Національна академія наук України

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP–97–07U

І.В.Пилюк, М.П.Козловський

ТЕРМОДИНАМІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТРИВИМІРНОЇ ІЗІНГІВСЬКОЇ СИСТЕМИ В НАБЛИЖЕННІ МОДЕЛІ ρ^6 З ВРАХУВАННЯМ КОНФЛУЕНТНОЇ ПОПРАВКИ. II. НИЗЬКОТЕМПЕРАТУРНА 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 ρ^6 з врахуванням конфлуентної поправки. II. Низькотемпературна область

І.В.Пилюк, М.П.Козловський

Анотація. В низькотемпературній області розвинутий спосіб розрахунку термодинамічних характеристик тривимірної ізінгівської системи на основі моделі ρ^6 з врахуванням першої конфлуентної поправки. Обчислено мікроскопічний аналог вільної енергії Ландау. Знайдені вирази для середнього спінового моменту і сприйнятливості системи.

Thermodynamic characteristics of the 3D Ising system in ρ^6 model approximation taking into account the confluent correction. II. Low-temperature region

I.V.Pylyuk, M.P.Kozlovskii

Abstract. A method for the calculation of the thermodynamic characteristics of the three-dimensional Ising system is developed on the basis of the ρ^6 model taking into account the first confluent correction in the low-temperature region. A microscopic analogue of the Landau free energy is calculated. The expressions for the average spin moment and susceptibility of the system are obtained.

Подається до Українського фізичного журналу
Submitted to Ukrainian Journal of Physics

Вступ

В останній час продовжується активний розвиток теорії фазових переходів і критичних явищ, розширюються уявлення про критичні властивості граткових моделей, зокрема тривимірної моделі Ізінга. Про це свідчить навіть цей невеликий оглядовий аналіз робіт, який приведений нижче.

В [1] методом ренормгрупи в процедурі Монте-Карло досліджується модель Ізінга на простій кубічній гратці, а в [2] представлені результати вивчення методом Монте-Карло кореляційної довжини для другого моменту і ренормалізаційної взаємодії в критичній області тривимірної моделі Ізінга для об'ємоцентрованої кубічної гратки. Метод локальних станів для розрахунку вільної енергії граткових моделей при використанні методу Монте-Карло розглядається в [3]. Згаданий метод Монте-Карло використовується при дослідженні критичної поведінки тривимірної моделі Ізінга і в роботах [4,5]. В статті [6] модель Ізінга на простій кубічній гратці вивчається з допомогою алгоритму кластерного поновлення Монте-Карло.

Опису феноменологічних моделей фазових переходів на основі теорем теорії катастроф присвячена робота [7]. В огляді [8] обговорюється використання ідей скейлінгу та універсальності при аналізі поведінки статистичних систем в критичних точках.

Новий числовий метод для визначення природи фазового переходу запропонований в [9], а в [10] описується новий числовий підхід до дослідження критичних властивостей моделей Ізінга розмірністю більше двох, що грунтується на розрахунку матриці переходу.

Інтерпретації деяких експериментів з феромагнетиками по визначенню критичних показників поблизу точки фазового переходу другого роду присвячена робота [11], де основну роль при цьому відводиться наявності заморожених неоднорідностей типу "локальна температура фазового переходу".

Ряд методів розрахунку термодинамічних функцій для класу граткових моделей, який включає в себе і модель Ізінга, обговорюється в [12]. В [13] на основі розкладу виразу для вільної енергії по спінових кластерах систематично викладається наближення рядів по цих кластерах. В рамках цього наближення обчислено критичну температуру і критичні показники для ізінгівських систем різної розмірності. При дослідженні поведінки ізінгівського феромагнетика з безмежним спіном одержано низькотемпературний розклад для вільної енергії, формули для теплоємності, спонтанної намагніченості і магнітної сприйнятливості в нульовому полі [14]. У цій же статті із високотемпературного розкладу вільної енергії знайдено вираз для високотемпературної магнітної сприйнятливості.

В [15] дано огляд літератури, що стосується перевірки умов застосування наближення середнього поля при аналізі критичних явищ. Огляд класифікації фазових переходів і її зв'язків з основами статистичної фізики приведено у роботі [16]. Впорядкування в феромагнетиках з позицій статистичної термодинаміки розглядається в [17].

У статті [18] застосування методу когерентної аномалії до рокладів в ряди перевіряється з допомогою пробних функцій та розрахунку критичного показника сприйнятливості для моделі Ізінга.

Дальшому розвитку підходу до опису фазових переходів другого роду, який грунтується на методі колективних змінних (КЗ) [19], присвячена дана робота. Об'єктом дослідження є тривимірна модель Ізінга. В роботі одержані термодинамічні функції цієї моделі в наближенні шестирного розподілу з врахуванням першої конфлуентної поправки для $T < T_c$ (низькотемпературна область). Дана робота – продовження роботи [20], де аналогічні дослідження виконано для випадку $T > T_c$. Вона доповнює цикл робіт [21–28], що містять розрахунок в методі КЗ термодинамічних характеристик тривимірної ізінгівської системи в низькотемпературній області, причому в [21] обчислення виконані в рамках моделі ρ^4 без врахування конфлуентних поправок, в [22,23] – з врахуванням першої конфлуентної поправки, в [24–27] – з врахуванням першої і другої конфлуентних поправок, в [28] – в наближенні моделі ρ^6 без врахування конфлуентних поправок.

1. Схема розрахунку вільної енергії системи при $\mathbf{T < T_c}$

Як і при $T > T_c$, вільну енергію системи будемо обчислювати, розділяючи вклади від коротко- і довгохвильових мод коливань спінової густини. Для неї при $T < T_c$ маємо

$$F = F_0 + F_{\rm КР} + F_{\rm ІГР}, \tag{1.1}$$

де $F_0 = -kTN \ln 2$ відповідає вільній енергії невзаємодіючих спінів, $F_{\rm КР}$ – вкладу у вільну енергію від короткохвильових фаз флуктуацій густини спінового моменту (область критичного режиму(КР)), а $F_{\rm ІГР}$ – вкладу від довгохвильових фаз флуктуацій (область інверсного гаусового режиму(ІГР)).

В області КР справедливі розв'язки рекурентних співвідношень (РС) ренормгрупового (РГ) типу (див., наприклад, [20]). ІГР, на відміну від граничного гаусового режиму (ГГР) при $T > T_c$, описується негаусовою густиною міри. Слід відзначити, що у випадку $T < T_c$ в системі виникає відмінний від нуля параметр порядку. Він не вводиться як незалежна величина, а визначається з допомогою безпосереднього розрахунку. Це є можливим, оскільки серед множини КЗ міститься змінна ρ_0, зв'язана із параметром порядку. Тільки в результаті виділення вільної енергії впорядкування розподіл приймає гаусів характер.

Коротко- і довгохвильові фази флуктуацій спінової густини при $T < T_c$ розділяє номер шару фазового простору КЗ μ_τ. КР має місце для шарів фазового простору КЗ $n \le \mu_\tau$, а ІГР – для $n > \mu_\tau$. Умовою для визначення μ_τ служить рівність

$$\frac{r_{\mu_\tau+1} - r^{(0)}}{r^{(0)}} = \delta. \tag{1.2}$$

Тут δ – постійна величина ($\delta \le 1$), $r_{\mu_\tau+1}$ визначається із розв'язків РС, $r^{(0)}$ відповідає одній із координат фіксованої точки [20]. Згідно (1.2) отримуємо рівняння

$$\tilde{c}_1|\tau|E_1^{\mu_\tau+1} = f_0\delta + c_{20}w_{12}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}E_2^{\mu_\tau+1} + c_{30}w_{13}^{(0)}\varphi_0^{-1}E_3^{\mu_\tau+1}, \tag{1.3}$$

де

$$\begin{aligned} \tilde{c}_1 &= \tilde{c}_1^{(0)} - \tilde{c}_1^{(1)}|\tau|, \\ c_{20} &= c_{20}^{(0)} - c_{20}^{(1)}|\tau| + c_{20}^{(2)}|\tau|^2, \\ c_{30} &= c_{30}^{(0)} - c_{30}^{(1)}|\tau| + c_{30}^{(2)}|\tau|^2. \end{aligned} \tag{1.4}$$

Величини, що входять в (1.3), (1.4), містяться у [20].

Як і у випадку $T > T_c$, (1.3) розв'язуватимемо методом послідовних наближень. На основі двох наближень (нульового та першого) знаходимо

$$\begin{aligned} \mu_\tau &= \mu_\tau^{(0)} - m_{\Delta_1}|\tau|^{\Delta_1}, \\ \mu_\tau^{(0)} &= -\frac{\ln|\tau|}{\ln E_1} + \mu_0 - 1, \\ \mu_0 &= m_c. \end{aligned} \tag{1.5}$$

Вигляд m_{Δ_1}, Δ_1, m_c приведений у роботі [20].

Вираз для номера шару μ_τ, який визначає точку виходу системи із КР при $T < T_c$, дозволяє знайти як $F_{\text{КР}}$, так і $F_{\text{ІГР}}$. Перейдемо до цих розрахунків.

2. Термодинамічні функції системи, що відповідають області критичного режиму

Так як і при $T > T_c$, розрахунок вкладу у вільну енергію системи від області КР $F_{\text{КР}}$ зв'язаний із сумуванням по шарах фазового простору КЗ парціальних вільних енергій. Виділяючи явну залежність від номера шару, використовуючи (1.5) і співвідношення

$$\begin{aligned} E_1^{\mu_\tau+1} &= \frac{f_0\delta(1 - m_2|\tau|^{\Delta_1})}{\tilde{c}_1|\tau|}, \\ E_2^{\mu_\tau^{(0)}+1} &= \left(\frac{\tilde{c}_1^{(0)}}{f_0\delta}\right)^{\Delta_1}|\tau|^{\Delta_1}, \\ s^{-3(\mu_\tau+1)} &= s^{-3(\mu_\tau^{(0)}+1)}(1 + \mathcal{N}_1^-|\tau|^{\Delta_1}), \\ s^{-3(\mu_\tau^{(0)}+1)} &= s^{-3\mu_0}|\tau|^{3\nu}, \qquad s^{-3\mu_0} = c_\nu^3, \\ \mathcal{N}_1^- &= -\mathcal{N}_1^+, \end{aligned} \tag{2.1}$$

приходимо до виразу

$$\begin{aligned} F_{KP} = -kTN'\Big[&\gamma_0 + \delta_0 - \gamma_3^{(KP)(0)-}|\tau|^{3\nu} - \\ &-\gamma_3^{(KP)(1)-}|\tau|^{3\nu+\Delta_1}\Big]. \end{aligned} \tag{2.2}$$

Величини m_2, c_ν, $\mathcal{N}_1^+$, а також N' ті ж, що і при $T > T_c$ (див. [20]). Коефіцієнти γ_0 і δ_0 одержуємо із відповідних виразів для випадку $T > T_c$, покладаючи в них $\tau = -|\tau|$. Коефіцієнти $\gamma_3^{(\text{КР})(l)-}$ подамо у формі, в якій виділено універсальний множник $\bar{\gamma}_3^{(\text{КР})(l)-}$, що не залежить від мікроскопічних параметрів системи. До останніх в нашому випадку відносяться параметри експонентно спадного потенціалу взаємодії (радіус дії b потенціалу, фур'є-образ $\tilde{\Phi}(0)$ потенціалу при нульовому значенні хвильового вектора) і така характеристика простої кубічної гратки як її постійна c. Маємо

$$\begin{aligned} \gamma_3^{(KP)(l)-} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{\gamma}_3^{(KP)(l)-}, \qquad l = 0, 1, \\ \bar{\gamma}_3^{(KP)(0)-} &= \gamma^-, \qquad \bar{\gamma}_3^{(KP)(1)-} = \gamma_{\Delta_1}^- - \Phi_0(\gamma_{11}^- + 3\nu\gamma^-). \end{aligned} \tag{2.3}$$

Тут

$$\begin{aligned} \gamma^- &= \frac{f_{KP}^{(0)}}{1 - s^{-3}} - \frac{f_{KP}^{(1)}\varphi_0^{-1/2}f_0\delta}{1 - E_1 s^{-3}} + \frac{f_{KP}^{(7)}\varphi_0^{-1}(f_0\delta)^2}{1 - E_1^2 s^{-3}}, \\ \gamma_{\Delta_1}^- &= \frac{f_{KP}^{(2)}\varphi_0^{-1}}{1 - E_2 s^{-3}} - \frac{f_{KP}^{(4)}\varphi_0^{-3/2}f_0\delta}{1 - E_1E_2 s^{-3}} + \frac{f_{KP}^{(8)}\varphi_0^{-2}(f_0\delta)^2}{1 - E_1^2E_2 s^{-3}}, \end{aligned} \tag{2.4}$$

$$\gamma_{11}^{-} = \frac{f_{KP}^{(1)}\varphi_0^{-1/2}f_0\delta}{1-E_1 s^{-3}} - \frac{2f_{KP}^{(7)}\varphi_0^{-1}(f_0\delta)^2}{1-E_1^2 s^{-3}}.$$

Відмітимо, що c_{Δ_1}, ν та величини, які входять в (2.4), такі ж, як і в роботі [20]. В останній визначені і коефіцієнти формул

$$\gamma_0 = \gamma_0^{(0)} - \gamma_0^{(1)}|\tau| + \gamma_0^{(2)}|\tau|^2, \qquad (2.5)$$
$$\delta_0 = \delta_0^{(0)} - \delta_0^{(1)}|\tau| + \delta_0^{(2)}|\tau|^2,$$

з допомогою яких із (2.2) остаточно обчислюємо вільну енергію, що відповідає області КР. Вона представляється у вигляді

$$F_{KP} = -kTN'\left[\gamma_0^{(KP)} - \gamma_1|\tau| + \gamma_2|\tau|^2 - \gamma_3^{(KP)(0)-}|\tau|^{3\nu} - \right. \qquad (2.6)$$
$$\left. -\gamma_3^{(KP)(1)-}|\tau|^{3\nu+\Delta_1}\right],$$

де залежні від мікроскопічних параметрів системи $\gamma_0^{(\mathrm{KP})}$, γ_1, γ_2 співпадають із відповідними величинами при $T > T_c$. Критичний показник кореляційної довжини ν та показник $\Delta_1 = -\frac{\ln E_2}{\ln E_1}$ при різних значеннях параметра поділу s фазового простору КЗ на шари приведені в таблиці 1.

Табл. 1: Значення критичних показників та показника Δ_1 (модель ρ^6).

s	ν	Δ_1	α	β	γ
2.0000	0.619	0.653	0.143	0.309	1.238
2.5000	0.634	0.552	0.099	0.317	1.268
2.7349	0.637	0.525	0.088	0.319	1.275
3.0000	0.640	0.503	0.079	0.320	1.281
3.5000	0.645	0.476	0.066	0.322	1.290
3.5862	0.645	0.473	0.064	0.323	1.291
4.0000	0.648	0.460	0.055	0.324	1.296

Здійснюючи диференціювання виразу F_{KP} (2.6) по температурі, знаходимо наступні вирази для ентропії S_{KP}, внутрішньої енергії U_{KP} та теплоємності C_{KP} в області КР:

$$S_{KP} = kN'\left[s^{(KP)(0)} - c_0|\tau| + u_3^{(KP)(0)-}|\tau|^{1-\alpha} + \right.$$
$$\left. +u_3^{(KP)(1)-}|\tau|^{1-\alpha+\Delta_1}\right],$$

$$U_{KP} = kTN'\left[\gamma_1 - u_1|\tau| + u_3^{(KP)(0)-}|\tau|^{1-\alpha} + \right. \qquad (2.7)$$
$$\left. +u_3^{(KP)(1)-}|\tau|^{1-\alpha+\Delta_1}\right],$$
$$C_{KP} = kN'\left[c_0 - c_3^{(KP)(0)-}|\tau|^{-\alpha} - c_3^{(KP)(1)-}|\tau|^{\Delta_1-\alpha}\right].$$

Тут

$$u_3^{(KP)(l)-} = c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{u}_3^{(KP)(l)-}, \qquad l = 0, 1,$$
$$\bar{u}_3^{(KP)(0)-} = 3\nu\bar{\gamma}_3^{(KP)(0)-},$$
$$\bar{u}_3^{(KP)(1)-} = (3\nu+\Delta_1)\bar{\gamma}_3^{(KP)(1)-}, \qquad (2.8)$$
$$c_3^{(KP)(l)-} = c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{c}_3^{(KP)(l)-},$$
$$\bar{c}_3^{(KP)(0)-} = 3\nu(3\nu-1)\bar{\gamma}_3^{(KP)(0)-},$$
$$\bar{c}_3^{(KP)(1)-} = (3\nu+\Delta_1)(3\nu+\Delta_1-1)\bar{\gamma}_3^{(KP)(1)-}.$$

Інші коефіцієнти та критичний показник теплоємності α (див. таблицю 1) визначені в роботі [20].

3. Термодинамічні функції системи, що відповідають області інверсного гаусового режиму

Розрахуємо вклад у вільну енергію системи від області ІГР

$$F_{\text{ІГР}} = -kTN'\ s^{-3(\mu_\tau+1)}\ \ln\left[\sqrt{2}\ Q(P_{\mu_\tau})\right] - kT\ln Z_{\mu_\tau+1}, \qquad (3.1)$$

де

$$\sqrt{2}\ Q(P_{\mu_\tau}) = \left(\frac{4s^3 u_{\mu_\tau} s^{-4\mu_\tau}}{\pi^4 C(h_{\mu_\tau}, \alpha_{\mu_\tau})}\right)^{1/4} I_0(\eta_{\mu_\tau}, \xi_{\mu_\tau}), \qquad (3.2)$$

а для $Z_{\mu_\tau+1}$ в наближенні моделі ρ^6 маємо

$$Z_{\mu_\tau+1} = \int \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{k\le B_{\mu_\tau+1}} d_{\mu_\tau+1}(k)\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}} - \right.$$
$$-\sum_{l=2}^{3}\frac{a_{2l}^{(\mu_\tau+1)}}{(2l)!N_{\mu_\tau+1}^{l-1}}\sum_{k_1,\ldots,k_{2l}\le B_{\mu_\tau+1}}\rho_{\mathbf{k}_1}\cdots\rho_{\mathbf{k}_{2l}}\ \times \qquad (3.3)$$
$$\left.\times\delta_{\mathbf{k}_1+\cdots+\mathbf{k}_{2l}}\right]\ (d\rho)^{N_{\mu_\tau+1}}.$$

При цьому будемо виходити із співвідношень

$$
\begin{aligned}
r_{\mu_\tau+m} &= -\beta\tilde{\Phi}(0)\left(\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+m} - \bar{r}^{(1)}_{\mu_\tau+m}|\tau|^{\Delta_1}\right),\\
\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+m} &= f_0(\delta E_1^{m-1}+1),\\
\bar{r}^{(1)}_{\mu_\tau+m} &= c_{\Delta_1} E_2^{m-1}\varphi_0^{-1/2} w_{12}^{(0)} e_{1m};\\
u_{\mu_\tau+m} &= (\beta\tilde{\Phi}(0))^2\left(\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+m} + \bar{u}^{(1)}_{\mu_\tau+m}|\tau|^{\Delta_1}\right),\\
\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+m} &= \varphi_0 - f_0\delta\varphi_0^{1/2} w_{21}^{(0)} E_1^{m-1},\\
\bar{u}^{(1)}_{\mu_\tau+m} &= c_{\Delta_1} E_2^{m-1} e_{2m};\\
w_{\mu_\tau+m} &= (\beta\tilde{\Phi}(0))^3\left(\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+m} + \bar{w}^{(1)}_{\mu_\tau+m}|\tau|^{\Delta_1}\right),\\
\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+m} &= \psi_0 - f_0\delta\varphi_0 w_{31}^{(0)} E_1^{m-1},\\
\bar{w}^{(1)}_{\mu_\tau+m} &= c_{\Delta_1} E_2^{m-1}\varphi_0^{1/2} w_{32}^{(0)} e_{3m},
\end{aligned}
\tag{3.4}
$$

на основі яких для $h_{\mu_\tau+m} = (r_{\mu_\tau+m}+q)(\frac{6}{u_{\mu_\tau+m}})^{1/2}$, $\alpha_{\mu_\tau+m} = \frac{\sqrt{6}}{15}\times$ $\times\frac{w_{\mu_\tau+m}}{(u_{\mu_\tau+m})^{3/2}}$ одержуємо

$$
\begin{aligned}
h_{\mu_\tau+m} &= h^{(0)}_{\mu_\tau+m}\left(1 + h^{(1)}_{\mu_\tau+m}|\tau|^{\Delta_1}\right),\\
h^{(0)}_{\mu_\tau+m} &= \sqrt{6}\,\frac{\bar{q} - \bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+m}}{(\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+m})^{1/2}},\\
h^{(1)}_{\mu_\tau+m} &= c_{\Delta_1}\bar{h}^{(1)}_{\mu_\tau+m},\\
\bar{h}^{(1)}_{\mu_\tau+m} &= E_2^{m-1}\varphi_0^{-1/2}\left(\frac{w_{12}^{(0)} e_{1m}}{\bar{q} - \bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+m}} - \frac{1}{2}\,\frac{\varphi_0^{1/2} e_{2m}}{\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+m}}\right);\\
\alpha_{\mu_\tau+m} &= \alpha^{(0)}_{\mu_\tau+m}\left(1 + \alpha^{(1)}_{\mu_\tau+m}|\tau|^{\Delta_1}\right),\\
\alpha^{(0)}_{\mu_\tau+m} &= \frac{\sqrt{6}}{15}\,\frac{\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+m}}{(\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+m})^{3/2}},\\
\alpha^{(1)}_{\mu_\tau+m} &= c_{\Delta_1}\bar{\alpha}^{(1)}_{\mu_\tau+m},\\
\bar{\alpha}^{(1)}_{\mu_\tau+m} &= E_2^{m-1}\varphi_0^{1/2}\left(\frac{w_{32}^{(0)} e_{3m}}{\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+m}} - \frac{3}{2}\,\frac{\varphi_0^{-1/2} e_{2m}}{\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+m}}\right).
\end{aligned}
\tag{3.5}
$$

Вирази для e_{1m}, e_{2m}, e_{3m} приведені в [20].

Обчислимо перший доданок правої частини виразу для $F_{\text{IГР}}$ (3.1). Величини h_{μ_τ} і α_{μ_τ}, які входять в цей доданок (див. (3.1), (3.2)), знаходимо із співвідношень (3.5) при $m=0$. Для функції $C(h_{\mu_\tau}, \alpha_{\mu_\tau})$

будемо використовувати представлення у вигляді ряду відносно малих відхилень її аргументів (див. [29]). З точністю до $|\tau|^{\Delta_1}$ запишемо

$$
\begin{aligned}
C(h_{\mu_\tau}, \alpha_{\mu_\tau}) = p_{40}^{(\mu_\tau)}\Big[1 - (p_{41}^{(\mu_\tau)} h^{(0)}_{\mu_\tau} h^{(1)}_{\mu_\tau} +\\
+ p_{42}^{(\mu_\tau)}\alpha^{(0)}_{\mu_\tau}\alpha^{(1)}_{\mu_\tau})|\tau|^{\Delta_1}\Big].
\end{aligned}
\tag{3.6}
$$

Тут коефіцієнти $p_{4j}^{(\mu_\tau)} (j=0,1,2)$ – функції $F_{2l}^{*(\mu_\tau)} = \frac{I_{2l}^{*(\mu_\tau)}}{I_0^{*(\mu_\tau)}}$, де

$$
I_{2l}^{*(\mu_\tau)} = \int_0^\infty x^{2l}\exp\left(-h^{(0)}_{\mu_\tau}x^2 - x^4 - \alpha^{(0)}_{\mu_\tau}x^6\right)dx. \tag{3.7}
$$

Величини

$$
\begin{aligned}
\eta_{\mu_\tau} &= \sqrt{6}\; s^{3/2}\; F_2(h_{\mu_\tau}, \alpha_{\mu_\tau})[C(h_{\mu_\tau}, \alpha_{\mu_\tau})]^{-1/2},\\
\xi_{\mu_\tau} &= \frac{\sqrt{6}}{15}\; s^{-3/2}\; N(h_{\mu_\tau}, \alpha_{\mu_\tau})[C(h_{\mu_\tau}, \alpha_{\mu_\tau})]^{-3/2}
\end{aligned}
\tag{3.8}
$$

після використання розкладів для функцій, через які вони виражаються [29], і виділення в них температурної залежності задаються виразами, аналогічними випадку $T > T_c$ [20]:

$$
\begin{aligned}
\eta_{\mu_\tau} &= \eta^{(0)}_{\mu_\tau}\left[1 - \left(\bar{\eta}_1^{(\mu_\tau)} h^{(0)}_{\mu_\tau} h^{(1)}_{\mu_\tau} + \bar{\eta}_2^{(\mu_\tau)}\alpha^{(0)}_{\mu_\tau}\alpha^{(1)}_{\mu_\tau}\right)|\tau|^{\Delta_1}\right],\\
\xi_{\mu_\tau} &= \xi^{(0)}_{\mu_\tau}\left[1 - \left(\bar{\xi}_1^{(\mu_\tau)} h^{(0)}_{\mu_\tau} h^{(1)}_{\mu_\tau} + \bar{\xi}_2^{(\mu_\tau)}\alpha^{(0)}_{\mu_\tau}\alpha^{(1)}_{\mu_\tau}\right)|\tau|^{\Delta_1}\right].
\end{aligned}
\tag{3.9}
$$

В (3.2) входить функція $I_0(\eta_{\mu_\tau}, \xi_{\mu_\tau})$. На основі приведеної для неї в [28] аналітичної форми з врахуванням пропорціонального до $|\tau|^{\Delta_1}$ доданка отримуємо

$$
\begin{aligned}
I_0(\eta_{\mu_\tau}, \xi_{\mu_\tau}) &= I_0^{**(\mu_\tau)}\Big[1 + \Big(b_1^{(\mu_\tau)} h^{(0)}_{\mu_\tau} h^{(1)}_{\mu_\tau} +\\
&\quad + b_2^{(\mu_\tau)}\alpha^{(0)}_{\mu_\tau}\alpha^{(1)}_{\mu_\tau}\Big)|\tau|^{\Delta_1}\Big],\\
b_k^{(\mu_\tau)} &= \eta^{(0)}_{\mu_\tau}\bar{\eta}_k^{(\mu_\tau)} F_2^{**(\mu_\tau)} + \xi^{(0)}_{\mu_\tau}\bar{\xi}_k^{(\mu_\tau)} F_6^{**(\mu_\tau)}, \qquad k=1,2.
\end{aligned}
\tag{3.10}
$$

Тут $F_{2l}^{**(\mu_\tau)} = \frac{I_{2l}^{**(\mu_\tau)}}{I_0^{**(\mu_\tau)}}$, де

$$
I_{2l}^{**(\mu_\tau)} = \int_0^\infty x^{2l}\exp\left(-\eta^{(0)}_{\mu_\tau}x^2 - x^4 - \xi^{(0)}_{\mu_\tau}x^6\right)dx. \tag{3.11}
$$

Тепер, маючи вирази для $s^{-3(\mu_\tau+1)}$ (див. (2.1)), u_{μ_τ} (див. (3.4)), $C(h_{\mu_\tau},\alpha_{\mu_\tau})$ (3.6) та $I_0(\eta_{\mu_\tau},\xi_{\mu_\tau})$ (3.10), можемо представити перший доданок правої частини рівності (3.1) у вигляді

$$-kTN'\ s^{-3(\mu_\tau+1)}\ \ln\left[\sqrt{2}\ Q(P_{\mu_\tau})\right] = -kTN'\left(\gamma_g|\tau|^{3\nu}+ +s^{-3(\mu_\tau+1)}\ln\frac{\sqrt{\beta\tilde{\Phi}(0)}}{s^{\mu_\tau+1}}\right). \tag{3.12}$$

Коефіцієнти $\gamma_g^{(l)}$ величини

$$\gamma_g=\gamma_g^{(0)}+\gamma_g^{(1)}|\tau|^{\Delta_1} \tag{3.13}$$

визначаються співвідношеннями

$$\begin{aligned}
&\gamma_g^{(l)}=c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l\bar{\gamma}_g^{(l)}, \qquad l=0,1,\\
&\bar{\gamma}_g^{(0)}=\ln\left[\left(\frac{4s^7\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau}}{\pi^4 p_{40}^{(\mu_\tau)}}\right)^{1/4} I_0^{**(\mu_\tau)}\right],\\
&\bar{\gamma}_g^{(1)}=\bar{\gamma}_{g1}-3\nu\Phi_0\bar{\gamma}_g^{(0)},\\
&\bar{\gamma}_{g1}=\frac{1}{4}\ \frac{\bar{\bar{u}}^{(1)}_{\mu_\tau}}{\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau}}+\left(\frac{1}{4}p_{41}^{(\mu_\tau)}+b_1^{(\mu_\tau)}\right)h^{(0)}_{\mu_\tau}\bar{h}^{(1)}_{\mu_\tau}+\left(\frac{1}{4}p_{42}^{(\mu_\tau)}+ +b_2^{(\mu_\tau)}\right)\alpha^{(0)}_{\mu_\tau}\bar{\alpha}^{(1)}_{\mu_\tau}.
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Зауважимо, що $p_{40}^{(\mu_\tau)}=C(h^{(0)}_{\mu_\tau},\alpha^{(0)}_{\mu_\tau})$, $I_0^{**(\mu_\tau)}=I_0(\eta^{(0)}_{\mu_\tau},\xi^{(0)}_{\mu_\tau})$. Це випливає із рядів відповідних функцій [28,29], де в якості аргументів покладаються $h^{(0)}_{\mu_\tau}$ і $\alpha^{(0)}_{\mu_\tau}$, $\eta^{(0)}_{\mu_\tau}$і $\xi^{(0)}_{\mu_\tau}$. Величини $\bar{\bar{u}}^{(1)}_{\mu_\tau}$, $\bar{h}^{(1)}_{\mu_\tau}$, $\bar{\alpha}^{(1)}_{\mu_\tau}$ не залежать від b, c, $\tilde{\Phi}(0)$. Вони одержані в результаті виключення із $\bar{u}^{(1)}_{\mu_\tau}$, $h^{(1)}_{\mu_\tau}$, $\alpha^{(1)}_{\mu_\tau}$ неуніверсальногофактора c_{Δ_1}.

Другий доданок правої частини (3.1) зв'язаний із розрахунком $Z_{\mu_\tau+1}$ (3.3), де

$$\begin{aligned}
&N_{\mu_\tau+1}=s^{-3(\mu_\tau+1)}N',\\
&d_{\mu_\tau+1}(k)=s^{-2(\mu_\tau+1)}r_{\mu_\tau+1}+\tilde{q}k^2, \qquad \tilde{q}=2b^2\beta\tilde{\Phi}(0),\\
&a_4^{(\mu_\tau+1)}=s^{-4(\mu_\tau+1)}u_{\mu_\tau+1},\\
&a_6^{(\mu_\tau+1)}=s^{-6(\mu_\tau+1)}w_{\mu_\tau+1},
\end{aligned} \tag{3.15}$$

а $r_{\mu_\tau+1}$, $u_{\mu_\tau+1}$, $w_{\mu_\tau+1}$ обчислюються із (3.4) при $m=1$. Відмітимо, що при цьому $\bar{r}^{(1)}_{\mu_\tau+1}=0$.

У блочній структурі, яка описується $Z_{\mu_\tau+1}$, існує відмінний від нуля середній спіновий момент. Для виділення вільної енергії, що відповідає впорядкуванню, яке виникло в системі, здійснимо у виразі для $Z_{\mu_\tau+1}$ заміну змінних

$$\rho_{\mathbf{k}}=\rho'_{\mathbf{k}}+\sqrt{N}\langle\bar{\sigma}\rangle\delta_{\mathbf{k}}. \tag{3.16}$$

Параметр зміщення $\langle\bar{\sigma}\rangle$ визначаємо із умови екстремальності макроскопічної частини гамільтоніану $\mu_\tau+1$-ої блочної структури [19]:

$$\begin{aligned}
&\langle\bar{\sigma}\rangle^2=10\ \frac{a_4^{(\mu_\tau+1)}}{a_6^{(\mu_\tau+1)}}\ \frac{N_{\mu_\tau+1}}{N}(-1+b_2),\\
&b_2=\left(1+\frac{6}{5}\ \frac{a_6^{(\mu_\tau+1)}|d_{\mu_\tau+1}(0)|}{(a_4^{(\mu_\tau+1)})^2}\right)^{1/2}.
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Одночасно включимо в розгляд постійне зовнішнє поле $\boldsymbol{\mathcal{H}}$, яке б «тримало» виділений середній момент. Виділяючи із сум по k доданки з $k=0$, знаходимо (штрихи біля ρ_0 і $\rho_{\mathbf{k}}$ опущено)

$$\begin{aligned}
Z_{\mu_\tau+1}=&\exp\left(-\beta F_\sigma+\beta F_h\right)\int d\rho_0\ \exp\Bigg(\beta\sqrt{N}\ h\rho_0-\\
&-\frac{1}{2}\bar{d}_{\mu_\tau+1}(0)\rho_0^2-\frac{b_3^{(\mu_\tau+1)}}{3!N_{\mu_\tau+1}^{1/2}}\ \rho_0^3-\frac{b_4^{(\mu_\tau+1)}}{4!N_{\mu_\tau+1}}\ \rho_0^4-\frac{b_5^{(\mu_\tau+1)}}{5!N_{\mu_\tau+1}^{3/2}}\ \rho_0^5-\\
&-\frac{a_6^{(\mu_\tau+1)}}{6!N_{\mu_\tau+1}^2}\ \rho_0^6\Bigg)\int\exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{k\le B_{\mu_\tau+1}}{}'\ \bar{d}_{\mu_\tau+1}(k)\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}}\right]\times\\
&\times\exp\left(p_0+p_1\rho_0+p_2\rho_0^2+p_3\rho_0^3+p_4\rho_0^4\right)(d\rho)^{N_{\mu_\tau+1}-1}.
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Тут штрих біля суми по k означає $k\neq 0$,

$$\begin{aligned}
-\beta F_\sigma=&\ \frac{10}{3}\ |d_{\mu_\tau+1}(0)|\ \frac{a_4^{(\mu_\tau+1)}}{a_6^{(\mu_\tau+1)}}\ N_{\mu_\tau+1}(-1+b_2)-\\
&-\frac{25}{18}\ \frac{(a_4^{(\mu_\tau+1)})^3}{(a_6^{(\mu_\tau+1)})^2}N_{\mu_\tau+1}(-1+b_2)^2,\\
\beta F_h=&\ \beta h\left[10\ \frac{a_4^{(\mu_\tau+1)}}{a_6^{(\mu_\tau+1)}}\ NN_{\mu_\tau+1}(-1+b_2)\right]^{1/2},\\
h=&\ \mu_{\text{Б}}\mathcal{H}.
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Для коефіцієнтів підінтегрального виразу (3.18) маємо

$$\bar{d}_{\mu_\tau+1}(k) = 4|d_{\mu_\tau+1}(0)| - \frac{10}{3}\ \frac{(a_4^{(\mu_\tau+1)})^2}{a_6^{(\mu_\tau+1)}}\ (-1+b_2) + \tilde{q}k^2,$$

$$b_3^{(\mu_\tau+1)} = \left(\frac{10}{a_6^{(\mu_\tau+1)}}\right)^{1/2} (a_4^{(\mu_\tau+1)})^{3/2}\ (-1+b_2)^{1/2} \times$$

$$\times \left[1+\frac{5}{3}\ (-1+b_2)\right], \tag{3.20}$$

$$b_4^{(\mu_\tau+1)} = a_4^{(\mu_\tau+1)}\left[1+5(-1+b_2)\right],$$

$$b_5^{(\mu_\tau+1)} = \left(10 a_4^{(\mu_\tau+1)} a_6^{(\mu_\tau+1)}\right)^{1/2} (-1+b_2)^{1/2},$$

а величини p_0, p_1, ..., p_4 задаються формулами

$$p_0 = -\frac{b_3^{(\mu_\tau+1)}}{3! N_{\mu_\tau+1}^{1/2}} \sum_{k_i \le B_{\mu_\tau+1}}{}' \rho_{\mathbf{k}_1}\cdots\rho_{\mathbf{k}_3}\ \delta_{\mathbf{k}_1+\cdots+\mathbf{k}_3} - \frac{b_4^{(\mu_\tau+1)}}{4! N_{\mu_\tau+1}} \times$$

$$\times \sum_{k_i \le B_{\mu_\tau+1}}{}' \rho_{\mathbf{k}_1}\cdots\rho_{\mathbf{k}_4}\ \delta_{\mathbf{k}_1+\cdots+\mathbf{k}_4} - \frac{b_5^{(\mu_\tau+1)}}{5! N_{\mu_\tau+1}^{3/2}} \times$$

$$\times \sum_{k_i \le B_{\mu_\tau+1}}{}' \rho_{\mathbf{k}_1}\cdots\rho_{\mathbf{k}_5}\delta_{\mathbf{k}_1+\cdots+\mathbf{k}_5} - \frac{a_6^{(\mu_\tau+1)}}{6! N_{\mu_\tau+1}^2} \times$$

$$\times \sum_{k_i \le B_{\mu_\tau+1}}{}' \rho_{\mathbf{k}_1}\cdots\rho_{\mathbf{k}_6}\ \delta_{\mathbf{k}_1+\cdots+\mathbf{k}_6},$$

$$p_1 = -\frac{b_3^{(\mu_\tau+1)}}{2 N_{\mu_\tau+1}^{1/2}} \sum_{k \le B_{\mu_\tau+1}}{}' \rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}} - \frac{b_4^{(\mu_\tau+1)}}{3! N_{\mu_\tau+1}} \sum_{k_i \le B_{\mu_\tau+1}}{}' \rho_{\mathbf{k}_1}\cdots\rho_{\mathbf{k}_3} \times$$

$$\times\ \delta_{\mathbf{k}_1+\cdots+\mathbf{k}_3} - \frac{b_5^{(\mu_\tau+1)}}{4! N_{\mu_\tau+1}^{3/2}} \sum_{k_i \le B_{\mu_\tau+1}}{}' \rho_{\mathbf{k}_1}\cdots\rho_{\mathbf{k}_4}\ \delta_{\mathbf{k}_1+\cdots+\mathbf{k}_4} -$$

$$-\frac{a_6^{(\mu_\tau+1)}}{5! N_{\mu_\tau+1}^2} \sum_{k_i \le B_{\mu_\tau+1}}{}' \rho_{\mathbf{k}_1}\cdots\rho_{\mathbf{k}_5}\delta_{\mathbf{k}_1+\cdots+\mathbf{k}_5}, \tag{3.21}$$

$$p_2 = -\frac{b_4^{(\mu_\tau+1)}}{4 N_{\mu_\tau+1}} \sum_{k \le B_{\mu_\tau+1}}{}' \rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}} - \frac{b_5^{(\mu_\tau+1)}}{12 N_{\mu_\tau+1}^{3/2}} \sum_{k_i \le B_{\mu_\tau+1}}{}' \rho_{\mathbf{k}_1}\cdots\rho_{\mathbf{k}_3} \times$$

$$\times\ \delta_{\mathbf{k}_1+\cdots+\mathbf{k}_3} - \frac{a_6^{(\mu_\tau+1)}}{48 N_{\mu_\tau+1}^2} \sum_{k_i \le B_{\mu_\tau+1}}{}' \rho_{\mathbf{k}_1}\cdots\rho_{\mathbf{k}_4}\ \delta_{\mathbf{k}_1+\cdots+\mathbf{k}_4},$$

$$p_3 = -\frac{b_5^{(\mu_\tau+1)}}{12 N_{\mu_\tau+1}^{3/2}} \sum_{k \le B_{\mu_\tau+1}}{}' \rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}} - \frac{a_6^{(\mu_\tau+1)}}{36 N_{\mu_\tau+1}^2} \sum_{k_i \le B_{\mu_\tau+1}}{}' \rho_{\mathbf{k}_1}\cdots\rho_{\mathbf{k}_3} \times$$

$$\times\ \delta_{\mathbf{k}_1+\cdots+\mathbf{k}_3},$$

$$p_4 = -\frac{a_6^{(\mu_\tau+1)}}{48 N_{\mu_\tau+1}^2} \sum_{k \le B_{\mu_\tau+1}}{}' \rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}}.$$

