

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-04-03U

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. На мікроскопічному рівні виконаний розрахунок термодинамічних функцій тривимірного ізінгоподібного магнетика в зовнішньому полі поблизу критичної точки. Критична поведінка системи при $T > T_c$ описана у випадках як слабких, так і сильних полів. Отримані вирази для вільної енергії, параметра порядку, сприйнятливості, ентропії та теплоємності є явними функціями температури, величини поля і мікроскопічних параметрів системи.

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. We evaluate the thermodynamic functions for an Ising-like magnet near the critical point in the presence of an external field. The calculations are performed on the microscopic level in the three-dimensional space. We described the critical behaviour of the system at $T > T_c$ in the cases of both weak and strong fields. The obtained expressions for the free energy, order parameter, susceptibility, entropy and specific heat are the explicit functions of the temperature, field strength and microscopic parameters of the system.

В роботі [1] запропонований метод розрахунку поблизу критичної точки вільної енергії системи ізінгівських спінів у зовнішньому полі h . Обчислення виконувалися для системи із гамільтоніаном

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{j} \in \Lambda} \Phi(r_{\mathbf{l}\mathbf{j}}) s_{\mathbf{l}} s_{\mathbf{j}} - h \sum_{\mathbf{l} \in \Lambda} s_{\mathbf{l}}, \quad (1)$$

у якому $\Phi(r_{\mathbf{l}\mathbf{j}})$ – деякий короткосяжний потенціал взаємодії. Особливістю способу розрахунку [1] є те, що задавався не вираз для $\Phi(r_{\mathbf{l}\mathbf{j}})$ як функція віддалі між вузлами $r_{\mathbf{l}\mathbf{j}} = |\mathbf{r}_{\mathbf{l}} - \mathbf{r}_{\mathbf{j}}|$, а його фур'є-образ $\Phi'(k)$, для якого використовується співвідношення

$$\Phi(r_{\mathbf{l}\mathbf{j}}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \Phi'(k) e^{i\mathbf{k}r_{\mathbf{l}\mathbf{j}}}. \quad (2)$$

Хвильовий вектор \mathbf{k} приймає значення всередині першої зони Брілюена

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

Тут c – стала простої кубічної ґратки, $N_i^3 = N$ – число вузлів. Відповідно до методу розрахунку статистичної суми з гамільтоніаном (1) поблизу точки фазового переходу [2] величина $\Phi(k)$ замінюється послідовністю деяких не залежних від \mathbf{k} величин. Для цього область значень $\mathbf{k} \in \mathcal{B}$ розбивається на частини $\mathcal{B}_0, \mathcal{B}_1, \mathcal{B}_2, \dots, \mathcal{B}_n$. Для \mathcal{B}_0 маємо

$$\mathcal{B}_0 = \left\{ \mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) \mid k_i = -\frac{\pi}{c_0} + \frac{2\pi}{c_0} \frac{n_i}{N_{0i}}; \right. \\ \left. n_i = 1, 2, \dots, N_{0i}, \quad i = x, y, z \right\}, \quad (4)$$

де $N_{0x}N_{0y}N_{0z} = N_0$, $N_0 = Ns_0^{-d}$, причому $s_0 \geq 1$, d – вимірність простору (в даних розрахунках $d = 3$). Параметр s_0 визначає величину періоду деякої ефективної ґратки:

$$c_0 = cs_0. \quad (5)$$

Вважається, що для кожного конкретного короткосяжного потенціалу взаємодії величина s_0 приймає таке значення, що при всіх $\mathbf{k} \in \mathcal{B}_0$

для $\Phi(k)$ має місце параболічна апроксимація. Так, для експонентно спадного потенціалу $\Phi(r_{\mathbf{l}\mathbf{j}}) = A \exp(-r_{\mathbf{l}\mathbf{j}}/b)$ маємо

$$\Phi(k) = \begin{cases} \Phi(0)(1 - 2b^2k^2), & \mathbf{k} \in \mathcal{B}_0, \\ \Phi_0 = \Phi(0)\bar{\Phi}, & \mathbf{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0. \end{cases} \quad (6)$$

Для всіх $\mathbf{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0$ величина $\Phi(k)$ вважається постійною. Таким чином, модель з гамільтоніаном (1) містить два додаткових параметри. Перший з них $\bar{\Phi}$ може визначатися з умови

$$\bar{\Phi} = \frac{\int_{\mathcal{B}_0}^B \Phi'(k) k^2 dk}{\int_{\mathcal{B}_0}^B \Phi(0) k^2 dk}. \quad (7)$$

Тут $B = \pi/c$, $B_0 = \pi/c_0$, $\Phi'(k)$ – повний (без параболічної апроксимації) фур'є-образ потенціалу $\Phi(r_{\mathbf{l}\mathbf{j}})$. Розрахунки в даній роботі будуть проілюстровані випадком $\bar{\Phi} = 0.05$. Другий параметр s_0 визначає область значень $\mathbf{k} \in \mathcal{B}_0$, де для $\Phi'(k)$ можна скористатись із наближення (6). Насправді величини $\bar{\Phi}$ та s_0 пов'язані між собою, оскільки вибір s_0 визначає значення $\bar{\Phi}$. Области значень \mathcal{B}_n із $n = 1, 2, \dots$ мають вигляд

$$\mathcal{B}_n = \left\{ \mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) \mid k_i = -\frac{\pi}{c_n} + \frac{2\pi}{c_n} \frac{n_i}{N_{n,i}}; \right. \\ \left. n_i = 1, 2, \dots, N_{n,i}, \quad i = x, y, z \right\}, \quad (8)$$

де $c_n = c_0 s^n$, s – параметр ренормгрупи ($s \geq 1$), $N_n = N_{nx}N_{ny}N_{nz}$. Число вузлів n -ої ефективної блочної структури $N_n = N_0 s^{-dn}$. Відповідно до (8) вводимо об'єм періодичності

$$\Lambda_n = \{ \mathbf{l} = (l_x, l_y, l_z) \mid l_i = c_n n_i; \quad n_i = 1, 2, \dots, N_{n,i}, \quad i = x, y, z \} \quad (9)$$

з циклічними граничними умовами.

Статистична сума моделі (1) із врахуванням (6) записується у вигляді [3]

$$Z = Z_0 j_0 e^{\tilde{a}_0 N_0} \int (d\eta)^{N_0} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_0} d(k) \eta_{\mathbf{k}} \eta_{-\mathbf{k}} - \right. \\ \left. - a_1 N_0^{1/2} \eta_0 - \frac{a_3}{3!} N_0^{-1/2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_3 \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}_0}} \eta_{\mathbf{k}_1} \dots \eta_{\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_3} - \right. \\ \left. - \frac{a_4}{4!} N_0^{-1} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}_0}} \eta_{\mathbf{k}_1} \dots \eta_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right]. \quad (10)$$

Тут

$$\begin{aligned} Z_0 &= 2^N \exp \left[\frac{1}{2} \beta \Phi_0 N \right] e^{N \mathcal{M}_0}, \quad j_0 = \sqrt{2}^{N_0-1}, \\ e^{\tilde{a}_0} &= (2\pi \mathcal{M}_2)^{-1/2} e^{-a'^2/4} \left[1 - \frac{3}{4} g(1 - a'^2) \right], \\ a_1 &= -\frac{a'}{2} \mu_2 (1 - 3g), \\ a_3 &= -\frac{3}{2} \mu_2^3 a' g, \quad a_4 = \frac{3}{2} \mu_2^4 g. \end{aligned} \quad (11)$$

Величини $\mathcal{M}_n(h')$ є кумулянтами:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_0 &= \ln \operatorname{ch} h', & \mathcal{M}_1 &= \operatorname{th} h', \\ \mathcal{M}_2 &= 1 - \mathcal{M}_1^2, & \mathcal{M}_3 &= -2\mathcal{M}_1 \mathcal{M}_2, \\ \mathcal{M}_4 &= -2\mathcal{M}_2^2 + 4\mathcal{M}_1^2 \mathcal{M}_2; \\ h' &= \beta h, & \beta &= 1/(kT). \end{aligned} \quad (12)$$

Для a' , g та μ_2 маємо вирази

$$\begin{aligned} a' &= s_0^{d/2} \mathcal{M}_1(h') \mu_2, \quad \mu_2 = \left(\frac{2}{\mathcal{M}_2(h')} \right)^{1/2}, \\ g &= -s_0^{-d} \frac{1}{6} \mathcal{M}_4(h') / \mathcal{M}_2^2(h'). \end{aligned} \quad (13)$$

Коефіцієнт $d(k)$ пов'язаний з параболічною апроксимацією фур'є-образу потенціалу:

$$\begin{aligned} d(k) &= \tilde{a}_2 - \beta \Phi(0) + 2\beta \Phi(0) b^2 k^2, \\ \tilde{a}_2 &= a_2 + \beta \Phi_0, \quad a_2 = \frac{1}{2} \mu_2^2 \left[1 - 3g \left(1 - \frac{a'^2}{2} \right) \right]. \end{aligned}$$

В нашій попередній роботі [1] було розраховано статистичну суму (10) поблизу критичної точки ($h = 0$, $T = T_c$) для випадків слабких ($h < h_c$) та сильних ($h > h_c$) полів. Величина граничного поля h_c пов'язана з нормованою відносною температурою

$$\tilde{\tau} = \left(\frac{T - T_c}{T_c} \right) c_{k_1}^{(0)} / f_0 \quad (14)$$

співвідношенням [4]

$$\tilde{h}_c = \tilde{\tau}^{p_0}, \quad (15)$$

де $\tilde{h}_c = h_c \beta / f_0$. Показник степеня p_0 рівний

$$p_0 = \frac{d+2}{2} \nu. \quad (16)$$

Тут ν – критичний показник кореляційної довжини, а постійні величини f_0 та $c_{k_1}^{(0)}$ виникають при розв'язку рекурентних співвідношень (РС). Розв'язки РС приведені в [5] і мають вигляд

$$\begin{aligned} w_n &= -c_{h_1} \mathcal{M}_1 E_1^n - c_{h_2} \mathcal{M}_1 T_{13}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} (\beta \Phi(0))^{-1} E_3^n, \\ r_n &= r^* + c_{k_1}^{(0)} \beta \Phi(0) \tau E_2 + c_{k_2} T_{24}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} (\beta \Phi(0))^{-1} E_4^n, \\ v_n &= -c_{h_2} \mathcal{M}_1 E_3^n, \\ u_n &= u^* + c_{k_1}^{(0)} \tau T_{42}^{(0)} \varphi_0^{1/2} (\beta \Phi(0))^2 E_2^n + c_{k_2} E_4^n. \end{aligned} \quad (17)$$

Величини E_l є власними значеннями матриці лінійного перетворення ренормгрупи

$$\begin{pmatrix} w_{n+1} - w^* \\ r_{n+1} - r^* \\ v_{n+1} - v^* \\ u_{n+1} - u^* \end{pmatrix} = \mathcal{R} \begin{pmatrix} w_n - w^* \\ r_n - r^* \\ v_n - v^* \\ u_n - u^* \end{pmatrix}.$$

Вони обчислюються відповідно до формул

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

Значення w^* , r^* , v^* та u^* визначають координати фіксованої точки РС

$$\begin{aligned} w^* &= v^* = 0, \\ r^* &= -f_0 \beta \Phi(0), \quad u^* = \varphi_0 (\beta \Phi(0))^2, \end{aligned} \quad (18)$$

де постійні f_0 та φ_0 виражаються через параметри моделі:

$$\begin{aligned} f_0 &= \pi^2 (b/c)^2 s_0^{-2} (1 + s^{-2}), \\ \varphi_0^{1/2} &= f_0 (1 - s^{-2}) / f_{00}, \quad f_{00} = (1 - 3s^{-d} G_0) / (\gamma \sqrt{24}). \end{aligned} \quad (19)$$

Тут $\gamma = \Gamma(3/4) / \Gamma(1/4) \approx 0.337989$, $G_0 = (12\gamma^2 - 1) / (24\gamma^2) \approx 0.135260$. Інші величини із (17) означені в [5].

