

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-96-16U

М.П. Козловський, З.Є. Усатенко

ДОСЛІДЖЕННЯ КРИТИЧНОЇ ПОВЕДІНКИ
n-КОМПОНЕНТНОЇ МОДЕЛІ МАГНЕТИКА.
РОЗРАХУНОК ВІЛЬНОЇ ЕНЕРГІЇ ПРИ
ТЕМПЕРАТУРАХ $T > T_c$

ЛЬВІВ

УДК: 532; 533; 533.9:530.182; 536.75; 536-12.01.
PACS: 05.60.+w, 05.70.Ln, 05.20.Dd, 52.25.Dg, 52.25.Fi

Дослідження критичної поведінки *n*-компонентної моделі магнетика. Розрахунок вільної енергії при температурах $T > T_c$

М.П.Козловський, З.Є.Усатенко

Анотація. В рамках ренормгрупового підходу, з використанням методу колективних змінних (КЗ) при обчисленні статистичної суми, проведено дослідження критичної поведінки *n*-компонентної 3D моделі магнетика для температур $T > T_c$. Розраховано температуру фазового переходу, значення критичних показників даної моделі. Проведено розрахунок вільної енергії і отримано явні аналітичні вирази для термодинамічних характеристик системи, як функцій температури, зовнішнього поля та компонентності параметра порядку. Досліджено залежність отриманих величин від мікрокопічних параметрів системи. Дослідження проведені в рамках моделі ρ^4 .

Investigation of the critical behaviour of *n*-component magnetic model. Calculation of the free energy at the temperatures $T > T_c$

M.P.Kozlovskii, Z.E.Usatenko

Abstract. Investigation of the critical behaviour of *n*-component 3D magnetic model in the vicinity of the phase transition at the temperatures $T > T_c$ is performed. Calculations were performed in the spirit of the renormalization group approach with using collective variables (CV) method. The phase transition temperature and the critical exponents values are calculated. Calculation of the free energy is performed and the explicit analytical expressions for thermodynamic functions of the system as the functions of the temperature, external field and order parameter components number are obtained. The dependence of the obtained values on the microscopic parameters of the system is investigated. Calculations were performed in the frames of the ρ^4 - model.

Подається до Українського фізичного журналу
Submitted to Ukrainian Journal of Physics

© Інститут фізики конденсованих систем 1996
Institute for Condensed Matter Physics 1996

1. Основні співвідношення.

Актуальною проблемою фізики критичних явищ є розвиток прямих методів дослідження тривимірних систем в околі точки фазового переходу. Незважаючи на значні успіхи досягнуті в даному напрямку при використанні числових методів розрахунку та методів, які використовують симетрійні властивості системи дотепер не існує теорії, яка дозволила б розрахувати на мікрокопічному рівні критичну поведінку тривимірних систем в повному об'ємі. Мова йде не лише про дослідження асимптичної поведінки теплоємності, параметра порядку системи чи іншої її фізичної характеристики в критичній області. Основне завдання теорії полягає в тому, щоб одержати явні аналітичні вирази для цих величин, як функцій температури, зовнішнього поля, компонентності параметра порядку, а також знайти їх залежність від мікрокопічних параметрів системи.

Дана робота є продовженням досліджень, розпочатих в [1] і присвячена розрахунку вільної енергії n -компонентного магнетика поблизу точки фазового переходу. В якості моделі використовується модель Стенлі [2-4], яка описується гамільтоніаном

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\mathbf{R}'} J(|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|) \mathbf{S}_{\mathbf{R}} \mathbf{S}_{\mathbf{R}'} \quad (1.1)$$

де $\mathbf{S}_{\mathbf{R}} = (S_{\mathbf{R}}^{(1)}, \dots, S_{\mathbf{R}}^{(n)})$ - n -мірний класичний спін, довжини m

$$\sum_{\alpha=1}^n (S_{\mathbf{R}}^{(\alpha)})^2 = m^2, \quad \text{локалізований в } N \text{ вузлах } d\text{-мірної}$$

кристалічної гратки з координатами \mathbf{R} . Взаємодія має обмінний характер і описується експонентно спадною функцією віддалі між частинками

$$J(|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|) = A_0 \exp\left(-\frac{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|}{b}\right) \quad (1.2)$$

де A_0 є константа, а b - радіус ефективної дії. Фур'є-образ потенціалу взаємодії (1.2) має вид

$$\tilde{\Phi}(\mathbf{k}) = \tilde{\Phi}(0)/(1 + b^2 \mathbf{k}^2)^2 \quad (1.3)$$

де $\tilde{\Phi}(0) = 8\pi A_0 \left(\frac{b}{c}\right)^3$. Скористаємося наступною апроксимацією для $\tilde{\Phi}(\mathbf{k})$

$$\tilde{\Phi}(\mathbf{k}) = \begin{cases} \tilde{\Phi}(0)(1 - 2b^2 \mathbf{k}^2)^2 & \mathbf{k} \leq B, \\ \overline{\Phi}, & B' < \mathbf{k} \leq B, \end{cases} \quad (1.4)$$

де координата B' визначається з умовою застосовності параболічної апроксимації для $\tilde{\Phi}(\mathbf{k})$ і рівна $B' = (b\sqrt{2})^{-1}$. Така апроксимація дозволяє правильно відтворити поведінку фур'є-образу потенціалу при малих значеннях \mathbf{k} та врахувати його вплив на поведінку системи при \mathbf{k} близьких до границі зони Бриллюена.

В представленні колективних змінних (КЗ)

$\rho_{\mathbf{k}} = (\rho_{\mathbf{k}}^{(1)}, \dots, \rho_{\mathbf{k}}^{(n)})$ статистична сума моделі (1.1) записується у виді [5]

$$Z = \int \exp\left[\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \leq B} \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}\right] J[\rho] (d\rho_{\mathbf{k}})^N, \quad (1.5)$$

де

$$(d\rho_{\mathbf{k}})^N = \prod_{a=1}^n d\rho_0^a \prod_{\mathbf{k} \neq 0} d\rho_{\mathbf{k}}^{a,c} d\rho_{\mathbf{k}}^{a,s} = (\sqrt{2})^{(1-N)n} \prod_{\mathbf{R}=1}^N d\rho(\mathbf{R}).$$

Якобіан переходу від спінових до КЗ має вигляд [4,5]

$$J[\rho] = \tilde{Z}_0 \prod_{\mathbf{k} \leq B} \int \exp(2\pi i \rho_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} + \bar{D}[\omega]) (d\omega_{\mathbf{k}}), \quad (1.6)$$

де

$$\prod_{\mathbf{k} \leq B} (d\omega_{\mathbf{k}}) = \prod_{a=1}^n d\omega_0^a \prod_{\mathbf{k} \neq 0} d\omega_{\mathbf{k}}^{a,c} d\omega_{\mathbf{k}}^{a,s} = (\sqrt{2})^{(N-1)n} \prod_{\mathbf{R}=1}^N d\omega(\mathbf{R}),$$

$$\tilde{Z}_0 = \left[\frac{(2\pi)^{n/2} m^{n-1}}{\Gamma(n/2)} \right]^N. \quad (1.7)$$

У випадку $n = 1$

$$J[\rho] = 2^N (\sqrt{2})^{(N-1)} \prod_{\mathbf{R}=1}^N \int \exp(2\pi i \omega(\mathbf{R})\rho(\mathbf{R})) ch(2\pi i \omega(\mathbf{R})m) d\omega(\mathbf{R}),$$

що цілком аналогічно до результатів, отриманих в [5]. Для величин $\bar{D}[\omega]$ маємо

$$\bar{D}[\omega] = \sum_{l \geq 1} \frac{(2\pi i)^{2l}}{(2l)!} \frac{u_{2l}}{N^{l-1}} \omega_{\mathbf{k}_1} \dots \omega_{\mathbf{k}_{2l}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2l}}, \quad (1.8)$$

причому коефіцієнти u_{2l} виражаються наступним чином [4]

$$u_2 = m^2/s, u_4 = -\frac{6m^4}{n^2(n+2)}, u_6 = 15m^6 \left[\frac{1}{n(n+2)(n+4)} - \frac{3}{n^2(n+2)} + \frac{2}{n^3} \right]. \quad (1.9)$$

В роботі [1] було запропоновано спосіб обчислення виразу (1.6). Основна ідея такого розрахунку полягає в поетапному виключенні з розгляду короткохвильових змінних $\rho_{\mathbf{k}}$, які описують поведінку ефективних спінових блоків малих розмірів (в порівнянні з кореляційною довжиною системи, як функцією температури). Після кожного з етапів такого виключення розміри ефективних спінових блоків збільшуються в s разів ($s \geq 1$).

Множина колективних змінних $\rho_{\mathbf{k}}$ розбивається на підмножини. Кожна з підмножин містить змінні $\rho_{\mathbf{k}}$ з певними значеннями хвильових векторів \mathbf{k} . Для l -ої підмножини $k \in (B_{l+1}, B_l)$, де

$B_{l+1} = B_l/s$, причому $B_0 = B'$ (див.(1.4)). В кожному з шарів фазового простору КЗ величина $\tilde{\Phi}(\mathbf{k})$ замінюється відповідним середнім значенням [4-5]. Обмежившись при розгляді моделлю ρ^4 її здійснивши інтегрування в l послідовно розміщених шарах, для статистичної суми отримаємо [1]

$$Z = \tilde{Z}_0 C'_l Q_0 Q_1 \dots Q_l \int (d\rho_{\mathbf{k}})^{N_{l+1}} \omega_{l+1}(\rho_{\mathbf{k}}), \quad (1.10)$$

де

$$\omega_{l+1}(\rho_{\mathbf{k}}) = \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{0 \leq k \leq B_{l+1}} d_2^{(n,l+1)}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{a_4^{(n,l+1)}}{4! N_{l+1}} \sum_{k_1 \dots k_4 \leq B_{l+1}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4}^{(B_{l+1})} \right] \quad (1.11)$$

-густина міри $(l+1)$ -ої ефективної блочної структури,

$$C'_l = (\sqrt{2})^{(N_l-1)n}, \quad N_l = N' s^{-d l}, \quad N' = N s_0^{-d}, \quad s_0 = B/B',$$

$$Q_0 = [Q(u)Q(d_0)]^{N'}, \quad (1.12)$$

$$Q_l = [Q(d_l)Q(P_{l-1})]^{N_l}, \quad l = 1, 2, \dots$$

Величини, що входять у вирази для парціальних статистичних сум, записуються у вигляді

$$Q(d_l) = (2\pi)^{n/2} \left(\frac{3}{a_4^{(n,l)}} \right)^{n/4} U\left(\frac{n-1}{2}, x_l\right) \exp\left(\frac{x_l^2}{4}\right),$$

$$Q(P_{l-1}) = (2\pi)^{-n/2} \left(s^d \frac{(n+2)}{3} \frac{a_4^{(n,l-1)}}{\Phi_n(x_{l-1})} \right)^{n/4} U\left(\frac{n-1}{2}, y_{l-1}\right) \exp\left(\frac{(y_{l-1})^2}{4}\right), \quad (1.13)$$

$$Q(u) = e^{u'_0} \left(\frac{3}{(2\pi)^2 u'_4} \right)^{n/4} \exp\left(\frac{3(u'_2)^2}{4u'_4}\right) U\left(\frac{n-1}{2}, z'\right),$$

$$\text{де } z' = u'_2 \sqrt{\frac{3}{u'_4}}.$$

Функції $U_n(t), \Phi_n(t)$ є комбінаціями функцій параболічного циліндра Вебера

$$U_n(t) = \frac{U\left(\frac{n+1}{2}, t\right)}{U\left(\frac{n-1}{2}, t\right)}, \quad \varphi_n(t) = (n+2)U_n^2(t) + 2tU_n(t) - 2. \quad (1.14)$$

Їхніми аргументами виступають змінні

$$x_l = \sqrt{\frac{3}{d_4^{(n,l)}}} d_2^{(n,l)}(B_{l+1}, B_l), \quad y_l = s^{d/2} U_n(x_l) \left(\frac{n+2}{\varphi_n(x_l)} \right)^{1/2}, \quad (1.15)$$

де $d_2^{(n,l)}(B_{l+1}, B_l)$ - відповідне середнє значення коефіцієнта $d_2^{(n,l+1)}(\mathbf{k})$ в інтервалі (B_{l+1}, B_l) . Для величин $d_2^{(n,l+1)}(\mathbf{k})$ маємо

$$d_2^{(n,l+1)}(\mathbf{k}) = a_2^{(n,l+1)} - \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}). \quad (1.16)$$

Слід зауважити, що для величин $a_2^{(n,l+1)}$ і $a_4^{(n,l+1)}$ справедливі наступні рекурентні спiввiдношення (РС)

$$\begin{aligned} a_2^{(n,l+1)} &= a_2^{(n,l)} + d_2^{(n,l+1)}(B_{l+1}, B_l) M_n(x_l), \\ a_4^{(n,l+1)} &= a_4^{(n,l)} s^{-d} E_n(x_l) \end{aligned} \quad (1.17)$$

де

$$E_n(x_l) = s^{2d} \frac{\varphi_n(y_l)}{\varphi_n(x_l)},$$

$$M_n(x_l) = N_n(x_l) - 1, \quad N_n(x_l) = \frac{y_l U_n(y_l)}{x_l U_n(x_l)}.$$

Коефіцієнти $a_2^{(n,l)}$, $a_4^{(n,l)}$ є функціями мікрокопічних параметрів моделі, зокрема вони залежать від відношення радіуса ефективної дії b до постійної гратки c , а також від величини фур'є-образу потенціалу в області великих $\mathbf{k} \in \Delta (\Delta \equiv (B', B])$.

Для початкових значень цих коефіцієнтів при $l = 0$ маємо

$$a_2^{(n,0)} = \frac{1}{m^2} s_0^d \left(\frac{1}{1 - \frac{20m^2}{(n+4)} \sum_{k \in \Delta} \frac{\beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})}{N}} \right)^{1/2} U_0, \quad (1.18)$$

$$a_4^{(n,0)} = -\frac{3n^2}{m^4} s_0^d \left(\frac{1}{1 - \frac{20m^2}{(n+4)} \sum_{k \in B} \frac{\beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})}{N}} \right) (1 - z' U_n(z') - U_0^2),$$

$$\text{де } U_0 = \sqrt{\frac{n+2}{2}} U_n(z').$$

Кумулянти u_{2l}' , які входять у вираз для $Q(u)$ (див.(1.13)) є перенормованими за рахунок врахування фур'є-образу $\tilde{\Phi}(\mathbf{k})$ при великих значеннях \mathbf{k}

$$\begin{aligned} u_0' &= \frac{u_2 n}{2} s_0^d \sum_{k \in \Delta} \frac{\beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})}{N}, \\ u_2' &= u_2 - \frac{|u_4| n}{2} \sum_{k \in \Delta} \frac{\beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})}{N}, \\ u_4' &= \left(|u_4| - \frac{u_6 n}{2} \sum_{k \in \Delta} \frac{\beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})}{N} \right) s_0^{-d}. \end{aligned} \quad (1.19)$$

Детальний аналіз РС (1.17) був виконаний нами в [1]. Виявляється, що їх дослідження зручно проводити в термінах величин $r_l^{(n)}$ та $u_l^{(n)}$, які є перенормованими значеннями коефіцієнтів $d_2^{(n,l)}(B_{l+1}, B_l)$ та $a_4^{(n,l)}$, а саме

$$\begin{aligned} r_l^{(n)} + q &= s^{2l} d_2^{(n,l)}(B_{l+1}, B_l), \\ u_l^{(n)} &= s^{4l} a_4^{(n,l)}. \end{aligned} \quad (1.20)$$

РС (1.17) в якості часткового розвязку мають фіксовану точку

$$\begin{aligned} r_{l+1}^{(n)} &= r_l^{(n)} = r_n^*, \\ u_{l+1}^{(n)} &= u_l^{(n)} = u_n^*, \end{aligned} \quad (1.21)$$

координати якої представляються у виді

$$\begin{aligned} r_n^* &= -f_n \beta \tilde{\Phi}(0), \\ u_n^* &= \Phi_n [\beta \tilde{\Phi}(0)]^2, \end{aligned} \quad (1.22)$$

де постійні f_n та Φ_n залежать лише від розмірності параметра порядку n та універсальної величини x_n^* , яка є розв'язком рівняння

$$s^{4+d} \Phi_n \left(s^{\frac{d}{2}} U_n \left(x^* \right) \left(\frac{n+2}{\Phi_n(x^*)} \right)^{\frac{1}{2}} \right) = \Phi_n(x^*) \quad (1.23)$$

Для f_n та Φ_n були отримані вирази

$$\begin{aligned} f_n &= \bar{q} \frac{s^2 [N_n(x^*) - 1]}{s^2 N_n(x^*) - 1}, \\ \Phi_n &= \frac{3}{(x^*)^2} \bar{q}^2 \left(\frac{1 - s^{-2}}{N_n(x^*) - s^{-2}} \right)^2, \end{aligned} \quad (1.24)$$

де \bar{q} - відповідає середньому значенню \mathbf{k}^2 на інтервалі $(\frac{1}{s}, 1]$

$$\bar{q} = \frac{d}{d+2} \frac{(1 - s^{-(d+2)})}{(1 - s^{-d})}.$$

Залежність f_n, Φ_n від n була досліджена в роботі [1]. Основний результат роботи [1], який ми надалі будемо використовувати при розрахунку вільної енергії системи, є розв'язки РС (1.17) в околі фіксованої точки. Вони записуються у виді

$$\begin{aligned} r_l^{(n)} &= r_n^* + c_1 E_1^l + c_2 R E_2^l, \\ u_l^{(n)} &= u_n^* + c_1 R_1 E_1^l + c_2 E_2^l, \end{aligned} \quad (1.25)$$

де E_1, E_2 - власні значення матриці \mathfrak{R} лінійного перетворення ренормгрупи (РГ)

$$\begin{pmatrix} r_{l+1}^{(n)} - r_n^* \\ u_{l+1}^{(n)} - u_n^* \end{pmatrix} = \mathfrak{R} \begin{pmatrix} r_l^{(n)} - r_n^* \\ u_l^{(n)} - u_n^* \end{pmatrix}, \quad (1.26)$$

які були обчислені нами в [1]. Коефіцієнти c_1, c_2 знаходяться з початкових умов при $l = 0$ і записуються у виді

$$\begin{aligned} c_1 &= \left(r_0^{(n)} - r_n^* - (a_4^{(n,0)} - u_n^*) R \right) D^{-1}, \\ c_2 &= \left(a_4^{(n,0)} - u_n^* - (r_0^{(n)} - r_n^*) R_1 \right) D^{-1}, \end{aligned} \quad (1.27)$$

де

$$R_1 = \frac{R_{21}}{E_1 - R_{22}}, \quad R = \frac{R_{12}}{E_2 - R_{11}}, \quad D = \frac{E_1 - E_2}{R_{11} - E_2}. \quad (1.28)$$

Слід зауважити, що R_{ij} , де $i, j = 1, 2$ - це матричні елементи матриці \mathfrak{R} лінійного перетворення ренормгрупи (РГ), які були обчислені нами в [1].

2. Дослідження області застосування розв'язків РС та означення температури фазового переходу.

Частковим розв'язком загальних РС (1.17) є фіксована точка типу сідла (1.21). Однак такий розв'язок реалізується не для всіх температур. Аналіз наближених розв'язків РС (1.25) показує, що реалізація рівностей

$$\lim_{l \rightarrow \infty} r_l^{(n)} = r_n^*, \quad \lim_{l \rightarrow \infty} u_l^{(n)} = u_n^* \quad (2.1)$$

забезпечується двома умовами. Перша з них полягає в зменшенні з ростом l доданків, пропорційних до $c_2 E_2^l$. Вона виконується автоматично, оскільки $E_2 < 1$. Друга умова повинна приводити до зменшення з ростом l (та прямуванням їх до нуля при $l \rightarrow \infty$) доданків типу $c_1 E_1^l$. Така поведінка, взагалі кажучи, не реалізується, оскільки $E_1 > 0$. Однак, існує така температура T_c , при якій виконується рівність

$$c_1(T_c) = 0. \quad (2.2)$$

Для $T = T_c$ рівності (2.1) мають місце, а знайдена з умови (2.2) температура називається температурою фазового переходу. Приймаючи до уваги (1.27) можна записати рівняння для T_c у явному виді

$$[\beta_c \tilde{\Phi}(0)]^2 \left(1 - f_n - \varphi_n^{1/2} R^* \right) - a_2^{(n,0)} \beta_c \tilde{\Phi}(0) = -a_4^{(n,0)} R^* \varphi_n^{-1/2}, \quad (2.3)$$

де

$$R^* = R \sqrt{u_n^*}, \quad \beta c = \frac{1}{k T_c}.$$

Коефіцієнти $a_2^{(n,l)}, a_4^{(n,l)}$ (див.(1.18)) є функціями радіуса дії вихідного потенціалу (1.4). Отримання конкретних чисельних результатів пов'язане з вибором величини $\bar{\Phi}$, тобто значення $\tilde{\Phi}(\mathbf{k})$ при $\mathbf{k} \in \Delta (\Delta = (B', B])$. Виберемо в якості $\bar{\Phi}$

$$\bar{\Phi} = \langle \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rangle + \Phi_\infty. \quad (2.4)$$

Це дає можливість суму $\sum_{\mathbf{k} \in \Delta} \frac{\beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})}{N}$ в (1.18) представити у виді

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k} \in \Delta} \frac{\beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})}{N} &= \frac{\beta}{N} \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{B'}^B d\mathbf{k} \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) = \\ &= \frac{\pi}{6} \left(\langle \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rangle + \Phi_\infty \right) \left(1 - s_0^{-d} \right) \beta_c \tilde{\Phi}(0) \end{aligned}, \quad (2.5)$$

де $\langle \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rangle$ (в одиницях $\tilde{\Phi}(0)$) можна представити у виді

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rangle &= \frac{\int_{B'}^B \tilde{\Phi}(k) k^2 dk}{\int_{B'}^B k^2 dk} = \\ &= \frac{3}{\left(\frac{\pi}{x} \right)^3 - \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^3} \left[-\frac{0.5}{\left(\frac{x}{\pi} + \frac{\pi}{x} \right)} + \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \left(\frac{\pi}{x} \right) + \frac{1}{3\sqrt{2}} - \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \frac{1}{\sqrt{2}} \right] \end{aligned} \quad (2.6)$$

де $x = \frac{c}{b}$, а величина Φ_∞ визначається з тієї умови, що в границі $\frac{b}{c} \rightarrow \infty$ наші результати повинні виходити на результати теорії середнього поля, тобто

$$\beta_c \tilde{\Phi}(0) = \frac{n}{m^2}.$$

Приймаючи до уваги цю рівність і рівняння для T_c (2.3), отримуємо рівняння для визначення Φ_∞ , розв'язок якого можна записати у виді

$$\Phi_\infty = - \frac{(n+2) \left(f_n + \varphi_n^{1/2} R^* \right)}{3n \left(1 - s_0^{-d} \right)}. \quad (2.7)$$

Результати розрахунків для випадку $m^2 = n$ представлені на рис.1, де наведена залежність температури фазового переходу від відношення радіуса дії потенціалу b до постійної гратки c при різних значеннях компонентності параметра порядку n . Як видно з наведених графіків, значення температури фазового переходу, розраховане в одиницях $\beta_c \tilde{\Phi}(0)$, при зростанні компонентності параметра порядку n зростає. При зростанні радіуса ефективної дії b значення температури фазового переходу зменшується і виходить на результати теорії середнього поля. В таб.1 представлено залежність температури фазового переходу від компонентності параметра порядку n для випадку взаємодії типу найближчих сусідів при $\bar{\Phi} = 0$ (стовбець 2) і при $\bar{\Phi} \neq 0$ (стовбець 3). Також в цій таблиці наведено для порівняння результати обчислень, отриманих іншими методами, зокрема, g – розкладу (стовбець 4), $1/s$ – розкладу (стовбець 5), високотемпературними розкладами (стовбець 6) і результати МСС (стовбець 7).

Для температур близьких до T_c коефіцієнти c_1 та c_2 можна представити у виді

$$\begin{aligned} c_1(T) &= c_{1T} \tau \beta \tilde{\Phi}(0), \\ c_2(T) &= c_{2T} [\beta \tilde{\Phi}(0)]^2. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Оскільки $c_1(T) \sim \tau$, то для величини c_{1T} можна обмежитись наступним наближенням

$$c_{1T} = c_{1k} + c_{1k1}\tau + O(\tau^2), \quad (2.9)$$

де

$$c_{1k} = \left[c_{11} + \frac{c_{12}}{[\beta_c \tilde{\Phi}(0)]^2} \right] D^{-1}, \quad (2.10)$$

$$c_{1k1} = \frac{c_{12}}{[\beta_c \tilde{\Phi}(0)]^2} D^{-1},$$

причому

$$\begin{aligned} c_{11} &= 1 - f_n - R^* \varphi_n^{1/2}, \\ c_{12} &= -a_4^{(n,0)} R^* \varphi_n^{-1/2}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Згідно до (2.8) для c_{2T} до уваги прийматимуться доданки пропорційні до τ^2

$$c_{2T} = c_{2k} + \tau c_{2k1} + \tau^2 c_{2k2} + O(\tau^3), \quad (2.12)$$

де введені наступні позначення

$$c_{2k} = \left[c_{23} + \frac{c_{22}}{\beta_c \tilde{\Phi}(0)} + \frac{c_{21}}{[\beta_c \tilde{\Phi}(0)]^2} \right] D^{-1},$$

$$c_{2k1} = \left[\frac{c_{22}}{\beta_c \tilde{\Phi}(0)} + \frac{2c_{21}}{[\beta_c \tilde{\Phi}(0)]^2} \right] D^{-1}, \quad (2.13)$$

$$c_{2k2} = \frac{c_{21}}{[\beta_c \tilde{\Phi}(0)]^2} D^{-1},$$

причому

$$c_{21} = a_4^{(n,0)}, \quad c_{22} = -a_2^{(n,0)} R_1^* \varphi_n^{1/2}, \quad c_{23} = R_1^* \varphi_n^{1/2} (1 - f_n) - \varphi_n,$$

$$R_1^* = R_1 \left(u_n^* \right)^{-1/2} \quad \text{и} \quad R^* = R \left(u_n^* \right)^{1/2}.$$

Розрахунок вільної енергії системи здійснюється згідно до формули

$$F = -kT \ln Z,$$

де в якості статистичної суми Z будемо використовувати (1.10). Розрахунок парціальних статистичних сум (1.12), (1.13), що входять в (1.10), пов'язаний з використанням загальних РС (1.17). Поблизу фіксованої точки (1.21) їх можна замінити наближеними співвідношеннями (1.25) (які є точними при $T = T_c$). Дослідимо при яких умовах співвідношення (1.25) можуть бути використані замість загальних РС (1.17). Очевидно, що умовою застосовності (1.25) є система нерівностей

$$\begin{aligned} |r_l^{(n)} - r_n^*| &\leq |r_n^*|, \\ |u_l^{(n)} - u_n^*| &\leq u_n^*. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Величини, що входять в (2.14), пов'язані з значенням компонентності параметра порядку n та величиною номера ітерації l . Головною причиною відхилення величин $r_l^{(n)}$ та $u_l^{(n)}$ від їх фіксованих значень є наявність доданків пропорційних до $c_1 E_1^l$ у розв'язках (1.25). Для малих значень l вклад від них є малим в порівнянні з r_n^* та u_n^* , оскільки $c_1 \sim \tau$. Однак, при $T \neq T_c$ завжди знайдеться таке значення $l = m_\tau$, що вклад $c_1 E_1^{m_\tau}$ стане порядку r_n^* чи u_n^* . При $l > m_\tau$ відхилення стають значними і рівняння (1.25) вже не можуть використовуватись для опису загальних РС (1.17).

