

ІНСТИТУТ  
ФІЗИКИ  
КОНДЕНСОВАНИХ  
СИСТЕМ

ICMP-02-32U

М.П.Козловський

ВПЛИВ ЗОВНІШНЬОГО ПОЛЯ НА КРИТИЧНУ  
ПОВЕДІНКУ ТРИВИМІРНОГО МАГНЕТИКА. II. ВІЛЬНА  
ЕНЕРГІЯ ДЛЯ ВИПАДКУ  $T = T_c$

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

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

**Вплив зовнішнього поля на критичну поведінку тривимірного магнетика. II. Вільна енергія для випадку  $T = T_c$**

М.П.Козловський

**Анотація.** Розрахована залежність від поля вільної енергії, параметра порядку та сприйнятливості ізінгоподібного магнетика при температурі  $T = T_c$ , де  $T_c$  – температура фазового переходу при відсутності поля. Знайдені критичні показники та критичні амплітуди цих величин. Встановлена залежність критичних амплітуд від мікроскопічних параметрів системи.

**Influence of an external field on the critical behaviour of the three-dimensional magnet. II. The Free energy in case  $T = T_c$**

M.P.Kozlovskii

**Abstract.** The dependence of the free energy, order parameter and susceptibility on the field for Ising-like magnet in the case  $T = T_c$ , where  $T_c$  – phase transition temperature absent the field, is calculated. The critical exponents and critical amplitudes of these values are founded. The dependence of the critical amplitudes on the microscopic parameters of the system is established.



## Вступ

Ця робота є продовженням досліджень, розпочатих в [1]. Вона присвячена розрахунку вільної енергії системи ізінгівських спінів поблизу критичної точки. Використовується метод опису фазового переходу, запропонований в [2], однак вважається, що система знаходиться в однорідному зовнішньому полі  $h$ . Гамільтоніан системи має вигляд

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

Потенціал взаємодії вибирається у вигляді експонентно-спадної функції віддалі

$$\Phi(r) = A \cdot \exp(-r/b), \quad (2)$$

де  $A$ ,  $b$  - постійні величини. В подальших розрахунках (див. [1]) переходимо до дещо зміненої модельної системи, де фур'є-образ потенціалу (2) записується у вигляді

$$\Phi(k) = \begin{cases} \Phi(0)(1 - 2b^2k^2), & \vec{k} \in \mathcal{B}_0, \\ \Phi_0 = \Phi(0)\bar{\Phi}, & \vec{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0. \end{cases} \quad (3)$$

Тут  $\mathcal{B}_0$  - зона Бріллюена, що відповідає ефективній блочній ґратці з періодом

$$c_0 = c \cdot s_0, \quad (4)$$

де  $c$  - період вихідної простої кубічної ґратки, за вузлами якої відбувається сумування в (1),  $s_0$  - параметр моделі ( $s_0 > 1$ ). Значення параметра  $s_0$  залежить від вигляду потенціалу взаємодії  $\Phi(r_{\vec{l}\vec{j}})$  для кожної конкретної системи і визначається так, щоб в області значень  $\vec{k} \in \mathcal{B}_0$  для  $\Phi(k)$  можна було скористатись параболічною апроксимацією для  $\Phi(\vec{k})$ . Так для експонентно-спадного потенціалу взаємодії (2) маємо наближену формулу (3), де

$$\mathcal{B}_0 = \left\{ \vec{k} = (k_x, k_y, k_z) \mid k_i = -\frac{\pi}{c_0} + \frac{2\pi}{c_0} \frac{n_i}{N_{0i}}; \right. \\ \left. n_i = 1, 2, \dots, N_{0i}; i = x, y, z \right\}. \quad (5)$$

Тут  $N_0 = N_{0x} \cdot N_{0y} \cdot N_{0z}$ ,  $N_0 = N \cdot s_0^{-d}$ , де  $N$  - загальне число частинок системи. По-суті ми розглядаємо критичну поведінку моделі (1) із потенціалом взаємодії (3), який пов'язаний з експонентно-спадним потенціалом взаємодії (2).

## 1. Загальний вираз для вільної енергії

Як було показано в [1], вільна енергія такої системи поблизу критичної точки може бути записана у вигляді декількох вкладів

$$F = F_0 + F_{\text{кр}} + F_p + F_I. \quad (1.1)$$

Тут

$$F_0 = -kTN \left( \ln 2 + \frac{1}{2} \beta \Phi_0 + \mathcal{M}_0 \right), \quad (1.2)$$

де  $\Phi_0$  - деяка постійна величина, наприклад, усереднена для великих значень хвильового вектора  $\vec{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0$  частина фур'є-образу потенціалу взаємодії [2],

$$\mathcal{M}_0 = \ln ch(\beta h), \quad (1.3)$$

$\beta = 1/k_B T$  - обернена температура,  $h$  - зовнішнє поле.

Для складової  $F_{\text{кр}}$  справедливий вираз

$$F_{\text{кр}} = -kT \ln Q_0 + F'_{\text{кр}}. \quad (1.4)$$

Тут, відповідно до результатів роботи [1], маємо

$$\ln Q_0 = N_0 [\tilde{a}_0 + \ln Q(d)]. \quad (1.5)$$

Величина  $\tilde{a}_0$  обчислена в [1]

$$\tilde{a}_0 = -\frac{1}{2} \ln(2\pi \mathcal{M}_2(h')) - \frac{a'^2}{4} - \frac{3}{4} g(1 - a'^2), \quad (1.6)$$

де використані позначення.

$$a' = s_0^{d/2} \mathcal{M}_1(h') \mu_2(h'), \quad \mu_2(h') = (2/\mathcal{M}_2(h'))^{1/2} \\ \mathcal{M}_1(h') = th(h'), \quad \mathcal{M}_2(h') = 1 - \mathcal{M}_1^2(h'), \\ g = s_0^{-3} \frac{1}{6} (-\mathcal{M}_4(h')) / \mathcal{M}_2^2(h'), \\ \mathcal{M}_4(h') = -2\mathcal{M}_2^2(h') + 4\mathcal{M}_1^2(h') \mathcal{M}_2(h'). \quad (1.7)$$

Для  $Q(d)$  справедливий вираз

$$Q(d) = (24/a_4)^{1/4} \gamma_1 \left( 1 - \gamma h_2^{(0)} + \frac{3}{8} \gamma (h_3^{(0)})^2 \right), \quad (1.8)$$

де

$$a_4 = 3/2 \mu_2^4 g,$$

$$\begin{aligned}\gamma &= \Gamma(3/4)/\Gamma(1/4) \approx 0.337989, \\ \gamma_1 &= \pi\sqrt{2}/(2\Gamma(3/4)) \approx 1.8128\dots\end{aligned}\quad (1.9)$$

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

$$h_2^{(0)} = \sqrt{6}(r_0 + q)a_4^{-1/2}, \quad h_3^{(0)} = h_{30}a_3a_4^{-3/4}, \quad (1.10)$$

де

$$\begin{aligned}r_0 &= a_2 + \beta\Phi_0 - \beta\Phi(0), & h_{30} &= (24)^{3/4}/6, \\ q &= \bar{q} \cdot \beta\Phi(0), & \bar{q} &= \pi^2(b/c)^2s_0^{-2}(1 + s^{-2}) \\ a_2 &= \frac{1}{2}\mu_2^2(1 - 3g(1 - a'^2/2)), \\ a_3 &= -\frac{3}{2}\mu_2^3a' \cdot g.\end{aligned}\quad (1.11)$$

Для другого доданку правої частини рівності (1.4) маємо

$$F'_{\text{кр}} = -kT \sum_{n=1}^{n_p} \ln Q_n, \quad (1.12)$$

де  $n_p$  індекс сумування, який залежить від  $\tau$  ( $\tau = (T - T_c)/T_c$ ) або від  $h'$ .

$$\ln Q_n = N_n \left[ \ln Q(P^{(n-1)}) + \ln Q(d_n) \right]. \quad (1.13)$$

Величина  $Q_n$  має зміст парціальної статистичної суми  $n$ -тої блочної структури,  $N_n = N_0s^{-3n}$ ,  $N_0 = N \cdot s_0^{-3}$  ( $s_0 > 1, s \geq 1$ ).

В роботі [2] розрахований явний вираз для  $F_{\text{кр}}$  як функції  $\tau$  та мікроскопічних параметрів системи для випадку  $h = 0$ . За наявності поля величина  $F_{\text{кр}}$  буде додатково включати залежність від  $h$ , що зобумовлене залежністю від поля величин  $Q(P^{(n-1)})$  та  $Q(d_n)$ . Зокрема, для  $Q(d_n)$  маємо

$$Q(d_n) = \left(24/a_4^{(n)}\right)^{1/4} K_0(h_2^{(n)}, h_3^{(n)}). \quad (1.14)$$

Тут

$$K_0(h_2^{(n)}, h_3^{(n)}) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-h_2^{(n)}x^2 - h_3^{(n)}x^3 - x^4\right), \quad (1.15)$$

де

$$\begin{aligned}h_2^{(n)} &= \sqrt{6}d_n(B_n, B_{n+1})(a_4^{(n)})^{-1/2}, \\ h_3^{(n)} &= h_{30}a_3^{(n)} \cdot (a_4^{(n)})^{-3/4},\end{aligned}\quad (1.16)$$

а коефіцієнти  $a_l^{(n)}$  та  $d_n(B_n, B_{n+1})$  з допомогою рекурентних співвідношень [1] пов'язані з їх вихідними значеннями  $a_l$ .

Як було показано в [1], поблизу критичної точки ( $\tau = 0, h = 0$ ), величини  $h_2^{(n)}$  та  $h_3^{(n)}$  приймають малі значення для номерів блочних структур  $n < n_p$ . В цьому випадку вираз (1.14) може бути записаний у вигляді

$$Q(d_n) = \left(24/a_4^{(n)}\right)^{1/4} \gamma_1 \left(1 - \gamma h_2^{(h)} + \frac{3}{8}\gamma(h_3^{(n)})^2\right). \quad (1.17)$$

Для величини  $Q(P^{(n)})$  маємо

$$\begin{aligned}Q(P^{(n)}) &= \left(2P_2^{(n)}\right)^{-1/2} \frac{1}{\pi} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp\left(-iG_h^{(n)}y - y^2 - G_n y^4\right),\end{aligned}\quad (1.18)$$

де

$$\begin{aligned}G_h^{(n)} &= P_1^{(n)} \left(2/P_2^{(n)}\right)^{1/2}, \\ G_n &= \frac{1}{6}P_4^{(n)} \left(P_2^{(n)}\right)^{-2}.\end{aligned}\quad (1.19)$$

Для коефіцієнтів  $P_l^{(n)}$  справедливі співвідношення

$$\begin{aligned}P_1^{(n)} &= -s^{d/2} \left(24/a_4^{(n)}\right)^{1/4} M_1^{(n)}, \\ P_2^{(n)} &= \left(24/a_4^{(n)}\right)^{1/2} [M_2^{(n)} - (M_1^{(n)})^2], \\ P_3^{(n)} &= s^{-d/2} \left(24/a_4^{(n)}\right)^{3/4} [-3M_2^{(n)}M_1^{(n)} + 2(M_1^{(n)})^3 + M_3^{(n)}], \\ P_4^{(n)} &= s^{-d} \left(24/a_4^{(n)}\right) [3(M_2^{(n)})^2 - 12M_2^{(n)}(M_1^{(n)})^2 + \\ &+ 4M_3^{(n)}M_1^{(n)} + 6(M_1^{(n)})^4 - M_4^{(n)}].\end{aligned}\quad (1.20)$$

Для скорочення запису введіть позначення

$$\begin{aligned}M_l^{(n)} &= K_l(h_2^{(n)}, h_3^{(n)})/K_0(h_2^{(n)}, h_3^{(n)}), \\ K_l(h_2^{(n)}, h_3^{(n)}) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot x^l \exp(-h_2^{(n)}x^2 - h_3^{(n)}x^3 - x^4).\end{aligned}\quad (1.21)$$

Використовуючи (1.20), знаходимо

$$G_h^{(n)} = -\sqrt{2}s^{d/2}\mu_{1n}(1 - \mu_{1n}^2)^{-1}, \quad (1.22)$$

де

$$\mu_{1n} = M_1^{(n)}(M_2^{(n)})^{-1/2},$$

а також

$$G_n = \frac{1}{6}s^{-d} [3 - 12\mu_{1n}^2 + 4\mu_{1n}\mu_{3n} + 6\mu_{1n}^4 - \mu_{4n}], \quad (1.23)$$

де

$$\mu_{3n} = M_3^{(n)}(M_2^{(n)})^{-3/2}, \quad \mu_{4n} = M_4^{(n)}(M_2^{(n)})^{-2}.$$

В області значень  $n < n_p$  величини  $h_2^{(n)}$  та  $h_3^{(n)}$  приймають малі значення і для коефіцієнтів  $P_l^{(n)}$  справедливі наближені вирази

$$\begin{aligned} P_1^{(n)} &= \frac{1}{4}h_3^{(n)}s^{d/2} \left( \frac{24}{a_4^{(n)}} \right)^{1/4}, \\ P_2^{(n)} &= \gamma \left( \frac{24}{a_4^{(n)}} \right)^{1/2} (1 + t_2h_2^{(n)}), \\ P_3^{(n)} &= -t_3h_2^{(n)}h_3^{(n)}s^{-d/2} \left( \frac{24}{a_4^{(n)}} \right)^{3/4}, \\ P_4^{(n)} &= t_4(a_4^{(n)})^{-1}s^{-d} [1 + \gamma_2h_2^{(n)} + \gamma_3(h_3^{(n)})^2]. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Тут введені позначення

$$\begin{aligned} t_2 &= \gamma - \frac{1}{4\gamma} \approx -0.4017, & t_3 &= \frac{3}{16}(1 - 4\gamma^2) \approx 0.1018, \\ t_4 &= 6(12\gamma^2 - 1) \approx 2.2250, \\ \gamma_2 &= 4\gamma \frac{6\gamma^2 - 1}{12\gamma^2 - 1} \approx -1.1468, \\ \gamma_3 &= -\frac{3\gamma}{12\gamma^2 - 1} \approx -2.7342. \end{aligned} \quad (1.25)$$

Наближені вирази для  $G_h^{(n)}$  та  $G_n$  мають вигляд

$$G_h^{(n)} = G_0^{(0)}s^{d/2}h_3^{(n)}, \quad G_n = G_0s^{-d}(1 + G_2h_2^{(n)}), \quad (1.26)$$

де

$$\begin{aligned} G_0^{(0)} &= \frac{1}{4} \left( \frac{2}{\gamma} \right)^{1/2} \approx 0.6081, & G_0 &= \frac{12\gamma^2 - 1}{24\gamma^2} \approx 0.1353, \\ G_2 &= \frac{1}{2\gamma} - 2\gamma + \gamma_2 \approx -0.3435. \end{aligned} \quad (1.27)$$

Вираз для  $Q(P^{(n)})$  із (1.18) при малих значеннях  $h_2^{(n)}$  та  $h_3^{(n)}$  приймає вигляд

$$\begin{aligned} Q(P^{(n)}) &= (2\pi\gamma)^{-1/2}G'_{00} \left( \frac{a_4^{(n)}}{24} \right)^{1/4} \times \\ &\times \exp \left( -H_{22}(h_3^{(n)})^2 \right) (1 + H_{211}h_2^{(n)}), \end{aligned} \quad (1.28)$$

де

$$\begin{aligned} G'_{00} &= 1 - \frac{3}{4}s^{-d}G_0, & H_{22} &= s^d(32\gamma)^{-1} \\ H_{211} &= -\frac{1}{2}t_2 - \frac{3}{4}s^{-d}G_0G_2(G'_{00})^{-1}. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Використаємо наближені вирази для  $Q(d_n)$  із (1.17) та  $Q(P^{(n-1)})$  із (1.28) для розрахунку парціальної статистичної суми  $Q_n$  для  $n$ -тої блочної структури. Прийmemo до уваги рекурентні співвідношення (3.22) із [1]. Із них слідує, що

$$a_4^{(n)}/a_4^{(n-1)} = s^{-(d+1)}(1 + \alpha_4h_2^{(n-1)}), \quad (1.30)$$

де

$$\alpha_4 = G_2 - 2t_2 \approx 0.4599.$$

В результаті із (1.13) знаходимо

$$\begin{aligned} \ln Q_n &= N_n \left[ H_{20} + H_{21}h_2^{(n-1)} - \gamma h_2^{(n)} - \right. \\ &\left. - H_{22}(h_3^{(n-1)})^2 + \frac{3}{8}\gamma(h_3^{(n)})^2 \right], \end{aligned} \quad (1.31)$$

де

$$\begin{aligned} H_{20} &= -\frac{1}{2}\ln(2\pi\gamma) + \ln(1 - \frac{3}{4}s^{-d}G_0) + \ln\gamma_1 + \ln s \\ H_{21} &= H_{211} - \frac{\alpha_4}{4}. \end{aligned} \quad (1.32)$$

Вираз (1.31) є базовим для розрахунку вкладу до вільної енергії від ділянки критичного режиму. Для проведення розрахунків потрібно знайти явну залежність величин  $h_2^{(n)}$  та  $h_3^{(n)}$  від номера  $n$ . Такий розрахунок проведений нижче.

Вирази  $F_p$  та  $F_I$  із (1.1) описують вклади до вільної енергії від довгохвильових флуктуацій. Вони відповідають області хвильових векторів  $k \in [0, B_{n_p}]$ , де  $B_{n_p} = B_0 s^{-n_p}$ ,  $B_0 = \pi/c \cdot s_0$ ,  $c$  - стала ґратки. Для  $F_p$  маємо

$$F_p = -kTN_{n_p+1} \ln Q(P^{(n_p)}), \quad (1.33)$$

де вираз для  $Q(P^{(n_p)})$  приведений в (1.28) при  $n = n_p$ .

Величина  $F_I$  розраховується із формули

$$F_I = -kT \ln I_{n_p+1}, \quad (1.34)$$

де

$$I_{n_p+1} = \int (d\rho)^{N_{n_p+1}} \exp \left[ -\tilde{a}_1^{(n_p+1)} N_{n_p+1}^{1/2} \rho_0 - \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathcal{B}_p} d_{n_p+1}(k) \rho_{\vec{k}} \rho_{-\vec{k}} - \frac{1}{4!} a_4^{(n_p+1)} N_{n_p+1}^{-1} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_4 \\ \vec{k}_i \in \mathcal{B}_p}} \rho_{\vec{k}_1} \dots \rho_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_4} \right]. \quad (1.35)$$

Тут  $\mathcal{B}_p = \mathcal{B}_{n_p+1}$ ,

$$\mathcal{B}_{n_p+1} = \left\{ \vec{k} = (k_x, k_y, k_z) \mid k_i = -\frac{\pi}{c_{n_p+1}} + \frac{2\pi}{c_{n_p+1}} \frac{n_i}{N_{n_p+1,i}}; \right. \\ \left. n_i = 1, 2, \dots, N_{n_p+1,i}; i = x, y, z \right\}, \quad (1.36)$$

де

$$c_{n_p+1} = c \cdot s_0 \cdot s^{n_p+1}, N_{n_p+1} = N_{n_p+1,x} N_{n_p+1,y} N_{n_p+1,z}; \\ N_{n_p+1} = N_0 \cdot s^{-3(n_p+1)}. \quad (1.37)$$

Коефіцієнти  $a_l^{(n_p+1)}$  та  $d_{n_p+1}(k)$  знаходимо із рекурентних співвідношень, отриманих в [1].

## 2. Розрахунок залежності парціальної вільної енергії від номера ефективної блочної структури $n$

Розрахунок величини  $F'_{кр}$  із (1.12) передбачає визначення залежності від  $n$  парціальної вільної енергії  $n$ -тої блочної структури

$$F_n = -kT \ln Q_n.$$

Приймаючи до уваги вираз (1.31), ця задача зводиться до розрахунку залежності від  $n$  величин

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

Скористаємося для цього явними розв'язками рекурентних співвідношень (4.17) із [1]. Маємо

$$\begin{aligned} w_n &= E_1^n (w_0 - T_{13} v_0) + E_3^n T_{13} v_0, \\ r_n &= r^* + E_2^n V_2 [r_0 - r^* - T_{24} (u_0 - u^*)] + \\ &+ E_4^n V_2 T_{24} [u_0 - u^* - T_{42} (r_0 - r^*)], \\ v_n &= E_3^n v_0, \\ u_n &= u^* + E_2^n V_2 T_{42} [r_0 - r^* - T_{24} (u_0 - u^*)] + \\ &+ E_4^n V_2 [u_0 - u^* - T_{42} (r_0 - r^*)]. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Тут  $E_n$  - власні значення матриці ренормгрупового перетворення

$$\begin{aligned} E_1 &= s^{(d+2)/2}, \quad E_3 = s^{(d-2)/2}, \\ E_2 &= \frac{1}{2} \left\{ R_{22} + R_{44} + [(R_{22} - R_{44})^2 + 4R_{24}R_{42}]^{1/2} \right\} \\ E_4 &= \frac{1}{2} \left\{ R_{22} + R_{44} - [(R_{22} - R_{44})^2 + 4R_{24}R_{42}]^{1/2} \right\}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Матричні елементи  $R_{ij}$  розраховані в [1]. Для випадку  $s = s^*$ , який використовується в цих розрахунках, маємо

$$E_1 = 20.9768; \quad E_2 = 7.3740; \quad E_3 = 1.8380; \quad E_4 = 0.3974.$$

Величини  $w_0$ ,  $r_0$ ,  $v_0$  та  $u_0$  відповідають початковим значенням величин із (2.1) і мають вигляд

$$\begin{aligned} w_0 &= -s_0^{d/2} \mathcal{M}_1(h') (1 - 3g) / \mathcal{M}_2(h'), \\ r_0 &= a_2 + \beta \Phi_0 - \beta \Phi(0), \\ v_0 &= s_0^{-d/2} \mathcal{M}_1(h') \mathcal{M}_4(h') / \mathcal{M}_2^4(h'), \\ u_0 &= -s_0^{-d} \mathcal{M}_4(h') / \mathcal{M}_2^4(h'), \end{aligned} \quad (2.3)$$

де  $\mathcal{M}_n(h')$  - кумулянти, приведені в (1.7). Для інших величин із (2.1) в [1] отримані вирази

$$\begin{aligned} T_{13} &= (u^*)^{1/2} T_{13}^{(0)}, & T_{13}^{(0)} &= R_{13}^{(0)} / (E_3 - R_{11}) \approx -0.6550 \\ T_{24} &= (u^*)^{-1/2} T_{24}^{(0)}, & T_{24}^{(0)} &= R_{24}^{(0)} / (E_4 - R_{22}) \approx -0.5350 \\ T_{42} &= (u^*)^{1/2} T_{42}^{(0)}, & T_{42}^{(0)} &= R_{42}^{(0)} / (E_2 - R_{44}) \approx 0.1767, \\ V_2 &= [1 + (E_2 - R_{22})^2 / R_{24} R_{42}]^{-1} = 0.9136. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Координати фіксованої точки мають вигляд [1]

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

де

$$\begin{aligned} f_0 &= \bar{q} = \pi^2 (b/c)^2 s_0^{-2} (1 + s^{-2}) \\ \varphi_0 &= \bar{q}^2 (1 - s^{-2})^2 / f_{00}^2, \end{aligned} \quad (2.6)$$

де  $f_{00} = 0.5976$ . При  $s_0 = 2.0$  маємо  $f_0 = 0.2415$ ,  $\varphi_0 = 0.1360$ .

Розв'язки рекурентних співвідношень (2.1) можуть бути записані у більш зручній формі. Скористаємось із означення температури фазового переходу  $T_c$  із [1]. При  $h' = 0$  маємо рівняння  $c(T_c) = 0$ , де

$$c(T) = [r_0 - r^* - T_{24}(u_0 - u^*)].$$

Вираз для коефіцієнта  $c(T)$  буде мати вигляд

$$C(T) = c_{k1} \cdot \tau,$$

де

$$\begin{aligned} \tau &= (T - T_c) / T_c, \\ c_{k1} &= c_{k1}^{(0)} \beta \Phi(0). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Для величини  $c_{k1}^{(0)}$  знаходимо

$$c_{k1}^{(0)} = V_2 \left[ 1 - f_0 - T_{24}^{(0)} u_0 \varphi_0^{-1/2} (\beta_c \Phi(0))^{-2} - T_{24} \varphi_0^{1/2} \right]. \quad (2.8)$$

Для множника  $w_0 - T_{13} v_0$  із (2.1) маємо

$$w_0 - T_{13}^{(0)} \sqrt{\varphi_0} \beta \Phi(0) v_0 = -\mathcal{M}_1(h') c_{h1},$$

де

$$\begin{aligned} c_{h1} &= s_0^{d/2} \mathcal{M}_{20} / \mathcal{M}_2(h'), \\ \mathcal{M}_{20} &= 1 - 3g - 6g T_{13}^{(0)} \varphi_0^{1/2} \beta \Phi(0) / \mathcal{M}_2(h'). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Приймаючи до уваги отримані вище співвідношення, отримуємо

$$\begin{aligned} w_n &= -c_{h1} \mathcal{M}_1(h') E_1^n - c_{h1} \mathcal{M}_1(h') T_{13}^{(0)} \varphi_0^{1/2} \beta \Phi(0) E_3^n, \\ r_n &= r^* + c_{k1}^{(0)} \beta \Phi(0) \tau E_2^n + c_{k2} T_{24}^{(0)} (\varphi_0^{1/2} \beta \Phi(0))^{-1} E_4^n, \\ v_n &= -c_{h2} \mathcal{M}_1(h') E_3^n, \\ u_n &= u^* + c_{k1}^{(0)} \tau T_{42}^{(0)} \varphi_0^{1/2} (\beta \Phi(0))^2 E_2^n + c_{k2} E_4^n, \end{aligned} \quad (2.10)$$

де

$$\begin{aligned} c_{h2} &= 6g s_0^{d/2} / \mathcal{M}_2^2(h') = s_0^{-d/2} (-\mathcal{M}_4(h')) / \mathcal{M}_2^{-4}(h') \\ c_{k2} &= V_2 \left\{ u_0 - \varphi_0 (\beta \Phi(0))^2 - T_{42}^{(0)} \varphi_0^{1/2} \beta \Phi(0) [r_0 + f_0 \beta \Phi(0)] \right\}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Загальні розв'язки (2.10) спрощуються для граничних випадків. Перший з них пов'язаний із відсутністю поля ( $h = 0$ ). Тоді

$$w_n = 0, \quad v_n = 0$$

і отримуємо рівняння

$$\begin{aligned} r_n &= r^* + c_{k1}^{(0)} \tau \beta \Phi(0) E_2^n + c_{k2} T_{24}^{(0)} (\varphi_0^{1/2} \beta \Phi(0))^{-1} E_4^n, \\ u_n &= u^* + c_{k1}^{(0)} \tau \beta \Phi(0) T_{42}^{(0)} \varphi_0^{1/2} \beta \Phi(0) E_2^n + c_{k2} E_4^n, \end{aligned} \quad (2.12)$$

які співпадають із результатами розрахунків, отриманими в [2,3]. Вони справедливі для всіх  $n \leq m_\tau$ , де

$$m_\tau = -\frac{\ln \tau}{\ln E_2} + m_0 - 1. \quad (2.13)$$

Тут розглядається область температур  $T > T_c$ ,

$$m_0 = \ln \left( f_0 / c_{k1}^{(0)} \right) / \ln E_2. \quad (2.14)$$

Введемо позначення

$$\tilde{\tau} = \tau c_{k1}^{(0)} / f_0. \quad (2.15)$$

Тоді

$$m_{\tau+1} = \ln \tilde{\tau} / \ln E_2. \quad (2.16)$$

Другий граничний випадок відповідає випадку  $\tau = 0$ . Для нього співвідношення (2.10) мають вигляд

$$\begin{aligned} w_n &= -c_{h1} \mathcal{M}_1(h') E_1^n - c_{h2} \mathcal{M}_1(h') T_{13}^{(0)} \varphi_0^{1/2} \beta_c \Phi(0) E_3^n, \\ r_n &= r^* + c_{k2}^{(0)} T_{24}^{(0)} (\varphi_0^{1/2} \beta_c \Phi(0))^{-1} E_4^n, \\ v_n &= -c_{h1} \mathcal{M}_1(h') E_3^n, \\ u_n &= u^* + c_{k2} E_4^n. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Оскільки  $E_4 < 1$ , то з ростом  $n$  із (2.17) маємо

$$\lim_{n \rightarrow \infty} r_n = r^*, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} u_n = u^*.$$

Величини  $w_n$  та  $v_n$  з ростом  $n$  будуть віддалятися від їхніх фіксованих значень із (2.5), причому

$$\lim_{n \rightarrow \infty} w_n \gg \lim_{n \rightarrow \infty} v_n,$$

оскільки  $E_1 > E_3$ . Однак, завжди знайдеться таке значення  $n_h$ , що для всіх  $n < n_h$  відхилення  $w_n - w^*$  та  $v_n - v^*$  не будуть перевищувати деякого, наперед заданого числа. Така поведінка забезпечується наявністю множника  $\mathcal{M}_1(h')$ . Оскільки при  $h' \ll 1$  маємо

$$th(h') \approx h'$$

величина  $n_h$  може приймати великі значення при малих  $h$  і в границі  $h' \rightarrow 0$  отримуємо  $n_h \rightarrow \infty$ .

Використаємо формули (2.10) для знаходження явної залежності  $h_2^{(n)}$  та  $h_3^{(n)}$  від номера  $n$  для  $n < n_p$ . Нагадаємо, що  $n_p = m_\tau$  у випадку  $h = 0$  та  $n_p = n_h$  при  $h \neq 0$  та  $\tau = 0$ . Для  $h_2^{(n)}$  знаходимо

$$h_2^{(n)} = h_{22} \left[ c_{k1}^{(0)} \tau E_2^n - \frac{1}{2} \varphi_0^{-1/2} T_{42}^{(0)} (c_{k1}^{(0)} \tau E_2^n)^2 \right],$$

$$h_{22} = \left( \frac{6}{\varphi_0} \right)^{1/2}. \quad (2.18)$$

При отриманні (2.18) не приймалися до уваги доданки, пропорційні до  $(E_4/E_2)^n$ . Вираз (2.18) має місце для всіх  $n < m_\tau$ . Причому

$$h_2^{(m_\tau)} = h_{22} \left[ f_0 E_2^{-1} - \frac{1}{2} \varphi_0^{-1/2} T_{42}^{(0)} f_0^2 E_2^{-2} \right]. \quad (2.19)$$

При  $s_0 = 2$  та  $s = s^*$  знаходимо  $h_2^{(m_\tau)} = 0.2159$ ,  $h_2^{(m_\tau+1)} = 1.5115$ .

Знайдемо таке значення  $n = n_h$ , що для всіх  $n < n_h$  величини  $w_n$  та  $v_n$  не будуть надто відрізнятися від їхніх фіксованих значень. Оскільки ріст  $w_n$  із збільшенням  $n$  відбувається значно швидше, ніж величини  $v_n$ , то в якості рівняння для визначення  $n_h$  будемо використовувати перше рівняння із (2.10).

$$|h'| E_1^{n_h+1} = f_0. \quad (2.20)$$

Структура цього рівняння подібна до рівняння на визначення величини  $m_\tau$  [2], яка має вигляд

$$c_{k1}^{(0)} \tau E_2^{m_\tau+1} = f_0. \quad (2.21)$$

Рівняння (2.21) приводить до формули (2.13), а рівняння (2.20) має розв'язок

$$n_h = -\frac{\ln \tilde{h}}{\ln E_1} - 1, \quad (2.22)$$

де введене позначення

$$\tilde{h} = |h'|/f_0. \quad (2.23)$$

Явна залежність величини  $h_3^{(n)}$  від номера  $n$  для  $n < n_h$  має вигляд

$$h_3^{(n)} = h_{32} \mathcal{M}_1(h') E_3^n (1 - h_{34} c_{k1}^{(0)} \tau E_2^n), \quad (2.24)$$

де

$$h_{32} = -h_{30} c_{h2} (u^*)^{-3/4}, \quad h_{34} = \frac{3}{4} T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2}.$$

Для  $n = n_h$  із (2.24) маємо

$$h_3^{(n_h)} = h_{32} f_0 \left( \frac{E_3}{E_1} \right)^{n_h} E_1^{-1} (1 - h_{34} c_{k1}^{(0)} \tau E_2^{n_h}). \quad (2.25)$$

Тут

$$\left( \frac{E_3}{E_1} \right)^{n_h} = s^2 \tilde{h}^{4/5}, \quad (2.26)$$

отже,  $h_3^{(n)}$  при  $n < n_\tau$  не перевищує (2.25), яке в свою чергу є пропорційне до (2.26).

Вираз (2.24) справедливий при умові  $n < m_\tau$ , оскільки останній доданок в (2.24) має зміст лише в цьому випадку. При  $n > m_\tau$  формула (2.24) має бути замінена на більш загальну.

Приймаючи до уваги (2.18) та (2.24), отримуємо залежність від  $n$  ( $n < n_h, n < m_\tau$ ) величини  $Q_n$

$$\begin{aligned} \ln Q_n = & N_0 s^{-3n} \left[ H_{20} + (H_{21} E_2^{-1} - \gamma) h_{22} c_{k1}^{(0)} \tau E_2^n + \right. \\ & + \frac{1}{2} \varphi_0^{-1/2} h_{22} T_{42}^{(0)} (\gamma - H_{21} E_2^{-2}) (c_{k1}^{(0)} \tau E_2^n)^2 + \\ & + \left( \frac{3}{8} \gamma - H_{22} E_3^{-2} \right) (h_{32} h' E_3^n)^2 + \\ & \left. + 2h_{34} \left( \frac{H_{22}}{E_2 E_3^2} - \frac{3}{8} \gamma \right) c_{k1}^{(0)} \tau E_2^n (h_{32} h' E_3^n)^2 \right]. \quad (2.27) \end{aligned}$$

Коефіцієнти  $H_{20}$ ,  $H_{21}$  та  $H_{22}$  наведені в (1.29) та (1.32).



### 3. Розрахунок вкладу до вільної енергії системи від ділянки критичного режиму

Відповідно до (1.1) вільна енергія системи поблизу критичної точки містить вклад  $F_{\text{кр}}$ , який має вигляд (1.4). Саме ця величина описує особливості поведінки термодинамічних функцій поблизу критичної точки при  $h = 0$ . Розрахунок виразу (1.4) будемо здійснювати з використанням формули (2.27). При цьому не будемо конкретизувати явного вигляду величини  $n_p$ . В подальшому розгляді це буде зроблено у граничному випадку, коли  $T = T_c$ . Він описує траєкторію руху до криїчної точки, коли  $\tau = 0$  та  $h \neq 0$ . Тут  $n_p = n_h$ . Другий випадок передбачає ситуацію, коли система наближається до критичної точки при  $\tau \neq 0$  та  $h \neq 0$ , однак  $\tau$  та  $h$  прямують до нуля синхронно. Це буде предметом розгляду окремої роботи. Можливий також випадок, коли  $h = 0$ , а  $\tau \rightarrow 0$ . Тоді  $n_p = m_\tau$ . Цей випадок був детально досліджений в [2].

Запишемо вираз для  $F'_{\text{кр}}$  із (1.12) у вигляді

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

$F_{\text{кр}}^{(0)}$  відповідає вкладу від першого доданку із (2.27) і не містить явної залежності ні від температури  $\tau$ , ні від поля  $h$ . Він має вигляд

$$F_{\text{кр}}^{(0)} = -kTN_0 \sum_{n=1}^{n_p} H_{20} s^{-3n}. \quad (3.2)$$

Вираз для  $F_{\text{кр},2}$  складається із двох доданків

$$F_{\text{кр},2} = F_{\text{кр},2}^{(1)} + F_{\text{кр},2}^{(2)}, \quad (3.3)$$

кожен з яких явним чином залежить від температури (див. (2.27))

$$\begin{aligned} F_{\text{кр},2}^{(1)} &= -kTN_0 h_{22} \left( \frac{H_{21}}{E_2} - \gamma \right) c_{k1}^{(0)} \tau \sum_{n=1}^{n_p} s^{-3n} E_2^n, \\ F_{\text{кр},2}^{(2)} &= -kTN_0 \frac{1}{2} T_{42}^{(0)} h_{22} \varphi_0^{-1/2} \times \\ &\times \left( \gamma - \frac{H_{21}}{E_2^2} \right) (c_{k1}^{(0)} \tau)^2 \sum_{n=1}^{n_p} s^{-3n} E_2^{2n}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Величина  $F_{\text{кр},3}$  містить два доданки

$$F_{\text{кр},3} = F_{\text{кр},3}^{(1)} + F_{\text{кр},3}^{(2)}, \quad (3.5)$$

які пропорційні до квадрату зовнішнього поля

$$\begin{aligned} F_{\text{кр},3}^{(1)} &= -kTN_0 h_{32}^2 \left( \frac{3}{8} \gamma - \frac{H_{22}}{E_3^2} \right) (h')^2 \sum_{n=1}^{n_p} s^{-3n} E_3^{2n}, \\ F_{\text{кр},3}^{(2)} &= -kTN_0 2h_{32}^2 h_{34} \left( \frac{H_{22}}{E_2 E_3^2} - \frac{3}{8} \gamma \right) c_{k1}^{(0)} \tau (h')^2 \times \\ &\times \sum_{n=1}^{n_p} s^{-3n} E_2^n E_3^{2n}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Виконуючи сумування в (3.2), отримуємо

$$F_{\text{кр}}^{(0)} = -kTN_0 (F_{10} s^{-3} - F_{10} s^{-3(n_p+1)}), \quad (3.7)$$

де

$$F_{10} = H_{20} (1 - s^{-3})^{-1}. \quad (3.8)$$

Для  $F_{\text{кр},2}$  знаходимо

$$\begin{aligned} F_{\text{кр},2} &= -kTN_0 \left\{ F_{11} s^{-3} E_2 \tilde{\tau} + F_{12} s^{-3} E_2^2 \tilde{\tau}^2 - \right. \\ &\left. - \left[ F_{11} \tilde{\tau} E_2^{n_p+1} + F_{12} (\tilde{\tau} E_2^{n_p+1})^2 \right] s^{-3(n_p+1)} \right\}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

де

$$\begin{aligned} F_{11} &= f_0 h_{22} \left( \frac{H_{21}}{E_2} - \gamma \right) (1 - s^{-3} E_2)^{-1}, \\ F_{12} &= \frac{1}{2} T_{42}^{(0)} h_{22} \varphi_0^{-1/2} \left( \gamma - \frac{H_{21}}{E_2^2} \right) f_0^2 (1 - s^{-3} E_2)^{-1}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Для величини  $F_{\text{кр},3}$  маємо

$$\begin{aligned} F_{\text{кр},3} &= -kTN_0 \left\{ F_{13} s^{-3} E_3^2 \tilde{h}^2 + F_{14} s^{-3} E_3^2 E_2 \tilde{\tau} \tilde{h}^2 - \right. \\ &\left. - \left[ F_{13} \tilde{h}^2 E_3^{2(n_p+1)} + F_{14} \tilde{h}^2 E_3^{2(n_p+1)} \tilde{\tau} E_2^{n_p+1} \right] s^{-3(n_p+1)} \right\}, \end{aligned} \quad (3.11)$$

де

$$\begin{aligned} F_{13} &= h_{32}^2 f_0^2 \left( \frac{3}{8} \gamma - \frac{H_{22}}{E_3^2} \right) (1 - s^{-3} E_3^2)^{-1}, \\ F_{14} &= 2h_{32}^2 f_0^2 \left( \frac{H_{22}}{E_2 E_3^2} - \frac{3}{8} \gamma \right) h_{34} (1 - s^{-3} E_2 E_3^2)^{-1}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

В залежності від значення величини  $n_p$  вирази  $F_{кр}^{(0)}$ ,  $F_{кр,2}$  та  $F_{кр,3}$  будуть мати різну залежність від поля  $h$  та температури  $\tau$ .

Знайдемо залежність від поля (при  $h \rightarrow 0$ ) виразу  $F'_{кр}$  у випадку  $\tau = 0$ . Температура  $T = T_c$  означена в [1,2]. Рекурентні співвідношення в цьому випадку мають вигляд (2.17). Для величини  $h_2^{(n)}$  при  $\tau = 0$  маємо

$$\lim_{n \rightarrow \infty} h_2^{(n)} = h_2^* = 0. \quad (3.13)$$

Оскільки  $E_4 < 1$ , то відповідно до (1.16), (2.12) границя (3.13) досягається вже при  $n \geq 1$ . Для аргумента  $h_3^{(n)}$ , відповідно до рівності (2.24), отримуємо

$$h_3^{(n)} = h_{32} h' E_3^n. \quad (3.14)$$

Тут ми скористалися із малості  $h$  і поклали  $\mathcal{M}_1(h') \approx h'$ .

Як було встановлено вище, випадок  $\tau = 0$  відповідає рівності

$$n_p = n_h, \quad (3.15)$$

де величина  $n_h$  означена в (2.22). Приймаючи до уваги (3.15), знаходимо

$$F_{кр}^{(0)} = -kTN_0 F_{10} s^{-3} + kTN_0 F_{10} \tilde{h}^{6/5}, \quad (3.16)$$

оскільки

$$s^{-3(n_h+1)} = \tilde{h}^{6/5}. \quad (3.17)$$

Вклади пов'язані з  $F_{кр,2}$  дають нульовий вклад, оскільки відповідно до (3.9) вони пропорційні до  $\tau$ . Для  $F_{кр,3}$  знаходимо

$$F_{кр,3} = -kTN_0 \left[ F_{13} s^{-3} E_3^2 \tilde{h}^2 - F_{13} \tilde{h}^2 E_3^{2(n_h+1)} \tilde{h}^{6/5} \right]. \quad (3.18)$$

Останній доданок в (3.18) є зникаюче малим. В цьому легко переко-натися оцінивши величину вкладу

$$\tilde{h}^2 E_3^{2(n_h+1)} = \tilde{h}^2 \tilde{h}^{-2 \frac{\ln E_3}{\ln E_1}} = \tilde{h}^{8/5}. \quad (3.19)$$

Приймаючи до уваги (3.19) знаходимо, що останній доданок в (3.18) пропорційний  $\tilde{h}^{14/5} \ll \tilde{h}^2$ .

Таким чином, для  $F_{кр}$  при  $\tau = 0$  маємо вираз

$$F'_{кр} = -kTN_0 \left[ e'_{c0} + e'_{c1} \tilde{h}^{6/5} + e'_{c2} \tilde{h}^2 \right], \quad (3.20)$$

де

$$\begin{aligned} e'_{c0} &= F_{10} s^{-3} = H_{20} (s^3 - 1)^{-1}, \\ e'_{c1} &= -F_{10}, \\ e'_{c2} &= F_{13} s^{-3} E_3^2. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Для оцінки порядку величини та знаків коефіцієнтів  $e'_{cl}$  приведемо їх значення для деякого набору початкових параметрів. Оскільки розрахунки в рамках моделі  $\rho^4$  проводяться при малих значеннях аргумента  $h_2^*$ , то параметр ренормгрупи  $s$  визначається певним рівнянням і рівний  $s^* = 3.3783$  [1]. Відповідне йому значення критичного показника кореляційної довжини  $\nu = 0.609$ . Якщо обчислення виконувати з використанням моделі  $\rho^6$ , яка точніше описує систему з гамільтоніаном (1), то значення  $\nu = 0.639$  [4]. Це краще узгоджується з даними числових розрахунків та результатами теоретико-польового підходу [5]. Однак використання моделі  $\rho^4$  дозволяє не лише отримати неklasичне значення  $\nu = 0.609$ , але й явний вигляд вільної енергії та інших термодинамічних функцій. При цьому маємо їхню залежність від мікроскопічних параметрів гамільтоніану задачі та потенціалу взаємодії між частинками. Це дозволяє зрозуміти особливості критичної поведінки ґраткової тривимірної системи спінів поблизу критичної точки при  $h \neq 0$ .

Покладемо

$$s_0 = 2, \quad b = 0.3c. \quad (3.22)$$

Для такого набору параметрів

$$e'_{c0} = 0.038, \quad e'_{c1} = -1.471, \quad e'_{c2} = -0.081. \quad (3.23)$$

Знайдемо вираз для  $F_{кр}$  із (1.4). Маємо

$$\ln Q_n = N_0 \left[ e''_{c0} + e''_{c2} \tilde{h}^2 \right], \quad (3.24)$$

де

$$\begin{aligned} e''_{c0} &= \tilde{a} + \frac{1}{4} \ln(24/a_4) + \ln \gamma_1 - \gamma h_2^{(0)}, \\ e''_{c2} &= \frac{3}{8} \gamma f_0^2 h_{30}^2 s_0^{d/2} (-\mathcal{M}_4(h'))^{1/2} (\mathcal{M}_2(h'))^{-2}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Величини, що входять до складу коефіцієнтів (3.25) приведені в (1.6)-(1.11). Відповідно до (1.4) знаходимо

$$F_{кр} = -kTN_0 \left[ e_{c0} + e_{c1} \tilde{h}^{6/5} + e_{c2} \tilde{h}^2 \right], \quad (3.26)$$

де

$$\begin{aligned} e_{c0} &= e'_{c0} + e''_{c0}, \\ e_{c1} &= e'_{c1}, \\ e_{c2} &= e'_{c2} + e''_{c2}. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Для випадку (3.22) маємо

$$e_{c0} = 0.875, \quad e_{c1} = -1.471, \quad e_{c2} = 0.016. \quad (3.28)$$

Можна перекоонатися, що вклади до фізичних характеристик системи, зокрема до параметра порядку  $\left(\sigma_{кр} = -\left(\frac{\partial F_{кр}}{\partial h}\right)_T\right)$ , які відповідають ділянці критичного режиму - є термодинамічно нестійкими. Так отримуємо вираз

$$\sigma_{кр} = \sigma_{кр,0} \tilde{h}^{1/5},$$

який має правильну асимптотику при  $h \rightarrow 0$ , однак величина  $\sigma_{кр,0}$  приймає від'ємні значення. Така ситуація нагадує особливості температурної поведінки системи у випадку  $h = 0$  та  $T \rightarrow T_c$ , коли вклади до термодинамічних величин від ділянки критичного режиму приводили до від'ємних значень критичних амплітуд [2].

Врахування вкладів до вільної енергії системи від довгохвильових флуктуацій параметра порядку дозволяє усунути цю недолугість і отримати додатні сумарні значення для критичних амплітуд.

#### 4. Розрахунок вкладів до вільної енергії системи від довгохвильових флуктуацій

Щоб отримати вираз для повної вільної енергії поблизу критичної точки відповідно до (1.1) слід знайти вклади  $F_p$  та  $F_I$ . Для першого з них відповідно до (1.33) маємо

$$F_p = -kTN_{n_p+1} \ln Q(P^{(n_p)}), \quad (4.1)$$

де  $N_{n_p+1} = N_0 s^{-3(n_p+1)}$ , а для  $Q(P)$  маємо

$$Q(P^{(n_p)}) = (2\pi\gamma)^{-1/2} \left(a^{(n_p)}/24\right)^{1/4} \times \exp\left(-H_{22}(h_3^{(n_p)})^2\right) \left(1 - \frac{3}{4}s^{-d}G_0\right) (1 + H_{211}h_2^{(n_p)}). \quad (4.2)$$

Розглянемо випадок  $\tau = 0$ , що відповідає  $n_p = n_h$ . Тоді

$$a_4^{(n_h)} = u^* s^{-4n_h}, \quad (4.3)$$

де  $u^* = \varphi_0(\beta_c \Phi(0))^2$ . При цьому  $h_2^{(n_h)} = 0$ , а для  $h_3^{(n)}$  маємо

$$h_3^{(n_h)} = h_{32} \tilde{h} f_0 E_3^{n_h} = h_{32} f_0 E_1^{-1} \cdot (E_3/E_1)^{n_h}.$$

Однак,

$$(E_3/E_1)^{n_h} = s^2 \tilde{h}^{4/5}, \quad (4.4)$$

тому

$$h_3^{(n_h)} = h_{32} f_0 s^2 E_1^{-1} \tilde{h}^{4/5}. \quad (4.5)$$

Таким чином, для  $F_p$  знаходимо

$$F_p = -kTcN_0 s^{-3(n_h+1)} [f_p - n_h \ln s - f_{p2} \tilde{h}^{8/5}], \quad (4.6)$$

де введені позначення

$$f_p = -\frac{1}{2} \ln(2\pi\gamma) - \frac{1}{4} \ln 24 + \frac{1}{4} \ln u^* + \ln \left(1 - \frac{3}{4} s^{-d} G_0\right), \\ f_{p2} = -H_{22} h_{32}^2 f_0^2 s^4 E_1^{-2}. \quad (4.7)$$

При значеннях початкових параметрів в (3.22) маємо

$$f_p = -1.549, \quad f_{p2} = -0.958. \quad (4.8)$$

Приймаючи до уваги (3.17) для  $F_p$  знаходимо

$$F_p = -kTcN_0 \tilde{h}^{6/5} (f_p - n_h \ln s). \quad (4.9)$$

Тут ми не приймаємо до уваги останній доданок із (4.6), оскільки він пропорційний до  $\tilde{h}^{14/5} \ll \tilde{h}^2$ . Вираз (4.9) містить доданок, пропорційний до

$$\tilde{h}^{6/5} \ln \tilde{h}, \quad (4.10)$$

який порушує однорідність вільної енергії. Як буде показано нижче, він скорочується із відповідним доданком із  $F_I$ , який має вигляд

$$F_I = -kT \ln I_{n_h+1}, \quad (4.11)$$

де

$$I_{n_h+1} = \int (d\rho)^{N_{n_p+1}} \exp \left[ -\tilde{a}_1^{(n_h+1)} N_{n_h+1}^{1/2} \rho_0 - \frac{l}{2} \sum_{k \in \mathcal{B}_p} d_{n_h+1}(k) \rho_{\vec{k}} \rho_{-\vec{k}} - \frac{1}{4!} \frac{a_4^{(n_h+1)}}{N_{n_h+1}} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \in \mathcal{B}_p}} \rho_{\vec{k}_1} \dots \rho_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_4} \right], \quad (4.12)$$

де для  $\mathcal{B}_p = \mathcal{B}_{n_p+1}$  маємо

$$\mathcal{B}_{n_p+1} = \left\{ \vec{k} = (k_x, k_y, k_z) |_{k_i} = -\frac{\pi}{c_p} + \frac{2\pi}{c_p} \frac{n_i}{N_{p_i}}; \right. \\ \left. n_i = 1, 2, \dots, N_{p_i}, \quad i = x, y, z \right\}, \quad (4.13)$$

де  $N_{px}N_{py}N_{pz} = N_p$ ,  $N_p = N_0 s^{-3(n_h+1)}$ ,  $c_p = c_0 s^{-(n_h+1)}$ .

У виразі (4.12) не приймається до уваги коефіцієнт  $a_3^{(n_h+1)}$ , оскільки він є малим. В цьому легко переконатися шляхом його прямого розрахунку. Запишемо вирази для коефіцієнтів  $a_n^{(n_h+1)}$

$$\begin{aligned} \tilde{a}_1^{(n_h+1)} &= s^{-(n_h+1)} w_{n_h+1}, \\ d_{n_h+1}(0) &= s^{-2(n_h+1)} r_{n_h+1}, \\ a_3^{(n_h+1)} &= s^{-3(n_h+1)} v_{n_h+1}, \\ a_4^{(n_h+1)} &= s^{-4(n_h+1)} u_{n_h+1}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Із (2.17) знаходимо (при  $\tau = 0$ )

$$\begin{aligned} w_{n_h+1} &= -c_{h_1} f_0, & r_{n_h+1} &= -f_0 \beta_c \Phi(0), \\ v_{n_h+1} &= -c_{h_1} f_0 \left( \frac{E_3}{E_1} \right)^{n_h+1}, & u_{n_h+1} &= \varphi_0 (\beta_c \Phi(0))^2. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Приймаючи до уваги (4.4), знаходимо

$$\begin{aligned} \tilde{a}_1^{(n_h+1)} &= -c_{h_1} f_0 \tilde{h}^{2/5}, \\ d_{n_h+1}(0) &= -f_0 \beta_c \Phi(0) \tilde{h}^{4/5}, \\ a_3^{(n_h+1)} &= -c_{h_1} s^2 \tilde{h}^2, \\ a_4^{(n_h+1)} &= \varphi_0 (\beta_c \Phi(0))^2 \tilde{h}^{8/5}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Із рівностей (4.16) видно, що коли  $h \rightarrow 0$ ,  $a_3^{(n_h+1)}$  значно швидше прямує до нуля, ніж решта коефіцієнтів.

Для спрощення розрахунку (4.12) виконаємо заміну змінних

$$\rho_{\vec{k}} = \eta_{\vec{k}} + \sigma \sqrt{N} \delta_{\vec{k},0}. \quad (4.17)$$

Тоді

$$I_{n_h+1} = e^{E_0(\sigma)} \int (d\eta)^{N_{n_h+1}} \exp \left[ A_0 \sqrt{N} \eta_0 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_p} \bar{d}(k) \times \right.$$

$$\begin{aligned} &\times \eta_{\vec{k}} \eta_{-\vec{k}} - \frac{\bar{b}}{3!} N_{n_p+1}^{-1/2} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_3 \\ \vec{k}_i \in \mathcal{B}_p}} \eta_{\vec{k}_1} \dots \eta_{\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_3} - \\ &\left. - \frac{\bar{a}_4}{4!} N_{n_h+1}^{-1} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_4 \\ \vec{k}_i \in \mathcal{B}_p}} \eta_{\vec{k}_1} \dots \eta_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_4} \right]. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Величина  $E_0(\sigma)$  має вигляд

$$E_0(\sigma) = h' N \sigma \frac{\mathcal{M}_{20}}{\mathcal{M}_2} - \frac{1}{2} d_{n_h+1}(0) N \sigma^2 - \frac{\sigma^4}{24} N^2 \frac{a_4^{(n_h+1)}}{N_{n_h+1}}. \quad (4.19)$$

Для коефіцієнтів  $A_0$ ,  $\bar{d}(k)$ ,  $\bar{b}$  та  $\bar{a}_4$  отримуємо рівності

$$\begin{aligned} A_0 &= h' \mathcal{M}_{20} / \mathcal{M}_2 - d_{n_h+1}(0) \sigma - \frac{1}{6} a_4^{(n_h+1)} N N_{n_h+1}^{-1} \sigma^3, \\ \bar{d}(k) &= \bar{d}(0) + 2\beta \Phi(0) b^2 k^2, \\ \bar{d}(0) &= d_{n_h+1}(0) + \frac{1}{2} N \sigma^2 \frac{a_4^{(n_h+1)}}{N_{n_h+1}}, \\ \bar{b} &= \sigma a_4^{(n_h+1)} (N / N_{n_h+1})^{1/2}, \\ \bar{a}_4 &= a_4^{(n_h+1)}. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Величину змінення  $\sigma$  розраховуємо із умови екстремуму  $E_0(\sigma)$

$$\frac{\partial E_0(\sigma)}{\partial \sigma} = 0. \quad (4.21)$$

Маємо рівняння

$$h' \mathcal{M}_{20} / \mathcal{M}_0 - d_{n_h+1}(0) \sigma - \frac{1}{6} \sigma^3 a_4^{(n_h+1)} N / N_{n_h+1} = 0. \quad (4.22)$$

Розв'язок (4.22) шукатимемо у вигляді

$$\sigma = \sigma_0 \tilde{h}^{1/5}. \quad (4.23)$$

В результаті підстановки (4.23) в (4.22) отримуємо

$$h' \frac{\mathcal{M}_{20}}{\mathcal{M}_2} + f_0 \beta_c \Phi(0) \sigma_0 \tilde{h} - \frac{\varphi_0}{6} (\beta_c \Phi(0))^2 s_0^3 \sigma_0^3 \tilde{h} = 0. \quad (4.24)$$

При  $h \neq 0$  можемо скоротити на  $\tilde{h}$  і для випадку  $h > 0$  маємо рівняння

$$f_0 \frac{\mathcal{M}_{20}}{\mathcal{M}_2} + f_0 \beta_c \Phi(0) \sigma_0 - \frac{\varphi_0}{6} (\beta_c \Phi(0))^2 s_0^3 \sigma_0^3 = 0, \quad (4.25)$$

з якого знаходимо  $\sigma_0 = \sigma_0(s_0, b/c)$ .

В таблиці 1 приведені значення  $\sigma_0$  для різних значень параметра  $s_0$  при  $b/c = 0.3$ . Таблиця 2. ілюструє залежність значення  $\sigma_0$  для

Табл. 1.

$s_0$	1.2	1.25	1.50	2.0	2.5	3.0	3.5	5.0
$\sigma_0$	1.783	1.711	1.484	1.283	1.180	1.105	1.050	0.927

різних значень  $b/c$  при  $s_0 = 2.0$ . Як легко бачити, рівняння (4.25)

Табл. 2.

$b/c$	0.25	0.28	0.30	0.35	0.40	0.50	0.80	0.90
$\sigma_0$	1.438	1.341	1.283	1.160	1.058	0.899	0.598	0.526

має один дійсний та два комплексно-спряжених корені. Зауважимо, що значення коефіцієнта  $\bar{d}(0)$  не чутливе до зміни напрямку поля, оскільки воно пропорційне до  $\sigma_0^2$ .

Обчисливши величину  $\sigma$  можемо знайти вирази для коефіцієнтів (4.20). Зауважимо, що

$$A_0 = 0. \quad (4.26)$$

Остання рівність є наслідком (4.22) і має місце при довільних значеннях параметрів  $s_0$  та  $b/c$ . Для  $\bar{d}(0)$  із (4.20) маємо

$$\bar{d}(0) = Dg\tilde{h}^{4/5}f_0\beta_c\Phi(0), \quad (4.27)$$

де

$$Dg = \sigma_0^2 \frac{1}{2} s_0^3 \varphi_0 f_0^{-1} \beta_c \Phi(0) - 1. \quad (4.28)$$

Скориставшись із даних табл. 1 та табл. 2, легко зауважити, що  $\bar{d}(0)$  приймає додатні значення. Для коефіцієнтів  $\bar{b}$  та  $\bar{a}_n$  одержуємо

$$\begin{aligned} \bar{b} &= \tilde{h}^{6/5} \varphi_0 (\beta_c \Phi(0))^2 s_0^{3/2} \sigma_0, \\ \bar{a}_n &= \tilde{h}^{8/5} \varphi_0 (\beta_c \Phi(0))^2. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Приймаючи до уваги (4.23), із (4.19) знаходимо

$$E_0 = NE_{00}\tilde{h}^{6/5}, \quad (4.30)$$

де

$$\begin{aligned} E_{00} &= \sigma_0 f_0 \mathcal{M}_{20} / \mathcal{M}_2 + \frac{1}{2} \sigma_0^2 f_0 \beta_c \Phi(0) - \\ &- \frac{1}{24} s_0^3 \sigma_0^4 \varphi_0 (\beta_c \Phi(0))^2. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Слід зауважити, що величина  $E_0(\sigma)$  не залежить від знаку поля. Це слідує із функціональної залежності (4.19). Перший доданок правої частини рівності (4.19) пропорційний до  $h\sigma_0$  і не змінюється при заміні  $h \rightarrow -h$  та  $\sigma_0 \rightarrow -\sigma_0$ . Решта доданків пропорційні до  $\sigma_0^2$ .

При виконанні (3.22) знаходимо

$$E_{00} = 0.348. \quad (4.32)$$

Оскільки  $\bar{d}(0)$  приймає додатні значення, при розрахунку (4.18) можемо обмежитися гаусовим наближенням. Маємо

$$I_{n_h+1} = \exp(E_0) \prod_{\vec{k} \in \mathcal{B}_p} (\pi / \bar{d}(k))^{1/2}. \quad (4.33)$$

Внесок до вільної енергії  $F_I$  є наступний

$$F_I = -kT_c N E_{02} \tilde{h}^{6/5} + kTN E_{03}, \quad (4.34)$$

де

$$E_{02} = E_{00} + E_{01}; \quad E_{01} = \frac{1}{2} s_0^{-3} \ln \pi. \quad (4.35)$$

Для  $E_{03}$  маємо

$$E_{03} = \frac{1}{2} \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{B_{n_h+1}} \ln \bar{d}(k). \quad (4.36)$$

Для розрахунку (4.36) скористаємося з інтегрального представлення [2]

$$E_{03} = \frac{1}{2} \frac{1}{N} \frac{6}{\pi} \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{B_{n_h+1}} dkk^2 \ln \bar{d}(k). \quad (4.37)$$

Тут  $V = Nc^3$ . Після перетворень знаходимо

$$E_{03} = \frac{1}{2} s_0^{-3} s^{-3(n_h+1)} I_0, \quad (4.38)$$

де

$$I_0 = 3 \int_0^1 dx x^2 [-2(n_h+1) \ln s + \ln(D_0 + D_1 x^2)]. \quad (4.39)$$

Тут

$$\begin{aligned} D_0 &= \frac{1}{2}s_0^3\sigma_0^2\varphi_0(\beta_c\Phi(0))^2 - f_0\beta_c\Phi(0), \\ D_1 &= 2\beta_c\Phi(0)b^2B^2s_0^{-2}. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Виконуючи інтегрування в (4.39), маємо

$$I_0 = -2(n_h + 1)lns + I'_0, \quad (4.41)$$

де

$$\begin{aligned} I'_0 &= ln(D_0 + D_1) - \frac{2}{3} + 2\frac{D_0}{D_1} - \\ &- 2\left(\frac{D_0}{D_1}\right)^2 \frac{D_1}{\sqrt{D_0D_1}} \operatorname{arctg} \frac{D_1}{\sqrt{D_0D_1}}. \end{aligned} \quad (4.42)$$

В результаті таких перетворень отримуємо вираз для  $F_I$

$$F_I = -kT_cN E_{02}\tilde{h}^{6/5} + kT_cN_0\tilde{h}^{6/5} \left[ -(n_h + 1)lns + \frac{1}{2}I'_0 \right]. \quad (4.43)$$

Легко бачити, що доданок типу

$$kTN_0\tilde{h}^{6/5}n_hlns,$$

що входить до складу (4.43), скорочуються із відповідним доданком із (4.9). Однорідність вільної енергії зберігається.

Підсумовуючи отримані вище вирази для  $F_{кр}$ ,  $F_p$  та  $F_I$ , отримуємо

$$F = -kT_cN \left[ lnchh' + l_0 + l_1\tilde{h}^{6/5} + l_2\tilde{h}^2 \right], \quad (4.44)$$

де

$$\begin{aligned} l_0 &= ln2 + \frac{1}{2}\beta_c\Phi(0)\bar{\Phi} + s_0^{-3}e_{c0}, \\ l_1 &= E_{02} + s_0^{-3}(e_{c1} + f_p + lns - \frac{1}{2}I'_0), \\ l_2 &= s_0^{-3}e_{c2}. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Вираз (4.44) відповідає вільній енергії тривимірної ґраткової спінової системи поблизу критичної точки у випадку, коли  $\tau = 0$ , а  $h \rightarrow 0$ .

## 5. Розрахунок параметра порядку та сприйнятливості системи при $\tau = 0$ та $h \rightarrow 0$

Знайдемо поведінку параметра порядку системи, яка знаходиться в магнітному полі  $h$  ( $h > 0$ ) при температурі  $T = T_c$ .

$$\langle \sigma \rangle = - \left( \frac{\partial F}{\partial h} \right)_{T_c}, \quad (5.1)$$

де в якості  $F$  будемо використовувати формулу (4.44). Введемо величину

$$\sigma_h = \frac{1}{N} \langle \sigma \rangle, \quad (5.2)$$

для якої маємо

$$\sigma_h = th(\beta h) + \frac{6}{5f_0}l_1\tilde{h}^{1/5} + 2l_2\tilde{h}/f_0. \quad (5.3)$$

При  $h \ll f$  лінійними доданками можемо знехтувати, так що

$$\sigma_{hc} = \sigma_{h,0}\tilde{h}^{1/\delta}, \quad (5.4)$$

де

$$\sigma_{h,0} = \frac{6}{5f_0}l_1, \quad \delta = 5. \quad (5.5)$$

Крива залежності  $\sigma_h$  при малих значеннях  $h$  приведена на рис. 1 для параметрів моделі (3.22). Сприйнятливість системи знаходимо із співвідношення

$$\chi = - \left( \frac{\partial^2 F}{\partial h^2} \right)_{T_c}. \quad (5.6)$$

Приймаючи до уваги (4.44), знаходимо

$$\chi_h = \frac{k_B T_c}{N} \chi = \chi_0 + \chi_1\tilde{h}^{-4/5}, \quad (5.7)$$

де

$$\begin{aligned} \chi_0 &= 1 - th^2\beta h + \frac{2l_2}{f_0^2}, \\ \chi_1 &= 6l_1/25f_0^2. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Крива залежності  $\chi_h$  від  $h'$  приведена на рис. 2 для випадку (3.22).

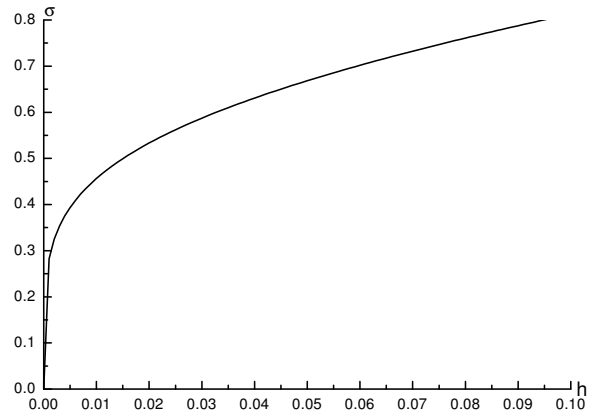


Рис. 1. Залежність від поля  $h' = \beta h$  параметра порядку системи при  $\tau = 0$  для значень параметрів системи  $s_0 = 2$ ,  $b = 0.3c$ .

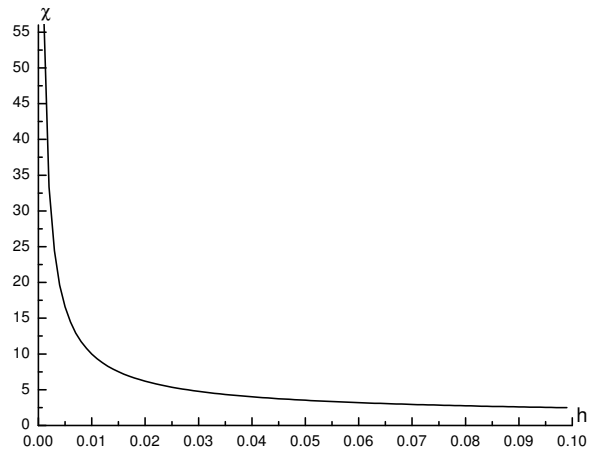


Рис. 2. Залежність нормованої сприйнятливості  $\chi' = \chi/(kT_c N)$  від величини поля  $h' = \beta h$  при  $T = T_c$ .

## Література

1. Козловський М.П. Вплив зовнішнього поля на критичну поведінку тривимірного магнетика. Рекурентні співвідношення. Препринт ICMP-02-06U, Львів, 2002, 43с.
2. Юхновський І.Р., Козловський М.П., Пилук І.В. Мікроскопічна теорія фазових переходів у тривимірних системах. - Львів: Євросвіт, 2001. - 592с.
3. Козловський М.П., Юхновський І.Р. Метод самоузгодженого опису критичної поведінки тривимірних ізінгоподібних систем на мікроскопічному рівні. Препринт ICMP-97-25U, Львів, 1977, 96с.
4. Yukhnovskii I.R., Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V. Phys. Rev. B66, 134410 (2002).
5. Pelissetto A., Vicari E. Phys. Rev. 268, p. 549-727, 2002.

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

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

Михайло Павлович Козловський

Вплив зовнішнього поля на критичну поведінку  
тривимірного магнетика. II. Вільна енергія для випадку  
 $T = T_c$

Роботу отримано 28 грудня 2002 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу СТеКС

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені