Національна академія наук України

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP–97–06U

І.В.Пилюк, М.П.Козловський

# ТЕРМОДИНАМІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТРИВИМІРНОЇ ІЗІНГІВСЬКОЇ СИСТЕМИ В НАБЛИЖЕННІ МОДЕЛІ $\rho^6$ З ВРАХУВАННЯМ КОНФЛУЕНТНОЇ ПОПРАВКИ. І. ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНА ОБЛАСТЬ

ЛЬВІВ

**УДК:** 536.75; 538.9; 548:537.621; 538.955-405
**PACS:** 05.50.+q, 05.70.Ce, 64.60.Fr, 75.10.Hk

**Термодинамічні характеристики тривимірної ізінгівської системи в наближенні моделі $\rho^6$ з врахуванням конфлуентної поправки. І. Високотемпературна область**

І.В.Пилюк, М.П.Козловський

**Анотація.** Запропонований оригінальний метод розрахунку вільної енергії, ентропії, внутрішньої енергії, теплоємності, сприйнятливості тривимірної моделі Ізінга. Розрахунок виконується для температур вище критичної в наближенні моделі $\rho^6$ з врахуванням першої конфлуентної поправки. Окремо розглядаються вклади в термодинамічні характеристики системи від короткохвильових і довгохвильових мод коливань густини спінового моменту. В виразах для основних критичних амплітуд і амплітуд конфлуентної поправки виділено залежність від мікроскопічних параметрів системи.

**Thermodynamic characteristics of the 3D Ising system in $\rho^6$ model approximation taking into account the confluent correction. I. High-temperature region**

I.V.Pylyuk, M.P.Kozlovskii

**Abstract.** Original method for the calculation of the free energy, entropy, internal energy, specific heat, susceptibility of the 3D Ising model is proposed. The calculation is performed for temperatures above the critical temperature in the approximation of the $\rho^6$ model taking into account the first confluent correction. Contributions into thermodynamic characteristics of the system from short-wave and long-wave fluctuation modes of the spin moment density are considered separately. The dependence on microscopic parameters of the system has been extracted in expressions for the leading critical amplitudes and for the confluent correction amplitudes.

**Подається до** Українського фізичного журналу
**Submitted to** Ukrainian Journal of Physics

## Вступ

Розглядається тривимірна модель Ізінга на простій кубічній гратці з періодом с. Гамільтоніан моделі має вигляд

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{j},\mathbf{l}} \Phi(|\mathbf{j}-\mathbf{l}|)\sigma_{\mathbf{j}}\sigma_{\mathbf{l}}, \tag{1}$$

де $\Phi(|\mathbf{j}-\mathbf{l}|)$ – потенціал взаємодії частинок, які знаходяться в вузлах $\mathbf{j}$ і $\mathbf{l}$, $\sigma_{\mathbf{j}}$ – оператор $z$-компоненти спіна в $\mathbf{j}$-му вузлі, що має два власних значення $+1$ і $-1$. Потенціал взаємодії представляється експонентно спадною функцією

$$\Phi(r_{\mathbf{jl}}) = A \exp\left(-\frac{r_{\mathbf{jl}}}{b}\right). \tag{2}$$

Тут $A$ – постійна, $r_{\mathbf{jl}}$ – віддаль між частинками, $b$ – радіус ефективної взаємодії. Для фур'є-образу потенціалу взаємодії використовується апроксимація

$$\tilde{\Phi}(k) = \begin{cases} \tilde{\Phi}(0)(1-2b^2k^2), & k \le B', \\ 0, & B' < k \le B, \end{cases} \tag{3}$$

де $B$ – границя півзони Бріллюена ($B = \pi/c$), $B' = (b\sqrt{2})^{-1}$, $\tilde{\Phi}(0) = 8\pi A(b/c)^3$.

В роботі використовується метод колективних змінних (КЗ) [1], який дозволяє провести наближений розрахунок виразу для статистичної суми, одержати, крім універсальних величин (критичних показників), повні вирази для термодинамічних функцій поблизу температури фазового переходу $T_c$.

В представленні КЗ для статистичної суми тривимірної моделі Ізінга маємо

$$Z = \int \exp\left[\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta\tilde{\Phi}(k)\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}}\right] J(\rho)\ (d\rho)^N. \tag{4}$$

Тут сумування по хвильових векторах $\mathbf{k}$ виконується в межах першої зони Бріллюена, $\beta = 1/(kT)$ - обернена термодинамічна температура, КЗ $\rho_{\mathbf{k}}$ вводяться з допомогою співвідношень типу аналітичного функціоналу для операторів мод коливань спінової густини $\hat{\rho}_{\mathbf{k}} = (\sqrt{N})^{-1} \sum_{\mathbf{l}} \sigma_{\mathbf{l}} \exp(-i\mathbf{kl})$,

$$J(\rho) = 2^N \int \exp\left[2\pi i \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}}\rho_{\mathbf{k}} + \sum_{n=1}^{\infty} (2\pi i)^{2n}\, N^{1-n} \times \right. \tag{5}$$



$$\left. \times \frac{\mathcal{M}_{2n}}{(2n)!} \sum_{\mathbf{k}_1,\ldots,\mathbf{k}_{2n}} \omega_{\mathbf{k}_1} \cdots \omega_{\mathbf{k}_{2n}}\ \delta_{\mathbf{k}_1+\cdots+\mathbf{k}_{2n}} \right] (d\omega)^N$$

– якобіан переходу від множини $N$ спінових змінних $\sigma_{\mathbf{l}}$ до множини КЗ $\rho_{\mathbf{k}}$, $\delta_{\mathbf{k}_1+\cdots+\mathbf{k}_{2n}}$ – символ Кронекера. Змінні $\omega_{\mathbf{k}}$ спряжені до $\rho_{\mathbf{k}}$, а кумулянти $\mathcal{M}_{2n}$ приймають постійні значення (див. [1]). Вираз для статсуми (4) через наявність нескінченного числа доданків в експоненті (5) точно розрахувати не можна. Тому використовують наближення, зв'язані з обмеженням числа доданків в експоненті підінтегрального виразу (5). Так, при $n = 1$ одержуємо гаусове наближення. Воно приводить до класичних значень критичних показників. Важливою умовою опису критичних властивостей моделі Ізінга є використання негаусових густин мір. Найпростіше наближення, яке дозволяє вийти за рамки класичної поведінки, відповідає $n = 2$ і грунтується на використанні четвірної густини міри. Для нього виконано розрахунок основних критичних показників термодинамічних характеристик, повних виразів для цих характеристик із врахуванням конфлуентних поправок, проаналізовано співвідношення для критичних амплітуд (див., наприклад, [2–4]). Через наближеність обчислення статистичної суми у зв'язку із обмеженням моделлю $\rho^4$ одержані результати (критичні показники, амплітуди, термодинамічні функції) містять деяку залежність від параметра ренормалізаційної групи (РГ) $s$. Дана залежність послаблюється в процесі ускладнення форми негаусової густини міри. Останнє підтверджується розрахунком критичного показника кореляційної довжини $\nu$ для моделей $\rho^{2m}$ ($m = 3, 4, 5$) [5–9], а також безпосереднім порівнянням графіків температурних залежностей термодинамічних функцій, розрахованих для моделей $\rho^4$ (з врахуванням конфлуентних поправок), $\rho^6$ (без врахування конфлуентних поправок) при різних значеннях параметра $s$ [10]. Результати проведених досліджень показують, що в інтервалі проміжних значень $s$ ($2 \le s \le 4$) якісну картину критичної поведінки дає модель $\rho^4$ . Більш складніша модель $\rho^6$ ($n = 3$, див. (5)), яка передбачає при інтегруванні статистичної суми врахування шестирної густини міри , дозволяє здійснити кількісний опис критичних властивостей спінової системи.

У даній роботі в рамках моделі $\rho^6$ розроблено спосіб розрахунку виразів для термодинамічних функцій тривимірної ізінгівської системи з врахуванням доданків, які визначають поправку до скейлінгу. Розрахунки виконані для температур, вищих за $T_c$ (високотемпературна область). Одержані вирази для основних критичних амплітуд і амплітуд першої конфлуентної поправки дозволяють дослідити їх залежність від мікроскопічних параметрів системи (радіуса дії потенціалу $b$, постійної гратки с).

## 1. Загальні співвідношення

Покладаючи в (5) $n = 3$ і здійснюючи в (4) інтегрування по змінних $\rho_\mathbf{k}$ і $\omega_\mathbf{k}$ з індексами $B' < k \leq B$, а потім ще по $N'$ змінних $\omega_\mathbf{k}$, приходимо до вихідного виразу для статистичної суми в наближенні моделі $\rho^6$ [10]:

$$Z = 2^N 2^{(N'-1)/2} e^{a'_0 N'} \int \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{k\leq B'} d'(k)\rho_\mathbf{k}\rho_{-\mathbf{k}} - \right. \tag{1.1}$$

$$\left. - \sum_{l=2}^{3} \frac{a'_{2l}}{(2l)!(N')^{l-1}} \sum_{k_1,\ldots,k_{2l}\leq B'} \rho_{\mathbf{k}_1}\cdots\rho_{\mathbf{k}_{2l}}\delta_{\mathbf{k}_1+\cdots+\mathbf{k}_{2l}}\right](d\rho)^{N'}.$$

Тут $N' = N s_0^{-3}, \qquad s_0 = B/B' = \pi\sqrt{2}b/c,$

$$d'(k) = a'_2 - \beta\tilde{\Phi}(k). \tag{1.2}$$

Коефіцієнти $a'_{2l}$ є функціями $s_0$ , тобто відношення $b/c$, і визначаються співвідношеннями

$$\begin{aligned} a'_0 &= \ln Q(\mathcal{M}), \qquad Q(\mathcal{M}) = (12 s_0^3)^{1/4}\pi^{-1} I_0(\eta', \xi'), \\ a'_2 &= (12 s_0^3)^{1/2} F_2(\eta', \xi'), \\ a'_4 &= 12 s_0^3 C(\eta', \xi'), \\ a'_6 &= (12 s_0^3)^{3/2} N(\eta', \xi'). \end{aligned} \tag{1.3}$$

Тут в якості аргументів виступають величини

$$\eta' = \sqrt{3} s_0^{3/2}, \qquad \xi' = \frac{8\sqrt{3}}{15 s_0^{3/2}}. \tag{1.4}$$

Спеціальні функції $C(\eta', \xi')$ і $N(\eta', \xi')$ мають вигляд

$$\begin{aligned} C(\eta', \xi') &= -F_4(\eta', \xi') + 3F_2^2(\eta', \xi'), \\ N(\eta', \xi') &= F_6(\eta', \xi') - 15 F_4(\eta', \xi') F_2(\eta', \xi') + 30 F_2^3(\eta', \xi'), \end{aligned} \tag{1.5}$$

де

$$\begin{aligned} F_{2l}(\eta', \xi') &= I_{2l}(\eta', \xi')/I_0(\eta', \xi'), \\ I_{2l}(\eta', \xi') &= \int_0^\infty t^{2l}\exp(-\eta' t^2 - t^4 - \xi' t^6)\, dt. \end{aligned} \tag{1.6}$$



У випадку $b = c$ маємо $s_0 = 4.442883$ і $a'_0 = -0.921788$, $a'_2 = 0.988692$, $a'_4 = 0.219943 \cdot 10^{-1}$, $a'_6 = 0.309102 \cdot 10^{-2}$.

Характерною рисою фазового переходу другого роду є наявність в системі параметра порядку. Серед КЗ $\rho_\mathbf{k}$ міститься змінна, що пов'язана з параметром порядку. Для моделі Ізінга такою змінною є $\rho_0$. Однак, ми не можемо виділити у виразі (1.1) вкладу лише від $\rho_0$, оскільки всі змінні $\rho_\mathbf{k}$ зв'язані між собою. Тому скористаємося з запропонованого в [1] методу "пошарового" інтегрування виразу (1.1) по змінних $\rho_\mathbf{k}$. Інтегрування починається із змінних $\rho_\mathbf{k}$ з великими значеннями $k$ (порядку границі півзони Бріллюена) і закінчується $\rho_\mathbf{k}$ з $k \to 0$. Для цього фазовий простір КЗ $\rho_\mathbf{k}$ розбивається на шари з параметром поділу $s$. В кожному $n$-му шарі (відповідна область хвильових векторів рівна $B_{n+1} < k \leq B_n$, $B_{n+1} = B_n/s$, $s > 1$) фур'є-образ потенціалу $\tilde{\Phi}(k)$ замінюється його середнім значенням (в даній роботі середнім арифметичним). В результаті поетапного обчислення статсуми число змінних інтегрування в виразі для неї зменшується. Після інтегрування по $n + 1$ шарах простору КЗ одержуємо

$$Z = 2^N 2^{(N_{n+1}-1)/2} Q_0 Q_1 \cdots Q_n [Q(P_n)]^{N_{n+1}} \int \mathcal{W}_6^{(n+1)}(\rho) \times \tag{1.7}$$

$$\times\, (d\rho)^{N_{n+1}}.$$

Тут $N_{n+1} = N' s^{-3(n+1)}$,

$$\begin{aligned} Q_0 &= \left[e^{a'_0} Q(d)\right]^{N'}, \qquad Q_1 = [Q(P)Q(d_1)]^{N_1}, \ldots, \\ Q_n &= [Q(P_{n-1})Q(d_n)]^{N_n}, \\ Q(d_n) &= 2\left(24/a_4^{(n)}\right)^{1/4} I_0(h_n, \alpha_n), \\ Q(P_n) &= \pi^{-1}\left(s^3 a_4^{(n)}/C(h_n, \alpha_n)\right)^{1/4} I_0(\eta_n, \xi_n). \end{aligned} \tag{1.8}$$

Основні аргументи

$$h_n = d_n(B_{n+1}, B_n)(6/a_4^{(n)})^{1/2}, \qquad \alpha_n = \frac{\sqrt{6}}{15} a_6^{(n)}/(a_4^{(n)})^{3/2} \tag{1.9}$$

визначаються середнім значенням коефіцієнта $d_n(k)$ в $n$-му шарі фазового простору КЗ і величинами $a_4^{(n)}$, $a_6^{(n)}$. Ефективна густина міри $n+1$-го шару $\mathcal{W}_6^{(n+1)}(\rho)$ має наступний вигляд:

$$\mathcal{W}_6^{(n+1)}(\rho) = \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{k\leq B_{n+1}} d_{n+1}(k)\rho_\mathbf{k}\rho_{-\mathbf{k}} - \right. \tag{1.10}$$

$$- \sum_{l=2}^{3} \frac{a_{2l}^{(n+1)}}{(2l)!N_{n+1}^{l-1}} \sum_{k_1,\ldots,k_{2l}\le B_{n+1}} \rho_{\mathbf{k}_1}\cdots\rho_{\mathbf{k}_{2l}}\ \delta_{\mathbf{k}_1+\cdots+\mathbf{k}_{2l}} \Bigg] .$$

Тут $B_{n+1} = B's^{-(n+1)}$, $d_{n+1}(k) = a_2^{(n+1)} - \beta\tilde{\Phi}(k)$, $a_{2l}^{(n+1)}$ – перенормовані значення коефіцієнтів $a'_{2l}$ після інтегрування по $n+1$ шарах фазового простору КЗ. Проміжні змінні $\eta_n$, $\xi_n$ є функціями $h_n$ і $\alpha_n$. Вони задаються виразами

$$\eta_n = (6s^3)^{1/2}F_2(h_n,\alpha_n)[C(h_n,\alpha_n)]^{-1/2}, \tag{1.11}$$
$$\xi_n = \frac{\sqrt{6}}{15}s^{-3/2}N(h_n,\alpha_n)[Ch_n,\alpha_n)]^{-3/2},$$

де вигляд спеціальних функцій $C(h_n,\alpha_n)$, $N(h_n,\alpha_n)$ визначений в (1.5). Коефіцієнти $d_n(B_{n+1},B_n)$, $a_4^{(n)}$, $a_6^{(n)}$ зв'язані з коефіцієнтами $n+1$-го шару рекурентними співвідношеннями (РС) [8,11,12], роз'язки яких (див. додаток) суттєвим чином будемо використовувати при обчисленні вільної енергії системи.

Основна ідея розрахунку на мікроскопічному рівні явних виразів для вільної енергії та інших термодинамічних функцій системи поблизу $T_c(\tau < \tau^* \sim 10^{-2}, \tau = (T-T_c)/T_c)$ полягає в окремому врахуванні вкладів від короткохвильових і довгохвильових мод коливань густини спінового моменту [1,2,13].

Короткохвильові моди характеризуються наявністю РГ симетрії і описуються негаусовою густиною міри. Вони відповідають області критичного режиму (КР), яка має місце як вище, так і нижче $T_c$. Тут використовується метод РГ. Розрахунок виразу для вкладу у вільну енергію від короткохвильових фаз флуктуацій спінової густини зв'язаний із сумуванням парціальних вільних енергій по шарах фазового простору КЗ до точки виходу системи із ділянки КР. Головною задачею при цьому є виділення явної залежності від номера шару. Для цієї мети використовуються розв'язки РС. Врахування в них більшого власного значення ($E_1 > 1$) матриці лінійного перетворення РГ дозволяє описати поблизу $T_c$ основну сингулярність для теплоємності. Менші власні значення ($E_2 < 1, E_3 < 1$) відповідають за виникнення поправок до скейлінгу. За рахунок врахування короткохвильових мод коливань спінової густини відбувається перенормування дисперсії розподілу, що описує довгохвильові моди. Останнім при $T > T_c$ відповідає область граничного гаусового режиму (ГГР). Спосіб врахування вкладу довгохвильових мод коливань у вільну енергію системи якісно відрізняється від методики обчислення короткохвильової частини статсуми. Розрахунок цього вкладу



грунтується на використанні гаусової густини міри в якості базисної. Тут розвинуто прямий метод розрахунку. Вихідними даними для нього є результати, одержані при врахуванні короткохвильових флуктуацій.

Обчисливши окремо вклади при $T > T_c$ у вільну енергію від короткохвильових $F_{\text{КР}}$ і довгохвильових $F_{\text{ГГР}}$ фаз флуктуацій спінової густини, можна знайти повний вираз для вільної енергії системи

$$F = F_0 + F_{\text{КР}} + F_{\text{ГГР}}. \tag{1.12}$$

Тут $F_0 = -kTN\ln 2$ - вільна енергія $N$ невзаємодіючих спінів. Перейдемо до обчислення вищевказаних вкладів $F_{\text{КР}}$ і $F_{\text{ГГР}}$.

## 2. Розрахунок вкладу в термодинамічні функції системи від короткохвильових мод коливань спінової густини

Статистичну суму моделі зручно представити у вигляді [10,14]

$$Z = 2^N Z_{\text{КР}} Z_{\text{ГГР}}, \tag{2.1}$$

де перший множник відповідає невзаємодіючим спінам. $Z_{\text{КР}}$ описує вклад сильно скорельованих короткохвильових флуктуацій $\rho_{\mathbf{k}}$ з $k \in [B_{m_\tau}, B']$ (область КР). Величина $B_{m_\tau} = B's^{-m_\tau}$, де номер шару простору КЗ $m_\tau$ , який характеризує точку виходу системи із КР, буде визначено нижче. Множник $Z_{\text{ГГР}}$ містить вклади довгохвильових флуктуацій з $k \in [0, B_{m_\tau})$ і відповідає ГГР.

Розглянемо величину $Z_{\text{КР}}$. Для неї маємо

$$Z_{\text{КР}} = \prod_{n=0}^{m_\tau} \left[ \frac{2}{\pi} \left( \frac{24}{C(\eta_{n-1},\xi_{n-1})} \right)^{1/4} I_0(h_n,\alpha_n) \times \right. \tag{2.2}$$
$$\left. \times I_0(\eta_{n-1},\xi_{n-1}) \right]^{N_n} .$$

Слід відмітити, що в (2.2) при $n=0$, $\eta_{-1} \equiv \eta'$, $\xi_{-1} \equiv \xi'$. В області КР основні $h_n$, $\alpha_n$ і проміжні $\eta_n$, $\xi_n$ аргументи близькі до своїх значень в фіксованій точці $h^{(0)}$, $\alpha^{(0)}$ і $\eta^{(0)}$, $\xi^{(0)}$. Тому функції від цих аргументів тут можна апроксимувати степеневими рядами відносно відхилень від їх фіксованих значень [15]. Проміжні аргументи і функції від них представляються через відхилення основних аргументів від їх значень в фіксованій точці. Використовуючи співвідношення для $I_0(h_n,\alpha_n)$, $I_0(\eta_{n-1},\xi_{n-1})$, $C(\eta_{n-1},\xi_{n-1})$ з врахуванням квадратів вказаних відхилень основних аргументів [10,15], із (2.2) визначаємо вільну енергію, яка відповідає $n$-му фазовому шару:

$$
\begin{aligned}
F_n = -kTN_n \Big[ & f_{\rm KP}^{(0)} + \varphi_1(h_{n-1} - h^{(0)}) + \varphi_2(\alpha_{n-1} - \alpha^{(0)}) + \\
& + \varphi_3(h_n - h^{(0)}) + \varphi_4(\alpha_n - \alpha^{(0)}) + \varphi_1'(h_{n-1} - h^{(0)})^2 + \\
& + \varphi_2'(\alpha_{n-1} - \alpha^{(0)})^2 + \varphi_3'(h_n - h^{(0)})^2 + \varphi_4'(\alpha_n - \alpha^{(0)})^2 + \\
& + \varphi_5'(h_{n-1} - h^{(0)})(\alpha_{n-1} - \alpha^{(0)}) + \varphi_6'(h_n - h^{(0)})(\alpha_n - \alpha^{(0)}) \Big],
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
& f_{\rm KP}^{(0)} = \ln\left(\frac{2(24)^{1/4}}{\pi}\right) - 1/4 \ln P_{40} + \ln I_0^* + \ln I_0^{**}, \\
& \varphi_k = b_k + P_{4k}/4, \qquad k = 1, 2, \\
& \varphi_3 = -F_2^*, \qquad \varphi_4 = -F_6^*, \\
& \varphi_k' = b_k' - \frac{1}{2} b_k^2 - P_{4k}'/4 + P_{4k}^2/8, \\
& \varphi_3' = F_4^*/2 - F_2^{*2}/2, \qquad \varphi_4' = F_{12}^*/2 - F_6^{*2}/2, \\
& \varphi_5' = b_3' - b_1 b_2 - P_{43}'/4 + P_{41}P_{42}/4, \\
& \varphi_6' = F_8^* - F_2^* F_6^*.
\end{aligned} \tag{2.3}
$$

Величини, що входять в $f_{\rm KP}^{(0)}$, $\varphi_i$, $\varphi_j'$, є функціями значень основних та проміжних аргументів в фіксованій точці і приведені в роботах [10,15].

Виділимо в $F_n$ явну залежність від номера шару $n$. Використовуючи розв'язки (Д.4) РС (Д.2) (див. додаток), для $h_n$ і $\alpha_n$ (1.9) знаходимо

$$
\begin{aligned}
h_n = {} & h^{(0)} + c_1 H_1 (u^{(0)})^{-1/2} E_1^n + c_2 H_2 (u^{(0)})^{-1} E_2^n + \\
& + c_3 H_3 (u^{(0)})^{-3/2} E_3^n + c_1 c_2 H_4 (u^{(0)})^{-3/2} E_1^n E_2^n + \\
& + c_1 c_2^2 H_5 (u^{(0)})^{-5/2} E_1^n E_2^{2n} + c_2^2 H_6 (u^{(0)})^{-2} E_2^{2n} + \\
& + c_1^2 H_7 (u^{(0)})^{-1} E_1^{2n} + c_1^2 c_2 H_8 (u^{(0)})^{-2} E_1^{2n} E_2^n + \\
& + c_1^2 c_2^2 H_9 (u^{(0)})^{-3} E_1^{2n} E_2^{2n}; \\
\alpha_n = {} & \alpha^{(0)} + c_1 L_1 (u^{(0)})^{-1/2} E_1^n + c_2 L_2 (u^{(0)})^{-1} E_2^n + \\
& + c_3 L_3 (u^{(0)})^{-3/2} E_3^n + c_1 c_2 L_4 (u^{(0)})^{-3/2} E_1^n E_2^n + \\
& + c_1 c_2^2 L_5 (u^{(0)})^{-5/2} E_1^n E_2^{2n} + c_2^2 L_6 (u^{(0)})^{-2} E_2^{2n} + \\
& + c_1^2 L_7 (u^{(0)})^{-1} E_1^{2n} + c_1^2 c_2 L_8 (u^{(0)})^{-2} E_1^{2n} E_2^n + \\
& + c_1^2 c_2^2 L_9 (u^{(0)})^{-3} E_1^{2n} E_2^{2n},
\end{aligned} \tag{2.4}
$$

де

$$H_1 = \sqrt{6} - 1/2\, h^{(0)} w_{21}^{(0)},$$



$$
\begin{aligned}
& H_2 = \sqrt{6}\, w_{12}^{(0)} - 1/2\, h^{(0)}, \\
& H_3 = \sqrt{6}\, w_{13}^{(0)} - 1/2\, h^{(0)} w_{23}^{(0)}, \\
& H_4 = 3/4\, h^{(0)} w_{21}^{(0)} - \sqrt{6}/2 \left(1 + w_{12}^{(0)} w_{21}^{(0)}\right), \\
& H_5 = 3\sqrt{6}/4 \left(1/2 + w_{12}^{(0)} w_{21}^{(0)} - 5/(4\sqrt{6})\, h^{(0)} w_{21}^{(0)}\right), \\
& H_6 = 1/2 \left(3/4\, h^{(0)} - \sqrt{6}\, w_{12}^{(0)}\right), \\
& H_7 = w_{21}^{(0)}/2 \left(3/4\, h^{(0)} w_{21}^{(0)} - \sqrt{6}\right), \\
& H_8 = 3\sqrt{6}/4\, w_{21}^{(0)} \left(1 + 1/2\, w_{12}^{(0)} w_{21}^{(0)} - 5/(4\sqrt{6})\, h^{(0)} w_{21}^{(0)}\right), \\
& H_9 = 15\sqrt{6}/16\, w_{21}^{(0)} \left(7/(4\sqrt{6})\, h^{(0)} w_{21}^{(0)} - 1 - w_{12}^{(0)} w_{21}^{(0)}\right); \\
& L_1 = \sqrt{6}/15\, w_{31}^{(0)} - 3/2\, \alpha^{(0)} w_{21}^{(0)}, \\
& L_2 = \sqrt{6}/15\, w_{32}^{(0)} - 3/2\, \alpha^{(0)}, \\
& L_3 = \sqrt{6}/15 - 3/2\, \alpha^{(0)} w_{23}^{(0)}, \\
& L_4 = 15/4\, \alpha^{(0)} w_{21}^{(0)} - \sqrt{6}/10 \left(w_{31}^{(0)} + w_{21}^{(0)} w_{32}^{(0)}\right), \\
& L_5 = \sqrt{6}/4 \left(1/2\, w_{31}^{(0)} + w_{21}^{(0)} w_{32}^{(0)} - 105/(4\sqrt{6})\, \alpha^{(0)} w_{21}^{(0)}\right), \\
& L_6 = 1/2 \left(15/4\, \alpha^{(0)} - \sqrt{6}/5\, w_{32}^{(0)}\right), \\
& L_7 = w_{21}^{(0)}/2 \left(15/4\, \alpha^{(0)} w_{21}^{(0)} - \sqrt{6}/5\, w_{31}^{(0)}\right), \\
& L_8 = \sqrt{6}/4\, w_{21}^{(0)} \left(w_{31}^{(0)} + 1/2\, w_{21}^{(0)} w_{32}^{(0)} - 105/(4\sqrt{6}) \alpha^{(0)} w_{21}^{(0)}\right), \\
& L_9 = 7\sqrt{6}/16\, w_{21}^{(0)} \left(45/(4\sqrt{6})\, \alpha^{(0)} w_{21}^{(0)} - w_{31}^{(0)} - w_{21}^{(0)} w_{32}^{(0)}\right).
\end{aligned} \tag{2.5}
$$

Вирази для $u^{(0)}$, $w_{il}^{(0)}$, $c_1$, $c_2$, $c_3$ містяться у додатку (див. (Д.6),(Д.9), (Д.11), (Д.13)). Відмітимо, що в записаних вище виразах для $h_n$ і $\alpha_n$ (див. (2.4)) якісно новим членом, пропорціональним $E_3^n$, який появляється для моделі $\rho^6$ , можна знехтувати ($E_3$ несуттєве в порівнянні з $E_1$, $E_2$ (див. таблицю 5, додаток)). З врахуванням (2.4) парціальна вільна енергія $n$-го шару фазового простору КЗ запишеться у вигляді

$$
\begin{aligned}
F_n = -kTN' s^{-3n} \Big[ & f_{\rm KP}^{(0)} + f_{\rm KP}^{(1)} (u^{(0)})^{-1/2} c_1 E_1^n + f_{\rm KP}^{(2)} (u^{(0)})^{-1} c_2 E_2^n + \\
& + f_{\rm KP}^{(3)} (u^{(0)})^{-3/2} c_3 E_3^n + f_{\rm KP}^{(4)} (u^{(0)})^{-3/2} c_1 c_2 E_1^n E_2^n + \\
& + f_{\rm KP}^{(5)} (u^{(0)})^{-5/2} c_1 c_2^2 E_1^n E_2^{2n} + f_{\rm KP}^{(6)} (u^{(0)})^{-2} c_2^2 E_2^{2n} +
\end{aligned} \tag{2.6}
$$

$$+f_{\text{KP}}^{(7)}(u^{(0)})^{-1}c_1^2E_1^{2n}+f_{\text{KP}}^{(8)}(u^{(0)})^{-2}c_1^2c_2E_1^{2n}E_2^n+$$
$$+f_{\text{KP}}^{(9)}(u^{(0)})^{-3}c_1^2c_2^2E_1^{2n}E_2^{2n}\Big].$$

Тут

$$\begin{aligned}
f_{\text{KP}}^{(k)} &= H_k\left(\varphi_3+\varphi_1/E_k\right)+L_k\left(\varphi_4+\varphi_2/E_k\right), \qquad k=1,2,3,\\
f_{\text{KP}}^{(4)} &= H_4\left[\varphi_3+\varphi_1/(E_1E_2)\right]+L_4\left[\varphi_4+\varphi_2/(E_1E_2)\right]+\\
&+2H_1H_2\left[\varphi_3'+\varphi_1'/(E_1E_2)\right]+2L_1L_2\left[\varphi_4'+\varphi_2'/(E_1E_2)\right]+\\
&+\left(H_1L_2+H_2L_1\right)\left[\varphi_6'+\varphi_5'/(E_1E_2)\right],\\
f_{\text{KP}}^{(5)} &= H_5\left[\varphi_3+\varphi_1/(E_1E_2^2)\right]+L_5\left[\varphi_4+\varphi_2/(E_1E_2^2)\right]+\\
&+2\left(H_1H_6+H_2H_4\right)\left[\varphi_3'+\varphi_1'/(E_1E_2^2)\right]+2\left(L_1L_6+L_2L_4\right)\times\\
&\times\left[\varphi_4'+\varphi_2'/(E_1E_2^2)\right]+\left(H_1L_6+H_6L_1+H_2L_4+H_4L_2\right)\times\\
&\times\left[\varphi_6'+\varphi_5'/(E_1E_2^2)\right],\\
f_{\text{KP}}^{(6)} &= H_6\left(\varphi_3+\varphi_1/E_2^2\right)+L_6\left(\varphi_4+\varphi_2/E_2^2\right)+H_2^2\left(\varphi_3'+\varphi_1'/E_2^2\right)+\\
&+L_2^2\left(\varphi_4'+\varphi_2'/E_2^2\right)+H_2L_2\left(\varphi_6'+\varphi_5'/E_2^2\right), \qquad (2.7)\\
f_{\text{KP}}^{(7)} &= H_7\left(\varphi_3+\varphi_1/E_1^2\right)+L_7\left(\varphi_4+\varphi_2/E_1^2\right)+H_1^2\left(\varphi_3'+\varphi_1'/E_1^2\right)+\\
&+L_1^2\left(\varphi_4'+\varphi_2'/E_1^2\right)+H_1L_1\left(\varphi_6'+\varphi_5'/E_1^2\right),\\
f_{\text{KP}}^{(8)} &= H_8\left[\varphi_3+\varphi_1/(E_1^2E_2)\right]+L_8\left[\varphi_4+\varphi_2/(E_1^2E_2)\right]+\\
&+2(H_1H_4+H_2H_7)\left[\varphi_3'+\varphi_1'/(E_1^2E_2)\right]+2(L_1L_4+L_2L_7)\times\\
&\times\left[\varphi_4'+\varphi_2'/(E_1^2E_2)\right]+\left(H_1L_4+H_4L_1+H_2L_7+H_7L_2\right)\times\\
&\times\left[\varphi_6'+\varphi_5'/(E_1^2E_2)\right],\\
f_{\text{KP}}^{(9)} &= H_9\left[\varphi_3+\varphi_1/(E_1E_2)^2\right]+L_9\left[\varphi_4+\varphi_2/(E_1E_2)^2\right]+\\
&+(2H_1H_5+2H_2H_8+H_4^2+2H_6H_7)\left[\varphi_3'+\varphi_1'/(E_1E_2)^2\right]+\\
&+(2L_1L_5+2L_2L_8+L_4^2+2L_6L_7)\left[\varphi_4'+\varphi_2'/(E_1E_2)^2\right]+\\
&+(H_1L_5+H_5L_1+H_2L_8+H_8L_2+H_4L_4+H_6L_7+\\
&+H_7L_6)\left[\varphi_6'+\varphi_5'/(E_1E_2)^2\right].
\end{aligned}$$

Таким чином, парціальна вільна енергія $n$-го шару $F_n$ складається із незалежної від номера шару $n$ частини $f_{\text{KP}}^{(0)}$, яка є універсальною величиною, і доданків, що містять залежність від $n$. На відміну від $f_{\text{KP}}^{(0)}$ вони залежать від мікроскопічних параметрів гамільтоніану системи.



Здійснюючи сумування виразу для $F_n$ (2.6) по шарах фазового простору КЗ, обчислюємо $F_{\text{KP}}$ :

$$\begin{aligned}
F_{\text{KP}} &= F_0'+F_{\text{KP}}',\\
F_0' &= -kTN'[\ln Q(\mathcal{M})+\ln Q(d)], \qquad (2.8)\\
F_{\text{KP}}' &= \sum_{n=1}^{m_\tau}F_n.
\end{aligned}$$

Номер шару $m_\tau$, що визначає точку виходу системи із ділянки КР при $T>T_c$, знаходимо із умови

$$\frac{r_{m_\tau+1}-r^{(0)}}{r^{(0)}}=-\delta, \qquad (2.9)$$

де $\delta$ – постійна величина ($\delta\leq 1$). На основі (2.9) і виразу для $r_n$ із (Д.4) (див. додаток) при $n=m_\tau+1$ одержуємо явний вигляд рівняння для $m_\tau$:

$$\tilde{c}_1\tau E_1^{m_\tau+1}=f_0\delta-c_{20}w_{12}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}E_2^{m_\tau+1}-c_{30}w_{13}^{(0)}\varphi_0^{-1}E_3^{m_\tau+1}. \qquad (2.10)$$

Величини, що входять в (2.10), приводяться у додатку. В області $\tau<<1$ при розв'язуванні рівняння (2.10) зручно скористатись методом послідовних наближень, приймаючи до уваги, що $E_2^{m_\tau+1}<<1$, $E_3^{m_\tau+1}<<1$. У нульовому наближенні (2.10) представляється у вигляді рівняння

$$\tilde{c}_1\tau E_1^{m_\tau^{(0)}+1}=f_0\delta, \qquad (2.11)$$

розв'язком якого є вираз

$$m_\tau^{(0)}=-\frac{\ln\tau}{\ln E_1}+m_0-1. \qquad (2.12)$$

Тут

$$m_0=m_c, \qquad m_c=\frac{\ln(f_0\delta/\tilde{c}_1^{(0)})}{\ln E_1}. \qquad (2.13)$$

Вираз для $\tilde{c}_1^{(0)}$ подано у додатку (див.(Д.18)). Перше наближення записується з врахуванням малості доданків, пропорціональних $E_2^{m_\tau+1}$, $E_3^{m_\tau+1}$, для яких використовується нульове наближення, тобто права частина рівняння (2.10) буде включати члени, пропорціональні $E_2^{m_\tau^{(0)}+1}=E_2^{m_0}\tau^{\Delta_1}$, $E_3^{m_\tau^{(0)}+1}=E_3^{m_0}\tau^{\Delta_2}$:

$$\begin{aligned}
\tilde{c}_1\tau E_1^{m_\tau+1} &= f_0\delta-c_{20}w_{12}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}E_2^{m_\tau^{(0)}+1}- \qquad (2.14)\\
&-c_{30}w_{13}^{(0)}\varphi_0^{-1}E_3^{m_\tau^{(0)}+1}.
\end{aligned}$$

Зауважимо, що в правій частині рівняння (2.14) ми опускатимемо доданок, пропорціональний $E_3^{m_\tau^{(0)}+1}$, оскільки в розрахунках ми будемо враховувати тільки першу конфлуентну поправку (визначається доданком, пропорціональним $\tau^{\Delta_1}$, $\Delta_1 = -\ln E_2/\ln E_1$) і нехтуватимемо другою конфлуентною поправкою (визначається доданком, пропорціональним $\tau^{\Delta_2}$, $\Delta_2 = -\ln E_3/\ln E_1$). Це пов'язано із тим, що вклад першої конфлуентної поправки є істотнішим в порівнянні з незначним внеском другої поправки в термодинамічні функції моделі поблизу $T_c$ ($\tau << 1$, $\Delta_1$ порядку 0.5, $\Delta_2 > 2$, див. [10]). Розв'язуючи (2.14), одержуємо

$$\begin{aligned} m_\tau &= m_\tau^{(0)} + m_{\Delta_1}\tau^{\Delta_1}, \\ m_{\Delta_1} &= \frac{m_2}{\ln E_1}, \qquad m_2 = -c_{\Delta_1}\Phi_0, \\ c_{\Delta_1} &= c_{20}^{(0)}\left(\frac{\tilde{c}_1^{(0)}}{f_0\delta}\right)^{\Delta_1}, \qquad \Phi_0 = \frac{w_{12}^{(0)}}{f_0\delta\sqrt{\varphi_0}}. \end{aligned} \tag{2.15}$$

Величина $c_{20}^{(0)}$ приводиться у додатку (див.(Д.19)). Слід відмітити, що у вищому наближенні рівняння (2.10) приводить до розв'язку типу (2.15), де додатково виникають доданки, пропорціональні $\tau^{2\Delta_1}$ і т.д., якими в даних обчисленнях будемо нехтувати.

Тепер, маючи вираз для $m_\tau$ (2.15), повернемось до обчислення $F_{\text{КР}}$ (2.8). Враховуючи (2.15), а також співвідношення

$$\begin{aligned} E_1^{m_\tau+1} &= \frac{f_0\delta(1+m_2\tau^{\Delta_1})}{\tilde{c}_1\tau}, \\ E_2^{m_\tau^{(0)}+1} &= \left(\frac{\tilde{c}_1^{(0)}}{f_0\delta}\right)^{\Delta_1}\tau^{\Delta_1}, \\ s^{-3(m_\tau+1)} &= s^{-3(m_\tau^{(0)}+1)}\left(1+\mathcal{N}_1^+\tau^{\Delta_1}\right), \\ s^{-3(m_\tau^{(0)}+1)} &= s^{-3m_0}\tau^{3\nu}, \quad s^{-3m_0} = c_\nu^3, \\ c_\nu &= \left(\frac{\tilde{c}_1^{(0)}}{f_0\delta}\right)^{\nu}, \quad \nu = \frac{\ln s}{\ln E_1}, \\ \mathcal{N}_1^+ &= -3\nu m_2 = 3\nu c_{\Delta_1}\Phi_0, \end{aligned} \tag{2.16}$$

знаходимо

$$\begin{aligned} F_{\text{КР}} = -kTN'\Big[&\gamma_0 + \delta_0 - \gamma_3^{(\text{КР})(0)+}\tau^{3\nu} - \\ &-\gamma_3^{(\text{КР})(1)+}\tau^{3\nu+\Delta_1}\Big], \end{aligned} \tag{2.17}$$



де

$$\begin{aligned} \gamma_0 = s^{-3}\Bigg[&\frac{f_{\text{КР}}^{(0)}}{1-s^{-3}} + \frac{f_{\text{КР}}^{(1)}\varphi_0^{-1/2}\tilde{c}_1\tau E_1}{1-E_1s^{-3}} + \frac{f_{\text{КР}}^{(2)}\varphi_0^{-1/2}c_{20}E_2}{1-E_2s^{-3}} + \\ &+\frac{f_{\text{КР}}^{(3)}\varphi_0^{-3/2}c_{30}E_3}{1-E_3s^{-3}} + \frac{f_{\text{КР}}^{(4)}\varphi_0^{-3/2}\tilde{c}_1\tau c_{20}E_1E_2}{1-E_1E_2s^{-3}} + \\ &+\frac{f_{\text{КР}}^{(5)}\varphi_0^{-5/2}\tilde{c}_1c_{20}^2\tau E_1E_2^2}{1-E_1E_2^2s^{-3}} + \frac{f_{\text{КР}}^{(6)}\varphi_0^{-2}c_{20}^2E_2^2}{1-E_2^2s^{-3}} + \\ &+\frac{f_{\text{КР}}^{(7)}\varphi_0^{-1}\tilde{c}_1^2\tau^2E_1^2}{1-E_1^2s^{-3}} + \frac{f_{\text{КР}}^{(8)}\varphi_0^{-2}\tilde{c}_1^2c_{20}\tau^2E_1^2E_2}{1-E_1^2E_2s^{-3}} + \\ &+\frac{f_{\text{КР}}^{(9)}\varphi_0^{-3}\tilde{c}_1^2c_{20}^2\tau^2E_1^2E_2^2}{1-E_1^2E_2^2s^{-3}}\Bigg], \\ \delta_0 = \ln Q(&\mathcal{M}) + \ln Q(d), \\ \gamma_3^{(\text{КР})(l)+} &= c_\nu^3c_{\Delta_1}^l\bar{\gamma}_3^{(\text{КР})(l)+}, \qquad l = 0,1, \\ \bar{\gamma}_3^{(\text{КР})(0)+} &= \gamma^+, \qquad \bar{\gamma}_3^{(\text{КР})(1)+} = \gamma_{\Delta_1}^+ - \Phi_0(\gamma_{11}^+ - 3\nu\gamma^+). \end{aligned} \tag{2.18}$$

Тут

$$\begin{aligned} \gamma^+ &= \frac{f_{\text{КР}}^{(0)}}{1-s^{-3}} + \frac{f_{\text{КР}}^{(1)}\varphi_0^{-1/2}f_0\delta}{1-E_1s^{-3}} + \frac{f_{\text{КР}}^{(7)}\varphi_0^{-1}(f_0\delta)^2}{1-E_1^2s^{-3}}, \\ \gamma_{\Delta_1}^+ &= \frac{f_{\text{КР}}^{(2)}\varphi_0^{-1}}{1-E_2s^{-3}} + \frac{f_{\text{КР}}^{(4)}\varphi_0^{-3/2}f_0\delta}{1-E_1E_2s^{-3}} + \frac{f_{\text{КР}}^{(8)}\varphi_0^{-2}(f_0\delta)^2}{1-E_1^2E_2s^{-3}}, \\ \gamma_{11}^+ &= \frac{f_{\text{КР}}^{(1)}\varphi_0^{-1/2}f_0\delta}{1-E_1s^{-3}} + \frac{2f_{\text{КР}}^{(7)}\varphi_0^{-1}(f_0\delta)^2}{1-E_1^2s^{-3}}. \end{aligned} \tag{2.19}$$

Зауважимо, що при одержанні виразу (2.17) в процесі сумування парціальних вільних енергій по шарах фазового простору КЗ члени, пропорціональні $E_2^{2(m_\tau^{(0)}+1)} \sim \tau^{2\Delta_1}$, $E_3^{m_\tau^{(0)}+1} \sim \tau^{\Delta_2}$, не враховувались.

Величини $\gamma_0$ і $\delta_0$ (2.18) є функціями температури, так як виражаються через $\tilde{c}_1$, $c_{20}$, $c_{30}$ (див. (Д.18), (Д.19), (Д.20), додаток), а також $Q(d)$ (див. (1.8) при $n = 0$). Виділимо в них залежність від температури. В результаті для коефіцієнта $\gamma_0$ запишемо

$$\begin{aligned} \gamma_0 &= \gamma_0^{(0)} + \gamma_0^{(1)}\tau + \gamma_0^{(2)}\tau^2, \\ \gamma_0^{(0)} &= s^{-3}\left[\frac{f_{\text{КР}}^{(0)}}{1-s^{-3}} + \frac{f_{\text{КР}}^{(2)}\varphi_0^{-1}\tilde{c}_{20}^{(0)}E_2}{1-E_2s^{-3}} + \frac{f_{\text{КР}}^{(3)}\varphi_0^{-3/2}c_{30}^{(0)}E_3}{1-E_3s^{-3}} + \right. \end{aligned}$$

$$
\left. + \frac{f^{(6)}_{\mathrm{KP}}\varphi_0^{-2}(c_{20}^{(0)})^2 E_2^2}{1-E_2^2 s^{-3}} \right],
$$

$$
\begin{aligned}
\gamma_0^{(1)} &= s^{-3}\left[\frac{f^{(1)}_{\mathrm{KP}}\varphi_0^{-1/2}\tilde{c}_1^{(0)}E_1}{1-E_1 s^{-3}} + \frac{f^{(2)}_{\mathrm{KP}}\varphi_0^{-1}c_{20}^{(1)}E_2}{1-E_2 s^{-3}} + \right. \\
&+ \frac{f^{(3)}_{\mathrm{KP}}\varphi_0^{-3/2}c_{30}^{(1)}E_3}{1-E_3 s^{-3}} + \frac{f^{(4)}_{\mathrm{KP}}\varphi_0^{-3/2}\tilde{c}_1^{(0)}c_{20}^{(0)}E_1E_2}{1-E_1E_2 s^{-3}} + \\
&\left. + \frac{f^{(5)}_{\mathrm{KP}}\varphi_0^{-5/2}\tilde{c}_1^{(0)}(c_{20}^{(0)})^2 E_1E_2^2}{1-E_1E_2^2 s^{-3}} + \frac{2f^{(6)}_{\mathrm{KP}}\varphi_0^{-2}c_{20}^{(0)}c_{20}^{(1)}E_2^2}{1-E_2^2 s^{-3}}\right], \qquad (2.20) \\
\gamma_0^{(2)} &= s^{-3}\left[\frac{f^{(1)}_{\mathrm{KP}}\varphi_0^{-1/2}\tilde{c}_1^{(1)}E_1}{1-E_1 s^{-3}} + \frac{f^{(2)}_{\mathrm{KP}}\varphi_0^{-1}c_{20}^{(2)}E_2}{1-E_2 s^{-3}} + \right. \\
&+ \frac{f^{(3)}_{\mathrm{KP}}\varphi_0^{-3/2}c_{30}^{(2)}E_3}{1-E_3 s^{-3}} + \frac{f^{(4)}_{\mathrm{KP}}\varphi_0^{-3/2}(\tilde{c}_1^{(0)}c_{20}^{(1)} + \tilde{c}_1^{(1)}c_{20}^{(0)})E_1E_2}{1-E_1E_2 s^{-3}} + \\
&+ \frac{f^{(5)}_{\mathrm{KP}}\varphi_0^{-5/2}\left[2\tilde{c}_1^{(0)}c_{20}^{(0)}c_{20}^{(1)} + \tilde{c}_1^{(1)}(c_{20}^{(0)})^2\right]E_1E_2^2}{1-E_1E_2^2 s^{-3}} + \\
&+ \frac{f^{(6)}_{\mathrm{KP}}\varphi_0^{-2}\left[(c_{20}^{(1)})^2 + 2c_{20}^{(0)}c_{20}^{(2)}\right]E_2^2}{1-E_2^2 s^{-3}} + \\
&+ \frac{f^{(7)}_{\mathrm{KP}}\varphi_0^{-1}(\tilde{c}_1^{(0)})^2E_1^2}{1-E_1^2 s^{-3}} + \frac{f^{(8)}_{\mathrm{KP}}\varphi_0^{-2}(\tilde{c}_1^{(0)})^2c_{20}^{(0)}E_1^2E_2}{1-E_1^2E_2 s^{-3}} + \\
&\left. + \frac{f^{(9)}_{\mathrm{KP}}\varphi_0^{-3}(\tilde{c}_1^{(0)})^2(\tilde{c}_{20}^{(0)})^2E_1^2E_2^2}{1-E_1^2E_2^2 s^{-3}}\right].
\end{aligned}
$$

Для $\delta_0$ одержуємо

$$
\begin{aligned}
\delta_0 &= \delta_0^{(0)} + \delta_0^{(1)}\tau + \delta_0^{(2)}\tau^2, \\
\delta_0^{(0)} &= \ln Q(\mathcal{M}) + \ln Q(d;T_c), \\
\delta_0^{(1)} &= -\frac{\sqrt{6}}{(a_4')^{1/2}}(1-\bar{q})\beta_c\tilde{\Phi}(0)F_2(h_c,\alpha), \qquad (2.21) \\
\delta_0^{(2)} &= -\frac{3}{a_4'}(1-\bar{q})^2(\beta_c\tilde{\Phi}(0))^2\left[F_2^2(h_c,\alpha) - F_4(h_c,\alpha)\right] + \\
&+ \frac{\sqrt{6}}{(a_4')^{1/2}}(1-\bar{q})\beta_c\tilde{\Phi}(0)F_2(h_c,\alpha), \\
h_c &= \frac{\sqrt{6}}{(a_4')^{1/2}}\left[a_2' - \beta_c\tilde{\Phi}(0)(1-\bar{q})\right], \qquad \alpha = \frac{\sqrt{6}}{15}\frac{a_6'}{(a_4')^{3/2}}.
\end{aligned}
$$



Таким чином, для вільної енергії КР маємо

$$
\begin{aligned}
F_{\mathrm{KP}} &= -kTN'\left[\gamma_0^{(\mathrm{KP})} + \gamma_1\tau + \gamma_2\tau^2 - \gamma_3^{(\mathrm{KP})(0)+}\tau^{3\nu} - \right. \\
&\left. -\gamma_3^{(\mathrm{KP})(1)+}\tau^{3\nu+\Delta_1}\right], \qquad (2.22) \\
\gamma_0^{(\mathrm{KP})} &= \gamma_0^{(0)} + \delta_0^{(0)}, \\
\gamma_k &= \gamma_0^{(k)} + \delta_0^{(k)}, \qquad k=1,2.
\end{aligned}
$$

Коефіцієнти $\gamma_0^{(\mathrm{KP})}$, $\gamma_1$, $\gamma_2$ (див.(2.22)), як і $m_2$ та $\mathcal{N}_1^+$ (див. (2.15), (2.16)), є неуніверсальними, оскільки в них входять величини $\tilde{c}_1^{(l)}$, $c_{20}^{(i)}$, $c_{30}^{(i)}$ ($l=0,1; i=0,1,2$), які залежать від мікроскопічних параметрів гамільтоніану. Коефіцієнти $\gamma_3^{(\mathrm{KP})(l)+}$ ($l=0,1$) приведені в (2.18). Тут величини $\bar{\gamma}_3^{(\mathrm{KP})(l)+}$ не залежать від мікроскопічних параметрів, тобто універсальні по відношенню до цих параметрів. Залежні від останніх множники $c_\nu$, $c_{\Delta_1}$, а також $s_0$ приведені в таблиці 1. Розрахунки виконано для деяких $s$, середнього арифметичного усереднення фур'є-образу потенціалу взаємодії і $\delta=1$. Числові дані подаються для різних значень радіуса ефективної дії $b$ потенціалу. Величина $b=b_I=c/(2\sqrt{3})$ відповідає взаємодії найближчих сусідів, $b=b_{II}=0.3379c$ – перших і других сусідів, $b=b_{III}=0.3584c$ – перших, других і третіх сусідів.

Табл. 1: Неуніверсальні множники $c_\nu$, $c_{\Delta_1}$, а також $s_0$ при різних значеннях радіуса дії $b$ потенціалу взаємодії та параметра РГ $s$.

| $b$ | $b_I$ | $b_{II}$ | $b_{III}$ | $c$ | $2c$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $s_0$ | 1.2825 | 1.5011 | 1.5922 | 4.4429 | 8.8858 |
| $s=2.0000$ | | | | | |
| $c_\nu$ | 1.7006 | 1.6514 | 1.6318 | 1.4412 | 1.4303 |
| $c_{\Delta_1}$ | −0.1130 | −0.1637 | −0.1828 | −0.3386 | −0.3464 |
| $s=2.7349$ | | | | | |
| $c_\nu$ | 1.4168 | 1.3764 | 1.3605 | 1.2097 | 1.2011 |
| $c_{\Delta_1}$ | −0.2671 | −0.3075 | −0.3227 | −0.4468 | −0.4530 |
| $s=3.0000$ | | | | | |
| $c_\nu$ | 1.3373 | 1.2997 | 1.2849 | 1.1462 | 1.1383 |
| $c_{\Delta_1}$ | −0.3243 | −0.3629 | −0.3774 | −0.4952 | −0.5012 |

Використовуючи $F_{\mathrm{KP}}$, обчислимо інші термодинамічні функції системи в області КР при $T>T_c$. Для ентропії $S_{\mathrm{KP}}=-\partial F_{\mathrm{KP}}/\partial T$, внутрішньої енергії $U_{\text{КР}} = F_{\text{КР}} + TS_{\text{КР}}$ і теплоємності $C_{\text{КР}} = T\partial S_{\text{КР}}/\partial T$ знаходимо

$$\begin{aligned} S_{\text{КР}} &= kN'\left[s^{(\text{КР})(0)} + c_0\tau + u_3^{(\text{КР})(0)+}\tau^{1-\alpha} + \right. \\ &\left. + u_3^{(\text{КР})(1)+}\tau^{1-\alpha+\Delta_1}\right], \\ U_{\text{КР}} &= kTN'\left[\gamma_1 + u_1\tau + u_3^{(\text{КР})(0)+}\tau^{1-\alpha} + \right. \\ &\left. + u_3^{(\text{КР})(1)+}\tau^{1-\alpha+\Delta_1}\right], \\ C_{\text{КР}} &= kN'\left[c_0 + c_3^{(\text{КР})(0)+}\tau^{-\alpha} + c_3^{(\text{КР})(1)+}\tau^{\Delta_1-\alpha}\right], \end{aligned} \tag{2.23}$$

де

$$\begin{aligned} s^{(\text{КР})(0)} &= \gamma_0^{(\text{КР})} + \gamma_1, \qquad c_0 = 2(\gamma_1 + \gamma_2), \\ u_3^{(\text{КР})(l)+} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{u}_3^{(\text{КР})(l)+}, \qquad l = 0, 1, \\ \bar{u}_3^{(\text{КР})(0)+} &= -3\nu\bar{\gamma}_3^{(\text{КР})(0)+}, \\ \bar{u}_3^{(\text{КР})(1)+} &= -(3\nu + \Delta_1)\bar{\gamma}_3^{(\text{КР})(1)+}, \\ u_1 &= \gamma_1 + 2\gamma_2, \\ c_3^{(\text{КР})(l)+} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{c}_3^{(\text{КР})(l)+}, \\ \bar{c}_3^{(\text{КР})(0)+} &= -3\nu(3\nu - 1)\bar{\gamma}_3^{(\text{КР})(0)+}, \\ \bar{c}_3^{(\text{КР})(1)+} &= -(3\nu + \Delta_1)(3\nu + \Delta_1 - 1)\bar{\gamma}_3^{(\text{КР})(1)+}, \\ \alpha &= 2 - 3\nu. \end{aligned} \tag{2.24}$$

## 3. Розрахунок вкладу в термодинамічні характеристики системи від довгохвильових мод коливань густини спінового моменту

Обчислення вкладу у вільну енергію тривимірної моделі Ізінга від довгохвильових фаз флуктуацій густини спінового моменту ($k < B's^{-m_\tau}$) з врахуванням першої конфлуентної поправки здійснюється по схемі, запропонованій в [1,10,14]. Після виходу із КР система переходить в ГГР. В області ГГР вираз частини статистичної суми $Z_{\text{ГГР}}$ із (2.1) має вигляд

$$\begin{aligned} Z_{\text{ГГР}} = \int \exp\Bigg\{ &-\frac{1}{2}\sum_{k\le B_{m_\tau+1}} \left[d_{m_\tau}(k) - d_{m_\tau}(B_{m_\tau+1}, B_{m_\tau})\right]\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}} - \\ &-2\pi i \sum_{k\le B_{m_\tau+1}} \omega_{\mathbf{k}}\rho_{\mathbf{k}} - \frac{(2\pi)^2}{2}\sum_{k\le B_{m_\tau+1}} P_2^{(m_\tau)}\omega_{\mathbf{k}}\omega_{-\mathbf{k}} - \\ &-\sum_{l=2}^{3}\frac{(2\pi)^{2l}}{(2l)!}N_{m_\tau+1}^{1-l}\sum_{k_1,\dots,k_{2l}\le B_{m_\tau+1}} P_{2l}^{(m_\tau)}\omega_{\mathbf{k}_1}\cdots\omega_{\mathbf{k}_{2l}} \times \\ &\times \delta_{\mathbf{k}_1+\dots+\mathbf{k}_{2l}}\Bigg\}(d\rho)^{N_{m_\tau+1}}(d\omega)^{N_{m_\tau+1}}. \end{aligned} \tag{3.1}$$



При розрахунку $Z_{\text{ГГР}}$ зручно виділити дві області значень хвильових векторів. Перша – перехідна область (ПО), яка відповідає значенням $\mathbf{k}$, близьким до $B_{m_\tau}$, друга – гаусова область, що відноситься до малих значень хвильового вектора ($k \to 0$). Після інтегрування статистичної суми в декількох шарах фазового простору КЗ, які слідують за точкою виходу із КР і визначають величину ПО, система описується гаусовою густиною міри. Таким чином, маємо

$$Z_{\text{ГГР}} = Z_{\text{ГГР}}^{(1)} Z_{\text{ГГР}}^{(2)}. \tag{3.2}$$

### 3.1. Перехідна область (ПО)

Ця область відповідає $\tilde{m}_0$ шарам фазового простору КЗ. Нижня границя ПО визначається точкою виходу системи із ділянки КР ($n = m_\tau + 1$). Верхня границя відповідає шару $m_\tau + \tilde{m}_0 + 1$. Остання визначає початок гаусової області, де справедливий гаусовий розподіл фаз флуктуацій. Характерною особливістю гаусового розподілу є ріст величини $h_n$. Тому умовою для отримання $\tilde{m}_0$ служить рівність

$$|\, h_{m_\tau+\tilde{m}_0'} \,| = \frac{A_0}{1 - s^{-3}}, \tag{3.3}$$

де $A_0$ – велике число ($A \geq 10$). Знайдене із (3.3) $\tilde{m}_0'$ і визначає число $\tilde{m}_0$.

Обчислимо вклад $F_{\text{ГГР}}^{(1)}$ у вільну енергію від шарів фазового простору КЗ безпосередньо після точки виходу із КР, який відповідає вкладу $Z_{\text{ГГР}}^{(1)}$ в статистичну суму від ПО. Він має вигляд

$$\begin{aligned} F_{\text{ГГР}}^{(1)} &= -kTN_{m_\tau+1}\sum_{m=0}^{\tilde{m}_0} s^{-3m} f_{\text{ГГР}_1}(m), \\ f_{\text{ГГР}_1}(m) &= \ln\left(\frac{2}{\pi}\right) + \frac{1}{4}\ln 24 - \frac{1}{4}\ln C(\eta_{m_\tau+m}, \xi_{m_\tau+m}) + \\ &+ \ln I_0(h_{m_\tau+m+1}, \alpha_{m_\tau+m+1}) + \ln I_0(\eta_{m_\tau+m}, \xi_{m_\tau+m}). \end{aligned} \tag{3.4}$$

Із робіт [1,16–19], які містять результати по числовому розрахунку статистичної суми моделі Ізінга і дослідженні РС, слідує, що в ПО еволюцію коефіцієнтів ефективних густин мір достатньо добре описують розв'язки РГ типу. Тому $F^{(1)}_{\text{ГГР}}$ будемо розраховувати з використанням розв'язків (Д.4) РС (Д.2) (див. додаток).