Для оцінки величини m_τ можна скористатись першим з рівнянь (1.25). Це пов'язано з наявністю біля доданку $c_1 E_1$ множника R_1 в другому рівнянні (1.25). Виходячи з того, що R_1 є малою величиною, як це було показано в [6,7], ми бачимо, що відхилення $r_l^{(n)}$ від r_n^* буде відбуватись швидче ніж відхід

$u_l^{(n)}$ від u_n^* . А звідси слідує, що величина m_τ може бути визначена з рівняння

$$r_{m_\tau+1} - r_n^* = -\delta r_n^*, \quad (2.15)$$

де δ -деяка постійна величина ($\delta \leq 1$). Подібна до (2.15) умова використовувалась в роботах [6,7]. При цьому область значень індексів $l \in (0, m_\tau)$ вважалась областю критичного режиму (КР), а область значень $l > m_\tau$ відповідала граничному гаусовому режиму (ГГР) при $T > T_c$, та інверсному гаусовому режиму (ІГР) при $T < T_c$. Скористаємося надалі введеними означеннями.

3. Вільна енергія системи при $T > T_c$

На основі вищесказаного вільна енергія системи при температурах $T > T_c$ може бути записана у виді

$$F = F_0 + F_{\text{КР}} + F_{\text{ГГР}}, \quad (3.1)$$

де F_0 – вільна енергія невзаємодіючих спінів

$$F_0 = -kTN \ln \left[\frac{(2\pi)^{\sqrt{n}/2} m^{n-1}}{\Gamma(\sqrt{n}/2)} \right]. \quad (3.2)$$

Величина $F_{\text{КР}}$ відповідає вкладу у вільну енергію від короткохвильових, а $F_{\text{ГГР}}$ – від довгохвильових флюктуацій

$$F_{\text{КР}} = -kT \sum_{l=0}^{m_\tau} \ln Q_l, \quad (3.3)$$

$$F_{\text{ГГР}} = -kT \sum_{l=m_\tau+1}^{\infty} \ln Q_l,$$

де Q_l – парціальна статистична сума l -ого фазового шару m_τ визначає величину хвильового вектора $B_{m_\tau} = B' s^{-m_\tau}$, який

розділяє область хвильових векторів $[0, B']$ на область короткохвильових флюктуацій $[B_{m_\tau}, B']$, які описуються негаусовою густинною міри і область довгохвильових флюктуацій $[0, B_{m_\tau}]$, для яких стає базовою гаусова густина міри. Згідно до (2.15), рівняння для визначення m_τ матиме вигляд

$$\tau c_{1T} E_1^{m_\tau+1} = f_n \left(\delta - c_{2T} \Phi_0 E_2^{m_\tau+1} \right), \quad (3.4)$$

де

$$\Phi_0 = R^* f_n^{-1} \Phi_n^{-1/2}.$$

Оскільки $\tau \ll 1$, то m_τ повинно бути великим числом. Отже, доданок пропорційний $E_2^{m_\tau+1} (E_2 < 1)$ буде малим і на основі цього, в першому наближенні по $(E_2/E_1)^{m_\tau}$ для m_τ матимемо

$$m_\tau = -\frac{\ln \tau}{\ln E_1} + m_0 - 1, \quad (3.5)$$

де

$$m_0 = m_c + m_1 \tau, \quad m_c = \frac{\ln(f_n \delta / c_{1k})}{\ln E_1}, \quad m_1 = -\frac{c_{1k}}{c_{1k} \ln E_1}. \quad (3.6)$$

Значення m_c і m_1 при різних відношеннях b/c і різних n приведені в таб.2. Наявність в правій частині (3.5) множника $\ln \tau$ свідчить про зростання m_τ при наближенні температури до T_c . Для величин r_l й u_l в точці виходу з КР ($l = m_\tau$) знаходимо

$$r_{m_\tau} = r_n^* \left(1 - \delta E_1^{-1} \right), \\ u_{m_\tau} = u_n^* \left(1 + \delta R_1^* f_n \Phi_n^{-1/2} E_1^{-1} \right) \quad (3.7)$$

Відповідно вирази для основної і проміжної змінної в точці виходу з КР записуються в наступному виді

$$x_{m_\tau} = \frac{x^* + \delta \sqrt{3} f_n \Phi_n^{-\frac{1}{2}} E_1^{-1}}{\sqrt{1 + \delta f_n \Phi_n^{-\frac{1}{2}} R_1^* E_1^{-1}}}, \quad \delta \neq 1 \quad (3.8)$$

$$y_{m_\tau} = s^{\frac{d}{2}} U_n \left(x_{m_\tau} \left(\frac{n+2}{\Phi_n(x_{m_\tau})} \right) \right)^{\frac{1}{2}}$$

Вклад у вільну енергію системи від області КР можна представити у виді

$$F_{\text{КР}} = -kTN'f_0^{\text{KP}} - kT \sum_{l=1}^{m_\tau} N_l f_l, \quad (3.9)$$

де

$$\begin{aligned} N_l &= N' s^{-dl}, \\ f_0^{\text{KP}} &= \ln [Q(u)Q(d_0)], \quad f_l = \ln [Q(d_l)Q(P_{l-1})] \\ f_l &= \frac{n}{4} \ln \left[\frac{n+2}{\Phi_n(y_{l-1})} \right] + \ln U\left(\frac{n-1}{2}, x_l\right) + \ln U\left(\frac{n-1}{2}, y_{l-1}\right) + \frac{(x_l)^2}{4} + \frac{(y_l)^2}{4} \end{aligned} \quad (3.10)$$

Скориставшись тим, що $y_{l-1} \gg 1$ є представивши функції параболічного циліндра $U(a, x)$ у вигляді рядів по його обернених степенях

$$U\left(\frac{n-1}{2}, t\right) = e^{-t^2/4} t^{-n/2} \left(1 - \frac{\frac{n}{2}(\frac{n}{2}+1)}{2t^2} + \frac{\frac{n}{2}(\frac{n}{2}+1)(\frac{n}{2}+2)(\frac{n}{2}+3)}{8t^4} - \dots \right) \quad (3.11)$$

для функцій $U_n(y_{l-1})$ і $\Phi_n(y_{l-1})$ матимемо

$$\begin{aligned} U_n(t) &= t^{-1} \left(1 - \left(\frac{n}{2} + 1 \right) t^{-2} + \left(\frac{n}{2} + 1 \right) (n+3) t^{-4} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{t^{-6}}{2} \left(\frac{n}{2} + 1 \right) \left(\frac{5n^2}{2} + 17n + 30 \right) + \frac{t^{-8}}{4} \left(\frac{n}{2} + 1 \right) \left(7n^3 + 79n^2 + 310n + 420 \right) \right), \end{aligned} \quad (3.12)$$

$$\Phi_n(t) = (n+2)t^{-4} \left(1 - t^{-2} \left(\frac{5n+16}{2} \right) + t^{-4} \left(\frac{21n^2}{4} + \frac{150n}{4} + 69 \right) \right) \quad (3.13)$$

Це в свою чергу дозволяє представити f_l у наступному виді

$$f_l = \ln U\left(\frac{n-1}{2}, x_l\right) + \frac{x_l^2}{4} + \frac{n}{2} \ln y_{l-1} + \left(\frac{(5n+16)n}{8} - \frac{\frac{n}{2}(\frac{n}{2}+1)}{2} \right) y_{l-1}^{-2} \quad (3.14)$$

А для f_0^{KP} згідно (3.10) і (1.13) матимемо

$$\begin{aligned} f_0^{\text{KP}} &= \frac{n}{4} \ln \left(\frac{3}{u_4'} \right) + u_0' + \frac{3}{4} \frac{(u_2')^2}{u_4'} + \ln U\left(\frac{n-1}{2}, z'\right) + \frac{n}{4} \ln \left(\frac{3}{a_4^{(n,0)}} \right) + \\ &\quad + \frac{x_0^2}{4} + \ln U\left(\frac{n-1}{2}, x_0\right). \end{aligned} \quad (3.15)$$

Виділяючи в f_l явну залежність від номера фазового шару l ми можемо представити вільну енергію l -ого фазового шару у виді

$$\begin{aligned} F_l &= -kTN_l \left(f_{\text{KP}}^* + c_{2T} d_2 E_2^l + c_{2T}^2 d_4 E_2^{2l} + \right. \\ &\quad \left. + \tau [c_{1T} d_1 E_1^l + c_{1T} c_{2T} d_5 E_1^l E_2^l + c_{1T} c_{2T}^2 d_7 E_1^l E_2^{2l}] + \right. \\ &\quad \left. + \tau^2 [c_{1T}^2 d_3 E_1^{2l} + c_{1T}^2 c_{2T} d_6 E_1^{2l} E_2^l + c_{1T}^2 c_{2T}^2 d_8 E_1^{2l} E_2^{2l}] \right) \end{aligned} \quad (3.16)$$

Слід зауважити, що у виразі (3.16) ми обмежились членами пропорційними $\tau^2 c_{1T}^2 E_1^{2l}$ і $c_{2T}^2 E_2^{2l}$ включно. Члени вищих порядків, типу τ^3 і E_2^{3l} у розгляд не приймались. Коефіцієнти d_j представлені в додатку 1. Для f_{KP}^* , яке входить у вираз для вільної енергії (3.16) маємо

$$f_{\text{KP}}^* = \frac{n}{2} \ln y^* + \tilde{\alpha} (y^*)^{-2} + \frac{(x^*)^2}{4} + \ln U\left(\frac{n-1}{2}, x^*\right) \quad (3.17)$$

Ця частина вільної енергії не залежить від номера l фазового шару на відміну від частини виразу (3.16) яка містить залежність від l і залежить від мікроскопічних параметрів гамільтоніану системи. Розрахунок вільної енергії критичного режиму (3.9) пов'язаний з сумуванням виразу (3.16) по шарах фазового простору колективних змінних до m_τ — точки виходу системи з КР для якої справедливі рівності (2.15), (3.5). Здійснивши дане сумування по m_τ є виділивши явну залежність від температури, вільну енергію КР можемо записати у виді

$$F_{\text{KP}} = -kTN' \left[\gamma'_{01} + \gamma_1 \tau + \gamma_2 \tau^2 - \gamma_{10} \tau^{dv} \right], \quad (3.18)$$

причому, коефіцієнти, що входять в (3.18) задаються співвідношеннями

$$\begin{aligned} \gamma'_{01} &= \gamma_{01} + \bar{a}_0, \\ \gamma_1 &= \gamma_{02} + \bar{a}_1, \\ \gamma_2 &= \gamma_{03} + \bar{a}_2, \end{aligned} \quad (3.19)$$

$$\gamma_{10} = \gamma' s^{-dm_0}$$

Вирази для коефіцієнтів γ_{01} приведені в додатку 2, а для коефіцієнтів \bar{a}_i маємо

$$\begin{aligned} \bar{a}_0 &= a'_0 + \frac{n}{4} \ln \left(\frac{3}{a_4^{(n,0)}} \right) + \frac{x_{oc}^2}{4} + \ln U \left(\frac{n-1}{2}, x_{oc} \right), \\ \bar{a}_1 &= -\frac{n}{2} T_c U_n(x_{oc}) \left(\frac{dx_0}{dT} \right)_{T=T_c}, \\ \bar{a}_2 &= -\frac{n}{4} T_c^2 \left(U_n(x_{oc}) \left(\frac{d^2 x_0}{dT^2} \right) + \left(\frac{dU_n(x_0)}{dx_0} \left(\frac{dx_0}{dT} \right)^2 \right) \right)_{T=T_c}, \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$a'_0 = \frac{n}{4} \ln \left(\frac{3}{u'_4} \right) + u'_0 + \frac{3}{4} \frac{(u'_2)^2}{u'_4} + \ln U \left(\frac{n-1}{2}, z' \right)$$

Величина x_{oc} відповідає значенню x_0 при $T = T_c$ й відповідно рівна

$$\begin{aligned} x_{oc} &= \sqrt{3} d_{2c} (a_{4c})^{-\frac{1}{2}}, \\ d_{2c} &= \bar{q} - f_n + c_{2k} R^* \Phi_n^{-\frac{1}{2}}, \\ a_{4c} &= \Phi_n + c_{2k}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Похідні x_0 по температурі, що входять у вирази (3.20) записуються у виді

$$\left(\frac{dx_0}{dT} \right)_{T=T_c} = \frac{\sqrt{3}}{T_c} \left((a_{4c})^{-\frac{1}{2}} t_1 - \frac{1}{2} (a_{4c})^{-\frac{3}{2}} d_{2c} t_2 \right), \quad (3.22)$$

причому

$$t_1 = c_{1k} + c_{2k1} R^* \Phi_n^{-\frac{1}{2}},$$

$$t_2 = \Phi_n^{\frac{1}{2}} R_1^* c_{1k} + c_{2k1},$$

а також,

$$\left(\frac{d^2 x_0}{dT^2} \right)_{T=T_c} = \frac{\sqrt{3}}{T_c^2} \left(\frac{t_3}{a_{4c}^{\frac{1}{2}}} + \frac{3}{4} \frac{d_{2c} t_2^2}{a_{4c}^{\frac{5}{2}}} - \frac{t_1 t_2}{a_{4c}^{\frac{3}{2}}} - \frac{d_{2c} t_4}{2 a_{4c}^{\frac{3}{2}}} \right) \quad (3.23)$$

де

$$t_3 = 2 \left(c_{1k1} + c_{2k2} R^* \Phi_n^{-\frac{1}{2}} \right),$$

$$t_4 = 2 \left(c_{2k2} + c_{1k1} R_1^* \Phi_n^{\frac{1}{2}} \right).$$

Слід зауважити, що коефіцієнти $\gamma'_{01}, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_{10}$, що входять у вираз для вільної енергії КР (3.18) не залежать від температури і є постійними. Аналітична частина вільної енергії КР пов'язана з коефіцієнтами $\gamma'_{01}, \gamma_1, \gamma_2$. Неаналітична частина, яка несе головну інформацію про температурну залежність теплоємності в околі точки фазового переходу пов'язана з членом $\gamma_{10} \tau^{dv}$. Залежність цих коефіцієнтів від мікроскопічних параметрів гамільтоніану і від компонентності параметра порядку n приведена в табл.3.

4. Розрахунок вільної енергії областей довгохвильових флюктуацій густини спінового моменту

Подальші розрахунки вільної енергії системи пов'язані з врахуванням флюктуаційного процесу, що відповідає довгохвильовим флюктуаціям густини спінового моменту і характеризується граничним гаусовим режимом (ГГР) [5,6]. Характерною особливістю ГГР є ріст основної x_l і проміжної y_l

змінних як функції l . В зв'язку з цим вільна енергія ГГР може бути розрахована в наближенні гаусової густини міри, оскільки в цій області доданок пропорційний четвертій степені в показнику експоненти функції розподілу стає набагато меншим квадратичного доданку. Але, оскільки зростання x_l відбувається поступово, то існує перехідна область, в якій все ще необхідно зберігати в функції розподілу четверту степінь змінних ρ_k й ω_k .

4.1. Перехідна область

Величина перехідної області визначається певним числом шарів фазового простору КЗ m'' , які слідують за точкою виходу системи з КР, тобто за точкою m_τ . Кількість шарів m'' може бути отримана з умови

$$\left| x_{m_\tau+m_0} \right|'' = \frac{\alpha_m}{1-s^{-d}}, \quad (4.1)$$

де α_m є велике число ($\alpha \geq 10$). В ряді робіт [8,9] було показано, що еволюція коефіцієнтів ефективних базисних густин мір в ПО може з великою степінню точності описуватися рівняннями РГ (2.2), тому згідно (3.8) для основної змінної в ПО матимемо

$$x_{m_\tau+m_0}'' = \frac{\sqrt{3} \left(f_n \left(\delta E_1^{m_0''-1} - 1 \right) + \bar{q} \right)}{\left(\Phi_n + R_1^* \Phi_n^{1/2} f_n \delta E_1^{m_0''-1} \right)^{1/2}}, \quad (4.2)$$

що в свою чергу з врахуванням (4.1) дає рівняння для m_0''

$$m_0'' = \frac{\ln E_0}{\ln E_1} + 1, \quad (4.3)$$

де введені позначення

$$E_0 = E_{01} + \left(E_{01}^2 + \frac{\alpha_m^2 \Phi_n}{3(1-s^{-d})^2 f_n^2 \delta^2} - \left(1 - \frac{\bar{q}}{f_n \delta} \right)^2 \right)^{1/2},$$

$$E_{01} = \frac{1}{\delta} - \frac{\bar{q}}{f_n \delta} + \frac{\alpha_m^2 R_1^{(0)} \Phi_n^{1/2}}{6 f_n \delta (1-s^{-d})^2}.$$