Розкладаємо вираз $\exp\left(p_0+p_1\rho_0+p_2\rho_0^2+p_3\rho_0^3+p_4\rho_0^4\right)$ в ряд, обмежуємося членами другого порядку малості і виконуємо інтегрування в (3.18) по змінних $\rho_{\mathbf{k}}$ з $k \ne 0$ з використанням гаусового базисного розподілу

$$\mathcal{W}_G^{(\mu_\tau+1)}(\rho) = \exp\left[-\frac{1}{2} \sum_{k \le B_{\mu_\tau+1}}{}' \bar{d}_{\mu_\tau+1}(k)\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}}\right]. \tag{3.22}$$

Величина b_2, через яку виражається коефіцієнт $\bar{d}_{\mu_\tau+1}(k)$ цього розподілу (див. (3.20)), і самий цей коефіцієнт після виділення в них залежності від температури приймають вигляд

$$b_2 = b_2^{(0)}(1+b_2^{(1)}|\tau|^{\Delta_1}),$$

$$b_2^{(0)} = \left(1+\frac{6}{5}\ \frac{\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+1}\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1}}{(\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}\right)^{1/2},$$

$$b_2^{(1)} = -\frac{3}{5}\ \frac{\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+1}\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1}}{(\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}\left(1+\frac{6}{5}\ \frac{\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+1}\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1}}{(\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}\right)^{-1} \times$$

$$\times\left(2\ \frac{\bar{u}^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+1}} - \frac{\bar{w}^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\right);$$

$$\bar{d}_{\mu_\tau+1}(k) = \bar{d}_{\mu_\tau+1}(0) + \tilde{q}k^2, \tag{3.23}$$

$$\bar{d}_{\mu_\tau+1}(0) = c_\nu^2|\tau|^{2\nu}\beta\tilde{\Phi}(0)\bar{d}^{(0)}_{\mu_\tau+1}(0)\left(1+\bar{d}^{(1)}_{\mu_\tau+1}(0)|\tau|^{\Delta_1}\right),$$

$$\bar{d}^{(0)}_{\mu_\tau+1}(0) = 4\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1} - \frac{10}{3}\ \frac{(\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\ (-1+b_2^{(0)}),$$

$$\bar{d}^{(1)}_{\mu_\tau+1}(0) = -\left[4\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1} - \frac{10}{3}\ \frac{(\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\ (-1+b_2^{(0)})\right]^{-1} \times$$

$$\times\left[\frac{10}{3}\ \frac{(\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+1}}(-1+b_2^{(0)})\left(2\ \frac{\bar{u}^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+1}} - \frac{\bar{w}^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+1}} + \right.\right.$$

$$+\frac{b_2^{(0)}b_2^{(1)}}{-1+b_2^{(0)}}\Bigg)\Bigg] - 2\nu c_{\Delta_1}\Phi_0.$$

Збираючи ряд по середніх відносно гаусового розподілу (3.22) в експоненту, одержуємо

$$Z_{\mu_\tau+1} = \exp\left(-\beta F_\sigma + \beta F_h - \beta F_m\right) \prod_{k\neq 0}^{B_{\mu_\tau+1}} \left(\frac{\pi}{\bar{d}_{\mu_\tau+1}(k)}\right)^{1/2} \times$$
$$\times \int \exp\left(\tilde{A}_1\rho_0 + \tilde{A}_2\rho_0^2 + \tilde{A}_3\rho_0^3 + \tilde{A}_4\rho_0^4 + \tilde{A}_5\rho_0^5 + \right. \tag{3.24}$$
$$\left. + \tilde{A}_6\rho_0^6 + \tilde{A}_7\rho_0^7 + \tilde{A}_8\rho_0^8\right) d\rho_0,$$

де вирази для $-\beta F_m$, $\tilde{A}_i$ $(i = 1, 2, ..., 8)$ містять такі величини як b_2, $b_j^{(\mu_\tau+1)}$ $(j = 3, 4, 5)$, $d_{\mu_\tau+1}(0)$, $a_{2l}^{(\mu_\tau+1)}$ $(l = 2, 3)$, $\mathcal{I}_k$ $(k = 1, 2, ..., 6)$ і приведені в роботі [28]. $\mathcal{I}_1$, ..., $\mathcal{I}_6$ обчислюємо з допомогою переходу до сферичної зони Бріллюена та інтегрування по $k \in (0, B_{\mu_\tau+1}]$. Для $\mathcal{I}_1$ запишемо

$$\mathcal{I}_1 = \frac{1}{N_{\mu_\tau+1}} \sum_{k\le B_{\mu_\tau+1}}{}' \frac{1}{\bar{d}_{\mu_\tau+1}(k)} = \tag{3.25}$$
$$= \mathcal{L}\left[4|d_{\mu_\tau+1}(0)| - \frac{10}{3}\,\frac{(a_4^{(\mu_\tau+1)})^2}{a_6^{(\mu_\tau+1)}}\,(-1+b_2)\right]^{-1}.$$

Тут

$$\mathcal{L} = 3\,\frac{x_r - \operatorname{arctg} x_r}{x_r^3},$$
$$x_r = x_r^{(0)}(1 + x_r^{(1)}|\tau|^{\Delta_1}),$$
$$x_r^{(0)} = \left[4\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} - \frac{10}{3}\,\frac{(\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}(-1+b_2^{(0)})\right]^{-1/2}, \tag{3.26}$$
$$x_r^{(1)} = \frac{1}{2}\left[4\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} - \frac{10}{3}\,\frac{(\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}(-1+b_2^{(0)})\right]^{-1} \times$$
$$\times \left[\frac{10}{3}\,\frac{(\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}(-1+b_2^{(0)})\left(2\,\frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} - \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} + \right.\right.$$
$$\left.\left. + \frac{b_2^{(0)}b_2^{(1)}}{-1+b_2^{(0)}}\right)\right].$$

З врахуванням співвідношення для b_2 (3.23), а також (3.15), (3.4) та

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}^{(0)} + \mathcal{L}^{(1)}|\tau|^{\Delta_1},$$
$$\mathcal{L}^{(0)} = 3\,\frac{x_r^{(0)} - \operatorname{arctg} x_r^{(0)}}{(x_r^{(0)})^3}, \tag{3.27}$$
$$\mathcal{L}^{(1)} = 3x_r^{(1)}\left[\frac{1}{1+(x_r^{(0)})^2} - \mathcal{L}^{(0)}\right],$$

вираз (3.25) можна представити в наступній формі:

$$\mathcal{I}_1 = \frac{s^{2(\mu_\tau+1)}}{\beta\tilde{\Phi}(0)}\,\alpha_1,$$
$$\alpha_1 = \alpha_1^{(0)}(1 + \alpha_1^{(1)}|\tau|^{\Delta_1}),$$
$$\alpha_1^{(0)} = \mathcal{L}^{(0)}\left[4\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} - \frac{10}{3}\,\frac{(\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}(-1+b_2^{(0)})\right]^{-1}, \tag{3.28}$$
$$\alpha_1^{(1)} = (\mathcal{L}^{(0)})^{-1}\left\{\left[4\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} - \frac{10}{3}\,\frac{(\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}(-1+b_2^{(0)})\right]^{-1} \times\right.$$
$$\times \left[\frac{10}{3}\,\frac{(\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}(-1+b_2^{(0)})\left(2\,\frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} - \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} + \right.\right.$$
$$\left.\left.\left. + \frac{b_2^{(0)}b_2^{(1)}}{-1+b_2^{(0)}}\right)\right]\mathcal{L}^{(0)} + \mathcal{L}^{(1)}\right\}.$$

Аналогічні рівності мають місце і для інших $\mathcal{I}_m = \sum_{\mathbf{r}} g^m(r)$ $(m = 2, 3, ..., 6)$, де

$$g(r) = \frac{1}{N_{\mu_\tau+1}} \sum_{k\le B_{\mu_\tau+1}}{}' \frac{e^{i\mathbf{kr}}}{\bar{d}_{\mu_\tau+1}(k)} \tag{3.29}$$

або

$$g(r) = g^{(0)}(1 + g^{(1)}|\tau|^{\Delta_1}),$$
$$g^{(0)} = \frac{6s^{2(\mu_\tau+1)}}{\beta\tilde{\Phi}(0)(B_{\mu_\tau+1}r)^3}\left[8\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} - \frac{20}{3}\,\frac{(\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}(-1+b_2^{(0)}) + \right.$$
$$\left. + 1\right]^{-1}\left[\sin(B_{\mu_\tau+1}r) - B_{\mu_\tau+1}r\cos(B_{\mu_\tau+1}r)\right], \tag{3.30}$$

$$g^{(1)} = \left[8\bar r^{(0)}_{\mu_\tau+1} - \frac{20}{3}\ \frac{(\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}(-1+b_2^{(0)})+1\right]^{-1} \times$$
$$\times\left[\frac{20}{3}\ \frac{(\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}(-1+b_2^{(0)})\left(2\ \frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}} - \frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}} + \right.\right.$$
$$\left.\left. + \frac{b_2^{(0)} b_2^{(1)}}{-1+b_2^{(0)}}\right)\right].$$

Для них знаходимо

$$\mathcal{I}_m = \frac{s^{2m(\mu_\tau+1)}}{(\beta\tilde\Phi(0))^m}\ \alpha_m, \qquad m = 2,3,\ldots,6,$$
$$\alpha_m = \alpha_m^{(0)}(1+\alpha_m^{(1)}|\tau|^{\Delta_1}),$$
$$\alpha_m^{(0)} = (\alpha_1^{(0)})^m + 6e_1^m\left(1+\frac{e_2^m}{2^{m/2-1}}\right), \tag{3.31}$$
$$\alpha_m^{(1)} = (\alpha_m^{(0)})^{-1}\left[m(\alpha_1^{(0)})^m\alpha_1^{(1)} + 6me_1^m g^{(1)}\left(1+\frac{e_2^m}{2^{m/2-1}}\right)\right],$$
$$e_1 = 6\pi^{-2}\left[8\bar r^{(0)}_{\mu_\tau+1} - \frac{20}{3}\ \frac{(\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}(-1+b_2^{(0)})+1\right]^{-1},$$
$$e_2 = (2\pi)^{-1}\left[\sin(\pi\sqrt2) - \pi\sqrt2\cos(\pi\sqrt2)\right] = 0.034861.$$

Покладаючи

$$\rho_0 = \rho_0' - \sqrt{N}\langle\bar\sigma\rangle, \tag{3.32}$$

позбудемось в експоненті під інтегралом в (3.24) членів, пропорціональних непарним степеням ρ_0. В результаті отримуємо (штрих біля ρ_0 опущено)

$$Z_{\mu_\tau+1} = e^{-\beta F'_{\mu_\tau+1}}\int\exp\left[\beta\sqrt{N}\rho_0 h + \tilde B\rho_0^2 - \frac{G}{N}\ \rho_0^4 - \right. \tag{3.33}$$
$$\left. - \frac{D}{N^2}\ \rho_0^6\right]\ d\rho_0.$$

Тут вираз

$$-\beta F'_{\mu_\tau+1} = N_{\mu_\tau+1}\left\{\frac52\ |d_{\mu_\tau+1}(0)|\left(\mathcal{I}_1 + \frac52\ |d_{\mu_\tau+1}(0)|\mathcal{I}_2\right) - \right.$$
$$-\frac{\mathcal{I}_1^2}{8}\left(a_4^{(\mu_\tau+1)} + \frac{a_6^{(\mu_\tau+1)}\mathcal{I}_1}{6}\right) + \frac{(a_4^{(\mu_\tau+1)})^2}{8}\left[\frac{\mathcal{I}_4}{6} + \mathcal{I}_1^2\mathcal{I}_2\left(\frac12 + \right.\right.$$

$$\left.\left. + \frac53\ (-1+b_2)\right)\right] - \frac54\ |d_{\mu_\tau+1}(0)|\mathcal{I}_1\mathcal{I}_2\left(a_4^{(\mu_\tau+1)} + \right. \tag{3.34}$$
$$\left. + \frac{a_6^{(\mu_\tau+1)}\mathcal{I}_1}{4}\right) + \frac{(a_6^{(\mu_\tau+1)})^2}{32}\left[\frac{\mathcal{I}_6}{45} + \frac{\mathcal{I}_1^2}{2}\left(\frac{\mathcal{I}_4}{3} + \frac{\mathcal{I}_1^2\mathcal{I}_2}{4}\right)\right] +$$
$$+ \frac{a_4^{(\mu_\tau+1)}a_6^{(\mu_\tau+1)}\mathcal{I}_1}{16}\left(\frac{\mathcal{I}_4}{3} + \frac{\mathcal{I}_1^2\mathcal{I}_2}{2}\right) - \frac53\ \frac{(a_4^{(\mu_\tau+1)})^2}{a_6^{(\mu_\tau+1)}} \times$$
$$\times\left[(-1+b_2)\left(\mathcal{I}_1 - a_4^{(\mu_\tau+1)}\mathcal{I}_2\left(\frac{\mathcal{I}_1}{2} - \frac{10}{3}\ \frac{a_4^{(\mu_\tau+1)}}{a_6^{(\mu_\tau+1)}}\right)\right) - \right.$$
$$\left.\left. -(7-5b_2)|d_{\mu_\tau+1}(0)|\mathcal{I}_2\right] - \frac{1}{2N_{\mu_\tau+1}}\sum_{k\le B_{\mu_\tau+1}}{}' \ln\frac{\bar d_{\mu_\tau+1}(k)}{\pi}\right\}$$

відповідає вкладу у вільну енергію системи від змінних $\rho_{\mathbf{k}}$ з $k\to0$, однак $k\neq0$. Коефіцієнт $\tilde B$ задається співвідношеннями

$$\tilde B = \tilde B^{(0)}|\tau|^{2\nu}\beta\tilde\Phi(0)(1+\tilde B^{(1)}|\tau|^{\Delta_1}),$$
$$\tilde B^{(0)} = \frac12\ c_\nu^2\bar r^{(0)}_{\mu_\tau+1}B_1^{(0)}, \qquad \tilde B^{(1)} = B_1^{(1)} - 2\nu c_{\Delta_1}\Phi_0,$$
$$B_1^{(0)} = 1 - \frac{\alpha_1^{(0)}}{2\bar r^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\left(\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1} + \frac{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}\alpha_1^{(0)}}{4}\right) + \frac{(\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{\bar r^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\times$$
$$\times\left[\frac53\ (-1+b_2^{(0)})\alpha_2^{(0)}\left(\frac{\alpha_1^{(0)}}{2} + \frac{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\right) + \frac12\left(\frac{\alpha_1^{(0)}\alpha_2^{(0)}}{2} + \right.\right.$$
$$\left.\left. + \frac{\alpha_3^{(0)}}{3}\right)\right] - \frac52\ \alpha_2^{(0)}\left(\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1} + \frac{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}\alpha_1^{(0)}}{2}\right) + \frac{(\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{8\bar r^{(0)}_{\mu_\tau+1}} \times$$
$$\times\left[\frac{\alpha_5^{(0)}}{15} + \alpha_1^{(0)}\left(\frac{\alpha_1^{(0)}\alpha_3^{(0)}}{3} + \frac12\left(\frac{\alpha_4^{(0)}}{3} + \frac{(\alpha_1^{(0)})^2\alpha_2^{(0)}}{2}\right)\right)\right] +$$
$$+ \frac{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}{2\bar r^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\left[\frac{\alpha_4^{(0)}}{12} + \alpha_1^{(0)}\left(\frac38\ \alpha_1^{(0)}\alpha_2^{(0)} + \frac{\alpha_3^{(0)}}{3}\right)\right],$$
$$B_1^{(1)} = (B_1^{(0)})^{-1}\left\{-\frac{\alpha_1^{(0)}}{2\bar r^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\left[\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}\left(\alpha_1^{(1)} + \frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\right) + \right.\right.$$
$$\left. + \frac{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}\alpha_1^{(0)}}{4}\left(2\alpha_1^{(1)} + \frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\right)\right] + \frac{(\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{\bar r^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\left[\frac53\ (-1 + \right.$$

$$
\begin{aligned}
&+b_2^{(0)})\alpha_2^{(0)}\Big[\frac{\alpha_1^{(0)}}{2}\Big(\alpha_1^{(1)}+\alpha_2^{(1)}+2\,\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}+\frac{b_2^{(0)}b_2^{(1)}}{-1+b_2^{(0)}}\Big)+\\
&+\frac{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big(\alpha_2^{(1)}+3\,\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}-\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}+\frac{b_2^{(0)}b_2^{(1)}}{-1+b_2^{(0)}}\Big)\Big]+ \qquad (3.35)\\
&+\frac12\Big[\frac{\alpha_1^{(0)}\alpha_2^{(0)}}{2}\Big(\alpha_1^{(1)}+\alpha_2^{(1)}+2\,\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big)+\frac{\alpha_3^{(0)}}{3}\Big(\alpha_3^{(1)}+\\
&+2\,\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big)\Big]\Big]-\frac52\,\alpha_2^{(0)}\Big[\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}\Big(\alpha_2^{(1)}+\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big)+\\
&+\frac{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}\alpha_1^{(0)}}{2}\Big(\alpha_1^{(1)}+\alpha_2^{(1)}+\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big)\Big]+\frac{(\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{8\bar r^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big[\frac{\alpha_5^{(0)}}{15}\times\\
&\times\Big(\alpha_5^{(1)}+2\,\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big)+\alpha_1^{(0)}\Big[\frac{\alpha_1^{(0)}\alpha_3^{(0)}}{3}\Big(2\alpha_1^{(1)}+\alpha_3^{(1)}+\\
&+2\,\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big)+\frac12\Big[\frac{\alpha_4^{(0)}}{3}\Big(\alpha_1^{(1)}+\alpha_4^{(1)}+2\,\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big)+\\
&+\frac{(\alpha_1^{(0)})^2\alpha_2^{(0)}}{2}\Big(3\alpha_1^{(1)}+\alpha_2^{(1)}+2\,\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big)\Big]\Big]\Big]+\\
&+\frac{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}{2\bar r^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big[\frac{\alpha_4^{(0)}}{12}\Big(\alpha_4^{(1)}+\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}+\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big)+\\
&+\alpha_1^{(0)}\Big[\frac38\,\alpha_1^{(0)}\alpha_2^{(0)}\Big(2\alpha_1^{(1)}+\alpha_2^{(1)}+\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}+\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big)+\\
&+\frac{\alpha_3^{(0)}}{3}\Big(\alpha_1^{(1)}+\alpha_3^{(1)}+\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}+\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big)\Big]\Big]\Big\}.
\end{aligned}
$$

Для коефіцієнта G запишемо

$$
\begin{aligned}
G &= G^{(0)}|\tau|^{\nu}(\beta\tilde\Phi(0))^2(1+G^{(1)}|\tau|^{\Delta_1}),\\
G^{(0)} &= c_\nu s_0^3 G_1^{(0)}, \qquad G^{(1)} = G_1^{(1)}-\nu c_{\Delta_1}\Phi_0,\\
G_1^{(0)} &= \frac{1}{24}\Big[\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}+\frac{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}{2}\Big(\alpha_1^{(0)}+5\bar r^{(0)}_{\mu_\tau+1}\alpha_2^{(0)}\Big)\Big]-
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&-\frac{(\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2\alpha_2^{(0)}}{8}\Big[\frac12+\frac59\,(-1+b_2^{(0)})\Big]-\frac{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}{12}\times\\
&\times\Big(\frac78\,\alpha_1^{(0)}\alpha_2^{(0)}+\frac{\alpha_3^{(0)}}{3}\Big)-\frac{(\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{24}\Big[\frac{\alpha_4^{(0)}}{8}+\alpha_1^{(0)}\times\\
&\times\Big(\frac{7}{16}\,\alpha_1^{(0)}\alpha_2^{(0)}+\frac{\alpha_3^{(0)}}{3}\Big)\Big], \qquad (3.36)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
G_1^{(1)} &= (G_1^{(0)})^{-1}\Big\{\frac{1}{24}\Big[\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}+\frac{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}{2}\Big[\alpha_1^{(0)}\Big(\alpha_1^{(1)}+\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big)+\\
&+5\bar r^{(0)}_{\mu_\tau+1}\alpha_2^{(0)}\Big(\alpha_2^{(1)}+\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big)\Big]\Big]-\frac{(\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2\alpha_2^{(0)}}{8}\Big[\frac12\Big(\alpha_2^{(1)}+\\
&+2\,\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big)+\frac59\,(-1+b_2^{(0)})\Big(\alpha_2^{(1)}+2\,\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}+\\
&+\frac{b_2^{(0)}b_2^{(1)}}{-1+b_2^{(0)}}\Big)\Big]-\frac{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}{12}\Big[\frac78\,\alpha_1^{(0)}\alpha_2^{(0)}\Big(\alpha_1^{(1)}+\alpha_2^{(1)}+\\
&+\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}+\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big)+\frac{\alpha_3^{(0)}}{3}\Big(\alpha_3^{(1)}+\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}+\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big)\Big]-\\
&-\frac{(\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{24}\Big[\frac{\alpha_4^{(0)}}{8}\Big(\alpha_4^{(1)}+2\,\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big)+\alpha_1^{(0)}\Big[\frac{7}{16}\alpha_1^{(0)}\times\\
&\times\alpha_2^{(0)}\Big(2\alpha_1^{(1)}+\alpha_2^{(1)}+2\,\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big)+\frac{\alpha_3^{(0)}}{3}\Big(\alpha_1^{(1)}+\alpha_3^{(1)}+\\
&+2\,\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Big)\Big]\Big]\Big\}.
\end{aligned}
$$

Коефіцієнт D представляється у вигляді

$$
\begin{aligned}
D &= D^{(0)}(\beta\tilde\Phi(0))^3(1+D^{(1)}|\tau|^{\Delta_1}),\\
D^{(0)} &= s_0^6 D_1^{(0)}, \qquad D^{(1)} = D_1^{(1)},\\
D_1^{(0)} &= \frac{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}{48}\Big(\frac{1}{15}-\frac{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}\alpha_2^{(0)}}{2}\Big)-\frac{(\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{48}\times\\
&\times\Big(\frac{\alpha_1^{(0)}\alpha_2^{(0)}}{4}+\frac{\alpha_3^{(0)}}{9}\Big), \qquad (3.37)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
D_1^{(1)} = (D_1^{(0)})^{-1} \Bigg\{ & \frac{\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+1}}{48} \left[\frac{1}{15} \, \frac{\bar{w}^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+1}} - \frac{\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+1}\alpha_2^{(0)}}{2} \left(\alpha_2^{(1)} + \right.\right. \\
& \left.\left. + \frac{\bar{u}^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+1}} + \frac{\bar{w}^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+1}} \right) \right] - \frac{(\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{48} \left[\frac{\alpha_3^{(0)}}{9} \left(\alpha_3^{(1)} + \right.\right. \\
& \left.\left. + 2\frac{\bar{w}^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+1}} \right) + \frac{\alpha_1^{(0)}\alpha_2^{(0)}}{4} \left(\alpha_1^{(1)} + \alpha_2^{(1)} + 2\frac{\bar{w}^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+1}} \right) \right] \Bigg\}.
\end{aligned}
$$

Обчислимо $Z_{\mu_\tau+1}$ методом перевалу (див., наприклад, [30]). Маємо

$$
Z_{\mu_\tau+1} = \sqrt{\frac{2\pi}{E_0''(\bar{\rho})}} \exp\left[-\beta F'_{\mu_\tau+1} - NE_0(\bar{\rho}) \right], \tag{3.38}
$$

де $\bar{\rho}$ – точка екстремуму виразу

$$
E_0(\rho) = D\rho^6 + G\rho^4 - \tilde{B}\rho^2 - \beta h\rho, \tag{3.39}
$$

який виникає в експоненті підінтегральної функції (3.33) при заміні

$$
\rho_0 = \sqrt{N}\rho. \tag{3.40}
$$

Для $E_0(\bar{\rho})$, що входить в (3.38), при $h = 0$ знаходимо

$$
\begin{aligned}
E_0(\bar{\rho}) = & -s^{-3(\mu_\tau+1)} s_0^{-3} E_0^{(0)} (1 + E_0^{(1)} |\tau|^{\Delta_1}), \\
E_0^{(0)} = & \frac{2}{27} \, \frac{(G_1^{(0)})^3}{(D_1^{(0)})^2} \left[-1 + \left(1 + \frac{3}{2} \, \frac{\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1} B_1^{(0)} D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2} \right)^{1/2} \right] + \\
& + \frac{\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1} B_1^{(0)} G_1^{(0)}}{6D_1^{(0)}} \left[-1 + \frac{2}{3} \left(1 + \frac{3}{2} \, \frac{\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1} B_1^{(0)} D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2} \right)^{1/2} \right],
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
E_0^{(1)} = (E_0^{(0)})^{-1} \Bigg\{ & \frac{2}{27} \, \frac{(G_1^{(0)})^3}{(D_1^{(0)})^2} \left[-1 + \left(1 + \frac{3}{2} \times \right.\right. \\
& \left.\left. \times \frac{\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1} B_1^{(0)} D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2} \right)^{1/2} \right] \left(3G_1^{(1)} - 2D_1^{(1)} \right) + \frac{\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1} B_1^{(0)} G_1^{(0)}}{6D_1^{(0)}} \times \\
& \times \left[\left(1 + \frac{3}{2} \, \frac{\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1} B_1^{(0)} D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2} \right)^{1/2} \left(B_1^{(1)} - \frac{D_1^{(1)}}{3} \right) - \right. \\
& \left. - \left(B_1^{(1)} + G_1^{(1)} - D_1^{(1)} \right) \right] \Bigg\}.
\end{aligned} \tag{3.41}
$$

Тепер, враховуючи (3.1), (3.12), (3.38), розраховуємо вклад у вільну енергію системи при $T < T_c$ від довгохвильових мод коливань густини спінового моменту:

$$
\begin{aligned}
F_{\text{ІГР}} &= -kTN' \left[\gamma^{(0)}_{\text{ІГР}} |\tau|^{3\nu} + \gamma^{(1)}_{\text{ІГР}} |\tau|^{3\nu+\Delta_1} \right], \\
\gamma^{(l)}_{\text{ІГР}} &= \gamma_3^{(l)(\mu_\tau)} + \gamma_3^{(l)\langle\sigma\rangle}, \qquad l = 0, 1.
\end{aligned} \tag{3.42}
$$

Перший доданок $\gamma_3^{(l)(\mu_\tau)}$ визначає вільну енергію після виходу з КР, а другий $\gamma_3^{(l)\langle\sigma\rangle}$ – вільну енергію впорядкування. Ці доданки обчислюються згідно наступних формул:

$$
\begin{aligned}
& \gamma_3^{(l)(\mu_\tau)} = \gamma_g^{(l)} + \gamma_\rho^{(l)}, \qquad \gamma_\rho^{(l)} = c_\nu^3 c^l_{\Delta_1} \bar{\gamma}_\rho^{(l)}, \\
& \gamma_3^{(l)\langle\sigma\rangle} = c_\nu^3 c^l_{\Delta_1} \bar{\gamma}_3^{(l)\langle\sigma\rangle},
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\bar{\gamma}_\rho^{(0)} = & \frac{5}{2} \, \bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1} \left(\alpha_1^{(0)} + \frac{5}{2} \, \bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1} \alpha_2^{(0)} \right) - \frac{(\alpha_1^{(0)})^2}{8} \left(\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+1} + \right. \\
& \left. + \frac{\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+1} \alpha_1^{(0)}}{6} \right) + \frac{(\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{8} \left[\frac{\alpha_4^{(0)}}{6} + (\alpha_1^{(0)})^2 \alpha_2^{(0)} \left(\frac{1}{2} + \right.\right. \\
& \left.\left. + \frac{5}{3} \, (-1 + b_2^{(0)}) \right) \right] - \frac{5}{4} \, \bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1} \alpha_1^{(0)} \alpha_2^{(0)} \times \\
& \times \left(\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+1} + \frac{\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+1} \alpha_1^{(0)}}{4} \right) + \frac{(\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{32} \left[\frac{\alpha_6^{(0)}}{45} + \frac{(\alpha_1^{(0)})^2}{2} \times \right. \\
& \left. \times \left(\frac{\alpha_4^{(0)}}{3} + \frac{(\alpha_1^{(0)})^2 \alpha_2^{(0)}}{4} \right) \right] + \frac{\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+1} \bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+1} \alpha_1^{(0)}}{16} \left(\frac{\alpha_4^{(0)}}{3} + \right. \\
& \left. + \frac{(\alpha_1^{(0)})^2 \alpha_2^{(0)}}{2} \right) - \frac{5}{3} \, \frac{(\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+1}} \left[(-1 + b_2^{(0)}) \left(\alpha_1^{(0)} - \right.\right. \\
& \left. - \bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+1} \alpha_2^{(0)} \left(\frac{\alpha_1^{(0)}}{2} - \frac{10}{3} \, \frac{\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+1}}{\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+1}} \right) \right) - (7 - 5b_2^{(0)}) \times \\
& \left. \times \bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1} \alpha_2^{(0)} \right] - \frac{1}{2} \ln \left[\left(1 + 4\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1} - \frac{10}{3} \, \frac{(\bar{u}^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{\bar{w}^{(0)}_{\mu_\tau+1}} \times \right.\right. \\
& \left.\left. \times (-1 + b_2^{(0)}) \right) \pi^{-1} \right] + \frac{1}{3} - \frac{\mathcal{L}^{(0)}}{3}, \\
\bar{\gamma}_3^{(0)\langle\sigma\rangle} = & E_0^{(0)},
\end{aligned}
$$

$$\bar\gamma_\rho^{(1)} = \bar\gamma_{\rho 1} - 3\nu\Phi_0\bar\gamma_\rho^{(0)},$$

$$\bar\gamma_{\rho1} = \frac{5}{2}\,\bar r^{(0)}_{\mu_\tau+1}\Bigg(\alpha_1^{(0)}\bar\alpha_1^{(1)} + \frac52\,\bar r^{(0)}_{\mu_\tau+1}\alpha_2^{(0)}\bar\alpha_2^{(1)}\Bigg) - \frac{(\alpha_1^{(0)})^2}{8}\times$$
$$\times\Bigg[\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}\Bigg(2\bar\alpha_1^{(1)} + \frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Bigg) + \frac{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}\alpha_1^{(0)}}{6}\Bigg(3\bar\alpha_1^{(1)}+$$
$$+\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Bigg)\Bigg] + \frac{(\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{8}\Bigg[\frac{\alpha_4^{(0)}}{6}\Bigg(\bar\alpha_4^{(1)} + 2\,\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Bigg)+$$
$$+(\alpha_1^{(0)})^2\alpha_2^{(0)}\Bigg[\frac12\Bigg(2\bar\alpha_1^{(1)}+\bar\alpha_2^{(1)}+2\,\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Bigg)+\frac53\,(-1+b_2^{(0)})\times$$
$$\times\Bigg(2\bar\alpha_1^{(1)}+\bar\alpha_2^{(1)}+2\,\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}+\frac{b_2^{(0)}\bar b_2^{(1)}}{-1+b_2^{(0)}}\Bigg)\Bigg]\Bigg] - \qquad (3.43)$$
$$-\frac54\,\bar r^{(0)}_{\mu_\tau+1}\alpha_1^{(0)}\alpha_2^{(0)}\Bigg[\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}\Bigg(\bar\alpha_1^{(1)}+\bar\alpha_2^{(1)}+\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Bigg)+$$
$$+\frac{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}\alpha_1^{(0)}}{4}\Bigg(2\bar\alpha_1^{(1)}+\bar\alpha_2^{(1)}+\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Bigg)\Bigg]+\frac{(\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{32}\Bigg[\frac{\alpha_6^{(0)}}{45}\times$$
$$\times\Bigg(\bar\alpha_6^{(1)}+2\,\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Bigg)+\frac{(\alpha_1^{(0)})^2}{2}\Bigg[\frac{\alpha_4^{(0)}}{3}\Bigg(2\bar\alpha_1^{(1)}+\bar\alpha_4^{(1)}+$$
$$+2\,\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Bigg)+\frac{(\alpha_1^{(0)})^2\alpha_2^{(0)}}{4}\Bigg(4\bar\alpha_1^{(1)}+\bar\alpha_2^{(1)}+$$
$$+2\,\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Bigg)\Bigg]\Bigg]+\frac{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}\alpha_1^{(0)}}{16}\Bigg[\frac{\alpha_4^{(0)}}{3}\Bigg(\bar\alpha_1^{(1)}+\bar\alpha_4^{(1)}+$$
$$+\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}+\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Bigg)+\frac{(\alpha_1^{(0)})^2\alpha_2^{(0)}}{2}\Bigg(3\bar\alpha_1^{(1)}+\bar\alpha_2^{(1)}+\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}+$$
$$+\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Bigg)\Bigg]-\frac53\,\frac{(\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Bigg[(-1+b_2^{(0)})\Bigg[\alpha_1^{(0)}\Bigg(\bar\alpha_1^{(1)}+$$
$$+2\,\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}-\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}+\frac{b_2^{(0)}\bar b_2^{(1)}}{-1+b_2^{(0)}}\Bigg)-\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}\alpha_2^{(0)}\Bigg[\frac{\alpha_1^{(0)}}{2}\times$$

$$\times\Bigg(\bar\alpha_1^{(1)}+\bar\alpha_2^{(1)}+3\,\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}-\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}+\frac{b_2^{(0)}\bar b_2^{(1)}}{-1+b_2^{(0)}}\Bigg)-$$
$$-\frac{10}{3}\,\frac{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Bigg(\bar\alpha_2^{(1)}+4\,\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}-2\,\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}+\frac{b_2^{(0)}\bar b_2^{(1)}}{-1+b_2^{(0)}}\Bigg)\Bigg]\Bigg]-$$
$$-\Bigg[7\Bigg(\bar\alpha_2^{(1)}+2\,\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}-\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}\Bigg)-5b_2^{(0)}\Bigg(\bar\alpha_2^{(1)}+2\,\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}-$$
$$-\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}+\bar b_2^{(1)}\Bigg)\Bigg]\,\bar r^{(0)}_{\mu_\tau+1}\alpha_2^{(0)}\Bigg]+\frac12\Bigg[\frac{10}{3}\,\frac{(\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}(-1+$$
$$+b_2^{(0)})\Bigg(2\,\frac{\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1}}-\frac{\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}+\frac{b_2^{(0)}\bar b_2^{(1)}}{-1+b_2^{(0)}}\Bigg)\Bigg]\Bigg[1+4\bar r^{(0)}_{\mu_\tau+1}-$$
$$-\frac{10}{3}\,\frac{(\bar u^{(0)}_{\mu_\tau+1})^2}{\bar w^{(0)}_{\mu_\tau+1}}(-1+b_2^{(0)})\Bigg]^{-1}-\frac{\bar{\mathcal L}^{(1)}}{3},$$
$$\bar\gamma_3^{(1)\langle\sigma\rangle} = E_0^{(0)}\left(\bar E_0^{(1)}-3\nu\Phi_0\right).$$

Вирази для $\bar u^{(1)}_{\mu_\tau+1}$, $\bar w^{(1)}_{\mu_\tau+1}$, $\bar\alpha_1^{(1)}$, $\bar\alpha_2^{(1)}$, $\bar\alpha_4^{(1)}$, $\bar\alpha_6^{(1)}$, $\bar b_2^{(1)}$, $\bar{\mathcal L}^{(1)}$, $\bar E_0^{(1)}$ можна одержати шляхом виключення із відповідних їм величин неуніверсального множника c_{Δ_1}.

Ентропія $S_{\text{ІГР}}$, внутрішня енергія $U_{\text{ІГР}}$, теплоємність $C_{\text{ІГР}}$, що відповідають ІГР, запишуться у вигляді

$$S_{\text{ІГР}} = S_{\mu_\tau}+S_{\langle\sigma\rangle},\quad U_{\text{ІГР}} = U_{\mu_\tau}+U_{\langle\sigma\rangle},\quad C_{\text{ІГР}} = C_{\mu_\tau}+C_{\langle\sigma\rangle}. \qquad (3.44)$$

Складові цих термодинамічних характеристик задовільняють співвідношення

$$S_\eta = -kN'\left[u_3^{(0)(\eta)}|\tau|^{1-\alpha}+u_3^{(1)(\eta)}|\tau|^{1-\alpha+\Delta_1}\right],$$
$$U_\eta = -kTN'\left[u_3^{(0)(\eta)}|\tau|^{1-\alpha}+u_3^{(1)(\eta)}|\tau|^{1-\alpha+\Delta_1}\right],$$
$$C_\eta = kN'\left[c_3^{(0)(\eta)}|\tau|^{-\alpha}+c_3^{(1)(\eta)}|\tau|^{\Delta_1-\alpha}\right],$$
$$u_3^{(l)(\eta)} = c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l\bar u_3^{(l)(\eta)},\qquad l=0,1, \qquad (3.45)$$
$$\bar u_3^{(0)(\eta)} = 3\nu\bar\gamma_3^{(0)(\eta)},\qquad \bar u_3^{(1)(\eta)} = (3\nu+\Delta_1)\bar\gamma_3^{(1)(\eta)},$$
$$c_3^{(l)(\eta)} = c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l\bar c_3^{(l)(\eta)},$$
$$\bar c_3^{(0)(\eta)} = 3\nu(3\nu-1)\bar\gamma_3^{(0)(\eta)},$$
$$\bar c_3^{(1)(\eta)} = (3\nu+\Delta_1)(3\nu+\Delta_1-1)\bar\gamma_3^{(1)(\eta)}.$$

Тут індекс η може приймати два значення: μ_τ і $\langle\sigma\rangle$. Коефіцієнти $\bar{\gamma}_3^{(l)(\mu_\tau)} = \bar{\gamma}_g^{(l)} + \bar{\gamma}_\rho^{(l)}$ $(l = 0, 1)$, а $\bar{\gamma}_3^{(l)\langle\sigma\rangle}$ приведені в (3.43).

Таким чином, здійснено розрахунок вільної енергії в області ІГР. Виходячи із виразу для $F_{\text{ІГР}}$ (3.42), обчислено інші термодинамічні функції, які відповідають ІГР. Цей вираз (3.42) включає в себе вільну енергію впорядкування, що отримується в результаті інтегрування по КЗ ρ_0, середнє значення якої пропорціональне параметру порядку – одній із найбільш важливих характеристик фазового переходу.

4. Параметр порядку і сприйнятливість ізінгівської системи

Роль параметра порядку досліджуваної системи відіграє середній спіновий момент. Він зумовлений наявністю нижче температури фазового переходу відмінного від нуля значення $\bar{\rho}_0$, при якому має місце екстремум підінтегрального виразу (3.33). Після виконання в останньому заміни (3.40) отримуємо

$$Z_{\mu_\tau+1} = e^{-\beta F'_{\mu_\tau+1}}\sqrt{N}\int e^{-NE_0(\rho)}d\rho \tag{4.1}$$

і розрахунок параметра порядку полягає в знаходженні точки $\bar{\rho}$ екстремуму $E_0(\rho)$ (3.39). Величина $\bar{\rho}$ співпадає із середнім значенням ρ, яке відповідає рівноважному значенню параметра порядку [19,28]. Вираз $E_0(\rho)$ визначає ту частину вільної енергії, яка зв'язана з параметром порядку. Це мікроскопічний аналог вільної енергії Ландау. Даний розклад вільної енергії в ряд за степенями параметра порядку одержаний шляхом послідовного виключення з розгляду «несуттєвих» змінних $\rho_{\mathbf{k}}$ з $k \neq 0$, внаслідок чого обчислено коефіцієнти $E_0(\rho)$. Отже, відпадає необхідність в постулюванні будь-якої залежності коефіцієнтів виразу (3.39) від температури (як це робиться в розкладі Ландау), оскільки аналітична форма їх залежності від температури та мікроскопічних параметрів системи знайдена шляхом прямих розрахунків і представлена в (3.35) – (3.37). На відміну від теорії Ландау залежність цих коефіцієнтів від температури є неаналітичною.

Перейдемо до безпосереднього розрахунку середнього спінового моменту. Точку $\bar{\rho}$ визначаємо з умови екстремуму $\frac{\partial E_0(\rho)}{\partial\rho} = 0$ або

$$6D\bar{\rho}^5 + 4G\bar{\rho}^3 - 2\tilde{B}\bar{\rho} - \frac{h}{kT} = 0. \tag{4.2}$$

У випадку $h = 0$ одержуємо біквадратне рівняння

$$6D\bar{\rho}^4 + 4G\bar{\rho}^2 - 2\tilde{B} = 0, \tag{4.3}$$

яке шляхом заміни змінної

$$\bar{\rho}^2 = y \tag{4.4}$$

зводиться до рівняння

$$6Dy^2 + 4Gy - 2\tilde{B} = 0. \tag{4.5}$$

Розв'язуючи це рівняння (4.5) і виділяючи температурну залежність, приходимо до наступної формули для середнього спінового моменту $\langle\sigma\rangle = \bar{\rho} = \sqrt{y}$:

$$\begin{aligned}
\langle\sigma\rangle &= \langle\sigma\rangle^{(0)}|\tau|^\beta(1 + \langle\sigma\rangle^{(1)}|\tau|^{\Delta_1}),\\
\langle\sigma\rangle^{(0)} &= c_\nu^{1/2}(\beta_c\tilde{\Phi}(0))^{-1/2}s_0^{-3/2}\bar{\langle\sigma\rangle}^{(0)},\\
\langle\sigma\rangle^{(1)} &= \langle\sigma\rangle_1 - \frac{1}{2}\,c_{\Delta_1}\nu\Phi_0,\\
\bar{\langle\sigma\rangle}^{(0)} &= \left\{\frac{G_1^{(0)}}{3D_1^{(0)}}\left[-1 + \left(1 + \frac{3}{2}\,\frac{\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1}B_1^{(0)}D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2}\right)^{1/2}\right]\right\}^{1/2},\\
\langle\sigma\rangle_1 &= \frac{3}{8}\,\frac{\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1}B_1^{(0)}D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2}\left(B_1^{(1)} - 2G_1^{(1)} + D_1^{(1)}\right)\times\\
&\quad\times\left(1 + \frac{3}{2}\,\frac{\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1}B_1^{(0)}D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2}\right)^{-1/2}\left[-1 + \left(1 + \right.\right.\\
&\quad\left.\left.+\frac{3}{2}\,\frac{\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1}B_1^{(0)}D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2}\right)^{1/2}\right]^{-1} + \frac{1}{2}\,(G_1^{(1)} - D_1^{(1)}).
\end{aligned} \tag{4.6}$$

Значення критичного показника середнього спінового моменту $\beta = \frac{\nu}{2}$ приведено в таблиці 1. Величини $\langle\sigma\rangle^{(l)}$ для деяких значень радіуса дії b потенціалу та параметра РГ s приведені в таблиці 2. Значення $b = b_I = c/(2\sqrt{3})$ відповідає взаємодії найближчих сусідів, $b = b_{II} = 0.3379c$ – перших і других сусідів, $b = b_{III} = 0.3584c$ – перших, других і третіх сусідів. Розрахунки,як і при $T > T_c$, виконано для випадку $\delta = 1$.

Рівняння (4.2) дає можливість обчислити сприйнятливість системи на одну частинку

$$\chi = \mu_{\text{Б}}\frac{\partial\langle\sigma\rangle}{\partial\mathcal{H}}. \tag{4.7}$$

Табл. 2: Коефіцієнти середнього спінового моменту $\langle\sigma\rangle$ (див. (4.6)) для деяких значень b і s.

b	b_I	b_{II}	b_{III}	c	$2c$
$s=2.0000$					
$\langle\sigma\rangle^{(0)}$	2.7329	2.0684	1.8700	0.3747	0.1321
$\langle\sigma\rangle^{(1)}$	0.2499	0.3619	0.4040	0.7485	0.7656
$s=2.7349$					
$\langle\sigma\rangle^{(0)}$	2.3854	1.8027	1.6288	0.3248	0.1145
$\langle\sigma\rangle^{(1)}$	0.3034	0.3493	0.3666	0.5076	0.5147
$s=3.0000$					
$\langle\sigma\rangle^{(0)}$	2.2861	1.7269	1.5600	0.3107	0.1095
$\langle\sigma\rangle^{(1)}$	0.3046	0.3409	0.3545	0.4651	0.4707

Матимемо

$$\chi = \frac{\mu_{\text{Б}}^2}{kT}\left[30D\bar{\rho}^4 + 12G\bar{\rho}^2 - 2\tilde{B}\right]^{-1}. \tag{4.8}$$

Кінцевий вираз для χ з врахуванням $\tilde{B}$, G, D і $\langle\sigma\rangle$ (див. (3.35) – (3.37), (4.6)) буде записано нижче.

5. Термодинамічні характеристики моделі Ізінга в низькотемпературній області як функції температури і мікроскопічних параметрів системи

Знайдемо тепер повні вирази для термодинамічних характеристик ізінгівської системи в наближенні моделі ρ^6 з врахуванням першої конфлуентної поправки (випадок $\mathcal{H}=0$).

Одержані вище вклади у вільну енергію тривимірної моделі Ізінга поблизу T_c від областей КР та ІГР дозволяють подати її повну вільну енергію (1.1) у вигляді

$$F = -kTN'\Big[\gamma_0 - \gamma_1|\tau| + \gamma_2|\tau|^2 + \gamma_3^{(0)-}|\tau|^{3\nu} + \\ +\gamma_3^{(1)-}|\tau|^{3\nu+\Delta_1}\Big]. \tag{5.1}$$

Всі коефіцієнти F (5.1) є функціями мікроскопічних параметрів системи, тобто радіуса дії b потенціалу, фур'є-образу $\tilde{\Phi}(0)$ потенціалу

при $k=0$, постійної решітки c. Коефіцієнти γ_0, γ_1, γ_2 такі ж як і у високотемпературній області (див. [20]). Їх значення, на відміну від $\gamma_3^{(l)-}$ $(l=0,1)$, не залежать від того, вище чи нижче температури фазового переходу виконуються розрахунки. Коефіцієнти $\gamma_3^{(l)-}$ мають форму добутку універсальної по відношенню до мікроскопічних параметрів величини $\bar{\gamma}_3^{(l)-}$ і неуніверсального множника $c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l$, залежного від них:

$$\gamma_3^{(l)-} = c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{\gamma}_3^{(l)-}, \qquad l=0,1, \tag{5.2}$$
$$\bar{\gamma}_3^{(l)-} = -\bar{\gamma}_3^{(KP)(l)-} + \bar{\gamma}_{\text{ІГР}}^{(l)}, \qquad \bar{\gamma}_{\text{ІГР}}^{(l)} = \bar{\gamma}_g^{(l)} + \bar{\gamma}_\rho^{(l)} + \bar{\gamma}_3^{(l)\langle\sigma\rangle}.$$

Числові значення коефіцієнтів $\bar{\gamma}_3^{(l)-}$ наводяться в таблиці 3.

Табл. 3: Величини $\bar{\gamma}_3^{(l)-}$ для деяких значень s.

s	$\bar{\gamma}_3^{(0)-}$	$\bar{\gamma}_3^{(1)-}$
2.0000	1.7599	−6.7968
2.7349	2.7650	−3.6743
3.0000	3.1073	−3.0714

Виходячи із вільної енергії F (5.1), можна знайти інші термодинамічні функції при $T<T_c$. Так, для ентропії S, внутрішньої енергії U і теплоємності C системи справедливі вирази

$$\begin{aligned} S &= kN'\left[s^{(0)} - c_0|\tau| - u_3^{(0)-}|\tau|^{1-\alpha} - u_3^{(1)-}|\tau|^{1-\alpha+\Delta_1}\right], \\ U &= kTN'\left[\gamma_1 - u_1|\tau| - u_3^{(0)-}|\tau|^{1-\alpha} - u_3^{(1)-}|\tau|^{1-\alpha+\Delta_1}\right], \\ C &= kN'\left[c_0 + c_3^{(0)-}|\tau|^{-\alpha} + c_3^{(1)-}|\tau|^{\Delta_1-\alpha}\right], \end{aligned} \tag{5.3}$$

де $s^{(0)}$, c_0, u_1 співпадають із відповідними величинами при $T>T_c$ [20], а структура інших коефіцієнтів в плані універсальності задається співвідношеннями

$$\begin{aligned} u_3^{(l)-} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{u}_3^{(l)-}, \qquad l=0,1, \\ \bar{u}_3^{(0)-} &= 3\nu\bar{\gamma}_3^{(0)-}, \qquad \bar{u}_3^{(1)-} = (3\nu+\Delta_1)\bar{\gamma}_3^{(1)-}, \\ c_3^{(l)-} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{c}_3^{(l)-}, \\ \bar{c}_3^{(0)-} &= 3\nu(3\nu-1)\bar{\gamma}_3^{(0)-}, \\ \bar{c}_3^{(1)-} &= (3\nu+\Delta_1)(3\nu+\Delta_1-1)\bar{\gamma}_3^{(1)-}. \end{aligned} \tag{5.4}$$

Представляючи теплоємність із (5.3) аналогічною випадку $T > T_c$ залежністю

$$\frac{C}{kN'} = \frac{A^-}{\alpha}|\tau|^{-\alpha}(1 + \alpha a_c^-|\tau|^{\Delta_1}) + B^-, \tag{5.5}$$

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

для відношень основних критичних амплітуд і амплітуд поправок до скейлінгу при температурах вище і нижче критичної отримуємо

$$\frac{A^+}{A^-} = \frac{\bar{c}_3^{(0)+}}{\bar{c}_3^{(0)-}}, \qquad \frac{a_c^+}{a_c^-} = \frac{\bar{c}_3^{(1)+}}{\bar{c}_3^{(1)-}}\,\frac{\bar{c}_3^{(0)-}}{\bar{c}_3^{(0)+}}. \tag{5.6}$$

Зауважимо, що B^- таке ж як і у випадку $T > T_c$.

Сприйнятливість на одну частинку як функцію температури і мікроскопічних параметрів системи остаточно визначаємо на основі (4.8). Для неї має місце

$$\chi = \Gamma^-|\tau|^{-\gamma}(1 + a_\chi^-|\tau|^{\Delta_1})\frac{\mu_Б^2}{\tilde{\Phi}(0)},$$

$$\Gamma^- = c_\nu^{-2}\left\{\frac{10}{3}\,\frac{(G_1^{(0)})^2}{D_1^{(0)}}\left[-1 + \left(1 + \frac{3}{2}\,\frac{\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1}B_1^{(0)}D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2}\right)^{1/2}\right]\left[\frac{1}{5} + \right.\right.$$

$$\left.\left. + \left(1 + \frac{3}{2}\,\frac{\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1}B_1^{(0)}D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2}\right)^{1/2}\right] - \bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1}B_1^{(0)}\right\}^{-1},$$

$$a_\chi^- = c_{\Delta_1}\bar{a}_\chi^-, \tag{5.7}$$

$$\bar{a}_\chi^- = \bar{\chi}_{01}^- + 2\nu\Phi_0, \qquad \bar{\chi}_{01}^- = \chi_{01}^- c_{\Delta_1}^{-1},$$

$$\chi_{01}^- = \bar{\Gamma}^-\left\{\frac{8}{3}\,\frac{(G_1^{(0)})^2}{D_1^{(0)}}\left[-1 + \left(1 + \frac{3}{2}\,\frac{\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1}B_1^{(0)}D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2}\right)^{1/2}\right] \times\right.$$

$$\times(2G_1^{(1)} - D_1^{(1)}) + 2\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1}B_1^{(0)}(B_1^{(1)} - 2G_1^{(1)} + D_1^{(1)}) \times$$

$$\left. \times\left(1 + \frac{3}{2}\,\frac{\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1}B_1^{(0)}D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2}\right)^{-1/2} - 4\bar{r}^{(0)}_{\mu_\tau+1}B_1^{(0)}B_1^{(1)}\right\}.$$

Тут $\bar{\Gamma}^- = \Gamma^- c_\nu^2$. Вираз для критичного показника сприйнятливості γ містить, наприклад, робота [20], а його значення – таблиця 1. Величини A^-, a_c^-, Γ^-, a_χ^- містяться в таблиці 4.

Табл. 4: Числові значення амплітуд A^-, a_c^-, Γ^-, a_χ^-.

b	b_I	b_{II}	b_{III}	c	$2c$
$s = 2.0000$					
A^-	1.9734	1.8071	1.7436	1.2012	1.1741
a_c^-	7.2567	10.5104	11.7347	21.7395	22.2353
Γ^-	0.2133	0.2262	0.2317	0.2970	0.3015
a_χ^-	0.1872	0.2711	0.3027	0.5608	0.5736
$s = 2.7349$					
A^-	1.2026	1.1027	1.0648	0.7486	0.7328
a_c^-	8.1288	9.3588	9.8206	13.5975	13.7882
Γ^-	0.2341	0.2480	0.2539	0.3211	0.3257
a_χ^-	0.3536	0.4071	0.4272	0.5915	0.5998
$s = 3.0000$					
A^-	1.0331	0.9484	0.9164	0.6506	0.6373
a_c^-	7.9599	8.9081	9.2633	12.1558	12.3022
Γ^-	0.2437	0.2580	0.2640	0.3318	0.3364
a_χ^-	0.3884	0.4346	0.4519	0.5931	0.6002

Таким чином, з врахуванням першої конфлуентної поправки здійснено кількісний опис критичної поведінки однокомпонентної спінової системи в рамках моделі ρ^6, який узгоджується з результатами інших авторів. Більш простіша модель ρ^4 дозволяє провести цей опис якісно. Це ілюструють, наприклад, рис. 1 і 2, на яких показані графіки температурних залежностей відповідно середнього спінового моменту $\langle\sigma\rangle$ та теплоємності C/kN тривимірної моделі Ізінга. Обчислення виконані при відсутності зовнішнього поля для випадку простої кубічної гратки та взаємодії типу найближчих сусідів. У наших розрахунках параметр РГ $s = 3$, радіус дії потенціалу $b = b_I$. Наближення моделлю ρ^6 включає першу конфлуентну поправку, а моделлю ρ^4 – першу і другу конфлуентні поправки (див. [24–27]). На рис. 1 крива 1 для середнього спінового моменту відповідає моделі ρ^4, 2 – моделі ρ^6, 3 – даним роботи [31]. На рис. 2 високотемпературна область представлена кривими 1, 2, 3, а низькотемпературна область – кривими $1'$, $2'$, $3'$. Криві 1 і $1'$ цього рисунка одержані з використанням моделі ρ^4, 2 і $2'$ – моделі ρ^6, 3 і $3'$ – результати роботи [31]. Відмітимо, що автори [31] здійснили нове числове дослідження основних критичних амплітуд сприйнятливості, кореляційної довжини, теплоємності, спонтанної намаг-

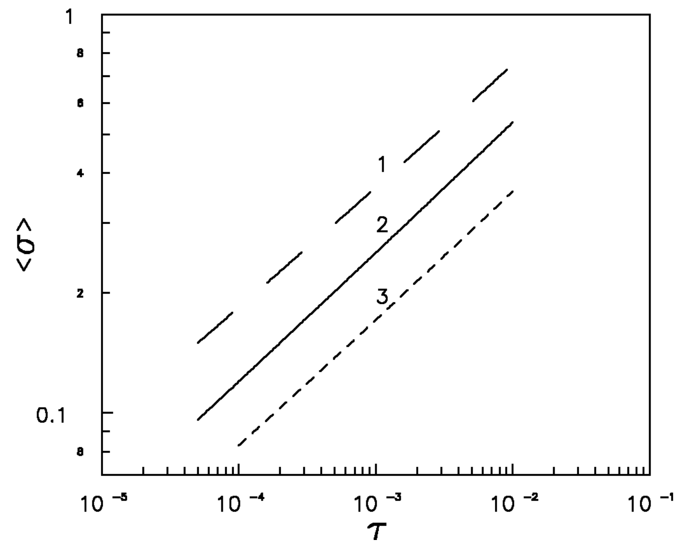

Рис. 1: Температурна залежність параметра порядку тривимірної моделі Ізінга на простій кубічній гратці. Результати наших розрахунків одержані для $s=3$ і $b=b_I=c/(2\sqrt{3})$. Крива 1 відповідає моделі ρ^4, 2 – моделі ρ^6, 3 – даним [31].

ніченості тривимірної ізінгівської системи, універсальних відношень цих амплітуд. Сучасні оцінки критичної температури і показників тут використано в поєднанні з диференціальними апроксимантами при екстраполяції наявних рядів.

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

Література

[1] Blőte H.W.J., Compagner A., Croockewit J.H., Fonk Y.T.J.C., Heringa J.R., Hoogland A., Smit T.S., Van Willigen A.L. Monte Carlo renormalization of the three-dimensional Ising model // Physica. A. – 1989. – **161**, N 1. – P. 1-22.

[2] Lai Pik-Yin, Mon K.K. Monte Caplo studies of universal critical amplitudes for the three-dimensional Ising model: Correlation length

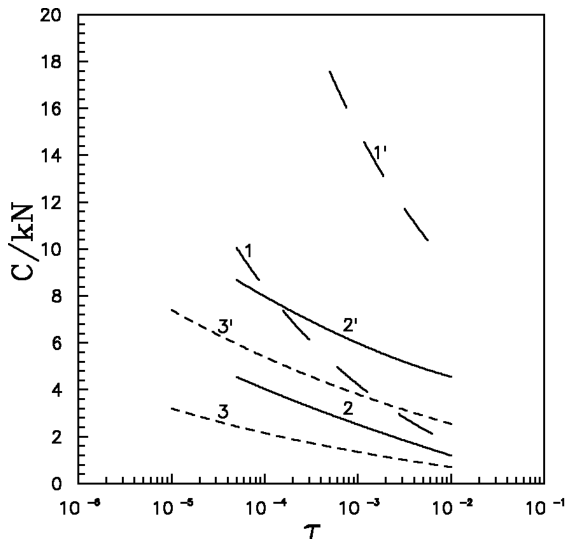

Рис. 2: Залежність теплоємності системи від τ. Криві 1, 2, 3 відповідають випадку $T>T_c$, $1'$, $2'$, $3'$ – випадку $T<T_c$, причому 1, $1'$ – моделі ρ^4, 2, $2'$ – моделі ρ^6, 3, $3'$ – результатам [31].

and renormalized coupling // Phys. Rev. B. – 1989. – **10**, N 16. – P. 11120-11122.

[3] Schlijper A.G., van Bergen A.R.D., Smit B. Local-states method for the calculation of free energies in Monte-Carlo simulations of lattice models // Phys. Rev. A. – 1990. – **41**, N 2. – P. 1175-1178.

[4] Baillie C.F. A new MCRG calculation of the critical behavior of the 3d Ising model // Comput. Phys. Commun. – 1991. – **65**, N 1-3. – P. 17-23.

[5] Ferrenberg A.M., Landau D.P. Critical behavior of the three-dimensional Ising model: A high-resolution Monte Carlo study // Phys. Rev. B. – 1991. – **44**, N 10. – P. 5081-5091.

[6] Livet F. The cluster updating Monte Carlo algorithm applied to the 3d Ising problem // Europhys. Lett. – 1991. – **16**, N 2. – P. 139-142.

[7] Павлов С.В. Описание феноменологических моделей фазовых переходов методами теории катастроф // Вест. МГУ. Сер. 3. – 1990. – **31**, N 1. – С. 70-76.

[8] Kadanoff L.P. Scaling and universality in statistical physics // Phys-

ica. A. – 1990. – **163**, N 1. – P. 1-14.

[9] Lee J., Kosterlitz J.M. New numerical method to study phase transitions // Phys. Rev. Lett. – 1990. – **65**, N 2. – P. 137-140.

[10] Novotny M.A. Transfer matrix studies of $d \geq 3$ Ising models // J. Appl. Phys. – 1990. – **67**, N 9, Pt 2B. – P. 5448-5450.

[11] Дубровский И.М. Об интерпретации экспериментов по определению критических индексов вблизи точки фазового перехода второго рода // Физ. тверд. тела (Ленинград). – 1990. – **33**, N 12. – С. 3629-3631.

[12] Lei G. A family of methods for the solution of lattice models // J. Comput. Phys. – 1991. – **92**, N 1. – P. 106-141.

[13] Mano H., Nakao K. Study of critical phenomena by spin-cluster approximation series: Ising spin system // J. Phys. Soc. Jap. – 1991. – **60**, N 2. – P. 548-561.

[14] Horiguchi T., Nagai O., Miyashita S. Low- and high-temperature behaviors of ferromagnetic Ising model of infinite-spin // J. Phys. Soc. Jap. – 1992. – **61**, N 1. – P. 308-321.

[15] Thompson C.J. Validity of mean-field theories in critical phenomena // Progr. Theor. Phys. – 1992. – **87**, N 3. – P. 535-559.

[16] Hilfer R. Scaling theory and the classification of phase transitions // Mod. Phys. Lett. B. – 1992. – **6**, N 13. – P. 773-784.

[17] Cavalotti P.L., Alberti M., Bozzini B., Iudica A., Nobili L., Ossi P.M. Statistical thermodynamics of ordering in ferromagnets // J. Magn. and Magn. Matter.. – 1992. – **104-107**, N 2. – P. 905-907.

[18] Kinosita Y., Kawashima N., Suzuki M. Coherent-anomaly analysis of series expansions and its application to the Ising model // J. Phys. Soc. Jap. – 1992. – **61**, N 11. – P. 3887-3901.

[19] Yukhnovskii I.R. Phase Transitions of the Second Order. Collective Variables Method. – Singapore: World Scientific Publ. Co. Pte. Ltd., 1987. – 327 p.

[20] Пилюк І.В., Козловський М.П. Термодинамічні характеристики тривимірної ізінгівської системи в наближенні моделі ρ^6 з врахуванням конфлуентної поправки. І. Високотемпературна область. – Львів, 1997. – 34 с. – (Препринт / НАН України. ІФКС; ICMP-97-06U).

[21] Козловский М.П., Ильницкий Я.Н., Пылюк И.В. Свободная энергия и другие термодинамические функции трехмерной модели Изинга ниже точки фазового перехода. – Киев, 1985. – 33 с. – (Препринт / АН УССР. ИТФ; ИТФ-85-107Р).

[22] Козловский М.П., Пылюк И.В. Сравнение выражений для термодинамических функций модели Изинга при температурах выше и ниже критической в трехмерном пространстве. – Киев, 1989. – 35 с. – (Препринт / АН УССР. ИТФ; ИТФ-89-42Р).

[23] 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.

[24] Пылюк И.В. Термодинамические функции трехмерного изинговского ферромагнетика в окрестности точки фазового перехода с учетом первой и второй конфлуентных поправок. – Киев, 1990. – 40 с. – (Препринт / АН УССР. ИТФ; ИТФ-90-12Р).

[25] Пылюк И.В., Козловский М.П. Вклад конфлуентных поправок в термодинамику трехмерной модели Изинга // Изв. АН СССР. Сер. физич. – 1991. – **55**, N 3. – С. 597-601.

[26] 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.

[27] Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V. Entropy and specific heat of the 3D Ising model as functions of temperature and microscopic parameters of the system // Phys. stat. sol. (b). – 1994. – **183**. – P. 243-249.

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

[29] 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.

[30] Мигдал А.Б. Качественные методы в квантовой теории. – М.: Наука, 1975. – 335 с.

[31] Liu A.J., Fisher M.E. The three-dimensional Ising model revisited numerically // Physica A. – 1989. – **156**. – P. 35-76.

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

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

Ігор Васильович Пилюк
Михайло Павлович Козловський

Термодинамічні характеристики тривимірної ізінгівської системи в наближенні моделі ρ^6 з врахуванням конфлуентної поправки. II. Низькотемпературна 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