На основі (Д.4) одержуємо

$$\begin{aligned}
r_{m_\tau+m} &= \beta\tilde{\Phi}(0)\left(\bar{r}^{(0)}_{m_\tau+m} + \bar{r}^{(1)}_{m_\tau+m}\tau^{\Delta_1}\right),\\
\bar{r}^{(0)}_{m_\tau+m} &= f_0(\delta E_1^{m-1} - 1),\\
\bar{r}^{(1)}_{m_\tau+m} &= c_{\Delta_1} E_2^{m-1}\varphi_0^{-1/2} w_{12}^{(0)} e_{1m},\\
e_{1m} &= 1 - (E_1/E_2)^{m-1};\\
u_{m_\tau+m} &= (\beta\tilde{\Phi}(0))^2\left(\bar{u}^{(0)}_{m_\tau+m} + \bar{u}^{(1)}_{m_\tau+m}\tau^{\Delta_1}\right),\\
\bar{u}^{(0)}_{m_\tau+m} &= \varphi_0 + f_0\delta\varphi_0^{1/2} w_{21}^{(0)} E_1^{m-1},\\
\bar{u}^{(1)}_{m_\tau+m} &= c_{\Delta_1} E_2^{m-1} e_{2m},\\
e_{2m} &= 1 - w_{12}^{(0)} w_{21}^{(0)} (E_1/E_2)^{m-1};\\
w_{m_\tau+m} &= (\beta\tilde{\Phi}(0))^3\left(\bar{w}^{(0)}_{m_\tau+m} + \bar{w}^{(1)}_{m_\tau+m}\tau^{\Delta_1}\right),\\
\bar{w}^{(0)}_{m_\tau+m} &= \psi_0 + f_0\delta\varphi_0 w_{31}^{(0)} E_1^{m-1},\\
\bar{w}^{(1)}_{m_\tau+m} &= c_{\Delta_1} E_2^{m-1}\varphi_0^{1/2} w_{32}^{(0)} e_{3m},\\
e_{3m} &= 1 - \frac{w_{12}^{(0)} w_{31}^{(0)}}{w_{32}^{(0)}}(E_1/E_2)^{m-1}.
\end{aligned} \tag{3.5}$$

Використовуючи (1.9), (Д.1), (3.5), для основних аргументів знаходимо

$$\begin{aligned}
h_{m_\tau+m} &= h^{(0)}_{m_\tau+m}\left(1 + h^{(1)}_{m_\tau+m}\tau^{\Delta_1}\right),\\
h^{(0)}_{m_\tau+m} &= \sqrt{6}\,\frac{\bar{r}^{(0)}_{m_\tau+m} + \bar{q}}{(\bar{u}^{(0)}_{m_\tau+m})^{1/2}},\\
h^{(1)}_{m_\tau+m} &= c_{\Delta_1}\bar{h}^{(1)}_{m_\tau+m},\\
\bar{h}^{(1)}_{m_\tau+m} &= E_2^{m-1}\varphi_0^{-1/2}\left(\frac{w_{12}^{(0)} e_{1m}}{\bar{r}^{(0)}_{m_\tau+m} + \bar{q}} - \frac{1}{2}\,\frac{\varphi_0^{1/2} e_{2m}}{\bar{u}^{(0)}_{m_\tau+m}}\right);\\
\alpha_{m_\tau+m} &= \alpha^{(0)}_{m_\tau+m}\left(1 + \alpha^{(1)}_{m_\tau+m}\tau^{\Delta_1}\right),\\
\alpha^{(0)}_{m_\tau+m} &= \frac{\sqrt{6}}{15}\,\frac{\bar{w}^{(0)}_{m_\tau+m}}{(\bar{u}^{(0)}_{m_\tau+m})^{3/2}},\\
\alpha^{(1)}_{m_\tau+m} &= c_{\Delta_1}\bar{\alpha}^{(1)}_{m_\tau+m},\\
\bar{\alpha}^{(1)}_{m_\tau+m} &= E_2^{m-1}\varphi_0^{1/2}\left(\frac{w_{32}^{(0)} e_{3m}}{\bar{w}^{(0)}_{m_\tau+m}} - \frac{3}{2}\,\frac{\varphi_0^{-1/2} e_{2m}}{\bar{u}^{(0)}_{m_\tau+m}}\right).
\end{aligned} \tag{3.6}$$



Тепер виділимо температурну залежність у виразах для проміжних аргументів

$$\begin{aligned}
\eta_{m_\tau+m} &= (6s^3)^{1/2} F_2(h_{m_\tau+m},\alpha_{m_\tau+m})\times\\
&\times [C(h_{m_\tau+m},\alpha_{m_\tau+m})]^{-1/2},\\
\xi_{m_\tau+m} &= \frac{\sqrt{6}}{15}\, s^{-3/2} N(h_{m_\tau+m},\alpha_{m_\tau+m})\times\\
&\times [C(h_{m_\tau+m},\alpha_{m_\tau+m})]^{-3/2}.
\end{aligned} \tag{3.7}$$

У $h_{m_\tau+m}$, $\alpha_{m_\tau+m}$ (3.6) суттєвими є перші доданки. Інші доданки в силу малості $\tau$ і $E_2$ відіграють незначну роль. Тому функції,що входять в (3.7), можна представляти у вигляді рядів за степенями малих відхилень $(h_{m_\tau+m} - h^{(0)}_{m_\tau+m})$, $(\alpha_{m_\tau+m} - \alpha^{(0)}_{m_\tau+m})$ і ми можемо використати результати роботи [15]. Остаточно одержимо

$$\begin{aligned}
\eta_{m_\tau+m} &= \eta^{(0)}_{m_\tau+m}\Big[1 - \Big(\bar{\eta}_1^{(m_\tau+m)} h^{(0)}_{m_\tau+m} h^{(1)}_{m_\tau+m} +\\
&+ \bar{\eta}_2^{(m_\tau+m)}\alpha^{(0)}_{m_\tau+m}\alpha^{(1)}_{m_\tau+m}\Big)\tau^{\Delta_1}\Big],\\
\xi_{m_\tau+m} &= \xi^{(0)}_{m_\tau+m}\Big[1 - \Big(\bar{\xi}_1^{(m_\tau+m)} h^{(0)}_{m_\tau+m} h^{(1)}_{m_\tau+m} +\\
&+ \bar{\xi}_2^{(m_\tau+m)}\alpha^{(0)}_{m_\tau+m}\alpha^{(1)}_{m_\tau+m}\Big)\tau^{\Delta_1}\Big].
\end{aligned} \tag{3.8}$$

Тут $\eta^{(0)}_{m_\tau+m}, \bar{\eta}_1^{(m_\tau+m)}, \bar{\eta}_2^{(m_\tau+m)}, \xi^{(0)}_{m_\tau+m}, \bar{\xi}_1^{(m_\tau+m)}, \bar{\xi}_2^{(m_\tau+m)}$ визначаються через величини $p_{ij}^{(m_\tau+m)}$ $(i = 2,4,6; j = 0,1,2)$, які є функціями $F_{2l}^{*(m_\tau+m)} = I_{2l}^{*(m_\tau+m)}/I_0^{*(m_\tau+m)}$, де

$$I_{2l}^{*(m_\tau+m)} = \int\limits_0^\infty x^{2l}\exp(-h^{(0)}_{m_\tau+m}x^2 - x^4 - \alpha^{(0)}_{m_\tau+m}x^6)\,dx. \tag{3.9}$$

Обчислюючи на основі приведених в [10,15] виразів функції, що входять в $f_{\text{ГГР}_1}(m)$ (3.4), отримуємо з точністю до $\tau^{\Delta_1}$ наступне співвідношення:

$$f_{\text{ГГР}_1}(m) = f^{(0)}_{\text{ГГР}_1}(m) + f^{(1)}_{\text{ГГР}_1}(m)\tau^{\Delta_1},$$

$$f^{(0)}_{\Gamma\Gamma\mathrm{P}_1}(m) = \ln\left(\frac{2}{\pi}\right) + \frac{1}{4}\ \ln 24 - \frac{1}{4}\ \ln C(\eta^{(0)}_{m_\tau+m}, \xi^{(0)}_{m_\tau+m}) +$$
$$+ \ln I_0(h^{(0)}_{m_\tau+m+1}, \alpha^{(0)}_{m_\tau+m+1}) + \ln I_0(\eta^{(0)}_{m_\tau+m}, \xi^{(0)}_{m_\tau+m}),$$
$$f^{(1)}_{\Gamma\Gamma\mathrm{P}_1}(m) = \varphi_1^{(m_\tau+m)} h^{(0)}_{m_\tau+m} h^{(1)}_{m_\tau+m} + \varphi_2^{(m_\tau+m)} \alpha^{(0)}_{m_\tau+m} \alpha^{(1)}_{m_\tau+m} +$$
$$+\varphi_3^{(m_\tau+m+1)} h^{(0)}_{m_\tau+m+1} h^{(1)}_{m_\tau+m+1} + \qquad (3.10)$$
$$+\varphi_4^{(m_\tau+m+1)} \alpha^{(0)}_{m_\tau+m+1} \alpha^{(1)}_{m_\tau+m+1},$$
$$\varphi_k^{(m_\tau+m)} = b_k^{(m_\tau+m)} + P_{4k}^{(m_\tau+m)}/4, \qquad k = 1, 2,$$
$$\varphi_3^{(m_\tau+m+1)} = -F_2^{*(m_\tau+m+1)}, \qquad \varphi_4^{(m_\tau+m+1)} = -F_6^{*(m_\tau+m+1)}.$$

Величини $b_k^{(m_\tau+m)}$, $P_{4k}^{(m_\tau+m)}$ залежать як від $F_{2l}^{*(m_\tau+m)}$, так і від $F_{2l}^{**(m_\tau+m)} = I_{2l}^{**(m_\tau+m)}/I_0^{**(m_\tau+m)}$, де

$$I_{2l}^{**(m_\tau+m)} = \int_0^\infty x^{2l} \exp(-\eta^{(0)}_{m_\tau+m} x^2 - x^4 - \xi^{(0)}_{m_\tau+m} x^6)\ dx. \qquad (3.11)$$

Для здійснення сумування по $m$ в $F^{(1)}_{\Gamma\Gamma\mathrm{P}}$ (3.4) необхідно мати $\tilde{m}_0$. Враховуючи у виразі для $h_{m_\tau+\tilde{m}'_0}$ (див. (3.6)) тільки перший доданок, згідно (3.3) знаходимо

$$\tilde{m}'_0 = \frac{\ln L_0 - \ln \delta}{\ln E_1} + 1,$$
$$L_0 = A_1 + (A_1^2 - A_2)^{1/2},$$
$$A_1 = 1 - \frac{\bar{q}}{f_0} + \frac{A_0^2 \varphi_0^{1/2} w_{21}^{(0)}}{12 f_0 (1 - s^{-3})^2}, \qquad (3.12)$$
$$A_2 = 1 - 2\frac{\bar{q}}{f_0} + \left(\frac{\bar{q}}{f_0}\right)^2 - \frac{A_0^2 \varphi_0}{6 f_0^2 (1 - s^{-3})^2}.$$

В розрахунках за $\tilde{m}_0$ вибирається найближче до $\tilde{m}'_0$ ціле число. Кінцевий результат для $F^{(1)}_{\Gamma\Gamma\mathrm{P}}$ (3.4) запишеться у вигляді

$$F^{(1)}_{\Gamma\Gamma\mathrm{P}} = -kTN' \left[ f^{(0)}_{\Pi\mathrm{O}} \tau^{3\nu} + f^{(1)}_{\Pi\mathrm{O}} \tau^{3\nu+\Delta_1} \right],$$
$$f^{(l)}_{\Pi\mathrm{O}} = c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{f}^{(l)}_{\Pi\mathrm{O}}, \qquad l = 0, 1, \qquad (3.13)$$
$$\bar{f}^{(0)}_{\Pi\mathrm{O}} = \sum_{m=0}^{\tilde{m}_0} s^{-3m} f^{(0)}_{\Gamma\Gamma\mathrm{P}_1}(m),$$
$$\bar{f}^{(1)}_{\Pi\mathrm{O}} = \bar{f}_{\Pi\mathrm{O}1} + 3\nu\Phi_0 \bar{f}^{(0)}_{\Pi\mathrm{O}}, \qquad \bar{f}_{\Pi\mathrm{O}1} = c_{\Delta_1}^{-1} \sum_{m=0}^{\tilde{m}_0} s^{-3m} f^{(1)}_{\Gamma\Gamma\mathrm{P}_1}(m).$$



Тепер приступимо до обчислення вкладу у вільну енергію системи від довгохвильових фаз флуктуацій в області хвильових векторів

$$k \le B' s^{-m'_\tau}, \qquad (3.14)$$
$$m'_\tau = m_\tau + \tilde{m}_0 + 2.$$

## 3.2. Область малих значень хвильового вектора ($k \to 0$)

Вводячи в розгляд нескінченно мале зовнішнє магнітне поле $\boldsymbol{\mathcal{H}}$ ($h = \mu_\mathrm{Б} \mathcal{H}$), для частини вільної енергії, що відповідає $Z^{(2)}_{\Gamma\Gamma\mathrm{P}}$ (див. (3.2)), одержуємо

$$F^{(2)}_{\Gamma\Gamma\mathrm{P}} = \frac{1}{2}\ kT \left[ N_{m'_\tau} \ln P_2^{(m'_\tau-1)} + \sum_{k=0}^{B_{m'_\tau}} \ln \tilde{d}_{m'_\tau}(k) - \frac{\beta^2 N h^2}{\tilde{d}_{m'_\tau}(0)} \right]. \qquad (3.15)$$

Тут

$$P_2^{(m'_\tau-1)} = 2h_{m'_\tau-1} F_2(h_{m'_\tau-1}, \alpha_{m'_\tau-1}) \times$$
$$\times \left[ d_{m'_\tau-1}(B_{m'_\tau}, B_{m'_\tau-1}) \right]^{-1}, \qquad (3.16)$$
$$\tilde{d}_{m'_\tau}(k) = [P_2^{(m'_\tau-1)}]^{-1} + \beta\tilde{\Phi}(B_{m'_\tau}, B_{m'_\tau-1}) - \beta\tilde{\Phi}(k).$$

Для $d_{m'_\tau-1}(B_{m'_\tau}, B_{m'_\tau-1})$ маємо стандартне представлення

$$d_{m'_\tau-1}(B_{m'_\tau}, B_{m'_\tau-1}) = s^{-2(m'_\tau-1)}(r_{m'_\tau-1} + q), \qquad (3.17)$$

де

$$r_{m'_\tau-1} = \beta\tilde{\Phi}(0) \left( \bar{r}^{(0)}_{m'_\tau-1} + \bar{r}^{(1)}_{m'_\tau-1} \tau^{\Delta_1} \right), \qquad (3.18)$$

а $\bar{r}^{(0)}_{m'_\tau-1}$, $\bar{r}^{(1)}_{m'_\tau-1}$ відповідають $\bar{r}^{(0)}_{m_\tau+m}$, $\bar{r}^{(1)}_{m_\tau+m}$ із (3.5) при $m = \tilde{m}_0 + 1$. В ролі

$$h_{m'_\tau-1} = h^{(0)}_{m'_\tau-1} \left( 1 + h^{(1)}_{m'_\tau-1} \tau^{\Delta_1} \right), \qquad (3.19)$$
$$\alpha_{m'_\tau-1} = \alpha^{(0)}_{m'_\tau-1} \left( 1 + \alpha^{(1)}_{m'_\tau-1} \tau^{\Delta_1} \right)$$

виступають відповідні величини із (3.6) при $m = \tilde{m}_0 + 1$.

Позначаючи через $p$ вираз

$$p = h_{m'_\tau-1} F_2 \left( h_{m'_\tau-1}, \alpha_{m'_\tau-1} \right), \qquad (3.20)$$

і представляючи його у вигляді

$$p^{-1} = p_0 (1 + p_1 \tau^{\Delta_1}), \qquad (3.21)$$

знаходимо вирази для коефіцієнтів $p_0$, $p_1$:

$$p_0 = \left[h^{(0)}_{m'_\tau-1} p^{(m'_\tau-1)}_{20}\right]^{-1}, \tag{3.22}$$
$$p_1 = -h^{(1)}_{m'_\tau-1}\left(1 - p^{(m'_\tau-1)}_{21} h^{(0)}_{m'_\tau-1}\right) + p^{(m'_\tau-1)}_{22}\alpha^{(0)}_{m'_\tau-1}\alpha^{(1)}_{m'_\tau-1}.$$

Відмітимо, що при цьому для $F_2(h_{m'_\tau-1}, \alpha_{m'_\tau-1})$ ми використали розклад із [15], який з точністю до $\tau^{\Delta_1}$ дозволяє отримати співвідношення:

$$F_2(h_{m'_\tau-1}, \alpha_{m'_\tau-1}) = p^{(m'_\tau-1)}_{20}\left[1 - \left(p^{(m'_\tau-1)}_{21} h^{(0)}_{m'_\tau-1} h^{(1)}_{m'_\tau-1} + \right.\right.$$
$$\left.\left. + p^{(m'_\tau-1)}_{22}\alpha^{(0)}_{m'_\tau-1}\alpha^{(1)}_{m'_\tau-1}\right)\tau^{\Delta_1}\right], \tag{3.23}$$
$$p^{(m'_\tau-1)}_{20} = F_2^{*(m'_\tau-1)}, \qquad p^{(m'_\tau-1)}_{21} = \frac{F_4^{*(m'_\tau-1)}}{F_2^{*(m'_\tau-1)}} - F_2^{*(m'_\tau-1)},$$
$$p^{(m'_\tau-1)}_{22} = \frac{F_8^{*(m'_\tau-1)}}{F_2^{*(m'_\tau-1)}} - F_6^{*(m'_\tau-1)}.$$

Тут $F_{2l}^{*(m'_\tau-1)} = I_{2l}^{*(m'_\tau-1)}/I_0^{*(m'_\tau-1)}$, де

$$I_{2l}^{*(m'_\tau-1)} = \int_0^\infty x^{2l}\exp(-h^{(0)}_{m'_\tau-1}x^2 - x^4 - \alpha^{(0)}_{m'_\tau-1}x^6)\,dx. \tag{3.24}$$

З врахуванням (3.21) для $P_2^{(m'_\tau-1)}$, $\tilde{d}_{m'_\tau}(k)$ із (3.16) знаходимо

$$P_2^{(m'_\tau-1)} = \left\{\frac{1}{2}\, s^{-2(m'_\tau-1)}\beta\tilde{\Phi}(0)p_0(\bar{r}^{(0)}_{m'_\tau-1} + \bar{q})\left[1 + \right.\right.$$
$$\left.\left. + \left(\frac{\bar{r}^{(1)}_{m'_\tau-1}}{\bar{r}^{(0)}_{m'_\tau-1} + \bar{q}} + p_1\right)\tau^{\Delta_1}\right]\right\}^{-1},$$
$$\tilde{d}_{m'_\tau}(k) = s^{-2(m'_\tau-1)}\beta\tilde{\Phi}(0)\tilde{G} + 2\beta\tilde{\Phi}(0)b^2k^2, \tag{3.25}$$
$$\tilde{G} = g_0(1 + g_1\tau^{\Delta_1}),$$
$$g_0 = \frac{1}{2}\left[\bar{r}^{(0)}_{m'_\tau-1}p_0 + (p_0 - 2)\bar{q}\right],$$
$$g_1 = \frac{1}{2}\,\frac{p_0}{g_0}\left[p_1(\bar{r}^{(0)}_{m'_\tau-1} + \bar{q}) + \bar{r}^{(1)}_{m'_\tau-1}\right].$$



Суму $\frac{1}{2}\sum_{k=0}^{B_{m'_\tau}} \ln\tilde{d}_{m'_\tau}(k)$, що входить у $F^{(2)}_{\text{ГГР}}$ (3.15), легко розрахувати:

$$\frac{1}{2}\sum_{k=0}^{B_{m'_\tau}} \ln\tilde{d}_{m'_\tau}(k) = N_{m'_\tau}\left\{\frac{1}{2}\,\ln(\tilde{G} + s^{-2}) + \ln s - m'_\tau\ln s + \right. \tag{3.26}$$
$$\left. + \frac{1}{2}\,\ln(\beta\tilde{\Phi}(0)) - \frac{1}{3} + \tilde{G}s^2 - (\tilde{G}s^2)^{3/2}\,\mathrm{arctg}\left[(\tilde{G}s^2)^{-1/2}\right]\right\}.$$

Одержані вирази (3.25), (3.26) дають можливість записати $F^{(2)}_{\text{ГГР}}$ у вигляді

$$F^{(2)}_{\text{ГГР}} = -kTN's^{-3m'_\tau}\left[f^{(0)} + f^{(1)}\tau^{\Delta_1}\right] - \beta Nh^2s^{2(m'_\tau-1)}\times$$
$$\times\left[2\beta\tilde{\Phi}(0)g_0\right]^{-1}(1 - g_1\tau^{\Delta_1}),$$
$$f^{(0)} = -\frac{1}{2}\,\ln\left(\frac{s^{-2} + g_0}{g_0 + \bar{q}}\right) + \frac{1}{3} - \tag{3.27}$$
$$-g'_0\left[1 - \sqrt{g'_0}\;\mathrm{arctg}\left(\frac{1}{\sqrt{g'_0}}\right)\right],$$
$$f^{(1)} = \frac{1}{2}\left(\frac{g_0g_1}{g_0 + \bar{q}} - \frac{g_1}{(g'_0)^{-1} + 1} - \frac{g'_0g_1}{(g'_0)^{-1} + 1}\right) -$$
$$-g'_0g_1\left[1 - \frac{3}{2}\sqrt{g'_0}\;\mathrm{arctg}\left(\frac{1}{\sqrt{g'_0}}\right)\right],$$
$$g'_0 = s^2g_0.$$

Виділяючи температурну залежність у множниках $s^{-3m'_\tau}$, $s^{2(m'_\tau-1)}$, приходимо до остаточної формули для $F^{(2)}_{\text{ГГР}}$:

$$F^{(2)}_{\text{ГГР}} = -kTN'\left[f^{(0)'}\tau^{3\nu} + f^{(1)'}\tau^{3\nu+\Delta_1}\right] -$$
$$-\beta N\gamma_4^+h^2\tau^{-2\nu}(1 + a_\chi^+\tau^{\Delta_1}),$$
$$f^{(l)'} = c_\nu^3c_{\Delta_1}^l\bar{f}^{(l)'}, \qquad l = 0, 1,$$
$$\bar{f}^{(0)'} = s^{-3(\tilde{m}_0+1)}f^{(0)}, \tag{3.28}$$
$$\bar{f}^{(1)'} = \bar{f}_{1'} + 3\nu\Phi_0\bar{f}^{(0)'}, \qquad \bar{f}_{1'} = c_{\Delta_1}^{-1}s^{-3(\tilde{m}_0+1)}f^{(1)},$$
$$\gamma_4^+ = c_\nu^{-2}\bar{\gamma}_4^+/(\beta\tilde{\Phi}(0)),$$
$$\bar{\gamma}_4^+ = s^{2\tilde{m}_0}/(2g_0),$$
$$a_\chi^+ = -g_1 - 2\nu c_{\Delta_1}\Phi_0.$$

Для загального виразу $F_{\text{ГГР}} = F^{(1)}_{\text{ГГР}} + F^{(2)}_{\text{ГГР}}$, який відповідає вкладу у вільну енергію від довгохвильових мод коливань густини спінового моменту, на основі (3.13), (3.28) маємо

$$\begin{aligned} F_{\text{ГГР}} &= -kTN'\left[f^{(0)}_{\text{ГГР}}\tau^{3\nu} + f^{(1)}_{\text{ГГР}}\tau^{3\nu+\Delta_1}\right] - \\ &-\beta N\gamma_4^+ h^2\tau^{-2\nu}(1 + a_\chi^+\tau^{\Delta_1}), \\ f^{(l)}_{\text{ГГР}} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar f^{(l)}_{\text{ГГР}}, \\ \bar f^{(l)}_{\text{ГГР}} &= \bar f^{(l)}_{\text{ПО}} + \bar f^{(l)'}, \qquad l = 0, 1. \end{aligned} \tag{3.29}$$

При $\mathcal{H} = 0$ ентропія, внутрішня енергія і теплоємність системи, що відповідають ГГР, визначаються наступними співвідношеннями:

$$\begin{aligned} S_{\text{ГГР}} &= kN'\left[u_3^{(\text{ГГР})(0)}\tau^{1-\alpha} + u_3^{(\text{ГГР})(1)}\tau^{1-\alpha+\Delta_1}\right], \\ U_{\text{ГГР}} &= kTN'\left[u_3^{(\text{ГГР})(0)}\tau^{1-\alpha} + u_3^{(\text{ГГР})(1)}\tau^{1-\alpha+\Delta_1}\right], \\ C_{\text{ГГР}} &= kN'\left[c_3^{(\text{ГГР})(0)}\tau^{-\alpha} + c_3^{(\text{ГГР})(1)}\tau^{\Delta_1-\alpha}\right], \end{aligned} \tag{3.30}$$

де

$$\begin{aligned} u_3^{(\text{ГГР})(l)} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar u_3^{(\text{ГГР})(l)}, \qquad l = 0, 1, \\ \bar u_3^{(\text{ГГР})(0)} &= 3\nu \bar f^{(0)}_{\text{ГГР}}, \\ \bar u_3^{(\text{ГГР})(1)} &= (3\nu + \Delta_1)\bar f^{(1)}_{\text{ГГР}}, \\ c_3^{(\text{ГГР})(l)} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar c_3^{(\text{ГГР})(l)}, \\ \bar c_3^{(\text{ГГР})(0)} &= 3\nu(3\nu - 1)\bar f^{(0)}_{\text{ГГР}}, \\ \bar c_3^{(\text{ГГР})(1)} &= (3\nu + \Delta_1)(3\nu + \Delta_1 - 1)\bar f^{(1)}_{\text{ГГР}}. \end{aligned} \tag{3.31}$$

Тепер в результаті послідовного врахування коротко- і довгохвильових мод коливань спінової густини розрахуємо повні вирази для вільної енергії та інших термодинамічних функцій тривимірної моделі Ізінга біля точки фазового переходу.

## 4. Термодинамічні характеристики моделі при $T > T_c$ з врахуванням першої конфлуентної поправки

При відсутності зовнішнього поля вільна енергія системи згідно (1.12) з врахуванням (2.22) і (3.29) запишеться у вигляді

$$F = -kTN'\left[\gamma_0 + \gamma_1\tau + \gamma_2\tau^2 + \gamma_3^{(0)+}\tau^{3\nu} + \gamma_3^{(1)+}\tau^{3\nu+\Delta_1}\right],$$



$$\begin{aligned} \gamma_0 &= s_0^3 \ln 2 + \gamma_0^{(\text{КР})}, \\ \gamma_3^{(l)+} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar\gamma_3^{(l)+}, \\ \bar\gamma_3^{(l)+} &= -\bar\gamma_3^{(\text{КР})(l)+} + \bar f^{(l)}_{\text{ГГР}}, \qquad l = 0, 1. \end{aligned} \tag{4.1}$$

Коефіцієнти $\gamma_1$, $\gamma_2$ задано в (2.22). Доданки, пропорціональні цілим степеням $\tau$ в (4.1), виникають виключно за рахунок врахування короткохвильових фаз флуктуацій. Члени, пропорціональні $\tau^{3\nu}$, $\tau^{3\nu+\Delta_1}$ (неаналітична частина вільної енергії), появляються в результаті врахування як коротко- так і довгохвильових фаз флуктуацій. Причому перша конфлуентна поправка виникає за рахунок врахування в розв'язках (Д.4) (див. додаток) РС (Д.2) меншого власного значення $E_2$ матриці перетворення (Д.5).

Основна перевага виразу для $F$ полягає в наявності співвідношень, які зв'язують його коефіцієнти з мікроскопічними параметрами системи і координатами фіксованої точки РС. В коефіцієнтах $\gamma_3^{(l)+}$ ($l = 0, 1$) залежність від мікроскопічних параметрів виділена (див. (4.1)). Вони представлені у вигляді добутку універсальної частини $\bar\gamma_3^{(l)+}$ і неуніверсального фактору, залежного через $\tilde c_1^{(0)}$ (Д.18), $c_{20}^{(0)}$ (Д.19) від мікроскопічних параметрів. Подібним чином представляються основні критичні амплітуди і амплітуди конфлуентної поправки теплоємності та інших термодинамічних характеристик системи. Величини $\gamma_0$, $\gamma_1$, $\gamma_2$ містяться в таблиці 2, а $\bar\gamma_3^{(l)+}$ – в таблиці 3.

Коефіцієнти ентропії, внутрішньої енергії, теплоємності виражаються через коефіцієнти вільної енергії. Для ентропії, внутрішньої енергії, теплоємності системи при $\mathcal{H} = 0$ з врахуванням першої конфлуентної поправки одержуємо

$$\begin{aligned} S &= kN'\left[s^{(0)} + c_0\tau + u_3^{(0)+}\tau^{1-\alpha} + u_3^{(1)+}\tau^{1-\alpha+\Delta_1}\right], \\ U &= kTN'\left[\gamma_1 + u_1\tau + u_3^{(0)+}\tau^{1-\alpha} + u_3^{(1)+}\tau^{1-\alpha+\Delta_1}\right], \\ C &= kN'\left[c_0 + c_3^{(0)+}\tau^{-\alpha} + c_3^{(1)+}\tau^{\Delta_1-\alpha}\right]. \end{aligned} \tag{4.2}$$

Тут

$$\begin{aligned} s^{(0)} &= \gamma_0 + \gamma_1, \\ u_3^{(l)+} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar u_3^{(l)+}, \qquad l = 0, 1, \\ \bar u_3^{(0)+} &= 3\nu\bar\gamma_3^{(0)+}, \\ \bar u_3^{(1)+} &= (3\nu + \Delta_1)\bar\gamma_3^{(1)+}, \end{aligned} \tag{4.3}$$

Табл. 2: Коефіцієнти $\gamma_0$, $\gamma_1$, $\gamma_2$ вільної енергії $F$ (4.1).

| $b$ | $b_I$ | $b_{II}$ | $b_{III}$ | $c$ | $2c$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $s = 2.0000$ | | | | | |
| $\gamma_0$ | 1.8758 | 2.7464 | 3.1962 | 61.1798 | 486.699 |
| $\gamma_1$ | $-0.8032$ | $-0.7759$ | $-0.7651$ | $-0.6734$ | $-0.6701$ |
| $\gamma_2$ | $-4.4816$ | $-3.9551$ | $-3.7548$ | $-2.0482$ | $-1.9599$ |
| $s = 2.7349$ | | | | | |
| $\gamma_0$ | 1.8776 | 2.7496 | 3.2000 | 61.1930 | 486.713 |
| $\gamma_1$ | $-0.7063$ | $-0.6952$ | $-0.6913$ | $-0.6924$ | $-0.6978$ |
| $\gamma_2$ | $-4.6948$ | $-4.1735$ | $-3.9764$ | $-2.2672$ | $-2.1665$ |
| $s = 3.0000$ | | | | | |
| $\gamma_0$ | 1.8789 | 2.7516 | 3.2023 | 61.1999 | 486.720 |
| $\gamma_1$ | $-0.6867$ | $-0.6795$ | $-0.6773$ | $-0.7020$ | $-0.7100$ |
| $\gamma_2$ | $-4.5304$ | $-4.0342$ | $-3.8466$ | $-2.1971$ | $-2.0936$ |

Табл. 3: Універсальні частини коефіцієнтів неаналітичної частини вільної енергії $F$ (4.1).

| $s$ | $\bar{\gamma}_3^{(0)+}$ | $\bar{\gamma}_3^{(1)+}$ |
|---|---|---|
| 2.0000 | 0.9699 | 0.6508 |
| 2.7349 | 1.8654 | 0.7263 |
| 3.0000 | 2.1770 | 0.7162 |

$$\begin{aligned} c_3^{(l)+} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{c}_3^{(l)+}, \\ \bar{c}_3^{(0)+} &= 3\nu(3\nu-1)\bar{\gamma}_3^{(0)+}, \\ \bar{c}_3^{(1)+} &= (3\nu+\Delta_1)(3\nu+\Delta_1-1)\bar{\gamma}_3^{(1)+}. \end{aligned}$$

Коефіцієнти $c_0$, $u_1$ приведені в (2.24).

Формулу для теплоємності (див. (4.2)) досліджуваної моделі можна переписати в іншому вигляді [20,21], а саме:

$$\frac{C}{kN'} = \frac{A^+}{\alpha}\tau^{-\alpha}(1+\alpha a_c^+\tau^{\Delta_1}) + B^+, \tag{4.4}$$

$$A^+ = c_\nu^3\alpha\bar{c}_3^{(0)+}, \quad a_c^+ = \frac{c_{\Delta_1}}{\alpha}\,\frac{\bar{c}_3^{(1)+}}{\bar{c}_3^{(0)+}}, \quad B^+ = c_0.$$

Таку важливу характеристику системи як сприйнятливість на



одну частинку

$$\chi = -\frac{1}{N}\frac{\partial^2 F_{\text{ГГР}}}{\partial\mathcal{H}^2} \tag{4.5}$$

можна обчислити, використовуючи (3.29). При нескінченно малих значеннях зовнішнього поля $\boldsymbol{\mathcal{H}}$ поблизу $T_c$ вона задається виразом

$$\begin{aligned} \chi &= \Gamma^+\tau^{-\gamma}(1+a_\chi^+\tau^{\Delta_1})\frac{\mu_{\text{Б}}^2}{\tilde{\Phi}(0)}, \\ \Gamma^+ &= 2c_\nu^{-2}\bar{\gamma}_4^+, \\ a_\chi^+ &= c_{\Delta_1}\bar{a}_\chi^+, \\ \bar{a}_\chi^+ &= -\bar{g}_1 - 2\nu\Phi_0, \\ \bar{g}_1 &= \frac{g_1}{c_{\Delta_1}}, \\ \gamma &= 2\nu. \end{aligned} \tag{4.6}$$

Тут величина $\bar{g}_1$ не залежить від мікроскопічних параметрів. Вона одержана в результаті виключення із $g_1$ (3.25) неуніверсального фактору $c_{\Delta_1} = c_{20}^{(0)}[\tilde{c}_1^{(0)}/(f_0\delta)]^{\Delta_1}$. Коефіцієнт $\bar{\gamma}_4^+$ приведений в (3.28).

Коефіцієнти для теплоємності $C/kN'$ (4.4) та сприйнятливості $\chi$ (4.6) приведені в таблиці 4. Слід підкреслити, що обчислені амплітуди конфлуентних поправок $a_c^+$, $a_\chi^+$ узгоджуються із результатами роботи [22], де розглядаються ведучі поправки до скейлінгових амплітуд для моделей Ізінга із взаємодією між найближчими сусідами на простій кубічній, об'ємоцентрованій кубічній і гранецентрованій кубічній гратках. У [22] показано, що амплітуди вказаних поправок для сприйнятливості, кореляційної довжини, теплоємності та спонтанної намагніченості мають від'ємний знак для всіх трьох граток. Відзначається узгодження одержаних результатів з результатами високотемпературних розкладів і даними теоретико-польового аналізу.

Робота виконана при підтримці Державного фонду фундаментальних досліджень по проекту N 2.4/173.

## Додаток
## Аналітичний розв'язок рекурентних співвідношень для шестирної густини міри

Запишемо РС, які виникають після послідовного інтегрування статистичної суми моделі по шарах фазового простору КЗ і зв'язують

Табл. 4: Значення коефіцієнтів для виразів теплоємності $C/kN'$ (4.4) та сприйнятливості $\chi$ (4.6).

| $b$ | $b_I$ | $b_{II}$ | $b_{III}$ | $c$ | $2c$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $s = 2.0000$ | | | | | |
| $A^+$ | 1.0876 | 0.9960 | 0.9609 | 0.6620 | 0.6471 |
| $a_c^+$ | −1.2609 | −1.8262 | −2.0389 | −3.7773 | −3.8634 |
| $B^+$ | −10.5696 | −9.4620 | −9.0397 | −5.4430 | −5.2601 |
| $\Gamma^+$ | 1.8711 | 1.9842 | 2.0321 | 2.6052 | 2.6450 |
| $a_\chi^+$ | −0.0691 | −0.1001 | −0.1118 | −0.2071 | −0.2118 |
| $s = 2.7349$ | | | | | |
| $A^+$ | 0.8113 | 0.7439 | 0.7184 | 0.5050 | 0.4944 |
| $a_c^+$ | −2.3816 | −2.7420 | −2.8773 | −3.9838 | −4.0397 |
| $B^+$ | −10.8022 | −9.7375 | −9.3355 | −5.9193 | −5.7286 |
| $\Gamma^+$ | 2.1659 | 2.2948 | 2.3488 | 2.9709 | 3.0134 |
| $a_\chi^+$ | −0.1177 | −0.1355 | −0.1422 | −0.1969 | −0.1996 |
| $s = 3.0000$ | | | | | |
| $A^+$ | 0.7238 | 0.6644 | 0.6420 | 0.4558 | 0.4465 |
| $a_c^+$ | −2.6494 | −2.9650 | −3.0832 | −4.0460 | −4.0947 |
| $B^+$ | −10.4343 | −9.4274 | −9.0478 | −5.7981 | −5.6074 |
| $\Gamma^+$ | 2.4427 | 2.5860 | 2.6459 | 3.3248 | 3.3710 |
| $a_\chi^+$ | −0.1291 | −0.1445 | −0.1502 | −0.1971 | −0.1995 |

між собою коефіцієнти шестирних густин мір $n+1$-ої і $n$-ої блочних структур. Ввівши позначення

$$\begin{aligned} d_n(B_{n+1}, B_n) &= s^{-2n}(r_n + q), \\ a_4^{(n)} &= s^{-4n} u_n, \\ a_6^{(n)} &= s^{-6n} w_n, \end{aligned} \tag{Д.1}$$

де $s$ – параметр РГ, $q = \bar{q}\beta\tilde{\Phi}(0)$ ($\bar{q}$ відповідає середньому значенню $k^2$ на інтервалі $(1/s, 1]$), одержуємо наступні РС [8,12]:

$$\begin{aligned} r_{n+1} &= s^2 \left[ -q + u_n^{1/2} Y(h_n, \alpha_n) \right], \\ u_{n+1} &= s^{4-d} u_n B(h_n, \alpha_n), \\ w_{n+1} &= s^{6-2d} u_n^{3/2} D(h_n, \alpha_n). \end{aligned} \tag{Д.2}$$

Функції, що входять в (Д.2), мають вигляд

$$Y(h_n, \alpha_n) = s^{d/2} F_2(\eta_n, \xi_n) \left[ C(h_n, \alpha_n) \right]^{-1/2},$$



$$\begin{aligned} B(h_n, \alpha_n) &= s^{2d} C(\eta_n, \xi_n) \left[ C(h_n, \alpha_n) \right]^{-1}, \\ D(h_n, \alpha_n) &= s^{7d/2} N(\eta_n, \xi_n) \left[ C(h_n, \alpha_n) \right]^{-3/2}. \end{aligned} \tag{Д.3}$$

Тут $d$ – розмірність простору (в нашому випадку $d = 3$), функції $F_2$, $C$, $N$ задані в (1.5), (1.6), їх аргументи $h_n$, $\alpha_n$ – в (1.9), а $\eta_n$, $\xi_n$ – в (1.11).

РС (Д.2) в області критичного режиму, якому відповідають сильно скорельовані короткохвильові флуктуації $\rho_{\mathbf{k}}$, допускають розв'язки [12]

$$\begin{aligned} r_n &= r^{(0)} + c_1 E_1^n + c_2 w_{12}^{(0)} (u^{(0)})^{-1/2} E_2^n + c_3 w_{13}^{(0)} (u^{(0)})^{-1} E_3^n, \\ u_n &= u^{(0)} + c_1 w_{21}^{(0)} (u^{(0)})^{1/2} E_1^n + c_2 E_2^n + \\ &\quad + c_3 w_{23}^{(0)} (u^{(0)})^{-1/2} E_3^n, \\ w_n &= w^{(0)} + c_1 w_{31}^{(0)} u^{(0)} E_1^n + c_2 w_{32}^{(0)} (u^{(0)})^{1/2} E_2^n + c_3 E_3^n, \end{aligned} \tag{Д.4}$$

де $E_l$ – власні значення матриці $\mathcal{R}$ лінеаризованого поблизу фіксованої точки $(r^{(0)}, u^{(0)}, w^{(0)})$ перетворення

$$\begin{pmatrix} r_{n+1} - r^{(0)} \\ u_{n+1} - u^{(0)} \\ w_{n+1} - w^{(0)} \end{pmatrix} = \mathcal{R} \begin{pmatrix} r_n - r^{(0)} \\ u_n - u^{(0)} \\ w_n - w^{(0)} \end{pmatrix}. \tag{Д.5}$$

Критичну поведінку системи описує фіксована точка, що має тип "сідла" ($E_1 > 1, E_2 < 1, E_3 < 1$) (див. таблицю 5). Для координат

Табл. 5: Власні значення матриці лінеаризації РС.

| $s$ | $E_1$ | $E_2$ | $E_3$ |
|---|---|---|---|
| 2.0000 | 3.0649 | 0.4811 | 0.0035 |
| 2.5000 | 4.2450 | 0.4500 | 0.0032 |
| 2.7349 | 4.8468 | 0.4367 | 0.0032 |
| 3.0000 | 5.5581 | 0.4221 | 0.0030 |
| 3.5000 | 6.9794 | 0.3964 | 0.0027 |
| 3.5862 | 7.2336 | 0.3923 | 0.0027 |
| 4.0000 | 8.4878 | 0.3737 | 0.0024 |

фіксованої точки маємо

$$r^{(0)} = -f_0 \beta\tilde{\Phi}(0), \quad u^{(0)} = \varphi_0 (\beta\tilde{\Phi}(0))^2, \quad w^{(0)} = \psi_0 (\beta\tilde{\Phi}(0))^3. \tag{Д.6}$$

Незалежні від температури постійні $f_0$, $\varphi_0$ і $\psi_0$ записуються у вигляді

$$
\begin{aligned}
f_0 &= \bar{q}\left[Y(h^{(0)},\alpha^{(0)}) - \frac{h^{(0)}}{\sqrt{6}}\right]\left[Y(h^{(0)},\alpha^{(0)}) - \frac{h^{(0)}}{s^2\sqrt{6}}\right]^{-1}, \\
\varphi_0 &= \left[\bar{q}(1-s^{-2})\right]^2\left[Y(h^{(0)},\alpha^{(0)}) - \frac{h^{(0)}}{s^2\sqrt{6}}\right]^{-2}, \qquad (\text{Д}.7) \\
\psi_0 &= \varphi_0^{3/2} D(h^{(0)},\alpha^{(0)}).
\end{aligned}
$$

При цьому величини $h^{(0)}$ і $\alpha^{(0)}$, які відповідають значенням $h_n$ і $\alpha_n$ в фіксованій точці, визначаються із рівнянь

$$
s^{-1} = B(h^{(0)},\alpha^{(0)}), \qquad \alpha^{(0)} = \frac{\sqrt{6}}{15}\,D(h^{(0)},\alpha^{(0)}). \qquad (\text{Д}.8)
$$

Незалежні від температури величини $w_{il}^{(0)}$ задаються виразами

$$
\begin{aligned}
w_{12}^{(0)} &= (E_2 - R_{22} - c_0 R_{23}^{(0)})/R_{21}^{(0)}, \\
w_{13}^{(0)} &= (E_3 - R_{33} - d_0 R_{32}^{(0)})/R_{31}^{(0)}, \qquad (\text{Д}.9) \\
w_{21}^{(0)} &= (E_1 - R_{11} - b_0 R_{13}^{(0)})/R_{12}^{(0)}, \qquad w_{23}^{(0)} = d_0, \\
w_{31}^{(0)} &= b_0, \qquad w_{32}^{(0)} = c_0; \qquad R_{ij}^{(0)} = R_{ij}(u^{(0)})^{(j-i)/2}.
\end{aligned}
$$

Тут $R_{ij}$ – елементи матриці $\mathcal{R}$, а для $b_0$, $c_0$, $d_0$ справедливі співвідношення

$$
\begin{aligned}
b_0 &= \frac{(E_1 - R_{11})R_{32}^{(0)} + R_{31}^{(0)}R_{12}^{(0)}}{(E_1 - R_{33})R_{12}^{(0)} + R_{13}^{(0)}R_{32}^{(0)}}, \\
c_0 &= \frac{(E_2 - R_{22})R_{31}^{(0)} + R_{32}^{(0)}R_{21}^{(0)}}{(E_2 - R_{33})R_{21}^{(0)} + R_{23}^{(0)}R_{31}^{(0)}}, \qquad (\text{Д}.10) \\
d_0 &= \frac{(E_3 - R_{33})R_{21}^{(0)} + R_{23}^{(0)}R_{31}^{(0)}}{(E_3 - R_{22})R_{31}^{(0)} + R_{32}^{(0)}R_{21}^{(0)}}.
\end{aligned}
$$

Характерною особливістю розв'язків (Д.4) є специфічна залежність коефіцієнта $c_1$ від температури. Як було показано в [12], для $c_1$ із (Д.4) маємо

$$
c_1 = \tilde{c}_1 \beta\tilde{\Phi}(0)\tau, \qquad (\text{Д}.11)
$$

де

$$
\begin{aligned}
\tilde{c}_1 = V_1 \Bigg[ & 1 - f_0 + v_{12}^{(0)}\varphi_0^{1/2} + v_{13}^{(0)}\psi_0\varphi_0^{-1} + \frac{a_4' v_{12}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}}{\beta_c\tilde{\Phi}(0)\beta\tilde{\Phi}(0)} + \qquad (\text{Д}.12) \\
& + \frac{a_6' v_{13}^{(0)}\varphi_0^{-1}}{(\beta_c\tilde{\Phi}(0))^2\beta\tilde{\Phi}(0)}\frac{T+T_c}{T_c}\Bigg],
\end{aligned}
$$



а для $c_2$ і $c_3$ одержуємо

$$
c_2 = c_{20}(\beta\tilde{\Phi}(0))^2, \qquad c_3 = c_{30}(\beta\tilde{\Phi}(0))^3, \qquad (\text{Д}.13)
$$

де

$$
\begin{aligned}
c_{20} = V_2 \Bigg[ & -\varphi_0 - v_{21}^{(0)}(1-f_0)\varphi_0^{1/2} - v_{23}^{(0)}\psi_0\varphi_0^{-1/2} + \frac{a_2' v_{31}^{(0)}\varphi_0^{1/2}}{\beta\tilde{\Phi}(0)} + \\
& + \frac{a_4'}{(\beta\tilde{\Phi}(0))^2} + \frac{a_6' v_{23}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}}{(\beta\tilde{\Phi}(0))^3}\Bigg], \qquad (\text{Д}.14) \\
c_{30} = V_3 \Bigg[ & -\psi_0 - v_{31}^{(0)}(1-f_0)\varphi_0 - v_{32}^{(0)}\varphi_0^{3/2} + \frac{a_2' v_{31}^{(0)}\varphi_0}{\beta\tilde{\Phi}(0)} + \\
& + \frac{a_4' v_{32}^{(0)}\varphi_0^{1/2}}{(\beta\tilde{\Phi}(0))^2} + \frac{a_6'}{(\beta\tilde{\Phi}(0))^3}\Bigg].
\end{aligned}
$$

Величина $\beta_c\tilde{\Phi}(0)$ (див. таблицю 6) визначає температуру фазового переходу системи, рівняння для якої приводиться в [12]. Для величин $V_1$, $V_2$, $V_3$ знаходимо

Табл. 6: Значення $\beta_c\tilde{\Phi}(0)$ для різних $b$ і $s$.

| $b$ | $b_I$ | $b_{II}$ | $b_{III}$ | $c$ | $2c$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $s = 2.0000$ | | | | | |
| $\beta_c\tilde{\Phi}(0)$ | 1.0333 | 1.0925 | 1.1069 | 1.1204 | 1.1181 |
| $s = 2.7349$ | | | | | |
| $\beta_c\tilde{\Phi}(0)$ | 1.0389 | 1.1022 | 1.1184 | 1.1506 | 1.1495 |
| $s = 3.0000$ | | | | | |
| $\beta_c\tilde{\Phi}(0)$ | 1.0419 | 1.1068 | 1.1236 | 1.1628 | 1.1621 |

$$
\begin{aligned}
V_1 &= \left[1 + e_0 b_0 + \frac{(E_1 - R_{11} - e_0 R_{31}^{(0)})(E_1 - R_{11} - b_0 R_{13}^{(0)})}{R_{12}^{(0)}R_{21}^{(0)}}\right]^{-1}, \\
V_2 &= \Big[1 + c_0 l_0 + (E_2 - R_{22} - l_0 R_{32}^{(0)})\times \qquad (\text{Д}.15)
\end{aligned}
$$

$$\times \frac{(E_2 - R_{22} - c_0 R_{23}^{(0)})}{R_{12}^{(0)} R_{21}^{(0)}} \Bigg]^{-1},$$

$$V_3 = \left[ 1 + g_0 d_0 + \frac{(E_3 - R_{33} - g_0 R_{23}^{(0)})(E_3 - R_{33} - d_0 R_{32}^{(0)})}{R_{13}^{(0)} R_{31}^{(0)}} \right]^{-1}.$$

Коефіцієнти $b_0$, $c_0$ і $d_0$ визначені в (Д.10), а для $e_0$, $l_0$ і $g_0$ маємо

$$\begin{aligned} e_0 &= \frac{(E_1 - R_{11})R_{23}^{(0)} + R_{21}^{(0)} R_{13}^{(0)}}{(E_1 - R_{33})R_{21}^{(0)} + R_{23}^{(0)} R_{31}^{(0)}}, \\ l_0 &= \frac{(E_2 - R_{22})R_{13}^{(0)} + R_{12}^{(0)} R_{23}^{(0)}}{(E_2 - R_{33})R_{12}^{(0)} + R_{13}^{(0)} R_{32}^{(0)}}, \\ g_0 &= \frac{(E_3 - R_{33})R_{12}^{(0)} + R_{13}^{(0)} R_{32}^{(0)}}{(E_3 - R_{22})R_{13}^{(0)} + R_{12}^{(0)} R_{23}^{(0)}}. \end{aligned} \tag{Д.16}$$

Величини $v_{lj}^{(0)}$ задаються формулами

$$\begin{aligned} v_{12}^{(0)} &= (E_1 - R_{11} - e_0 R_{31}^{(0)})/R_{21}^{(0)}, & v_{13}^{(0)} &= e_0, \\ v_{21}^{(0)} &= (E_2 - R_{22} - l_0 R_{32}^{(0)})/R_{12}^{(0)}, & v_{23}^{(0)} &= l_0, \\ v_{31}^{(0)} &= (E_3 - R_{33} - g_0 R_{23}^{(0)})/R_{13}^{(0)}, & v_{32}^{(0)} &= g_0. \end{aligned} \tag{Д.17}$$

У виразах для $\tilde{c}_1$, $c_{20}$, $c_{30}$ можна виділити температурну залежність. Тоді в околі $T_c$ одержуємо для $\tilde{c}_1$

$$\begin{aligned} \tilde{c}_1 &= \tilde{c}_1^{(0)} + \tilde{c}_1^{(1)} \tau, \\ \tilde{c}_1^{(0)} &= V_1 \Bigg[ 1 - f_0 + v_{12}^{(0)} \varphi_0^{1/2} + v_{13}^{(0)} \psi_0 \varphi_0^{-1} + \frac{a_4' v_{12}^{(0)} \varphi_0^{-1/2}}{(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^2} + \\ &+ \frac{2a_6' v_{13}^{(0)} \varphi_0^{-1}}{(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^3} \Bigg], \\ \tilde{c}_1^{(1)} &= V_1 \left[ \frac{a_4' v_{12}^{(0)} \varphi_0^{-1/2}}{(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^2} + \frac{3a_6' v_{13}^{(0)} \varphi_0^{-1}}{(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^3} \right], \end{aligned} \tag{Д.18}$$

для $c_{20}$

$$\begin{aligned} c_{20} &= c_{20}^{(0)} + c_{20}^{(1)} \tau + c_{20}^{(2)} \tau^2, \\ c_{20}^{(0)} &= V_2 \Bigg[ -\varphi_0 - v_{21}^{(0)} (1 - f_0) \varphi_0^{1/2} - v_{23}^{(0)} \psi_0 \varphi_0^{-1/2} + \frac{a_2' v_{21}^{(0)} \varphi_0^{1/2}}{\beta_c \tilde{\Phi}(0)} + \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} &+ \frac{a_4'}{(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^2} + \frac{a_6' v_{23}^{(0)} \varphi_0^{-1/2}}{(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^3} \Bigg], \\ c_{20}^{(1)} &= V_2 \left[ \frac{a_2' v_{21}^{(0)} \varphi_0^{1/2}}{\beta_c \tilde{\Phi}(0)} + \frac{2a_4'}{(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^2} + \frac{3a_6' v_{23}^{(0)} \varphi_0^{-1/2}}{(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^3} \right], \\ c_{20}^{(2)} &= V_2 \left[ \frac{a_4'}{(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^2} + \frac{3a_6' v_{23}^{(0)} \varphi_0^{-1/2}}{(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^3} \right], \end{aligned} \tag{Д.19}$$

для $c_{30}$

$$\begin{aligned} c_{30} &= c_{30}^{(0)} + c_{30}^{(1)} \tau + c_{30}^{(2)} \tau^2, \\ c_{30}^{(0)} &= V_3 \Bigg[ -\psi_0 - v_{31}^{(0)} (1 - f_0) \varphi_0 - v_{32}^{(0)} \varphi_0^{3/2} + \frac{a_2' v_{31}^{(0)} \varphi_0}{\beta_c \tilde{\Phi}(0)} + \\ &+ \frac{a_4' v_{32}^{(0)} \varphi_0^{1/2}}{(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^2} + \frac{a_6'}{(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^3} \Bigg], \\ c_{30}^{(1)} &= V_3 \left[ \frac{a_2' v_{31}^{(0)} \varphi_0}{\beta_c \tilde{\Phi}(0))} + \frac{2a_4' v_{32}^{(0)} \varphi_0^{1/2}}{(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^2} + \frac{3a_6'}{(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^3} \right], \\ c_{30}^{(2)} &= V_3 \left[ \frac{a_4' v_{32}^{(0)} \varphi_0^{1/2}}{(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^2} + \frac{3a_6'}{(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^3} \right]. \end{aligned} \tag{Д.20}$$

## Література


[1] Юхновский И.Р. Теория фазовых переходов второго рода. Метод коллективных переменных. – Киев: Наукова думка, 1985. – 224 с.

[2] Yukhnovskii I.R., Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V. A method for the calculation of thermodynamic functions for the 3D model systems in the critical region // Z. Naturforsch. – 1991. – **46a**. – P. 1-7.

[3] Козловский М.П., Пылюк И.В., Юхновский И.Р. Термодинамические функции трехмерной модели Изинга вблизи точки фазового перехода с учетом поправок к скейлингу. I. Случай $T > T_c$ // ТМФ. – 1991. – **87**, N 2. – С. 293-316.

[4] Козловский М.П., Пылюк И.В., Юхновский И.Р. Термодинамические функции трехмерной модели Изинга вблизи точки фазового перехода с учетом поправок к скейлингу. II. Случай $T < T_c$ // ТМФ. – 1991. – **87**, N 3. – С. 434-455.

[5] Пылюк И.В., Козловский М.П. Исследование модели Изинга с использованием негауссових базисных мер. – Киев, 1987. – 28 с. – (Препринт / АН УССР. ИТФ; ИТФ-87-31Р).

[6] Пылюк И.В. Критическое поведение трехмерной однокомпонентной спиновой системы в методе коллективных переменных при усложнении базисной меры. – Киев, 1988. – 33 с. – (Препринт / АН УССР. ИТФ; ИТФ-88-107Р).

[7] Козловский М.П., Пылюк И.В. Расчет критического показателя корреляционной длины трехмерной модели Изинга с использованием негауссовых базисних мер // Труды Всесоюзной конф. "Современные проблемы статистической физики", Львов, 3-5 февраля 1987 г. Т. 2. – Киев: Наукова думка, 1989. – С. 50-56.

[8] Козловский М.П. Неасимптотическая форма рекуррентных соотношений трехмерной модели Изинга // ТМФ. – 1989. – **78**, N 3. – С. 422-433.

[9] Козловський М.П., Пилюк І.В. Дослідження критичних характеристик тривимірної моделі Ізінга з використанням негауссових густин мір // УФЖ. – 1990. – **35**, N 1. – С. 146-147.

[10] Козловский М.П., Пылюк И.В. Термодинамика трехмерного изинговского ферромагнетика в окрестности точки фазового перехода в рамках модели $\rho^6$. Сравнение с моделью $\rho^4$. – Киев, 1990. – 53 с. – (Препринт / АН УССР. ИТФ; ИТФ-90-81Р).

[11] Козловский М.П. Критические свойства модели Изинга. Модель $\rho^6$. Общие рекуррентные соотношения. – Киев, 1982. – 32 с. – (Препринт / АН УССР. ИТФ; ИТФ-82-104Р).

[12] Козловский М.П. Решения уравнений ренормгруппы для системы изинговских спинов в модели $\rho^6$. – Киев, 1984. – 38 с. – (Препринт / АН УССР. ИТФ; ИТФ-84-35Р).

[13] Kozlovsky M.P., Pylyuk I.V. Free energy and other thermodynamical functions above the second-order phase transition point. – Kiev, 1985. – 48 p. – (Preprint / Acad. Sci. Ukr. SSR. ITP; ITP- 85-23E).

[14] Козловский М.П., Пылюк И.В. Расчет термодинамических функций вблизи точки фазового перехода в приближении шестерной базисной меры. – Киев, 1987. – 29 с. – (Препринт / АН УССР. ИТФ; ИТФ-87-9Р).

[15] Пилюк І.В. Спеціальні функції для дослідження критичних властивостей тривимірної моделі Ізинга в рамках шестирної густини міри // УФЖ. – 1996. – **41**, N 9. – С. 885-894.

[16] Юхновский И.Р., Козловский М.П., Коломиец В.А. Численное интегрирование статистической суммы трехмерной модели Изинга методом коллективных переменных // УФЖ. – 1982. – **27**, N 6. – С. 925-930.

[17] Юхновский И.Р., Козловский М.П., Коломиец В.А. Исследование трехмерной модели Изинга с помощью масштабных преобразований // УФЖ. – 1982. – **27**, N 6. – С. 930-935.

[18] Юхновский И.Р., Козловский М.П., Коломиец В.А. Аналитическое решение уравнений ренормализационной группы // УФЖ. – 1982. – **27**, N 9. – С. 1399-1403.

[19] Козловский М.П., Пылюк И.В., Коломиец В.А. Численное исследование статистической суммы трехмерной модели Изинга на основе шестерного базисного распределения. – Киев, 1984. – 41 с. – (Препринт / АН УССР. ИТФ; ИТФ-84-177Р).

[20] Bagnuls C., Bervillier C. Critical confluent corrections: Universality and estimates of amplitude ratios from field theory at $d = 3$ // Phys. Rev. B. – 1981. – **24**, N 3. – P. 1226-1235.

[21] Nicoll J.F., Albright P.C. Background fluctuations and Wegner corrections // Phys. Rev. B. – 1986. – **34**, N 3. – P. 1991-1996.

[22] Liu A.J., Fisher M.E. On the corrections to scaling in three-dimensional Ising models // J. Stat. Phys. – 1990. – **58**, N 3/4. – P. 431-442.

Ігор Васильович Пилюк
Михайло Павлович Козловський

Термодинамічні характеристики тривимірної ізінгівської системи в наближенні моделі $\rho^6$ з врахуванням конфлуентної поправки. І. Високотемпературна область

Роботу отримано 5 березня 1997 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу статистичної теорії конденсованих систем

Виготовлено при ІФКС НАН України