Величини m_0'' , як видно з (4.2), (4.3) незалежні від температури і є лише функціями s -параметра розбиття фазового простору на шари [6,7]. В якості m'' будемо брати найближче до $m_0'' + 0.5$ ціле число. Все це дає можливість записати вільну енергію ПО

$$F_{\text{ПО}} = -kTN's^{-d(m_\tau+1)} \sum_{m=0}^{m''} s^{-dm} f_{m_\tau+m+1} \quad (4.4)$$

у виді

$$F_{\text{ПО}} = -kTN' f_{\text{ПО}} \tau^{dv}, \quad (4.5)$$

де введені позначення

$$f_{\text{ПО}} = f_{\text{ПО}}' s^{-dm_0},$$

$$f_{\text{ПО}}' = \sum_{m=0}^{m''} s^{-dm} f_{m_\tau+m+1},$$

$$f_{m_\tau+m+1} = \frac{n}{2} \ln y_{m_\tau+m} + \left(\frac{(5n+16)n}{8} - \frac{\frac{n}{2}(\frac{n}{2}+1)}{2} \right) y_{m_\tau+m}^{-2} + \quad (4.6)$$

$$+ \ln U\left(\frac{n-1}{2}, x_{m_\tau+m+1}\right) + \frac{x_{m_\tau+m+1}^2}{4},$$

а для проміжної змінної, згідно (1.15) матимемо

$$y_{m_\tau+m} = s^{\frac{d}{2}} U_n(x_{m_\tau+m}) \left(\frac{n+2}{\Phi_n(x_{m_\tau+m})} \right)^{\frac{1}{2}}.$$

4.2. Область ГГР.

Згідно умови (4.1) в області хвильових векторів

$$k < B's^{-(m_\tau+m''+1)}$$

статистична сума моделі (1.1) може розраховуватись з використанням гаусівської густини міри. Згідно до цього, відповідна частина статистичної суми записується у виді

$$\begin{aligned} Z' = \int \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_m \tau} \left(d_{m'_\tau}(k) - d_{m'_\tau}(B_{m'_\tau}, B_{m'_\tau-1}) \rho_k \rho_{-k} + \right. \right. \\ \left. \left. + 2\pi i \sum_{k \leq B_m \tau} \omega_k \rho_k - \frac{(2\pi)^2}{2} \sum_{k \leq B_m \tau} P_2^{(m'_\tau-1)} \omega_k \omega_{-k} \right) \right) (d\rho)^N m_\tau (d\omega)^N m_\tau' \end{aligned} \quad (4.7)$$

де

$$P_2^{(m'_\tau-1)} = \left(\frac{3}{a_4^{(n,m_\tau-1)}} \right)^{\frac{1}{2}} U_n(x_{m'_\tau-1}), \quad (4.8)$$

$$m'_\tau = m_\tau + m'' + 2.$$

Виконавши інтегрування по ω_k і ρ_k , за виключенням інтегрування по змінній ρ_0 , для статистичної суми отримуємо

$$\begin{aligned} Z' = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \left[P_2^{(m'_\tau-1)} \right]^{-\frac{n}{2} N_m \tau} \prod_{k \neq 0}^{B_m \tau} \left[d_{m'_\tau}(k) \right]^{-\frac{n}{2}} \times \\ \times \int \exp \left(-\frac{d_{m'_\tau}(0)}{2} \rho_0^2 - \beta \mu_B \sqrt{N} \mathbf{H} \rho_0 \right) d\rho_0, \end{aligned} \quad (4.9)$$

де \mathbf{H} – безмежно мале магнітне поле, а для $\tilde{d}_{m'_\tau}(\mathbf{k})$ введено позначення

$$d_{m'_\tau}(k) = \frac{1}{P_2^{(m'_\tau-1)}} + \beta [\Phi(B_{m'_\tau}, B_{m'_\tau-1}) - \Phi(k)]. \quad (4.10)$$

Проінтегрувавши по ρ_0 вираз для вільної енергії можна записати у виді

$$F' = kT \frac{n}{2} \left[N_{m'_\tau} \ln P_2^{(m'_\tau-1)} + \sum_{k=0}^{B_m \tau} \ln d_{m'_\tau}(\mathbf{k}) \right] - \frac{kT\beta^2 \mu_B^2 H^2 N}{2d_{m'_\tau}(0)}. \quad (4.11)$$

Зробивши певні перетворення стосовно $P_2^{(m'_\tau-1)}$, $\tilde{d}_{m'_\tau}(\mathbf{k})$ й просумувавши по \mathbf{k} вираз $\ln \tilde{d}_{m'_\tau}(\mathbf{k})$, для вільної енергії отримуємо

$$F' = -kTN_{m'_\tau} nf^* - kTN\gamma_4 \beta^2 \mu_B^2 H^2 \tau^{-2v} \quad (4.12)$$

Слід зауважити, що в (4.12) введені позначення

$$f^* = -\frac{1}{2} \ln \left[\frac{g_0}{p_0 \bar{d}_0} \right] - \frac{1}{2} \left[a_0^2 \left(\frac{d}{d+2} - \frac{da_0^2}{2(d+4)} \right) \right]. \quad (4.13)$$

Для випадку $d=3$ ми матимемо

$$f^* = -\frac{1}{2} \ln \left[\frac{g_0}{p_0 \bar{d}_0} \right] - \frac{1}{2} \ln \left(1 + a_0^2 \right) - a_0^{-2} + \frac{1}{3} + a_0^{-3} \operatorname{arctg} a_0,$$

де введені наступні позначення

$$g_0 = p_0 \bar{d}_0 - \bar{q}, \quad \bar{d}_0 = \bar{r}_{m'_\tau-1}^* + \bar{q}, \quad \bar{r}_{m'_\tau-1}^* = f_n (\delta E_1^{m''} - 1),$$

$$p_0 = 1 + \left(\frac{n}{2} + 1 \right) \left(x_{m'_\tau-1}^* \right)^{-2} - \left(\frac{n^2}{4} + \frac{3}{2} n + 2 \right) \left(x_{m'_\tau-1}^* \right)^{-4} + \dots,$$

$$x_{m'_\tau-1}^* = \left[\frac{3}{\Phi_n + f_n \delta R_l^* \Phi_n^{\frac{1}{2}} E_1^{m''}} \right]^{\frac{1}{2}} \left[\bar{q} + \bar{r}_{m'_\tau-1}^* \right],$$

$$a_0 = \left(s g_0^{\frac{1}{2}} \right)^{-1}, \quad \gamma_4 = s^{2m''} \left(\frac{f_n \delta}{c_{1T}} \right)^{2v} \frac{1}{2\beta \Phi(0) g_0},$$

Виділяючи в (4.12) температурну залежність, для вільної енергії отримуємо

$$F' = -kTN f_*' \tau^{dv} - kTN \gamma_4 \beta^2 \mu_B^2 H^2 \tau^{-2v}, \quad (4.14)$$

де введені позначення

$$f'_* = n \left(\frac{c_{1T}}{f_n \delta} \right)^{d\nu} \bar{f}^*, \quad \bar{f}^* = s^{-d(m''+1)} f^*.$$

Оскільки, вклад участку ГГР у вільну енергію складається з вільної енергії перехідної області $F_{\text{ПО}}$ (4.5) і F' (див.(4.14)), то повний вклад від ГГР у вираз для вільної енергії системи можна записати у виді

$$F_{\text{ГГР}} = -kTN' f_{\text{ГГР}}^* \tau^{d\nu} - \beta \mu_B^2 H^2 N \gamma_4 \tau^{-2\nu} \quad (4.15)$$

де

$$f_{\text{ГГР}}^* = f_{\text{ПО}} + f'_*.$$

На основі цього повного виразу для вільної енергії n -компонентної моделі Стенлі в наближенні четвірної базисної густини міри без врахування поправок до скейлінгу (при $T > T_c$) можна записати наступним чином

$$F(T) = -kTN' [\gamma_0 + \gamma_1 \tau + \gamma_2 \tau^2 + \gamma_3 \tau^{d\nu}] - \beta \mu_B^2 H^2 N \gamma_4 \tau^{-2\nu} \quad (4.16)$$

де

$$\gamma_0 = \gamma'_{01} + s_0^d \ln \left[\frac{(2\pi)^{\frac{n}{2}} m^{n-1}}{\Gamma(\frac{n}{2})} \right], \quad \gamma_3 = f_{\text{ГГР}}^* - \gamma_{10}.$$

Коефіцієнт γ_3 , який враховує вклад від областей КР і ГГР, характеризує сингулярну поведінку теплоємності в околі точки фазового переходу. Залежність коефіцієнтів, які входять у вираз (4.16) для вільної енергії системи при $T > T_c$ від компонентності параметра порядку n та мікроскопічних параметрів вихідного гамільтоніану представлена в табл.3.

5. Термодинаміка системи в наближенні четвірної густини міри

Отриманий повний вираз для вільної енергії n -компонентної моделі Стенлі в наближенні четвірної густини міри (4.16) дозволяє обчислити в околі точки фазового переходу інші термодинамічні функції, такі як ентропія, внутрішня енергія, теплоємність, сприйнятливість. Шляхом прямого диференці-

ювання вільної енергії по температурі (при $\mathbf{H} = 0$) знаходимо для ентропії

$$S = kN' [s^{(0)} + s^{(1)} \tau + u^{(2)} \tau^{d\nu-1}], \quad (5.1)$$

де

$$s^{(0)} = \gamma_0 + \gamma_1, \quad s^{(1)} = 2(\gamma_1 + \gamma_2), \quad u^{(2)} = d\nu \gamma_3.$$

Значення коефіцієнтів, що входять у вираз (5.1) для ентропії при різних n приведені в табл.4. В даній таблиці наведено також отримані значення для універсальних критичних показників при різних значеннях компонентності параметру порядку n . Порівняння отриманих значень для критичних показників з результатами розрахунків здійснених з використанням високотемпературних розкладів [10], методу Монте-Карло [11], $\frac{1}{s}$ – розкладу [12] та g – розкладу [13] приведено в табл.5. Істинний хід температурної залежності ентропії забезпечується завдяки вкладу довгохвильових флуктуацій. Слід зауважити, що якщо при розрахунку ентропії системи ми обмежилися лише використанням методу РГ, що відповідає участку КР, без врахування області ГГР, то ентропія системи зростала би при зменшенні температури [6,7].

Важливою характеристикою системи є теплоємність. Вище T_c її можна записати у виді

$$C = kN' [c^{(0)} + c_3^{(0)} \tau^{-\alpha}], \quad (5.2)$$

де

$$\alpha = 2 - d\nu, \\ c^{(0)} = 2(\gamma_1 + \gamma_2), \\ c_3^{(0)} = d\nu \gamma_3 (1 - \alpha). \quad (5.3)$$

Другий член у формулі (5.2) характеризує головну особливість теплоємності в околі T_c . При розрахунку повного виразу для теплоємності необхідно враховувати як короткохвильові так і довгохвильові флуктуації. Як видно з табл.6, вклад в теплоємність від області КР виявляється строго від'ємним для випадків $n=1$ і $n=2$. Додатність теплоємності і більш того, стабільність системи забезпечується за рахунок врахування вкладу від довгохвильових мод флюктуацій густини спінового моменту, що відповідає

області ГПР. У випадку $n=3$, як видно з табл.4, критичний показник α , який характеризує розбіжність теплоємності в околі точки фазового переходу стає від'ємним. Аналіз виразу (5.2) і отриманих значень для коефіцієнтів, що характеризують теплоємність, приведених в табл.6 показує, що теплоємність у випадку $n=3$ не розбігається і при $T = T_c$ приймає певне скінчene значення. Залежність коефіцієнтів, що входять у вираз для теплоємності (5.3) від мікроскопічних параметрів гамільтоніану, тобто від відношення b/c для різних n приведена в табл.6.

Виходячи з повного виразу для вільної енергії можна знайти сприйнятливість системи

$$\chi = (kT)^{-1} \mu_B^2 N \chi^{(0)} \tau^{-\gamma}, \quad (5.4)$$

де γ - критичний показник, що характеризує температурну залежність сприйнятливості (див.табл.4)

$$\gamma = 2\nu, \quad (5.5)$$

а $\chi^{(0)}$ - величина, яка характеризує критичну амплітуду

$$\chi^{(0)} = 2\gamma_4. \quad (5.6)$$

Залежність коефіцієнта $\chi^{(0)}$ від мікроскопічних параметрів системи для різних n приведена в табл.6.

Таким чином, підсумовуючи отримані результати, слід зауважити, що, роздільне врахування вкладів від коротко- і довго- хвильових фаз флуктуацій густини спінового моменту у виразі для вільної енергії системи в околі T_c дало можливість отримати явні аналітичні вирази для термодинамічних функцій і знайти не тільки критичні показники, але й критичні амплітуди, як функції мікроскопічних параметрів вихідного гамільтоніану.

Додаток 1.

$$d_1 = B_3 \left(A_3 + \frac{A_1}{E_1} \right), d_2 = B_1 \left(A_3 + \frac{A_1}{E_2} \right), d_3 = B_6 \left(A_3 + \frac{A_1}{E_1^2} \right) + B_3^2 \left(A_4 + \frac{A_2}{E_1^2} \right)$$

$$d_4 = B_2 \left(A_3 + \frac{A_1}{E_2^2} \right) + B_1^2 \left(A_4 + \frac{A_2}{E_2^2} \right), d_5 = B_4 \left(A_3 + \frac{A_1}{E_1 E_2} \right) + 2B_1 B_3 \left(A_4 + \frac{A_2}{E_1 E_2} \right)$$

$$d_6 = B_7 \left(A_3 + \frac{A_1}{E_1 E_2^2} \right) + 2(B_1 B_6 + B_3 B_4) \left(A_4 + \frac{A_2}{E_1^2 E_2} \right),$$

$$d_7 = B_5 \left(A_3 + \frac{A_1}{E_1 E_2^2} \right) + 2(B_1 B_4 + B_2 B_3) \left(A_4 + \frac{A_2}{E_1 E_2^2} \right),$$

$$d_8 = B_8 \left(A_3 + \frac{A_1}{E_1^2 E_2^2} \right) + 2 \left(B_1 B_7 + B_2 B_6 + B_3 B_5 + \frac{B_4^2}{2} \right) \left(A_4 + A_2 E_1^{-2} E_2^{-2} \right),$$

де коефіцієнти A_i, B_j є універсальними константами і визначаються координатами фіксованої точки. Для коефіцієнтів B_j ми маємо

$$B_1 = \Phi_n^{-1} \left(R^* \sqrt{3} - \frac{x^*}{2} \right), B_2 = \Phi_n^{-2} \left(\frac{3}{2} x^* - \frac{\sqrt{3}}{2} R^* \right), B_3 = \Phi_n^{-1/2} \left(\sqrt{3} - \frac{R_1^* x^*}{2} \right)$$

$$B_4 = \Phi_n^{-3/2} \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} R_1^* R^* - \frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{3}{4} R_1^* x^* \right),$$

$$B_5 = \Phi_n^{-5/2} \frac{3\sqrt{3}}{4} \left(R_1^* R^* + \frac{1}{2} - \frac{5}{4\sqrt{3}} R_1^* x^* \right),$$

$$B_6 = \Phi_n^{-1} R_1^* \left(\frac{3}{8} x^* R_1^* - \frac{\sqrt{3}}{2} \right),$$

$$B_7 = \Phi_n^{-2} \frac{3\sqrt{3}}{4} R_1^* \left(1 + \frac{R_1^* R^*}{2} - \frac{5R_1^* x^*}{4\sqrt{3}} \right),$$

$$B_8 = \frac{\Phi_n^{-3} 15\sqrt{3} R_1^*}{16} \left(\frac{7x^* R_1^*}{4\sqrt{3}} - (1 + R^* R_1^*) \right)$$

А коефіцієнти A_i представляються наступним чином

$$A_1 = \frac{n}{2} r_1 - \frac{2r_1 \tilde{\alpha}}{(y^*)^2}, \quad A_2 = \frac{n}{2} r_2 - \frac{n}{4} r_1^2 + \frac{\tilde{\alpha}(3r_1^2 - 2r_2)}{(y^*)^2},$$

$$A_3 = -\frac{n}{2} U_n(x^*), \quad A_4 = -\frac{n}{4} U'(x^*),$$

де введені позначення

$$\tilde{\alpha} = \frac{(5n+16)n}{8} - \frac{\frac{n}{2} \left(\frac{n}{2} + 1 \right)}{2},$$

$$U'_n(x^*) = \left(\frac{dU_n(x_l)}{dx_l} \right)_{x^*},$$

$$r_1 = \tilde{d}_1 - \frac{q_1}{2}, \quad r_2 = \frac{1}{2}\tilde{d}_2 - \frac{1}{2}\tilde{d}_1 q_1 + \frac{3}{8}q_1^2 - \frac{1}{4}q_2,$$

$$\tilde{d}_i = \frac{1}{U_n(x^*)} \left(\frac{d^i U_n(x_l)}{dx_l^i} \right)_{x^*}, \quad q_i = \frac{1}{\Phi_n(x^*)} \left(\frac{d^i \Phi_n(x_l)}{dx_l^i} \right)_{x^*}.$$

Додаток 2.

$$\begin{aligned} \gamma_{01} &= s^{-d} \left(\frac{f_{\text{KP}}^*}{1-s^{-d}} + \frac{c_{2k} d_2 E_2}{1-s^{-d} E_2} + \frac{c_{2k}^2 d_4 E_2^2}{1-s^{-d} E_2^2} \right), \\ \gamma_{02} &= s^{-d} \left(\frac{c_{2k1} d_2 E_2}{1-s^{-d} E_2} + \frac{b_1 d_4 E_2^2}{1-s^{-d} E_2^2} + \frac{c_{1k} d_1 E_1}{1-s^{-d} E_1} + \frac{c_{1k} c_{2k} d_5 E_1 E_2}{1-s^{-d} E_1 E_2} + \frac{c_{1k} b_0 d_7 E_2^2 E_1}{1-s^{-d} E_1 E_2^2} \right), \\ \gamma_{03} &= s^{-d} \left(\frac{c_{2k2} d_2 E_2}{1-s^{-d} E_2} + \frac{(c_{1k} c_{2k1} + c_{2k} c_{1k1}) d_5 E_1 E_2}{1-s^{-d} E_1 E_2} + \frac{c_{1k1} d_1 E_1}{1-s^{-d} E_1} + \frac{b_2 d_4 E_2^2}{1-s^{-d} E_2^2} + \right. \\ &\quad \left. \frac{(c_{1k} b_1 + c_{1k1} b_0) d_7 E_1 E_2^2}{1-s^{-d} E_1 E_2^2} + \frac{c_{1k}^2 d_3 E_1^2}{1-s^{-d} E_1^2} + \frac{c_{1k}^2 c_{2k} d_6 E_1^2 E_2}{1-s^{-d} E_1^2 E_2} + \frac{c_{1k}^2 b_0 d_8 E_1^2 E_2^2}{1-s^{-d} E_1^2 E_2^2} \right), \end{aligned}$$

де

$$b_0 = c_{2k}^2,$$

$$b_1 = 2c_{2k}c_{2k1},$$

$$b_2 = c_{2k1}^2 + 2c_{2k}c_{2k2}.$$

А для γ' маємо

$$\gamma' = \frac{f_{\text{KP}}^*}{1-s^{-d}} + \frac{f_n \delta d_1}{1-s^{-d} E_1} + \frac{f_n^2 \delta^2 d_3}{1-s^{-d} E_1^2},$$

де введено позначення

$$f_n = \tau E_1^{m_\tau+1} c_{1k}.$$

ТАБ.1: Залежність температури фазового переходу від компонентності параметра порядку n .

$\beta_c \Phi(0)$						
n	$\tilde{\Phi} = 0$	$\tilde{\Phi} \neq 0$	$g - \exp [14]$	$1/s - \exp [12]$	HTE	MCC
1	0.994	1.036	1.727	1.741	1.330 [15]	1.330 [17]
2	1.004	1.156	1.845	5.267	3.866 [16]	-
3	1.006	1.291	1.936	5.751	4.158 [10]	4.158 [11]

ТАБ.2: Залежність постійних m_c і m_1 , які характеризують точку виходу системи з КР при $T > T_c$ від відношення радіуса дії потенціалу до постійної гратки c , причому,

$$b1 = \frac{c}{2\sqrt{3}}, b2 = 0.3379c, b3 = 0.3584c.$$

	m_c			m_1		
	$b \setminus n$	1	2	3	1	2
b1	-0.0979	-0.0091	0.0608	-0.0465	-0.0500	-0.0449
b2	-0.0893	0.0048	0.0961	-0.0387	-0.0374	-0.0116
b3	-0.0863	0.0083	0.0960	-0.0359	-0.0342	-0.0117
c	-0.0535	0.0382	0.1016	-0.0047	-0.0055	-0.0062

ТАБ.3: Залежність коефіцієнтів, які характеризують вільну енергію системи при $T > T_c$ від компонентності параметра порядку n та мікроскопічних параметрів гамільтоніану (позначення див. ТАБ.2).

b	n	γ'_{01}	γ_1	γ_2	γ_{10}	$f_{\text{ГР}}$	γ_0	γ_3
b1	1	0.349	-0.500	-0.459	-0.538	1.821	1.811	1.283
	2	0.727	-0.976	-4.427	3.315	2.479	5.335	5.795
	3	1.099	-1.435	24.497	-25.359	2.755	9.488	-22.603
c	1	0.297	-0.521	-0.122	-0.448	1.514	61.085	1.066
	2	0.620	-1.011	-3.200	2.722	2.036	192.194	4.759
	3	0.938	-1.470	21.176	-21.397	2.325	349.648	-19.072

ТАБ.4: Залежність коефіцієнтів які визначають ентропію моделі та критичних показників від компонентності параметра порядку n .

n	$s^{(0)}$	$s^{(1)}$	$u^{(2)}$	v	α	γ	Δ
1	1.311	1.917	2.356	0.612	0.163	1.225	0.456
2	4.359	-10.805	11.228	0.646	0.062	1.292	0.502
3	8.053	46.124	-45.677	0.674	-0.021	1.347	0.549

ТАБ.5: Значення критичних показників при компонентності параметра порядку $n=3$, отриманих різними методами.

	НТЕ [10]	MCC [13]	This study	1/g-exp [14]	1/s-exp [5]
v	0.703	0.705	0.674	0.647	0.684
γ	1.375	1.387	1.347	1.294	1.369
α	-0.108	-0.114	-0.021	0.059	-0.053

ТАБ.6: Залежність коефіцієнтів теплоємності та сприйнятливості при $T>T_c$ від компонентності параметра порядку n і від мікрокопічних параметрів гамільтоніану.

n	$c^{(0)}$	$c_3^{(0)}$	$\chi^{(0)}$	b
1	-1.917	1.972	2.969	
2	-10.805	10.529	4.007	$b=b_1$
3	46.124	-46.629	5.682	
1	-1.286	1.639	3.358	$b=c$
2	-8.421	8.646	4.569	
3	39.412	-39.344	5.781	

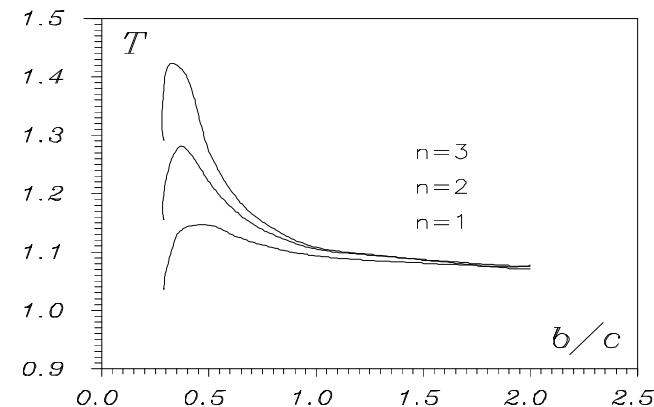


Рис.1. Залежність температури фазового переходу від відношення радіусу дії b до постійної гратки c для різних значень компонентності параметра порядку n .

Література.

- Козловський М.П., Усатенко З.Є. Дослідження критичної поведінки n -компонентної моделі магнетика. Рекурентні співвідношення - Львів, 1996. (Препринт/АН України, ICMP-96-03U).
- Стенлі Г.Е. Фазовые переходы и критические явления. - М.:Мир, 1973.
- Stanley H.E.//Phys.Rev.Lett. - 1968. - **20**.-P.150-154.
- Вакарчук И.А., Рудавский Ю.К., Юхновский И.Р.//ТМФ.-1982.-**50**, №2.-С.313-320.
- Юхновский И.Р. Фазовые переходы второго рода. Метод коллективных переменных. - К.: Наукова думка ,1985.
- Козловский М.П., Пылюк И.В., Юхновский И.Р. //ТМФ.-1991.- **87**, №2.-С.293-316.
- Козловский М.П. Приближенные рекурентные соотношения трехмерной модели Изинга в методе коллективных переменных. - Киев, 1981. (Препринт/АН УССР, ИТФ-81-82Р).
- Юхновский И.Р., Козловский М.П., Коломиец В.А. //УФЖ.-1982.- **27**, №6.-С.925-930.

9. Юхновский И.Р., Козловский М.П., Коломиец В.А./*УФЖ.*-1982.- **27**, №6.-С.930-935.
10. Bowers R.G., Woolf M.E./*// Phys.Rev.B.* - 1969. - **177**, №2.-P.917-932.
11. Chen K., Ferrenberg A.M., Landau D.P./*Phys.Rev.B.*- 1993.- **48**, №5.- P.3249-3256.
12. Юхновский И.Р., Мрыглод И.М. Исследование критического поведения n -компонентной модели структурного фазового перехода: критические амплитуды. - Киев, 1988. (Препринт/AН УРСР, ИТФ-88-6Р).
13. Вакарчук И.А., Рудавский Ю.К., Головач Ю.В./*Физика многочастичных систем.*-1983, №4.- С.44-59.
14. Головач Ю.В./*// Доповіді АН УРСР.*- 1987, №1. - С.41-44.
15. Baker Jr.G.A., Hunter D.L./*Phys.Rev.B.* - 1973. - **7**, №7. - P. 3377- 3392.
16. Ferer M., Moore M.A., Wortis M. // *Phys. Rev. B.* - 1973. - **8**, №11. -P.5205-5212.
17. Ferrenberg A.M., Landau D.P. // *Phys. Rev. B.* - 1991. - **44**, №10. - P.3249-3256.

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://alpha.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://alpha.icmp.lviv.ua>)

Михайло Павлович Козловський
Зоряна Євгенівна Усатенко

Дослідження критичної поведінки n -компонентної моделі магнетика. Розрахунок вільної енергії при температурах $T > T_c$

Роботу отримано 24 липня 1996 р.

Затверджено до друку Вченого радиою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу СТЕКС

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені