

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
Павло Романович Козак

ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДУ КОЛЕКТИВНИХ ЗМІННИХ ДО ОПИСУ КРИТИЧНО ПОВЕДІНКИ 3D СПІНОВОЇ СИСТЕМИ ПРИ НАЯВНОСТІ ПОЛЯ

Роботу отримано 14 травня 2008 р.

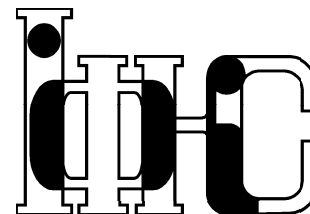
Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу СТeКС

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-08-07U

М.П.Козловський, П.Р.Козак*

ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДУ КОЛЕКТИВНИХ ЗМІННИХ ДО
ОПИСУ КРИТИЧНОЇ ПОВЕДІНКИ 3D СПІНОВОЇ СИСТЕМИ
ПРИ НАЯВНОСТІ ПОЛЯ

*Львівський національний університет ім. І.Я.Франка

ЛЬВІВ

УДК: 538.9;538.91;537.611.2

PACS: 64.60.-i, 64.60.Fr, 75.10.-b, 75.10.Hk, 75.40.Cx

Використання методу колективних змінних до опису критичної поведінки 3D спінової системи при наявності поля

М.П.Козловський, П.Р.Козак

Анотація. В роботі викладена схема отримання вихідного функціоналу для статистичної суми 3D моделі магнетика в зовнішньому полі з використанням множини колективних змінних. Показано, що використання, для якобіану переходу до колективних змінних, ряду послідовних наближень приводить до виникнення ланцюжка різних за своєю природою наближених підходів до опису фазового переходу: теорія типу молекулярного поля; гаусової теорії флуктуацій, підходу Ландау до опису явища фазового переходу тощо. Сформульовані умови наближеного опису поведінки 3D системи поблизу точки фазового переходу, який не потребує виконання припущень феноменологічного характеру та введення до теорії будь-яких макроскопічних параметрів (типу параметра порядку).

Use of the collective variables method for description of the 3D spin system critical behaviour at the presence of the external field

M.P.Kozlovskii, P.R.Kozak

Abstract. The scheme for obtaining the resulting functional for the partition function of the 3D model of magnet in the external field with using of the set of collective variables (CV) is represented. It is shown, that the use of series of approximations for the Jacobian of the transition to the CV generates the chain of the various approximate methods for describing the phase transition: the mean-field theory, the Gauss fluctuations theory, the Landau approach, etc. The conditions of the approximate description of the 3D system behaviour near the critical point are formulated without using any assumptions of phenomenological character and involving any macroscopic parameters (for example, the order parameter).

Вступ

В останній час особлива увага приділяється методам опису властивостей статистичних систем поблизу точки фазового переходу при наявності різного типу зовнішніх полів. Значну роль тут відіграють роботи, пов'язані із використанням числових методів розрахунку. Результати комп'ютерних розрахунків дозволяють встановити важливі деталі критичної поведінки, отримати значення критичних показників та деяких інших універсальних характеристик системи. Однак, використання комп'ютерних симуляцій не дає змоги встановити загальні закономірності поведінки фізичних величин при наближенні до точки фазового переходу. Для цієї мети використовуються аналітичні методи розрахунку. Вибір останніх пов'язаний із об'єктом дослідження і має тенденцію до спрощення методу при вдосконаленні гамільтоніану системи, поведінка якої вивчається. Для складних гамільтоніанів, які забезпечують ширший опис використовується метод молекулярного поля. Цей метод дозволяє описати, на фізичному рівні строгості, основні закономірності поведінки ряду статистичних систем, для яких розміри критичної області є малими. Наступним етапом деталізації опису критичної поведінки є врахування гаусових флуктуацій параметра порядку. Цей підхід дозволив, зокрема, встановити вигляд фазових діаграм двох- та багатокомпонентних сумішей. Класичним теоретичним підходом до опису критичної поведінки широкого класу об'єктів є феноменологічна теорія Ландау.

Кожен з цих підходів ґрунтується на певних, не пов'язаних між собою, фізичних міркуваннях і з різним ступенем точності описує критичну поведінку досліджуваної системи.

В запропонованому нижче способі опису явищ, при фазових переходах, з єдиних позицій, показано якому типу наближення відповідає кожна зі згаданих вище теорій і в який спосіб необхідно здійснювати опис картини фазового переходу, в тривимірних статистичних системах, за наявності постійного зовнішнього поля, використовуючи лише мікроскопічні параметри моделі.

Точка фазового переходу (ФП) характеризується координатами $h = 0$ (h – зовнішнє поле) та $T = T_c$, де T_c – температура ФП при відсутності поля. При наближенні до цієї точки в системі відбувається аномальний ріст флуктуацій параметра порядку. Це є причиною різкого зростання кореляційної довжини системи ξ , що в свою чергу приводить до сингулярного характеру поведінки ряду фізичних характеристик. При відсутності зовнішнього поля критична поведінка статистичних систем вивчена достатньо добре [1-4]. У цьому випадку

в системі мають місце лише теплові флуктуації параметра порядку і поведінка фізичних величин поблизу точки фазового переходу визначається приведеною температурою

$$\tau = (T - T_c/T_c). \quad (1)$$

При наближенні температури до T_c сприйнятливості системи (при $h = 0$) поводить себе як

$$\chi = \chi_0 |\tau|^{-\gamma}, \quad (2)$$

де χ_0 – так звана критична амплітуда, а γ – критичний показник. Ця асимптотична поведінка справедлива для малих значень τ . В загальному випадку поведінка сприйнятливості в критичній області температур $\tau < \tau^*$ описується більш складною залежністю, зокрема в (2) входять доданки, які характеризують поправки до скейлінгу. Ці доданки є менші від вкладів (2), однак пропорційні до $|\tau|^{-\gamma+\Delta}$, де $\gamma > \Delta$ і також приводять до аномально великих значень сприйнятливості.

Згадані вище залежності можна отримати із загальних принципів статистичної механіки для багаточастинкової ґраткової системи спінових частинок [5,6]. Поведінка теплоємності поблизу T_c , при відсутності поля, описується в асимптотичній області співвідношенням

$$C = C_0 |\tau|^{-\alpha}, \quad (3)$$

де C_0 – критична амплітуда, а α – критичний показник теплоємності. Відомі також вирази для інших фізичних величин однокомпонентної моделі фазового переходу при відсутності поля.

Деяка інша ситуація має місце при наближенні системи до температури фазового переходу, якщо $h \neq 0$. Крім теплових флуктуацій параметра порядку мають місце польові флуктуації. Це суттєвим чином ускладнює теоретичний опис моделі, оскільки обидва типи таких флуктуацій, поблизу точки фазового переходу, мають негаусовий характер. Розглянемо, для простоти, випадок $T = T_c$. Відомо, що в цьому випадку параметр порядку поводить себе як

$$\sigma = \sigma_0 h^{1/\delta}, \quad (4)$$

де σ_0 та δ – відповідно критична амплітуда та критичний показник (польовий) середньої намагніченості. Відповідно до (4) сприйнятливості системи (при $T = T_c$) буде мати особливість при прямуванні h до нуля, оскільки $\delta > 1$.

Відомо [3-5], що критичні показники різних фізичних величин пов'язані між собою. Обчисливши два з них можна розрахувати всі

інші. Таке твердження, однак, не має місця для критичних амплітуд. Тому актуальною задачею продовжує залишатися створення прямого аналітичного методу розрахунку фізичних характеристик різних статистичних систем поблизу точки фазового переходу при наявності поля, спряженого до параметра порядку. Це особливо важливо для тривимірних систем, де розвиток аналітичних методів пов'язаний з рядом проблем. Якщо при відсутності поля опис критичної поведінки 3D систем піддається теоретичному опису на мікроскопічному рівні [4,5], то наявність поля суттєво порушує симетрію задачі. Розрахунок фізичних характеристик поблизу точки фазового переходу вимагає врахування як теплових, так і польових флуктуацій параметра порядку.

1. Модель

Для опису явища фазового переходу використаємо найпростішу модель фазового переходу – тривимірну модель Ізінга у зовнішньому полі h . Гамільтоніан такої моделі має вигляд

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j \in \Lambda} \Phi(r_{ij}) \sigma_i \sigma_j - h \sum_{\vec{i} \in \Lambda} \sigma_{\vec{i}}. \quad (1.1)$$

Тут $\Phi(r_{ij})$ – деякий короткосяжний потенціал взаємодії частинок, які розташовані у вузлах \vec{i} та \vec{j} простої кубічної ґратки із періодом c , $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ – віддаль між вузлами. Оскільки змінна σ_i приймає значення ± 1 , то надалі вважатимемо, що випадок $i = j$ при операції сумування в (1.1) включається в розгляд. “Надлишкові” доданки такого типу приводять лише до зсуву вільної енергії системи і не вплинуть на критичну поведінку. Сумування в (1.1) відбувається в об'ємі періодичності

$$\Lambda = \left\{ \vec{l} = (l_x, l_y, l_z) | l_i = c \cdot n_i; n_i = 1, 2, \dots, N_i; i = x, y, z \right\} \quad (1.2)$$

із циклічними граничними умовами. В представленні колективних змінних (КЗ) $\rho_{\vec{k}}$ статистична сума моделі (1.1) записується у вигляді [5]

$$Z = \int (d\rho)^N \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}} \beta \Phi(k) \rho_{\vec{k}} \rho_{-\vec{k}} \right] J_h(\rho). \quad (1.3)$$

Сумування за хвильовими векторами \vec{k} в (1.3) відбувається в межах першої зони Бріллюена

$$\mathcal{B} = \left\{ \vec{k} = (k_x, k_y, k_z) \mid k_i = -\frac{\pi}{c} + \frac{2\pi}{c} \frac{n_i}{N_i}; \right. \\ \left. n_i = 1, 2, \dots, N_i; i = x, y, z \right\}, \quad (1.4)$$

де $N = N_x N_y N_z$ – загальне число вузлів ґратки, $\beta^{-1} = kT$ – обернена температура, $\Phi(k)$ – фур'є образ потенціалу взаємодії, $J_h(\rho)$ – „якобіан“ переходу до КЗ в присутності зовнішнього поля $h' = \beta h$

$$J_h(\rho) = Sp \left[e^{\beta h \sum_{\vec{l}} \sigma_{\vec{l}}} J(\rho - \hat{\rho}) \right]. \quad (1.5)$$

Оператор переходу від спінових до КЗ має вигляд

$$J(\rho - \hat{\rho}) = \int \exp \left[2\pi i \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}} \omega_{\vec{k}} (\rho_{\vec{k}} - \hat{\rho}_{\vec{k}}) \right] (d\omega)^N,$$

де оператори $\hat{\rho}_{\vec{k}}$ пов'язані з $\sigma_{\vec{l}}$

$$\hat{\rho}_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{l} \in \Lambda} \sigma_{\vec{l}} e^{-i\vec{k}\vec{l}}.$$

Елементи об'єму фазового простору мають вид

$$(d\rho)^N = d\rho_0 \prod_{\vec{k} \in \mathcal{B}} ' d\rho_{\vec{k}}^c d\rho_{\vec{k}}^s, \quad (d\omega)^N = d\omega_0 \prod_{\vec{k} \in \mathcal{B}} ' d\omega_{\vec{k}}^c d\omega_{\vec{k}}^s$$

(штрих біля добутку означає, що $k > 0$) відповідно до рівностей

$$\rho_{\vec{k}} = \rho_{\vec{k}}^c - i\rho_{\vec{k}}^s; \quad \rho_{\vec{k}}^c = \rho_{-\vec{k}}^c; \quad \rho_{\vec{k}}^s = -\rho_{-\vec{k}}^s$$

$$\omega_{\vec{k}} = \frac{1}{2} (\omega_{\vec{k}}^c + i\omega_{\vec{k}}^s).$$

При переході до вузлових змінних маємо

$$(d\rho)^N = j^{-1} \prod_{\vec{l} \in \Lambda} d\rho_{\vec{l}}, \quad (d\omega)^N = j \prod_{\vec{l} \in \Lambda} d\omega_{\vec{l}}, \quad j = \sqrt{2}^{N-1}. \quad (1.6)$$

Явний вигляд „якобіану“ переходу отримуємо шляхом виконання сумування в (1.5). Маємо

$$J_h(\rho) = \prod_{\vec{l} \in \Lambda} \left[\delta(\rho_{\vec{l}} + 1) e^{-h'} + \delta(\rho_{\vec{l}} - 1) e^{h'} \right]. \quad (1.7)$$

Зауважимо, що функція (1.7) володіє властивістю

$$\int (d\rho)^N J_h(\rho) = (2 \operatorname{ch} h')^N, \quad (1.8)$$

що і є умовою нормування „якобіану“ переходу. Це означає, що всякий наближений вираз для $J_h(\rho)$ має задовольняти умову (1.8).

Фур'є образ потенціалу взаємодії із (1.3) відповідає цілому класу функцій, які характеризують короткодіючі потенціали. Для експонентно-спадних потенціалів

$$\Phi(r) = A'_0 \exp(-r_{ij}/b) \quad (1.9)$$

фур'є образ має вигляд

$$\Phi_G(k) = \Phi(0) (1 + b^2 k^2)^{-2}, \quad (1.10)$$

де

$$\Phi(0) = A'_0 8\pi(b/c)^3.$$

Для потенціалу взаємодії типу найближчих сусідів фур'є-образ має вигляд

$$\Phi_I(k) = 2J \sum_{l=1}^d \cos(k_l c), \quad (1.11)$$

де J – постійна взаємодії найближчих сусідів. Для обох, згаданих вище, типів взаємодії, при малих значеннях хвильового вектора, справедлива параболічна апроксимація

$$\Phi(k) = \begin{cases} \Phi(0)(1 - 2b^2 k^2), & k \in \mathcal{B}_0 \\ \Phi_0 = \Phi(0)\bar{\Phi}, & k \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0, \end{cases} \quad (1.12)$$

де область значень \mathcal{B}_0 визначається наступним чином

$$\mathcal{B}_0 = \left\{ \vec{k} = (k_x, k_y, k_z) \mid k_i = -\frac{\pi}{c_0} + \frac{2\pi}{c_0} \frac{n_i}{N_{0i}}; n_i = 1, 2, \dots, N_{0i}; \right. \\ \left. i = x, y, z \right\} \quad (1.13)$$

Тут $N_0 = N_{0x} N_{0y} N_{0z}$, причому $N_0 = N \cdot s_0^{-d}$, $d = 3$ – вимірність простору, а параметр $s_0 \geq 1$ визначає період $c_0 = c \cdot s_0$ деякої блочної ґратки. Апроксимація (1.12) визначає, насправді, деяку нову модель, застосовну для опису подій поблизу точки фазового переходу. Вона

об'єднує фізичні об'єкти, в яких, при певних умовах, мають місце фазові переходи і пов'язана з короткодіючим характером взаємодії.

Для розрахунку основних характеристик цієї моделі необхідно розрахувати статистичну суму (1.3) з потенціалом (1.12). Універсальні риси моделі будуть визначатися в основному вкладом хвильових векторів $\vec{k} \in \mathcal{B}_0$, а неуніверсальні характеристики, як, наприклад, температура фазового переходу, залежатимуть від вкладів $\vec{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0$, отже суттєва роль належатиме параметру s_0 . Наближення (1.12) є загальноприйнятим при дослідженні критичної поведінки [3-5], однак основна увага дотепер приділялася лише області параболічної апроксимації $\Phi(k)$, в той час, як вклад флуктуацій параметра порядку із $\vec{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0$ є важливим, зокрема, при визначенні температури фазового переходу T_c .

Апроксимація (1.12) приводить до виникнення двох додаткових параметрів моделі. Одним із них є величина s_0 , яка визначає період деякої ефективної блочної ґратки s_0 . Значення s_0 залежить від вигляду вихідного потенціалу $\Phi(r_{ij})$. Зокрема, для потенціалу взаємодії найближчих сусідів $s_0 \geq 2$, оскільки лише для таких значень параметра s_0 можна використовувати параболічну апроксимацію $\Phi(k)$. Іншим мікроскопічним параметром моделі є $\bar{\Phi}$. Величина $\bar{\Phi}$ може виступати як незалежним параметром, так і вибиратися із певної умови. В якості останньої, надалі, будемо використовувати рівність

$$\Phi(\mathcal{B}_0) = \Phi(0)\bar{\Phi}, \quad (1.14)$$

яка означає, що значення параболічного наближення потенціалу для значень $k = B_0$, де $B_0 = B/s_0 = \frac{\pi}{c_0}$, рівна середньому значенню $\Phi(k)$ в області $\vec{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0$. Приймаючи до уваги (1.12), знаходимо

$$s_0 = \pi\sqrt{2}b/c(1 - \bar{\Phi})^{-1/2}. \quad (1.15)$$

При $\bar{\Phi} = 0$ формула (1.15) приводить до значення s_0 , яке використовувалося в [4]. Оскільки $s \geq 1$, то величина b/c повинна бути більшою за деяке мінімальне значення b/c , яке рівне

$$b/c = \frac{(1 - \bar{\Phi})^{1/2}}{\pi\sqrt{2}}. \quad (1.16)$$

Рівність (1.15) дозволяє виключити із розгляду один із параметрів (s_0 або b/c). Що стосується значення $\bar{\Phi}$, то припустимо, що

$$\bar{\Phi} = \langle \Phi(k) \rangle_{\mathcal{B}_0, B}, \quad (1.17)$$

де $\langle \Phi(k) \rangle$ – середнє значення повного фур'є-образу потенціалу $\Phi_G(k)$ із (1.10) на проміжку $\vec{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0$. Величина $\langle \Phi(k) \rangle$ має вигляд

$$\langle \Phi(k) \rangle = \int_{B/s_0}^B \Phi_G(k) d\vec{k} / \int_{B/s_0}^B \Phi(0) d\vec{k},$$

де $B = \pi/c$ – границя півзони Бріллоена. Використовуючи (1.10) та приймаючи до уваги (1.17), маємо

$$\begin{aligned} \langle \Phi(k) \rangle &= I_2/I_0 \\ I_2 &= \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{c}{b}\right)^3 \left[\frac{b}{c} \frac{(1 - s_{0,\varphi}) \left(s_{0,\varphi} - \pi^2 \left(\frac{b}{c}\right)^2\right)}{\left(1 + \pi^2 \left(\frac{b}{c}\right)^2\right) \left(s_{0,\varphi}^2 + \pi^2 \left(\frac{b}{c}\right)^2\right)} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\pi} \arctg\left(\pi \frac{b}{c}\right) - \frac{1}{\pi} \arctg\left(\pi \frac{b}{c} s_{0,\varphi}^{-1}\right) \right] \\ I_0 &= \frac{1}{3} (1 - s_{0,\varphi}^{-3}). \end{aligned} \quad (1.18)$$

де

$$s_{0,\varphi} = \pi\sqrt{2}b/c(1 - \langle \Phi(k) \rangle). \quad (1.19)$$

Тут $\langle \Phi(k) \rangle$ є функцією величин $s_{0,\varphi}$ та b/c . Таким чином, система рівнянь (1.18) та (1.19) дозволяє знайти однозначний зв'язок величин $s_{0,\varphi}$ та b/c .

В загальному випадку величина $\bar{\Phi}$ може відрізнятися (1.17) і мати вигляд

$$\bar{\Phi} = \langle \Phi(k) \rangle + \Phi_\infty, \quad (1.20)$$

де Φ_∞ – деяка постійна величина. При такому виборі $\bar{\Phi}$ формула (1.18) для визначення $\langle \Phi(k) \rangle$ не змінюється, однак іншою стає величина s_0

$$s_0 = \pi\sqrt{2} \frac{b}{c} (1 - \langle \Phi(k) \rangle - \Phi_\infty)^{-1/2}. \quad (1.21)$$

Замінюючи в (1.18) величину $s_{0,\varphi}$ із (1.19) на s_0 із (1.21) розраховуємо для кожного значення параметра b/c величину $\langle \Phi(k) \rangle$ та відповідне значення s_0 .

2. Функціональне зображення статистичної суми моделі

Для описаної вище моделі з потенціалом взаємодії (1.12) статистична сума (1.3) записується у вигляді [6]

$$Z = \int (d\eta)^{N_0} \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_0} \beta (\Phi(k) - \Phi_0) \eta_k \eta_{-k} \right] J_{s_0}(\eta), \quad (2.1)$$

де

$$J_{s_0}(\eta) = \int (d\omega)^{N_0} (d\rho)^N \exp \left[2\pi i \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_0} \omega_{\vec{k}} (\eta_{\vec{k}} - \rho_{\vec{k}}) + \frac{1}{2} \beta \Phi_0 \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}} \rho_{\vec{k}} \rho_{-\vec{k}} \right] J_h(\rho) \quad (2.2)$$

При $s_0 = 1$ функція $J_{s_0}(\eta)$ має зміст якобіану переходу від спінових $\sigma_{\vec{l}}$ до колективних змінних $\eta_{\vec{k}}$ в присутності зовнішнього поля h' . У цьому випадку $J_{s_0}(\eta)$ співпадає із $J_h(\eta)$ і має місце (1.8). При $s_0 > 1$ функція $J_{s_0}(\eta)$ також має точне нормування, яке буде знайдено нижче. Умова нормування $J_{s_0}(\eta)$ повинна братися до уваги при наближеному розрахунку цієї величини. Для розрахунку норми $J_{s_0}(\eta)$ виконаємо в (2.2) інтегрування за змінними $\rho_{\vec{k}}$. Отримуємо

$$J_{s_0}(\eta) = \int (d\omega)^{N_0} e^{2\pi i \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_0} \omega_{\vec{k}} \eta_{\vec{k}}} I(\omega), \quad (2.3)$$

де величина $I(\omega)$ зображується у вигляді¹

$$I(\omega) = \prod_{\vec{l}} I_L(\omega), \quad (2.4)$$

$$I_L(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\rho_{\vec{l}} e^{2\pi i \rho_{\vec{l}} \omega_{\vec{l}} + \frac{1}{2} \beta \Phi_0 \rho_{\vec{l}}^2} \times \left[\delta(\rho_{\vec{l}} - 1) e^{h'} + \delta(\rho_{\vec{l}} + 1) e^{-h'} \right].$$

¹При розрахунку виразу для оператора переходу був здійснений перехід $(d\omega)^N = j \prod_{\vec{l} \in \Lambda} d\omega_{\vec{l}}$. Локальний якобіан переходу $j = \sqrt{2}^{N-1}$ скомпенсовується при виконанні переходу до вузлових колективних змінних $\rho_{\vec{l}}$: $(d\rho)^N = j^{-1} \prod_{\vec{l} \in \Lambda} d\rho_{\vec{l}}$.

Інтегрування за змінними $\rho_{\vec{l}}$ є тривіальним і дає результат

$$I_{\vec{l}}(\omega) = \exp \left(\frac{1}{2} \beta \Phi_0 \right) 2 \operatorname{ch} (-2\pi i \bar{\omega}_{\vec{l}} + h'). \quad (2.5)$$

Слід зауважити, що величина $\bar{\omega}_{\vec{l}}$ не є змінною, а деяким позначенням:

$$\bar{\omega}_{\vec{l}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_0} \omega_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{l}}, \quad (2.6)$$

де $\vec{l} \in \Lambda$ в той час, як $\vec{k} \in \mathcal{B}_0$. Вузлове зображення змінної $\omega_{\vec{k}}$ має вигляд

$$\omega_{\vec{l}} = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_0} \omega_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{l}}, \quad (2.7)$$

де $\vec{k} \in \mathcal{B}_0$, $\vec{l} \in \Lambda_0$.

Таким чином, для величини $J_{s_0}(\eta)$ із (2.3) маємо

$$J_{s_0}(\eta) = Z' \int (d\omega)^{N_0} e^{2\pi i \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_0} \omega_{\vec{k}} \eta_{\vec{k}}} \prod_{\vec{l} \in \Lambda} \operatorname{ch} (-2\pi i \bar{\omega}_{\vec{l}} + h'). \quad (2.8)$$

Тут

$$Z' = 2^N \exp \left(\frac{1}{2} N \beta \Phi(0) \bar{\Phi} \right). \quad (2.9)$$

Знайдемо величину

$$Z_0 = \int (d\eta)^{N_0} J_{s_0}(\eta). \quad (2.10)$$

Оскільки кожна з величин $\bar{\omega}_{\vec{l}}$ пропорційна до $\omega_{\vec{k}}$ (2.6), то, відповідно до (2.8), отримуємо

$$Z_0 = 2^N \exp \left(\frac{1}{2} N \beta \Phi(0) \bar{\Phi} \right) (\operatorname{ch} h')^N. \quad (2.11)$$

Розрахунок Z_0 можна виконати точно, оскільки в підінтегральному виразі (2.10) внаслідок інтегрування за змінними $\eta_{\vec{k}}$ виникає добуток $\delta(\omega_{\vec{k}})$ -функцій.

Однак вказана вище послідовність інтегрування (спочатку за змінними $\eta_{\vec{k}}$, а згодом за $\omega_{\vec{k}}$) незастосовна при розрахунку статсуми (2.1). Це пов'язано з тим, що величина $(\Phi(k) - \Phi_0)$ в показнику підінтегрального виразу (2.1) залежить від хвильового вектора, що не дозволяє факторизувати підінтегральний вираз у вузловому представленні КЗ. При розрахунку (2.1) спочатку необхідно виконати інтегрування за змінними $\omega_{\vec{k}}$, а лише тоді за змінними $\eta_{\vec{k}}$.

Знайдемо явний вигляд $J_{s_0}(\eta)$. Скористаємося кумулянтним розкладом для $\text{ch}(\dots)$

$$\text{ch}(-2\pi i \bar{\omega}_{\bar{L}} + h') = \exp\left(\sum_{n \geq 0} D_n(\bar{\omega}_{\bar{L}})\right), \quad (2.12)$$

$$D_n(\bar{\omega}_{\bar{L}}) = \frac{(-2\pi i)^n}{n!} \mathcal{M}_n(h') \bar{\omega}_{\bar{L}}^n,$$

де для кумулянтів $\mathcal{M}_n(h')$ маємо

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_0 &= \ln \text{ch}(h'), & \mathcal{M}_1 &= \text{th}(h') \equiv x, \\ \mathcal{M}_2 &= 1 - x^2 \equiv y, & \mathcal{M}_3 &= -2xy, \\ \mathcal{M}_4 &= -2y^2 + 4x^2y, & \mathcal{M}_5 &= 16xy^2 - 8x^3y, \\ \mathcal{M}_6 &= 16y^3 - 88x^2y^2 + 16x^4y, \dots \end{aligned} \quad (2.13)$$

Для J_{s_0} із врахування (2.6) отримуємо

$$\begin{aligned} J_{s_0}(\eta) &= Z_0 \int (d\omega)^{N_0} e^{2\pi i \sum_{\bar{k} \in \mathcal{B}_0} \eta_{\bar{k}} \omega_{\bar{k}}} \exp\left[\sum_{n=1}^{n_0} \frac{(-2\pi i)^n}{n!} \mathcal{M}_n(h') \times \right. \\ &\quad \left. \times s_0^{d(1-n/2)} N_0^{1-n/2} \sum_{\substack{\bar{k}_1, \dots, \bar{k}_n \\ \bar{k}_1 \in \mathcal{B}_0}} \omega_{\bar{k}_1} \dots \omega_{\bar{k}_n} \delta_{\bar{k}_1 + \dots + \bar{k}_n}\right], \end{aligned} \quad (2.14)$$

де $\delta_{\bar{k}_1 + \dots + \bar{k}_n}$ – символ Кронекера.

Легко переконатися, що умова нормування (2.10) виконується для представлення (2.14) точно. При цьому значення величини n_0 не впливає на точність розрахунків. Подальші розрахунки будемо проводити, фіксуючи деяке значення n_0 , обмежуючи, тим самим, безмежний ряд в показнику експоненти (2.14). Члени цього ряду пропорційні до $s_0^{-d(n/2-1)}$, тому при $d = 3$ з ростом n вклади від подальших доданків спадатимуть, оскільки $s_0 > 1$. Зауважимо, що для будь-якого значення n_0 виконується умова (2.10). Після виконання в (2.14) інтегрування за змінними $\omega_{\bar{k}}$ умова (2.10) також повинна виконуватися. Припустимо, що нами проведений наближений розрахунок явного виразу $J_{s_0}(\eta)$. Позначимо його через \bar{J}_n , де риска означає наближеність розрахунку при обмеженні в (2.14) значенням $n = n_0$ (n -тий порядок наближення). Тоді відповідно до (2.10) маємо

$$\varphi_n \int \bar{J}_n(\eta) (d\eta)^{N_0} = Z_0, \quad (2.15)$$

де величина φ_n визначає нормування якобіану переходу $J_n(\eta)$:

$$J_n(\eta) = \varphi_n \bar{J}_n(\eta). \quad (2.16)$$

Таким чином, при наближеному розрахунку (2.14) необхідно перевіряти виконання умови (2.10) і в разі її порушення виконувати нормування отриманого наближеного виразу $\bar{J}_n(\eta)$ відповідно до (2.16), де множник нормування φ_n шукається з умови (2.15)

$$\varphi_n = Z_0 \left(\int (d\eta)^{N_0} \bar{J}_n(\eta) \right)^{-1}. \quad (2.17)$$

Як відомо [5], при відсутності поля ($h = 0$), необхідною умовою достовірності опису поведінки моделі поблизу температури фазового переходу T_c є умова $n_0 \geq 4$. При $n_0 = 2$ (гаусове наближення) маємо незадовільний опис, який приводить до виникнення нефізичних розбіжностей вільної енергії системи при наближенні температури до T_c . Більше того, для всіх $T < T_c$ при $n_0 = 2$ інтеграли типу (2.1) перестають існувати.

Дослідимо як впливає характер наближення (значення величини n_0) при розрахунку величини $J_{s_0}(\eta)$ на опис критичної поведінки системи при наявності поля. Розглянемо тривіальні наближення при обчисленні (2.14).

Нехай $n_0 = 0$. Тоді в показнику експоненти (2.14) нема жодного доданку і маємо

$$\bar{J}_0(\eta) = Z_0 \prod_{\bar{k} \in \mathcal{B}_0} \delta(\eta_{\bar{k}}). \quad (2.18)$$

Відповідний вираз для статсуми (2.1) буде

$$Z = Z_0, \quad (2.19)$$

де вираз для Z_0 приведений в (2.11). Він відповідає системі невзаємодіючих (на великих відстанях $l \geq c_0 = c \cdot s_0$) частинок. Відповідна (2.19) вільна енергія має вигляд

$$F_0 = -kTN \ln 2 - \frac{1}{2} N \Phi(0) \bar{\Phi} - kTN \ln(\text{ch } h'). \quad (2.20)$$

Для нормованого (на загальне число частинок) параметра порядку знаходимо

$$\langle \sigma \rangle_0 = \text{th}(h'). \quad (2.21)$$

Цей результат, однак, формальний. Він показує, що використане вище, наближення для якобіану переходу не описує жодного фазового переходу. Свідченням останнього є та обставина, що у випадку

прямування поля h до нуля ані сприйнятливість, ані теплоємність не мають жодних особливостей (температурних чи польових) ні при яких скінченних температурах.

Формула (2.21) нагадує вираз для параметра порядку в наближенні молекулярного поля. Припускаючи існування деякого середнього поля в i -тому вузлі ґратки [7]

$$\langle \mathcal{H}_i \rangle = \sum_j \Phi(r_{ij}) \langle \sigma_j \rangle + h, \quad (2.22)$$

яке внаслідок трансляційної симетрії величини $\langle \sigma_j \rangle$ не залежить від індекса i тому маємо

$$\langle \mathcal{H}_i \rangle = \Phi(0) \langle \sigma_0 \rangle + h, \quad (2.23)$$

де $\langle \sigma_0 \rangle$ – середня намагніченість.

Використовуючи в (2.21) замість поля h середнє поле $\langle \mathcal{H}_i \rangle$ приходимо до відомого самоузгодженого рівняння [7]

$$\langle \sigma \rangle_0 = \text{th}(\beta \Phi(0) \langle \sigma \rangle + h') \quad (2.24)$$

для параметра порядку. Наближеність цього підходу полягає в припущенні, що величина $\langle \mathcal{H}_i \rangle$ не залежить від орієнтації спіна в цьому ж вузлі. Це приводить до нехтування впливу флуктуацій параметра порядку.

У випадку $n_0 = 1$ статистична сума має вигляд

$$\begin{aligned} Z_1 &= Z_0 \int (d\eta)^{N_0} \exp \left[\frac{1}{2} \beta \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_0} (\Phi(k) - \Phi_0) \eta_{\vec{k}} \eta_{-\vec{k}} \right] \times \\ &\times \int (d\omega)^{N_0} \exp \left[2\pi i \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_0} \omega_{\vec{k}} \left(\eta_{\vec{k}} - \mathcal{M}_1 N^{1/2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Виконуючи інтегрування в (2.25) за змінними $\omega_{\vec{k}}$ та $\eta_{\vec{k}}$, знаходимо

$$Z_1 = Z_0 \exp \left(\frac{1}{2} \beta N \mathcal{M}_1^2 \Phi_{\Pi} \right), \quad (2.26)$$

де введено позначення

$$\Phi_{\Pi} = \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_0} (\Phi(k) - \Phi(0) \bar{\Phi}). \quad (2.27)$$

Зауважимо, що $\Phi_{\Pi} \geq 0$. Відповідна (2.26) вільна енергія має вигляд

$$F_1 = F_0 - \frac{1}{2} N \mathcal{M}_1^2 \Phi_{\Pi}, \quad (2.28)$$

а нормований параметр порядку можна записати як

$$\langle \sigma \rangle_1 = \langle \sigma_0 \rangle (1 + \Phi_{\Pi}). \quad (2.29)$$

Отже, наближення $n_0 = 1$ в (2.14) приводить до деякого зростання параметра порядку, однак, якісно не змінює ситуації, в порівнянні з наближенням $n_0 = 0$. Воно також не описує явища фазового переходу, без використання припущення про існування деякого середнього поля, пов'язаного з параметром порядку.

3. Гаусове наближення

Розглянемо випадок $n_0 = 2$, при розрахунку виразу (2.14). Таке наближення прийнято називати гаусовим. Воно (хоча і фрагментарно) описує явище фазового переходу в системі однокомпонентних спінів. Статистична сума, що відповідає такому наближенню, зображується у вигляді

$$\begin{aligned} Z_G &= Z_0 \int (d\eta)^{N_0} (d\omega)^{N_0} e^{2\pi i \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_0} \omega_{\vec{k}} \eta_{\vec{k}}} \times \\ &\times \exp \left[\frac{1}{2} \beta \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_0} (\Phi(k) - \Phi_0) \eta_{\vec{k}} \eta_{-\vec{k}} \right] \times \\ &\times \exp \left[-2\pi i \mathcal{M}_1 N^{1/2} \omega_0 - \frac{(2\pi)^2}{2} \mathcal{M}_2 \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_0} \omega_{\vec{k}} \omega_{-\vec{k}} \right]. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Виконаємо в (3.1) інтегрування за змінними $\omega_{\vec{k}}$. Отримуємо

$$Z_G = Z_0 P_G \int (d\eta)^{N_0} \exp \left(N^{1/2} \frac{\mathcal{M}_1}{\mathcal{M}_2} \eta_0 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_0} d_G(k) \eta_{\vec{k}} \eta_{-\vec{k}} \right), \quad (3.2)$$

де введені позначення

$$\begin{aligned} P_G &= 2^{-1/2} (\pi \mathcal{M}_2)^{-N_0/2} \exp \left(-N \frac{\mathcal{M}_1^2}{2\mathcal{M}_2} \right), \\ d_G(k) &= d_G(0) + 2\beta \Phi(0) b^2 k^2, \\ d_G(0) &= \mathcal{M}_2^{-1} - \beta \Phi(0) (1 - \bar{\Phi}). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Подальший розрахунок (3.2) пов'язаний з умовою додатності величини $d_G(0)$. Існує деяка температура T_G , при якій

$$d_G(0) = 0. \quad (3.4)$$

Розв'язком (3.4) є вираз

$$\beta_G \Phi(0) = \frac{1}{\mathcal{M}_2(1 - \bar{\Phi})}. \quad (3.5)$$

За умови відсутності зовнішнього поля ($h = 0, \mathcal{M}_1 = 0, \mathcal{M}_2 = 1$) отримуємо значення температури фазового переходу в гаусовому наближенні

$$\beta_c^{(G)} \Phi(0) = (1 - \bar{\Phi})^{-1}. \quad (3.6)$$

Виразимо значення температури T_G через $T_c^{(G)}$. Маємо

$$T_G = T_c^{(G)} (1 - \text{th}^2 h'), \quad (3.7)$$

тобто $T_G < T_c^{(G)}$.

Відзначимо дві особливості величини T_G . Перша з них полягає в тому, що T_G менша за температуру $T_c^{(G)}$, що означає можливість проведення розрахунку (3.2), при $h \neq 0$ для температур дещо нижчих за $T_c^{(G)}$ ($T_G < T \leq T_c^{(G)}$). Друга особливість вибраної моделі полягає в тому, що $T_c < \Phi(0)$. У випадку $\bar{\Phi} > 0$ має місце пониження $T_c^{(G)}$ в порівнянні із загальноприйнятими значенням $T_c^{(0)} = \Phi(0)$.

Легко переконатися, що

$$\mathcal{M}_2 d_G(0) = (T - T_G)/T = \tau_G. \quad (3.8)$$

Тому (3.2) записуємо у вигляді ($T > T_G$)

$$Z = Z_0 \exp\left(\frac{1}{2} N \frac{\mathcal{M}_1^2}{\mathcal{M}_2} \frac{1 - \tau_G}{\tau_G}\right) \times \prod_{\vec{k} \in B_0} (\tau_G + 2\beta\Phi(0)\mathcal{M}_2 b^2 k^2)^{-1/2}. \quad (3.9)$$

Відповідна (3.9) вільна енергія буде

$$F = F_0 + F_1 + F_2 + F_3, \quad (3.10)$$

де $N_0 = N s_0^{-3}$, вираз для F_0 приведений в (2.20),

$$F = F_0 + F_1 + F_2 + F_3,$$

де

$$F_1 = -\frac{1}{2} k T N \frac{\mathcal{M}_1^2}{\mathcal{M}_2} \frac{1}{\tau_G} + \frac{1}{2} k T N \frac{\mathcal{M}_1^2}{\mathcal{M}_2};$$

$$F_2 = \frac{1}{2} k T N s_0^{-3} \ln \tau_G.$$

$$F_3 = \frac{1}{2} k T \sum_{\vec{k} \in B_0} \ln \left(1 + \bar{g} \frac{c^2}{\tau_G} k^2\right), \quad \bar{g} = 2\beta\Phi(0)\mathcal{M}_2 \left(\frac{b}{c}\right)^2. \quad (3.11)$$

Для розрахунку вкладу F_3 скористаємося із інтегрального представлення

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in B_0} \dots = \frac{v}{N} \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \frac{6}{\pi} \int_0^{B_0} \dots k^2 dk,$$

де $B_0 = B/s_0$, $B = \pi/c$ – границя півзони Бріллюена.

В результаті обчислень знаходимо

$$F_3 = -\frac{1}{3} k T N s_0^{-3} + \frac{1}{2} k T N s_0^{-3} \ln(\tau_G s_0^2 + \bar{g} \pi^2) - \frac{1}{2} k T N s_0^{-3} \ln(\tau_G s_0^2) + k T N \tau_G / (\pi^2 s_0 \bar{g}) - k T N \tau_G^{3/2} (\pi \sqrt{\bar{g}})^{-3} \arctg[\pi \sqrt{\bar{g}} / (s_0 \sqrt{\tau_G})]. \quad (3.12)$$

Підставляючи (3.12) в (3.10), знаходимо вільну енергію моделі Ізінга в гаусовому наближенні.

Розрахунок середнього спінового моменту виконуватимемо за формулою

$$\langle \sigma \rangle = -\frac{1}{N} \beta \frac{\partial F}{\partial h'}, \quad (3.13)$$

де в якості F використовується (3.10) та (2.20), (3.11) і (3.12). Для розрахунку $\langle \sigma \rangle$ використаємо деякі співвідношення

$$\frac{\partial \mathcal{M}_1}{\partial h'} = \mathcal{M}_2; \quad \frac{\partial \mathcal{M}_2}{\partial h'} = \mathcal{M}_3 \equiv -2\mathcal{M}_1 \mathcal{M}_2 \approx -2\mathcal{M}_1,$$

$$\frac{\partial \tau}{\partial h'} = \frac{\beta}{\beta_c^{(G)}} 2\mathcal{M}_1 \mathcal{M}_2 \approx 2\mathcal{M}_1,$$

$$\frac{\partial \bar{g}}{\partial h'} = -2g_0 \mathcal{M}_1 \mathcal{M}_2 \approx -2g_0 \mathcal{M}_1, \quad g_0 = 2\beta\Phi(0) \left(\frac{b}{c}\right)^2. \quad (3.14)$$

Зауважимо, що в (3.14) знехтувано доданками, пропорційними до $(h)^3$, тобто покладено $\mathcal{M}_1 \mathcal{M}_2 \approx \mathcal{M}_1$.

Використовуючи (3.10) із (3.15), знаходимо вираз для середнього спінового моменту

$$\langle \sigma \rangle = \langle \sigma \rangle_0 + \langle \sigma \rangle_1 + \langle \sigma \rangle_2 + \langle \sigma \rangle_3. \quad (3.15)$$

Тут $\langle \sigma \rangle_0$ приведено в (2.21), а решта $\langle \sigma \rangle_l$ мають вигляд

$$\langle \sigma \rangle_l = -\frac{\beta}{N} \frac{\partial F_l}{\partial h^l}, \quad (3.16)$$

де F_l – відповідні доданки із (3.10). Шляхом прямого диференціювання знаходимо

$$\begin{aligned} \langle \sigma \rangle_1 &= -\mathcal{M}_1 + \mathcal{M}_1/\tau_G, \\ \langle \sigma \rangle_2 &= -2\mathcal{M}_1 s_0^{-3}/\tau_G. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Для $\langle \sigma \rangle_3$ маємо декілька вкладів

$$\langle \sigma \rangle_3 = \sum_{l=1}^4 \langle \sigma_{3l} \rangle, \quad (3.18)$$

де

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{31} \rangle &= -s_0^{-3} \frac{\mathcal{M}_1}{\tau_G + g_0 \pi^2 / s_0^2} (1 - g_0 \pi^2 / s_0^2); \quad 1 - g_0 \pi^2 / s_0^2 = \bar{\Phi}, \\ \langle \sigma_{32} \rangle &= s_0^{-3} \mathcal{M}_1 / \tau_G, \\ \langle \sigma_{33} \rangle &= -\frac{2\mathcal{M}_1}{\pi^2 s_0 g_0} (1 + \tau_G), \\ \langle \sigma_{34} \rangle &= \frac{3\mathcal{M}_1}{\pi^3 g_0^{3/2}} \tau_G^{1/2} (1 - \tau_G) \operatorname{arctg} \left(\frac{\pi \sqrt{g}}{s_0 \sqrt{\tau_G}} \right) - \\ &\quad - \frac{2\mathcal{M}_1 \tau_G^{3/2}}{\pi^2 s_0 \sqrt{g_0}} \frac{(1 + \tau_G)}{\tau_G + g_0 \pi^2 / s_0^2}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Як легко бачити, величини $\langle \sigma_{3l} \rangle$ є різного порядку малості. Основний вклад від них є пропорційним до $\mathcal{M}_1 \tau_G^{-1}$, далі слідує $\mathcal{M}_1 \cdot \text{const}$. Величинами, пропорційними до $\mathcal{M}_1 \sqrt{\tau_G}$ та $\mathcal{M}_1 \tau_G, \dots$ будемо надалі нехтувати.

В результаті сумування (3.15) знаходимо нормований середній спіновий момент, який в гаусовому наближенні поблизу $T \geq T_c^{(G)}$ має вигляд

$$\langle \sigma \rangle = \langle \sigma \rangle_0 \left(\frac{1}{\tau_G} - \varphi \right), \quad (3.20)$$

де постійна величина φ приймає значення

$$\varphi = s_0^{-3} \left(\frac{2}{g_0 \pi^2 / s_0^2} + \frac{\bar{\Phi}}{g_0 \pi^2 / s_0^2 + \tau_G} \right). \quad (3.21)$$

Для малих значень τ_G маємо наближений вираз для φ :

$$\bar{\varphi} = s_0^{-1} \frac{2 + \bar{\Phi}}{g_0 \pi^2}. \quad (3.22)$$

Оскільки величина g_0 залежить від відношення b/c , то

$$\bar{\varphi} = s_0^{-1} \left(\frac{c}{b} \right)^2 \frac{2 + \bar{\Phi}}{\pi^2 2\beta \Phi(0)}. \quad (3.23)$$

Вираз (3.21) можна зобразити в децю іншому виді, використавши співвідношення (1.14), тобто рівність

$$g_0 \pi^2 / s_0^2 = (1 - \bar{\Phi}). \quad (3.24)$$

Тоді

$$\varphi = s_0^{-3} \left(\frac{2}{1 - \bar{\Phi}} + \frac{\bar{\Phi}}{\tau_G + 1 - \bar{\Phi}} \right).$$

Переписавши (3.20) у вигляді

$$\langle \sigma \rangle = \langle \sigma \rangle_0 \frac{(1 - s_0^{-3} - \varphi \tau_G)}{\tau_G}$$

знаходимо умову додатності $\langle \sigma \rangle$:

$$\varphi \tau_G \leq 1. \quad (3.25)$$

Нерівність (3.25) має місце для всіх $\tau_G < \tau_{G,0}$, де $\tau_{G,0}$ є розв'язком рівняння

$$\varphi \tau_{G,0} = 1$$

або

$$\tau_{G,0} = \varphi_0^{-1} \approx s_0^3 \frac{1 - \bar{\Phi}}{2 + \bar{\Phi}}. \quad (3.26)$$

Для всіх $\bar{\Phi} < 0.9$ маємо $\tau_{G,0} > 1$.

Сприйнятливість системи поблизу T_G в гаусовому наближенні має вигляд

$$\chi = \chi_0 \tau_G^{-1}, \quad (3.27)$$

де

$$\chi_0 = 1 - \varphi\tau_G. \quad (3.28)$$

Отримується добре відома залежність Кюрі-Вейса.

Таким чином, для всіх скінченних температур результати гаусового наближення принципово відрізняються від результатів тривіальних наближень. Формально, вони дозволяють отримати деяку температуру $T_c^{(G)}$, в околі якої сприйнятливості χ аномально зростає. Можна вважати це проявом фазового переходу. Однак, гаусове наближення не дозволяє описувати поведінку фізичних величин в області $T < T_G$, хоча саме в цій області температур виникає відмінний від нуля параметр порядку (при $h = 0$).

4. Негаусові наближення якобіану переходу

Як було показано вище, тривіальні наближення в (2.14) ($n_0 = 0, 1$) не описують явища фазового переходу, оскільки не приводять до аномального росту сприйнятливості чи теплоємності при наближенні до точки фазового переходу. Такі наближення не описують також спонтанного виникнення параметра порядку. Гаусове наближення в (2.14) ($n_0 = 2$) приводить до розбіжностей сприйнятливості та теплоємності системи (при $h = 0$) при деякій температурі $T = T_G$, що може трактуватися як фазовий перехід. Однак відомо, що фазовий перехід пов'язується зі спонтанним виникненням, нижче T_c , ненульового параметра порядку. Цього явища гаусове наближення не описує. Виникнення особливостей поведінки деяких характеристик моделі в гаусовому наближенні (навіть вільної енергії) має математичний, а не фізичний зміст. Температура $T = T_G$, це деяка гранична точка, яка визначає область застосовності гаусового наближення. При $T \leq T_G$ отримуємо розбіжні вирази для всіх фізичних величин, включаючи вираз для статистичної суми. Для усунення нефізичних розбіжностей, поблизу точки фазового переходу, при розрахунку (2.14) до уваги слід приймати (крім другого) кумулянти вищих порядків. Як свідчать дослідження критичної поведінки тривимірної моделі Ізінга при відсутності поля [4], необхідно, у виразі для якобіану переходу в показнику експоненти брати до уваги принаймні кумулянт \mathcal{M}_4 .

Запишемо (2.1) у вигляді

$$Z = \int (d\eta)^{N_0} \exp \left[\frac{1}{2} \beta \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_0} (\Phi(k) - \Phi_0) \eta_{\vec{k}} \eta_{-\vec{k}} \right] \varphi_n \bar{J}_n(\eta), \quad (4.1)$$

де величина

$$\bar{J}_n(\eta) = Z' \prod_{\vec{l} \in \Lambda_0} \bar{J}_l^{(n)}(\eta) \quad (4.2)$$

являє собою ненормований якобіан переходу, причому індекс n визначає порядок наближення для його розрахунку, а φ_n – множник нормування, який визначається відповідно до (2.15). Наближений нормований якобіан переходу приведений в (2.16). Для $\bar{J}_l^{(n)}(\eta)$ маємо

$$\bar{J}_l^{(n)}(\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_{\vec{l}} e^{2\pi i \eta_{\vec{l}} \omega_{\vec{l}}} \exp \left[\sum_{m=0}^n \frac{(-2\pi i)^m}{m!} \mathcal{M}_m s_0^{3(1-m/2)} \omega_{\vec{l}}^m \right]. \quad (4.3)$$

Величина Z' приведена в (2.9), а $\omega_{\vec{l}}$ вузлове зображення змінної $\omega_{\vec{k}}$ із (2.7). Виконаємо в (4.3) заміну змінних

$$\omega_{\vec{l}} = (\mu_2/2\pi) \nu_{\vec{l}}, \quad \mu_2 = (2/\mathcal{M}_2)^{1/2}.$$

Отримуємо

$$\bar{J}_l^{(n)}(\eta) = (\mu_2/2\pi) I_l^{(n)}(\eta) e^{\mathcal{M}_0 s_0^d}, \quad (4.4)$$

де для величини $I_l^{(n)}(\eta)$ маємо

$$I_l(\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} d\nu_{\vec{l}} \exp \left(i\mu_2 \eta_{\vec{l}} \nu_{\vec{l}} - ia' \nu_{\vec{l}} - ib'' \nu_{\vec{l}}^3 - ic' \nu_{\vec{l}}^5 + \dots \right) \times \\ \times \exp \left(-\nu_{\vec{l}}^2 - g\nu_{\vec{l}}^4 - f\nu_{\vec{l}}^6 + \dots \right). \quad (4.5)$$

Тут введені позначення

$$a' = s_0^{d/2} \mathcal{M}_1 \mu_2, \quad b'' = \frac{2}{3} s_0^{-d} a', \\ c' = \frac{8}{15} s_0^{-2d} a' \left(1 - \frac{1}{4} s_0^{-d} a'^2 \right), \dots \\ g = \frac{1}{3} s_0^{-d} \left(1 - s_0^{-d} a'^2 \right), \quad f = \frac{8}{45} s_0^{-2d} \left(1 - \frac{11}{4} s_0^{-d} a'^2 \right), \dots \quad (4.6)$$

Зауважимо, що коефіцієнти a' , b'' та c' при непарних степенях $\nu_{\vec{l}}$ в (4.5) є спадними функціями величини s_0^{-3} . Це ж стосується коефіцієнтів g та f при парних степенях $\nu_{\vec{l}}$.

Обчислення (4.5) вимагає використання певних наближень, пов'язаних із скінченним числом доданків в показнику експоненти. Найпростішим негаусовим наближенням при розрахунку виразу

(4.5) є так зване наближення першого непарного кумулянта [6]. Воно передбачає врахування в (4.5) двох парних кумулянтів (другого та четвертого, що забезпечує збіжність інтегралів) та першого непарного кумулянта \mathcal{M}_1 . Решта доданків у показнику експоненти (4.5) покладаються рівними нулевi:

$$b'' = c' = \dots = 0; \quad f = \dots = 0. \quad (4.7)$$

Розрахунок явного вигляду $I_l^{(n)}(\eta)$ для випадку (4.7) (тут індекс $n = 1$, що означає наближення першого непарного кумулянта) виконані в [8]. Вони приводять до результату

$$I_l^{(1)}(\eta) = e^{a_0^{(1)}} \exp\left(-\sum_{m=1}^{m_0} \frac{a_m^{(1)}}{m!} \eta_l^m\right). \quad (4.8)$$

Обмежимося в (4.8) випадком $m_0 = 4$, який відповідає використанню моделі “ ρ^4 ”. Для коефіцієнтів $a_m^{(1)}$ маємо вирази

$$\begin{aligned} e^{a_0^{(1)}} &= \sqrt{\pi} \left(1 - \frac{3}{4}g\right), \\ a_1^{(1)} &= \frac{1}{2}a'\mu_2(1 - 3g), \\ a_2^{(1)} &= \frac{1}{2}\mu_2^2(1 - 3g), \\ a_3^{(1)} &= \frac{3}{2}\mu_2^3a'g, \quad a_4^{(1)} = \frac{3}{2}\mu_2^4g. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Знайдемо $\bar{J}_1(\eta)$ із (4.2). Підставляючи (4.8) в (4.4), отримуємо

$$\begin{aligned} \bar{J}_1(\eta) &= Z' \left(\frac{\mu_2}{2\pi}\right)^{N_0} e^{\mathcal{M}_0 N_0 S_0^d + a_0^{(1)} N_0} \times \\ &\times \prod_{\vec{l} \in \Lambda_0} \exp\left(-\sum_{m=1}^4 \frac{a_m^{(1)}}{m!} \eta_{\vec{l}}^m\right). \end{aligned} \quad (4.10)$$

Постійну нормування φ_1 визначаємо відповідно до (2.15). В результаті проведених розрахунків отримуємо нормований якобіан переходу до колективних змінних в наближенні першого непарного кумулянта

$$J_1(\eta) = Z_0 Z_{j_1}^{-N_0} \prod_{\vec{l} \in \Lambda_0} \exp\left(-\sum_{n=1}^4 \frac{a_n^{(1)}}{n!} \eta_{\vec{l}}^n\right), \quad (4.11)$$

де використане позначення

$$Z_{j_1} = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\sum_{n=1}^4 \frac{a_n^{(1)}}{n!} \eta_{\vec{l}}^n\right) d\eta. \quad (4.12)$$

Статистична сума в наближенні першого непарного кумулянта набуває вигляду

$$\begin{aligned} Z &= Z_0 Z_{j_1}^{-N_0} \int (d\eta)^{N_0} \exp\left\{-a_1^{(1)} \sqrt{N_0} \eta_0 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_0} d_1(k) \eta_{\vec{k}} \eta_{-\vec{k}} \right. \\ &\quad \left. - \frac{a_3^{(1)}}{6} N_0^{-1/2} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_3 \\ \vec{k}_i \in \mathcal{B}_0}} \eta_{\vec{k}_1} \dots \eta_{\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_3} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{a_4^{(1)}}{24} N_0^{-1} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_4 \\ \vec{k}_i \in \mathcal{B}_0}} \eta_{\vec{k}_1} \dots \eta_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_4} \right\}, \end{aligned} \quad (4.13)$$

де Z_0 приведено в (2.11), Z_{j_1} в (4.12), а коефіцієнти $a_n^{(1)}$ задані в (4.9). Зауважимо, що коефіцієнти $a_{2l+1}^{(1)}$ пропорційні до першого степеня поля, коефіцієнти $a_{2l}^{(1)}$ пропорційні до постійної величини, а

$$d_1(k) = a_2^{(1)} - \beta\Phi(k) + \beta\Phi_0. \quad (4.14)$$

Наступним наближенням, для розрахунку якобіану, мало би бути наближення другого непарного кумулянта \mathcal{M}_3 . Однак, виникає питання узгодження числа доданків в експоненті виразу (4.5) з парними та непарними степенями. Самоузгоджене врахування парних та непарних степенів змінної $\nu_{\vec{l}}$ в (4.5) можна здійснити, вибравши за малий параметр величину s_0^{-d} . Оскільки $d = 3$, а параметр s_0 великий ($s_0 \geq 2$), то величина

$$\epsilon = s_0^{-d} \quad (4.15)$$

вважається малою. Коефіцієнти (4.6) пропорційні різним степеням величини ϵ . В першому наближенні розглянемо величини пропорційні до першого степеня ϵ , в наступному – до другого степеня і т.д.

Оскільки існує критерій малості коефіцієнтів, то в першому наближенні за ϵ маємо

$$\begin{aligned} g &\neq 0, \quad f = 0, \quad \dots; \\ a' &\neq 0, \quad b'' \neq 0, \quad c' = 0, \dots \end{aligned} \quad (4.16)$$

Наступне наближення відповідатиме умовам:

$$\begin{aligned} g &\neq 0, & f &\neq 0, ; \\ a' &\neq 0, & b'' &\neq 0, & c' &\neq 0. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Таким чином, беручи до уваги (4.16), отримуємо наближення другого непарного кумулянта. Вираз (4.5) набуває вигляду

$$I_l^{(2)}(\eta) = \int d\nu_l e^{i\mu_2 \eta_l \nu_l} \exp(-\nu_l^2 - g\nu_l^4 - ia'\nu_l - ib''\nu_l^3). \quad (4.18)$$

Шляхом заміни змінних вираз (4.18) зводиться до вигляду

$$I_l^{(2)}(\eta) = e^{-a'^2/4} \left(1 - \frac{1}{4}s_0^{-d} a'^2\right) e^{1/2\mu_2 \eta_l a'/2} \tilde{J}_l^{(2)}(\eta), \quad (4.19)$$

де

$$\tilde{J}_l^{(2)}(\eta) = \int dy_l e^{i\mu_2 \eta_l y_l} \exp(-ia''y_l - y_l^2 - g'y_l^4). \quad (4.20)$$

Тут введені позначення

$$\begin{aligned} \mu_2' &= \mu_2 \left(1 - \frac{1}{4}s_0^{-d} a'^2\right), & g' &= \frac{s_0^{-d}}{3} \\ a'' &= -\frac{s_0^{-d} a'^3}{3}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

У результаті виконаних перетворень вираз (4.20) має функціональний вигляд подібний, до наближення першого непарного кумулянта. Відмінність полягає в тому, що величини μ_2 , a' та g слід замінити на μ_2' , a'' та g' відповідно.

Розрахунок (4.20) суттєво спрощується, оскільки у показнику експоненти можна знехтувати доданком пропорційним до a'' , який, в свою чергу, пропорційний h^3 . Таким чином знаходимо

$$\begin{aligned} I_l^{(2)}(\eta) &= e^{-a'^2/4} \left(1 - \frac{1}{4}s_0^{-d} a'^2\right) \times \\ &\times \exp\left(a_0^{(2)} - a_1^{(2)}\eta_l - \frac{1}{2}a_2^{(2)}\eta_l^2 - \right. \\ &\left. - \frac{1}{3!}a_3^{(2)}\eta_l^3 - \frac{1}{4!}a_4^{(2)}\eta_l^4\right). \end{aligned} \quad (4.22)$$

Для коефіцієнтів $a_l^{(2)}$ маємо

$$\begin{aligned} e^{a_0^{(2)}} &= \sqrt{\pi} \left(1 - \frac{s_0^{-d}}{4}\right), & a_1^{(2)} &= \frac{1}{2}\mu_2 a' + \frac{1}{6}\mu_2 s_0^{-d} a'^3, \\ a_2^{(2)} &= \frac{1}{2}\mu_2^2 \left(1 - s_0^{-d} - \frac{s_0^{-d} a'^2}{2}\right), \\ a_3^{(2)} &= 0, & a_4^{(2)} &= \frac{1}{2}\mu_2^4 s_0^{-d}. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Зауважимо принципову відмінність виразу (4.22) від (4.8). Останній містить в показнику експоненти доданок $a_3^{(1)}\eta_l^3$, а у виразі (4.22) коефіцієнт $a_3^{(2)}$ обертається в нуль. Підставимо (4.22) у вираз (4.4), а отриманий результат в (4.2). Маємо

$$\begin{aligned} \bar{J}_2(\eta) &= Z' \left(\frac{\mu_2}{2\pi}\right)^{N_0} e^{\mathcal{M}_0 N_0 s_0^d + a_0^{(2)} N_0} \times \\ &\times e^{-a'^2 N_0/4} \left(1 - \frac{1}{4}s_0^{-d} a'^2\right)^{N_0} \times \\ &\times \prod_{\vec{l} \in \Lambda_0} \exp\left(-a_1^{(2)}\eta_{\vec{l}} - \frac{1}{2}a_2^{(2)}\eta_{\vec{l}}^2 - \frac{1}{4!}a_4^{(2)}\eta_{\vec{l}}^4\right). \end{aligned} \quad (4.24)$$

Величина $\bar{J}_2(\eta)$ є ненормованим якобіаном переходу в наближенні другого непарного кумулянта. Його нормування виконуємо відповідно до (2.16), де величина φ_2 шукається з умови (2.15)

$$\varphi_2 \int (d\eta)^{N_0} \bar{J}_2(\eta) = Z_0.$$

Після розрахунків отримуємо нормований якобіан переходу

$$J_2(\eta) = Z_0 Z_{j_2}^{-N_0} \prod_{\vec{l} \in \Lambda_0} \exp\left(-\sum_{n=1}^4 \frac{a_n^{(2)}}{n!} \eta_{\vec{l}}^n\right), \quad (4.25)$$

де коефіцієнти $a_n^{(2)}$ приведені в (4.23),

$$Z_{j_2} = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-a_1^{(2)}\eta - \frac{1}{2}a_2^{(2)}\eta^2 - \frac{1}{24}a_4^{(2)}\eta^4\right) d\eta. \quad (4.26)$$

Зауважимо, що (4.25) відрізняється від (4.11) відсутністю, в показнику експоненти підінтегрального виразу доданку, пропорційного до третього степеня змінної $\eta_{\vec{l}}$, та заміною величини Z_{j_1} на Z_{j_2} .

Статистична сума, в наближенні другого непарного кумулянта, матиме вигляд

$$Z = Z_0 Z_{j_2}^{-N_0} \int (d\eta)^{N_0} \exp \left(-a_1^{(2)} \sqrt{N_0} \eta_0 - \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathcal{B}_0} d_2(k) \eta_{\bar{k}} \eta_{-\bar{k}} - \frac{a_4^{(2)}}{24} N_0^{-1} \sum_{\substack{\bar{k}_1, \dots, \bar{k}_4 \\ \bar{k}_i \in \mathcal{B}_0}} \eta_{\bar{k}_1} \dots \eta_{\bar{k}_4} \delta_{\bar{k}_1 + \dots + \bar{k}_4} \right), \quad (4.27)$$

де коефіцієнти $a_n^{(2)}$ приведені в (4.23), а

$$d_2(k) = a_2^{(2)} - \beta \Phi(k) + \beta \Phi_0. \quad (4.28)$$

Розглянемо наближення третього непарного кумулянта. Для цього використаємо рівності (4.17). Таке наближення враховує доданки пропорційні до ϵ та ϵ^2 і не приймає до уваги члени пропорційні до ϵ^3 .

Вираз (4.5) набуває вигляду

$$I_l^{(3)}(\eta) = \int d\nu_{\bar{l}} e^{i\mu_2 \eta_{\bar{l}} \nu_{\bar{l}}} \exp \left(-ia' \nu_{\bar{l}} - ib'' \nu_{\bar{l}}^3 - ic' \nu_{\bar{l}}^5 - \nu_{\bar{l}}^2 - g \nu_{\bar{l}}^4 - f \nu_{\bar{l}}^6 \right). \quad (4.29)$$

Шляхом заміни змінних він зводиться до вигляду

$$I_l^{(3)}(\eta) = e^{-a'^2/4} \left(1 - \frac{1}{4} s_0^{-d} a'^2 \right) e^{1/2 \mu_2 a' \eta_{\bar{l}}} \tilde{J}_l^{(3)}(\eta). \quad (4.30)$$

Для $\tilde{J}_l^{(3)}(\eta)$ маємо

$$\tilde{J}_l^{(3)}(\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} dy_{\bar{l}} e^{i\mu_2 \eta_{\bar{l}} y_{\bar{l}}} \times \exp \left(-iy_{\bar{l}} a''' - iy_{\bar{l}}^3 b''' - y_{\bar{l}}^2 - g''' y_{\bar{l}}^4 - f''' y_{\bar{l}}^6 \right), \quad (4.31)$$

де

$$a''' = -\frac{1}{3} s_0^{-d} a'^3, \quad b''' = -\frac{2}{9} s_0^{-2d} a'^3,$$

$$g''' = \frac{s_0^{-d}}{3} \left(1 + \frac{3}{4} s_0^{-d} a'^2 \right), \quad f''' = \frac{8}{45} s_0^{-2d}, \quad (4.32)$$

Як і у виразі (4.20), в (4.31) коефіцієнти a''' та b''' пропорційні до h^3 . Ними можна знехтувати. В результаті обчислюємо (4.31) і для $I_2^{(3)}(\eta)$ знаходимо

$$I_2^{(3)}(\eta) = e^{-a'^2/4} \left(1 - \frac{1}{4} s_0^{-d} a'^2 \right) \exp \left(a_0^{(3)} - a_1^{(3)} \eta_{\bar{l}} - \frac{1}{2} a_2^{(3)} \eta_{\bar{l}}^2 - \frac{1}{3!} a_3^{(3)} \eta_{\bar{l}}^3 - \frac{1}{24} a_4^{(3)} \eta_{\bar{l}}^4 \right), \quad (4.33)$$

де

$$\begin{aligned} e^{a_0^{(3)}} &= \sqrt{\pi} \left[1 - \frac{1}{4} s_0^{-d} \left(1 - \frac{1}{8} s_0^{-d} - \frac{3}{4} s_0^{-d} a'^2 \right) \right], \\ a_1^{(3)} &= \frac{a'}{\sqrt{2\mathcal{M}_2}} \left[1 + \frac{s_0^{-d} a'^2}{3} \left(1 + \frac{s_0^{-d}}{2} \right) \right], \\ a_2^{(3)} &= \frac{1}{\mathcal{M}_2} \left\{ 1 - s_0^{-d} \left[1 + \frac{a'^2}{2} + s_0^{-d} \left(\frac{2}{3} - \frac{5}{8} a'^2 \right) \right] \right\}, \\ a_3^{(3)} &= \frac{3}{64} \left(\frac{2}{\mathcal{M}_2} \right)^{3/2} s_0^{-d} a'^3, \\ a_4^{(3)} &= \frac{2}{\mathcal{M}_2^2} s_0^{-d} \left[1 - 3s_0^{-d} \left(1 + \frac{13}{48} a'^2 \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Виконуючи, відповідно до (4.2), нормування маємо

$$Z = Z_0 Z_{j_3}^{-N_0} \int (d\eta)^{N_0} \exp \left(-a_1^{(3)} \sqrt{N_0} \eta_0 - \frac{1}{2} \sum_{k \in \mathcal{B}_0} d_3(k) \eta_{\bar{k}} \eta_{-\bar{k}} - \frac{a_3^{(3)}}{6} N_0^{-1/2} \sum_{\substack{\bar{k}_1, \dots, \bar{k}_3 \\ \bar{k}_i \in \mathcal{B}_0}} \eta_{\bar{k}_1} \dots \eta_{\bar{k}_3} \delta_{\bar{k}_1 + \dots + \bar{k}_3} \right)$$

$$\left. -\frac{a_4^{(3)}}{24} N_0^{-1} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_4 \\ \vec{k}_i \in \mathcal{B}_0}} \eta_{\vec{k}_1} \cdots \eta_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_4} \right), \quad (4.35)$$

де постійна нормування має вигляд

$$Z_{j3} = \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-a_1^{(3)} \eta - \frac{1}{2} a_2^{(3)} \eta^2 - \frac{1}{3!} a_3^{(3)} \eta^3 - \frac{1}{24} a_4^{(3)} \eta^4 \right) d\eta, \quad (4.36)$$

а для $d_3(k)$ маємо

$$d_3(k) = a_2^{(3)} - \beta \Phi(k) + \beta \Phi_0. \quad (4.37)$$

Порівняємо вирази (4.13), (4.27) та (4.35), які є різними представленнями статистичної суми однокомпонентної моделі магнетика в зовнішньому полі. Кожен з них відповідає негаусовому наближенню для якобіану переходу (4.3) який крім $\mathcal{M}_2(h)$ враховує (без використання теорії збурень) кумулянти вищого порядку \mathcal{M}_4 (або \mathcal{M}_4 та \mathcal{M}_6).

Ці вирази відрізняються тим, що при проведенні розрахунків явної залежності $J(\eta)$ до уваги приймалося різне число непарних кумулянтів $\mathcal{M}_{2l+1}(h)$. При цьому отримуємо два типи представлень статистичної суми. Перший з них (4.13) відповідає примітивному наближенню, у якому вважається, що $\mathcal{M}_1 \neq 0$, а всі решта $\mathcal{M}_{2l+1} = 0$. Таке наближення є близьким до наближення типу молекулярного поля (2.20) та (2.25), яке базується на використанні негаусового розподілу флуктуацій за парними кумулянтами.

Два інші вирази (4.27) та (4.35) отримані з використанням малого параметра ϵ (4.15) шляхом оцінки пропорційності коефіцієнтів до степенів ϵ , з використанням умов (4.16) та (4.17). Такий підхід приводить до іншого типу представлення статистичної суми, у якому показник експоненти підінтегральної функції не містить доданків, пропорційних до непарних степенів вкладів за колективними змінними $\eta_{\vec{k}}$, крім ρ_0 і записується у вигляді

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

$$\left. -\frac{a_3}{6} N_0^{-1/2} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_3 \\ \vec{k}_i \in \mathcal{B}_0}} \eta_{\vec{k}_1} \cdots \eta_{\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_3} - \frac{a_4}{4!} N_0^{-1} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_4 \\ \vec{k}_i \in \mathcal{B}_0}} \eta_{\vec{k}_1} \cdots \eta_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_4} \right), \quad (4.38)$$

де

$$d(k) = a_2 - \beta \Phi(k) + \beta \Phi_0. \quad (4.39)$$

Розглянувши вирази для коефіцієнтів a_l у різних наближеннях: (4.9), (4.23), (4.34), бачимо, що кожне наступне наближення включає в себе попереднє, та доданки, що виходять за рамки попереднього наближення. Отже, для коефіцієнтів a_l маємо вирази

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{\mathcal{M}_1}{\mathcal{M}_2} s_0^{d/2} \left[1 + \frac{2}{3} \frac{\mathcal{M}_1^2}{\mathcal{M}_2} \left(1 + \frac{s_0^{-d}}{2} \right) \right], \\ a_2 &= \frac{1}{\mathcal{M}_2} \left[1 - \frac{\mathcal{M}_1^2}{\mathcal{M}_2} - s_0^{-d} \left(1 - \frac{5}{4} \frac{\mathcal{M}_1^2}{\mathcal{M}_2} + \frac{2}{3} s_0^{-d} \right) \right], \\ a_3 &= 3 \left(\frac{\mathcal{M}_1}{\mathcal{M}_2} \right)^3 s_0^{d/2}, \\ a_4 &= \frac{2}{\mathcal{M}_2^2} s_0^{-d} \left(1 - \frac{13}{8} \frac{\mathcal{M}_1^2}{\mathcal{M}_2} - 3 s_0^{-d} \right). \end{aligned} \quad (4.40)$$

5. Наближення типу теорії Ландау

Як відомо [5], серед множини колективних змінних $\eta_{\vec{k}}$ є змінна η_0 , середнє значення якої пов'язане із параметром порядку. Тому можна припустити, що основний вклад до статистичної суми (4.38) буде пов'язаний з інтегруванням за змінною $\eta_{\vec{k}}$ із $k = 0$. Вважатимемо, що ми виконали інтегрування в (4.38) за всіма $\eta_{\vec{k}}$ із $k \neq 0$ і цей вклад до статсуми позначимо через Z'_L . Тоді (4.38) матиме вигляд

$$Z = Z_L \int d\eta_0 \exp \left(a_1 \sqrt{N_0} \eta_0 - \frac{1}{2} d(0) \eta_0^2 - \frac{a_4}{24} \frac{1}{N_0} \eta_0^4 \right), \quad (5.1)$$

де $Z_L = Z_0 Z_j^{-N_0} Z'_L$, коефіцієнти a_n мають вигляд (4.40), а величина $d(0)$ записується як

$$d(0) = a_2 - \beta \Phi(0) + \beta \Phi(0) \bar{\Phi}. \quad (5.2)$$

Виконаємо в (5.1) заміну змінних $\eta_0 = \sqrt{N}\rho$. Отримуємо

$$Z = Z_L N^{1/2} I_L, \quad (5.3)$$

де

$$I_L = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(NE(\rho)) d\rho. \quad (5.4)$$

Для $E(\rho)$ маємо

$$E(\rho) = h'\rho - \frac{1}{2}d(0)\rho^2 - \frac{a_4}{24} \frac{N}{N_0} \rho^4. \quad (5.5)$$

Розрахунок I_L проводимо методом перевалу. Для цього знаходимо екстремум $E(\rho)$

$$h' = d(0)\bar{\rho} + \frac{1}{6}a_4 s_0^d \bar{\rho}^3. \quad (5.6)$$

Величина $\bar{\rho}$ характеризує екстремум $E(\bar{\rho})$ і є розв'язком рівняння

$$\bar{\rho}^3 + p\bar{\rho} + q = 0, \quad (5.7)$$

де

$$p = 6 \frac{d(0)}{a_4} s_0^{-d}, \quad q = -6h' s_0^{-d} / a_4. \quad (5.8)$$

В результаті вільна енергія моделі, в термодинамічній границі, записується у вигляді

$$F = -kT \ln Z_L - kTN \left(h'\bar{\rho} - \frac{1}{2}d(0)\bar{\rho}^2 - \frac{a_4}{24} s_0^d \bar{\rho}^4 \right) \quad (5.9)$$

де $\bar{\rho}$ розв'язок рівняння (5.7), який відповідає мінімальному значенню вільної енергії.

Характер розв'язку (5.7) залежить від знаку $d(0)$. Існує температура β_c , при якій

$$d(0) = 0. \quad (5.10)$$

Для всіх $T > T_c$ маємо $d(0) > 0$, а при $T < T_c$ $d(0) < 0$. Приймаючи до уваги (5.2), (4.39) із (5.10) знаходимо

$$\beta_c \Phi(0) = \frac{a_2}{1 - \bar{\Phi}}. \quad (5.11)$$

Приймаючи до уваги (5.11), отримуємо

$$d(0) = \tau \beta \Phi(0)(1 - \bar{\Phi}), \quad (5.12)$$

де

$$\tau = (T - T_c) / T_c. \quad (5.13)$$

Порівнюючи вирази для температури фазового переходу в наближенні типу теорії Ландау (5.11) та гаусовому наближенні (3.6), знаходимо повну їхню відповідність (в останньому $a_2 = \mathcal{M}_2^{-1}$ і при $h \rightarrow 0$ маємо $a_2 = 1$). Суттєва різниця між цими підходами полягає в тому, що наближення (5.1) описує наявність спонтанного порядку, а гаусове наближення не дозволяє цього зробити, оскільки справедливе лише при $T > T_c^{(G)}$.

Величини (5.8) зручно зобразити у вигляді

$$p = p_0 \tau; \quad q = -q_0 h', \quad (5.14)$$

де

$$p_0 = \frac{6}{a_4} s_0^{-d} \beta \Phi(0)(1 - \bar{\Phi}), \quad q_0 = \frac{6}{a_4} s_0^{-d}. \quad (5.15)$$

Розв'язки (5.7) шукаємо за відомими формулами

$$y_1 = A + B, \quad y_{2,3} = -\frac{1}{2}(A + B) \pm i \frac{A - B}{2} \sqrt{3}, \quad (5.16)$$

де

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

В залежності від знаку дискримінанта

$$Q = (p/3)^3 + (q/2)^2 \quad (5.17)$$

маємо три типи розв'язків. Для $Q > 0$ існує один дійсний розв'язок, при $Q = 0$ – три дійсні розв'язки (принаймні два з них співпадають), у випадку $Q < 0$ – три різні дійсні розв'язки. Для випадку $T > T_c$ реалізується лише умова $Q > 0$, для $T < T_c$ маємо всі три типи розв'язків. Розв'язок рівняння (5.7), який відповідає мінімальному значенню вільної енергії (5.9) позначимо через m . Він буде відповідати параметру порядку. На рис.1 зображено залежність параметра порядку від τ .

Сприйнятливості системи розраховується як похідна за полем від m . Її температурна залежність зображена на рис.2.

Застосуємо до розв'язків (5.16) ряд наближень, які дозволяють отримати явні температурні чи польові залежності параметра порядку при наявності зовнішнього поля. Для цього розглянемо випадок

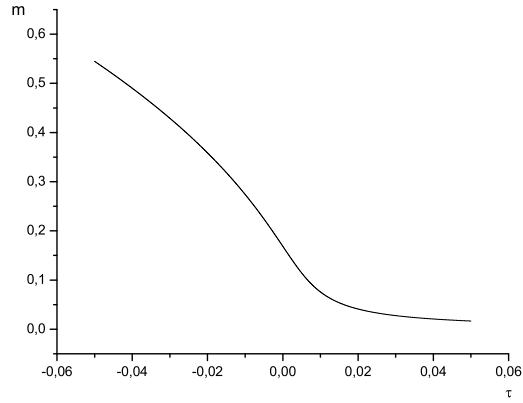


Рис. 1. Залежність параметра порядку m від τ при $h' = 0.001$.

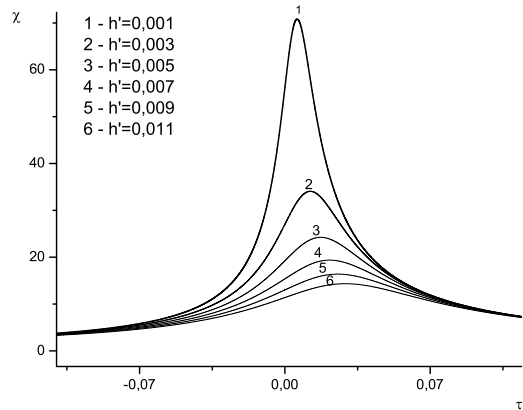


Рис. 2. Залежність сприйнятливості χ від τ при різних значеннях h' .

$T < T_c$ та дослідимо умову $Q = 0$. Остання має місце, коли $h' = h_c$, де

$$h_c = h_{c0} |\tau|^{3/2}, \quad (5.18)$$

$$h_{c0} = \frac{2}{q_0} (p_0/3)^{3/2}. \quad (5.19)$$

Таким чином, дискримінант (5.17) обертається в нуль для всіх значень полів $h' = h_c$, які пов'язані із температурою τ співвідношенням (5.18). Для температурної області $T < T_c$ при $h' > h_c$ маємо $Q > 0$, а для $h < h_c$ отримуємо $Q < 0$. Зауважимо, що для $T > T_c$ дискримінант $Q > 0$ при довільних значеннях поля h' .

Для випадку $Q = 0$ розв'язки (5.16) набувають вигляду

$$\begin{aligned} y_1 &= 2 (q_0/2)^{1/3} h'^{1/3}, \\ y_2 &= y_3 = - (q_0/2)^{1/3} h'^{1/3} \equiv -\frac{1}{2} y_1. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Мінімуму вільної енергії відповідає розв'язок y_1 , який і утотожнюється з параметром порядку m .

Приймаючи до уваги, що при $Q = 0$ маємо $h' = h_c$, з використанням рівності (5.18), розв'язок y_1 можна зобразити у вигляді

$$m = 2 (p_0/3)^{1/2} |\tau|^{1/2}, \quad (5.21)$$

який однак справедливий лише при полях $h' = h_c$.

Розглянемо температури $T < T_c$. Випадку $Q > 0$ відповідає область сильних значень полів ($h' > h_c$)

$$Q = (q_0/2)^2 h^2 - (p_0/3)^3 |\tau|^3. \quad (5.22)$$

Введемо величину α , яка визначає відхилення поля h' від його граничного значення h_c

$$h' = \alpha h_c. \quad (5.23)$$

Тоді (5.22) переписеться у вигляді

$$Q^{1/2} = \frac{q_0}{2} h' \left(1 - \frac{1}{\alpha^2}\right)^{1/2}. \quad (5.24)$$

У випадку $\alpha \gg 1$ ($T < T_c$) отримуємо наближений розв'язок

$$m = q_0^{1/3} h'^{1/3} \left[1 + (2\alpha)^{-2/3} - \frac{1}{12} \alpha^{-2}\right]. \quad (5.25)$$

Цей розв'язок має місце для великих полів h' (в порівнянні із h_c) та визначає асимптотику m в границі $\tau \rightarrow 0$.

Випадок $Q < 0$ має місце в області слабких полів ($h' < h_c$). Розв'язки (5.7) зручно зобразити у вигляді [10]

$$\begin{aligned} y_1 &= 2(-p/3)^{1/2} \cos(\beta/3), \\ y_{2,3} &= -2(-p/3)^{1/2} \cos\left(\beta/3 \pm \frac{\pi}{3}\right), \end{aligned} \quad (5.26)$$

де $\beta = \arccos \alpha$. В граничному випадку $\alpha \ll 1$ ($T < T_c$) маємо

$$\beta = \frac{\pi}{2} - \arcsin \alpha \approx \frac{\pi}{2} - \alpha.$$

Тоді, розклавши у (5.26) \cos в ряд за α , знаходимо

$$\begin{aligned} y_1 &= m = p_0^{1/2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{27}}\alpha - \frac{1}{18}\alpha^2\right) |\tau|^{1/2} \\ y_2 &= -\frac{2}{\sqrt{27}} p_0^{1/2} \alpha |\tau|^{1/2} \\ y_3 &= -2p_0^{1/2} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{27}}\alpha - \frac{1}{18}\alpha^2\right) |\tau|^{1/2} \end{aligned} \quad (5.27)$$

Мінімуму вільної енергії відповідає розв'язок y_1 , який позначається через m .

У випадку $T > T_c$ реалізується лише один тип розв'язку, оскільки тут $Q > 0$. Маємо, однак, відмінність від випадку $Q > 0$ при $T < T_c$. Якщо при $T < T_c$ випадок $Q > 0$ реалізувався лише для $h' > h_c$, то при $T > T_c$ можливі дві ситуації $\alpha > 1$ та $\alpha < 1$. В загальному виді

$$Q = (q_0/2)^2 h^2 + (p_0/3)^3 \tau^3. \quad (5.28)$$

Для сильних полів ($h \gg h_c$) параметр $\alpha \gg 1$ і дискримінант набуває вигляду

$$Q^{1/2} = (q_0/2) h' \left(1 + \frac{1}{\alpha^2}\right)^{1/2}. \quad (5.29)$$

Для величин A та B отримуємо наближені вирази

$$A \approx q_0^{1/3} (h')^{1/3} \left(1 + \frac{1}{12\alpha^2}\right), \quad B \approx -q_0^{1/3} (h')^{1/3} (2\alpha)^{-2/3},$$

тоді

$$m = q_0^{1/3} (h')^{1/3} \left[1 - \left(\frac{1}{2\alpha}\right)^{2/3} + \frac{1}{12\alpha^2}\right]. \quad (5.30)$$

Така залежність параметра порядку від поля співпадає з результатами розрахунку теорії Ландау [9].

Для випадку слабких полів ($h \ll h_c$, $\alpha \ll 1$) дискримінант (5.28) має вигляд

$$Q^{1/2} = (p_0/3)^{3/2} \tau^{3/2} (1 + \alpha^2)^{1/2}$$

Для величин A та B отримуємо вирази

$$A = \left(\frac{p_0}{3}\right)^{1/2} \tau^{1/2} \left(1 + \alpha + \frac{\alpha^2}{2}\right)^{1/3},$$

$$B = -\left(\frac{p_0}{3}\right)^{1/2} \tau^{1/2} \left(1 - \alpha + \frac{\alpha^2}{2}\right)^{1/3},$$

що дозволяє знайти поведінку параметра порядку

$$m = \left(\frac{p_0}{3}\right)^{1/2} \tau^{1/2} \frac{2}{3} \frac{h'}{h_c} \quad (5.31)$$

Отже, при $T > T_c$ маємо два граничних випадки поведінки параметра порядку. При $h' \gg h_c$ справедлива формула (5.30), де

$$m \sim h'^{1/3}.$$

При $h' \ll h_c$ отримуємо якісно іншу залежність. Використовуючи (5.18) із (5.31) знаходимо залежність

$$m \approx \tau^{1/2} \alpha.$$

Сприйнятливість для розглянутих вище випадків матиме вигляд: При $T < T_c$:

$$\alpha \gg 1: \chi_{в1} = \frac{q_0^{1/3}}{3} h'^{-2/3} \left[1 - \left(\frac{1}{2\alpha}\right)^{2/3} + \frac{5}{12} \frac{1}{\alpha^2}\right] \quad (5.32)$$

$$\alpha \ll 1: \chi_{м1} = \frac{1}{2} \frac{q_0}{p_0 |\tau|} \left(1 - \frac{\alpha}{\sqrt{3}}\right) \quad (5.33)$$

При $T > T_c$:

$$\alpha \gg 1: \chi_{в2} = \frac{q_0^{1/3}}{3} h'^{-2/3} \left[1 + \left(\frac{1}{2\alpha}\right)^{2/3} - \frac{5}{12} \frac{1}{\alpha^2}\right] \quad (5.34)$$

$$\alpha \ll 1: \chi_{м2} = \frac{q_0}{p_0 \tau} \quad (5.35)$$

Як легко бачити, важливою величиною при обчисленні параметра порядку та сприйнятливості системи ізінгівських спінів у наближенні теорії Ландау є параметр α із (5.23). При значеннях $\alpha \approx 1$ розв'язок рівняння (5.7) повинен шукатися точно, однак, для малих та великих значень параметра α мають місце наближені вирази.

Для випадку $\alpha \gg 1$ параметр порядку описується наближеною формулою (5.25) при $T < T_c$ та (5.30) при $T > T_c$, які при фіксованому значенні поля h' справедливі для інтервалу значень температур $\tau_{B1} < \tau < \tau_{B2}$. Величини τ_{B1} і τ_{B2} знаходимо з порівняння значень сприйнятливостей χ_{B1} та χ_{B2} (5.32), (5.34) із величиною χ_T розрахованою як похідна за полем від точного розв'язку $\bar{\rho}$ із рівняння (5.7). На рис.3 приведена залежність відношення χ_B/χ_T як фун-

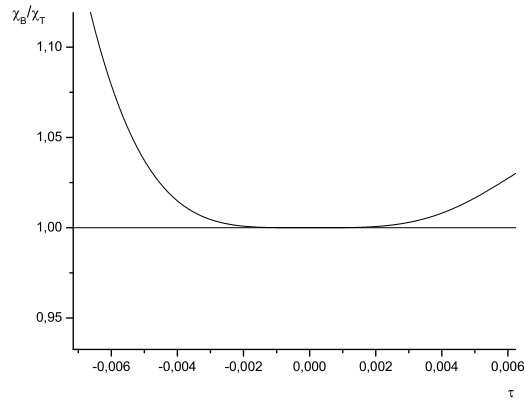


Рис. 3. Залежність χ_B/χ_T від τ для $\alpha \gg 1$.

кції температури τ при $h' = 0,001$. Функція χ_B приймає значення χ_{B1} для $T < T_c$ і χ_{B2} для $T > T_c$. Легко бачити, що $\tau_{B1} = -0,003$ а $\tau_{B2} = 0,004$, тобто $\alpha_{B1} = 5,5$ і $\alpha_{B2} = 3,5$. З іншого боку, можемо знайти область температур $\tau < \tau_{M1}$ та $\tau > \tau_{M2}$, де застосовні розклади за малими значеннями параметра α при $T < T_c$ та $T > T_c$ відповідно. Так в області $T < T_c$ порівнюючи сприйнятливість χ_{M1} (5.33) із χ_T знаходимо τ_{M1} . На рис.4 приведено відношення χ_{M1} до χ_T як функції температури при $h' = 0,001$. Значення χ_{M1} та χ_T співпадають в області температур $\tau < \tau_{M1}$, де $\tau_{M1} = -0,02$. Це відповідає значенню $\alpha_{M1} = 0,3$. При $T > T_c$ χ_{M2} та χ_T є близькими в області $\tau > \tau_{M2}$ (рис.5), де $\tau_{M2} = 0,02$, а $\alpha_{M2} = 0,3$.

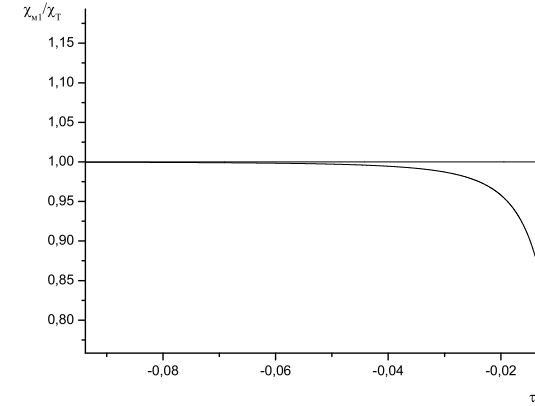


Рис. 4. Залежність χ_{M1}/χ_T від τ для $\alpha \ll 1$.

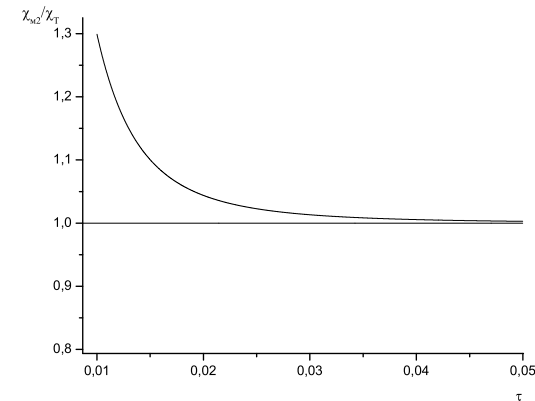


Рис. 5. Залежність χ_{M2}/χ_T від τ для $\alpha \ll 1$.

Таким чином, для кожного фіксованого значення поля h' теорія Ландау дозволяє розрахувати величини τ_{B1} , τ_{B2} , τ_{M1} , τ_{M2} , які визначають температурні діапазони, де має місце різна залежність параметра порядку та сприйнятливості від температури та зовнішнього поля.

Висновки

Наведені вище розрахунки середнього спінового моменту з використанням наближення типу теорії Ландау не дозволяють вийти за рамки опису фазового переходу із так званими класичними критичними показниками. Це і зрозуміло, оскільки перехід від (4.38) до (5.1) виконано із повним нехтуванням флуктуацій параметра порядку. Однак, навіть таке недосконале наближення дозволяє описати основні риси фазового переходу. Крім критичних показників (класичних) воно дає можливість знайти і критичні амплітуди. На відміну від гаусового наближення (розділ 3) воно не приводить до виникнення нефізичних розбіжностей.

Таким чином, для побудови мікроскопічної теорії фазового переходу в тривимірних системах в першу чергу важливо зберігати в показнику експоненти функції розподілу флуктуацій параметра порядку крім квадратичного вищі парні степені змінної η_k (принаймні четверту), а після цього приймати до уваги наявність самих флуктуацій. Перше забезпечує усунення нефізичних розбіжностей у виразах для статистичної суми та вільної енергії системи, а друге отримання реальних (а не класичних) значень критичних показників. Реалізація вказаного способу побудови теорії передбачає перехід від (4.38) до виразу (5.1) шляхом врахування вкладів до вільної енергії системи від змінних $\eta_{\vec{k}}$ із $k \neq 0$ з використанням негаусових розподілів флуктуацій параметра. При відсутності зовнішнього поля такий метод запропоновано в [5,6]. Узагальнення його на випадок наявності поля передбачає використання функціонального представлення статистичної суми (4.38), запропонованого вище.

Література

1. Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления. - М.: Мир, 1973. - 419 с.
2. Ма Ш. Современная теория критических явлений. М.: Мир, 1980. - 298 с.

3. Р. Бэкстер, Точно решаемые модели в статистической механике, М.: Мир, 1985.
4. Юхновський І.Р., Козловський М.П., Пиллюк І.В. Мікроскопічна теорія фазових переходів у тривимірних системах. - Львів: Євро-освіт, 2001. - 592 с.
5. Yukhnovskii I.R. Phase Transition of the Second Order. Collective Variables Method (World Scientific, Singapore, 1987).
6. Kozlovskii M.P. Condens. Matter Phys. 2005, v.8, N 3, p. 473.
7. Браут Р. Фазовые переходы.- Москва: Мир, 1967. - 288 с.
8. Kozlovskii M.P. Ferroelectrics, 2005, vol. 317, p.25-29.
9. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. 4.1, 1976, Москва, Наука, 584 с.
10. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. - Москва: Наука, 1974. - 831 с.