1. Загальні положення розрахунку вільної енергії в області слабких полів при $T > T_c$

Відповідно до [1, 4] область малих полів визначається співвідношенням

$$\tilde{h} = \tilde{\tau}^{p_0(1+\Delta)} \leq \tilde{h}_c, \quad (1.1)$$

де $\Delta > 0$. Це дозволяє знайти явний вираз для вільної енергії, однак розрахунок параметра порядку та інших фізичних характеристик є утруднений, оскільки існує функціональний зв'язок між полем і температурою.

В даній роботі розвинутий спосіб розрахунку вільної енергії, при якому не використовується співвідношення (1.1). Як було встановлено в [1, 4] (див. рис. 1), в областях I та IV значення поля є малим в порівнянні із \tilde{h}_c і основну роль тут відіграє температурна змінна $\tilde{\tau}$.

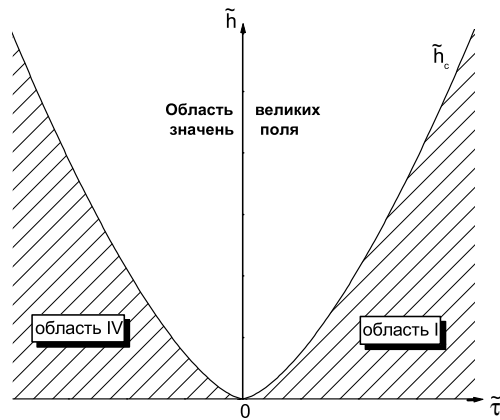


Рис. 1. Діаграма, що визначає області “великих” та “малих” полів поблизу критичної точки та величину граничного значення поля $\tilde{h}_c = \tilde{\tau}^{p_0}$ (вираз для p_0 приведений в (16)).

Вважатимемо, що температура системи $T > T_c$ зафіксована¹ і така, що величина $\tau = (T - T_c)/T_c$ є малою ($\tau \ll 1$). Значення поля \tilde{h} при

¹Величина T_c відповідає температурі фазового переходу при відсутності поля.

цьому змінюється в інтервалі

$$0 < \tilde{h} \ll \tilde{h}_c, \quad (1.2)$$

де \tilde{h}_c обчислюється відповідно до (15).

Скористаємося із методу поетапного обчислення статистичної суми (10), який для випадку наявності поля описаний в [3–5]. Використовуючи результати роботи [1], зобразимо вільну енергію системи при $T > T_c$ для значень поля (1.2) у вигляді

$$F = F_0 + F_{\text{КР}} + F_{\text{ПО}} + F_I, \quad (1.3)$$

де

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

Внесок $F_{\text{КР}}$ відповідає ділянці критичного режиму:

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

Тут перший доданок для малих значень τ та h може бути записаний як

$$\ln Q_0 = N_0 \left(e''_{c0} + e''_{c1} \tilde{\tau} + e''_{c2T} \tilde{\tau}^2 + e''_{c2} \tilde{h}^2 \right). \quad (1.5)$$

Явні вирази для коефіцієнтів e''_{c1} , e''_{c2T} отримані в [1, 4]. Для набору параметрів

$$b/c = 0.3, \quad s_0 = 2, \quad s = s^* = 3.3783 \quad (1.6)$$

маємо

$$\begin{aligned} e''_{c0} &= 0.837, & e''_{c1} &= -0.352, \\ e''_{c2T} &= 0.082, & e''_{c2} &= -0.280. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Частина вільної енергії критичного режиму $F'_{\text{КР}}$ передбачає сумування парціальних вільних енергій від першої до n_p блочної структури:

$$F'_{\text{КР}} = -kT \sum_{n=1}^{n_p} \ln Q_n. \quad (1.8)$$

Величина Q_n має зміст парціальної статистичної суми n -ої блочної структури і поблизу критичної точки представляється у вигляді [5]

$$\begin{aligned} \ln Q_n &= N_n \left[H_{20} + H_{21} h_2^{(n-1)} - \gamma h_2^{(n)} - H_{22} (h_3^{(n-1)})^2 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{3}{8} \gamma (h_3^{(n)})^2 \right]. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Тут вирази для коефіцієнтів H_{20} , H_{21} та H_{22} приведені в [1, 5]. Вони не залежать від параметрів b/c , s_0 , $\bar{\Phi}$ та приймають значення

$$H_{20} = 1.433, \quad H_{21} = 0.087, \quad H_{22} = 3.565. \quad (1.10)$$

Величини $h_2^{(n)}$ та $h_3^{(n)}$ (так звані основні аргументи) при $n \leq n_p$ зображаються у вигляді

$$h_2^{(n)} = h_{22} \left[f_0 \tilde{\tau} E_2^n - \frac{1}{2} \varphi_0^{-1/2} f_0^2 (\tilde{\tau} E_2^n)^2 T_{42}^{(0)} \right],$$

$$h_3^{(n)} = h_{32} \mathcal{M}_1(h') E_3^n (1 - h_{34} f_0 \tilde{\tau} E_2^n). \quad (1.11)$$

Тут $\tilde{\tau}$ – температурна змінна із (14), $\mathcal{M}_1(h')$ – перший кумулянт, який при $h' \ll 1$ пропорційний до h' . Решта величин приймають постійні значення. У випадку (1.6) вони рівні

$$h_{22} = 6.643, \quad h_{32} = -3.945, \quad h_{34} = 0.359,$$

$$f_0 = 0.242, \quad \varphi_0 = 0.136, \quad (1.12)$$

$$E_2 = 7.374, \quad E_3 = 1.838.$$

Слід зауважити, що для області малих значень поля величина n_p рівна [1]

$$n_p = m_\tau = -\frac{\ln \tilde{\tau}}{\ln E_2} - 1. \quad (1.13)$$

Приймаючи до уваги (1.13), із (1.8) та (1.9) знаходимо

$$F'_{\text{КР}} = -kTN_0 \left(f_{CR}^{(0)} + f_{CR}^{(1)} \tilde{\tau} + f_{CR}^{(2)} \tilde{\tau}^2 + f_{CR}^{(3)} \tilde{\tau}^3 + e_{4p} \tilde{\tau}^{3\nu} \right), \quad (1.14)$$

де явний вигляд коефіцієнтів $f_{CR}^{(l)}$ та e_{4p} міститься в [1], а у випадку (1.6) вони приймають значення

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

$$f_{CR}^{(3)} = -0.081, \quad e_{4p} = -0.748. \quad (1.15)$$

Сумуючи вирази (1.5) та (1.14), відповідно до (1.4) отримуємо внесок у вільну енергію системи від ділянки критичного режиму:

$$F_{\text{КР}} = -kTN s_0^{-3} \left(e_{0p} + e_{1p} \tilde{\tau} + e_{2p} \tilde{\tau}^2 + e_{3p} \tilde{\tau}^3 + e_{4p} \tilde{\tau}^{3\nu} \right). \quad (1.16)$$

Явні вирази для коефіцієнтів e_{lp} можна знайти в [1], а при (1.6) вони рівні

$$e_{0p} = 0.876, \quad e_{1p} = -0.476, \quad e_{2p} = -0.025, \quad e_{3p} = -0.361. \quad (1.17)$$

Внесок у вільну енергію (1.3) від перехідної області $F_{\text{ПО}}$ має вигляд

$$F_{\text{ПО}} = F_{m_\tau+1} + F_p. \quad (1.18)$$

Методика розрахунку складових цього внеску детально описана в [1] і тому приведемо результати обчислень. Для першого доданку правої сторони рівності (1.18) отримуємо

$$F_{m_\tau+1} = -kTN_0 f_{mp} \tilde{\tau}^{3\nu}, \quad (1.19)$$

де

$$f_{mp} = H'_{20} + \frac{1}{4} \ln \frac{u_{m_\tau}}{u_{m_\tau+1}} + H_{211} h_2^{(m_\tau)} + \ln K_0(h_2^{(m_\tau+1)}),$$

$$H'_{20} = -\frac{1}{2} \ln(2\pi\gamma) + \ln \left(1 - \frac{3}{4} G_0 s^{-d} \right) + \ln s, \quad (1.20)$$

$$H_{211} = -\frac{1}{2} \left(\gamma - \frac{1}{4\gamma} \right) - \frac{3}{4} s^{-d} G_0 G_2 (G'_{00})^{-1}.$$

Тут постійні G_2 та G'_{00} рівні

$$G_2 = \frac{1}{2\gamma} - 2\gamma + 4\gamma \frac{6\gamma^2 - 1}{12\gamma^2 - 1} \approx -0.3435,$$

$$G'_{00} = 1 - \frac{3}{4} s^{-d} G_0.$$

Для величин $u_{m_\tau+l}$ маємо [1]

$$u_{m_\tau} = u^* \left(1 + f_0 \varphi_0^{-1/2} T_{42}^{(0)} E_2^{-1} \right),$$

$$u_{m_\tau+1} = u^* \left(1 + f_0 \varphi_0^{-1/2} T_{42}^{(0)} \right). \quad (1.21)$$

Із формул (1.11) знаходимо

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

$$h_2^{(m_\tau+1)} = h_{22} f_0 \left(1 - \frac{1}{2} T_{42}^{(0)} f_0 \varphi_0^{-1/2} \right). \quad (1.22)$$

Величина $K_0(h_2^{(m_\tau+1)})$ визначається із співвідношення

$$K_{2l}(h_2^{(m_\tau+1)}) = \int_{-\infty}^{\infty} x^{2l} dx \exp \left(-h_2^{(m_\tau+1)} x^2 - x^4 \right) dx \quad (1.23)$$

при $l = 0$. Для доданку F_p , як це було показано в [1], маємо

$$F_p = -kTN_0s^{-3}\tilde{\tau}^{3\nu} [f_{p2} - (m_\tau + 1) \ln s], \quad (1.24)$$

де

$$f_{p2} = -\ln \pi - \frac{1}{4} \ln 24 + \frac{1}{4} \ln u_{m_\tau+1} - \frac{1}{2} \ln M_2^{(m_\tau+1)} + \ln I_G. \quad (1.25)$$

Тут введено позначення

$$M_{2l}^{(m_\tau+1)} = K_{2l}(h_2^{(m_\tau+1)})/K_0(h_2^{(m_\tau+1)}),$$

де вираз для $K_{2l}(h_2^{(m_\tau+1)})$ приведений в (1.23),

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

причому

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

Як буде показано нижче, при розрахунку повного виразу для вільної енергії системи останній доданок в (1.24) компенсується відповідним доданком із F_I .

Повернемося до формули (1.3). Для величини F_I справедливий вираз [1]

$$F_I = -kT \ln I_{m_\tau+2}, \quad (1.26)$$

де

$$\begin{aligned} I_{m_\tau+2} = & \int (d\rho)^{N_{m_\tau+2}} \exp \left[a_{1m} N^{1/2} \tilde{h} \rho_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{m_\tau+2}} \bar{d}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \right. \\ & - \frac{1}{3!} \bar{a}_3 N_{m_\tau+2}^{-1/2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_3 \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}_{m_\tau+2}}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_3} - \\ & \left. - \frac{1}{4!} \bar{a}_4 N_{m_\tau+2}^{-1} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}_{m_\tau+2}}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right]. \quad (1.27) \end{aligned}$$

Тут введені позначення

$$a_{1m} = f_0 \mathcal{M}_{20} / \mathcal{M}_2,$$

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{20} &= 1 - 3g - 6gT_{13}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} (\beta\Phi(0))^{-1} / \mathcal{M}_2, \\ \bar{d}(k) &= \bar{d}(0) + 2\beta\Phi(0)b^2k^2, \\ \bar{d}(0) &= d_{m_\tau+2}(0) = s^{-2(m_\tau+2)} r_{m_\tau+2}, \\ \bar{a}_3 &= s^{-3(m_\tau+2)} v_{m_\tau+2}, \\ \bar{a}_4 &= s^{-4(m_\tau+2)} u_{m_\tau+2}, \end{aligned} \quad (1.28)$$

де величини $r_{m_\tau+2}$, $v_{m_\tau+2}$ та $u_{m_\tau+2}$ мають вигляд

$$\begin{aligned} r_{m_\tau+2} &= f_0 \beta \Phi(0) (E_2 - 1), \\ v_{m_\tau+2} &= -c_{h2} \mathcal{M}_1(h') E_3^{m_\tau+2}, \\ u_{m_\tau+2} &= u^* \left(1 + f_0 \varphi_0^{-1/2} T_{42}^{(0)} E_2 \right). \end{aligned} \quad (1.29)$$

При розрахунку (1.27) в роботі [1] вважалося, що рух системи до критичної точки відбувається по деякій траєкторії, яка передбачає виконання рівності типу

$$\tilde{h} = \tilde{\tau}^{\rho_0(1+\Delta)}. \quad (1.30)$$

Для значень $\Delta > 0$ траєкторії проходять нижче граничної ($\Delta = 0$) і знаходяться (див. рис. 1) в області I (при $T > T_c$) або області IV (для $T < T_c$). Значення $\Delta < 0$ ($\Delta > -1$) відповідають сильним полям. Співвідношення (1.30) реалізується для реальних систем далеко не завжди. Зазвичай зміна поля та температури не відповідає співвідношенню (1.30) і відбувається незалежно. Тому обмежимося умовою (1.2) на величину поля і проведемо розрахунок (1.27) для фіксованого значення температури

$$0 \leq \tau \leq \tau^*, \quad (1.31)$$

де $\tau^* \approx 10^{-2}$ [2].

2. Вільна енергія системи для малих значень полів при $T > T_c$

Розрахуємо величину $I_{m_\tau+2}$ як функцію температури та поля поблизу критичної точки. Запишемо (1.27) у вигляді

$$I_{m_\tau+2} = \prod_{\substack{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{m_\tau+2} \\ \mathbf{k} \neq 0}} (\pi/\bar{d}(k))^{1/2} I_{m_\tau+2}^{(0)}, \quad (2.1)$$

де

$$I_{m_\tau+2}^{(0)} = \int_{-\infty}^{\infty} d\rho_0 \exp \left[a_{1m} N^{1/2} \tilde{h} \rho_0 - \frac{1}{2} \bar{d}(0) \rho_0^2 - \frac{1}{3!} \bar{a}_3 N_{m_\tau+2}^{-1/2} \rho_0^3 - \frac{1}{4!} \bar{a}_4 N_{m_\tau+2}^{-1} \rho_0^4 \right]. \quad (2.2)$$

При обчисленні (2.1) ми скористалися з того факту, що величина $h_2^{(m_\tau+1)}$ є суттєво більшою за $h_2^{(m_\tau)}$. Це ж стосується і наступних значень $h_2^{(m_\tau+2)}$, $h_2^{(m_\tau+3)}$, Ця обставина дозволяє обмежитися гаусовим розподілом і виконати в (1.27) інтегрування за змінними ρ_k із $k \neq 0$, скориставшись гаусовою мірою².

Для обчислення (2.2) використаємо метод перевалу [6]. Для цього виконаємо заміну змінної

$$\rho_0 = \bar{\rho}_0 \sqrt{N} \quad (2.3)$$

та знайдемо величину $\bar{\rho}_0$ з умови екстремуму показника експоненти підінтегральної функції в (2.2). Маємо рівняння

$$\begin{aligned} -\tilde{h} a_{1m} + \bar{d}(0) \bar{\rho}_0 + \frac{1}{2} \bar{a}_3 s_0^{3/2} s^{3/2} s^{3/2(m_\tau+1)} \bar{\rho}_0^2 + \\ + \frac{1}{6} \bar{a}_4 s_0^3 s^3 s^{3(m_\tau+1)} \bar{\rho}_0^3 = 0. \end{aligned} \quad (2.4)$$

²Числова оцінка (після заміни змінних $\rho_k = N_{m_\tau+2}^{-1/2} \sum_1 \tilde{\rho}_1 \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{l})$ та $(\tilde{\rho}_1)^4 = 4!x^4/\bar{a}_4$ в (1.27))

$$\begin{aligned} \sqrt{6} \frac{\bar{d}(0, B_{m_\tau+2})}{(\bar{a}_4)^{1/2}} &= \sqrt{6} \frac{f_0(E_2 - 1) + \pi^2(b/c)^2 s_0^{-2}}{\varphi_0^{1/2} (1 + f_0 \varphi_0^{-1/2} T_{42}^{(0)} E_2)^{1/2}} = 8.595, \\ \frac{24^{3/4}}{6} \frac{\bar{a}_3}{(\bar{a}_4)^{3/4}} &= -\frac{24^{3/4}}{3} \frac{f_0 E_3}{\varphi_0^{3/4} (\beta\Phi(0))^{3/2} (1 + f_0 \varphi_0^{-1/2} T_{42}^{(0)} E_2)^{3/4}} \times \\ &\times s_0^{-3/2} \frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} \tilde{\tau}^{2\nu} \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad \tilde{h} \rightarrow 0 \end{aligned}$$

свідчить про велике значення коефіцієнта $\sqrt{6}\bar{d}(k)/(\bar{a}_4)^{1/2} = \sqrt{6} [\bar{d}(0) + 2\beta\Phi(0) \times b^2 k^2] / (\bar{a}_4)^{1/2}$ квадратичного члена у виразі (1.27) порівняно з іншими його коефіцієнтами. Наслідком цього є близькість числових значень інтегралів

$$\begin{aligned} I_{x^4} &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-8.595x^2 - 0x^3 - x^4] dx \approx 0.599, \\ I_{x^2} &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-8.595x^2] dx \approx 0.605. \end{aligned}$$

Для знаходження його розв'язку нагадаємо, що мають місце співвідношення

$$\begin{aligned} \bar{d}(0) &= \tilde{\tau}^{2\nu} r_{m_\tau+2} s^{-2}, \quad r_{m_\tau+2} = \beta\Phi(0) f_0 (E_2 - 1), \\ \bar{a}_3 s^{3(m_\tau+2)/2} &= -c_{h2} f_0 \tilde{h} s^{-3} E_3 \tilde{\tau}^\nu = \tilde{\tau}^\nu p_{m_\tau+2} s^{-3} \tilde{h}, \\ p_{m_\tau+2} &= -c_{h2} f_0 E_3, \\ \bar{a}_4 s^{3(m_\tau+1)} &= \tilde{\tau}^\nu u_{m_\tau+2} s^{-4}, \\ u_{m_\tau+2} &= \varphi_0 (\beta\Phi(0))^2 \left(1 + f_0 \varphi_0^{-1/2} T_{42}^{(0)} E_2 \right). \end{aligned} \quad (2.5)$$

Як легко бачити із (2.5), коефіцієнт при кубічному члені в (2.2) та біля квадратичного доданку в (2.4) є зникаюче малим, оскільки $\tilde{h} \leq \tilde{h}_c$. Поблизу критичної точки величини $r_{m_\tau+2}$ та $u_{m_\tau+2}$ можна розрахувати, покладаючи $T = T_c$. Тоді за умов (1.2), (1.6) отримуємо

$$r_{m_\tau+2}(T_c) = 1.969, \quad u_{m_\tau+2}(T_c) = 0.412, \quad a_{1m}(T_c) = 0.295. \quad (2.6)$$

Рівняння (2.4) будемо розв'язувати, виконавши підстановку

$$\bar{\rho}_0 = \sigma \tilde{\tau}^{\nu/2}. \quad (2.7)$$

Отримуємо

$$-a_{1m} \tilde{h} + \tilde{\tau}^{5\nu/2} \left[\sigma s^{-2} r_{m_\tau+2} + \frac{1}{6} \sigma^3 s_0^3 \frac{1}{s} u_{m_\tau+2} \right] = 0. \quad (2.8)$$

Приймаючи до уваги (15), отримуємо зведене кубічне рівняння для σ :

$$\sigma^3 + R_1' \sigma - R_0' \frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} = 0. \quad (2.9)$$

Тут

$$\begin{aligned} R_1' &= 6 \frac{r_{m_\tau+2}}{u_{m_\tau+2}} s^{-1} s_0^{-3}, \\ R_0' &= 6 a_{1m} s \frac{1}{u_{m_\tau+2}} s_0^{-3}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Для набору параметрів (1.6) знаходимо

$$R_0' = 1.814, \quad R_1' = 1.060.$$

Відповідно до розв'язку Кардано [7] маємо корені рівняння (2.9)

$$\sigma_1 = A' + B', \quad \sigma_{2,3} = -\frac{A' + B'}{2} \pm i \frac{A' - B'}{2} \sqrt{3}, \quad (2.11)$$

де

$$A' = \left(\frac{1}{2} R'_0 \frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} + \sqrt{Q'} \right)^{1/3}, \quad B' = \left(\frac{1}{2} R'_0 \frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} - \sqrt{Q'} \right)^{1/3}.$$

Величина

$$Q' = \left(\frac{R'_1}{3} \right)^3 + \left(-\frac{1}{2} R'_0 \frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} \right)^2 \quad (2.12)$$

приймає додатні значення. Отже, маємо один дійсний корінь $\sigma = \sigma_1$, який при $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$ можна наближено записати у вигляді

$$\sigma \approx \sigma_{10} \tilde{h} / \tilde{h}_c. \quad (2.13)$$

Тут

$$\sigma_{10} = a_{1m} s^2 r_{m_\tau+2}^{-1}.$$

У випадку (1.6) маємо

$$\sigma_{10} = 1.711.$$

Використовуючи метод перевалу, для (2.2) знаходимо

$$I_{m_\tau+2}^{(0)} = \sqrt{\frac{2\pi}{E''(\bar{\rho}_0)}} e^{-NE(\bar{\rho}_0)}.$$

Для показника експоненти $E_0(\bar{\rho}_0) = -NE(\bar{\rho}_0)$ із врахуванням

$$E(\bar{\rho}_0) = -a_{1m} \tilde{h} \bar{\rho}_0 + \frac{1}{2} s^{-2} \tilde{\tau}^{2\nu} r_{m_\tau+2} \bar{\rho}_0^2 + \frac{1}{24} s_0^3 s^{-1} u_{m_\tau+2} \tilde{\tau}^\nu \bar{\rho}_0^4$$

та (2.7) отримуємо

$$E_0(\bar{\rho}_0) = N \left[a_{1m} \tilde{h} \tilde{\tau}^{\nu/2} \sigma - \frac{1}{2} r_{m_\tau+2} s^{-2} \tilde{\tau}^{3\nu} \sigma^2 - \frac{1}{24} u_{m_\tau+2} s^{-1} s_0^3 \tilde{\tau}^{3\nu} \sigma^4 \right]. \quad (2.14)$$

Підставляючи в (2.14) наближений вираз для σ із (2.13) та приймаючи до уваги рівність (15), приходимо до результату

$$E_0(\bar{\rho}_0) = N E_0^{(2)} \tilde{\tau}^{3\nu} \left(\frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} \right)^2 \left[1 - E_0^{(4)} \left(\frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} \right)^2 \right], \quad (2.15)$$

де

$$E_0^{(2)} = a_{1m}^2 \frac{s^2}{2r_{m_\tau+2}}, \quad E_0^{(4)} = \frac{1}{12} s s_0^3 \frac{u_{m_\tau+2}}{r_{m_\tau+2}} \sigma_{10}^2. \quad (2.16)$$

Для набору параметрів (1.6) маємо

$$E_0^{(2)} = 0.252, \quad E_0^{(4)} = 1.380.$$

Обчислимо внесок у вільну енергію системи від довгохвильових флуктуацій, який задається виразом

$$F_I = -\frac{1}{2} k T N_{m_\tau+2} \ln \pi + \frac{1}{2} k T \sum_{\substack{k \in \mathcal{B}_{m_\tau+2} \\ k \neq 0}} \ln \bar{d}(k) - k T E_0(\bar{\rho}_0). \quad (2.17)$$

Явний вигляд другого доданку правої частини (2.17) знаходимо відповідно до способу, викладеного в роботах [4, 5]. Остаточню будемо мати

$$F_I = -k T N_0 s^{-3} \tilde{\tau}^{3\nu} \left[\frac{1}{2} \ln \pi + (m_\tau + 2) \ln s - \frac{1}{2} I_0'' \right] - k T N \times \\ \times \tilde{\tau}^{3\nu} E_0^{(2)} \left(\frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} \right)^2 \left[1 - E_0^{(4)} \left(\frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} \right)^2 \right]. \quad (2.18)$$

Тут

$$I_0'' = \ln(D'_0 + D'_1) - \frac{2}{3} + 2 \frac{D'_0}{D'_1} - 2 \left(\frac{D'_0}{D'_1} \right)^{3/2} \operatorname{arctg} \left(\frac{D'_1}{D'_0} \right)^{1/2}, \\ D'_0 = \beta \Phi(0) f_0 [E_2 - 1], \quad D'_1 = 2\beta \Phi(0) b^2 B_0^2, \quad (2.19) \\ B_0 = \frac{\pi}{s_0 c}.$$

Коефіцієнти D'_0 , D'_1 , а також I_0'' для випадку (1.6) приймають наступні числові значення:

$$D'_0 = 1.969, \quad D'_1 = 0.568, \quad I_0'' = 0.835. \quad (2.20)$$

Запишемо повний вираз для вільної енергії системи поблизу критичної точки при $T > T_c$ для $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$. Маємо зведену формулу

$$F = F_0 - k T N s_0^{-3} \left(e_{0p} + e_{1p} \tilde{\tau} + e_{2p} \tilde{\tau}^2 + e_{3p} \tilde{h}^2 + e_{4p} \tilde{\tau}^{3\nu} \right) -$$

$$\begin{aligned}
& -kTNs_0^{-3}f_{mp}\tilde{\tau}^{3\nu} - kTNs_0^{-3}s^{-3}\tilde{\tau}^{3\nu} [f_{p2} - (m_\tau + 1)\ln s] - \\
& -kTNs_0^{-3}s^{-3}\tilde{\tau}^{3\nu} \left[\frac{1}{2}\ln \pi + (m_\tau + 2)\ln s - \frac{1}{2}I_0'' \right] - \\
& -kTN\tilde{\tau}^{3\nu}E_0^{(2)} \left(\frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} \right)^2 \left[1 - E_0^{(4)} \left(\frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} \right)^2 \right]
\end{aligned}$$

або

$$\begin{aligned}
F = & -kTN \left[\ln \operatorname{ch} h' + l_0 + l_{1T}\tilde{\tau}^{3\nu} + l_{12T}\tilde{\tau}^{3\nu} \left(\frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} \right)^2 + \right. \\
& \left. + l_{14T}\tilde{\tau}^{3\nu} \left(\frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} \right)^4 + l_2\tilde{h}^2 + l_3\tilde{\tau} + l_4\tilde{\tau}^2 \right], \quad (2.21)
\end{aligned}$$

де введені позначення

$$\begin{aligned}
l_0 &= \ln 2 + \frac{1}{2}\beta_c\Phi(0)\bar{\Phi} + s_0^{-3}e_{0p}, \\
l_{1T} &= s_0^{-3} \left[e_{4p} + f_{mp} + s^{-3} \left(f_{p2} + \frac{1}{2}\ln \pi + \ln s - \frac{1}{2}I_0'' \right) \right], \\
l_{12T} &= E_0^{(2)}, \quad l_{14T} = -E_0^{(2)}E_0^{(4)}, \quad (2.22) \\
l_2 &= s_0^{-3}e_{3p}, \quad l_3 = s_0^{-3}e_{1p} - \frac{1}{2}\beta_c\Phi(0)\bar{\Phi}\frac{f_0}{c_{k1}^{(0)}}, \\
l_4 &= s_0^{-3}e_{2p} + \frac{1}{2}\beta_c\Phi(0)\bar{\Phi} \left(\frac{f_0}{c_{k1}^{(0)}} \right)^2.
\end{aligned}$$

Для набору параметрів (1.6) знаходимо

$$\begin{aligned}
l_0 &= 0.835, & l_{1T} &= 0.041, \\
l_{12T} &= 0.252, & l_{14T} &= -0.349, \\
l_2 &= -0.045, & l_3 &= -0.067, & l_4 &= -0.001.
\end{aligned} \quad (2.23)$$

3. Фізичні характеристики системи в області слабких полів $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$ при $T > T_c$

Обчислимо параметр порядку, роль якого для даної системи відіграє середній спіновий момент:

$$\sigma^{(+)} = -\frac{1}{N} \left(\frac{\partial F}{\partial h} \right)_T \equiv \frac{\beta}{N} \left(\frac{\partial F}{\partial h'} \right)_T.$$

Використовуючи вираз (2.21), отримуємо

$$\begin{aligned}
\sigma^{(+)} &= \operatorname{th} h' + \sigma_0 h' + \sigma_2^{(+)} \tilde{\tau}^{\nu/2} \frac{h'}{\tilde{h}_c} + \sigma_3^{(+)} \tilde{\tau}^{\nu/2} \left(\frac{h'}{\tilde{h}_c} \right)^3, \\
\sigma_0 &= 2l_2 f_0^{-2}, \quad \sigma_2^{(+)} = 2l_{12T} f_0^{-2}, \quad \sigma_3^{(+)} = 4l_{14T} f_0^{-4}. \quad (3.1)
\end{aligned}$$

При $h' = 0$ маємо рівність $\sigma^{(+)} = 0$. У випадку $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$ останнім доданком у (3.1) можна знехтувати. Як бачимо, величина $\sigma^{(+)}$ пропорційна до першого степеня поля, причому при малих значеннях поля основний внесок дає третій доданок, який відповідає моменту, індукованому полем h' . Для цього доданка знаходимо

$$\sigma_0^{(+)} = \sigma_2^{(+)} \tilde{\tau}^{\nu/2} \frac{h'}{\tilde{h}_c} = \frac{a_{1m}^2}{r_{m_\tau+2}} s^2 f_0^{-2} h' \tilde{\tau}^{-2\nu}. \quad (3.2)$$

Порівняємо (3.2) з виразом для $\bar{\rho}_0$. Відповідно до (2.7) та (2.13) будемо мати

$$\bar{\rho}_0 = \sigma_{10} \frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} \tilde{\tau}^{\nu/2} = \frac{a_{1m}}{r_{m_\tau+2}} s^2 f_0^{-1} h' \tilde{\tau}^{-2\nu}. \quad (3.3)$$

Як легко бачити, останній вираз з точністю до множника a_{1m}/f_0 співпадає із (3.2):

$$\sigma_0^{(+)} = \frac{a_{1m}}{f_0} \bar{\rho}_0. \quad (3.4)$$

Внесок у середній спіновий момент $\sigma_0^{(+)}$ відповідає частині вільної енергії системи від $\bar{\rho}_0$ і отримується із співвідношення (2.14) для $E_0(\bar{\rho}_0)$.

Для сприйнятливості системи на одну частинку

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

при $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$ та $T > T_c$ знаходимо

$$\begin{aligned}
\chi^{(+)} &= \beta \left[1 - \operatorname{th}^2 h' + \chi_0 + \chi_1^{(+)} \tilde{\tau}^{-\gamma} \right], \\
\chi_0 &= \sigma_0, \quad \chi_1^{(+)} = \sigma_2^{(+)}. \quad (3.5)
\end{aligned}$$

Тут $\gamma = 2\nu$ – критичний показник сприйнятливості.

4. Вільна енергія для випадку сильних полів при $T > T_c$

В подальшому розгляді системи (1) з потенціалом взаємодії (6) вважатимемо, що має місце співвідношення

$$\tilde{h} \gg \tilde{h}_c, \quad (4.1)$$

де величина граничного поля \tilde{h}_c визначена в (15). Слід, однак, зауважити, що великі поля не повинні бути такими за абсолютним значенням³. Оскільки $\tilde{h}_c = \tilde{\tau}^{p_0}$, а $\tilde{\tau}$ може приймати як завгодно малі значення, то величина \tilde{h} може прямувати і до нуля.

Для зручності розгляду представимо вільну енергію системи у вигляді декількох доданків

$$F_h^{(+)} = F_0 + F_{\text{КР},h} + F_{p,h} + F_{I,h}, \quad (4.2)$$

кожен з яких описує певний флуктуаційний процес. Величина F_0 є однаковою як для малих, так і для великих полів (формула (1.3)). При $\bar{\Phi} = 0$ F_0 відповідає внеску у вільну енергію від невзаємодіючих спінів.

Внесок від ділянки критичного режиму зручно зобразити у вигляді суми двох доданків:

$$F_{\text{КР},h} = -kT \ln Q_0 + F'_{\text{КР},h}. \quad (4.3)$$

Вираз для $\ln Q_0$ приведений в (1.5), а для $F'_{\text{КР},h}$ маємо

$$F'_{\text{КР},h} = -kT \sum_{n=1}^{n_h} \ln Q_n = F_{\text{КР},h}^{(0)} + F_{\text{КР},2h} + F_{\text{КР},3h}. \quad (4.4)$$

Для першого доданку із (4.4) знаходимо [1]

$$F_{\text{КР},h}^{(0)} = -kTN_0 \left(F_{10}s^{-3} - F_{10}\tilde{h}^{6/5} \right). \quad (4.5)$$

Тут

$$F_{10} = H_{20}(1 - s^{-3})^{-1}, \quad (4.6)$$

причому коефіцієнт H_{20} той самий, що і в (1.9). Другий доданок із (4.4) можна записати у вигляді

$$F_{\text{КР},2h} = -kTN_0 \left[F_{11}s^{-3}E_2\tilde{\tau} + F_{12}s^{-3}E_2^2\tilde{\tau}^2 - F_{11}\tilde{h}^{6/5}\varphi_h - F_{12}\tilde{h}^{6/5}\varphi_h^2 \right], \quad (4.7)$$

³Якщо температура T наближається до T_c , то $\tau \ll 1$ і тоді будь-яке мале поле може вважатися великим, якщо виконується (4.1).

де [1, 4, 5]

$$F_{11} = h_{22}f_0 \left(\frac{H_{21}}{E_2} - \gamma \right) (1 - s^{-3}E_2)^{-1},$$

$$F_{12} = h_{22}\frac{1}{2}T_{42}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}f_0^2 \left(\gamma - \frac{H_{21}}{E_2} \right) (1 - s^{-3}E_2)^{-1}. \quad (4.8)$$

Тут введена величина

$$\varphi_h = \tilde{\tau}\tilde{h}^{-1/p_0} = (\tilde{h}_c/\tilde{h})^{1/p_0}, \quad (4.9)$$

яка приймає малі значення при виконанні умови (4.1). Тому надалі поряд із загальними виразами будемо записувати наближені формули, використовуючи розклади за степенями величини⁴ φ_h . Для останнього доданку правої частини рівності (4.4) маємо [1]

$$F_{\text{КР},3h} = -kTN_0F_{13}s^{-3}E_2^2\tilde{h}^2, \quad (4.10)$$

де

$$F_{13} = h_{32}^2f_0^2 \left(\frac{3}{8}\gamma - \frac{H_{22}}{E_3^2} \right) (1 - s^{-3}E_3)^{-1}. \quad (4.11)$$

Числові значення коефіцієнтів F_{1l} при виконанні (1.6) наступні:

$$F_{10} = 1.471, \quad F_{11} = -0.647, \quad F_{12} = -0.076, \quad F_{13} = -0.924. \quad (4.12)$$

Підсумовуючи внески (4.5), (4.7) та (4.10), відповідно до (4.4) отримуємо

$$F'_{\text{КР},h} = -kTN_0 \left[f_{\text{CR}}^{(0)} + f_{\text{CR}}^{(1)}\tilde{\tau} + f_{\text{CR}}^{(2)}\tilde{\tau}^2 + f_{\text{CR}}^{(3)}\tilde{\tau}^2 - \tilde{h}^{6/5} (F_{10} + F_{11}\varphi_h + F_{12}\varphi_h^2) \right]. \quad (4.13)$$

Порівняємо вираз (4.13) із відповідним йому співвідношенням (1.14), яке має місце для випадку слабких полів. Легко бачити, що при $\tilde{h} = \tilde{h}_c$, а отже $\varphi_h = 1$, виконується рівність

$$e_{4p} = -F_{10} - F_{11} - F_{12}.$$

⁴Слід зауважити, що дослідження поведінки системи проводиться в режимі постійної температури $\tilde{\tau} = const$. При цьому величина поля \tilde{h} не фіксується, а φ_h характеризує величину поля по відношенню до \tilde{h}_c . Можливий режим постійного поля $\tilde{h} = const$, при якому досліджується залежність від $\tilde{\tau}$. У цьому випадку величину φ_h слід замінити на $\varphi_\tau = \tilde{\tau}/\tilde{\tau}_c$, де $\tilde{\tau}_c = \tilde{h}^{1/p_0}$, а $\tilde{\tau}$ змінюється від 0 до $\tilde{\tau}_c$. В області слабких полів замість вищеприведених степеневих розкладів за \tilde{h}/\tilde{h}_c будемо мати розклади за $(\tilde{\tau}_c/\tilde{\tau})^{p_0}$. Тут $\tilde{\tau}_c < \tilde{\tau} < \tilde{\tau}^*$, а $\tilde{\tau}^*$ визначає величину критичної області за температурою при $\tilde{h} = 0$.

Для випадку $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ основний внесок у неаналітичну частину вільної енергії забезпечується першим доданком, пропорційним до $F_{10}\tilde{h}^{6/5}$. Решта доданків пропорційні до φ_h і при $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ є значно меншими від першого доданка. Повний вираз для $F_{\text{КР},h}$ можна знайти відповідно до (4.3) при врахуванні (1.5) та (4.13).

Розрахуємо третій доданок виразу (4.2). Відповідно до [1] запишемо

$$F_{p,h} = -kTN_{n_h+1} \left(\frac{1}{2} \ln 2 + f'_{p0} + \frac{1}{4} \ln a_4^{(n_h)} + H_{211} h_2^{(n_h)} \right). \quad (4.14)$$

Скористаємось розв'язками РС [1,4,5] та прийемо до уваги наступні співвідношення:

$$\tilde{\tau} E_2^{n_h} = E_2^{-1} \varphi_h, \quad s^{-3(n_h+1)} = \tilde{h}^{6/5}. \quad (4.15)$$

З врахуванням степеневих розкладів для $\ln a_4^{(n_h)}$ та $h_2^{(n_h)}$ за малою величиною $E_2^{-1} \varphi_h$ будемо мати

$$F_{p,h} = -kTN_0 \tilde{h}^{6/5} [f_{p1c} - n_h \ln s + f_{p11c} \varphi_h - f_{p12c} \varphi_h^2]. \quad (4.16)$$

Тут

$$\begin{aligned} f_{p1c} &= f_{p0} + \frac{1}{4} \ln u^*, \quad f_{p0} = f'_{p0} + \frac{1}{2} \ln 2, \\ f'_{p0} &= -\frac{1}{2} \ln(2\pi\gamma) - \frac{1}{4} \ln 24 + \ln \left(1 - \frac{3}{4} G_0 s^{-d} \right), \quad (4.17) \\ f_{p11c} &= f_0 \varphi_0^{-1/2} E_2^{-1} \left(\frac{1}{4} T_{42}^{(0)} + \sqrt{6} H_{211} \right), \\ f_{p12c} &= \frac{1}{2} \left(f_0 \varphi_0^{-1/2} E_2^{-1} \right)^2 T_{42}^{(0)} \left(\frac{1}{4} T_{42}^{(0)} + \sqrt{6} H_{211} \right). \end{aligned}$$

Величина H_{211} приведена в (1.20).

Вираз (4.16) містить аномально великий доданок, пропорційний до n_h . Як буде показано нижче, він при сумуванні внесків у вільну енергію скорочуватиметься з відповідним членом із $F_{I,h}$. Знайдемо явне представлення

$$F_{I,h} = -kT \ln I_{n_h+1}, \quad (4.18)$$

де [1]

$$I_{n_h+1} = \int (d\rho)^{N_{n_h+1}} \exp \left[a_{1m} N^{1/2} \tilde{h} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{n_h+1}} d_{n_h+1}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{4!} a_4^{(n_h+1)} N_{n_h+1}^{-1} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}_{n_h+1}}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right]. \quad (4.19)$$

Для коефіцієнтів цього виразу справедливі співвідношення [1]

$$\begin{aligned} d_{n_h+1}(0) &= -f_0 \beta \Phi(0) (1 - \varphi_h) \tilde{h}^{4/5}, \\ a_4^{(n_h+1)} &= \varphi_0 (\beta \Phi(0))^2 \left(1 + T_{42}^{(0)} f_0 \varphi_0^{-1/2} \varphi_h \right) \tilde{h}^{8/5}, \quad (4.20) \end{aligned}$$

а величина a_{1m} означена в (1.28). Виконаємо в (4.19) заміну змінних

$$\rho_{\mathbf{k}} = \eta_{\mathbf{k}} + \sigma_h \sqrt{N} \delta_{\mathbf{k}}. \quad (4.21)$$

Отримуємо

$$\begin{aligned} I_{n_h+1} &= \exp[E_0(\sigma_h)] \int (d\eta)^{N_{n_h+1}} \exp \left[A_0 N^{1/2} \eta_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{n_h+1}} d_h(k) \times \right. \\ &\quad \times \eta_{\mathbf{k}} \eta_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{3!} b_h N_{n_h+1}^{-1/2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_3 \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}_{n_h+1}}} \eta_{\mathbf{k}_1} \dots \eta_{\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_3} - \\ &\quad \left. - \frac{1}{4!} a_h N_{n_h+1}^{-1} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}_{n_h+1}}} \eta_{\mathbf{k}_1} \dots \eta_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right]. \quad (4.22) \end{aligned}$$

Тут (див. [1])

$$E_0(\sigma_h) = N \left[a_{1m} \tilde{h} \sigma_h - \frac{1}{2} d_{n_h+1}(0) \sigma_h^2 - \frac{a_4^{(n_h+1)}}{24} \sigma_h^4 \frac{N}{N_{n_h+1}} \right], \quad (4.23)$$

а для коефіцієнтів із (4.22) маємо

$$\begin{aligned} A_0 &= a_{1m} \tilde{h} - d_{n_h+1}(0) \sigma_h - \frac{1}{6} a_4^{(n_h+1)} \sigma_h^3 \frac{N}{N_{n_h+1}}, \\ d_h(k) &= d_h(0) + 2\beta \Phi(0) b^2 k^2, \\ d_h(0) &= d_{n_h+1}(0) + \frac{1}{2} \sigma_h^2 a_4^{(n_h+1)} \frac{N}{N_{n_h+1}}, \quad (4.24) \\ b_h &= \sigma_h a_4^{(n_h+1)} \left(\frac{N}{N_{n_h+1}} \right)^{1/2}, \quad a_h = a_4^{(n_h+1)}. \end{aligned}$$

Величину зміщення σ_h знаходимо із умови

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

яка еквівалентна до наступного рівняння на величину σ_h :

$$a_{1m}\tilde{h} - d_{n_h+1}(0)\sigma_h - \frac{1}{6}a_4^{(n_h+1)}\sigma_h^3 \frac{N}{N_{n_h+1}} = 0. \quad (4.25)$$

Слід зауважити, що це рівняння приводить до умови

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

Розв'язок (4.25) будемо шукати у вигляді

$$\sigma_h = \sigma_0 \tilde{h}^{1/\delta}, \quad (4.27)$$

де $\delta = (d+2)/(d-2)$. Отримуємо рівняння для амплітуди σ_0 :

$$\tilde{h} \left[a_{1m} + f_0 \beta \Phi(0) (1 - \varphi_h) \sigma_0 - \frac{\sigma_0^3 s_0^3}{6} \varphi_0 (\beta \Phi(0))^2 \times \right. \\ \left. \times (1 + T_{42}^{(0)} f_0 \varphi_0^{-1/2} \varphi_h) \right] = 0. \quad (4.28)$$

В загальному вигляді величина σ_0 є функцією як поля \tilde{h} (оскільки така залежність міститься в φ_h), так і параметрів задачі. Подамо (4.28) в зручному для дослідження вигляді

$$R_3 \sigma_0^3 + R_1 \sigma_0 + R_0 = 0$$

або

$$\sigma_0^3 + p \sigma_0 + q = 0. \quad (4.29)$$

Тут

$$p = \frac{R_1}{R_3}, \quad q = \frac{R_0}{R_3}, \\ R_0 = a_{1m}, \quad R_1 = f_0 \beta \Phi(0) (1 - \varphi_h), \\ R_3 = -\frac{1}{6} \varphi_0 (\beta \Phi(0))^2 s_0^3 (1 + f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} \varphi_h). \quad (4.30)$$

Коефіцієнти p, q задовільняють наступним рядам за степенями малої величини φ_h :

$$p = p^{(0)} (1 - p^{(1)} \varphi_h + p^{(2)} \varphi_h^2), \\ p^{(0)} = -\frac{6f_0}{\varphi_0 \beta \Phi(0) s_0^3}, \quad p^{(1)} = 1 + f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2}, \\ p^{(2)} = f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} (1 + f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2}); \\ q = q^{(0)} (1 - q^{(1)} \varphi_h + q^{(2)} \varphi_h^2), \\ q^{(0)} = -\frac{6a_{1m}}{\varphi_0 (\beta \Phi(0))^2 s_0^3}, \quad q^{(1)} = f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2}, \\ q^{(2)} = (f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2})^2. \quad (4.31)$$

Рівняння (4.29) має три розв'язки

$$\sigma_{01} = A + B, \quad \sigma_{02,3} = -\frac{A+B}{2} \pm i \frac{A-B}{2} \sqrt{3}, \quad (4.32)$$

де

$$A = \left(-\frac{q}{2} + \sqrt{Q} \right)^{1/3}, \quad B = \left(-\frac{q}{2} - \sqrt{Q} \right)^{1/3},$$

причому

$$Q = \left(\frac{p}{3} \right)^3 + \left(\frac{q}{2} \right)^2. \quad (4.33)$$

Кількість дійсних коренів (4.29) визначається знаком величини Q . Знак цієї величини можна оцінити в деяких граничних випадках. При $\varphi_h = 1$ (граничне значення поля) маємо

$$Q = \left(\frac{q}{2} \right)^2 > 0.$$

Це відповідає наявності одного дійсного кореня рівняння (4.29). Зміна знаку (а отже, зміна числа дійсних коренів) може наступити при зменшенні величини φ_h . Знайдемо Q в границі $\varphi_h \rightarrow 0$. Тоді для набору параметрів (1.6) отримуємо

$$p^{(0)} \approx -1.041, \quad q^{(0)} \approx -0.995,$$

що свідчить про додатність Q . Шляхом прямого розрахунку можна переконатися, що для всіх інших значень параметрів задачі величина Q при $\varphi_h = 0$ більша нуля.

Запишемо вираз для Q (4.33) при $\varphi_h \ll 1$. Будемо мати

$$Q = Q^{(0)} - Q^{(1)} \varphi_h + Q^{(2)} \varphi_h^2. \quad (4.34)$$

Тут

$$Q^{(0)} = \frac{1}{27} (p^{(0)})^3 + \frac{1}{4} (q^{(0)})^2, \\ Q^{(1)} = \frac{1}{9} (p^{(0)})^3 p^{(1)} + \frac{1}{2} (q^{(0)})^2 q^{(1)}, \\ Q^{(2)} = \frac{1}{9} (p^{(0)})^3 \left[(p^{(1)})^2 + p^{(2)} \right] + \frac{1}{4} (q^{(0)})^2 \left[(q^{(1)})^2 + 2q^{(2)} \right]. \quad (4.35)$$

Для набору параметрів (1.6) коефіцієнти $Q^{(l)}$ ($l = 0, 1, 2$) приймають значення

$$Q^{(0)} = 0.206, \quad Q^{(1)} = -0.083, \quad Q^{(2)} = -0.163.$$

Із (4.34) видно, що $Q > 0$ для достатньо малих значень φ_h .

Приймаючи до уваги (4.31) та (4.34), із (4.32) знаходимо дійсний розв'язок $\sigma_0 = \sigma_{01}$ рівняння (4.29) у вигляді ряду за степенями величини φ_h (випадок $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$)

$$\sigma_0 = \sigma_0^{(0)} + \sigma_0^{(1)}\varphi_h - \sigma_0^{(2)}\varphi_h^2, \quad (4.36)$$

де

$$\begin{aligned} \sigma_0^{(0)} &= (A^{(0)})^{1/3} + (B^{(0)})^{1/3}, \\ \sigma_0^{(1)} &= \frac{1}{6(A^{(0)})^{2/3}}A^{(1)} + \frac{1}{6(B^{(0)})^{2/3}}B^{(1)}, \\ \sigma_0^{(2)} &= \frac{1}{6(A^{(0)})^{2/3}}A^{(2)} + \frac{1}{36(A^{(0)})^{5/3}}(A^{(1)})^2 + \\ &\quad + \frac{1}{6(B^{(0)})^{2/3}}B^{(2)} + \frac{1}{36(B^{(0)})^{5/3}}(B^{(1)})^2; \\ A^{(0)} &= -\frac{1}{2}q^{(0)} + (Q^{(0)})^{1/2}, \\ B^{(0)} &= -\frac{1}{2}q^{(0)} - (Q^{(0)})^{1/2}, \\ A^{(1)} &= q^{(0)}q^{(1)} - \frac{Q^{(1)}}{(Q^{(0)})^{1/2}}, \\ B^{(1)} &= q^{(0)}q^{(1)} + \frac{Q^{(1)}}{(Q^{(0)})^{1/2}}, \\ A^{(2)} &= q^{(0)}q^{(2)} - \frac{Q^{(2)}}{(Q^{(0)})^{1/2}} + \frac{1}{4}\frac{(Q^{(1)})^2}{(Q^{(0)})^{3/2}}, \\ B^{(2)} &= q^{(0)}q^{(2)} + \frac{Q^{(2)}}{(Q^{(0)})^{1/2}} - \frac{1}{4}\frac{(Q^{(1)})^2}{(Q^{(0)})^{3/2}}. \end{aligned} \quad (4.37)$$

В границі $\tilde{h}/\tilde{h}_c \rightarrow \infty$ маємо

$$\lim_{\varphi_h \rightarrow 0} \sigma_0 = \sigma_0^{(0)} \neq 0. \quad (4.38)$$

Це значення визначає амплітуду насичення індукованого полем магнітного моменту.

Знайдемо явний вираз для коефіцієнта $d_h(0)$ із (4.24). Отримуємо

$$d_h(0) = D_g f_0 \beta \Phi(0) \tilde{h}^{4/5}. \quad (4.39)$$

Тут

$$D_g = \frac{1}{2}\sigma_0^2 s_0^3 \varphi_0 f_0^{-1} \beta \Phi(0) (1 + f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} \varphi_h) - (1 - \varphi_h).$$

Використовуючи (4.36), зобразимо D_g у вигляді степеневого розкладу за малою величиною φ_h :

$$\begin{aligned} D_g &= D_g^{(0)} + D_g^{(1)}\varphi_h + D_g^{(2)}\varphi_h^2, \\ D_g^{(0)} &= \frac{1}{2}(\sigma_0^{(0)})^2 s_0^3 \varphi_0 f_0^{-1} \beta \Phi(0) - 1, \\ D_g^{(1)} &= \sigma_0^{(0)} s_0^3 \varphi_0 f_0^{-1} \beta \Phi(0) \left(\frac{1}{2}\sigma_0^{(0)} f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} + \sigma_0^{(1)} \right) + 1, \\ D_g^{(2)} &= s_0^3 \varphi_0 f_0^{-1} \beta \Phi(0) \left[\sigma_0^{(0)} \sigma_0^{(1)} f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \left((\sigma_0^{(1)})^2 - 2\sigma_0^{(0)} \sigma_0^{(2)} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Коефіцієнт b_h із (4.24) задовільняє подібній наближеній формулі:

$$\begin{aligned} b_h &= B_g \varphi_0 (\beta \Phi(0))^2 s_0^{3/2} \tilde{h}^{6/5}, \\ B_g &= B_g^{(0)} + B_g^{(1)}\varphi_h + B_g^{(2)}\varphi_h^2, \\ B_g^{(0)} &= \sigma_0^{(0)}, \quad B_g^{(1)} = \sigma_0^{(0)} f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} + \sigma_0^{(1)}, \\ B_g^{(2)} &= \sigma_0^{(1)} f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} - \sigma_0^{(2)}. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Розрахунок інтегралу (4.22) за змінними $\eta_{\mathbf{k}}$ із $k \neq 0$ можна провести в гаусовому наближенні⁵. Обмежуючись в (4.22) гаусовим розподілом флуктуацій, знаходимо

$$I_{n_h+1} = \exp[E_0(\sigma_h)] \prod'_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{n_h+1}} (\pi/d_h(k))^{1/2} I_{n_h+1}^{(0)}. \quad (4.42)$$

⁵В границі $\tilde{h}/\tilde{h}_c \rightarrow \infty$ ($\varphi_h \rightarrow 0$) маємо

$$\begin{aligned} \sqrt{6} \frac{d_h(0, B_{n_h+1})}{a_h^{1/2}} &= \sqrt{6} \left(\frac{1}{2} \varphi_0^{1/2} \beta \Phi(0) s_0^3 (\sigma_0^{(0)})^2 - f_0 \varphi_0^{-1/2} + \right. \\ &\quad \left. + \pi^2 (b/c)^2 s_0^{-2} \varphi_0^{-1/2} \right) = 8.125, \\ \frac{24^{3/4}}{6} \frac{b_h}{a_h^{3/4}} &= \frac{24^{3/4}}{6} \varphi_0^{1/4} (\beta \Phi(0))^{1/2} s_0^{3/2} \sigma_0^{(0)} = 4.692. \end{aligned}$$

Як бачимо, коефіцієнт квадратичного доданка в показнику підінтегральної функції у виразі (4.22) є досить великим в порівнянні з коефіцієнтами інших доданків. Це приводить до того, що числові оцінки інтегралу в четвірному та гаусовому наближеннях є близькими.

Штрих біля знаку добутку означає, що $k \neq 0$, а для $I_{n_h+1}^{(0)}$ маємо

$$I_{n_h+1}^{(0)} = \int d\eta_0 \exp \left[-\frac{1}{2} d_h(0) \eta_0^2 - \frac{1}{3!} b_h N_{n_h+1}^{-1/2} \eta_0^3 - \frac{a_h}{4!} N_{n_h+1}^{-1} \eta_0^4 \right]. \quad (4.43)$$

Виконаємо в (4.43) заміну змінної

$$\eta_0 = \rho_0 - \sqrt{N} \sigma_h,$$

яка є “зворотньою” до (4.21). В результаті отримуємо

$$I_{n_h+1}^{(0)} = \exp [E'_0(\sigma_h)] I_h^{(0)}, \quad (4.44)$$

де

$$I_h^{(0)} = \int d\rho_0 \exp \left[a_{1m} \tilde{h} N^{1/2} \rho_0 - \frac{1}{2} d_{n_h+1}(0) \rho_0^2 - \frac{1}{4!} a_4^{(n_h+1)} N_{n_h+1}^{-1} \rho_0^4 \right], \quad (4.45)$$

$$E'_0(\sigma_h) = -\frac{1}{2} N \sigma_h^2 \left[d_{n_h+1}(0) + \frac{1}{4} a_4^{(n_h+1)} \sigma_h^2 N N_{n_h+1}^{-1} \right].$$

Легко переконатися, що

$$E_0(\sigma_h) + E'_0(\sigma_h) = 0. \quad (4.46)$$

Таким чином,

$$I_{n_h+1} = \prod'_{k \in \mathcal{B}_{n_h+1}} (\pi/d_h(k))^{1/2} I_h^{(0)}. \quad (4.47)$$

Відповідну I_{n_h+1} (4.47) вільну енергію можна обчислити згідно викладеної в [1, 4, 5] методики і подати у вигляді

$$F_{I,h} = -\frac{1}{2} k T N s_0^{-3} (\ln \pi - I_0) \tilde{h}^{6/5} + E_0. \quad (4.48)$$

Тут

$$I_0 = -2(n_h + 1) \ln s + I'_0, \quad (4.49)$$

причому

$$I'_0 = \ln(D_0 + D_1) - \frac{2}{3} + 2 \frac{D_0}{D_1} - 2 \left(\frac{D_0}{D_1} \right)^{3/2} \operatorname{arctg} \left(\frac{D_1}{D_0} \right)^{1/2}, \\ D_0 = D_g f_0 \beta \Phi(0), \quad D_1 = 2 \beta \Phi(0) s_0^{-2} \pi^2 (b/c)^2, \quad (4.50)$$

а E_0 одержується в результаті розрахунку $I_h^{(0)}$ методом перевалу. Величина E_0 задовільняє виразу

$$E_0 = -k T N \tilde{h}^{6/5} \left[E_{00}^{(0)} + E_{00}^{(1)} \varphi_h - E_{00}^{(2)} \varphi_h^2 \right], \quad (4.51)$$

де

$$E_{00}^{(0)} = a_{1m} \sigma_0^{(0)} + \frac{1}{2} f_0 \beta \Phi(0) (\sigma_0^{(0)})^2 - \frac{1}{24} s_0^3 \varphi_0 (\beta \Phi(0))^2 (\sigma_0^{(0)})^4, \\ E_{00}^{(1)} = a_{1m} \sigma_0^{(1)} + f_0 \beta \Phi(0) \sigma_0^{(0)} \left(\sigma_0^{(1)} - \frac{1}{2} \sigma_0^{(0)} \right) - \frac{1}{6} s_0^3 \varphi_0 (\beta \Phi(0))^2 (\sigma_0^{(0)})^3 \left(\sigma_0^{(1)} + \frac{1}{4} \sigma_0^{(0)} f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} \right), \\ E_{00}^{(2)} = a_{1m} \sigma_0^{(2)} - f_0 \beta \Phi(0) \left[\frac{1}{2} \left((\sigma_0^{(1)})^2 - 2 \sigma_0^{(0)} \sigma_0^{(2)} \right) - \sigma_0^{(0)} \sigma_0^{(1)} \right] + \frac{1}{6} s_0^3 \varphi_0 (\beta \Phi(0))^2 (\sigma_0^{(0)})^2 \left[\frac{3}{2} (\sigma_0^{(1)})^2 - \sigma_0^{(0)} \sigma_0^{(2)} + f_0 T_{42}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} \sigma_0^{(0)} \sigma_0^{(1)} \right]. \quad (4.52)$$

Запишемо ряд за степенями φ_h для I'_0 із (4.50). Врахуємо співвідношення

$$D_0 = D_0^{(0)} + D_0^{(1)} \varphi_h + D_0^{(2)} \varphi_h^2. \quad (4.53)$$

Тут

$$D_0^{(l)} = D_g^{(l)} f_0 \beta \Phi(0), \quad l = 0, 1, 2, \quad (4.54)$$

а коефіцієнти $D_g^{(l)}$ задані в (4.40). Тоді знаходимо

$$I'_0 = I'_{00} + I'_{01} \varphi_h + I'_{02} \varphi_h^2, \quad (4.55)$$

де

$$I'_{00} = \ln(D_0^{(0)} + D_1) - \frac{2}{3} + 2 \frac{D_0^{(0)}}{D_1} - 2 \left(\frac{D_0^{(0)}}{D_1} \right)^{3/2} \operatorname{arctg} \left(\frac{D_1}{D_0^{(0)}} \right)^{1/2}, \\ I'_{01} = 3 \frac{D_0^{(1)}}{D_1} \left[1 - \left(\frac{D_0^{(0)}}{D_1} \right)^{1/2} \operatorname{arctg} \left(\frac{D_1}{D_0^{(0)}} \right)^{1/2} \right], \\ I'_{02} = \frac{3}{D_1} \left[\frac{(D_0^{(1)})^2}{4(D_0^{(0)} + D_1)} + D_0^{(2)} - \frac{1}{D_1^{1/2}} \left(\frac{(D_0^{(1)})^2}{4(D_0^{(0)})^{1/2}} + (D_0^{(0)})^{1/2} D_0^{(2)} \right) \operatorname{arctg} \left(\frac{D_1}{D_0^{(0)}} \right)^{1/2} \right]. \quad (4.56)$$

Загальний вираз для вільної енергії при $T > T_c$ у випадку сильних полів (відповідає умові $\varphi_h \ll 1$) згідно (4.2) набуває вигляду

$$\begin{aligned}
F_h^{(+)} = & -kTN \left(\ln 2 + \ln \operatorname{ch} h' + \frac{1}{2} \beta \Phi(0) \bar{\Phi} \right) - kTN s_0^{-3} [e_{0p} + e_{1p} \tilde{\tau} + \\
& + e_{2p} \tilde{\tau}^2 + e_{3p} \tilde{h}^2 - \tilde{h}^{6/5} (F_{10} + F_{11} \varphi_h + F_{12} \varphi_h^2)] - \\
& - kTN s_0^{-3} [f_{p1c} - n_h \ln s + f_{p11c} \varphi_h - f_{p12c} \varphi_h^2] \tilde{h}^{6/5} - \\
& - kTN s_0^{-3} \left[\frac{1}{2} \ln \pi + (n_h + 1) \ln s - \right. \\
& \left. - \frac{1}{2} (I'_{00} + I'_{01} \varphi_h + I'_{02} \varphi_h^2) \right] \tilde{h}^{6/5} - \\
& - kTN \tilde{h}^{6/5} \left[E_{00}^{(0)} + E_{00}^{(1)} \varphi_h - E_{00}^{(2)} \varphi_h^2 \right].
\end{aligned} \tag{4.57}$$

Тут

$$\begin{aligned}
e_{0p} = f_{CR}^{(0)} + e_{c0}'' , \quad e_{1p} = f_{CR}^{(1)} + e_{c1}'' , \\
e_{2p} = f_{CR}^{(2)} + e_{c2T}'' , \quad e_{3p} = f_{CR}^{(3)} + e_{c2}'' .
\end{aligned} \tag{4.58}$$

Інші коефіцієнти виразу (4.57) означені в (4.17), (4.52) та (4.56).

Вираз (4.57) зручно переписати у вигляді ряду за степенями малого параметра φ_h . Будемо мати

$$\begin{aligned}
F_h^{(+)} = & -kTN \left[\ln \operatorname{ch} h' + l_0 + l_1 \tilde{h}^{6/5} + l_{11} \tilde{h}^{6/5} \varphi_h + \right. \\
& \left. + l_{12} \tilde{h}^{6/5} \varphi_h^2 + l_2 \tilde{h}^2 + l_3 \tilde{\tau} + l_4 \tilde{\tau}^2 \right],
\end{aligned} \tag{4.59}$$

де введені наступні позначення

$$\begin{aligned}
l_0 = \ln 2 + \frac{1}{2} \beta_c \Phi(0) \bar{\Phi} + s_0^{-3} e_{0p}, \\
l_1 = E_{00}^{(0)} + s_0^{-3} \left(-F_{10} + f_{p1c} + \frac{1}{2} \ln \pi + \ln s - \frac{1}{2} I'_{00} \right), \\
l_{11} = E_{00}^{(1)} + s_0^{-3} \left(-F_{11} + f_{p11c} - \frac{1}{2} I'_{01} \right), \\
l_{12} = -E_{00}^{(2)} + s_0^{-3} \left(-F_{12} - f_{p12c} - \frac{1}{2} I'_{02} \right), \\
l_2 = s_0^{-3} e_{3p}, \\
l_3 = s_0^{-3} e_{1p} - \frac{1}{2} \beta_c \Phi(0) \bar{\Phi} \frac{f_0}{c_{k1}},
\end{aligned} \tag{4.60}$$

$$l_4 = s_0^{-3} e_{2p} + \frac{1}{2} \beta_c \Phi(0) \bar{\Phi} \left(\frac{f_0}{c_{k1}} \right)^2.$$

Слід зауважити, що вирази для коефіцієнтів польової залежності $F_h^{(+)}$ (величини l_1, l_{11}, l_{12}, l_2) містять $\beta \Phi(0)$. Ці коефіцієнти обчислюємо поблизу критичної точки, покладаючи $\beta \Phi(0) = \beta_c \Phi(0)$. Саме отримані таким способом відповідні їм доданки в (4.59) є основними серед членів, які виникали б при врахуванні у виразах для вказаних коефіцієнтів співвідношення

$$\beta \Phi(0) \approx \beta_c \Phi(0) (1 - \tau + \tau^2).$$

У випадку (1.6) знаходимо

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

Числові значення l_0, l_2, l_3, l_4 приведені в (2.23).

5. Основні характеристики системи поблизу критичної точки для випадку сильних полів при $T > T_c$

Враховуючи (4.9), запишемо вільну енергію системи (4.59) у вигляді явної функції $\tilde{\tau}$ та \tilde{h} :

$$\begin{aligned}
F_h^{(+)} = & -kTN \left[\ln \operatorname{ch} h' + l_0 + l_1 \tilde{h}^{6/5} + l_{11} \tilde{\tau} \tilde{h}^{6/5-1/p_0} + \right. \\
& \left. + l_{12} \tilde{\tau}^2 \tilde{h}^{6/5-2/p_0} + l_2 \tilde{h}^2 + l_3 \tilde{\tau} + l_4 \tilde{\tau}^2 \right].
\end{aligned} \tag{5.1}$$

Для параметра порядку

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

отримуємо

$$\begin{aligned}
\sigma_h^{(+)} = & \operatorname{th} h' + \sigma_{h_0} h' + \sigma_{h_1} (h')^{1/5} + \sigma_{h_2} \tilde{\tau} (h')^{1/5-1/p_0} + \\
& + \sigma_{h_3} \tilde{\tau}^2 (h')^{1/5-2/p_0}, \\
\sigma_{h_0} = & 2l_2 f_0^{-2}, \quad \sigma_{h_1} = \frac{6}{5} l_1 f_0^{-6/5}, \\
\sigma_{h_2} = & \left(\frac{6}{5} - \frac{1}{p_0} \right) l_{11} f_0^{-(6/5-1/p_0)}, \\
\sigma_{h_3} = & \left(\frac{6}{5} - \frac{2}{p_0} \right) l_{12} f_0^{-(6/5-2/p_0)}.
\end{aligned} \tag{5.2}$$

Оскільки $1/5 - 1/p_0 \approx -0.456$, $1/5 - 2/p_0 \approx -1.113$, то складається враження, що два останні доданки у $\sigma_h^{(+)}$ із (5.2) ставатимуть великими при зменшенні h' . Однак кожен із цих доданків пропорційний також до температурної змінної $\tilde{\tau}$, яка зв'язана із \tilde{h}_c співвідношенням (15). Тому при $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ внески кожного із цих доданків є малими в порівнянні із доданком, пропорційним до $(h')^{1/5}$. Справді, для передостаннього доданка маємо

$$\tilde{\tau}(h')^{1/5-1/p_0} \ll \tilde{h}^{1/p_0}(h')^{1/5-1/p_0} = f_0^{-1/p_0}(h')^{1/5}.$$

Останній доданок із виразу для $\sigma_h^{(+)}$ також задовільняє аналогічну умову. Таким чином, для великих значень полів маємо

$$\sigma_h^{(+)} \approx \text{th } h' + \sigma_{h_0} h' + \sigma_{h_1} (h')^{1/5}. \quad (5.3)$$

Тут основний внесок забезпечується доданком, пропорційним до $(h')^{1/5}$.

Сприйнятливість системи на одну частинку

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

відповідно до (5.2) задовільнятиме наступному виразу:

$$\chi_h^{(+)} = \beta \left[1 - \text{th}^2 h' + \chi_{h_0} + \chi_{h_1} (h')^{-4/5} + \chi_{h_2} \tilde{\tau} (h')^{-4/5-1/p_0} + \chi_{h_3} \tilde{\tau}^2 (h')^{-4/5-2/p_0} \right], \quad (5.4)$$

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

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

Знайдемо ентропію системи

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

в області сильних полів $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ та при $T > T_c$. Отримуємо

$$S_h^{(+)} = kN \left[s_{h_0} + s_{h_1} \tilde{h}^\psi + s_{h_2} \tilde{\tau} \tilde{h}^{-\varphi} + s_{h_3} \tilde{\tau} \right]. \quad (5.5)$$

Тут введені позначення

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{6}{5} - \frac{1}{p_0} = \frac{6}{5} - \frac{2}{5\nu} \approx 0.544, \\ \varphi &= - \left(\frac{6}{5} - \frac{2}{p_0} \right) = -\frac{6}{5} + \frac{4}{5\nu} \approx 0.113. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Для коефіцієнтів s_{hl} маємо

$$\begin{aligned} s_{h_0} &= \ln \text{ch } h' + l_0 + l_3 \frac{c_{k1}^{(0)}}{f_0}, & s_{h_1} &= l_{11} \frac{c_{k1}^{(0)}}{f_0}, \\ s_{h_2} &= 2l_{12} \frac{c_{k1}^{(0)}}{f_0}, & s_{h_3} &= 2 \left(l_3 + l_4 \frac{c_{k1}^{(0)}}{f_0} \right). \end{aligned} \quad (5.7)$$

Доданок $s_{h_1} \tilde{h}^\psi$ характеризує основний внесок у польову частину ентропії $S_h^{(+)}$ при $\tau = 0$.

Теплоємність системи

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

приймає вигляд

$$C_h^{(+)} = kN \left[c_{h_0} + c_{h_1} \tilde{h}^{-\varphi} \right], \quad (5.8)$$

де

$$\begin{aligned} c_{h_0} &= s_{h_3} \frac{c_{k1}^{(0)}}{f_0} = 2 \left(l_3 + l_4 \frac{c_{k1}^{(0)}}{f_0} \right) \frac{c_{k1}^{(0)}}{f_0}, \\ c_{h_1} &= s_{h_2} \frac{c_{k1}^{(0)}}{f_0} = 2l_{12} \left(\frac{c_{k1}^{(0)}}{f_0} \right)^2. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Асимптотику виразу (5.8) визначає другий доданок. В границі $\tau \rightarrow 0$ знаходимо

$$C_h^{(+)} \approx kN c_{h_1} \tilde{h}^{-\varphi}. \quad (5.10)$$

Оскільки φ приймає додатне значення, то при $\tilde{h} \rightarrow 0$ теплоємність буде аномально зростати.

Відмітимо, що отримані в цій роботі значення показників φ та ψ (див. (5.6)) узгоджуються із оцінками [8], зробленими на основі співвідношень між критичними показниками, які випливають із гіпотези подібності. Так, в [8], використовуючи експериментальні дані

для критичних показників β , γ та δ , у випадку діелектрика $CrBr_3$ знайдено $\varphi \approx 0.03$, $\psi \approx 0.60$, а для металічного нікелю одержано $\varphi \approx -0.06$, $\psi \approx 0.64$. Гіпотеза подібності дає можливість зробити важливі висновки відносно універсальних величин (критичних показників), не використовуючи конкретного вигляду функції, що визначає рівняння стану. Деякі властивості цієї функції можуть бути встановлені із загальних міркувань (див., наприклад, [9]). У процесі наших досліджень знаходиться явний вигляд скейлінгових функцій для різних термодинамічних характеристик системи, причому вирази для коефіцієнтів скейлінгових функцій визначаються через мікроскопічні параметри вихідної системи (постійну ґратки, параметри потенціалу взаємодії). Природне формулювання і реалізація теорії в термінах змінних $\tilde{h}/\tilde{h}_c = \tilde{h}/\tilde{\tau}^{\beta\delta}$ (слабкі поля) та $\tilde{\tau}\tilde{h}^{-1/p_0} = (\tilde{h}_c/\tilde{h})^{1/p_0} = \tilde{\tau}/\tilde{h}^{1/(\beta\delta)}$ (сильні поля) розвинуті із перших принципів без загальних міркувань та припущень. Ці змінні співпадають із загальноприйнятим вибором аргументів скейлінгових функцій на основі вимоги масштабної інваріантності (див., наприклад, [10]).

Література

1. 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; ISMP-03-21U).
2. Юхновський І.Р., Козловський М.П., Пилюк І.В. Мікроскопічна теорія фазових переходів у тривимірних системах. – Львів: ЄвроСвіт, 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; ISMP-02-31U).
4. 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; ISMP-03-13U).
5. 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; ISMP-02-32U).
6. Мигдал А.Б. Качественные методы в квантовой теории. – М.: Наука, 1975. – 335 с.
7. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. – М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1974. – 832 с.
8. Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления. – М.: Мир, 1973. – 419 с.
9. Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. – М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1975. – 256 с.
10. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Ч. 1. – М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1976. – 584 с.

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 Пилюк
Орест Олегович Притула

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

Роботу отримано 27 лютого 2004 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку ІФКС НАН України

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені