичний показник кореляційної довжини. За наявності зовнішнього поля в

системі поблизу критичної точки для параметра порядку виникають два флуктуаційних процеси, які описуються негаусовим розподілом. Перший з них – температурний, що характеризується величиною $\mu_\tau = -\ln \tilde{\tau}_1 / \ln E_2 - 1$. Він має місце для ефективних блочних структур, розмір яких не перевищує величини $c_\mu = cs^{\mu_\tau}$ (s – параметр ренормалізаційної групи), співвимірної із кореляційною довжиною системи $\xi = \xi_0 \tilde{\tau}_1^{-\nu}$ при фіксованому значенні $\tilde{\tau}_1$. Другий флуктуаційний процес описується величиною $n_h = -\ln \tilde{h} / \ln E_1 - 1$ і має польовий характер. Величини E_l – власні значення матриці лінійного перетворення ренормалізаційної групи. В області слабких полів ($\tilde{h} < \tilde{h}_c$) поведінка системи визначається першим флуктуаційним процесом, оскільки $\mu_\tau < n_h$ [6]. При великих значеннях поля ($\tilde{h} > \tilde{h}_c$) маємо зворотню ситуацію, тобто $n_h < \mu_\tau$, і основний внесок в поведінку системи дають польові флуктуації параметра порядку.

У випадку слабких полів та нижчих від T_c температур вільну енергію досліджуваної системи N спінів можна представити у вигляді суми декількох складових (див. [6]):

$$\tilde{F} = F_0 + \tilde{F}_{\text{КР}} + \tilde{F}_p + \tilde{F}_I. \quad (1.1)$$

Тут

$$F_0 = -kTN \left(\ln 2 + \frac{1}{2}\beta\Phi(0)\bar{\Phi} + \ln \text{ch } h' \right), \quad (1.2)$$

$\tilde{F}_{\text{КР}}$ відповідає внеску у вільну енергію системи від короткохвильових мод коливань густини спінового моменту, а \tilde{F}_p та \tilde{F}_I – внескам від довгохвильових мод коливань. Методика розрахунку внесків із (1.1) детально описана в [5, 6]. Приведемо деякі співвідношення, які використовуються при отриманні виразу для \tilde{F} у явному вигляді. Їх можна записати наступним чином:

$$E_1^{\mu_\tau+1} = \tilde{\tau}_1^{-p_0}, \quad \tilde{\tau}_1 E_2^{\mu_\tau+1} = 1, \quad E_3^{\mu_\tau+1} = \tilde{\tau}_1^{-\frac{d-2}{2}\nu}, \quad (1.3)$$

$$s^{-a(\mu_\tau+1)} = \tilde{\tau}_1^{a\nu}, \quad N_{\mu_\tau+1} = N_0 \tilde{\tau}_1^{d\nu}, \quad N_0 = N s_0^{-d},$$

де величина a – це конкретне число, яке виникає під час розрахунків (наприклад, $a = 5/2, 3$). Значення параметра s_0 залежить від вигляду фур'є-образу потенціалу кожної конкретної задачі. Так, для потенціалу взаємодії найближчих сусідів $s_0 > 2$, оскільки лише для таких значень s_0 , можна вести мову про параболічну апроксимацію фур'є-образу потенціалу.

У випадку сильних полів повний вираз для вільної енергії системи у низькотемпературній області має аналогічний до (1.1) вигляд [6]

$$F_h^{(-)} = F_0 + F_{\text{КР},h} + F_{p,h} + F_{I,h}. \quad (1.4)$$

Співвідношення (1.3), які мають місце для слабких значень поля, переходять у формули

$$\begin{aligned} \tilde{h}E_1^{n_h+1} &= 1, & E_2^{n_h+1} &= \tilde{h}^{-1/p_0}, & E_3^{n_h+1} &= \tilde{h}^{-(d-2)/(d+2)}, \\ s^{-a(n_h+1)} &= \tilde{h}^{2a/(d+2)}, & N_{n_h+1} &= N_0\tilde{h}^{2d/(d+2)}. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Розрахуємо явні вирази для складових вільної енергії системи при $T < T_c$ у випадках $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$ та $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ (див. (1.1) та (1.4)). Зауважимо, що саме ці випадки приводять до появи при обчисленнях малих параметрів, степеневі розклади за якими дозволяють до кінця здійснити аналітичні викладки. При $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$ такою малою величиною є \tilde{h}/\tilde{h}_c , а при $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ та фіксованій температурі $-\tilde{\tau}_1\tilde{h}^{-1/p_0} = (\tilde{h}_c/\tilde{h})^{1/p_0}$. Величини \tilde{h}/\tilde{h}_c та $\tilde{\tau}_1\tilde{h}^{-1/p_0}$, рівні одиниці при $\tilde{h} = \tilde{h}_c$, поступово зменшуються в процесі віддалення від граничного значення поля \tilde{h}_c , яке розділяє слабкі та сильні поля. На відміну від роботи [6] ми не будемо вводити яких-небудь залежностей величини поля від температури. Проте при виконанні подальших обчислень скористаємося деякими результатами цієї роботи.

2. Вільна енергія, середній спіновий момент та сприйнятливість системи при $T < T_c$ в області слабких полів $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$

Для спрощення розрахунків в [6] вважалося, що область значень поля \tilde{h} залежить деяким чином від температури $\tilde{\tau}$. Зв'язок між величинами поля та температури задавався співвідношенням

$$\tilde{h} = \tilde{\tau}^{p_0(1+\Delta)} \equiv \tilde{h}_c\tilde{\tau}^{p_0\Delta}, \quad (2.1)$$

де

$$\begin{aligned} \Delta > 0 & \quad \text{при} \quad \tilde{h} < \tilde{h}_c, \\ -1 < \Delta < 0 & \quad \text{при} \quad \tilde{h} > \tilde{h}_c. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Вибираючи різні значення параметра Δ із (2.1), можна знайти вираз для вільної енергії системи як для малих, так і для великих значень поля. Такий підхід утруднював розрахунок похідних вільної енергії, оскільки на систему була накладена певна в'язь.

В даній роботі ми відмовилися від накладання на систему яких-небудь додаткових умов типу (2.1). Для кожної температури $\tilde{\tau}$ проводиться розрахунок вільної енергії системи для довільних значень поля у двох випадках: $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$ – область слабких полів та $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ – область сильних полів. При цьому величини $\tilde{\tau}$ та \tilde{h} є незалежними.

Знайдемо вільну енергію системи нижче T_c за наявності слабого поля. Вона описується виразом (1.1). Після цього перейдемо до обчислення середнього спінового моменту та сприйнятливості системи.

Розрахунок $\tilde{F}_{\text{КР}}$. Остаточна формула для внеску у вільну енергію системи від короткохвильових мод коливань спінової густини (ділянки критичного режиму)

$$\tilde{F}_{\text{КР}} = -kTN_0 \left(e_{0p} - e_{1p}\tilde{\tau}_1 + e_{2p}\tilde{\tau}_1^2 + e_{3p}\tilde{h}^2 + \tilde{e}_{4p}\tilde{\tau}_1^{3\nu} \right) \quad (2.3)$$

та вирази для її коефіцієнтів подані в [6]. Відмітимо, що до розгляду не приймалися доданки, пропорційні $\tilde{h}^2 E_3^{2(\mu_\tau+1)}$ та $\tilde{\tau}_1\tilde{h}^2$. Вони практично є зникаюче малими в силу виконання нерівностей $\tilde{h}^2 E_3^{2(\mu_\tau+1)} < \tilde{\tau}_1^{4\nu}$, $\tilde{\tau}_1\tilde{h}^2 < \tilde{\tau}_1^{5\nu+1}$.

Розрахунок \tilde{F}_p . Спосіб розрахунку внеску \tilde{F}_p у вільну енергію системи викладена в [5, 6]. Кінцевий результат має вигляд

$$\tilde{F}_p = -kTN_0\tilde{\tau}_1^{3\nu} \left[\tilde{f}_{p1} - \mu_\tau \ln s \right], \quad (2.4)$$

де коефіцієнт \tilde{f}_{p1} означений у вищевказаних роботах [5, 6], а s – параметр поділу фазового простору колективних змінних на шари (в даних обчисленнях $s = s^* = 3.3783$ (див. [3])). Зауважимо, що останній доданок із (2.4) при знаходженні сумарної вільної енергії \tilde{F} (1.1) буде компенсуватися відповідним йому членом із виразу для \tilde{F}_I .

Розрахунок \tilde{F}_I . Основою для обчислення $\tilde{F}_I = -kT \ln I_{\mu_\tau+1}$ служить вираз для величини $I_{\mu_\tau+1}$. В результаті заміни змінних $\eta_{\mathbf{k}} = \rho_{\mathbf{k}} + \tilde{\sigma}\sqrt{N}\delta_{\mathbf{k}}$ для нього отримуємо [5, 6]

$$\begin{aligned} I_{\mu_\tau+1} &= \exp[E_0(\tilde{\sigma})] \int (d\rho)^{N_{\mu_\tau+1}} \exp \left[\tilde{A}_0 N^{1/2} \rho_0 - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{\mu_\tau+1}} \tilde{d}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{3!} \tilde{b} N_{\mu_\tau+1}^{-1/2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_3 \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}_{\mu_\tau+1}}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_3} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{4!} a_4^{(\mu_\tau+1)} N_{\mu_\tau+1}^{-1} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}_{\mu_\tau+1}}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right]. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Формули для коефіцієнтів із (2.5) можна знайти у [6], а

$$E_0(\tilde{\sigma}) = N \left[a_{1m} \tilde{h} \tilde{\sigma} - \frac{1}{2} r_{\mu_\tau+1} \tilde{\tau}_1^{2\nu} \tilde{\sigma}^2 - \frac{1}{24} u_{\mu_\tau+1} s_0^3 \tilde{\tau}_1^{3\nu} \tilde{\sigma}^4 \right]. \quad (2.6)$$

Тут

$$\begin{aligned} a_{1m} &= f_0 \mathcal{M}_{20} / \mathcal{M}_2, \\ r_{\mu_\tau+1} &= -2f_0 \beta \Phi(0), \\ u_{\mu_\tau+1} &= \varphi_0 (\beta \Phi(0))^2 \left(1 - f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2}\right). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Величини, що входять в (2.7), приведені в [4, 6].

Параметр зміщення $\tilde{\sigma}$ визначаємо із умови екстремуму макроскопічної частини $E_0(\tilde{\sigma})$ гамільтоніану $(\mu_\tau + 1)$ -ої блочної структури:

$$\frac{\partial E_0(\tilde{\sigma})}{\partial \tilde{\sigma}} = 0.$$

Приходимо до рівняння

$$a_{1m} \tilde{h} - r_{\mu_\tau+1} \tilde{\tau}_1^{2\nu} \tilde{\sigma} - \frac{1}{6} u_{\mu_\tau+1} s_0^3 \tilde{\tau}_1^{3\nu} \tilde{\sigma}^3 = 0. \quad (2.8)$$

Представивши розв'язок (2.8) у вигляді

$$\tilde{\sigma} = \tilde{\sigma}_0 \tilde{\tau}_1^{\nu/2}, \quad (2.9)$$

для $\tilde{\sigma}_0$ одержуємо рівняння

$$\tilde{\sigma}_0^3 + \tilde{p} \tilde{\sigma}_0 + \tilde{q} = 0, \quad (2.10)$$

де

$$\tilde{p} = 6s_0^{-3} \frac{r_{\mu_\tau+1}}{u_{\mu_\tau+1}}, \quad \tilde{q} = -6s_0^{-3} \frac{a_{1m}}{u_{\mu_\tau+1}} \frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c}. \quad (2.11)$$

Коефіцієнт \tilde{q} при $\tilde{h} < \tilde{h}_c$ є малим, а $\tilde{p} < 0$. Як показують результати числових досліджень, дискримінант $Q = (\tilde{p}/3)^3 + (\tilde{q}/2)^2$ за рахунок переважальної ролі першого доданку є від'ємним. Тому існують три дійсні корені рівняння (2.10) (див., наприклад, [7]). Один із коренів

$$\tilde{\sigma}_0 = 2\sqrt{-\tilde{p}/3} \cos(\varphi/3), \quad (2.12)$$

де

$$\varphi = \arccos(-t), \quad t = \frac{1}{2} \frac{\tilde{q}}{\sqrt{-(\tilde{p}/3)^3}},$$

збільшується по модулю із ростом поля. Він і формуватиме внески у неаналітичну частину формули для середнього спінового моменту системи. Як побачимо нижче, цей корінь в даних розрахунках

співпадатиме з величиною, через яку знаходиться точка екстремуму виразу, що відповідає мікроскопічному аналогу вільної енергії Ландау. Оскільки $t \sim \tilde{h}/\tilde{h}_c$, то при $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$ ми можемо записати наближену форму для $\tilde{\sigma}_0$ (2.12), скориставшись розкладами за малою величиною t . Будемо мати

$$\tilde{\sigma}_0 = \sqrt{-\tilde{p}} \left(1 - \frac{t}{3\sqrt{3}} - \frac{t^2}{18} - \dots\right). \quad (2.13)$$

Тут

$$t = -\frac{3s_0^{3/2} a_{1m} (u_{\mu_\tau+1})^{1/2}}{2\sqrt{2} (-r_{\mu_\tau+1})^{3/2}} \frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c}.$$

З точністю до $(\tilde{h}/\tilde{h}_c)^2$ отримуємо

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_0 &= \tilde{\sigma}_0^{(0)} - \tilde{\sigma}_0^{(1)} \frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} - \tilde{\sigma}_0^{(2)} \left(\frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c}\right)^2, \\ \tilde{\sigma}_0^{(0)} &= \frac{\sqrt{6}}{s_0^{3/2}} \left(-\frac{r_{\mu_\tau+1}}{u_{\mu_\tau+1}}\right)^{1/2}, \quad \tilde{\sigma}_0^{(1)} = \frac{a_{1m}}{2r_{\mu_\tau+1}}, \\ \tilde{\sigma}_0^{(2)} &= \frac{\sqrt{6}}{16} \frac{s_0^{3/2} a_{1m}^2 (u_{\mu_\tau+1})^{1/2}}{(-r_{\mu_\tau+1})^{5/2}}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Враховуючи співвідношення (2.7), (2.9) та (2.14), представимо коефіцієнти $\tilde{d}(0) = u_{\mu_\tau+1} s_0^3 \tilde{\sigma}^2 \tilde{\tau}_1^\nu / 2 + r_{\mu_\tau+1} \tilde{\tau}_1^{2\nu}$, $\tilde{b} = u_{\mu_\tau+1} s_0^3 \tilde{\sigma} \tilde{\tau}_1^{p_0}$ із (2.5) у вигляді наступних наближених формул:

$$\begin{aligned} \tilde{d}(0) &= \tilde{D}_g f_0 \beta \Phi(0) \tilde{\tau}_1^{2\nu}, \\ \tilde{D}_g &= \tilde{D}_g^{(0)} - \tilde{D}_g^{(1)} \frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} + \tilde{D}_g^{(2)} \left(\frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c}\right)^2, \\ \tilde{D}_g^{(0)} &= \frac{1}{2} (\tilde{\sigma}_0^{(0)})^2 s_0^3 \varphi_0 f_0^{-1} \beta \Phi(0) \left(1 - f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2}\right) - 2, \\ \tilde{D}_g^{(1)} &= \tilde{\sigma}_0^{(0)} \tilde{\sigma}_0^{(1)} s_0^3 \varphi_0 f_0^{-1} \beta \Phi(0) \left(1 - f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2}\right), \\ \tilde{D}_g^{(2)} &= \frac{1}{2} \left((\tilde{\sigma}_0^{(1)})^2 - 2\tilde{\sigma}_0^{(0)} \tilde{\sigma}_0^{(2)}\right) s_0^3 \varphi_0 f_0^{-1} \beta \Phi(0) \left(1 - f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2}\right); \\ \tilde{b} &= \tilde{B}_g \varphi_0 (\beta \Phi(0))^2 s_0^{3/2} \tilde{\tau}_1^{3\nu}, \\ \tilde{B}_g &= \tilde{B}_g^{(0)} - \tilde{B}_g^{(1)} \frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} + \tilde{B}_g^{(2)} \left(\frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c}\right)^2, \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$\begin{aligned}\tilde{B}_g^{(0)} &= \tilde{\sigma}_0^{(0)} \left(1 - f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2}\right), \\ \tilde{B}_g^{(1)} &= \tilde{\sigma}_0^{(1)} \left(1 - f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2}\right), \\ \tilde{B}_g^{(2)} &= -\tilde{\sigma}_0^{(2)} \left(1 - f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2}\right).\end{aligned}$$

Коефіцієнт $\tilde{A}_0 = a_{1m} \tilde{h} - r_{\mu_\tau+1} \tilde{\tau}_1^{2\nu} \tilde{\sigma} - u_{\mu_\tau+1} s_0^3 \tilde{\tau}_1^\nu \tilde{\sigma}^3 / 6$ із (2.5) відповідно до (2.8) задовільняє рівності $\tilde{A}_0 = 0$. Підставляючи в (2.6) наближений вираз для $\tilde{\sigma}$, можна також знайти наближений вигляд $E_0(\tilde{\sigma})$.

Наближене співвідношення

$$\tilde{d}(0) \approx 4f_0 \beta \Phi(0) \tilde{\tau}_1^{2\nu},$$

яке одержується в границі $\tilde{h}/\tilde{h}_c \rightarrow 0$, свідчить, що $\tilde{d}(0)$, а відповідно, і $\tilde{d}(k) = \tilde{d}(0) + 2\beta\Phi(0)b^2k^2$ є додатніми. Виконаємо в (2.5) інтегрування за змінними ρ_k із $k \neq 0$, використовуючи гаусовий розподіл флуктуацій як базисний¹ (нульове наближення при $k \neq 0$). Виділяючи в (2.5) доданки з $k = 0$ і здійснюючи інтегрування за ρ_k із $k \neq 0$, знаходимо

$$I_{\mu_\tau+1} = \exp[E_0(\tilde{\sigma})] \prod_{k \neq 0}^{B_{\mu_\tau+1}} \left(\pi/\tilde{d}(k)\right)^{1/2} I_{\mu_\tau+1}^{(0)}. \quad (2.16)$$

Тут

$$\begin{aligned}I_{\mu_\tau+1}^{(0)} &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\rho_0 \exp \left[-\frac{1}{2} \tilde{d}(0) \rho_0^2 - \frac{1}{3!} \tilde{b} N_{\mu_\tau+1}^{-1/2} \rho_0^3 - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{4!} a_4^{(\mu_\tau+1)} N_{\mu_\tau+1}^{-1} \rho_0^4 \right].\end{aligned} \quad (2.17)$$

Заміною змінної

$$\rho_0 = \eta_0 - \tilde{\sigma} \sqrt{N} \quad (2.18)$$

¹Числовий результат при $\tilde{h}/\tilde{h}_c \rightarrow 0$

$$\begin{aligned}\sqrt{6} \frac{\tilde{d}(0, B_{\mu_\tau+1})}{(a_4^{(\mu_\tau+1)})^{1/2}} &= \sqrt{6} \frac{4f_0 + \pi^2(b/c)^2 s_0^{-2}}{\varphi_0^{1/2} (1 - f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2})^{1/2}} = 8.393, \\ \frac{24^{3/4}}{6} \frac{\tilde{b}}{(a_4^{(\mu_\tau+1)})^{3/4}} &= \frac{24^{3/4}}{3^{1/2}} \frac{f_0^{1/2}}{\varphi_0^{1/4} (1 - f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2})^{1/4}} = 5.225\end{aligned}$$

вказує на велике значення коефіцієнта квадратичного доданка в (2.5) порівняно з коефіцієнтами інших доданків, що забезпечує числову близькість результатів інтегрування в четвірному та гаусовому наближеннях.

ліквідуємо кубічний член у виразі для $I_{\mu_\tau+1}^{(0)}$. Отримуємо

$$\begin{aligned}I_{\mu_\tau+1} &= \prod_{k \neq 0}^{B_{\mu_\tau+1}} \left(\pi/\tilde{d}(k)\right)^{1/2} \int \exp \left[a_{1m} N^{1/2} \tilde{h} \eta_0 - \frac{1}{2} d_{\mu_\tau+1}(0) \eta_0^2 - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{4!} a_4^{(\mu_\tau+1)} N_{\mu_\tau+1}^{-1} \eta_0^4 \right] d\eta_0.\end{aligned} \quad (2.19)$$

Коефіцієнт a_{1m} заданий в (2.7), а $d_{\mu_\tau+1}(0) = s^{-2(\mu_\tau+1)} r_{\mu_\tau+1}$, $a_4^{(\mu_\tau+1)} = s^{-4(\mu_\tau+1)} u_{\mu_\tau+1}$. Покладаючи

$$\eta_0 = \sqrt{N} \eta, \quad (2.20)$$

приходимо до формули

$$I_{\mu_\tau+1} = \prod_{k \neq 0}^{B_{\mu_\tau+1}} \left(\pi/\tilde{d}(k)\right)^{1/2} \sqrt{N} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-NE(\eta)} d\eta, \quad (2.21)$$

де вираз

$$E(\eta) = -a_{1m} \tilde{h} \eta + \frac{1}{2} d_{\mu_\tau+1}(0) \eta^2 + \frac{1}{24} a_4^{(\mu_\tau+1)} N N_{\mu_\tau+1}^{-1} \eta^4 \quad (2.22)$$

відповідає мікроскопічному аналогу вільної енергії Ландау. Завдяки множнику N в показнику експоненти підінтегральний вираз в (2.21) має різкий максимум в точці $\bar{\eta}$, яка відповідає рівноважному значенню параметра порядку.

Із умови екстремуму

$$\frac{\partial E(\eta)}{\partial \eta} = 0$$

одержуємо наступне кубічне рівняння для величини $\bar{\eta}$:

$$a_{1m} \tilde{h} - d_{\mu_\tau+1}(0) \bar{\eta} - \frac{1}{6} a_4^{(\mu_\tau+1)} N N_{\mu_\tau+1}^{-1} \bar{\eta}^3 = 0. \quad (2.23)$$

Запис його розв'язку у вигляді

$$\bar{\eta} = \bar{\eta}_0 \tilde{\tau}_1^{\nu/2} \quad (2.24)$$

приводить до такого ж рівняння для $\bar{\eta}_0$ (з такими ж коефіцієнтами), як і для $\tilde{\sigma}_0$ (2.10). Величина $\bar{\eta}_0$ задовільнятиме виразу

$$\bar{\eta}_0 = \bar{\eta}_0^{(0)} - \bar{\eta}_0^{(1)} \frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} - \bar{\eta}_0^{(2)} \left(\frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} \right)^2, \quad (2.25)$$

де коефіцієнти $\bar{\eta}_0^{(l)}$ ($l = 0, 1, 2$) задаються такими ж співвідношеннями, що й $\tilde{\sigma}_0^{(l)}$ (див. (2.14)), відповідно. Вирази для величин $\bar{\eta}$ та $\tilde{\sigma}$ також співпадають.

З використанням методу перевалу [8] для (2.21) будемо мати

$$I_{\mu_\tau+1} = \sqrt{\frac{2\pi}{E''(\bar{\eta})}} e^{-NE(\bar{\eta})} \prod_{k \neq 0}^{B_{\mu_\tau+1}} \left(\pi / \tilde{d}(k) \right)^{1/2}. \quad (2.26)$$

Вираз для показника експоненти $E_0(\bar{\eta}) = -NE(\bar{\eta})$ у (2.26) набуває вигляду

$$E_0(\bar{\eta}) = N \left[a_{1m} \tilde{h} \bar{\eta} - \frac{1}{2} d_{\mu_\tau+1}(0) \bar{\eta}^2 - \frac{1}{24} a_4^{(\mu_\tau+1)} N N_{\mu_\tau+1}^{-1} \bar{\eta}^4 \right] \quad (2.27)$$

або, інакше,

$$\begin{aligned} E_0(\bar{\eta}) &= N \left[\tilde{E}_{00} \tilde{\tau}_1^{3\nu} + a_{1m} \tilde{h} \bar{\eta} \right], \quad (2.28) \\ \tilde{E}_{00} &= -\frac{1}{2} r_{\mu_\tau+1} \bar{\eta}_0^2 - \frac{1}{24} u_{\mu_\tau+1} s_0^3 \bar{\eta}_0^4. \end{aligned}$$

Наближені обчислення для \tilde{E}_{00} приводять до наступного результату:

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{00} &= \tilde{E}_{00}^{(0)} - \tilde{E}_{00}^{(1)} \frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} - \tilde{E}_{00}^{(2)} \left(\frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} \right)^2, \\ \tilde{E}_{00}^{(0)} &= -\frac{1}{2} r_{\mu_\tau+1} (\bar{\eta}_0^{(0)})^2 - \frac{1}{24} u_{\mu_\tau+1} s_0^3 (\bar{\eta}_0^{(0)})^4, \\ \tilde{E}_{00}^{(1)} &= -\bar{\eta}_0^{(0)} \bar{\eta}_0^{(1)} \left[r_{\mu_\tau+1} + \frac{1}{6} u_{\mu_\tau+1} s_0^3 (\bar{\eta}_0^{(0)})^2 \right], \quad (2.29) \\ \tilde{E}_{00}^{(2)} &= \frac{1}{2} \left[r_{\mu_\tau+1} \left((\bar{\eta}_0^{(1)})^2 - 2\bar{\eta}_0^{(0)} \bar{\eta}_0^{(2)} \right) + \frac{1}{3} u_{\mu_\tau+1} s_0^3 (\bar{\eta}_0^{(0)})^2 \times \right. \\ &\quad \left. \times \left(\frac{3}{2} (\bar{\eta}_0^{(1)})^2 - \bar{\eta}_0^{(0)} \bar{\eta}_0^{(2)} \right) \right]. \end{aligned}$$

Розклади $\bar{\eta}_0$ (2.25) та \tilde{E}_{00} (2.29) за \tilde{h}/\tilde{h}_c дають можливість явно виділити польову залежність у $E_0(\bar{\eta})$ із (2.28).

Повернемось до розрахунку \tilde{F}_I . Маємо

$$\tilde{F}_I = -kT E_0(\bar{\eta}) - \frac{1}{2} kT N_0 \ln \pi \tilde{\tau}_1^{3\nu} + kT N \tilde{E}_{03}. \quad (2.30)$$

Використовуючи методику розрахунку із [4, 5], для

$$\tilde{E}_{03} = \frac{1}{2} \frac{1}{N} \sum_{k \neq 0}^{B_{\mu_\tau+1}} \ln \tilde{d}(k)$$

знаходимо співвідношення (див. [6])

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{03} &= \frac{1}{2} s_0^{-3} \tilde{I}_0 \tilde{\tau}_1^{3\nu}, \\ \tilde{I}_0 &= -2(\mu_\tau + 1) \ln s + \tilde{I}'_0, \quad (2.31) \\ \tilde{I}'_0 &= \ln(D_{0\mu} + D_{1\mu}) - \frac{2}{3} + 2 \frac{D_{0\mu}}{D_{1\mu}} - 2 \left(\frac{D_{0\mu}}{D_{1\mu}} \right)^{3/2} \arctg \left(\frac{D_{1\mu}}{D_{0\mu}} \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

Тут

$$D_{0\mu} = r_{\mu_\tau+1} + \frac{1}{2} \tilde{\sigma}_0^2 u_{\mu_\tau+1} s_0^3,$$

а вираз

$$D_{1\mu} = 2\beta\Phi(0) s_0^{-2} \pi^2 (b/c)^2$$

співпадає із приведеним в [6]. Величини $D_{0\mu}$ та \tilde{I}'_0 зобразимо у вигляді рядів за степенями відношення \tilde{h}/\tilde{h}_c . З врахуванням квадратичних доданків для них запишемо

$$\begin{aligned} D_{0\mu} &= D_{0\mu}^{(0)} - D_{0\mu}^{(1)} \frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} + D_{0\mu}^{(2)} \left(\frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} \right)^2, \\ D_{0\mu}^{(0)} &= \tilde{D}_g^{(0)} f_0 \beta \Phi(0), \quad D_{0\mu}^{(1)} = \tilde{D}_g^{(1)} f_0 \beta \Phi(0), \quad D_{0\mu}^{(2)} = \tilde{D}_g^{(2)} f_0 \beta \Phi(0); \\ \tilde{I}'_0 &= \tilde{I}'_{00} - \tilde{I}'_{01} \frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} + \tilde{I}'_{02} \left(\frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} \right)^2, \quad (2.32) \\ \tilde{I}'_{00} &= \ln(D_{0\mu}^{(0)} + D_{1\mu}) - \frac{2}{3} + 2 \frac{D_{0\mu}^{(0)}}{D_{1\mu}} - 2 \left(\frac{D_{0\mu}^{(0)}}{D_{1\mu}} \right)^{3/2} \times \\ &\quad \times \arctg \left(\frac{D_{1\mu}}{D_{0\mu}^{(0)}} \right)^{1/2}, \\ \tilde{I}'_{01} &= 3 \frac{D_{0\mu}^{(1)}}{D_{1\mu}} \left[1 - \left(\frac{D_{0\mu}^{(0)}}{D_{1\mu}} \right)^{1/2} \arctg \left(\frac{D_{1\mu}}{D_{0\mu}^{(0)}} \right)^{1/2} \right], \\ \tilde{I}'_{02} &= \frac{3}{D_{1\mu}} \left[\frac{(D_{0\mu}^{(1)})^2}{4(D_{0\mu}^{(0)} + D_{1\mu})} + D_{0\mu}^{(2)} - \frac{1}{D_{1\mu}^{1/2}} \left(\frac{(D_{0\mu}^{(1)})^2}{4(D_{0\mu}^{(0)})^{1/2}} + \right. \right. \end{aligned}$$

$$+(D_{0\mu}^{(0)})^{1/2} D_{0\mu}^{(2)} \left[\operatorname{arctg} \left(\frac{D_{1\mu}}{D_{0\mu}^{(0)}} \right)^{1/2} \right].$$

Використовуючи означені в (2.28) та (2.31) величини $E_0(\bar{\eta})$ та \tilde{E}_{03} , для \tilde{F}_I (2.30) отримуємо

$$\begin{aligned} \tilde{F}_I &= -kTN \left[\tilde{E}_{02\mu} \tilde{\tau}_1^{3\nu} + a_{1m} \tilde{h} \bar{\eta} \right] + kTN s_0^{-3} \tilde{\tau}_1^{3\nu} \times \\ &\times \left(\frac{1}{2} \tilde{I}'_0 - (\mu_\tau + 1) \ln s \right), \end{aligned} \quad (2.33)$$

де

$$\tilde{E}_{02\mu} = \tilde{E}_{00} + \tilde{E}_{01}, \quad \tilde{E}_{01} = \frac{1}{2} s_0^{-3} \ln \pi. \quad (2.34)$$

Коефіцієнт $\tilde{E}_{02\mu}$ задовільняє наближеному виразу

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{02\mu} &= \tilde{E}_{02\mu}^{(0)} - \tilde{E}_{02\mu}^{(1)} \frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} - \tilde{E}_{02\mu}^{(2)} \left(\frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} \right)^2, \\ \tilde{E}_{02\mu}^{(0)} &= \tilde{E}_{00}^{(0)} + \frac{1}{2} s_0^{-3} \ln \pi, \\ \tilde{E}_{02\mu}^{(1)} &= \tilde{E}_{00}^{(1)}, \quad \tilde{E}_{02\mu}^{(2)} = \tilde{E}_{00}^{(2)}. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Формулу (2.33) можна переписати у наступному вигляді:

$$\tilde{F}_I = -kTN \left[\tilde{E}_{022} \tilde{\tau}_1^{3\nu} + a_{1m} \tilde{h} \bar{\eta} \right] - kTN_0 \tilde{\tau}_1^{3\nu} \mu_\tau \ln s. \quad (2.36)$$

Тут для позначення

$$\tilde{E}_{022} = \tilde{E}_{02\mu} + \left(\ln s - \frac{1}{2} \tilde{I}'_0 \right) s_0^{-3} \quad (2.37)$$

справедливе наближене представлення

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{022} &= \tilde{E}_{022}^{(0)} - \tilde{E}_{022}^{(1)} \frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} - \tilde{E}_{022}^{(2)} \left(\frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} \right)^2, \\ \tilde{E}_{022}^{(0)} &= \tilde{E}_{02\mu}^{(0)} + \left(\ln s - \frac{1}{2} \tilde{I}'_{00} \right) s_0^{-3}, \\ \tilde{E}_{022}^{(1)} &= \tilde{E}_{02\mu}^{(1)} - \frac{1}{2} \tilde{I}'_{01} s_0^{-3}, \\ \tilde{E}_{022}^{(2)} &= \tilde{E}_{02\mu}^{(2)} + \frac{1}{2} \tilde{I}'_{02} s_0^{-3}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Повний вираз для вільної енергії системи. Сумуючи внески (1.2), (2.3), (2.4) та (2.36), одержуємо вільну енергію системи поблизу критичної точки в слабких полях $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$ при температурах $T < T_c$. Будемо мати

$$\begin{aligned} \tilde{F} &= -kTN \left[\ln \operatorname{ch} h' + l_0 + l_{1\mu} \tilde{\tau}_1^{3\nu} + l_{11\mu} \tilde{\tau}_1^{3\nu} \frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} + \right. \\ &\left. + l_{12\mu} \tilde{\tau}_1^{3\nu} \left(\frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} \right)^2 + l_2 \tilde{h}^2 - l_3 \tilde{\tau}_1 + l_4 \tilde{\tau}_1^2 \right], \end{aligned} \quad (2.39)$$

де

$$\begin{aligned} l_0 &= \ln 2 + \frac{1}{2} \beta_c \Phi(0) \bar{\Phi} + s_0^{-3} e_{0p}, \\ l_{1\mu} &= \tilde{E}_{022}^{(0)} + s_0^{-3} (\tilde{e}_{4p} + \tilde{f}_{p1}), \\ l_{11\mu} &= a_{1m} \bar{\eta}_0^{(0)} - \tilde{E}_{022}^{(1)}, \quad l_{12\mu} = -a_{1m} \bar{\eta}_0^{(1)} - \tilde{E}_{022}^{(2)}, \\ l_2 &= s_0^{-3} e_{3p}, \quad l_3 = s_0^{-3} e_{1p} - \frac{1}{2} \beta_c \Phi(0) \bar{\Phi} f_0 / c_{k1}^{(0)}, \\ l_4 &= s_0^{-3} e_{2p} + \frac{1}{2} \beta_c \Phi(0) \bar{\Phi} f_0^2 / (c_{k1}^{(0)})^2. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Для набору параметрів $s_0 = 2$, $b/c = 0.3$, $\bar{\Phi} = 0.05$ знаходимо

$$\begin{aligned} l_0 &= 0.835, & l_{1\mu} &= 0.148, \\ l_{11\mu} &= 0.430, & l_{12\mu} &= 0.043, \\ l_2 &= -0.045, & l_3 &= -0.067, & l_4 &= -0.001. \end{aligned}$$

Середній спіновий момент та сприйнятливість системи. Середній спіновий момент

$$\sigma^{(-)} = -\frac{1}{N} \left(\frac{\partial \tilde{F}}{\partial h} \right)_T$$

та сприйнятливість на одну частинку

$$\chi^{(-)} = -\frac{1}{N} \left(\frac{\partial^2 \tilde{F}}{\partial h^2} \right)_T = \left(\frac{\partial \sigma^{(-)}}{\partial h} \right)_T$$

можна обчислити, враховуючи (2.39).

При $T < T_c$ та $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$ середній спіновий момент поблизу критичної точки задається виразом

$$\sigma^{(-)} = \text{th } h' + \sigma_0 h' + \sigma_1^{(-)} \tilde{\tau}_1^{\nu/2} + \sigma_2^{(-)} \tilde{\tau}_1^{\nu/2} \frac{h'}{\tilde{h}_c}, \quad (2.41)$$

$$\sigma_0 = 2l_2 f_0^{-2}, \quad \sigma_1^{(-)} = l_{11\mu} f_0^{-1}, \quad \sigma_2^{(-)} = 2l_{12\mu} f_0^{-2}.$$

Два перші доданки у (2.41) є малими в порівнянні із третім та четвертим доданками. Третій член відповідає спонтанному моменту системи (при $h' = 0$ маємо $\sigma^{(-)} = \sigma_1^{(-)} \tilde{\tau}_1^{\nu/2}$), а четвертий – моменту, індукованому полем h' . Два останні доданки із $\sigma^{(-)}$ (2.41) формуються за рахунок виділення та врахування польової залежності у $I_{\mu\tau+1}$ (2.26), зокрема для $\tilde{\eta}$ (див. (2.24), (2.25)), $E_0(\tilde{\eta})$ ((2.28), (2.29)) та \tilde{E}_{03} ((2.31), (2.32)). Врахування тільки екстремального значення $\tilde{\eta}$ підінтегрального виразу для $I_{\mu\tau+1}$ приводить до появи у третьому та четвертому доданках із $\sigma^{(-)}$ (2.41) внесків лише від $E_0(\tilde{\eta})$.

Сприйнятливість з явно виділеною температурною та польовою залежністю набуває вигляду

$$\chi^{(-)} = \beta \left[1 - \text{th}^2 h' + \chi_0 + \chi_1^{(-)} \tilde{\tau}_1^{-\gamma} \right], \quad (2.42)$$

$$\gamma = 2\nu, \quad \chi_0 = \sigma_0, \quad \chi_1^{(-)} = \sigma_2^{(-)}.$$

Результати розрахунків в області слабких полів $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$ при $T > T_c$ (див. [9]) та $T < T_c$ (дана робота) дозволяють побудувати в цій області графіки польових залежностей середнього спінового моменту та сприйнятливості системи для різних значень τ (рис. 1 та 2).

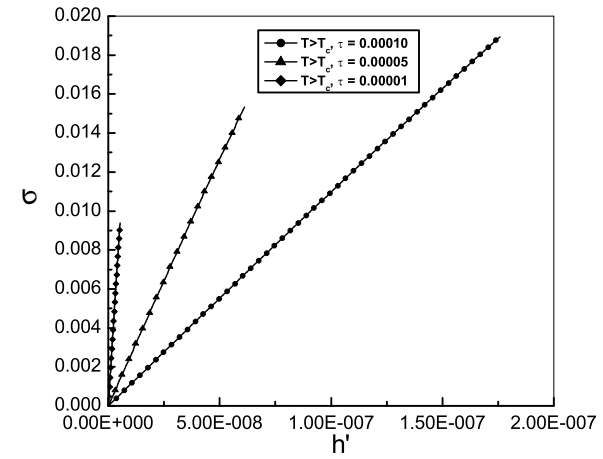
Відношення основних критичних амплітуд для сприйнятливості системи при $T > T_c$ та $T < T_c$ у випадку $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$ приймає наступне значення:

$$\frac{\chi_1^{(+)}}{\chi_1^{(-)}} = \frac{l_{12T}}{l_{12\mu}} \approx 5.85.$$

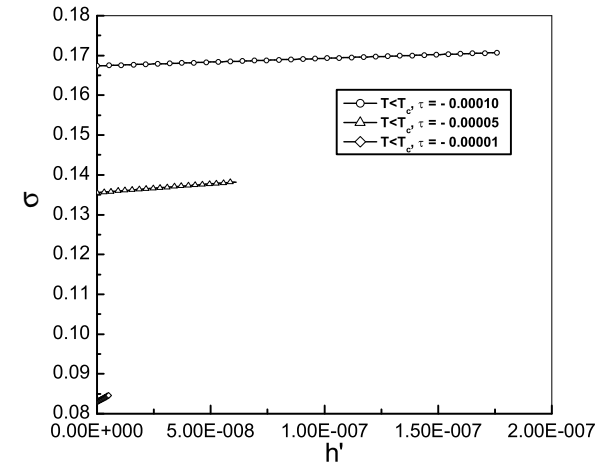
Воно не залежить від мікроскопічних параметрів системи ($\tilde{\Phi}, b/c$).

3. Вільна енергія, середній спіновий момент та сприйнятливість системи при $T < T_c$ в області сильних полів $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$

Розрахуємо вираз (1.4) для вільної енергії системи при $T < T_c$ у випадку сильних (в порівнянні із граничним значенням \tilde{h}_c) полів.

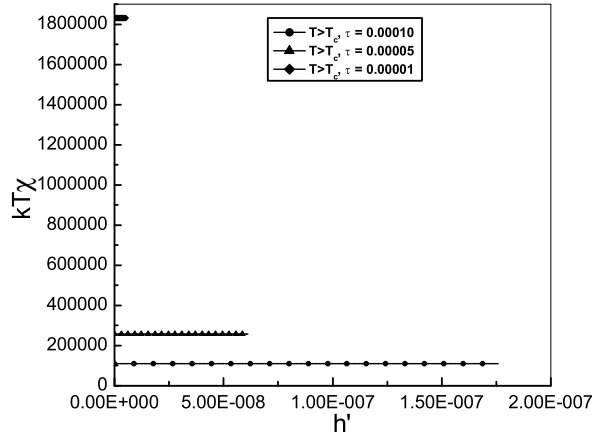


a

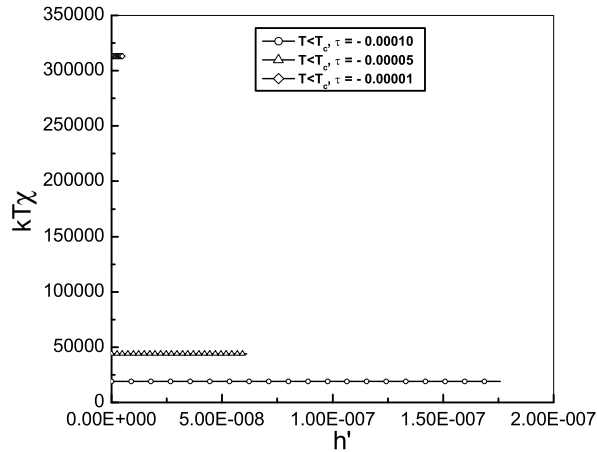


b

Рис. 1. Залежність середнього спінового моменту системи від h' при $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$ для різних значень τ . Розглянуто випадки: а – високотемпературної ($\tau > 0$) та б – низькотемпературної ($\tau < 0$) областей.



а



b

Рис. 2. Польова залежність ($\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$) сприйнятливості системи для різних значень температур із областей: а – $T > T_c$ та б – $T < T_c$.

Проміжна область значень полів $\tilde{h} \approx \tilde{h}_c$ потребує більш детального дослідження і буде предметом окремої роботи.

Розрахунок $F_{\text{КР},h}$. Величина F_0 із (1.4) задана в (1.2). Для $F_{\text{КР},h}$ справедливе співвідношення [6]

$$F_{\text{КР},h} = -kT \ln Q_0 + F'_{\text{КР},h}, \quad (3.1)$$

де

$$F'_{\text{КР},h} = F_{\text{КР},h}^{(0)} + F_{\text{КР},2h} + F_{\text{КР},3h}. \quad (3.2)$$

Вирази для трьох доданків правої частини останньої рівності з врахуванням (1.5) приймають вигляд

$$\begin{aligned} F_{\text{КР},h}^{(0)} &= -kTN_0 \left(F_{10}s^{-3} - F_{10}\tilde{h}^{6/5} \right), \\ F_{\text{КР},2h} &= -kTN_0 \left[F_{11}s^{-3}E_2\tilde{\tau} + F_{12}s^{-3}E_2^2\tilde{\tau}^2 + \right. \\ &\quad \left. + \tilde{h}^{6/5} (F_{11}\varphi_h - F_{12}\varphi_h^2) \right], \\ F_{\text{КР},3h} &= -kTN_0 F_{13}s^{-3}E_3^2\tilde{h}^2. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Тут, як і у [9], введено позначення

$$\varphi_h = \tilde{\tau}_1 \tilde{h}^{-1/p_0} = (\tilde{h}_c/\tilde{h})^{1/p_0}. \quad (3.4)$$

В результаті знаходимо

$$\begin{aligned} F_{\text{КР},h} &= -kTN_0 \left[e_{0p} - e_{1p}\tilde{\tau}_1 + e_{2p}\tilde{\tau}_1^2 + e_{3p}\tilde{h}^2 - \right. \\ &\quad \left. - \tilde{h}^{6/5} (F_{10} - F_{11}\varphi_h + F_{12}\varphi_h^2) \right]. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Коефіцієнти, що входять до складу (3.3) та (3.5), задовільняють тим же виразам і приймають такі ж значення, що й у випадку слабких полів при $T > T_c$ (див., наприклад, [6]).

Розрахунок $F_{p,h}$. Відповідно до результатів роботи [6] маємо

$$F_{p,h} = -kTN_0 s^{-3(n_h+1)} \left(f_{p_0} + \frac{1}{4} \ln a_4^{(n_h)} + H_{211} h_2^{(n_h)} \right), \quad (3.6)$$

де $a_4^{(n_h)} = s^{-4n_h} u_{n_h}$, $h_2^{(n_h)} = \sqrt{6}(r_{n_h} + q)(u_{n_h})^{-1/2}$, величина q означена в [3, 4], f_{p_0} – в [6], а H_{211} – в [4, 6]. Вирази для r_{n_h} та u_{n_h} отримуються на основі розв'язків рекурентних співвідношень [4–6]. Для них знаходимо

$$\begin{aligned} r_{n_h} &= r^* (1 + E_2^{-1} \varphi_h), \\ u_{n_h} &= u^* (1 - f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} E_2^{-1} \varphi_h), \\ r^* &= -f_0 \beta \Phi(0), \quad u^* = \varphi_0 (\beta \Phi(0))^2. \end{aligned} \quad (3.7)$$

При розрахунку $h_2^{(n_h)}$ та $\ln a_4^{(n_h)}$ скористаємось степеневими розкладами за малою величиною $E_2^{-1}\varphi_h$. Тоді для $h_2^{(n_h)}$ будемо мати

$$h_2^{(n_h)} = -h_{22}f_0E_2^{-1}\varphi_h \left(1 + \frac{1}{2}f_0T_{42}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}E_2^{-1}\varphi_h \right),$$

$$h_{22} = \sqrt{6}\varphi_0^{-1/2}, \quad (3.8)$$

а $F_{p,h}$ визначатиметься згідно формули [9]

$$F_{p,h} = -kTN_0\tilde{h}^{6/5} [f_{p1c} - n_h \ln s - f_{p11c}\varphi_h - f_{p12c}\varphi_h^2]. \quad (3.9)$$

Тут

$$f_{p1c} = f_{p0} + \frac{1}{4} \ln u^*,$$

$$f_{p11c} = f_0\varphi_0^{-1/2}E_2^{-1} \left(\frac{1}{4}T_{42}^{(0)} + \sqrt{6}H_{211} \right), \quad (3.10)$$

$$f_{p12c} = \frac{1}{2} \left(f_0\varphi_0^{-1/2}E_2^{-1} \right)^2 T_{42}^{(0)} \left(\frac{1}{4}T_{42}^{(0)} + \sqrt{6}H_{211} \right).$$

Розрахунок $F_{I,h}$. При $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ та $T < T_c$ величина I_{n_h+1} із виразу для внеску у вільну енергію $F_{I,h} = -kT \ln I_{n_h+1}$ визначається аналогічною до випадку сильних полів та $T > T_c$ формулою (див. [6,9]) з наступними коефіцієнтами:

$$\tilde{a}_1^{(n_h+1)} = -c_{h1}f_0\tilde{h}^{2/5},$$

$$d_{n_h+1}(k) = d_{n_h+1}(0) + 2\beta\Phi(0)b^2k^2,$$

$$d_{n_h+1}(0) = r^*(1 + \varphi_h)\tilde{h}^{4/5}, \quad (3.11)$$

$$a_4^{(n_h+1)} = u^* \left(1 - f_0T_{42}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}\varphi_h \right) \tilde{h}^{8/5}.$$

Відмітимо, що $-\tilde{a}_1^{(n_h+1)}N_{n_h+1}^{1/2} = a_{1m}N^{1/2}\tilde{h}$, де a_{1m} приведено в (2.7). Здійснюючи заміну змінних $\rho_{\mathbf{k}} = \eta_{\mathbf{k}} + \sigma_h\sqrt{N}\delta_{\mathbf{k}}$, для I_{n_h+1} одержуємо

$$I_{n_h+1} = \exp[E_0(\sigma_n)] \int (d\eta)^{N_{n_h+1}} \exp \left[A_0N^{1/2}\eta_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{n_h+1}} d_h(k) \times \right.$$

$$\left. \times \eta_{\mathbf{k}}\eta_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{3!}b_hN_{n_h+1}^{-1/2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_3 \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}_{n_h+1}}} \eta_{\mathbf{k}_1} \dots \eta_{\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_3} - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{4!}a_hN_{n_h+1}^{-1} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}_{n_h+1}}} \eta_{\mathbf{k}_1} \dots \eta_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right]. \quad (3.12)$$

Перенормовані коефіцієнти A_0 , $d_h(k)$, b_h та a_h , що входять в (3.12), визначені в [6], а

$$E_0(\sigma_h) = N \left[a_{1m}\tilde{h}\sigma_h - \frac{1}{2}d_{n_h+1}(0)\sigma_h^2 - \frac{1}{24}a_4^{(n_h+1)}\sigma_h^4 NN_{n_h+1}^{-1} \right]. \quad (3.13)$$

Величину зміщення σ_h можна знайти із рівняння

$$\frac{\partial E_0(\sigma_h)}{\partial \sigma_h} = 0$$

або

$$a_{1m}\tilde{h} - d_{n_h+1}(0)\sigma_h - \frac{1}{6}a_4^{(n_h+1)}\sigma_h^3 NN_{n_h+1}^{-1} = 0. \quad (3.14)$$

Записуючи розв'язок (3.14) у вигляді

$$\sigma_h = \sigma_0\tilde{h}^{1/\delta}, \quad (3.15)$$

де $\delta = (d+2)/(d-2)$, приходимо до рівняння

$$\sigma_0^3 + p\sigma_0 + q = 0. \quad (3.16)$$

Тут

$$p = \frac{R_1}{R_3}, \quad q = \frac{R_0}{R_3},$$

$$R_0 = a_{1m}, \quad R_1 = f_0\beta\Phi(0)(1 + \varphi_h), \quad (3.17)$$

$$R_3 = -\frac{1}{6}\varphi_0(\beta\Phi(0)^2s_0^3(1 - f_0T_{42}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}\varphi_h)).$$

Як свідчать результати числових досліджень, при $\tilde{h} \geq 1.54\tilde{h}_c$ рівняння (3.16) має один дійсний та два комплексно спряжених корені (дискримінант рівняння додатний)². Дійсний корінь задовільняє виразу [7]

$$\sigma_0 = A + B,$$

$$A = \sqrt[3]{-\frac{1}{2}q + \sqrt{Q}}, \quad B = \sqrt[3]{-\frac{1}{2}q - \sqrt{Q}}, \quad (3.18)$$

$$Q = \left(\frac{p}{3}\right)^3 + \left(\frac{q}{2}\right)^2.$$

²В області полів $\tilde{h}_c \leq \tilde{h} < 1.54\tilde{h}_c$ рівняння (3.16) має три дійсних корені (дискримінант від'ємний). У випадку $\tilde{h}_c \leq \tilde{h} < 1.54\tilde{h}_c$ для обчислення кореня, зв'язаного із середнім спіновим моментом, можна використати подібну до (2.12) формулу. Однак, ми не можемо скористатись у вищевказаній області значень \tilde{h} наближеним співвідношенням для цього кореня (аналогічним до (2.13)), оскільки тут величина $t = q/(2\sqrt{-(p/3)^3})$ по модулю є порядку одиниці (не мала) і недоцільно проводити розклади за нею. Наприклад, для $\tilde{h} = 1.3h_c$ і $\tau = -0.0001$ отримуємо $t \approx -0.925$.

Вважаючи $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$, представимо корінь σ_0 (3.18) у вигляді ряду за степенями малої величини φ_h . Для коефіцієнтів p і q із (3.17) з точністю до φ_h^2 знаходимо

$$\begin{aligned} p &= p^{(0)}(1 + p^{(1)}\varphi_h + p^{(2)}\varphi_h^2), \\ p^{(0)} &= -\frac{6f_0}{\varphi_0\beta\Phi(0)s_0^3}, \quad p^{(1)} = 1 + f_0T_{42}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}, \\ p^{(2)} &= f_0T_{42}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}(1 + f_0T_{42}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}); \\ q &= q^{(0)}(1 + q^{(1)}\varphi_h + q^{(2)}\varphi_h^2), \\ q^{(0)} &= -\frac{6a_{1m}}{\varphi_0(\beta\Phi(0))^2s_0^3}, \quad q^{(1)} = f_0T_{42}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}, \\ q^{(2)} &= (f_0T_{42}^{(0)}\varphi_0^{-1/2})^2. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Дискримінант Q із (3.18) визначається згідно формули

$$\begin{aligned} Q &= Q^{(0)} + Q^{(1)}\varphi_h + Q^{(2)}\varphi_h^2, \\ Q^{(0)} &= \frac{1}{27}(p^{(0)})^3 + \frac{1}{4}(q^{(0)})^2, \\ Q^{(1)} &= \frac{1}{9}(p^{(0)})^3p^{(1)} + \frac{1}{2}(q^{(0)})^2q^{(1)}, \\ Q^{(2)} &= \frac{1}{9}(p^{(0)})^3 \left[(p^{(1)})^2 + p^{(2)} \right] + \frac{1}{4}(q^{(0)})^2 \left[(q^{(1)})^2 + 2q^{(2)} \right]. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Остаточний наближений вираз для σ_0 набуває вигляду

$$\begin{aligned} \sigma_0 &= \sigma_0^{(0)} - \sigma_0^{(1)}\varphi_h - \sigma_0^{(2)}\varphi_h^2, \\ \sigma_0^{(0)} &= (A^{(0)})^{1/3} + (B^{(0)})^{1/3}, \\ \sigma_0^{(1)} &= \frac{1}{6(A^{(0)})^{2/3}}A^{(1)} + \frac{1}{6(B^{(0)})^{2/3}}B^{(1)}, \\ \sigma_0^{(2)} &= \frac{1}{6(A^{(0)})^{2/3}}A^{(2)} + \frac{1}{36(A^{(0)})^{5/3}}(A^{(1)})^2 + \\ &\quad + \frac{1}{6(B^{(0)})^{2/3}}B^{(2)} + \frac{1}{36(B^{(0)})^{5/3}}(B^{(1)})^2; \\ A^{(0)} &= -\frac{1}{2}q^{(0)} + (Q^{(0)})^{1/2}, \\ B^{(0)} &= -\frac{1}{2}q^{(0)} - (Q^{(0)})^{1/2}, \\ A^{(1)} &= q^{(0)}q^{(1)} - \frac{Q^{(1)}}{(Q^{(0)})^{1/2}}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

$$\begin{aligned} B^{(1)} &= q^{(0)}q^{(1)} + \frac{Q^{(1)}}{(Q^{(0)})^{1/2}}, \\ A^{(2)} &= q^{(0)}q^{(2)} - \frac{Q^{(2)}}{(Q^{(0)})^{1/2}} + \frac{1}{4}\frac{(Q^{(1)})^2}{(Q^{(0)})^{3/2}}, \\ B^{(2)} &= q^{(0)}q^{(2)} + \frac{Q^{(2)}}{(Q^{(0)})^{1/2}} - \frac{1}{4}\frac{(Q^{(1)})^2}{(Q^{(0)})^{3/2}}. \end{aligned}$$

Використовуючи наближене співвідношення для σ_0 (3.21), можна одержати розклади для коефіцієнтів $d_h(0) = d_{n_h+1}(0) + \sigma_h^2 a_4^{(n_h+1)} N \times N_{n_h+1}^{-1}/2$, $b_h = \sigma_h a_4^{(n_h+1)} (N/N_{n_h+1})^{1/2}$ із (3.12), а також для $E_0(\sigma_h)$ (3.13). Зокрема, маємо

$$\begin{aligned} d_h(0) &= D_g f_0 \beta \Phi(0) \tilde{h}^{4/5}, \\ D_g &= D_g^{(0)} - D_g^{(1)}\varphi_h + D_g^{(2)}\varphi_h^2, \\ D_g^{(0)} &= \frac{1}{2}(\sigma_0^{(0)})^2 s_0^3 \varphi_0 f_0^{-1} \beta \Phi(0) - 1, \\ D_g^{(1)} &= \sigma_0^{(0)} s_0^3 \varphi_0 f_0^{-1} \beta \Phi(0) \left(\frac{1}{2} \sigma_0^{(0)} f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} + \sigma_0^{(1)} \right) + 1, \\ D_g^{(2)} &= s_0^3 \varphi_0 f_0^{-1} \beta \Phi(0) \left[\sigma_0^{(0)} \sigma_0^{(1)} f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \left((\sigma_0^{(1)})^2 - 2\sigma_0^{(0)} \sigma_0^{(2)} \right) \right]; \end{aligned} \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} b_h &= B_g \varphi_0 (\beta \Phi(0))^2 s_0^{3/2} \tilde{h}^{6/5}, \\ B_g &= B_g^{(0)} - B_g^{(1)}\varphi_h + B_g^{(2)}\varphi_h^2, \\ B_g^{(0)} &= \sigma_0^{(0)}, \quad B_g^{(1)} = \sigma_0^{(0)} f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} + \sigma_0^{(1)}, \\ B_g^{(2)} &= \sigma_0^{(1)} f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} - \sigma_0^{(2)}. \end{aligned}$$

Підкреслимо, що коефіцієнт $A_0 = a_{1m}\tilde{h} - d_{n_h+1}(0)\sigma_h - a_4^{(n_h+1)}\sigma_h^3 N \times N_{n_h+1}^{-1}/6$ із (3.12) відповідно до (3.14) перетворюється в нуль.

Оскільки коефіцієнт квадратичного члена в (3.12) додатний і приймає великі значення порівняно з іншими коефіцієнтами, то обчислення I_{n_h+1} будемо проводити на основі гаусового розподілу флуктуацій³. Виділяючи в (3.12) доданки з $k = 0$ і здійснюючи інтегрування

³При $\tilde{h}/\tilde{h}_c \rightarrow \infty$ ($\varphi_h \rightarrow 0$), як і при $T > T_c$ [9], знаходимо

$$\sqrt{6} \frac{d_h(0, B_{n_h+1})}{a_h^{1/2}} = \sqrt{6} \left(\frac{1}{2} \varphi_0^{1/2} \beta \Phi(0) s_0^3 (\sigma_0^{(0)})^2 - f_0 \varphi_0^{-1/2} + \right.$$

за змінними η_k із $k \neq 0$ з використанням гаусової густини міри (нульове наближення), отримуємо

$$I_{n_h+1} = \exp[E_0(\sigma_h)] \prod_{k \neq 0}^{B_{n_h+1}} (\pi/d_h(k))^{1/2} I_{n_h+1}^{(0)}, \quad (3.23)$$

де

$$I_{n_h+1}^{(0)} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta_0 \exp \left[-\frac{1}{2} d_h(0) \eta_0^2 - \frac{1}{3!} b_h N_{n_h+1}^{-1/2} \eta_0^3 - \frac{a_h}{4!} N_{n_h+1}^{-1} \eta_0^4 \right]. \quad (3.24)$$

Позбудемось в експоненті підінтегральної функції із (3.24) кубічного члена, покладаючи

$$\eta_0 = \rho_0 - \sigma_h \sqrt{N}. \quad (3.25)$$

В результаті запишемо

$$I_{n_h+1} = \prod_{k \neq 0}^{B_{n_h+1}} (\pi/d_h(k))^{1/2} \int \exp \left[a_{1m} N^{1/2} \tilde{h} \rho_0 - \frac{1}{2} d_{n_h+1}(0) \rho_0^2 - \frac{1}{4!} a_4^{(n_h+1)} N_{n_h+1}^{-1} \rho_0^4 \right] d\rho_0. \quad (3.26)$$

Як і у випадку слабких полів та $T < T_c$, після заміни змінної

$$\rho_0 = \sqrt{N} \rho_h \quad (3.27)$$

та застосування при обчисленні інтегралу

$$I_{n_h+1} = \prod_{k \neq 0}^{B_{n_h+1}} (\pi/d_h(k))^{1/2} \sqrt{N} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-NE(\rho_h)} d\rho_h \quad (3.28)$$

методу перевалу, знаходимо

$$I_{n_h+1} = \sqrt{\frac{2\pi}{E''(\bar{\rho}_h)}} e^{-NE(\bar{\rho}_h)} \prod_{k \neq 0}^{B_{n_h+1}} (\pi/d_h(k))^{1/2} \cdot \left(+\pi^2 (b/c)^2 s_0^{-2} \varphi_0^{-1/2} \right) = 8.125, \quad (3.29)$$

$$\frac{24^{3/4}}{6} \frac{b_h}{a_h^{3/4}} = \frac{24^{3/4}}{6} \varphi_0^{1/4} (\beta\Phi(0))^{1/2} s_0^{3/2} \sigma_0^{(0)} = 4.692.$$

Тут $\bar{\rho}_h$ – точка екстремуму виразу

$$E(\rho_h) = -a_{1m} \tilde{h} \rho_h + \frac{1}{2} d_{n_h+1}(0) \rho_h^2 + \frac{1}{24} a_4^{(n_h+1)} N N_{n_h+1}^{-1} \rho_h^4, \quad (3.30)$$

який можна трактувати як частину вільної енергії, що зв'язана із параметром порядку. Цю точку визначаємо із умови

$$\frac{\partial E(\rho_h)}{\partial \rho_h} = 0,$$

яка приводить до рівняння

$$a_{1m} \tilde{h} - d_{n_h+1}(0) \bar{\rho}_h - \frac{1}{6} a_4^{(n_h+1)} N N_{n_h+1}^{-1} \bar{\rho}_h^3 = 0. \quad (3.31)$$

Представивши розв'язок (3.31) у вигляді

$$\bar{\rho}_h = \bar{\rho}_{h0} \tilde{h}^{1/\delta}, \quad (3.32)$$

одержуємо таке ж рівняння, як і (3.16), де роль σ_0 відіграє

$$\bar{\rho}_{h0} = \bar{\rho}_{h0}^{(0)} - \bar{\rho}_{h0}^{(1)} \varphi_h - \bar{\rho}_{h0}^{(2)} \varphi_h^2. \quad (3.33)$$

Коефіцієнти $\bar{\rho}_{h0}^{(l)}$ ($l = 0, 1, 2$) задовільняють таким же виразам, що й $\sigma_0^{(l)}$ (див. (3.21)), відповідно. Значення величин $\bar{\rho}_h$ (3.32) та σ_h (3.15) також будуть однаковими. Приймаючи до уваги (3.4) та (3.33), співвідношення для $\bar{\rho}_h$ (3.32) можна подати у вигляді явної функції $\tilde{\tau}_1$ та \tilde{h} :

$$\bar{\rho}_h = \bar{\rho}_{h0}^{(0)} \tilde{h}^{1/\delta} - \bar{\rho}_{h0}^{(1)} \tilde{\tau}_1 \tilde{h}^{1/\delta-1/p_0} - \bar{\rho}_{h0}^{(2)} \tilde{\tau}_1^2 \tilde{h}^{1/\delta-2/p_0}.$$

Запишемо наближений вираз для показника експоненти $E_0(\bar{\rho}_h) = -NE(\bar{\rho}_h)$ у (3.29). Для цього скористаємось формулою

$$E_0(\bar{\rho}_h) = N E_{00} \tilde{h}^{6/5}, \quad (3.34)$$

$$E_{00} = a_{1m} \bar{\rho}_{h0} + \frac{1}{2} f_0 \beta \Phi(0) (1 + \varphi_h) \bar{\rho}_{h0}^2 - \frac{1}{24} s_0^3 \varphi_0 (\beta \Phi(0))^2 \left(1 - f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} \varphi_h \right) \bar{\rho}_{h0}^4,$$

отриману на основі (3.30) з врахуванням (3.11) та (3.32). Підставляючи у E_{00} із (3.34) розклад (3.33), будемо мати

$$E_{00} = E_{00}^{(0)} - E_{00}^{(1)} \varphi_h - E_{00}^{(2)} \varphi_h^2,$$

$$\begin{aligned}
E_{00}^{(0)} &= a_{1m}\bar{\rho}_{h0}^{(0)} + \frac{1}{2}f_0\beta\Phi(0)(\bar{\rho}_{h0}^{(0)})^2 - \frac{1}{24}s_0^3\varphi_0(\beta\Phi(0))^2(\bar{\rho}_{h0}^{(0)})^4, \\
E_{00}^{(1)} &= a_{1m}\bar{\rho}_{h0}^{(1)} + f_0\beta\Phi(0)\bar{\rho}_{h0}^{(0)}\left(\bar{\rho}_{h0}^{(1)} - \frac{1}{2}\bar{\rho}_{h0}^{(0)}\right) - \\
&\quad - \frac{1}{6}s_0^3\varphi_0(\beta\Phi(0))^2(\bar{\rho}_{h0}^{(0)})^3\left(\bar{\rho}_{h0}^{(1)} + \frac{1}{4}\bar{\rho}_{h0}^{(0)}f_0T_{42}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}\right), \quad (3.35) \\
E_{00}^{(2)} &= a_{1m}\bar{\rho}_{h0}^{(2)} - f_0\beta\Phi(0)\left[\frac{1}{2}\left((\bar{\rho}_{h0}^{(1)})^2 - 2\bar{\rho}_{h0}^{(0)}\bar{\rho}_{h0}^{(2)}\right) - \right. \\
&\quad \left. - \bar{\rho}_{h0}^{(0)}\bar{\rho}_{h0}^{(1)}\right] + \frac{1}{6}s_0^3\varphi_0(\beta\Phi(0))^2(\bar{\rho}_{h0}^{(0)})^2\left[\frac{3}{2}(\bar{\rho}_{h0}^{(1)})^2 - \bar{\rho}_{h0}^{(0)}\bar{\rho}_{h0}^{(2)} + \right. \\
&\quad \left. + f_0T_{42}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}\bar{\rho}_{h0}^{(0)}\bar{\rho}_{h0}^{(1)}\right].
\end{aligned}$$

Внесок у вільну енергію $F_{I,h}$ із (1.4) з використанням (3.29) тепер набуває вигляду

$$F_{I,h} = -kTNE_{02}\tilde{h}^{6/5} + kTNE_{03}, \quad (3.36)$$

де

$$E_{02} = E_{00} + \frac{1}{2}s_0^{-3}\ln\pi. \quad (3.37)$$

Для E_{02} при $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ справедливе наступне співвідношення:

$$\begin{aligned}
E_{02} &= E_{02}^{(0)} - E_{02}^{(1)}\varphi_h - E_{02}^{(2)}\varphi_h^2, \quad (3.38) \\
E_{02}^{(0)} &= E_{00}^{(0)} + \frac{1}{2}s_0^{-3}\ln\pi, \quad E_{02}^{(1)} = E_{00}^{(1)}, \quad E_{02}^{(2)} = E_{00}^{(2)}.
\end{aligned}$$

Величину

$$E_{03} = \frac{1}{2}\frac{1}{N}\sum_{k \neq 0}^{B_{n_h+1}} \ln d_h(k)$$

обчислюємо відповідно до методики із [4, 5]. Одержуємо [6]

$$\begin{aligned}
E_{03} &= \frac{1}{2}s_0^{-3}I_0\tilde{h}^{6/5}, \\
I_0 &= -2(n_h + 1)\ln s + I'_0, \quad (3.39) \\
I'_0 &= \ln(D_0 + D_1) - \frac{2}{3} + 2\frac{D_0}{D_1} - 2\left(\frac{D_0}{D_1}\right)^{3/2}\arctg\left(\frac{D_1}{D_0}\right)^{1/2}.
\end{aligned}$$

Відмітимо, що

$$D_0 = \frac{1}{2}s_0^3\sigma_0^2\varphi_0(\beta\Phi(0))^2\left(1 - f_0T_{42}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}\varphi_h\right) - f_0\beta\Phi(0)(1 + \varphi_h),$$

а D_1 визначається згідно поданої в [6, 9] формули

$$D_1 = 2\beta\Phi(0)s_0^{-2}\pi^2(b/c)^2.$$

В області сильних полів $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ величини D_0 та I'_0 задовільняють наближеним виразам

$$\begin{aligned}
D_0 &= D_0^{(0)} - D_0^{(1)}\varphi_h + D_0^{(2)}\varphi_h^2, \\
D_0^{(0)} &= D_g^{(0)}f_0\beta\Phi(0), \quad D_0^{(1)} = D_g^{(1)}f_0\beta\Phi(0), \quad D_0^{(2)} = D_g^{(2)}f_0\beta\Phi(0); \\
I'_0 &= I'_{00} - I'_{01}\varphi_h + I'_{02}\varphi_h^2, \quad (3.40)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I'_{00} &= \ln(D_0^{(0)} + D_1) - \frac{2}{3} + 2\frac{D_0^{(0)}}{D_1} - 2\left(\frac{D_0^{(0)}}{D_1}\right)^{3/2} \times \\
&\quad \times \arctg\left(\frac{D_1}{D_0^{(0)}}\right)^{1/2},
\end{aligned}$$

$$I'_{01} = 3\frac{D_0^{(1)}}{D_1}\left[1 - \left(\frac{D_0^{(0)}}{D_1}\right)^{1/2}\arctg\left(\frac{D_1}{D_0^{(0)}}\right)^{1/2}\right],$$

$$\begin{aligned}
I'_{02} &= \frac{3}{D_1}\left[\frac{(D_0^{(1)})^2}{4(D_0^{(0)} + D_1)} + D_0^{(2)} - \frac{1}{D_1^{1/2}}\left(\frac{(D_0^{(1)})^2}{4(D_0^{(0)})^{1/2}} + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + (D_0^{(0)})^{1/2}D_0^{(2)}\right)\arctg\left(\frac{D_1}{D_0^{(0)}}\right)^{1/2}\right].
\end{aligned}$$

Підставляючи E_{03} із (3.39) у $F_{I,h}$ (3.36), знаходимо

$$F_{I,h} = -kTNE_{02}\tilde{h}^{6/5} - kTN_0\tilde{h}^{6/5}n_h\ln s. \quad (3.41)$$

Тут

$$\tilde{E}_{02} = E_{02} + \left(\ln s - \frac{1}{2}I'_0\right)s_0^{-3} \quad (3.42)$$

або наближено (ряд за степенями φ_h) маємо

$$\begin{aligned}
\tilde{E}_{02} &= \tilde{E}_{02}^{(0)} - \tilde{E}_{02}^{(1)}\varphi_h - \tilde{E}_{02}^{(2)}\varphi_h^2, \\
\tilde{E}_{02}^{(0)} &= E_{02}^{(0)} + \left(\ln s - \frac{1}{2}I'_{00}\right)s_0^{-3}, \quad (3.43)
\end{aligned}$$

$$\tilde{E}_{02}^{(1)} = E_{02}^{(1)} - \frac{1}{2}I'_{01}s_0^{-3}, \quad \tilde{E}_{02}^{(2)} = E_{02}^{(2)} + \frac{1}{2}I'_{02}s_0^{-3}.$$

Відзначимо, що останній доданок із (3.41) при сумуванні внесків вільної енергії системи скоротиться з відповідним доданком із (3.9).

Сумарна вільна енергія системи. Загальний вираз для вільної енергії системи в околі критичної точки у випадку сильних полів $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ та $T < T_c$ відповідно до (1.4) має вигляд

$$F_h^{(-)} = -kTN \left[\ln \operatorname{ch} h' + l_0 + l_1 \tilde{h}^{6/5} - l_{11} \tilde{h}^{6/5} \varphi_h + l_{12} \tilde{h}^{6/5} \varphi_h^2 + l_2 \tilde{h}^2 - l_3 \tilde{\tau}_1 + l_4 \tilde{\tau}_1^2 \right], \quad (3.44)$$

де

$$\begin{aligned} l_1 &= \tilde{E}_{02}^{(0)} + s_0^{-3} (f_{p1c} - F_{10}), \\ l_{11} &= -s_0^{-3} (F_{11} - f_{p11c}) + \tilde{E}_{02}^{(1)}, \\ l_{12} &= -s_0^{-3} (F_{12} + f_{p12c}) - \tilde{E}_{02}^{(2)}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Інші коефіцієнти (l_0, l_2, l_3, l_4) задані в (2.40) і приймають ті ж значення, що й вищеприведені для області слабких полів $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$. При $s_0 = 2, b/c = 0.3, \bar{\Phi} = 0.05$ отримуємо такі ж величини l_1, l_{11}, l_{12} , що й у випадку $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ та $T > T_c$ [9]:

$$l_1 = 0.293, \quad l_{11} = -0.200, \quad l_{12} = 0.105.$$

Слід підкреслити, що отримана в (3.44) із перших принципів статистичної фізики явна форма сингулярної частини вільної енергії $F_h^{(-)}(\tilde{\tau}_1, \tilde{h})$ узгоджується із статичною гіпотезою подібності, яка стверджує, що потенціал Гіббса є узагальненою однорідною функцією (див., наприклад, [10]). Справді, однорідну функцію $f(x, y)$ двох змінних для довільних значень λ, b, p можна представити як

$$f(\lambda x, \lambda^b y) = \lambda^p f(x, y)$$

або при виборі $\lambda = 1/x$

$$f(x, y) = x^p f(1, yx^{-b}).$$

Скориставшись степеневим розкладом $f(1, yx^{-b})$ за yx^{-b} , для $f(x, y)$ з точністю до квадратичних членів запишемо

$$\begin{aligned} f(x, y) &= x^p \left[f(1, 0) + f'(1, yx^{-b}) \Big|_{yx^{-b}=0} yx^{-b} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} f''(1, yx^{-b}) \Big|_{yx^{-b}=0} y^2 x^{-2b} \right]. \end{aligned}$$

Покладаючи $x = \tilde{h}$ та $y = \tilde{\tau}_1$, переконаємось, що у випадку сильних полів $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ для $b > 0$ величина $yx^{-b} = \tilde{\tau}_1 \tilde{h}^{-b} = \tilde{h}_c^{1/p_0} \tilde{h}^{-b}$, за якою здійснюється розклад, є дійсно малою і права частина останньої рівності при $p = 6/5, b = 1/p_0, p_0 = 5\nu/2$ приймає форму запису сингулярної частини у (3.44).

Середній спіновий момент та інші термодинамічні характеристики системи. На основі виразу для $F_h^{(-)}$ (3.44) можна розрахувати середній спіновий момент

$$\sigma_h^{(-)} = -\frac{1}{N} \left(\frac{\partial F_h^{(-)}}{\partial h} \right)_T$$

та сприйнятливості на одну частинку

$$\chi_h^{(-)} = -\frac{1}{N} \left(\frac{\partial^2 F_h^{(-)}}{\partial h^2} \right)_T = \left(\frac{\partial \sigma_h^{(-)}}{\partial h} \right)_T.$$

Для середнього спінового моменту $\sigma_h^{(-)}$ маємо

$$\begin{aligned} \sigma_h^{(-)} &= \operatorname{th} h' + \sigma_{h_0} h' + \sigma_{h_1} (h')^{1/5} - \sigma_{h_2} \tilde{\tau}_1 (h')^{1/5-1/p_0} + \\ &\quad + \sigma_{h_3} \tilde{\tau}_1^2 (h')^{1/5-2/p_0}, \end{aligned} \quad (3.46)$$

$$\sigma_{h_0} = 2l_2 f_0^{-2}, \quad \sigma_{h_1} = \frac{6}{5} l_1 f_0^{-6/5},$$

$$\sigma_{h_2} = \left(\frac{6}{5} - \frac{1}{p_0} \right) l_{11} f_0^{-(6/5-1/p_0)},$$

$$\sigma_{h_3} = \left(\frac{6}{5} - \frac{2}{p_0} \right) l_{12} f_0^{-(6/5-2/p_0)}.$$

Як бачимо із (3.46), при $\tilde{\tau}_1 = 0$ основний внесок у середній спіновий момент $\sigma_h^{(-)}$ визначається доданком $\sigma_{h_1} (h')^{1/5}$.

Для сприйнятливості $\chi_h^{(-)}$ при $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ справедливе співвідношення

$$\begin{aligned} \chi_h^{(-)} &= \beta \left[1 - \operatorname{th}^2 h' + \chi_{h_0} + \chi_{h_1} (h')^{-4/5} - \right. \\ &\quad \left. - \chi_{h_2} \tilde{\tau}_1 (h')^{-4/5-1/p_0} + \chi_{h_3} \tilde{\tau}_1^2 (h')^{-4/5-2/p_0} \right], \end{aligned} \quad (3.47)$$

$$\chi_{h_0} = \sigma_{h_0}, \quad \chi_{h_1} = \frac{1}{5} \sigma_{h_1},$$

$$\chi_{h_2} = \left(\frac{1}{5} - \frac{1}{p_0} \right) \sigma_{h_2}, \quad \chi_{h_3} = \left(\frac{1}{5} - \frac{2}{p_0} \right) \sigma_{h_3}.$$

Приймаючи до уваги результати розрахунків в області сильних полів $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ для високотемпературної [9] та низькотемпературної (дана робота) областей, можна графічно проілюструвати еволюцію середнього спінового моменту та сприйнятливості системи з ростом поля для різних температур (див. рис. 3 та 4).

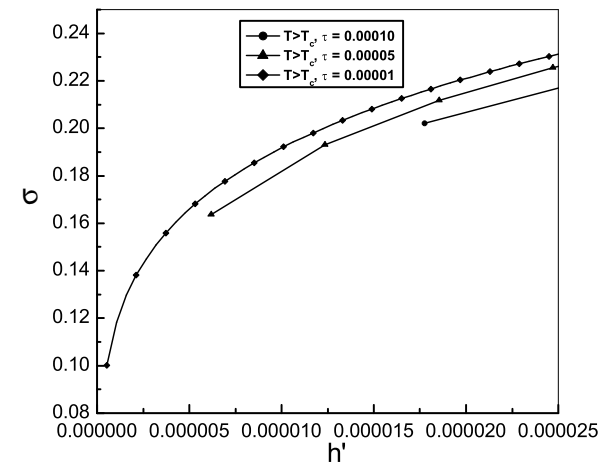
Одержані нами значення середнього спінового моменту для різних h' із областей слабких ($\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$) та сильних ($\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$) полів узгоджуються із результатами інших авторів, наприклад, з даними [11,12] Монте-Карло досліджень моделі Ізінга на простій кубічній ґратці із взаємодією найближчих сусідів (у нашому випадку моделюється набором параметрів $s_0 = 2$, $b/c = 0.3$, $\Phi = 0.092$ [3]). При $T > T_c$ ($\tau = 0.0050$) це можна бачити із таблиці 1, а при $T < T_c$ ($\tau = -0.0047$) – із таблиці 2. Дані із робіт [11,12], приведені в цих таблицях, відповідають максимумам ймовірнісних розподілів параметра порядку системи. Поведінку польової залежності середнього

Табл. 1. Оцінка величин середнього спінового моменту тривимірної ізінгоподібної системи для високотемпературної області ($\tau = 0.0050$), здійснена на основі результатів робіт [9] та [11]. Значення $\sigma^{(+)}$ відповідає випадку слабого поля $\tilde{h} = 0.205\tilde{h}_c$, де $\tilde{h}_c = \tilde{\tau}^{5\nu/2}$, або $h' = \beta h = 0.00013$, а значення $\sigma_h^{(+)}$ – випадку сильного поля $\tilde{h} = 4.251\tilde{h}_c$ або $h' = 0.0027$.

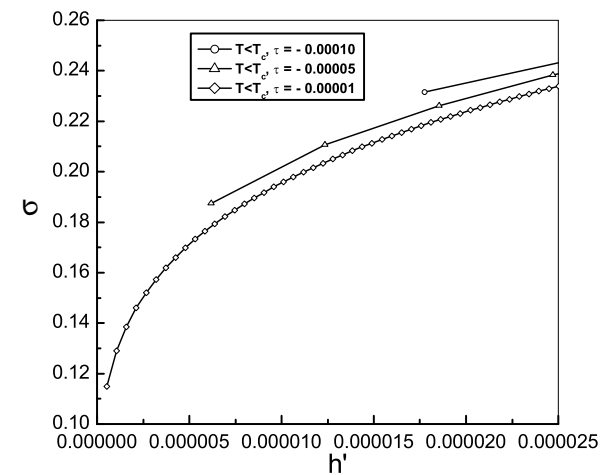
Середній спіновий момент при $T > T_c$	Робота [9], метод колективних змінних	Робота [11], метод Монте-Карло, $L^3 = 58^3$
$\sigma^{(+)}$	0.110	0.100
$\sigma_h^{(+)}$	0.500	0.359

спінового моменту $\sigma_h^{(T_c)}$ при $T = T_c$ демонструє рис. 5. Крива 1 відтворює наші результати, а крива 2 взята із роботи [13], яка також присвячена вивченню з допомогою Монте-Карло симуляцій тривимірної моделі Ізінга поблизу критичної точки при наявності зовнішнього магнітного поля.

Слід відмітити, що в представленій схемі розрахунку використовувались певні наближення. Зокрема, ми обмежувались моделлю ρ^4 . Очікується, що врахування більш складної моделі ρ^6 привело б до зменшення величини середнього спінового моменту (див., [2,14–16]), а отже, до кращого співпадіння наших даних та вищеприведених ре-

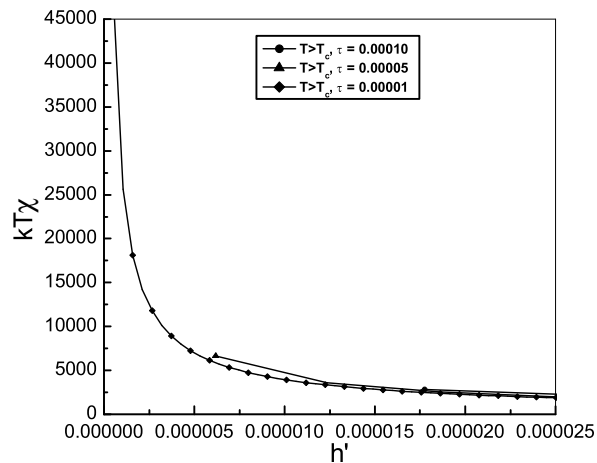


a

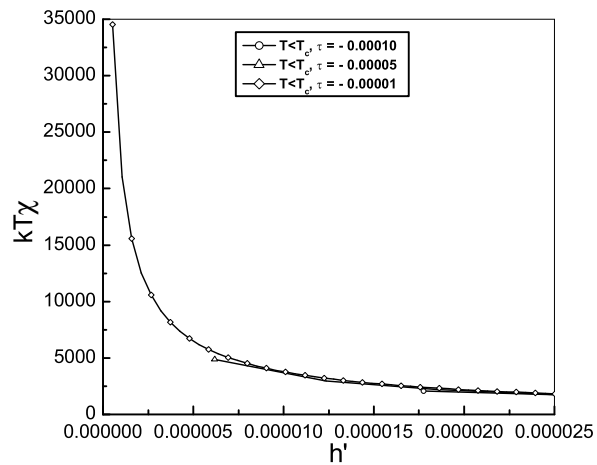


b

Рис. 3. Криві залежності середнього спінового моменту системи від поля для різних значень температур (а – випадок сильних полів $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ та $T > T_c$; б – випадок $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ та $T < T_c$).



a



b

Рис. 4. Зміна сприйнятливості системи із ростом поля для різних значень τ (а – випадок сильних полів $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ та $T > T_c$; б – випадок $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ та $T < T_c$).

Табл. 2. Порівняння величин середнього спінового моменту системи у низькотемпературній області ($\tau = -0.0047$), отриманих на основі даних досліджень та результатів роботи [12]. Середній спіновий момент $\sigma_{h=0}^{(-)}$ відтворює випадок нульового зовнішнього поля. Значення $\sigma^{(-)}$ відноситься до випадку слабого поля $\tilde{h} = 0.746\tilde{h}_c$ або $h' = 0.00043$, а значення $\sigma_h^{(-)}$ – до випадку сильного поля $\tilde{h} = 4.337\tilde{h}_c$ або $h' = 0.0025$.

Середній спіновий момент при $T < T_c$	Дана робота, метод колективних змінних	Робота [12], метод Монте-Карло, $L^3 = 74^3$
$\sigma_{h=0}^{(-)}$	0.516	0.289
$\sigma^{(-)}$	0.591	0.335
$\sigma_h^{(-)}$	0.624	0.420

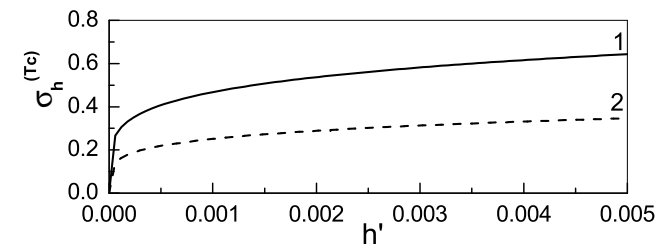


Рис. 5. Середній спіновий момент системи при $T = T_c$ (крива 1) як функція поля h' . Крива 2 відповідає результатам роботи [13].

зультатів із [11–13]. Як і у випадку $T > T_c$ [9], при обчисленні довгохвильової частини статистичної суми системи ($I_{\mu\tau+1}$ (2.5) для $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$ та I_{n_h+1} (3.12) для $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$) також використовувалось наближення, врахування якого внесло б певні коректури. Тут при інтегруванні за змінними з $k \neq 0$ в рамках гаусової густини міри враховувалось тільки нульове наближення, а середні відносно гаусового розподілу від доданків з $k \neq 0$ не брались до уваги. Методика врахування таких середніх розроблена в [2, 17].

Описаний вище підхід дозволяє обчислити ентропію

$$S_h^{(-)} = - \left(\frac{\partial F_h^{(-)}}{\partial T} \right)_h$$

та теплоємність системи

$$C_h^{(-)} = -T \left(\frac{\partial^2 F_h^{(-)}}{\partial T^2} \right)_h = T \left(\frac{\partial S_h^{(-)}}{\partial T} \right)_h.$$

Проілюструємо це на прикладі випадку сильних полів $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$.

Розрахунок $S_h^{(-)}$ та $C_h^{(-)}$ слід проводити при фіксованій польовій змінній. При $\tilde{h} = const$ роль φ_h (3.4) відіграватиме величина

$$\varphi_\tau = \tilde{\tau}_1 / \tilde{\tau}_c, \quad (3.48)$$

де $\tilde{\tau}_c = \tilde{h}^{1/p_0}$, а температурна змінна $\tilde{\tau}_1$ змінюється від 0 до $\tilde{\tau}_c$. Враховуючи цю рівність, вільну енергію $F_h^{(-)}$ (3.44) можна переписати у вигляді

$$F_h^{(-)} = -kTN \left[\ln \operatorname{ch} h' + l_0 + l_1 \tilde{h}^{6/5} - l_{11} \tilde{\tau}_1 \tilde{h}^{6/5-1/p_0} + l_{12} \tilde{\tau}_1^2 \tilde{h}^{6/5-2/p_0} + l_2 \tilde{h}^2 - l_3 \tilde{\tau}_1 + l_4 \tilde{\tau}_1^2 \right]. \quad (3.49)$$

Відмітимо, що кінцевий явний вираз для вільної енергії $F_h^{(-)}$ як функція $\tilde{\tau}_1$ та \tilde{h} є однаковий і не залежить від того, яку змінну (температурну $\tilde{\tau}_1$ чи польову \tilde{h}) ми фіксуємо при розгляді. У цьому можна переконатись, підставляючи почергово у (3.44) замість φ_h вирази (3.4) і (3.48), які справедливі при $\tilde{\tau}_1 = const$ та $\tilde{h} = const$, відповідно. На основі (3.49) для ентропії системи при $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ та $T < T_c$ знаходимо

$$S_h^{(-)} = kN \left[s_{h0} + s_{h1} \tilde{h}^\psi - s_{h2} \tilde{\tau}_1 \tilde{h}^{-\varphi} - s_{h3} \tilde{\tau}_1 \right]. \quad (3.50)$$

Теплоємність системи $C_h^{(-)}$ задається формулою

$$C_h^{(-)} = kN \left[c_{h0} + c_{h1} \tilde{h}^{-\varphi} \right]. \quad (3.51)$$

Коефіцієнти та показники степенів у виразах (3.50) та (3.51) задовільняють таким же співвідношенням, що й при $T > T_c$ [9].

Література

1. Бинги В.Н., Савин А.В. // УФН. – 2003. – **173**, № 3. – С. 265-300.
2. Юхновський І.Р., Козловський М.П., Пилюк І.В. Мікроскопічна теорія фазових переходів у тривимірних системах. – Львів: Євровіт, 2001. – 592 с.
3. Козловський М.П. Вплив зовнішнього поля на критичну поведінку тривимірного магнетика. Рекурентні співвідношення. – Львів, 2002. – 43 с. – (Препринт / НАН України. ІФКС; ICMP-02-31U).
4. Козловський М.П. Вплив зовнішнього поля на критичну поведінку тривимірного магнетика. II. Вільна енергія для випадку $T = T_c$. – Львів, 2002. – 26 с. – (Препринт / НАН України. ІФКС; ICMP-02-32U).
5. Козловський М.П. Вплив зовнішнього поля на критичну поведінку тривимірного магнетика. III. Вільна енергія для випадку граничного значення поля ($h \neq 0$ та $\tau \neq 0$). – Львів, 2003. – 35 с. – (Препринт / НАН України. ІФКС; ICMP-03-13U).
6. Козловський М.П., Пилюк І.В., Притула О.О. Поведінка тривимірного магнетика поблизу критичної точки за наявності зовнішнього поля. – Львів, 2003. – 42 с. – (Препринт / НАН України. ІФКС; ICMP-03-21U).
7. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. – М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1974. – 832 с.
8. Мигдал А.Б. Качественные методы в квантовой теории. – М.: Наука, 1975. – 335 с.
9. Козловський М.П., Пилюк І.В., Притула О.О. Термодинамічні функції однокомпонентної моделі магнетика при $T > T_c$ за наявності зовнішнього поля. – Львів, 2004. – 32 с. – (Препринт / НАН України. ІФКС; ICMP-04-03U).
10. Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления. – М.: Мир, 1973. – 419 с.
11. Tsypin M.M. // Phys. Rev. Lett. – 1994. – **73**, № 15. – P. 2015-2018.
12. Tsypin M.M. // Phys. Rev. B. – 1997. – **55**, № 14. – P. 8911-8917.

13. Engels J., Fromme L., Seniuch M. // Nucl. Phys. B. – 2003. – **655** [FS]. – P. 277-299.
14. Духовый В.В., Козловский М.П., Пылюк И.В. // ТМФ. – 1996. – **107**, № 2. – С. 288-306.
15. Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V., Dukhovii V.V. // J. Magn. Magn. Mater. – 1997. – **169**. – P. 335-342.
16. Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V., Dukhovii V.V. // Condens. Matter Phys. (Lviv). – 1997. – № 11. – P. 17-49.
17. Yukhnovskii I.R. Phase Transitions of the Second Order. Collective Variables Method. – Singapore: World Scientific, 1987. – 327 p.

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
Ігор Васильович Пілюк
Орест Олегович Притула

ТЕРМОДИНАМІЧНІ ФУНКЦІЇ ОДНОКОМПОНЕНТНОЇ МОДЕЛІ
МАГНЕТИКА ПРИ $T < T_c$ ЗА НАЯВНОСТІ ЗОВНІШНЬОГО ПОЛЯ

Роботу отримано 8 липня 2004 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром ІФКС НАН України

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені