

ІНСТИТУТ  
ФІЗИКИ  
КОНДЕНСОВАНИХ  
СИСТЕМ

ICMP-97-25U

М.П.Козловський, І.Р.Юхновський

МЕТОД САМОУЗГОДЖЕНОГО ОПИСУ КРИТИЧНОЇ  
ПОВЕДІНКИ ТРИВИМІРНИХ ІЗІНГОПОДІБНИХ СИСТЕМ  
НА МІКРОСКОПІЧНОМУ РІВНІ

УДК: 532; 533; 533.9:530.182; 536.75; 536-12.01.

РАС: 05.60.+w, 05.70.Ln, 05.20.Dd, 52.25.Dg, 52.25.Fi

Метод самоузгодженого опису критичної поведінки тривимірних ізінгоподібних систем на мікроскопічному рівні.

М.П.Козловський, І.Р.Юхновський

**Анотація.** Запропонований аналітичний метод опису фазового переходу в тривимірних спінових системах. Метод ґрунтується на використанні негаусового розподілу флуктуацій мод флуктуацій спінового моменту і дозволяє описати критичну поведінку системи поблизу точки фазового переходу. Одержані явні вирази для основних термодинамічних функцій ізінгоподібної системи з експонентно спадним потенціалом взаємодії між частинками. Знайдена їх залежність від температури та досліджена залежність від мікроскопічних параметрів моделі (сталого ґратки, параметрів потенціалу взаємодії).

**Method for the self-consistent description of the critical behaviour of the three-dimensional ising-like system at a microscopic level**

M.P.Kozlovskii, I.R.Yukhnovskii

**Abstract.** Analytical method for the description at a phase transition in a three-dimensional spin system is suggested. The method is based on the use of non-Gaussian distribution for fluctuations of spin moment densities and enables to represent the critical behaviour near a phase transition point. Explicit expressions for fundamental thermodynamical functions of an Ising-like system with exponentially dropping interparticle potential are obtained. Their dependence on the temperature is researched as well as that on microscopic parameters of a model (lattice constant, parameters of an interaction potential).

Поведінка системи поблизу точки фазового переходу (ТФП) суттєвим чином відрізняється від її поведінки поза цим колом. Точку фазового переходу визначимо як таку, коли температура системи рівна температурі фазового переходу  $T_c$ , а зовнішнє поле  $h$  відсутнє. Якщо далеко від точки фазового переходу взаємодія між окремими частинками є, як правило, короткосяжною, то при наближенні до неї має місце зростання ефективного радіуса взаємодії це є прямим наслідком наявності поблизу ТФП великомасштабних флуктуацій параметра порядку. При наближенні до ТФП відбувається збільшення кореляційної довжини, що сприяє тенденції до впорядкування системи. Впорядкування має макроскопічну природу при температурах нижчих за  $T_c$  і виникає в деяких мікроскопічних областях системи поблизу  $T_c$  при  $T > T_c$ . По мірі наближення температури до  $T_c$  зверху, величина мікроскопічних впорядкованих областей зростає. Це суттєвим чином відображається на поведінці термодинамічних функцій системи. Зокрема, тенденція до впорядкування системи при наближенні до ТФП приводить до виникнення від'ємного вкладу до теплоємності системи. Якщо цей вклад стає домінуючим, то неминучим його наслідком є перебудова системи, яка і супроводжується фазовим переходом.

В даній роботі розглянутий механізм виникнення від'ємних вкладів до ентропії тривимірної спінової системи. Такі вклади неминуче виникають поблизу точки фазового переходу. Природа цих вкладів до ентропії тісно пов'язана з виникненням поблизу ТФП нового типу симетрії. Ця симетрія має в першу чергу математичну природу. Вона полягає в наявності специфічних математичних перетворень, які переводять систему саму в себе внаслідок "виключення" з розгляду певної множини змінних. Перетворення носять назву перетворень ренормалізаційної групи, а симетрія – ренормгруповою.

В якості об'єкту дослідження вибирається тривимірна модель Ізінга, яка описує найбільш характерні риси фазового переходу (ФП). Вона може бути використана з певними несуттєвими модифікаціями для опису всіх основних явищ при фазових переходах другого роду. Серед них сильно анізотропні магнетики, прості флюїди, бінарні сплави та ряд інших систем.

Моделлю Ізінга називаємо систему  $N$  частинок з попарною взаємодією. Частинки розміщені в вузлах простої кубічної ґратки з періодом  $c$  і характеризуються двома власними значеннями  $+1$  та  $-1$ . Потенціал взаємодії має вигляд експонентно спадної функції віддалі між частинками. Гамільтоніан такої системи записується у стандартному вигляді

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} \Phi(r_{ij}) s_i s_j - h \sum_i s_i. \quad (1)$$

Тут  $h$  - зовнішнє поле,  $r_{ij}$  - відстань між частинками, які розміщені в вузлах  $i$  та  $j$ ,

$$\Phi(r_{ij}) = A \exp(-r_{ij}/b), \quad (2)$$

де  $b$  - радіус ефективної дії потенціалу. Величини  $A$  та  $b$  є постійними. Метою роботи є розрахунок термодинамічних функцій моделі поблизу точки ФП, як функцій температури, зовнішнього поля та мікроскопічних параметрів системи  $c, b, A$ .

Особливістю даного підходу до опису ФП є використання негаусових густин міри, оскільки поблизу ТФП дисперсія гаусового розподілу прямує до безмежності і такий розподіл не може бути використаний для опису системи. Математично строга постановка задачі про опис критичних властивостей системи з гамільтоніаном (1) була сформульована І. Р. Юхновським в [1]. Це стало можливим завдяки узагальненню методу колективних змінних (КЗ) [2,3] на випадок спінових систем [4]. Важливим моментом застосування методу КЗ до дослідження фазових переходів стали роботи [4,5], пов'язані з обґрунтуванням форми базисного розподілу флуктуацій поблизу точки фазового переходу. В представленні КЗ статистична сума моделі (1) записується у вигляді функціонального інтегралу [4,6]

$$Z = 2^N 2^{(N'-1)/2} e^{\mathcal{M}_0 N} \int W(\rho) (d\rho)^{N'}. \quad (3)$$

Тут  $N' = N s_0^{-3}$  ( $N$  - загальне число частинок,  $s_0 > 1$ ). Величина  $\mathcal{M}_0$  буде приведена в (16). Параметер  $s_0$  вводиться для зручності розрахунків і пов'язаний з апроксимацією фур'є-образу потенціалу взаємодії  $\tilde{\Phi}(k)$ .

*Вибір потенціалу.* В загальному вигляді фур'є-образ виразу (2) має вигляд

$$\tilde{\Phi}(k) = \frac{\tilde{\Phi}(0)}{(1 + b^2 k^2)^2}, \quad \Phi(0) = A_0 8\pi (b/c)^3. \quad (4)$$

В області малих значень хвильового вектора  $\vec{k}$  для  $\tilde{\Phi}(k)$  можна обмежитись параболічною апроксимацією  $\tilde{\Phi}(k) = \tilde{\Phi}(0)(1 - 2b^2 k^2)$ , яка справедлива, однак, при  $k < B'$  де  $B' = (\alpha' b \sqrt{2})^{-1}$ . Величина  $\alpha'$  є постійним коефіцієнтом ( $\alpha' \geq 1$ ). Для області значень хвильових векторів близьких до границі першої півзони Бріллюена  $B = \pi/c$ ,

фур'є-образ потенціалу  $\Phi(k)$  із (4) замінимо деяким його середнім значенням  $\bar{\Phi}$ . В результаті, будемо використовувати наступну апроксимацію для фур'є-образу потенціалу [7]

$$\Phi(k) = \begin{cases} \tilde{\Phi}(0) (1 - 2b^2k^2) & \text{при } k \leq B' \\ \bar{\Phi} & \text{при } B' < k \leq B \end{cases} \quad (5)$$

Приймаючи до уваги (5), для параметра  $s_0$  знаходимо

$$s_0 = B/B' = \alpha' \pi \sqrt{2} b/c. \quad (6)$$

У випадку  $\alpha' = 1$  маємо, що  $\Phi(0)(1 - 2b^2k^2) = 0$  при  $k = B'$ . При  $\alpha' > 1$  величина  $\Phi(0)(1 - 2b^2k^2) > 0$  для всіх  $k \in [0, B']$ . Множник  $\alpha' \geq 1$  введений виключно з технічних причин. В попередніх роботах авторів [6,7] вважалося, що  $\alpha' = 1$ . Наявність області значень  $\alpha' > 1$  приводить до зменшення області застосування параболічної апроксимації потенціалу. Оптимальний вибір величини  $\alpha'$  буде здійснений нижче (див.(2.44)), а залежність результатів розрахунку від значення  $\alpha'$  приведена в Додатку 1.

Слід зауважити, що  $s_0 \geq 1$ . Тому мінімальне значення величини  $b$  рівне  $b_{min} = c/\pi\alpha'\sqrt{2}$ . При  $b = b_{min}$  знаходимо, що  $B' = B$ , а отже  $s_0 = 1$ . Область параболічної апроксимації потенціалу при  $b = b_{min}$  розповсюджується на всі значення хвильового вектора з першої зони Бріллюена.

Можна зробити оцінку величини параметра  $s_0$  для випадку, який відповідає взаємодії типу найближчих сусідів. Порівняємо вираз (4) з фур'є-образом потенціалу найближчих сусідів. У випадку малих значень хвильового вектора знаходимо

$$\tilde{\Phi}(0) = 2dJ, \quad b = b_I = \frac{c}{2\sqrt{d}}. \quad (7)$$

Тут  $J$  - постійна взаємодії найближчих сусідів,  $d$  - вимірність простору. В цьому випадку

$$s_0 = \pi\alpha'/\sqrt{6} \approx 1.28255 \cdot \alpha' \quad (8)$$

Величина  $\bar{\Phi}$  відповідає усередненому значенню потенціалу  $\tilde{\Phi}(k)$  із (4) на інтервалі  $k \in (B', B]$ . В подальших розрахунках будемо використовувати наступне усереднення

$$\langle \Phi \rangle = \int_{B'}^B \Phi(k) d\vec{k} / \int_{B'}^B \Phi(0) d\vec{k}.$$

Приймаючи до уваги (4) знаходимо

$$\langle \Phi \rangle = \Phi_1/\Phi_0, \quad (9)$$

де

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= b^{-3} \left[ -\frac{\pi b}{2c} \left( 1 + \pi^2 \left( \frac{b}{c} \right)^2 \right)^{-1} + \frac{\alpha'}{\sqrt{2}(1+2\alpha'^2)} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \arctg \left( \frac{b}{c} \right) - \frac{1}{2} \arctg \frac{1}{\alpha'\sqrt{2}} \right] \\ \Phi_0 &= b^{-3} / 3 \left[ \pi^3 \left( \frac{b}{c} \right)^3 - \frac{1}{2\alpha'^3\sqrt{2}} \right] \quad ; \quad (10) \end{aligned}$$

З ростом відношення  $b/c$  величина  $\langle \Phi \rangle$  прямує до нуля (мінімальне значення  $b/c = 1/\pi\alpha'\sqrt{2}$ ). Значення  $\langle \Phi \rangle$  приведені в табл.1 (див.стор.7).

В подальших розрахунках в якості  $\bar{\Phi}$  будемо використовувати вираз

$$\bar{\Phi} = \langle \Phi \rangle + \Phi_\infty. \quad (11)$$

Тут  $\Phi_\infty$  є поправка, яка забезпечує правильну асимптотичну поведінку моделі в границі  $b/c \rightarrow \infty$  і обчислена в (3.13). Зазначимо лише, що  $\Phi_\infty < 0$  і за порядком величини є  $-0, 1$ . Підсумовуючи сказане вище, в подальших розрахунках будемо вважати, що величина  $\bar{\Phi}$  є малою.

Для густини міри  $\mathcal{W}(\rho)$  із (3), згідно до результатів робіт [4,5], маємо

$$\begin{aligned} \mathcal{W}(\rho) &= \exp \left[ N' a'_0 - \frac{1}{2} \sum_{k \leq B'} d(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \right. \\ &\quad \left. - \sum_{n \geq 2}^l \frac{a'_{2n}}{(2n)!} (N')^{1-n} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_{2n} \\ k_i \leq B'}} \times \right. \\ &\quad \left. \times \rho_{\vec{k}_1} \dots \rho_{\vec{k}_{2n}} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_{2n}} + \sqrt{N} \beta h \rho_0 \right] \quad (12) \end{aligned}$$

Тут

$$d(k) = a'_2 - \beta\Phi(k) \quad (13)$$

Відповідні вирази для коефіцієнтів  $a'_{2l}$  одержані в [6,7] шляхом інтегрування по колективних змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$ , індекси  $\bar{k}$  яких належать до інтервалу  $k \in (B', B]$ . Структура виразів для  $a'_{2l}$  залежить від форми базисної густини міри, яка використовується при розрахунках. В околі ТФП в якості базисної слід використовувати негаусову густину міри [4]. Найпростішою такою мірою є четвірна густина міри [1]. Як було показано в наших попередніх роботах [6-8] вона дозволяє відтворити основні риси фазового переходу і знайти термодинамічні характеристики системи в критичній області. Проведення розрахунків з використанням четвірної густини міри відповідає наближенню моделі  $\rho^4$  в термінології теоретико-польового підходу. Наступною, більш точною, є шестірна густина міри (модель  $\rho^6$ ) і т.д. Для точного розв'язку задачі про фазовий перехід в моделі (1) при  $d < 4$  слід використовувати густину міри, яка відповідає моделі  $\rho^{2l}$ , де  $l \rightarrow \infty$  [9]. Для скорочення викладок будемо використовувати в даній роботі наближення моделі  $\rho^4$ . Отримані в такому наближенні результати можуть бути легко узагальнені на випадок використання вищих моделей типу  $\rho^6$  і т.д.

В наближенні моделі  $\rho^4$  вирази для коефіцієнтів  $a'_{2l}$  мають вигляд [8]

$$a'_0 = \ln \left[ (2\pi)^{-1/2} \left( \frac{3}{\tilde{\mathcal{M}}_4} \right)^{1/4} \exp \left( \frac{\tilde{y}^2}{4} \right) U(0, \tilde{y}) \right]$$

$$a'_2 = \left( \frac{3}{\tilde{\mathcal{M}}_4} \right)^{1/2} U(\tilde{y}), \quad a'_4 = \left( \frac{3}{\tilde{\mathcal{M}}_4} \right) U(\tilde{y}), \quad (14)$$

де

$$\tilde{y} = \sqrt{3}\tilde{\mathcal{M}}_2(\tilde{\mathcal{M}}_4)^{-1/2} \quad (15)$$

Для величин  $\tilde{\mathcal{M}}_{2n}$  маємо вирази

$$\tilde{\mathcal{M}}_0 = \frac{1}{2}\alpha; \quad \tilde{\mathcal{M}}_2 = 1 - \alpha; \quad \tilde{\mathcal{M}}_4 = 2s_0^{-3}(1 - 4\alpha) \quad (16)$$

Тут введено позначення

$$\alpha = \beta\tilde{\Phi}(0)\tilde{\Phi}(1 - s_0^{-3})$$

Спеціальні функції  $U(0, \tilde{y})$  та  $U(\tilde{y}), \varphi(\tilde{y})$  виражаються через функції параболічного циліндра Вебера  $U(a, x)$  [10]. Для останньої будемо використовувати наступне інтегральне представлення

$$U(a, x) = \frac{2}{\Gamma(a + \frac{1}{2})} e^{-x^2/4} \int_0^\infty t^{2a} \exp(-xt^2 - \frac{1}{2}t^4) dt \quad (17)$$

Для  $U(\tilde{y})$  та  $\varphi(\tilde{y})$  маємо

$$U(\tilde{y}) = \frac{U(1, \tilde{y})}{U(0, \tilde{y})}, \quad \varphi(\tilde{y}) = 3U^2(\tilde{y}) + 2\tilde{y}U(\tilde{y}) - 2 \quad (18)$$

В границі великих значень  $b/c$  аргумент  $\tilde{y}$  приймає великі значення

$$\tilde{y} \approx \sqrt{3/2}s_0^{3/2} \approx \left( \alpha' \pi \frac{b}{c} \right)^3 \quad (19)$$

В цьому випадку, для спеціальних функцій (18) можна використати наближені вирази

$$U(0, \tilde{y}) = (\tilde{y})^{-1/2} \exp[-\tilde{y}^2/4] \left( 1 - \frac{3}{8}(\tilde{y})^{-2} + \frac{105}{108}(\tilde{y})^{-4} + \dots \right)$$

$$U(\tilde{y}) = (\tilde{y})^{-1} \left( 1 - \frac{3}{2}(\tilde{y})^{-2} + 6(\tilde{y})^{-4} + \dots \right)$$

$$\varphi(\tilde{y}) = 3(\tilde{y})^{-4} \left( 1 - \frac{21}{2}(\tilde{y})^{-2} + \frac{447}{4}(\tilde{y})^{-4} + \dots \right) \quad (20)$$

Для проміжних і малих значень  $b/c$  розклади (20) не мають місця і при розрахунку коефіцієнтів  $a'_{2n}$  повинні використовуватися вирази (16)-(18). В загальному випадку коефіцієнти  $a'_{2n}$  є функціями температури, величини  $\tilde{\Phi}$  та залежать від відношення  $b/c$ .

У випадку  $\tilde{\Phi} = 0$  розрахунки суттєво спрощуються. Для величин  $\tilde{\mathcal{M}}_{2l}$  маємо

$$\tilde{\mathcal{M}} = 0, \quad \tilde{\mathcal{M}}_2 = 1, \quad \tilde{\mathcal{M}}_4 = 2s_0^{-3} \quad (21)$$

і коефіцієнти  $a'_{2n}$  стають незалежними від температури постійними величинами. Вони є функціями лише відношення  $b/c$ .

В таблиці 1. приведені значення  $a'_{2l}$  при  $\tilde{\Phi} = 0$  в залежності від величини параметра  $b/c$ . Вони є монотонними функціями від  $b/c$ , за винятком коефіцієнта  $a'_4$ , який має локальний максимум при  $b/c = 0.2735$ .

Табл. 1. Значення коефіцієнтів  $a'_{2n}$  при  $\bar{\Phi} = 0$ . Величина  $b_{min} = \frac{c}{\alpha' \pi \sqrt{2}}$  відповідає випадку  $s_0 = 1 (B' = B)$ ;  $b_I = \frac{c}{2\sqrt{d}}$  - взаємодії типу найближчих сусідів з константою взаємодії  $J = \Phi(0)/2d$ .

$b$	$a'_0$	$a'_2$	$a'_4$	$\tilde{y}$	$\langle \Phi \rangle$
$b_{min}$	-1.05569	0.64493	0.18259	1.22475	
$b_I=0.2887$	-1.00021	0.75804	0.19239	1.77897	0.3717
0.3000	-0.99346	0.77391	0.19071	1.88462	0.3576
$b_{II}=0.3379$	-0.97536	0.81934	0.180247	2.25281	0.3132
0.3500	-0.97076	0.83164	0.17576	2.37490	0.3001
$b_{III}=0.3584$	-0.96783	0.83962	0.17242	2.46091	0.2912
0.4000	-0.95605	0.87329	0.15427	2.90157	0.2510
0.4500	-0.94623	0.90337	0.13163	3.46228	0.2102
0.5000	-0.93949	0.92527	0.11062	4.05507	0.1765
0.6000	-0.93132	0.95337	0.07697	5.33052	0.1263
0.8000	-0.92431	0.97905	0.03870	8.20688	0.0691
1.0000	-0.92174	0.98894	0.02113	11.4695	0.0411
2.0000	-0.91929	0.99858	0.00282	32.4405	0.0068
3.0000	-0.91904	0.99958	0.00084	59.5971	0.0022
5.0000	-0.91896	0.99991	0.00018	128.232	0.0005
10.0000	-0.91894	0.99999	0.00002	362.696	0.0001
.					
.					
.					
$\infty$	-0.91894	1	0	$\infty$	0

## 1. Процедура наближеного обчислення статистичної суми.

Запропонований спосіб наближеного розрахунку статистичної суми тривимірної однокомпонентної спінової системи. Він ґрунтується на використанні негаусових базисних розподілів флуктуацій густини спінового моменту і є ефективним поблизу точки фазового переходу. Статистична сума представлена в виді добутку парціальних статистичних сум, для яких знайдені явні вирази. Записані загальні рекурентні співвідношення для коефіцієнтів, які визначають розподіл флуктуацій в суміжних блочних структурах.

Функціональне представлення статистичної суми моделі (1) в на-

ближенні четвірної густини міри при  $h = 0$  має вигляд [1,6]

$$Z = C' e^{a'_0 N'} \int \exp \left( -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B'} d(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{4!} \frac{a'_4}{N'} \times \right. \\ \left. \times \sum_{\substack{k_1, \dots, k_{2n} \\ k_i \leq B'}} \rho_{\vec{k}_1} \dots \rho_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_4} \right) (d\rho)^{N'} \quad (1.1)$$

де

$$C' = 2^N 2^{(N'-1)/2} e^{\mathcal{M}_0 N} \quad (1.2)$$

Вираз для величини  $d(k)$  приведений в (13), а коефіцієнти  $a'_l$  задані формулами (14). Розглянемо схему обчислення статистичної суми (1.1) поблизу ТФП. Вона має свою специфіку в зв'язку з необхідністю використання в процесі розрахунків негаусової густини міри. Загальна ідея обчислення статистичної суми (1.1) є подібна до методики, запропонованої в роботах К.Вільсона [11,12]. Однак, реалізація цієї ідеї в даній роботі здійснюється з використанням іншого математичного апарату, який дозволяє на фізичному рівні строгості розв'язати задачу про фазовий перехід з позицій мікроскопічного опису.

Основна роль поблизу ТФП належить довгохвильовим флуктуаціям параметра порядку. Вони описуються КЗ  $\rho_{\mathbf{k}}$  з малими значеннями хвильових векторів  $\vec{k}$ . Однак в виразі (1.1) не вдається виділити окремо його коротко- та довгохвильову частини. Змінні  $\rho_{\mathbf{k}}$ , внаслідок наявності символу Кронекера  $\delta_{k_1 + \dots + k_4}$  в (1.1), не розділяються. Тому, в даній роботі використовується ідея про поетапне відінтегрування "несуттєвих" змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$ , з великими значеннями хвильового вектора  $\vec{k}$  і опису системи при використанні перенормованих таким чином змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$  з  $k \rightarrow 0$ . Реалізація такої схеми розрахунку була здійснена в роботах І.Юхновського [1,4] і передбачає два етапи.

На першому з них зона Брілюена розбивається на інтервали, які визначають шари фазового простору КЗ. До нульового шару КЗ ( $n = 0$ ) належить множина змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$ , для яких  $k \in (B_1, B']$ , де  $B_1 = B'/s$ . До  $n$ -того шару КЗ - множина КЗ  $\rho_{\mathbf{k}}$ , для яких  $k \in (B_{n+1}, B_n]$ , причому  $B_{n+1} = B_n/s$ . Величина  $s$  називається параметром поділу фазового простору КЗ на шари і відповідає параметру ренормалізаційної групи (РГ). В принципі, параметр  $s$  може

приймати довільні значення ( $s > 1$ ). В даній роботі запропоноване оптимізаційне рівняння для визначення параметра поділу  $s = s^*$ . Дослідження і аналіз розв'язків цього рівняння дозволяють запропонувати відносно просту і разом з тим загальну схему обчислення основних характеристик тривимірних модельних систем поблизу точки фазового переходу. Вона застосовна як у випадку використання моделі  $\rho^4$  так і для вищих наближень (модель  $\rho^6$  і т.д.). Її особливістю, в порівнянні зі схемами розрахунку критичних властивостей тривимірних систем, що розвинуті в роботах [1,6,13], полягає в наступному. По-перше, значення  $s = s^*$  не змінюється при ускладненні базисної густини міри (моделей  $\rho^{2l}$  при  $l \geq 2$ ). По-друге, результати, отримані для моделі  $\rho^4$  є базовими при розрахунку моделі  $\rho^6$ , та вищих моделей  $\rho^{2l}$ .

Другий етап розрахунку передбачає інтегрування по шарах фазового простору КЗ. Його реалізація передбачає використання негаусових густин міри і потребує (згідно до результатів робіт [1,6]) заміни фур'є-образу потенціалу  $\Phi(k)$  на відповідне середнє значення в  $n$ -тому шарі КЗ. Процедура усереднення  $\Phi(k)$  приводить до огрублення моделі і втрати при розрахунках так званого малого критичного показника  $\eta$ . З іншого боку вона дозволяє здійснити опис критичної поведінки моделі на мікроскопічному рівні. Останнє є принципово важливим, коли йдеться про опис системи поблизу точки фазового переходу.

Виконаємо інтегрування у статистичній сумі (1.1) по нульовому шарі КЗ  $\{\rho_{\mathbf{k}}\}_0$ , де  $k \in (B_1, B]$ . Пізніше запишемо результат інтегрування в  $n$  послідовно розташованих шарах КЗ і відповідне представлення для статистичної суми. Середнє значення коефіцієнта  $d(k)$  в (1.1) на інтервалі  $k \in (B_1, B')$  запишемо у вигляді

$$\langle d(k) \rangle = a_2 - \beta\Phi(0) + 2\beta\Phi(0)b^2 \langle k^2 \rangle_{B_1, B'}$$

В якості середнього виберемо середньо арифметичне усереднення. Тоді

$$\langle d(k) \rangle \equiv d(B_1, B') = a_2 - \beta\Phi(0) + q \quad (1.3)$$

де

$$q = \beta\Phi(0)\bar{q}, \quad \bar{q} = \frac{1}{2}(1 + s^{-2})\frac{1}{\alpha'^2} \quad (1.4)$$

Запишемо статистичну суму (1.1) у вигляді [4]

$$Z = C' e^{a'_0 N'} \int \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B'} [d(k) - d(B_1, B')] \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - 2\pi i \sum_{k \leq B_1} \nu_{\vec{k}} \rho_{\mathbf{k}} \right] \prod_{l=1}^{N'} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{2} d(B_1, B') \eta_l^2 - \frac{1}{4!} a'_4 \eta_l^4 + 2\pi i \eta_l \nu_l \right\} d\eta_l \right] (d\rho)^{N_1} (d\nu)^{N_1} \quad (1.5)$$

Тут змінна  $\eta_l$  є вузловим зображенням КЗ  $\rho_{\mathbf{k}}$ , а змінні  $\nu_{\vec{k}}$  являють собою множину  $N'$  змінних, спряжених до КЗ  $\rho_{\mathbf{k}}$ . Для  $\nu_l$  маємо вираз

$$\nu_l = \frac{1}{\sqrt{N'}} \sum_{k \leq B_1} \nu_k \exp(i\vec{k}\vec{l}), \quad (1.6)$$

який слід трактувати як позначення. Виконаємо інтегрування в (1.5) по змінних  $\eta_l$ . Отримуємо

$$Z = C' e^{a'_0 N'} [Q(d)]^{N'} \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B'} \times \right. \\ \left. \times (d(k) - d(B_1, B')) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - 2\pi i \sum_{k \leq B_1} \nu_{\vec{k}} \rho_{\mathbf{k}} - \sum_{m \geq 1} (2\pi)^{2m} \frac{P_{2m}}{(2m)!} \sum_{l=1}^{N_1} \nu_l^{2m} \right\} (d\rho)^{N_1} (d\nu)^{N_1}, \quad (1.7)$$

де  $[Q(d)]^{N'}$  є результатом інтегрування в (1.5) по змінних  $\eta_l$

$$Q(d) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\eta) d\eta, \quad (1.8)$$

причому

$$f(\eta) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} d(B_1, B) \eta^2 - \sum_{m=2}^{m_0} \frac{a_{2m}}{(2m)!} \eta^{2m} \right\} \quad (1.9)$$

В даній роботі ми використовуємо наближення четвірної базисної густини міри і відповідно до цього  $m_0 = 2$ . Проте, не виникає принципових труднощів при використанні вищих наближень. Так моделі  $\rho^6$  відповідатиме  $m_0 = 3$ , моделі  $\rho^8$  - значення  $m_0 = 4$  і т.д.

Коефіцієнти  $P_{2m}$  розраховуються згідно до наступних співвідношень

$$\begin{aligned} P_2 &= I_2, & P_4 &= s^{-d}[-I_4 + 3I_2^2], \\ P_6 &= s^{-2d}[I_6 - 15I_4I_2 + 30I_2^3], \\ P_8 &= s^{-3d}[-I_8 + 28I_6I_2 + 35I_4^2 - 420I_4I_2^2 + 630I_2^4] \end{aligned} \quad (1.10)$$

і т.д., причому

$$I_{2l} = \int_{-\infty}^{\infty} \eta^{2l} f(\eta) d\eta / \int_{-\infty}^{\infty} f(\eta) d\eta \quad (1.11)$$

Як видно із (1.9) значення коефіцієнтів  $P_{2m}$  залежать від значення  $m_0$ . В подальших обчисленнях будемо вважати, що  $m_0 = 2$ . Таке наближення будемо називати наближенням моделі  $\rho^4$ .

Виконаємо в (1.7) інтегрування по  $N_1$  змінних  $\eta_{\vec{k}}$ . В результаті отримуємо [4]

$$\begin{aligned} Z &= C_1 e^{a'_0 N'} [Q(d)]^{N'} [Q(P)]^{N_1} \int \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \in B'} d_1(k) \rho_{\vec{k}} \rho_{-\vec{k}} - \right. \\ &\left. - \sum_{m=2}^{m_0} \frac{a'_{2m}}{(2m)!} N_1^{1-m} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_{2m} \\ k_1 \leq B_1}} \rho_{\vec{k}_1} \cdots \rho_{\vec{k}_{2m}} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_{2m}} \right] (d\rho)^{N_1} \end{aligned} \quad (1.12)$$

Тут  $C_1 = 2^N 2^{(N_1-1)/2} \exp(\tilde{\mathcal{M}}_0 N)$ ,

$$Q(P) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left( - \sum_{m \geq 1} (2\pi)^{2m} \frac{P_{2m}}{(2m)!} \nu^{2m} \right) d\nu \quad (1.13)$$

Величина  $d_1(k) = a_2^{(1)} - \beta\Phi(k)$  в (1.12) є подібною за своїм змістом до величини  $d(k)$  із (1.1), однак приймає значення на інтервалі значень  $k \in [0, B_1]$ . Коефіцієнти  $a_{2m}^{(1)}$  виражаються через їх початкові значення  $a'_{2m}$  (див. (14)) з допомогою рекурентних співвідношень (РС).

$$\begin{aligned} a_2^{(1)} &= (2\pi)^2 T_2 + \beta\Phi(B_1, B') \\ a_4^{(1)} &= (2\pi)^4 [-T_4 + 3T_2^2], \end{aligned} \quad (1.14)$$

де  $\Phi(B_1, B')$  - середнє значення  $\tilde{\Phi}(k)$  на інтервалі  $(B_1, B')$ ,

$$T_{2l} = \int_{-\infty}^{\infty} \nu^{2l} f(\nu) d\nu / \int_{-\infty}^{\infty} f(\nu) d\nu, \quad (1.15)$$

причому

$$f(\nu) = \exp \left\{ - \sum_{m \geq 1} (2\pi)^{2m} \frac{P_{2m}}{(2m)!} \nu^{2m} \right\} \quad (1.16)$$

Ми не будемо обмежувати суму по  $m$  в (1.16) зверху, як це було зроблено в (1.12). Обмеження в сумі по  $m$  відбувається, коли мова йде про інтегрування в  $\rho_{\vec{k}}$  просторі (див. (1.1), (1.12)). Це обмеження визначає тип наближення (модель  $\rho^4$  для  $m_0 = 2$ , модель  $\rho^6$  для  $m_0 = 3$  і т.д.). При інтегруванні в  $\nu_{\vec{k}}$  просторі подібне обмеження не потрібне, оскільки врахування необхідного числа доданків регулюється малим параметром  $(s^*)^{-d}$ . Оскільки  $s^* > 3$  (як це буде з'ясовано нижче), то величина  $(s^*)^{-d}$  є достатньо малою, і згідно до (1.10) буде визначати порядок величини коефіцієнтів  $P_{2m}$ .

Таким чином, здійснено інтегрування у статистичній сумі (1.1) по  $(N' - N_1)$  змінних  $\rho_{\vec{k}}$  (для яких  $k \in (B_1, B')$ ). В результаті одержується вираз (1.12). За своєю структурою він подібний до (1.1). Різниця між ними полягає в наявності вищих, як четверта, степенів змінної  $\rho_{\vec{k}}$  в (1.12). Обмежимося в (1.12) лише двома доданками в сумі по  $m$ , тобто покладемо  $m_0 = 2$ . Це відповідає наближенню моделі  $\rho^4$ . Тепер можна говорити лише про формальну відмінність (1.1) та (1.12). Процедура поетапного інтегрування може бути знову застосована до (1.12), подібно до того, як це мало місце для (1.1).

Проблема узгодження числа доданків (в сумі по  $m$ ) при обчисленні інтегралів в  $\rho_{\vec{k}}$  та  $\nu_{\vec{k}}$  змінних широко обговорювалась в літературі. Зокрема, в роботах [13,14] використовувався  $g$  - розклад, який дозволяє вирішувати цю проблему самоузгоджено. Для вихідної моделі  $\rho^{2l}$ , в рамках  $g$ -розкладу вдається сформулювати умови вибору певного числа доданків при інтегруванні в  $\nu_{\vec{k}}$  - просторі КЗ. Метод  $g$ -розкладу виявився ефективним при розрахунку критичних показників тривимірних ґраткових систем. Однак, розрахунок термодинамічних характеристик в цьому підході пов'язаний з трудно-

щами. Інший підхід, що розвивається в [6,15] ґрунтується на твердженні, що моделі  $\rho^{2l}$  відповідає наближення  $\nu^{2l}$  в  $\nu_k$ -просторі. Так, для моделі  $\rho^4$  в сумі по  $m$  в (1.7) слід обмежуватися врахуванням двох доданків; для моделі  $\rho^6$  – трьох доданків і т.д. Очевидно, що в границі  $n \rightarrow \infty$  всі ці підходи еквівалентні. Однак, для кожного конкретного випадку (при  $n = 2$  чи  $n = 3$ ) буде мати місце певна відмінність в результатах розрахунків одержаних в різних підходах.

Слід підкреслити, що наявність проміжного інтегрування у статистичній сумі пов'язане із процедурою "розширення" фазового простору КЗ  $\rho_k$ , яка була запропонована в роботах І.Р.Юхновського [1,4]. У зв'язку із цим слід намагатися виконати інтегрування по змінних  $\nu_k$  якнайточніше, навіть при обмеженні кількості доданків в  $\rho_k$ -просторі. В даній роботі запропонований новий підхід до врахування вкладів у статистичну суму від змінних  $\rho_k$  (так зване пряме інтегрування) та змінних  $\nu_k$  (проміжне інтегрування). Він полягає в тому, що незалежно від форми вихідного наближення в  $\rho_k$  просторі (модель  $\rho^{2l}$ ) для інтегралів в  $\nu_k$  просторі враховується "весь ряд". Останнє твердження вимагає пояснення. Виявляється, що для достатньо великих значень параметра  $s$  ( $s > 3.0$ ) вклад доданків вищих порядків в сумі по  $m$  в (1.7) є пропорційний до  $s^{-(n-1)3}$ . Тому, приймаючи до уваги достатнє число доданків в сумі по  $m$  в (1.7) ми можемо завжди досягти при розрахунках достатньої степені точності. Таким чином, розрахунок термодинамічних функцій вихідної моделі (1) у вищих наближеннях зводиться лише до ускладнення порядку наближення при обчисленні інтегралів в  $\rho_k$ -просторі.

Вперше, ідея використання при проміжному інтегруванні гаусової густини міри в якості базисної була використана в [16]. Запропоновані в ній рекурентні співвідношення (РС) мали вигляд рядів за степенями величини  $s^{-3}$ . В роботах [17,18] були отримані РС для компонентної ізінгоподібної моделі у вигляді розкладів за параметром  $s^{-3}$ . Пізніше цей підхід застосовувався в роботах [19,20] для дослідження критичної поведінки  $n$ - компонентної моделі магнетика та системи рідина-газ. В даній роботі ми розглянемо випадок ізінгоподібної моделі  $\rho^4$ , яка відповідає використанню четвірної густини міри в якості базисної. При цьому в проміжному інтегруванні враховується весь ряд за степенями змінної  $\nu_k$ . Для цього достатньо обмежитись практично декількома першими доданками, які відповідають випадку  $m_0 = 4$ , тобто моделі  $\nu^8$ . Цього виявляється достатньо, щоб вклад неврахованих доданків був малий.

Виконаємо інтегрування статистичної суми (1.1) в  $n$  шарах фазового простору КЗ. Відповідно до [16] маємо:

$$Z = C_n e^{a'_0 N'} [Q(d_0)]^{N'} Q_1 \dots Q_n [Q(P_n)]^{N_{n+1}} \times \int W_{n+1}(\rho) (d\rho)^{N_{n+1}}. \quad (1.17)$$

Тут  $N_n = N' s^{-3n}$ ,  $C_n = 2^N 2^{(N_n-1)/2} \exp(\tilde{\mathcal{M}}_0 N)$ . Величина  $Q(d)$  означена в (1.8), вираз для  $a'_0$  приведений в (14). Парціальні статистичні суми  $Q_n$  мають вигляд

$$(Q_n)^{1/N_n} = Q(P_{n-1})Q(d_n). \quad (1.18)$$

Вони описують вклад до статистичної суми системи від  $n$ -того фазового шару, тобто від множини змінних  $\rho_k$ , індекси яких знаходяться в інтервалі  $(B_{n+1}, B_n]$ . Подібно до (1.13) для  $Q(P_n)$  маємо

$$Q(P_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[ - \sum_{m \geq 1} (2\pi)^{2m} \frac{P_{2m}^{(n)}}{(2m)!} \nu^{2m} \right] d\nu. \quad (1.19)$$

Для коефіцієнтів  $P_{2m}^{(n)}$  справедливі формули (1.10), в яких величини  $I_{2l}^{(n)}$  повинні бути замінені на  $I_{2l}^{(n)}$ , для яких маємо

$$I_{2l}^{(n)} = L_{2l}^{(n)} / L_0^{(n)}, \quad (1.20)$$

де

$$L_{2l}^{(n)} = \int_{-\infty}^{\infty} \eta^{2l} f_n(\eta) d\eta \quad (1.21)$$

У випадку використання моделі  $\rho^4$  функція  $f_n(\eta)$  має вигляд

$$f_n(\eta) = \exp \left[ -\frac{1}{2} d_n(B_{n+1}, B_n) \eta^2 - \frac{1}{4!} a_4^{(n)} \eta^4 \right] \quad (1.22)$$

Для  $Q(d_n)$  знаходимо

$$Q(d_n) = \int_{-\infty}^{\infty} f_n(\eta) d\eta \quad (1.23)$$

Цей вираз може бути записаний в дещо іншій формі, через функції параболічного циліндра Вебера  $U(a, x_n)$

$$Q(d_n) = (2\pi)^{1/2} \left( \frac{3}{a_4^{(n)}} \right)^{1/4} \exp \left( \frac{x_n^2}{4} \right) U(0, x_n),$$



де

$$x_n = d_n(B_{n+1}, B_n) \left( \frac{3}{a_4^{(n)}} \right)^{1/2} \quad (1.24)$$

Густина міри  $(n+1)$ -ої блочної структури  $W_{n+1}(\rho)$  із (1.17) записується у вигляді

$$W_{n+1}(\rho) = \exp \left( -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{n+1}} d_{n+1}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{a_4^{(n+1)}}{4!} N_{n+1}^{-1} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \leq B_{n+1}}} \rho_{\bar{k}_1} \cdots \rho_{\bar{k}_4} \delta_{\bar{k}_1 + \dots + \bar{k}_4} \right) \quad (1.25)$$

Тут  $B_{n+1} = B's^{-(n+1)}$ ,

$$d_{n+1}(k) = d_{n+1}(0) + 2\beta\Phi(0)b^2k^2 \quad (1.26)$$

Для коефіцієнтів  $d_{n+1}(0)$  та  $a_4^{(n)}$  мають місце рекурентні співвідношення (РС)

$$\begin{aligned} d_{n+1}(0) &= -qs^{-2n} + (2\pi)^2 T_2^{(n)} \\ a_4^{(n+1)} &= (2\pi)^4 \left[ -T_4^{(n)} + 3(T_2^{(n)})^2 \right]. \end{aligned} \quad (1.27)$$

Постійна  $q$  означена в (1.4), а вирази для моментів  $T_{2l}^{(n)}$  співпадають з виразами (1.15) для  $T_{2l}$ , якщо функцію  $f(\nu)$  замінити на  $f_n(\nu)$ , для якої маємо

$$f_n(\nu) = \exp \left[ - \sum_{m \geq 1} (2\pi)^{2m} \frac{P_{2m}^{(n)}}{(2m)!} \nu^{2m} \right]. \quad (1.28)$$

Дослідження виразу для статистичної суми (1.17) пов'язане з вивченням РС (1.27). Крім того, РС дозволяють отримати додаткову інформацію про критичну поведінку моделі навіть без розрахунку вільної енергії. Розглянемо їх більш детально.

## 2. Дослідження рекурентних співвідношень.

Одержано явний вигляд рекурентних співвідношень в критичній області. Знайдені власні значення і власні вектори лінеаризованої поблизу фіксованої точки матриці  $PF$  перетворення. Запропонована процедура обчислення оптимального значення параметра  $PF$   $s$ . Знайдене нами значення  $s = 3.4252$  використовується в подальших обчисленнях.

Перепишемо РС (1.27) у більш зручній формі. Для цього введемо величини  $r_n$  та  $u_n$ , які пов'язані з  $d_n(0)$  та  $u_n$  з допомогою співвідношень

$$r_n = s^{2n} d_n(0), \quad u_n = s^{4n} a_4^{(n)}. \quad (2.1)$$

В результаті заміни (2.1) рекурентні співвідношення (1.27) записуються у вигляді

$$\begin{aligned} r_{n+1} &= s^2 \left[ -q + (2\pi)^2 s^{2n} T_2^{(n)} \right], \\ u_{n+1} &= s^4 \left[ (4\pi)^2 s^{4n} (-T_4^{(n)} + 3(T_2^{(n)})^2) \right]. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Для величин  $T_{2l}^{(n)}$  маємо

$$T_{2l}^{(n)} = Y_{2l}^{(n)} / Y_0^{(n)}, \quad (2.3)$$

де

$$Y_{2l}^{(n)} = \int_{-\infty}^{\infty} \nu^{2l} f_n(\nu) d\nu.$$

В якості  $f_n(\nu)$  використовується вираз <sup>1</sup> типу (1.16) при  $m_0 = 4$ . Після відповідної заміни змінних знаходимо

$$\begin{aligned} Y_{2l}^{(n)} &= \left( \frac{2}{(2\pi)^2 P_2^{(n)}} \right)^{l+\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} x^{2l} e^{-x^2} \times \\ &\times \exp(-g_n x^4 - f_n x^6 - k_n x^8) dx, \end{aligned} \quad (2.4)$$

<sup>1</sup>Значення  $m_0 = 4$  відповідає третьому наближенню за величиною  $s_0^{-d}$ . Таке високе наближення доцільно використовувати при малих значеннях параметра  $b/c$ , де величина  $s_0$  не є великим числом. Однак, при  $b \sim c$  вже перше наближення ( $m_0 = 2$ ) дає добрі результати, оскільки  $s_0^{-d} \ll 1$ .

де

$$g_n = \frac{P_4^{(n)}}{6(P_2^{(n)})^2}, \quad f_n = \frac{P_6^{(n)}}{90(P_2^{(n)})^3}, \quad k_n = \frac{P_8^{(n)}}{2520(P_2^{(n)})^4}. \quad (2.5)$$

Виявляється, що величини  $g_n, f_n$  та  $k_n$  мають різний порядок малості. Щоб це показати розглянемо вирази для коефіцієнтів  $P_{2l}^{(n)}$ . Для них справедливі формули (1.10), де в якості величин  $I_{2l}$  слід використати  $I_{2l}^{(n)}$  із (1.20). Знайдемо явний вираз для величини

$$L_{2l}^{(n)} = \int_{-\infty}^{\infty} \eta^{2l} f_n(\eta) d\eta. \quad (2.6)$$

Прийемо до уваги (1.22). Тоді, після відповідної заміни змінних отримаємо

$$L_{2l}^{(n)} = \left(\frac{24}{u_n}\right)^{\frac{1}{2} + \frac{1}{4}} s^{(2l+1)n} \int_{-\infty}^{\infty} x^{2l} \times \exp\left(-h_n \sqrt{6}x^2 - x^4\right) dx. \quad (2.7)$$

При розрахунку інтегралу в (2.7) припустимо, що величина

$$h_n = \frac{r_n + q}{\sqrt{u_n}} \quad (2.8)$$

є малою. В подальших розрахунках будуть одержані умови, при яких  $h_n$  приймаються малі значення. Саме така ситуація має місце поблизу точки фазового переходу. В результаті, для  $L_{2l}^{(n)}$  знаходимо

$$L_{2l}^{(n)} = s^{n(2l+1)} \frac{1}{2} \left(\frac{24}{u_n}\right)^{\frac{1}{2} + \frac{1}{4}} \left[ \Gamma\left(\frac{2l+1}{4}\right) - h_n \sqrt{6} \Gamma\left(\frac{2l+3}{4}\right) + 3h_n^2 \Gamma\left(\frac{2l+5}{4}\right) + \dots \right]. \quad (2.9)$$

Тут  $\Gamma(a)$  - Гамма функція. Використовуючи (1.20), знаходимо

$$I_{2l}^{(n)} = s^{2ln} \left(\frac{24}{u_n}\right)^{\frac{l}{2}} \epsilon_{l_0} (1 + \epsilon_{l_1} h_n + \epsilon_{l_2} h_n^2). \quad (2.10)$$

Для коефіцієнтів  $\epsilon_{2m}$  маємо вирази

$$\begin{aligned} \epsilon_{20} &= \gamma, & \epsilon_{21} &= \gamma\sqrt{6} - \frac{\sqrt{6}}{4\gamma}, & \epsilon_{22} &= 6\gamma^2; \\ \epsilon_{40} &= \frac{1}{4}, & \epsilon_{41} &= -2\gamma\sqrt{6}, & \epsilon_{42} &= 3 - 12\gamma^2; \\ \epsilon_{60} &= \frac{3}{4}\gamma, & \epsilon_{61} &= \gamma\sqrt{6} - \frac{5\sqrt{6}}{12\gamma}, & \epsilon_{62} &= 2 + 6\gamma^2; \\ \epsilon_{80} &= \frac{5}{16}, & \epsilon_{81} &= -\frac{16}{5}\gamma\sqrt{6}, & \epsilon_{82} &= 6 - \frac{96}{5}\gamma^2; \end{aligned} \quad (2.11)$$

Тут введене позначення

$$\gamma = \frac{\Gamma(3/4)}{\Gamma(1/4)} \approx 0.33798912 \dots$$

Підставивши замість  $\gamma$  його значення, отримуємо числові значення для коефіцієнтів  $\epsilon_{lm}$

$$\begin{aligned} \epsilon_{20} &= 0.33799, & \epsilon_{21} &= -0.98391, & \epsilon_{22} &= 0.68542; \\ \epsilon_{40} &= 0.25000, & \epsilon_{41} &= -1.65580, & \epsilon_{42} &= 1.62916; \\ \epsilon_{60} &= 0.25349, & \epsilon_{61} &= -2.19178, & \epsilon_{62} &= 2.68542; \\ \epsilon_{80} &= 0.31250, & \epsilon_{81} &= -2.64928, & \epsilon_{82} &= 3.80666. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Формула (2.10) дозволяє представити коефіцієнти  $P_{2l}^{(n)}$  в виді розкладів за степенями величини  $h_n$ . Згідно до (1.10), де  $I_{2l}$  замінені на  $I_{2l}^{(n)}$ , знаходимо

$$P_2^{(n)} = s^{2n} \left(\frac{24}{u_n}\right)^{\frac{1}{2}} \epsilon_0 (1 + \epsilon_1 h_n + \epsilon_2 h_n^2). \quad (2.13)$$

Надалі для скорочення записів введемо позначення  $\epsilon_0 = \epsilon_{20}, \epsilon_1 = \epsilon_{21}, \epsilon_2 = \epsilon_{22}$ ,

$$P_4^{(n)} = s^{4n-d} \frac{24}{u_n} m_0 (1 + m_1 h_n + m_2 h_n^2). \quad (2.14)$$

Тут  $m_0 = 0.0927, m_1 = -2.8092, m_2 = 4.2528$ . Подібно записується

$$P_6^{(n)} = s^{6n-2d} \left(\frac{24}{u_n}\right)^{3/2} b_0 (1 + b_1 h_n + b_2 h_n^2), \quad (2.15)$$

де  $b_0 = 0.14435$ ,  $b_1 = -4.3568$ ,  $b_2 = 9.8927$ ,

$$P_8^{(n)} = s^{8n-3d} \left( \frac{24}{u_n} \right)^2 y_0 (1 + y_1 h_n + y_2 h_n^2), \quad (2.16)$$

Тут  $y_0 = 0.5006$ ,  $y_1 = -5.8461$ ,  $y_2 = 17.5998$ .

Знайдемо тепер вирази для коефіцієнтів  $g_n$ ,  $f_n$  та  $k_n$ . Згідно до (2.5) маємо

$$g_n = g_0 s^{-d} (1 + g_1 h_n + g_2 h_n^2), \quad (2.17)$$

де  $g_0 = 0.1353$ ,  $g_1 = -0.8414$ ,  $g_2 = 0.2582$ ,

$$f_n = f_0 s^{-2d} (1 + f_1 h_n + f_2 h_n^2), \quad (2.18)$$

тут  $f_0 = 0.4154 \cdot 10^{-1}$ ,  $f_1 = -1.4051$ ,  $f_2 = 0.7848$ ,

$$k_n = k_0 s^{-3d} (1 + k_1 h_n + k_2 h_n^2), \quad (2.19)$$

де  $k_0 = 0.1522 \cdot 10^{-1}$ ,  $k_1 = -1.9105$ ,  $k_2 = 1.5308$ .

Як легко бачити, величини  $g_0$ ,  $f_0$  та  $k_0$  є різними за порядком величини. Покладаючи  $h_n = 0$ , одержуємо ланцюжок нерівностей

$$0 \leq g_n^3 \leq g_n f_n \leq k_n \ll g_n^2 \leq f_n \ll g_n \ll 1. \quad (2.20)$$

Дана обставина дозволяє отримати вираз для величини  $Y_{2l}^{(n)}$  із (2.4).

$$Y_{2l}^{(n)} = \left( \frac{2}{(2\pi)^2 P_2^{(n)}} \right)^{l+\frac{1}{2}} \left[ \Gamma \left( \frac{2l+1}{2} \right) - g_n \Gamma \left( \frac{2l+5}{2} \right) + \frac{1}{2} g_n^2 \Gamma \left( \frac{2l+9}{2} \right) - \frac{1}{6} g_n^3 \Gamma \left( \frac{2l+13}{2} \right) - f_n \Gamma \left( \frac{2l+7}{2} \right) - k_n \Gamma \left( \frac{2l+9}{2} \right) + g_n f_n \Gamma \left( \frac{2l+11}{2} \right) \right]. \quad (2.21)$$

Використовуючи співвідношення (2.21) із (2.3) знаходимо

$$T_2^{(n)} = \left( (2\pi)^1 P_2^{(n)} \right)^{-1} \left[ 1 - 3g_n + 24g_n^2 - \frac{45}{4} f_n - 297g_n^3 + \frac{1125}{4} g_n f_n - \frac{105}{2} k_n \right],$$

$$T_4^{(n)} = 3 \left( (2\pi)^1 P_2^{(n)} \right)^{-2} \left[ 1 - 8g_n + 99g_n^2 - \frac{75}{4} f_n - 1632g_n^3 + 1335g_n f_n - 210k_n \right]. \quad (2.22)$$

Тепер можна приступити до знаходження явного виду рекурентних співвідношень (2.2). Для першого з рівнянь (2.2) маємо

$$r_{n+1} = s^2 \left[ -q + u_n^{\frac{1}{2}} \mu_0 (1 + \bar{\mu}_1 h_n + 0(h_n^2)) \right] \quad (2.23)$$

де

$$\mu_0 = \tilde{\mu}_{01} / (e_0 \sqrt{24}), \quad \bar{\mu}_1 = \tilde{\mu}_{02} / \tilde{\mu}_{01} - e_1. \quad (2.24)$$

Коефіцієнти  $\tilde{\mu}_{0l}$  представляються в виді рядів за степенями параметра  $s^{-d}$ .

$$\begin{aligned} \tilde{\mu}_{01} &= 1 + \mu_{01} s^{-d} + \mu_{02} s^{-2d} + \mu_{03} s^{-3d} \\ \tilde{\mu}_{02} &= \mu_{11} s^{-d} + \mu_{12} s^{-2d} + \mu_{13} s^{-3d} \end{aligned} \quad (2.25)$$

Коефіцієнти розкладів (2.25) є постійними величинами

$$\begin{aligned} \mu_{01} &= -0.4058; & \mu_{02} &= -0.0283; & \mu_{03} &= 0.0461 \\ \mu_{11} &= 0.3414; & \mu_{12} &= -0.0822; & \mu_{13} &= -0.1681 \end{aligned} \quad (2.26)$$

В термінах постійних  $g_l$ ,  $f_l$ ,  $k_l$  маємо

$$\begin{aligned} \mu_{01} &= -3g_0, & \mu_{02} &= 24g_0^2 - \frac{45}{4} f_0, \\ \mu_{03} &= -297g_0^3 + \frac{1125}{4} g_0 f_0 - \frac{105}{2} k_0; \\ \mu_{11} &= -3g_0 g_1, & \mu_{12} &= 48g_0^2 g_1 - \frac{45}{4} f_0 f_1 \\ \mu_{13} &= -891g_0^3 g_1 + \frac{1125}{4} g_0 f_0 (g_1 + f_1) - \frac{105}{2} k_0 k_1 \end{aligned} \quad (2.27)$$

Для другого рівняння (2.2) знаходимо

$$u_{n+1} = s^{4-d} u_n [\omega_0 + \omega_1 h_n + \omega_2 h_n^2], \quad (2.28)$$

де введені позначення

$$\begin{aligned}\omega_0 &= \frac{\tilde{\omega}_{00}}{8e_0^2}, & \omega_1 &= \frac{\tilde{\omega}_{10}}{8e_0^2} - e_1 \frac{\tilde{\omega}_{00}}{4e_0^2}, \\ \omega_2 &= \frac{\tilde{\omega}_{20}}{8e_0^2} - e_1 \frac{\tilde{\omega}_{10}}{4e_0^2} + \left(\frac{3}{2}e_1^2 - 2e_2\right) \frac{\tilde{\omega}_{00}}{8e_0^2}.\end{aligned}\quad (2.29)$$

Для величин  $\tilde{\omega}_{10}$  маємо наступні вирази

$$\begin{aligned}\tilde{\omega}_{00} &= \omega_{00} + \omega_{01}s^{-d} + \omega_{02}s^{-2d}, \\ \tilde{\omega}_{10} &= \omega_{10} + \omega_{11}s^{-d} + \omega_{12}s^{-2d}, \\ \tilde{\omega}_{20} &= \omega_{20} + \omega_{21}s^{-d} + \omega_{22}s^{-2d},\end{aligned}\quad (2.30)$$

де коефіцієнти  $\omega_{2m}$  мають вигляд

$$\begin{aligned}\omega_{00} &= 2g_0, & \omega_{01} &= 15f_0 - 42g_0^2, \\ \omega_{02} &= 894g_0^3 - 705g_0f_0 + 105k_0; \\ \omega_{10} &= 2g_0g_1, & \omega_{11} &= 15f_0f_1 - 84g_0^2g_1, \\ \omega_{12} &= 894 \cdot 3g_0^3g_1 - 705f_0g_0(f_1 + g_1) + 105k_0k_1, \\ \omega_{20} &= 2g_0g_2, & \omega_{21} &= 15f_0f_2 - 42g_0^2(g_1^2 + 2g_2), \\ \omega_{22} &= 894 \cdot 3g_0^3(g_1^2 + g_2) - \\ & 705f_0g_0(g_2 + g_1f_1 + f_2) + 105k_0k_2.\end{aligned}\quad (2.31)$$

Вони приймають наступні числові значення

$$\begin{aligned}\omega_{00} &= 0.2705, & \omega_{01} &= -0.1453, & \omega_{02} &= -0.1506 \\ \omega_{10} &= -0.2276, & \omega_{11} &= 0.4175, & \omega_{12} &= 0.2610 \\ \omega_{20} &= 0.0699, & \omega_{21} &= -0.4518, & \omega_{22} &= 0.0444.\end{aligned}\quad (2.32)$$

Приймаючи до уваги (2.23) та (2.28), одержуємо явний вид РС (2.2) в лінійному по  $h_n$  порядку

$$\begin{aligned}r_{n+1} &= s^2 [-q + \mu_0\sqrt{u_n} + \mu_1(r_n + q)] \\ u_{n+1} &= s^{4-d} [\omega_0 u_n + \omega_1(r_n + q)\sqrt{u_n}]\end{aligned}\quad (2.33)$$

Тут  $\mu_1 = \mu_0\bar{\mu}_1$ . Отримані РС характеризують еволюцію величин  $r_n$  та  $u_n$ , як функцій номера шару  $n$ . Приймаючи до уваги (2.1),

дослідимо поведінку коефіцієнтів  $d_n(0)$  та  $a_4^{(n)}$ , як функцій номера  $n$ .

Знайдемо фіксовану точку РС (2.33) із умов

$$r_{n+1} = r_n = r^* \quad u_{n+1} = u_n = u^* \quad (2.34)$$

В результаті, із другого рівняння (2.33) отримуємо

$$s^{-1} = \omega_0 + \omega_1 h^* + 0(h^*)^2 \quad (2.35)$$

де  $h^*$  відповідає значенню  $h_n$  у фіксованій точці

$$h^* = \frac{r^* + q}{\sqrt{u^*}} \quad (2.36)$$

Величина  $h^*$  залежить від значення параметра  $s$ . Параметр  $s$  при розрахунках може бути довільним ( $s \geq 1$ ). Виберемо в якості  $s$  таке значення  $s = s^*$ , при якому виконується умова

$$h^*(s^*) = 0 \quad (2.37)$$

Тоді рівність (2.35) переписеться як рівняння для цього параметра

$$(s^*)^{-1} = \omega_0(s^*) \quad (2.38)$$

Коефіцієнт  $\omega_0$ , згідно до (2.29), (2.30), є відомою функцією  $s^*$ . В результаті, із (2.38) отримуємо явний вигляд рівняння для  $s^*$

$$(s^*)^{-1} = (8e_0^2)^{-1} [\omega_{00} + \omega_{01}(s^*)^{-d} + \omega_{02}(s^*)^{-2d}] \quad (2.39)$$

Оскільки  $(s^*)^{-d}$  є малою величиною, то в нульовому наближенні маємо

$$s_0^* = \frac{8e_0^2}{\omega_{00}} \quad (2.40)$$

Приймаючи до уваги (2.12), (2.32), знаходимо

$$s_0^* = 3.38 \pm 0.05 \quad (2.41)$$

У більш високому наближенні отримуємо

$$s^* = 3.4252 \quad (2.42)$$

При цьому похибка обчислень є порядку  $(s^*)^{-3d} \sim 1.5 \cdot 10^{-5}$ .

Надалі, в якості параметра  $s$  будемо використовувати значення  $s^*$  із (2.42). При  $s = s^*$  суттєво спрощується процедура обчислення статистичної суми. Має місце два позитивних фактори. Перший з них полягає в тому, що в околі фіксованої точки величина  $h_n$  є малою, як це і припускалося при отриманні наближених РС (2.33). Другий фактор пов'язаний з виникненням малого параметра  $(s^*)^{-d} \sim 2.5 \cdot 10^{-2}$ . Це суттєво спрощує процедуру розрахунку інтегралів за змінними  $\nu_{\vec{k}}$ , оскільки ланцюжок нерівностей (2.20) має місце як в самій фіксованій точці, так і її околі.

Знайдемо координати фіксованої точки РС (2.33). Виділимо температурну залежність величин  $r^*$ ,  $u^*$  із (2.34).

$$r^* = -f_0 \beta \Phi(0), \quad u^* = \varphi_0 (\beta \Phi(0))^2. \quad (2.43)$$

Для  $f_0$  та  $\varphi_0$ , які надалі будемо називати приведеними координатами фіксованої точки, маємо <sup>2</sup>

$$f_0 = \bar{q} = \frac{1 + (s^*)^{-2}}{2 \cdot (\alpha')^2}, \quad (\varphi_0)^{1/2} = \bar{q} \left( \frac{1 - (s^*)^{-2}}{\mu_0} \right) \quad (2.44)$$

Для скорочення записів надалі введемо позначення  $s^* = s$ .

Обчислимо значення коефіцієнтів  $\mu_l$  та  $\omega_l$  РС (2.33). Використовуючи знайдене нами значення параметра поділу фазового простору КЗ на шари (2.42), маємо

$$\begin{aligned} \mu_0 &= 0.5978, & \mu_1 &= 0.5933 \\ \omega_0 &= 0.2920, & \omega_1 &= 0.3370 \end{aligned} \quad (2.45)$$

Відповідно до цього знаходимо

$$f_0 = 0.5000, \quad \varphi_0 = 0.5853 \quad (2.46)$$

Виконаємо лінеаризацію РС (2.33) в околі фіксованої точки

$$\begin{pmatrix} r_{n+1} - r^* \\ u_{n+1} - u^* \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} r_n - r^* \\ u_n - u^* \end{pmatrix} \quad (2.47)$$

<sup>2</sup>Параметр  $\alpha' \geq 1$ . У випадку, коли  $\alpha' = 1.041746$ , знаходимо, що  $\bar{q} = \frac{1}{2}$ . Надалі будемо проводити числові значення саме для цього значення  $\alpha'$ . В Додатку 1 описана залежність результатів розрахунку від вибору  $\alpha'$ .

Для матричних елементів  $R_{ij}$  маємо

$$\begin{aligned} R_{11} &= s^2 \mu_1, & R_{22} &= s \omega_0 \\ R_{12} &= R_{12}^{(0)} (u^*)^{-1/2}, & R_{12}^{(0)} &= \frac{1}{2} s^2 \mu_0 \\ R_{21} &= R_{21}^{(0)} (u^*)^{1/2}, & R_{21}^{(0)} &= s \omega_1. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Слід зауважити, що якщо в РС (2.33) приймати до уваги доданки пропорційні до  $h_n^2$  (чи вищим степеням  $h_n$ ), то відповідні вклади до матричних елементів  $R_{ij}$  будуть пропорційні до  $h^*$ , а отже, рівні нулю. Тому, обмеження лінійним наближенням по  $h_n$  при записі (2.33) ніяк не впливає точність обчислення  $R_{ij}$ . Власні значення  $E_l$  матриці перетворення (2.47) знаходимо з формули

$$E_{1,2} = \frac{1}{2} \left\{ R_{11} + R_{22} \pm [(R_{11} - R_{22})^2 + 4R_{12}R_{21}]^{1/2} \right\} \quad (2.49)$$

Підкреслимо, що величини  $E_1, E_2$  є універсальними і не залежать від координат фіксованої точки. Справді, неуніверсальні матричні елементи  $R_{12}$  та  $R_{21}$  входять до (2.49) в виді добутку  $R_{12}R_{21}$ , який не залежить від координат фіксованої точки. Приймаючи до уваги (2.45), (2.48) маємо

$$E_1 = 7.5764, \quad E_2 = 0.3845 \quad (2.50)$$

Фіксована точка має сідловий тип ( $E_1 > 1, E_2 < 1$ ). Знайдемо власні вектори матриці  $R$ . Величини  $r_n$  та  $u_n$  розкладемо по власних векторах. В результаті  $n$ -кратної ітерації знаходимо

$$\begin{aligned} r_n &= r^* + c_1 E_1^n + c_2 R E_2^n \\ u_n &= u^* + c_1 R_1 E_1^n + c_2 E_2^n \end{aligned} \quad (2.51)$$

де

$$\begin{aligned} R &= R^{(0)} (u^*)^{-1/2}, & R^{(0)} &= R_{12}^{(0)} (E_2 - R_{11})^{-1} \\ R_1 &= R_1^{(0)} (u^*)^{1/2}, & R_1^{(0)} &= (E_1 - R_{11}) / R_{12}^{(0)} \end{aligned} \quad (2.52)$$

(або  $R^{(0)} = -0.5333, R_1^{(0)} = 0.1755$ ). Коефіцієнти  $c_l$  знаходимо з початкових умов при  $n = 0$

$$r_0 = a'_2 - \beta\Phi(0), \quad u_0 = a'_4$$

В результаті маємо

$$\begin{aligned} c_1 &= D^{-1} [a'_2 - \beta\Phi(0) - r^* - R(a'_4 - u^*)] \\ c_2 &= D^{-1} [a'_4 - u^* - R_1(a'_2 - \beta\Phi(0) - r^*)] \end{aligned} \quad (2.53)$$

де

$$D = (E_1 - E_2)/(R_{11} - E_2),$$

(або  $D = 1.0936$ ).

Як легко бачити з (2.51) з ростом  $n$  величини  $r_n$  та  $u_n$  прямують до своїх фіксованих значень ( $r^*$  та  $u^*$  відповідно) лише у випадку, коли виконується умова

$$c_1 = 0 \quad (2.54)$$

Оскільки  $c_1$  залежить від температури, то важливо дослідити, якій саме температурі відповідає умова (2.54). Як буде показано в наступному параграфі, існує лише одна додатня температура  $T = T_c$ , при якій має місце (2.54). Саме ця температура і буде прийнята в подальших розрахунках за температуру фазового переходу.

### 3. Розрахунок температури фазового переходу.

*Записане рівняння для температури фазового переходу і знайдені його розв'язки. Досліджена залежність температури ФП від параметрів потенціалу взаємодії початкової моделі та відношення радіуса ефективної дії потенціалу до постійної ґратки.*

На даний час існує декілька підходів до обчислення температури фазового переходу. Найбільш точні результати дають підходи, що ґрунтуються на числових методах типу Монте-Карло чи подібні їм. Ці результати стосуються моделей із наперед заданими типами взаємодії (наприклад, взаємодії найближчих сусідів). Зміна параметрів взаємодії потребує нового розрахунку. Серед аналітичних методів є мало робіт, які б дозволяли вести розрахунок температури фазового переходу на мікроскопічному рівні. Незважаючи на меншу точність одержання значень температури фазового переходу, вони дозволяють дослідити її залежність від параметрів потенціалу

взаємодії. Запропонований в даній роботі підхід до опису фазового переходу дозволяє дати визначення  $T_c$  з точки зору дослідження особливостей поведінки системи безпосередньо в критичній області. В його основі знаходиться твердження про наявність в системі поблизу ТФП двох основних флуктуаційних процесів. Перший з них називається критичним режимом (КР) флуктуацій; другий - граничний гаусовий режим (ГГР). Вперше такі поняття були введені в [1, 4]. Особливості поведінки системи в цих режимах досліджені в роботах [6,15]. Нижче ми обговоримо природу основних флуктуаційних процесів для моделі (1.1). Буде показано, що температура, при якій виконується умова (2.54) і є температурою фазового переходу.

Використаємо для коефіцієнта  $c_1(T)$  вираз, приведений в (2.53). В результаті одержуємо рівняння

$$\begin{aligned} a'_2(T_c) - \beta_c\Phi(0) - r^*(T_c) - \\ - R(T_c)(a'_4(T_c) - u^*(T_c)) = 0. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Величини, які входять до складу (3.1) обчислюються при температурі  $T = T_c$ . Зокрема відомо, що

$$r^*(T_c) = -f_0\beta_c\Phi(0), \quad u^*(T_c) = \varphi_0(\beta_c\Phi(0))^2 \quad (3.2)$$

Для величини  $R(T_c)$  знаходимо

$$R(T_c) = R^{(0)}(\varphi_0)^{-1/2}(\beta_c\Phi(0))^{-1} \quad (3.3)$$

Коефіцієнти  $a'_{2n}(T_c)$  мають вигляд (див.(14))

$$\begin{aligned} a'_0(T_c) &= -\frac{1}{2}\ln(2\pi) + \frac{1}{4}\ln 3 - \\ &\frac{1}{4}\ln\tilde{\mathcal{M}}_4(T_c) + \frac{\tilde{y}_c^2}{4} + \ln U(0, \tilde{y}_c), \\ a'_2(T_c) &= \left(\frac{3}{\tilde{\mathcal{M}}_4(T_c)}\right) U(\tilde{y}_c), \\ a'_4(T_c) &= \frac{3}{\tilde{\mathcal{M}}_4(T_c)}\varphi(\tilde{y}_c), \end{aligned} \quad (3.4)$$

де

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{M}}_0(T_c) &= \frac{1}{2}\alpha_0, \quad \tilde{\mathcal{M}}_2(T_c) = 1 - \alpha_0, \\ \tilde{\mathcal{M}}_4(T_c) &= 2s_0^{-3}(1 - 4\alpha_0) \end{aligned} \quad (3.5)$$

Для величини  $\alpha_0$  маємо вираз

$$\alpha_0 = \beta_c \Phi(0) \bar{\Phi}(1 - s_0^{-3}), \quad (3.6)$$

причому,  $\bar{\Phi}$  є малою величиною.

$$\tilde{y}_c = y_0 = s_0^{3/2} \sqrt{\frac{3}{2}} (1 - \alpha_0)(1 - 4\alpha_0)^{-1/2}$$

В результаті, коефіцієнти  $a'_n(T_c)$  мають вигляд

$$\begin{aligned} a'_0(T_c) &= a_{00} = -\frac{1}{2} \ln 2\pi + \frac{1}{4} \ln(3s_0^3/2) - \\ &\quad - \frac{1}{4} \ln(1 - 4\alpha_0) + \frac{y_0^2}{4} + \ln U(0, y_0) \\ a'_2(T_c) &= a_{20} = y_0 U(y_0)/(1 - \alpha_0) \\ a'_4(T_c) &= a_{40} = y_0^2 \varphi(y_0)/(1 - \alpha_0)^2 \end{aligned} \quad (3.7)$$

В границі  $b/c \rightarrow \infty$ , яка відповідає моделі з "далекодійним потенціалом" взаємодії, знаходимо

$$\begin{aligned} \lim a'_0(T_c) &= -\frac{1}{2} \ln 2\pi + \alpha_0/2 \\ \lim a'_2(T_c) &= (1 - \alpha_0)^{-1} \\ \lim a'_4(T_c) &\approx s_0^{-3} \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (3.8)$$

Щоб одержати рівняння для температури фазового переходу підставляємо вирази (3.2), (3.3) та (3.7) в рівність (3.1). В результаті приходимо до рівняння

$$A'_c(\beta_c \Phi(0))^2 + B'_c \beta_c \Phi(0) + D'_c = 0, \quad (3.9)$$

для коефіцієнтів якого знаходимо

$$\begin{aligned} A'_c &= 1 - f_0 - R^{(0)} \sqrt{\varphi_0} \\ B'_c &= -a_{20} \\ D'_c &= a_{40} R^{(0)} \varphi_0^{-1/2} \end{aligned} \quad (3.10)$$

Рівняння (3.9) записане в формі квадратного рівняння відносно  $\beta_c \Phi(0)$ . Однак, його коефіцієнти  $B'_c$  та  $D'_c$  є в свою чергу функціями температури. Вони виражаються через величину  $\alpha_0$ , яка згідно

до (3.6) залежить від  $\beta_c \Phi(0)$ . Перш ніж навести його розв'язок<sup>3</sup>, повернемося до співвідношення (11) і визначимо невідому величину  $\Phi_\infty$ . Як було відзначено вище, ця величина повинна забезпечувати правильну асимптотичну поведінку моделі в границі  $b/c \rightarrow \infty$ . Це стосується визначення точки відліку для температури фазового переходу. В цій границі  $\bar{\Phi} = \Phi_\infty$  (оскільки  $\langle \Phi \rangle$  обертається в нуль при  $b/c \rightarrow \infty$ ) і повинно виконуватися співвідношення

$$\lim \beta_c \Phi(0) = 1 \quad (3.11)$$

Приймаючи до уваги (3.11), знаходимо, що в границі  $b/c \rightarrow \infty$  виконується рівність  $\alpha_0 = \Phi_\infty$ . Тоді рівняння (3.9) з врахуванням (3.8) приймає вигляд

$$A'_c = \frac{1}{1 - \Phi_\infty}, \quad (3.12)$$

що дозволяє знайти величину

$$\Phi_\infty = 1 - \frac{1}{1 - f_0 - R^{(0)} \sqrt{\varphi_0}} \quad (3.13)$$

Підставляючи в (3.13) координати фіксованої точки отримуємо числове значення  $\Phi_\infty = -0.10134$ .

Загальний розв'язок рівняння (3.9) для температури фазового переходу знаходиться в результаті самоузгодженої процедури з врахуванням залежності від  $\beta_c \Phi(0)$  в коефіцієнтах  $a'_c$  та коефіцієнта  $\alpha_0$  із (3.6). Результати розрахунків подані на рис.1.

Для порівняння одержаних нами результатів з роботами інших авторів, зокремаданими числових методів [21], розглянемо випадок  $b = b_I$ . Це значення параметра  $b$  відповідає такій вихідній взаємодії між частинками, яка близька до взаємодії типу найближчих сусідів. Для нього знаходимо

$$\beta_c \Phi(0) = 1.221; \quad (3.14)$$

або в одиницях  $J$

$$\beta_c = 0.203J \quad (3.15)$$

<sup>3</sup>Слід зауважити, що коли  $A'_c = 1$ , то це означає, що  $\Phi_\infty = 0$ . Задовільнити рівність  $A'_c = 1$  можна за рахунок вибору величини  $\alpha'$ . Згідно до (3.10) маємо  $A'_c = 1 - f_0 [1 + (1 - s^{-2})R^{(0)}/\mu_0] \frac{1}{\alpha'^2}$ . Тому із ростом  $\alpha'$  знаходимо, що  $A'_c \rightarrow 1$ . З іншої сторони величина  $\alpha'$  визначає собою область параболічної апроксимації потенціалу (5). Надмірне збільшення  $\alpha'$  веде до нефізичного спрощення моделі. Тому очевидно, що  $A'_c < 1$ , а отже  $\Phi_\infty < 0$ .

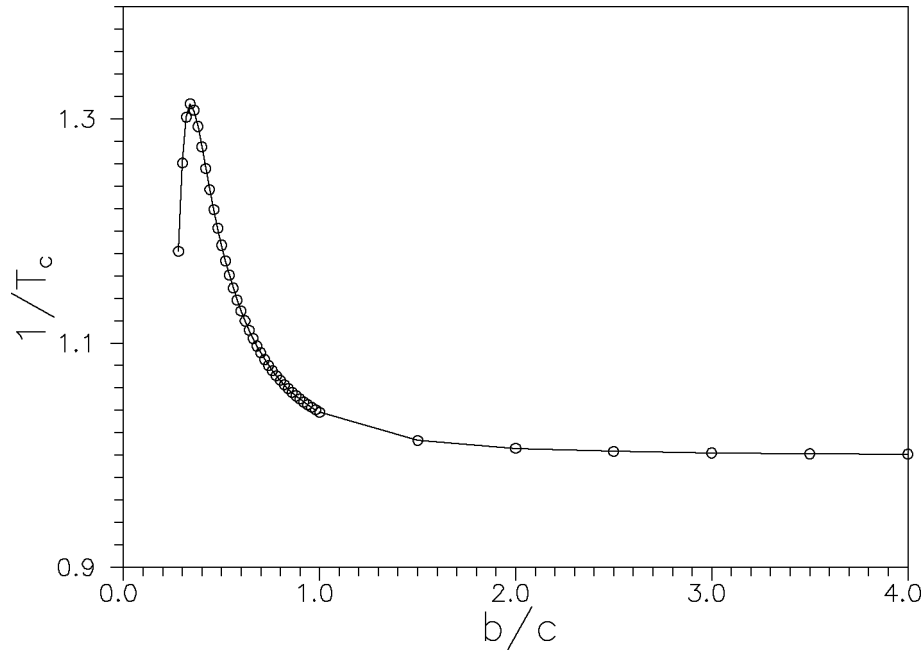


Рис. 1. Температура фазового переходу  $3d$  моделі Ізінга в наближенні моделі  $\rho^4$  (з експонентно-спадним потенціалом попарної взаємодії).

Отримане вище значення для  $\beta_c$  узгоджується з даними числових розрахунків [22,23]. Виразимо температуру фазового переходу  $\beta_c$  в одиницях виміру константи  $A$  (див. ф-лу (2)). Маємо

$$\beta_c A = \beta_c \Phi(0) \left[ 8\pi \left( \frac{b}{c} \right)^3 \right]^{-1} \quad (3.16)$$

Крива залежності величини  $\beta_c A$  від параметра  $b/c$  приведена на рис.2.

Необхідно зауважити, що отримана нами крива залежності температури фазового переходу від радіуса дії потенціалу підтверджує результати роботи [23], де подібна залежність досліджувалася як функція числа найближчих сусідів, на які розповсюджується взаємодія модельної системи.

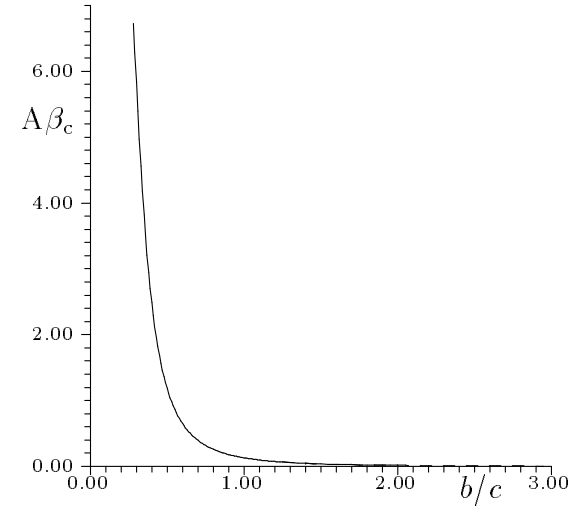


Рис. 2. Критична температура, як функція мікроскопічних параметрів задачі ( $\Phi(r_{ij}) = A \exp(-r_{ij}/b)$ ).

#### 4. Про величину критичної області та температурну поведінку коефіцієнтів $a'_n$ в цій області.

Запропонований критерій оцінки величини критичної області. Він ґрунтується на введеному нами понятті т.з. критичного режиму (КР), визначеному в теоремах 1,2. Наявність в системі КР свідчить, що система знаходиться в критичній області температур, а його відсутність – про позакритичний характер поведінки системи. Знайдена температурна залежність точки виходу системи з КР.

В попередньому параграфі була обчислена температура фазового переходу. Вона характеризує фазовий перехід в системі ізінгівських спінів для якої виконані наступні наближення. Перше з них відповідає наближенню моделі  $\rho^4$  і полягає в використанні четвірної базисної густини міри при розрахунку статистичної суми. Воно не є принциповим, оскільки, подібні розрахунки можуть бути приведені (з використанням приведеної вище схеми розрахунку) для вищих густин міри (модель  $\rho^6$  і т.д.). Друге наближення пов'язане з апроксимацією потенціалу взаємодії. Вихідна взаємодія частинок, що знаходяться в вузлах простої кубічної ґратки описуєть-



ся експонентно-спадною функцією віддалі  $\Phi(r_{ij})$  (див.(2)) з фур'є-образом  $\tilde{\Phi}(k)$ , приведеним в (4). При проведенні розрахунків  $\tilde{\Phi}(k)$  змінюється його параболічною апроксимацією в області малих значень хвильового вектора  $\vec{k}$ , та постійною величиною (див.(9)) при значеннях  $\vec{k}$  близьких до границі зони Бріллюена (ф-ла(5)). Друге наближення є добрим при відносно великих значеннях параметра  $b/c$  ( $b > 0.35c$ ), і потребує уточнення для малих значень цього параметра ( $b_{min} < b < 0.35c, b_{min} = c/\pi\alpha'\sqrt{2}$ ).

Однак, незважаючи на використані вище наближення запропонована схема опису критичної поведінки дозволяє в рамках єдиного підходу визначити як значення температури фазового переходу (і її залежності від параметрів вихідної взаємодії), так і знайти явні вирази для термодинамічних характеристик системи поблизу точки фазового переходу.

Розглянемо область температур близьких до  $T_c$ . Введемо величину

$$\tau = \frac{T - T_c}{T_c}, \quad (4.1)$$

яка описує відхилення температури від температури фазового переходу  $T_c$ . Тоді вирази для величин  $\tilde{\mathcal{M}}_{2n}$  із (16) можна представити у вигляді

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{M}}_0 &= \frac{1}{2}\alpha_0 - \frac{1}{2}\alpha_0 \frac{\tau}{1+\tau}, \\ \tilde{\mathcal{M}}_2 &= (1-\alpha_0) \left( 1 - \frac{\alpha_0}{1-\alpha_0} \frac{\tau}{1+\tau} \right), \\ \tilde{\mathcal{M}}_4 &= 2s_0^{-3}(1-4\alpha_0) \left( 1 + \frac{4\alpha_0}{1-4\alpha_0} \frac{\tau}{1+\tau} \right), \end{aligned} \quad (4.2)$$

де величина  $\alpha_0$  означена в (3.6). При отриманні цих виразів ми скористалися із тотожних перетворень

$$\beta = \frac{\beta_c}{1+\tau}; \quad \frac{1}{1+\tau} = 1 - \frac{\tau}{1+\tau}.$$

Використаємо (4.2) для знаходження температурної залежності коефіцієнтів  $a'_{2n}$  із (14). Запишемо величину  $\tilde{y}$  із (15) у вигляді

$$\tilde{y} = y_0 \left( 1 + y_1 \frac{\tau}{1+\tau} \right), \quad (4.3)$$

де коефіцієнти

$$y_0 = \sqrt{\frac{3}{2}} s_0^{3/2} \frac{1-\alpha_0}{\sqrt{1-4\alpha_0}}, \quad y_1 = \alpha_0 \left( \frac{1}{1-\alpha_0} - \frac{2}{1-4\alpha_0} \right) \quad (4.4)$$

не залежать від температури і є функціями мікроскопічних параметрів гамільтоніану задачі.

Запишемо температурну залежність коефіцієнтів  $a'_{2n}$  в критичній області. Із (14) знаходимо

$$a'_0 = a_{00} + a_{01} \frac{\tau}{1+\tau} \quad (4.5)$$

Вираз для  $a_{00}$  приведений в (3.7), а для  $a_{01}$  маємо

$$a_{01} = -\frac{\alpha_0}{1-4\alpha_0} - \frac{1}{2} y_0 y_1 U(y_0) \quad (4.6)$$

Зокрема, при  $b = b_I$ , маємо  $a_{00} = -0.8929$ ,  $a_{01} = -0.1193$ .

Для  $a'_2$  та  $a'_4$  маємо вирази, подібні до (4.5)

$$a'_i = a_{i0} + a_{i1} \frac{\tau}{1+\tau}, \quad (4.7)$$

де значення  $a_{20}, a_{40}$  приведені в (3.7), а для решти величин знаходимо

$$\begin{aligned} a_{21} &= a_{20} \left( -\frac{2\alpha_0}{1-4\alpha_0} + y_0 y_1 U'(y_0)/U(y_0) \right), \\ a_{41} &= a_{40} \left( -\frac{4\alpha_0}{1-4\alpha_0} + y_0 y_1 \varphi'(y_0)/\varphi(y_1) \right) \end{aligned} \quad (4.8)$$

(або при  $b = b_I, a_{20} = 0.9750, a_{21} = -0.2800; a_{40} = 0.2336, a_{41} = -0.0145$ ). Тут  $U'(y_0)$  похідна функції  $U(y_0) = U(1, y_0)/U(0, y_0)$ , а  $\varphi'(y_0)$ - похідна функції  $\varphi(y_0)$ . Коефіцієнти  $a'_i$  можуть бути представлені у вигляді розкладу за степенями  $\tau$

$$a'_i = a_{i0} + a_{i1}\tau + a_{i2}\tau^2, \quad (4.9)$$

де

$$a_{i2} = -a_{i1}. \quad (4.10)$$

Записані вище представлення для коефіцієнтів  $a'_i$  дозволяють знайти температурну залежність величин  $c_l$ , які описують еволюцію

величин  $r_n$  та  $u_n$  із (2.51). Скористаємося виразами для  $c_l$ , які приведені в (2.53). Запишемо  $c_1$  у вигляді

$$c_1 = \tau \cdot \tilde{c}_{11} \quad (4.11)$$

де

$$\tilde{c}_{11} = c_{10} + \frac{c_{11}}{1 + \tau} \quad (4.12)$$

Тут введені наступні позначення

$$\begin{aligned} c_{10} &= -R^{(0)}(a_{41} + a_{40})(\beta_c \Phi(0) \sqrt{\varphi_0} D)^{-1}, \\ c_{11} &= \left[ a_{21} + \beta_c \Phi(0)(1 - f_0 - R^{(0)} \sqrt{\varphi_0}) \right] / D. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Для коефіцієнта  $c_2$  знаходимо

$$c_2 = c_{20} + \frac{c_{21}}{1 + \tau} + \frac{c_{22}}{(1 + \tau)^2} \quad (4.14)$$

де

$$\begin{aligned} c_{20} &= (a_{40} + a_{41}) / D \\ c_{21} &= (-a_{41} - R_1^{(0)} \sqrt{\varphi_0} \beta_c \Phi(0)(a_{20} + a_{21})) / D \\ c_{22} &= \left[ -\varphi_0 (\beta_c \Phi(0))^2 + R_1^{(0)} \sqrt{\varphi_0} \beta_c \Phi(0) a_{21} + \right. \\ &\quad \left. + R_1^{(0)} \sqrt{\varphi_0} (1 - f_0) (\beta_c \Phi(0))^2 \right] / D \end{aligned} \quad (4.15)$$

У випадку  $b = b_I$  знаходимо:  $c_{10} = 0.1144$ ,  $c_{11} = 0.7575$ ;  $c_{20} = 0.2003$ ,  $c_{21} = -0.0909$ ,  $c_{22} = -0.7480$ . При  $\tau = 0$  маємо  $\tilde{c}_{11} = 0.8719$ ,  $c_2 = -0.8386$ . Особливістю температурної поведінки коефіцієнта  $c_1$  є його пропорційність до  $\tau$ . Коефіцієнт  $c_2$  приймає від'ємні значення при всіх значеннях  $\tau$ , включаючи  $\tau = 0$ , для всіх значень мікроскопічних параметрів.

Дослідимо поведінку величин  $r_n$ ,  $u_n$  з ростом  $n$  в критичній області температур. Зауважимо, що загальні рекурентні співвідношення (2.2) справедливі для будь-яких температур і при довільному значенні індекса  $n$ . В якості часткового розв'язку РС (2.2) мають фіксовану точку (2.34). Її координати визначаються співвідношеннями (2.43), (2.44). Поблизу фіксованої точки для величин  $r_n$  та  $u_n$  отримані розв'язки (2.51). Визначимо для якого інтервалу індексів  $n$  вони мають місце і як залежить величина цього інтервалу від  $\tau$ .

При  $T = T_c$  для величин  $r_n$  та  $u_n$  маємо

$$\begin{aligned} r_n &= r^* + c_2 R E_2^n \\ u_n &= u^* + c_2 E_2^n \end{aligned} \quad (4.16)$$

З ростом  $n$  величини  $r_n$  та  $u_n$  будуть прямувати до значень  $r^*$  та  $u^*$  відповідно. Сформулюємо наступну теорему.

**Теорема 1.** При  $T = T_c$  для будь-якого, наперед загаданого числа  $\epsilon > 0$ , знайдеться такий номер  $n_\epsilon$ , що при  $n > n_\epsilon$  будуть виконуватися нерівності

$$\left| \frac{r_n(T_c) - r^*}{r^*} \right| \leq \epsilon, \left| \frac{u_n(T_c) - u^*}{u^*} \right| \leq \epsilon \quad (4.17)$$

При цьому, значення  $n_\epsilon$  характеризує вхід<sup>4</sup> системи в критичний режим (КЗ). Під КР будемо розуміти специфічну залежність коефіцієнтів  $r_n$ ,  $u_n$  від  $n$ , при якому (в області  $n > n_\epsilon$ ) мають місце нерівності (4.17).

Доведення цього твердження очевидне з огляду на (4.16) та умову  $E_2 < 1$ .

У випадку  $\tau > 0$ , розв'язки наближених РС мають вигляд (2.51)

$$\begin{aligned} r_n &= r^* + c_1 E_1^n + c_2 R E_2^n \\ u_n &= u^* + c_1 R_1 E_1^n + c_2 E_2^n \end{aligned} \quad (4.18)$$

Згідно до (4.11) коефіцієнт  $c_1 \sim \tau > 0$ . Тому завжди знайдеться такий номер  $n_\tau$ , що при  $n > n_\tau$  величини  $r_n$  та  $u_n$  будуть суттєво відрізнятися від  $r^*$  та  $u^*$  відповідно.

**Теорема 2.** При  $\tau > 0$  для будь-якого, наперед заданого числа  $\delta > 0$ , знайдеться такий номер  $m_\tau > 0$ , залежний від  $\tau$ , що при  $n > m_\tau$  будуть мати місце нерівності

<sup>4</sup>Встановимо нижню границю області КР, тобто інтервал  $n \in [0, n_\epsilon]$ , що описує вхід системи до КР. У випадку виконання рівності в (4.17), із першого рівняння знаходимо

$$n_\epsilon = \frac{\ln(\epsilon) + \ln N_\epsilon}{\ln E_2},$$

де введено позначення

$$N_\epsilon = \frac{f_0 \sqrt{\varphi_0}}{\tilde{c}_{22} R^{(0)}} \beta_c \Phi(0) \sim 1$$

Знаходимо, що  $n_\epsilon = 1$  при  $\epsilon = E_2$ . Величина  $n_\epsilon$  визначає верхню границю області індексів  $n$ , які характеризують область входу системи в КР.

$$\left| \frac{r_n - r^*}{r^*} \right| > \delta, \left| \frac{u_n - u^*}{u^*} \right| > \delta$$

Значення  $m_\tau$  характеризує вихід з КР (якщо КР, як такий, мав місце згідно до теореми 1, тобто якщо  $m_\tau > n_\epsilon$ ).

З огляду на (4.18) та умову  $E_1 > 1$  доведення очевидне. Величина  $\delta$  не може бути як завгодно великою, оскільки розв'язки (4.18) справедливі лише поблизу фіксованої точки РС (2.33). Для обчислення величини  $m_\tau$  скористаємося з рівності

$$\frac{r_{m_\tau+\delta} - r^*}{r^*} = -\delta \quad (4.19)$$

При  $\delta = 1$  вона є наслідком відомої фізичної умови

$$d_{m_\tau+1}(0) = 0, \quad (4.20)$$

яка була запропонована в [1] для означення точки виходу системи з КР. Як було доведено в [4], з ростом  $n$  величина  $d_n(0)$  не зменшується. Тому умова (4.20) дозволяє стверджувати, що при  $n < m_\tau$  значення коефіцієнта  $d_n(0)$  є від'ємними, а при  $n \geq m_\tau + 1$  маємо, що  $d_n(0) \geq 0$ . Знак коефіцієнта  $d_n(0)$  є принципово важливим при проведенні розрахунків термодинамічних функцій. Він визначає форму базисної густини міри. Оскільки  $d_n(k) = d_n(0) + 2\beta\Phi(0)b^2k^2$ , то при  $d_n(0) > 0$  можна ставити питання про використання гаусової густини міри в якості базисної. При  $d_n(0) < 0$  використання гаусової густини міри при розрахунку статистичної суми моделі є принципово неможливим. В цьому випадку, обчислення термодинамічних характеристик системи повинно здійснюватись на основі негаусових густин міри.

Знайдемо явний вираз для величин  $m_\tau$ . Приймаючи до уваги (4.18), (4.19) отримуємо

$$c_1 E_1^{m_\tau+\delta} = \beta\Phi(0)f_0\delta - c_2 R E_2^{m_\tau+\delta} \quad (4.21)$$

Розв'язки цього нелінійного рівняння поблизу точки фазового переходу будемо шукати використовуючи метод послідовних наближень. Приймемо до уваги, що для температур близьких до критичної  $m_\tau$  велике число, а  $E_2 \approx 0.385$ . В нульовому наближенні можна знехтувати останнім доданком в (4.21). Тоді маємо

$$m_\tau^{(0)} = -\frac{\ln\tau}{\ln E_1} + m_0 - \delta \quad (4.22)$$

де

$$m_0 = \ln \left( \frac{f_0 \beta \Phi(0) \delta}{\tilde{c}_{11}} \right) / \ln E_1 \quad (4.23)$$

Як видно із (4.22), при  $\tau \rightarrow 0$  величина  $m_\tau^{(0)} \rightarrow \infty$  і для всіх значень  $n > n_\epsilon$  загальні РС (2.2) можуть бути замінені наближеними РС (2.33), які мають розв'язки (4.18). Такий висновок справедливий лише для  $n \in [n_\epsilon, m_\tau]$ . Розв'язок рівняння (4.21) в першому наближенні передбачає заміну  $E_2^{m_\tau+\delta}$  на  $E_2^{m_\tau^{(0)}+\delta}$  і має вигляд

$$m_\tau = -\frac{\ln\tau}{\ln E_1} + m_0 + m_\Delta \tau^\Delta - \delta, \quad (4.24)$$

де введені позначення

$$m_\Delta = m_2 / \ln E_1, \quad m_2 = -c_\Delta \Phi_0, \quad \Phi_0 = \frac{R^{(0)}}{f_0 \sqrt{\varphi_0}},$$

$$c_\Delta = c_\nu^\Delta \frac{c_2}{(\beta\Phi(0))^2 \delta}, \quad c_\nu = \frac{\tilde{c}_{11}}{\delta \cdot f_0 \beta \Phi(0)}, \quad (4.25)$$

У випадку  $b = b_I$  маємо:  $m_0 = -0.1615$ ;  $m_\Delta = -0.3343$ ;  $c_\nu = 1.3869$ ,  $c_\Delta = -0.4856$ . Значення цих величин при інших параметрах  $b$  приведені в таблиці 3. Величини  $\nu$  та  $\Delta$  визначаються формулами

$$\nu = \frac{\ln s}{\ln E_1}, \quad \Delta = -\frac{\ln E_2}{\ln E_1} \quad (4.26)$$

У випадку моделі  $\rho^4$  вони приймають значення  $\nu = 0.608$ ,  $\Delta = 0.472$ . Надалі, в якості точки виходу з КР будемо використовувати величину  $m_\tau$  із (4.24). На рис. 3 показана схематична залежність величини  $h_n = (r_n + q)(u_n)^{-1/2}$ , як функції  $n$ . Подібна залежність має місце і для величин  $r_n$  та  $u_n$ .

В області індексів  $n < m_\tau$  для всіх температур  $\tau \ll 1$  в системі неминуче виникає ренормгрупова симетрія. Вона свідчить про зміну температурної поведінки термодинамічних функцій системи, коли температура наближається до  $T_c$ . Відсутність області критичного режиму (див. рис.3) означає, що система буде описуватися гаусовим режимом флуктуацій, який приводить до класичних значень критичних показників. З точки зору теоретичного опису фазового переходу на мікроскопічному рівні критичні показники повністю визначаються участком КР. Перехід класичних критичних показників (область гаусових флуктуацій) до некласичних повністю визначається величиною  $\tau^*$ .

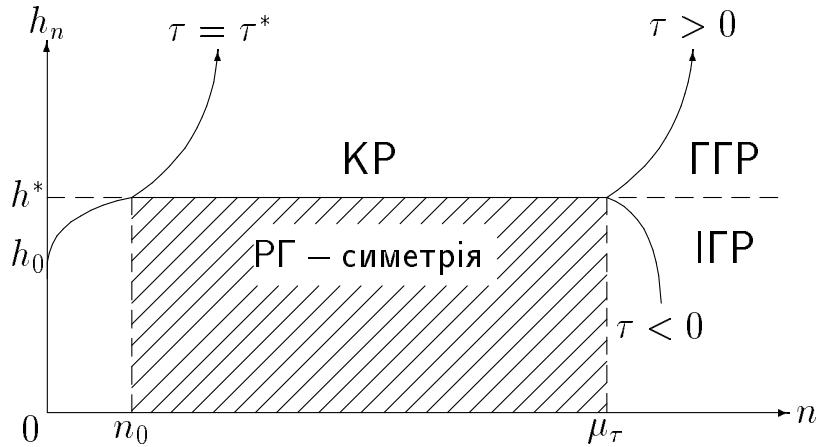


Рис. 3. Залежність змінної  $h_n$  (2.8) від номера блочної структури  $n$  поблизу точки фазового переходу ( $\tau < \tau^*$ ).

Оцінимо порядок величин  $\tau^*$ . Для цього порівнюємо величини, які визначають вхід та вихід з участку КР. Запишемо вираз для величини  $r_n$  при деякому  $n = n_0$ . Згідно до (4.18) маємо

$$r_{n_0} = r^* + c_1 E_1^{n_0} + c_2 R E_2^{n_0} \quad (4.27)$$

Із умови

$$c_1 E_1^{n_0} \approx c_2 R E_2^{n_0} \quad (4.28)$$

знаходимо рівняння

$$\tau^* = A \left( \frac{E_2}{E_1} \right)^{n_0} \quad (4.29)$$

де

$$A = \frac{\tilde{c}_{22} R^{(0)}}{\tilde{c}_{11} \sqrt{\varphi_0} \beta_2 \Phi(0)} \quad (4.30)$$

Рівняння (4.29) дозволяє знайти значення температури  $\tau^*$ , при якому координата точки входу до КР співпадає з координатою точки виходу з нього. Це означає, що для області температур  $\tau > \tau^*$  участок КР відсутній, а при  $\tau < \tau^*$  такий участок має місце. Приймаючи до уваги температурну залежність величин  $c_1, c_2$  та  $R$  (див.(4.11),

(4.14) та (2.52)) знаходимо постійну  $A$ . Для оцінки величини  $\tau^*$  прийmemo, що  $n_0 = n_\epsilon$  (див. зноску 5 на ст. 35) і згідно до (4.29) знаходимо

$$\tau^* \approx 0.01 \div 0.02 \quad (4.31)$$

В залежності від величини параметра  $b/c$  для  $\tau^*$  отримуємо дані, приведені в таблиці 2. Слід зауважити, що при  $b/c$  значення  $\tau^*$  стає не залежною від  $b/c$  величиною і рівне

$$\tau^* = 0.023 \quad (4.32)$$

Табл. 2. Величина критичної області температур як функція мікроскопічних параметрів.

$b/c$	$b_{min}$	0.22	0.30	0.35	0.40	0.50	1.00
$\tau^*$	0.012	0.011	0.023	0.025	0.024	0.022	0.023

Визначення величини критичної області є важливим елементом кожної теоретичної схеми опису фазового переходу. Добре відомим є критерій Гінзбурга [24], для визначення величини критичної області температур, детальне вивчення цього питання проводилося також в [25].

Таким чином, знайдена величина області температур  $|\tau| < \tau^*$ , в якій поведінка системи повинна описуватись з використанням принципів нового математичного апарату. Будемо називати цю область критичною областю температур.

## 5. Розрахунок вкладів до вільної енергії однокомпонентної спінової системи поблизу точки фазового переходу. (Область КР).

Викладена схема розрахунку вільної енергії тривимірної спінової системи поблизу точки ФП. Загальна ідея розрахунку полягає в роздільному врахуванні вкладів до вільної енергії від короткохвильових та довгохвильових флуктуацій густини параметра порядку. Отриманий явний вигляд для частини вільної енергії (5.40), яка формується вкладом короткохвильових флуктуацій. Досліджена залежність від мікроскопічних параметрів моделі. Знайдені значення критичних показників.

Відомо, що поблизу точки фазового переходу вирази для термодинамічних функцій набувають неаналітичної залежності від температури. Викладена нижче схема розрахунку вільної енергії пояснює зміну характеру її температурної залежності при наближенні температури до критичної. Якщо далеко від точки ФП система описується гаусовим розподілом флуктуацій, то поблизу її необхідно використовувати негаусові базисні розподіли. В зв'язку з цим вільну енергію системи зручно зобразити у виді суми (різних за своєю природою) доданків [22].

$$F = F_0 + F_{\text{кр}} + F_{\text{ГРР}}. \quad (5.1)$$

Основний вклад до величини  $F_0$  походить від системи невзаємодіючих частинок

$$F_0 = -kTN(\ln 2 + \tilde{M}_0),$$

де величина  $\tilde{M}_0$  означена в (16).

Вільна енергія КР  $F_{\text{кр}}$  відповідає вкладу короткохвильових флуктуацій до вільної енергії. Це такі флуктуації, довжина хвилі яких не перевищує величину  $s^{m_\tau}$ . Остання, за порядком величини, співпадає з кореляційною довжиною і залежить від температури.  $F_{\text{кр}}$  записується у вигляді

$$F_{\text{кр}} = -kT \sum_{n=0}^{m_\tau} F_n \quad (5.2)$$

Величина  $m_\tau$  означена в (4.19). Для парціальної вільної енергії  $n$ -того фазового шару  $F_n$  маємо вираз

$$F_n = -kT \ln Q_n \quad (5.3)$$

Парціальна статистична сума  $Q_n$  обчислюється згідно до (1.18).

Вільна енергія ГРР позначається як  $F_{\text{ГРР}}$  і описує вклад до загальної вільної енергії від довгохвильових фаз флуктуацій параметра порядку (див. Рис.3). При її розрахунку скористаємося з формули

$$F_{\text{ГРР}} = -kT \ln Z_{\text{ГРР}}, \quad (5.4)$$

де в якості  $Z_{\text{ГРР}}$  маємо вираз

$$Z_{\text{ГРР}} = [Q(P_{m_\tau})]^{N_{m_\tau+1}} 2^{(N_{m_\tau+1}-1)/2} \int W_{m_\tau+1}(\rho) (d\rho)^{N_{m_\tau+1}} \quad (5.5)$$

Тут  $Q(P_{m_\tau})$  обчислюється згідно до загального виразу (1.19), або його наближеної формули (2.21) при  $l = 0$  (тобто величиною  $Y_0^{(n)}$ , де в якості  $n$  використовується значення  $m_\tau$ ). Для  $W_{m_\tau+1}(\rho)$  маємо

$$W_{m_\tau+1}(\rho) = \epsilon x p \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{m_\tau+1}} d_{m_\tau+1}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{a_{m_\tau+1}}{4!} N_{m_\tau+1}^{-1} \sum_{k_1, \dots, k_4} \rho_{\vec{k}_1} \dots \rho_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_4} \right\} \quad (5.6)$$

Коефіцієнти  $d_{m_\tau+1}(0)$  та  $a_{m_\tau+1}$  знаходяться з РС (2.33).

Знайдемо явний вираз для величини  $F_{\text{кр}}$ . Запишемо формулу (5.2) у вигляді двох доданків

$$F_{\text{кр}} = F_1 - kT \sum_{n=1}^{m_\tau} \ln Q, \quad (5.7)$$

де  $F_1$ -вільна енергія нульового шару

$$F_1 = -kTN'(a'_0 + \ln Q(d_0)), \quad (5.8)$$

Коефіцієнт  $a'_0$  обчислений нами в (4.5)-(4.9), а вираз для  $Q(d_0)$  приведений в (1.23). Перший доданок в (5.7) описує за вхід системи в критичний режим і розраховується окремо. Другий доданок описує вільну енергію власне критичного режиму. Він включає в себе  $m_\tau$  шарів фазового простору КЗ. Величина  $Q_n$  при  $n \in [1, m_\tau]$  може бути представлена як явна функція номера шару  $n$ , оскільки величини  $r_n$  та  $u_n$  в цій області близькі до їх фіксованих значень  $r^*$  та  $u^*$  відповідно. Це дозволяє провести операцію сумування по  $n$ .

Температурна залежність доданку  $F_1$  із (5.7) розрахована в Додатку 2 і має вигляд розкладу за степенями  $\tau$ . Обмежуючись членами пропорційними до другої степені  $\tau$ , маємо

$$F_1 = -kTN'[f_0 + f_1\tau + f_2\tau^2] \quad (5.9)$$

де

$$f_l = a_{0l} + q_{0l} \quad (5.10)$$

Значення виразу (5.9) випадку  $\tau \rightarrow 0$  визначається коефіцієнтом  $f_0$ . При збільшенні радіуса дії потенціалу величина  $f_0$  досягає свого мінімального значення при  $b = 0.57c$ . Коефіцієнти  $f_1$  та  $f_2$  є

мінімальними при  $b = 0.29c$ . Значення коефіцієнтів  $g_{0l}$  та  $f_l$  приведені в таблиці 3.

Табл. 3. Значення коефіцієнтів вільної енергії "вхідного режиму" (Ф-ла (5.9)) від мікроскопічних параметрів задачі.

$b/c$	$q_{00}$	$q_{01}$	$q_{02}$	$f_0$	$f_1$	$f_2$
$b_I$	1.2977	-0.2963	0.3636	0.4049	-0.4156	0.4829
0.30	1.2781	-0.2689	0.3290	0.4023	-0.4035	0.4636
$b_{II}$	1.2501	-0.2670	0.3383	0.3984	-0.4107	0.4820
0.35	1.2494	-0.2828	0.3620	0.3978	-0.4201	0.4993
$b_{III}$	1.2503	-0.2956	0.3805	0.3978	-0.4272	0.5122
0.40	1.2616	-0.3632	0.4814	0.3972	-0.4630	0.5813
0.45	1.2785	-0.4332	0.5959	0.3968	-0.5001	0.6628
0.50	1.2933	-0.4865	0.6918	0.3965	-0.5290	0.7344
0.60	1.3150	-0.5581	0.8351	0.3964	-0.5695	0.8466
0.80	1.3389	-0.6317	1.0037	0.3972	-0.6142	0.9861
1.00	1.3504	-0.6662	1.0914	0.3982	-0.6364	1.0616
2.00	1.3644	-0.7074	1.2045	0.3997	-0.6639	1.1610
3.00	1.3663	-0.7127	1.2196	0.3999	-0.6675	1.1744
5.00	1.3670	-0.7146	1.2250	0.4000	-0.6688	1.1792
10.00	1.3672	-0.7151	1.2264	0.4000	-0.6691	1.1804
$\infty$						

Знайдемо вираз для другого доданку із (5.7). До складу  $Q_n$  входить добуток двох величин  $Q(P_{n-1})$  та  $Q(d_n)$ . Для їх розрахунку, згідно до (2.10), (2.21), скористаємося з наступних виразів

$$Q(d_n) = s^n \left(\frac{24}{u_n}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{1}{4}\right) \left[1 - \gamma\sqrt{6}h_n + \frac{3}{4}h_n^2 + 0(h_n^3)\right]$$

$$Q(P_n) = \left((2\pi)P_2^{(n)}\right)^{1/2} \left[1 - \frac{3}{4}g_n + \left(\frac{105}{32}g_n^2 - \frac{15}{8}f_n\right) + \left(\frac{945}{32}g_n f_n - \frac{33 \cdot 105}{32 \cdot 4}g_n^3 - \frac{105}{16}k_n\right)\right] \quad (5.11)$$

Для величин  $g_n, f_n$  та  $k_n$  маємо вирази (2.17)-(2.19), а для  $P_2^{(n)}$  вираз (2.13). Вони дозволяють представити  $Q(P_n)$  в вигляді розкладу за степенями аргумента  $h_n$  (див. формулу (2.8)). В результаті знаходимо

$$Q(P_n) = \frac{z_0}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \left(\frac{u_n}{24}\right)^{1/4} s^{-n} [1 + p_{11}h_n + p_{12}h_n^2] \quad (5.12)$$

Тут введені позначення

$$z_0 = 1 - \frac{3}{4}g_0 s^{-d} + \left(\frac{105}{32}g_0^2 - \frac{15}{8}f_0\right) s^{-2d} + \left(\frac{945}{32}g_0 f_0 - \frac{33 \cdot 105}{32 \cdot 4}g_0^3 - \frac{105}{16}k_0\right) s^{-3d} + \dots;$$

$$p_{11} = \frac{z_1}{z_0} - \frac{e_1}{2}, \quad p_{12} = \frac{z_2}{z_0} - \frac{z_1 e_1}{2z_0} + \frac{3}{8}e_1^2 - \frac{e_2}{2}, \quad (5.13)$$

причому

$$z_1 = g_0 g_1 \frac{3}{4} s^{-d} + \frac{15}{8} s^{-2d} \left(\frac{7}{2}g_0^2 g_1 - f_0 f_1\right) + \frac{105}{16} s^{-3d} \left[\frac{9}{2}f_0 g_0 (f_1 + g_1) - \frac{99}{8}g_0^3 g_1 - k_0 k_1\right]$$

$$z_2 = -\frac{3}{4} s^{-d} g_0 g_2 + \frac{15}{8} s^{-2d} \left(\frac{7}{4}g_0^2 (g_1^2 + 2g_2) - f_0 f_2\right) + \frac{105}{16} s^{-3d} \left[\frac{9}{2}f_0 g_0 (g_2 + g_1 f_1 + f_2) - \frac{99}{8}g_0^3 (g_2 + g_1^2) - k_0 k_2\right] + \dots \quad (5.14)$$

Ми маємо, що  $s = s^*$ , тому

$$z_0 = 0.9975, \quad z_1 = 0.2129 \cdot 10^{-2}, \quad z_2 = -0.6439 \cdot 10^{-3};$$

$$p_{11} = 0.4941, \quad p_{12} = 0.2072 \cdot 10^{-1} \quad (5.15)$$

Для парціальної статистичної суми  $n$ -того шару знаходимо

$$Q_n^{1/N_n} = q_0 s \left(\frac{u_{n-1}}{u_n}\right)^{1/4} \left[1 + p_{11}h_{n-1} - \gamma\sqrt{6}h_n - \gamma\sqrt{6}p_{11}h_n h_{n-1} + p_{12}h_{n-1}^2 + \frac{3}{4}h_n^2\right], \quad (5.16)$$

де універсальна постійна  $q_0$  рівна

$$q_0 = \frac{z_0}{2} (2\pi\gamma)^{-1/2} \Gamma\left(\frac{1}{4}\right) = 1.2408 \quad (5.17)$$

Для обчислення (5.16) скористаємось з рівності

$$\left(\frac{u_{n-1}}{u_n}\right)^{1/4} = 1 - \frac{\omega_1}{4\omega_0} h_{n-1} + \left(-\frac{\omega_2}{4\omega_0} + \frac{5}{32} \left(\frac{\omega_1}{\omega_0}\right)^2\right) h_{n-1}^2, \quad (5.18)$$

яка слідує з рівняння (2.28). В результаті, вираз (5.16) переписеться в виді

$$(Q_n)^{1/N_n} = q_0 s \left[ 1 + \tilde{p}_{11} h_{n-1} - \gamma\sqrt{6} h_n + \tilde{p}_{12} h_{n-1}^2 + \frac{3}{4} h_n^2 + \tilde{p}_{22} h_n h_{n-1} \right] \quad (5.19)$$

де

$$\begin{aligned} \tilde{p}_{11} &= p_{11} - \frac{\omega_1}{4\omega_0}, & \tilde{p}_{12} &= p_{12} - \frac{\omega_2}{4\omega_0} + \frac{5}{32} \left(\frac{\omega_1}{\omega_0}\right)^2, \\ \tilde{p}_{22} &= \sqrt{6}\gamma \left(\frac{\omega_1}{4\omega_0} - p_{11}\right) \end{aligned} \quad (5.20)$$

(причому  $\tilde{p}_{11} = 0.2055$ ,  $\tilde{p}_{12} = 0.5945$ ,  $\tilde{p}_{22} = -0.1701$ ).

Представимо  $h_n$  як функцію номера шару  $n$ . Для цього розглянемо поведінку величини

$$h_n = (r_n + q)(u_n)^{-1/2} \quad (5.21)$$

з ростом  $n$ . Скористаємося з явних розв'язків РС, що отримані в (2.51). Оскільки,  $n \leq m_\tau$ , то кожна з величин  $r_n$  та  $u_n$  близькі до своїх фіксованих значень  $r^*$  та  $u^*$  відповідно. Це означає, що праві частини рівностей

$$\begin{aligned} r_n - r^* &= c_1 E_1^n + c_2 R E_2^n \\ u_n - u^* &= c_1 R_1 E_1^n + c_2 E_2^n \end{aligned} \quad (5.22)$$

є малими величинами. Запишемо вираз для  $h_n$

$$h_n = \frac{c_1 E_1^n + c_2 R E_2^n}{(u^* + c_1 R_1 E_1^n + c_2 E_2^n)^{1/2}} \quad (5.23)$$

Величини  $c_1 E_1^n$  та  $c_2 E_2^n$  є малими в порівнянні з  $u^*$ . Тому, розкладаючи в ряд знаменник виразу (5.23) і обмежуючись членами другого порядку, одержуємо вираз

$$h_n = B_1 E_2^n + B_2 E_2^{2n} + B_3 c_1 E_1^n + B_4 c_1 E_1^n E_2^n + B_6 c_1^2 E_1^{2n}, \quad (5.24)$$

де для коефіцієнтів  $B_i$  маємо

$$\begin{aligned} B_1 &= R^{(0)} c_2 (u^*)^{-1}, & B_2 &= -\frac{1}{2} R^{(0)} (c_2/u^*)^2, & B_3 &= (u^*)^{-1/2} \\ B_4 &= -\frac{1}{2} (1 + R_1^{(0)} R^{(0)}) c_2 (u^*)^{-3/2}, & B_6 &= -\frac{1}{2} R_1^{(0)} (u^*)^{-1} \end{aligned} \quad (5.25)$$

Підставимо (5.24) в (5.19). В результаті отримуємо

$$\begin{aligned} F_n &= -k T N_n \ln Q_n = -k T N' s^{-3n} \{ \ln(q_0 s) + \\ &+ f_{11} c_1 (u^*)^{-1/2} E_1^n + f_{12} c_2 (u^*)^{-1} E_2^n + f_{13} (u^*)^{-1} c_1^2 E_1^{2n} + \\ &+ f_{14} c_2^2 (u^*)^{-2} E_2^{2n} + f_{15} c_2 (u^*)^{-3/2} c_1 E_1^n E_2^n \} \end{aligned} \quad (5.26)$$

де введені позначення

$$\begin{aligned} f_{11} &= f_{110}, & f_{12} &= f_{120}, & f_{13} &= f_{130} - \frac{1}{2} f_{110}^2, \\ f_{14} &= f_{140} - \frac{1}{2} f_{120}^2, & f_{15} &= f_{150} - f_{110} f_{120}, \end{aligned} \quad (5.27)$$

причому

$$\begin{aligned} f_{110} &= \tilde{p}_{11}/E_1 - \gamma\sqrt{6}, & f_{120} &= R^{(0)} (\tilde{p}_{11}/E_2 - \gamma\sqrt{6}), \\ f_{130} &= -\frac{1}{2} R_1^{(0)} (\tilde{p}_{11}/E_1^2 - \gamma\sqrt{6}) + \\ &+ (\tilde{p}_{12}/E_1^2 + \frac{3}{4} + \tilde{p}_{22}/E_1), \\ f_{140} &= -\frac{1}{2} R^{(0)} (\tilde{p}_{11}/E_2^2 - \gamma\sqrt{6}) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +(R^{(0)})^2 \left( \frac{\tilde{p}_{12}}{E_2^2} + \frac{3}{4} + \frac{\tilde{p}_{22}}{E_2} \right), \\
f_{150} = & -\frac{1}{2}(1 + R^{(0)}R_1^{(0)}) \left( \frac{\tilde{p}_{11}}{E_1E_2} - \gamma\sqrt{6} \right) + \\
& + R^{(0)} \left[ 2\frac{\tilde{p}_{12}}{E_1E_2} + \frac{3}{2} + \tilde{p}_{22}\frac{E_1 + E_2}{E_1E_2} \right] \quad (5.28)
\end{aligned}$$

Величини  $f_{1l}$  є універсальними і приймають наступні числові значення

$$\begin{aligned}
f_{11} = & -0.8008, f_{12} = 0.1564, f_{13} = 0.4896 \\
f_{14} = & 1.3689, f_{15} = -0.3011 \quad (5.29)
\end{aligned}$$

В результаті виконання операції сумування по  $n$  виразу (5.26) знаходимо

$$-kTN' \sum_{n=1}^{m_\tau} s^{-3n} \ln Q_n = -kTN'[Q' + Q_{m_\tau}] \quad (5.30)$$

де

$$\begin{aligned}
Q' = & s^{-3} \left[ t_{00} + t_{01}(u^*)^{-1/2}c_1E_1 + t_{02}(u^*)^{-1}c_2E_2 + \right. \\
& \left. + t_{03}(u^*)^{-1}(c_1E_1)^2 + t_{04}(u^*)^{-2}(c_2E_2)^2 + \right. \\
& \left. + t_{05}(u^*)^{-3/2}c_1E_1c_2E_2 \right] \\
Q_{m_\tau} = & -s^{-3(m_\tau+1)} \left[ t_{00} + t_{01}\frac{\delta f_0}{\sqrt{\varphi_0}}E_1^{1-\delta}(1 - \Phi_0c_\Delta\tau^\Delta) + \right. \\
& \left. + t_{02}\varphi_0^{-1}c_\Delta\tau^\Delta\delta E_2^{1-\delta} + t_{03}f_0^2\varphi_0^{-1}\delta^2E_1^{2(1-\delta)} \times \right. \\
& \left. \times (1 - 2\Phi_0c_\Delta\tau^\Delta) + t_{05}f_0\varphi_0^{-3/2}\delta^2(E_1E_2)^{1-\delta}c_\Delta\tau^\Delta \right] \quad (5.31)
\end{aligned}$$

Тут введені позначення

$$\begin{aligned}
t_{00} = & \ln(q_0s)/(1 - s^{-3}), t_{01} = f_{11}/(1 - E_1s^{-3}), \\
t_{02} = & f_{12}/(1 - E_2s^{-3}), t_{03} = f_{13}/(1 - E_1^2s^{-3}), \\
t_{04} = & f_{14}/(1 - E_2^2s^{-3}), t_{05} = f_{15}/(1 - E_1E_2s^{-3}), \quad (5.32)
\end{aligned}$$

Дані величини є універсальними і приймають значення

$$t_{00} = 1.4839, t_{01} = -0.9868, t_{02} = 0.1579,$$

$$t_{03} = -1.1429, t_{04} = 1.3740, t_{05} = -0.3246.$$

Виділимо у  $Q'$  явну залежність від температури. Приймаючи до уваги (2.43), (4.11) та (4.14) знаходимо

$$Q' = f_{\text{кр}}^{(00)} + f_{\text{кр}}^{(01)}\tau + f_{\text{кр}}^{(02)}\tau^2, \quad (5.33)$$

де для коефіцієнтів  $f_{\text{кр}}^{(0l)}$  маємо вирази

$$\begin{aligned}
f_{\text{кр}}^{(00)} = & t_{00}s^{-3} + d^{(2)}\tilde{c}_{22} + d^{(4)}\tilde{c}_{22}^2, \\
f_{\text{кр}}^{(01)} = & d^{(1)}(c_{10} + c_{11}) + d^{(2)}(2c_{20} + c_{21}) + \\
& d^{(4)}2\tilde{c}_{22}(2c_{20} + c_{21}) + d^{(5)}\tilde{c}_{22}(c_{10} + c_{11}), \\
f_{\text{кр}}^{(02)} = & d^{(1)}c_{10} + d^{(2)}c_{20} + d^{(3)}(c_{10} + c_{11})^2 + \\
& + d^{(4)}(2\tilde{c}_{22}c_{20} + (2c_{20} + c_{21})^2) + \\
& + d^{(5)}(\tilde{c}_{22}c_{10} + (2c_{20} + c_{21})(c_{10} + c_{11})) \quad (5.34)
\end{aligned}$$

Тут введене позначення  $\tilde{c}_{22} = c_{20} + c_{21} + c_{22}$ , а для коефіцієнтів  $c_{1l}, c_{2l}$  маємо вирази, приведені в (4.13), (4.15). Для універсальних постійних  $d^{(0)}$  знаходимо

$$\begin{aligned}
d^{(1)} = & t_{01}E_1(s^3\beta_c\Phi(0)\sqrt{\varphi_0})^{-1}, \\
d^{(2)} = & t_{02}E_2(s^3\varphi_0(\beta_c\Phi(0))^2)^{-1}, \\
d^{(3)} = & t_{03}E_1^2(s^3\varphi_0(\beta_c\Phi(0))^2)^{-1}, \\
d^{(4)} = & t_{04}E_2^2(s^3\varphi_0^2(\beta_c\Phi(0))^4)^{-1}, \\
d^{(5)} = & t_{05}E_1E_2(s^3\varphi_0^{3/2}(\beta_c\Phi(0))^3)^{-1}, \quad (5.35)
\end{aligned}$$

Вираз для  $Q_{m_\tau}$  із (5.3) має неаналітичну температурну залежність. Маємо

$$Q_{m_\tau} = -s^{-3(m_\tau+1)} \left[ f_{\text{кр}}^{(1)} + f_{\text{кр}}^{(2)}c_\Delta\tau^\Delta \right] \quad (5.36)$$

де



$$\begin{aligned}
f_{\text{кр}}^{(1)} &= t_{00} + t_{01}\delta E_1^{1-\delta} f_0(\varphi_0)^{-1/2} + t_{03}\delta^2 E_1^{2(1-\delta)} f_0^2(\varphi_0)^{-1}, \\
f_{\text{кр}}^{(2)} &= -R^{(0)}(\varphi_0)^{-1} t_{01}\delta E_1^{1-\delta} + t_{02}\delta E_2^{1-\delta}(\varphi_0)^{-1} - \\
&2R^{(0)} f_0 \varphi_0^{-3/2} t_{03}\delta^2 E_1^{2(1-\delta)} + t_{05} f_0 \varphi_0^{-3/2} \delta^2 (E_1 E_2)^{1-\delta} \quad (5.37)
\end{aligned}$$

Слід підкреслити, що коефіцієнти  $f_{\text{кр}}^{(i)}$  є універсальними величинами. Вони визначаються виключно координатами фіксованої точки РС та їх власними значеннями. Для випадку моделі  $\rho^4$  вони рівні <sup>5</sup>

$$f_{\text{кр}}^{(1)} = 0.4001 \quad f_{\text{кр}}^{(2)} = -2.2364 \quad (5.38)$$

При розрахунку величини  $Q_{m_\tau}$  нами були використані рівності

$$\begin{aligned}
s^{-3(m_\tau+1)} &= (c_\nu)^{3\nu} \tau^{3\nu} (1 + 3\nu\Phi_0 c_\Delta \tau^\Delta) s^{3(\delta-1)} \\
c_1 E_1^{m_\tau+1} &= f_0 \beta \Phi(0) (1 - \Phi_0 c_\Delta \tau^\Delta) E_1^{1-\delta} \\
E_2^{m_\tau+1} &= c_\nu^\Delta \tau^\Delta E_2^{1-\delta}, \quad (5.39)
\end{aligned}$$

які слідують з означення точки виходу з критичного режиму. Використовуючи першу з цих рівностей, знаходимо остаточний вираз для вільної енергії критичного режиму

$$\begin{aligned}
F_{\text{кр}} &= -kTN' [\gamma'_0 + \gamma_1 \tau + \gamma_2 \tau^2 + \\
&+ \gamma'_3 c_\nu^{3\nu} \tau^{3\nu} + \gamma'_4 c_\nu^{3\nu} c_\Delta \tau^{3\nu+\Delta}] \quad (5.40)
\end{aligned}$$

Коефіцієнти, що визначають аналітичну частину  $F_{\text{кр}}$  (див. Ф-ли (5.9), (5.33)) мають вигляд

$$\begin{aligned}
\gamma'_0 &= f_0 + f_{\text{кр}}^{(00)} \\
\gamma_1 &= f_1 + f_{\text{кр}}^{(01)} \\
\gamma_2 &= f_2 + f_{\text{кр}}^{(02)} \quad (5.41)
\end{aligned}$$

Вони є монотонними функціями величини  $b/c$  і приймають значення, приведені в таблиці 4. Свого мінімального значення коефіцієнт  $\gamma'_0$  досягає при  $b = 0.5c$ . Коефіцієнти  $\gamma_1$  та  $\gamma_2$  мають максимуми при  $b = 0.29c$  та  $b = 0.34c$  відповідно.

<sup>5</sup>При обчисленнях використане значення  $\delta = 1.0300$ , яке визначається з умови узгодження точок виходу з КР при температурах вищих і нижчих за критичну.

Для коефіцієнтів неаналітичної частини знаходимо

$$\gamma'_3 = -f_{\text{кр}}^{(1)} s^{3(\delta-1)}; \quad \gamma'_4 = -f_{\text{кр}}^{(3)} s^{3(\delta-1)}; \quad (5.42)$$

де

$$f_{\text{кр}}^{(3)} = f_{\text{кр}}^{(2)} + 3\nu\Phi_0 f_{\text{кр}}^{(1)} \quad (5.43)$$

Величина  $f_{\text{кр}}^{(3)}$  не залежить від мікроскопічних параметрів системи і рівна  $f_{\text{кр}}^{(3)} = -3.2538$ .

Приведені вище розрахунки дозволяють зробити важливий висновок про появу неаналітичних по температурі доданків у вільній енергії системи. Вони виникають внаслідок сумування по шарах фазового простору КЗ (згідно до (5.7)) на участку КР. Згідно до теореми 2, участок КР відповідає такій області значень  $n \leq m_\tau$ , де відхилення величин  $r_n$  та  $u_n$  від їх фіксованих значень малий, а отже справедливі співвідношення ренормалізаційної групи. Саме РГ симетрія, яка має місце в КР (див.рис.3), приводить до появи в (5.40) доданків, пропорційних до  $\tau^{3\nu} \tau^{3\nu+\Delta}$ . Критичні показники  $\nu$  та  $\Delta$  для моделі  $\rho^4$  приймають значення

$$\nu = 0.608, \quad \Delta = 0.472 \quad (5.44)$$

При використанні вищих моделей типу  $\rho^6$  і т.д. значення  $\nu$  зростає [8].

Розглянемо більш детально структуру коефіцієнтів  $\gamma_i$  виразу (5.40). Коефіцієнти  $\gamma_0, \gamma_1$  та  $\gamma_2$  складаються з двох доданків. Перший з них ( $f_0, f_1$  та  $f_2$ ) характеризує область режиму входу в КР, а останні – вклад від участку КР. Кожен з них залежить від відношення  $b/c$  та нормованої на  $\tilde{\Phi}(0)$  температури фазового переходу  $\beta_c \Phi(0)$ . В таблицях 3, 4 приведені їх значення для деяких відношень  $b/c$ .

Проведені вище розрахунки дозволяють оцінити величину окремих вкладів до коефіцієнтів  $\gamma'_0, \gamma_1$  та  $\gamma$ . Так для  $\gamma'_0$  при  $b = b_I$  маємо (див.(5.10) та табл.3)

$$\gamma'_0 = q_{00} + a_{00} + f_{\text{кр}}^{(00)} = 1.2978 - 0.8929 + 0.0385$$

Вклад величини  $f_{\text{кр}}^{(00)}$  до коефіцієнта  $\gamma'_0$  не перевищує 10%. Подібна ситуація має місце і для  $\gamma_1$ .

Табл. 4. Значення коефіцієнтів  $\gamma_l$ , що визначають аналітичну частину вільної енергії при  $T > T_c$ .

$b/s$	$\gamma'_0$	$\gamma_1$	$\gamma_2$	$c_\nu$	$c_\Delta$	$\tau^*$
$b_I$	0.4434	-0.5753	-0.9690	1.3869	-0.4856	
0.3000	0.4410	-0.5563	-0.8756	1.3306	-0.4929	
$b_{II}$	0.4374	-0.5584	-0.7904	1.2960	-0.5228	
0.35	0.4370	-0.5694	-0.8038	1.3126	-0.5314	
$b_{III}$	0.4369	-0.5779	-0.8185	1.3274	-0.5370	
0.40	0.4365	-0.6225	-0.9162	1.4126	-0.5621	
0.45	0.4361	-0.6688	-1.0238	1.5026	-0.5892	
0.50	0.4359	-0.7042	-1.0957	1.5673	-0.6129	
0.60	0.4361	-0.7518	-1.1606	1.6439	-0.6502	
0.80	0.4373	-0.8014	1.1692	1.7062	-0.6938	
1.00	0.4384	-0.8252	-1.1502	1.7297	-0.7147	
2.00	0.4401	-0.8544	-1.1128	1.7553	-0.7382	
3.00	0.4404	-0.8582	-1.1080	1.7588	-0.7410	
5.00	0.4404	-0.8596	-1.1065	1.7601	-0.7419	
10.00	0.4405	-0.8599	-1.1061	1.7605	-0.7422	

Для коефіцієнта  $\gamma_2$  при  $b = b_1$  знаходимо

$$\gamma_2 = q_{02} + a_{02} + f_{\text{кр}}^{(02)} = 0.3637 + 0.1193 - 1.4520$$

Основний вклад походить від участку КР.

Коефіцієнти  $\gamma'_3$  та  $\gamma'_4$  є універсальними і приймають значення

$$\gamma'_3 = -0.4470, \quad \gamma'_4 = 3.6351 \quad (5.45)$$

Неуніверсальні постійні  $c_\nu$  та  $c_\Delta$  мають вигляд

$$\begin{aligned} c_\nu &= (c_{10} + c_{11}) / (f_0 \beta_c \Phi(0) \delta), \\ c_\Delta &= c_\nu^\Delta \frac{1}{\delta} (c_{20} + c_{21} + c_{22}) / (\beta_c \Phi(0))^2, \end{aligned} \quad (5.46)$$

де вирази для коефіцієнтів  $c_{2m}$  приведені в (4.12), (4.14). Тут не приймаються до уваги доданки, пропорційні до  $\tau$ , оскільки величини

$c_\nu$  та  $c_\Delta$  є множниками біля  $\tau^{3\nu}$  та  $\tau^{3\nu+\Delta}$  відповідно. Врахування цих членів привело б до виникнення доданків вищого порядку малості по  $\tau$  ( $\tau^{3\nu+1}, \tau^{3\nu+\Delta+1}, \dots$ ). Залежність величин  $c_\nu$  та  $c_\Delta$  від відношення  $b/c$  приведена в таблиці 4. Слід зауважити, що величина  $c_\nu$  досягає мінімального значення при  $b = 0,34c$  в той час, коли  $c_\Delta$  є монотонно спадною функцією  $b$ .

## 6. Розрахунок вкладів до вільної енергії системи від довгохвильових флуктуацій.

Для температур вищих від критичної, але близьких до неї, отриманий явний вираз для частини вільної енергії, що відповідає вкладу довгохвильових мод флуктуацій спінового моменту. Вони приводять до появи доданків, які мають виключно неаналітичну залежність від температури. Останнє твердження, однак, справедливе лише за умови наявності участку КР. Результатом проведених розрахунків є встановлення наявності двох різних за своїм характером областей. Одна з них відповідає власне довгохвильовим вкладам  $F_{\text{ГР}}^{(3)}$ . Вона описується перенормованим гаусовим розподілом флуктуацій. Інша частина (вклади  $F_{\text{ГР}}^{(1)}$  та  $F_{\text{ГР}}^{(2)}$ ) відповідає перехідній області від КР до ГР. Досліджені відносні вклади доданків до вільної енергії.

Результати розрахунків попереднього параграфу свідчать про наявність двох типів вкладів до вільної енергії системи, що виникають від врахування короткохвильових мод флуктуацій параметра порядку. Перші з них пропорційні до цілих степенів величини  $\tau$ , другі – мають неаналітичну залежність від  $\tau$  (доданки типу  $\tau^{3\nu}$  та  $\tau^{3\nu+\Delta}$ ).

Розглянемо більш детально вираз для  $F_{\text{ГР}}$  із (5.4), (5.5). Його зручно представити у вигляді декількох частин.

$$F_{\text{ГР}} = F_{\text{ГР}}^{(1)} + F_{\text{ГР}}^{(2)} + F_{\text{ГР}}^{(3)} \quad (6.1)$$

де

$$\begin{aligned} F_{\text{ГР}}^{(1)} &= -kTN_{m_\tau+1} \ln Q(P_{m_\tau}) \\ F_{\text{ГР}}^{(2)} &= -\frac{1}{2} kTN_{m_\tau+1} \ln 2 \\ F_{\text{ГР}}^{(3)} &= -kT \ln I_{m_\tau} \end{aligned} \quad (6.2)$$

Величина  $I_{m_\tau}$  має вигляд

$$I_{m_\tau} = \int W_{m_\tau+1}(\rho)(d\rho)^{N_{m_\tau+1}} \quad (6.3)$$

де вираз для  $W_{m_\tau+1}(\rho)$  приведений в (5.6).

Для розрахунку  $Q(P_{m_\tau})$  використаємо представлення (5.12), де покладемо  $n = m_\tau$ . В результаті знаходимо

$$Q(P_{m_\tau}) = \frac{z_0}{\sqrt{2\pi}} \gamma^{-1/2} \left( \frac{u_{m_\tau}}{24} \right)^{1/4} s^{-m_\tau} [1 + p_{11}h_{m_\tau} + p_{12}h_{m_\tau}^2] \quad (6.4)$$

Вирази для коефіцієнтів  $z_0, p_{12}$  приведені в (5.13). Знайдемо значення величин  $u_{m_\tau}$  та  $h_{m_\tau}$ . Використаємо для цього формули (2.51), (4.24) та співвідношення (5.39). Маємо формули, де виділена явна температурна залежність

$$\begin{aligned} r_{m_\tau+l} &= r_i^{(0)} \beta \Phi(0) (1 + r_i^{(1)} c_\Delta \tau^\Delta) \\ u_{m_\tau+l} &= (\beta \Phi(0))^2 u_i^{(0)} (1 + u_i^{(1)} c_\Delta \tau^\Delta) \end{aligned} \quad (6.5)$$

Величини

$$\begin{aligned} r_i^{(0)} &= f_0 (E_1^{l-\delta} \delta - 1), \\ r_i^{(1)} &= f_0 \Phi_0 \delta (E_2^{l-\delta} - E_1^{l-\delta}) / r_i^{(0)}, \\ u_i^{(0)} &= \varphi_0 + f_0 \sqrt{\varphi_0} R_1^{(0)} \delta E_1^{l-\delta}, \\ u_i^{(1)} &= \delta (E_2^{l-\delta} - R^{(0)} R_1^{(0)} E_1^{l-\delta}) / u_i^{(0)} \end{aligned} \quad (6.6)$$

не залежать від температури.

Для величини  $h_{m_\tau+l}$ , яка рівна

$$h_{m_\tau+l} = (r_{m_\tau+l} + q) (u_{m_\tau})^{-1/2}, \quad (6.7)$$

знаходимо

$$h_{m_\tau+l} = h_i^{(0)} (1 + h_i^{(1)} c_\Delta \tau^\Delta), \quad (6.8)$$

де не залежні від температури коефіцієнти мають вигляд

$$\begin{aligned} h_i^{(0)} &= f_0 E_1^{l-\delta} \delta (u_i^{(0)})^{-1/2}; \\ h_i^{(1)} &= \Phi_0 \left[ \left( \frac{E_2}{E_1} \right)^{l-\delta} - 1 \right] - \frac{1}{2} u_i^{(1)} \end{aligned} \quad (6.9)$$

У випадку  $l = 0$ , який має місце для (6.4), маємо

$$\begin{aligned} r_0^{(0)} &= -0.4360 & r_0^{(1)} &= 4.2026 \\ u_0^{(0)} &= 0.5939 & u_0^{(1)} &= 4.6622 \\ h_0^{(0)} &= 0.0830 & h_0^{(1)} &= -30.9781 \end{aligned} \quad (6.10)$$

Підставимо (6.5) та (6.8) при  $l = 0$  у (6.4). В результаті знаходимо

$$F_{\text{ггп}}^{(1)} = -kTN_{m_\tau+1} [f_{60} + f_{61}c_\Delta \tau^\Delta] + F'_{\text{ггп}} \quad (6.11)$$

Для коефіцієнтів  $f_{6l}$  маємо вирази

$$\begin{aligned} f_{60} &= \ln z_0 - \frac{1}{2} \ln(4\pi\gamma\sqrt{6}) + \frac{1}{4} \ln u_0^{(0)} + \\ &\quad + p_{11}h_0^{(0)} + (p_{12} - \frac{1}{2}p_{11}^2)(h_0^{(0)})^2, \\ f_{61} &= \frac{1}{4}u_0^{(1)} + p_{11}h_0^{(0)}h_0^{(1)} + 2(p_{12} - \frac{1}{2}p_{11}^2)(h_0^{(0)})^2h_0^{(1)} \end{aligned} \quad (6.12)$$

Запропонований метод розрахунку дозволяє отримати числові значення коефіцієнтів, що входять у вираз для вільної енергії. Поряд з аналітичними виразами будемо наводити числові значення коефіцієнтів. Для цього, як і раніше використовуються наступні значення параметрів:

$$\begin{aligned} \alpha' &= 1.04175, & \Phi_\infty &= -0.10134 \\ & & \delta &= 1.0300 \end{aligned} \quad (6.13)$$

Зокрема, для коефіцієнтів з (6.12) маємо

$$f_{60} = -1.264, \quad f_{61} = -0.062$$

Доданок  $F'_{\text{ггп}}$  є аномально великим

$$F'_{\text{грр}} = -kTN_{m_\tau+1} \left( \frac{1}{2} \ln(\beta\Phi(0)) - m_\tau \ln s \right) \quad (6.14)$$

Він приводить до вкладів у вільну енергію системи, які пропорційні до  $\tau^{3\nu} \ln \tau$ . Відповідні доданки до теплоємності системи є типу  $\tau^{-\alpha} \ln \tau$ , де  $\alpha = 2 - 3\nu$ . Однак, виявляється, що вклад  $F'_{\text{грр}}$  повністю компенсується доданками, які виникають при розрахунку  $F_{\text{грр}}^{(3)}$  (див. (6.20)).

Вираз для  $F_{\text{грр}}^{(2)}$  має вигляд

$$F_{\text{грр}}^{(2)} = -kTN_{m_\tau+1} f'_2 \quad (6.15)$$

де

$$f'_2 = \frac{1}{2} \ln 2$$

Повернемося до розрахунку  $F_{\text{грр}}^{(3)}$ . Для цього виконаємо в виразі для  $I_{m_\tau}$  із (6.3) заміну змінних

$$\rho_{\mathbf{k}} = \rho'_k s^{m_\tau+1} (\beta\Phi(0))^{-1/2} \quad (6.16)$$

В результаті знаходимо

$$I_{m_\tau} = s^{(m_\tau+1)N_{m_\tau+1}} (\beta\Phi(0))^{-N_{m_\tau+1}/2} \int W(\rho) (d\rho)^{N_{m_\tau+1}} \quad (6.17)$$

де для  $W(\rho)$  одержуємо

$$W(\rho) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{m_\tau+1}} (\bar{r}_{m_\tau+1} + 2b^2 k^2 s^{2(m_\tau+1)}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{4!} \frac{\bar{u}_{m_\tau+1}}{N_{m_\tau+1}} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \leq B_{m_\tau+1}}} \rho_{\bar{k}_1} \cdots \rho_{\bar{k}_4} \delta_{\bar{k}_1 + \dots + \bar{k}_4} \right\} \quad (6.18)$$

Тут введені позначення

$$\bar{r}_{m_\tau+1} = r_{m_\tau+1} / \beta\Phi(0), \quad \bar{u}_{m_\tau+1} = u_{m_\tau+1} / (\beta\Phi(0))^2, \quad (6.19)$$

Для  $F_{\text{грр}}^{(3)}$  маємо

$$F_{\text{грр}}^{(3)} = -kT \ln I - kTN_{m_\tau+1} \ln s - F'_{\text{грр}} \quad (6.20)$$

де  $F'_{\text{грр}}$  співпадає з (6.13) і має протилежний знак, а для  $I$  має місце рівність

$$I = \int W(\rho) (d\rho)^{N_{m_\tau+1}} \quad (6.21)$$

Розрахунок  $I$  може приводитись в різних наближеннях. Найбільш просте пов'язане з використанням в якості базисної гаусової густини міри. Це стає можливим завдяки зміні знаку коефіцієнта  $\bar{r}_{m_\tau+1}$  з негативного на позитивний. Із рівності (6.6) видно, що  $r_i^{(0)}$  з ростом  $l$  стає додатнім, а значення  $l$ , при якому  $r_i^{(0)} > 0$ , залежить від величини  $\delta$ . При  $\delta = 1$  маємо, що  $r_{m_\tau+1} = 0$ , а всі  $r_l$  при  $l > m_\tau + 1$  є додатні. У випадку, коли  $l$  є більше за одиницю (але не значно відрізняється від неї) вже величина  $r_{m_\tau+1}$  (чи  $r_i^{(0)}$ ) приймає додатне значення. При цьому всі  $r_{m+l}$  для  $l > 1$  також є додатніми. Скористаємося з (6.5) і знайдемо вирази для  $\bar{r}_{m_\tau+1}, \bar{u}_{m_\tau+1}$

$$\begin{aligned} \bar{r}_{m_\tau+1} &= r_1^{(0)} (1 + r_1^{(1)} c_\Delta \tau^\Delta) \\ \bar{u}_{m_\tau+1} &= u_1^{(0)} (1 + u_1^{(1)} c_\Delta \tau^\Delta) \end{aligned} \quad (6.22)$$

де для універсальних величин  $r_1^{(l)}, u_1^{(l)}$  маємо

$$\begin{aligned} r_1^{(0)} &= f_0 (\delta E_1^{1-\delta} - 1) \\ r_1^{(1)} &= f_0 \Phi_0 \delta (E_2^{1-\delta} - E_1^{1-\delta}) / r_1^{(0)} \\ u_1^{(0)} &= \varphi_0 + f_0 \sqrt{\varphi_0} R_1^{(0)} \delta E_1^{1-\delta} \\ u_1^{(1)} &= \delta (E_2^{1-\delta} - R^{(0)} R_1^{(0)} E_1^{1-\delta}) / u_1^{(0)} \end{aligned} \quad (6.23)$$

У випадку виконання рівностей (6.13) знаходимо

$$r_1^{(0)} = -0.0154 \quad r_1^{(1)} = 4.1159$$

$$u_1^{(0)} = 0.6504 \quad u_1^{(1)} = 1.7692$$

Використаємо наближення

$$\sum_{k_1, \dots, k_4} \rho_{\bar{k}_1} \cdots \rho_{\bar{k}_4} \delta_{\bar{k}_1 + \dots + \bar{k}_4} \approx 3 \sum_{k_1} \langle \rho_{\bar{k}_1} \rho_{-\bar{k}_1} \rangle \sum_k \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}$$

В результаті для (6.21) отримуємо вираз

$$I = \int \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{m_\tau+1}} g(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right] (d\rho)^{N_{m_\tau+1}} \quad (6.24)$$

де

$$g(k) = g(0) + q_\tau k^2, \quad g(0) = A + \bar{r}_{m_\tau+1} \quad (6.25)$$

тут  $q_\tau = 2b^2 s^{2(m_\tau+1)}$ , а величина  $A$  рівна

$$A = \frac{\bar{u}_{m_\tau+1}}{4} \frac{1}{N_{m_\tau+1}} \sum_{k \leq B_{m_\tau+1}} \langle \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \rangle \quad (6.26)$$

Усереднення  $\langle \dots \rangle$  в (6.26) здійснюється відносно густини міри типу (6.24). Рівняння для  $d(0)$  має вигляд

$$d(0) = \bar{r}_{m_\tau+1} + \frac{3}{4} (\alpha')^2 \bar{u}_{m_\tau+1} \left( 1 - \alpha' \sqrt{d(0)} \operatorname{arctg} \frac{1}{\alpha' \sqrt{d(0)}} \right) \quad (6.27)$$

Воно отримується із співвідношення

$$\langle \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \rangle = -2 \frac{\partial I}{\partial d(k)} \quad (6.28)$$

Розв'язок (6.28) шукається у виді

$$d(0) = D_0 (1 + D_1 c_\Delta \tau^\Delta) \quad (6.29)$$

В результаті знаходимо рівняння для  $D_0$

$$D_0 = r_1^{(0)} + \frac{3}{4} (\alpha')^2 u_1^{(0)} D_{30} \quad (6.30)$$

де введене позначення

$$D_{30} = 1 - \alpha' \sqrt{D_0} \operatorname{arctg} \frac{1}{\alpha' \sqrt{D_0}} \quad (6.31)$$

Величина  $D_1$  визначається із рівності

$$D_1 = \left( r_1^{(1)} r_1^{(0)} + \frac{3}{4} (\alpha')^2 u_1^{(0)} D_{30} u_1^{(1)} \right) \left( D_0 - \frac{3}{8} (\alpha')^2 u_1^{(0)} D_{30} D_{12} \right)^{-1} \quad (6.32)$$

Тут

$$D_{12} = 1 - \frac{1}{D_{30}} \frac{1}{1 + (\alpha')^2 D_0} \quad (6.33)$$

Ці величини приймають наступні значення (див. співвідношення (6.13))

$$D_0 = 0.2237, \quad D_{30} = 0.4516, \quad D_1 = 1.1343$$

Це дозволяє використати при обчисленні (6.21) гаусове наближення в якості базисного. В результаті знаходимо загальний вираз для  $F_{\text{ггп}}^{(3)}$

$$F_{\text{ггп}}^{(3)} = -F'_{\text{ггп}} - kT N_{m_\tau+1} \ln s - \frac{1}{2} kT \sum_{k \geq 0}^{B_{m_\tau+1}} \ln (\pi/d(k)) \quad (6.34)$$

Доданок  $F'_{\text{ггп}}$  в цьому виразі має вигляд (6.14) і компенсується з відповідним доданком в (6.11). Для обчислення суми в останньому доданку (6.34), як і в [4], перейдемо до інтегралу згідно до правила

$$\frac{1}{N_{m_\tau+1}} \sum_{k \geq 0}^{B_{m_\tau+1}} \dots = \frac{1}{N_{m_\tau+1}} \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{6}{\pi} \int_0^{B_{m_\tau+1}} \dots 4\pi k^2 dk \quad (6.35)$$

В результаті обчислень знаходимо

$$F_{\text{ггп}}^{(3)} = -kT N_{m_\tau+1} [I_{00} + I_{01} c_\Delta \tau^\Delta] \quad (6.36)$$

де

$$I_{00} = \ln(s\sqrt{\pi}) - \frac{1}{2} \ln(D_0 + (\alpha')^{-2}) + \frac{1}{3} - (\alpha')^2 D_0 D_{30} \\ I_{01} = -\frac{3}{2} D_0 D_1 D_{30} (\alpha')^2 \quad (6.37)$$

Таким чином, вклад довгохвильових фаз флуктуацій параметра порядку до вільної енергії системи при  $h = 0$  має вигляд

$$F_{\text{ГРР}} = -kTN' [\gamma_3'' c_\nu^{3\nu} \tau^{3\nu} + \gamma_4'' c_\nu^{3\nu} c_\Delta \tau^{3\nu+\Delta}] \quad (6.38)$$

де введені позначення

$$\begin{aligned} \gamma_3'' &= f_{GG} s^{3(\delta-1)} \\ \gamma_4'' &= f_{GG}^{(1)} s^{3(\delta-1)} \end{aligned} \quad (6.39)$$

Причому

$$\begin{aligned} f_{GG} &= f_{60} + f_2' + I_{00} \\ f_{GG}^{(1)} &= f_{61} + I_{01} + 3\nu\Phi_0 f_{GG} \end{aligned} \quad (6.40)$$

Легко бачити, що вираз (6.38) містить доданки пропорційні до  $\tau^{3\nu}$  та  $\tau^{3\nu+\Delta}$ . Вклади вищого порядку малості  $\tau^{3\nu+l}$  та  $\tau^{3\nu+\Delta+l}$  (де  $l \geq 1$ ) до уваги не приймаються.

Для порівняльної оцінки вкладів в (6.39), наведемо числові значення:

$$f_{60} = -1.264, \quad f_2' = 0.347, \quad I_{00} = 1.959;$$

а також

$$f_{61} = -0.061, \quad I_{01} = -0.187$$

Величини  $f_{GG}$  та  $f_{GG}^{(1)}$  є універсальними і приймають значення

$$f_{GG} = 1.042 \quad f_{GG}^{(1)} = -2.899$$

Приймаючи до уваги (6.13) маємо

$$\gamma_3'' = 1.165 \quad \gamma_4'' = -3.238.$$

## 7. Вільна енергія та інші термодинамічні функції в критичній області при $T > T_c$ .

Отримані явні вирази для вкладів в термодинамічні функції від критичної області. Побудовані криві їх температурної залежності. Досліджена залежність відмікроскопічних параметрів моделі.

Підсумуємо проведені вище обчислення. Запишемо загальний вираз для вільної енергії. Він складається, згідно до (5.1), із трьох доданків. Перший з них  $F_0$  записується у вигляді

$$F_0 = -kTN \ln 2 - \frac{1}{2} kTN \beta \Phi(0) \bar{\Phi}(1 - s_0^{-3}) \quad (7.1)$$

Другий доданок в (7.1) не залежить від температури і не впливає на критичну поведінку моделі. Наступним доданком вільної енергії є  $F_{\text{КР}}$ . Він обчислюється відповідно до формули (5.2) і має вигляд приведений в (5.40)-(5.43). Третьою складовою частиною вільної енергії є  $F_{\text{ГРР}}$  із (5.4). Доданок  $F_{\text{ГРР}}$  описує вклад довгохвильових фаз флуктуацій параметра порядку і його розрахунок ґрунтується на використанні гаусового розподілу флуктуацій в якості базисного. Явний вигляд для  $F_{\text{ГРР}}$  при умові відсутності зовнішнього поля знайдений в (6.38). Однак, можна узагальнити отриманий результат на випадок наявності малого зовнішнього поля  $h$ . Згідно до (12), вплив зовнішнього поля на результати розрахунків пов'язаний лише з інтегруванням по змінній  $\rho_0$ . Тому його наявність приводить до зміни виразу для  $I$  із (6.24). Маємо

$$\begin{aligned} I' &= \int \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{m\tau+1}} (d(0) + q_\tau k^2) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \right. \\ &\quad \left. -\frac{1}{2} d(0) \rho_0^2 + \beta \sqrt{N} h \frac{s_{m\tau+1}}{(\beta \Phi(0))^{1/2}} \rho_0 \right] (d\rho)^{N_{m\tau+1}} \end{aligned} \quad (7.2)$$

Тут штрих біля суми по  $k$  означає, що  $k \neq 0$ . В результаті обчислення (7.2) отримуємо для  $F_I = -kTN \ln I'$  вираз

$$\begin{aligned} F_I &= -\frac{1}{2} kT \sum_{k \geq 0}^{B_{m\tau+1}} \ln \left( \frac{\pi}{d(0) + q_\tau k^2} \right) - \\ &\quad -kTN \beta^2 h^2 \frac{1}{2d(0)} (\beta \Phi(0))^{-1} s^{2(m\tau+1)} \end{aligned} \quad (7.3)$$

Тому вираз для  $F_{\text{ГРР}}$  (6.38) не зміниться; до нього додається доданок, пов'язаний із впливом поля

$$F_h = -kTN f_h^{(0)} h^2 \tau^{-2\nu} (1 + c_\Delta f_n^{(1)} \tau^\Delta) \quad (7.4)$$

де

$$f_h^{(0)} = \frac{\beta^2}{(\beta\Phi(0))} \frac{1}{2D_0} (c_\nu)^{-2\nu} s^{2(1-\delta)}; \quad f_h^{(1)} = -(D_1 + 2\nu\Phi_0) \quad (7.5)$$

Вільна енергія системи в критичній області при  $T > T_c$  зображається в наступному вигляді ( $h \rightarrow 0$ )

$$F = -kTN \ln 2 + F'_0 - kTN'(\gamma'_0 + \gamma_1\tau + \gamma_2\tau^2) - kTN'c_\nu^{3\nu}\gamma_3\tau^{3\nu} - kTN'c_\nu^{3\nu}c_\Delta\gamma_4\tau^{3\nu+\Delta} - kTNf_n^{(0)}h^2\tau^{-2\nu}(1 + f_n^{(1)}c_\Delta\tau^\Delta) \quad (7.6)$$

Тут введене позначення

$$F'_0 = -\frac{1}{2}kT_c N \beta_c \Phi(0) \bar{\Phi}(1 - s_0^{-3}) \quad (7.7)$$

Для коефіцієнтів  $\gamma'_0, \gamma_1$  та  $\gamma_2$  (згідно до (5.41) та (5.10)) маємо

$$\begin{aligned} \gamma'_0 &= a_{00} + q_{00} + f_{\text{кр}}^{(00)}, \\ \gamma_1 &= a_{01} + q_{01} + f_{\text{кр}}^{(01)}, \\ \gamma_2 &= a_{02} + q_{02} + f_{\text{кр}}^{(02)} \end{aligned} \quad (7.8)$$

Їх значення приведені в таблиці 3.

Коефіцієнти  $\gamma_3$  та  $\gamma_4$  записуються у виді

$$\gamma_3 = \gamma'_3 + \gamma''_3, \quad (7.9)$$

(див. (5.42), (5.37) для  $\gamma'_3$ ; (6.39) для  $f_{GG}$ ), а також, аналогічним чином знаходимо

$$\gamma_4 = \gamma'_4 + \gamma''_4, \quad (7.10)$$

Для величин  $f_h^{(0)}$  та  $f_h^{(1)}$  маємо вирази, приведені в (7.5). Коефіцієнти  $\gamma_3, \gamma_4$  є універсальними величинами і приймають значення

$$\gamma_3 = 0.718, \quad \gamma_4 = 0.397 \quad (7.11)$$

Знайдемо деякі термодинамічні характеристики системи поблизу точки ФП. Скористаємося із співвідношення

$$S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_V \quad (7.12)$$

і розрахуємо, згідно до (7.6) ентропію системи

$$S = kN [S_0 + S_1\tau + S_3\tau^{1-\alpha} + S_4\tau^{1+\Delta-\alpha}] + 0(\tau^{2-\alpha}, \tau^{2+\Delta-\alpha}) \quad (7.13)$$

Тут

$$S_0 = \ln 2 + s_0^{-3}(\gamma'_0 + \gamma_1), \quad S_1 = 2s_0^{-3}(\gamma_1 + \gamma_2), \quad S_3 = s_0^{-3}3\nu c_\nu^{3\nu}\gamma_3, \quad S_4 = s_0^{-3}(3\nu + \Delta)c_\nu^{3\nu}c_\Delta\gamma_4 \quad (7.14)$$

В границі  $\tau \rightarrow 0$  маємо<sup>6</sup>

$$S = S_0$$

Коефіцієнти  $S_3, S_4$  виразу для ентропії (7.13) містять вклади як від участку КР, так і від ГГР. Це легко бачити на прикладі обчислення величин  $\gamma_3$  та  $\gamma_4$  (формули (7.9) та (7.10) відповідно). Зокрема, для коефіцієнта  $\gamma_3$  маємо вираз

$$\gamma_3 = s^{3(\delta-1)} \left( -f_{\text{кр}}^{(1)} + f_{60} + f'_2 + I_{00} \right), \quad (7.15)$$

де  $f_{\text{кр}}^{(1)} = 0.4001$ ,  $f_{60} = -1.264$ ,  $f'_2 = 0.347$ ,  $I_{00} = 1.959$ . Основний вклад до коефіцієнта  $\gamma_3$  ( $\gamma_3 = 0.718$ ) пов'язаний з величиною  $I_{00}$ , яка характеризує вираз (6.3). Поділ вкладів до вільної енергії (як

<sup>6</sup>Оскільки  $s_0 = \alpha' \pi \sqrt{2b}/c$ , де  $\alpha' > 1$ , то очевидно, що з ростом радіуса ефектної дії потенціалу  $\Phi(r) = Ae^{-r/b}$  ентропія системи (7.15) переходить у вираз для ентропії незваємодіючих спінів. Зокрема, при  $b = b_I = c/2\sqrt{d}$  маємо  $s_0^{(I)} = \frac{\pi \cdot \alpha'}{\sqrt{2d}} = 1.2825 \cdot \alpha'$ ,  $\alpha' = 1.041746$  маємо

$$S_0 = 0.638$$

Приймаючи до уваги, що  $\ln 2 = 0.693$ , знаходимо

$$S = kN(0.693 - 0.055) = 0.638 \cdot kN$$

Як бачимо, навіть при відносно малих значеннях  $b = b_I$  вклад до незваємодіючої частини ентропії при  $T = T_c$  є малий. Для випадку  $b = c$  він становить

$$s_0^{-3}(\gamma'_0 + \gamma_1) \sim 4 \cdot 10^{-3}$$

і є зникаюче малим в порівнянні з  $\ln 2$ .

і інших термодинамічних функцій) на участок критичного режиму флуктуацій і участок ГГР є, взагалі кажучи, умовним. Проте, власне граничному гаусовому режиму відповідає лише вклад  $F_{\text{ГГР}}^{(3)}$  в виразі (6.1). Всі решта вкладів слід відносити до участку КР. Тому, зручно зобразити коефіцієнт  $\gamma_3$  у вигляді

$$\gamma_3 = \gamma_3^{\text{кр}} + \gamma_3^{(\text{ГГР})} \quad (7.16)$$

де

$$\begin{aligned} \gamma_3^{(\text{кр})} &= s^{3(\delta-1)}(-f_{\text{кр}}^{(1)} + f_{60} + f_2') \\ \gamma_3^{(\text{ГГР})} &= s^{3(\delta-1)}I_{00} \end{aligned} \quad (7.17)$$

Підставляючи відповідні числові значення маємо

$$\gamma_3^{(\text{кр})} = -1.471; \quad \gamma_3^{(\text{ГГР})} = 2.189; \quad (7.18)$$

В результаті ентропія системи зображається в вигляді двох доданків

$$S = S_{\text{кр}} + S_{\text{ГГР}}$$

Для першого з них маємо

$$S_{\text{кр}} = kN \left[ S_0 + S_1\tau + S_3^{(\text{кр})}\tau^{1-\alpha} + S_4^{(\text{кр})}\tau^{1+\Delta-\alpha} \right] \quad (7.19)$$

де

$$S_3^{(\text{кр})} = s_0^{-3}3\nu c_\nu^{3\nu} \gamma_3^{(\text{кр})}, \quad S_4^{(\text{кр})} = s_0^{-3}(3\nu + \Delta)c_\nu^{3\nu} c_\Delta \gamma_4^{(\text{кр})} \quad (7.20)$$

Для другого

$$S_{\text{ГГР}} = kN \left[ S_3^{(\text{ГГР})}\tau^{1-\alpha} + S_4^{(\text{кр})}\tau^{1+\Delta-\alpha} \right] \quad (7.21)$$

де

$$S_3^{(\text{ГГР})} = s_0^{-3}3\nu c_\nu^{3\nu} \gamma_3^{(\text{ГГР})}, \quad S_4^{(\text{ГГР})} = s_0^{-3}(3\nu + \Delta)c_\nu^{3\nu} c_\Delta \gamma_4^{(\text{ГГР})} \quad (7.22)$$

причому

$$\begin{aligned} \gamma_4^{(\text{кр})} &= s^{3(\delta-1)} \left( -f_{\text{кр}}^{(3)} + f_{61} + 3\nu\Phi_0(f_{60} + f_2') \right) \\ \gamma_4^{(\text{ГГР})} &= s^{3(\delta-1)} (I_{01} + 3\nu\Phi_0 I_{00}) \end{aligned} \quad (7.23)$$

Коефіцієнти  $\gamma_4^{(\text{кр})}$  та  $\gamma_4^{(\text{ГГР})}$  є універсальними величинами

$$\gamma_4^{(\text{кр})} = 6.170; \quad \gamma_4^{(\text{ГГР})} = -5.773 \quad (7.24)$$

На рис.4 приведена температурна залежність ентропії (7.13) (крива 1), при  $b = b_I$ . Тут ж приведені залежності її вкладів  $S_{\text{кр}}$  (крива 2).

Слід зауважити, що температурний хід ентропії (її спадання при пониженні температури) забезпечується вкладом від участку граничного гаусового режиму. Виконання розрахунку ентропії в рамках ренормгрупового підходу приводить до виразу (7.19). Для всіх  $\tau < \tau^*$  він має неправильну температурну залежність, оскільки приводить до зростання ентропії із зменшенням температури. Поясненням цього явища є виникнення в системі нового типу симетрії - симетрії ренормалізаційної групи.

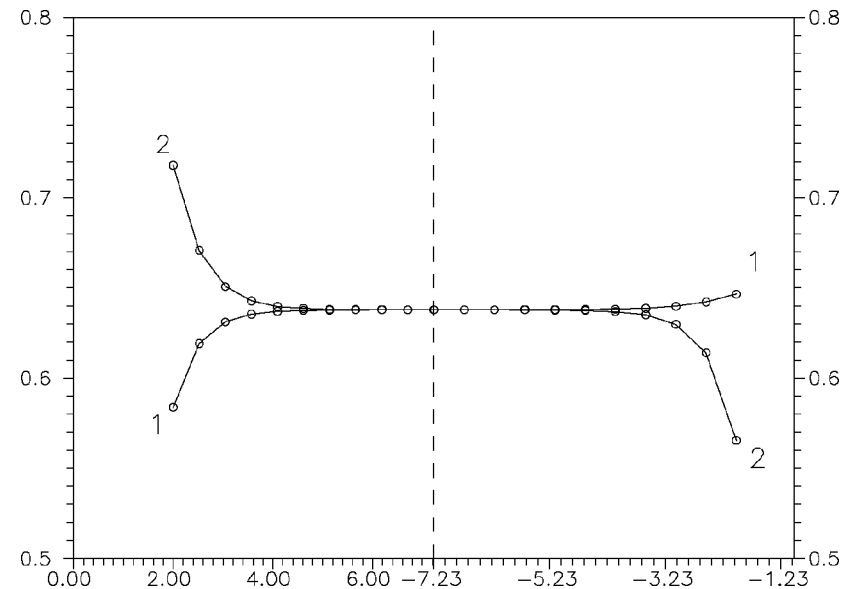


Рис. 4. Поведінка ентропії системи (крива 1) при  $b = b_I$ . Криві 2 - вклади від участку КР.

Теплоємність системи в околі точки ФП розраховується за формулою

$$C = -T \left( \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_V$$

і записується у вигляді

$$C = kN \left[ C_0 + C_3^{(+)}\tau^{-\alpha} + C_4^{(+)}\tau^{-\alpha+\Delta} + 0(\tau^{1-\alpha}, \tau^{1+\Delta-\alpha}) \right] \quad (7.25)$$



де

$$\begin{aligned} C_0 &= 2s_0^{-3}(\gamma_1 + \gamma_2) \\ C_3^{(+)} &= 3\nu(3\nu - 1)s_0^{-3}c_\nu^{3\nu}\gamma_3 \\ C_4^{(+)} &= (3\nu + \Delta)(3\nu + \Delta - 1)s_0^{-3}c_\nu^{3\nu}c_\Delta\gamma_4 \end{aligned} \quad (7.26)$$

Оскільки  $\alpha = 2 - 3\nu$  є додатнім, то основний вклад в теплоємність системи визначається доданком

$$C_s^{(+)} = kN C_3^{(+)} \tau^{-\alpha}$$

Коефіцієнт  $C_3^{(+)}$  складається з двох множників

$$C_3^{(+)} = C_{30}^{(+)} \cdot C_b$$

Перший з них є універсальною величиною

$$C_{30}^{(+)} = (3\nu)(3\nu - 1)\gamma_3,$$

і у випадку виконання (6.13) рівний  $C_{30}^{+} = 1.079$  Другий множник залежить від мікроскопічних параметрів системи

$$C_b = s_0^{-3}c_\nu^{3\nu}$$

Незалежний від температури вклад до теплоємності описується коефіцієнтом  $C_0$  і є від'ємним. Так, при  $b = c$

$$\gamma_1 + \gamma_2 = -1.975$$

Температурна залежність теплоємності приведена на рис.5. (крива 1). Тут же показані вклади для  $C_{кр}$  із (7.18) (крива 2) та  $C_{ггр}$  із (7.30) (крива 3). Тільки завдяки наявності доданку  $C_{ггр}$  теплоємність системи стає додатньою і має правильну температурну залежність. При  $b > c$  це значення практично не змінюється, а при  $b < c$  воно дещо зменшується (по абсолютній величині) (див. табл.3). Так при  $b = 0.3c$  маємо

$$\gamma_1 + \gamma_2 = -1.432$$

Умовою стабільності системи є нерівність

$$C_0 + C_3^+ \tau^{-\alpha} + C_4^+ \tau^{\Delta - \alpha} > 0 \quad (7.27)$$

Якщо не приймати до уваги останній доданок в (7.27), маємо

$$C_3^+ \tau^{-\alpha} > -C_0$$

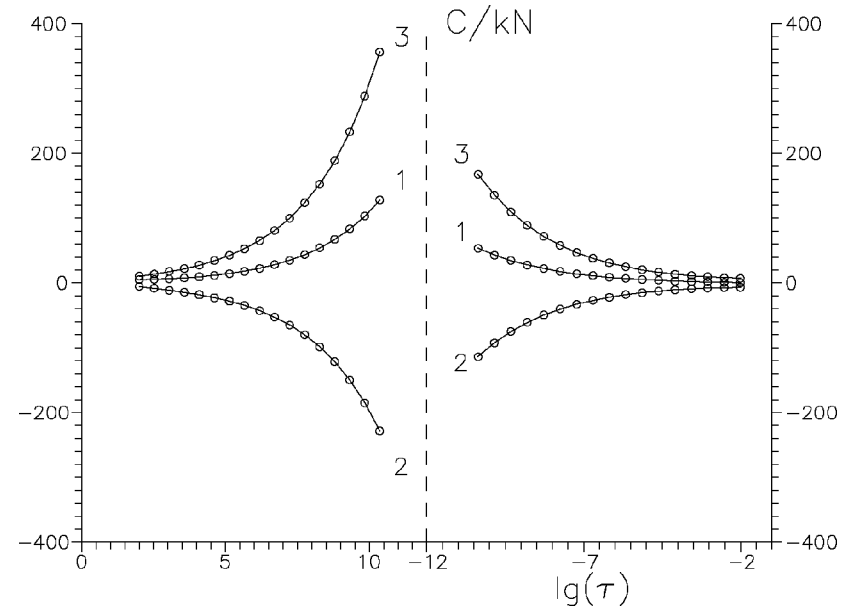


Рис. 5. Температурна залежність теплоємності (крива 1) в критичній області при  $b = b_I$ . Криві 2 відповідають вкладам КР, криві 3 - вкладам від частків ГР та ІГР при  $\tau > 0$  та  $\tau < 0$  відповідно.

Або

$$\tau^* < \left( \frac{C_3^+}{-C_0} \right)^{-1/3\alpha} \sim \left( \frac{3\nu(3\nu - 1)c_\nu^{3\nu}\gamma_3}{-2(\gamma_1 + \gamma_2)} \right)^{-1/\alpha}$$

При  $b = 0.3$  знаходимо

$$\tau < \left( \frac{1.824 \cdot 0.824 \cdot (2.3256)^{1.824} \cdot 0.718}{2 \cdot 1.432} \right)^{-1/\alpha} \rightarrow 0.04$$

Температурна область  $\tau < 0.04$  включає в себе критичну область, для якої виконані розрахунки. Теплоємність (7.25) є додатньою величиною для всіх  $\tau < \tau^*$ , де  $\tau^* \sim 10^{-2}$ .

Виділимо в теплоємності вклади від граничного гаусового режиму подібно до того, як це було зроблено для виразу для ентропії

(7.19), (7.21). Маємо

$$C_{\text{кр}} = kN \left[ C_0 + C_3^{(\text{кр})} \tau^{-\alpha} + C_4^{(\text{кр})} \tau^{\Delta-\alpha} \right], \quad (7.28)$$

де

$$\begin{aligned} C_3^{(\text{кр})} &= 3\nu(3\nu-1)s_0^{-3}c_\nu^{3\nu}\gamma_3^{(\text{кр})} \\ C_4^{(\text{кр})} &= (3\nu+\Delta)(3\nu+\Delta-1)s_0^{-3}c_\nu^{3\nu}c_\Delta\gamma_3^{(\text{кр})} \end{aligned} \quad (7.29)$$

Оскільки  $\gamma_3^{(\text{кр})} < 0$ , то і  $C_3^{(\text{кр})}$  є від'ємною величиною при  $\tau \ll 1$ .

$$C_{\text{грр}} = kN \left[ C_3^{(\text{грр})} \tau^{-\alpha} + C_4^{(\text{грр})} \tau^{\Delta-\alpha} \right], \quad (7.30)$$

де

$$\begin{aligned} C_3^{(\text{грр})} &= 3\nu(3\nu-1)s_0^{-3}c_\nu^{3\nu}\gamma_3^{(\text{грр})} \\ C_4^{(\text{грр})} &= (3\nu+\Delta)(3\nu+\Delta-1)s_0^{-3}c_\nu^{3\nu}c_\Delta\gamma_3^{(\text{грр})} \end{aligned} \quad (7.31)$$

Причому

$$C = C_{\text{кр}} + C_{\text{грр}}$$

Визначимо сприйнятливість системи. Скористаємося з формули

$$\chi = -\frac{\partial^2 F}{\partial h^2}$$

при  $h \rightarrow 0$ . Використовуючи в якості  $F$  вираз (7.6) знаходимо питому сприйнятливість

$$\chi = \chi_0^{(+)} \tau^{-\gamma} (1 + \chi_1^{(+)} c_\Delta \tau^\Delta) \quad (7.32)$$

де  $\gamma = 2\nu$ ,

$$\begin{aligned} \chi_0^{(+)} &= 2kT f_h^{(0)} = \frac{1}{\Phi(0) D_0} c_\nu^{-\gamma} s^{2(1-\delta')} \\ \chi_1^{(+)} &= f_h^{(1)} = -2\nu\Phi_0 - D_1 \end{aligned} \quad (7.33)$$

## 8. Розрахунок статистичної суми при температурах нижчих за критичну.

Приведені результати розрахунку вільної енергії нижче точки фазового переходу. Виконане порівняння вкладів до вільної енергії системи від участку КР та вкладів довгохвильових флуктуацій. Виділена

частина вільної енергії, що відповідає за впорядкування в системі. Отриманий мікроскопічний аналог вільної енергії Ландау.

Загальна схема розрахунку термодинамічних функцій в критичній області при  $T < T_c$  не відрізняється від методики її розрахунку, яка була застосована вище для випадку  $T > T_c$ . Статистична сума при температурах нижчих за  $T_c$  зображається у вигляді

$$\begin{aligned} Z &= 2^N e^{\mathcal{M}_0 N} Q_0 Q_1 \dots Q_{\mu_\tau} 2^{(N_{\mu_\tau+1}-1)/2} \times \\ &\times [Q(P_{\mu_\tau})]^{N_{\mu_\tau+1}} \int W_{\mu_\tau+1}(\rho) (d\rho)^{N_{\mu_\tau+1}} \end{aligned} \quad (8.1)$$

Такий запис відповідає інтегруванню по  $n = \mu_\tau$  шарах фазового простору КЗ і обґрунтований в (1.17)-(1.28). Для  $W_{\mu_\tau+1}(\rho)$  маємо вираз

$$\begin{aligned} W_{\mu_\tau+1}(\rho) &= \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{\mu_\tau+1}} d_{\mu_\tau+1}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \right. \\ &\left. - \frac{1}{4!} \frac{a_{\mu_\tau+1}}{N_{\mu_\tau+1}} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \leq B_{\mu_\tau+1}}} \rho_{\vec{k}_1} \dots \rho_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_4} \right] \end{aligned} \quad (8.2)$$

де

$$d_{\mu_\tau+1}(k) = a_2^{(\mu_\tau+1)} - \beta\Phi(k).$$

Коефіцієнти  $a_2^{(\mu_\tau+1)}$ ,  $a_{\mu_\tau+1}$  виражаються через їх початкові значення  $a'_2, a'_4$  та величину  $\beta\Phi(0)$  з допомогою РС. Єдиною, однак, суттєвою відмінністю (8.1) від відповідного виразу для випадку  $T > T_c$  є заміна точки виходу системи з КР із  $m_\tau$  на  $\mu_\tau$ . Вираз для  $m_\tau$  задається співвідношеннями (4.24)-(4.26). Умова для знаходження  $m_\tau$  тісно пов'язана з рівністю (4.20). Оскільки виконується нерівність  $d_{n+1}(k) \geq d_n(k)$  (див.[4]), то з (4.20) слідує, що для всіх  $n \geq m_\tau + 1$  виконується нерівність  $d_n(k) \geq 0$ . З точки зору фізики фазового переходу ця нерівність означає, що за відсутності зовнішнього поля в системі не може бути відмінного від нуля параметра порядку. У випадку  $T < T_c$  умова (4.20) не буде мати місця, оскільки  $d_n(0)$  приймає від'ємні значення при всіх значеннях  $n$ . Більше того, виявляється, що можна знайти таке  $n = \mu_\tau$ , при якому не лише  $d_{\mu_\tau+1}(0) < 0$ , але й  $d_{\mu_\tau+1}(k) \leq 0$  при всіх  $k \in [0, B_{\mu_\tau+1})$ ,  $B_{\mu_\tau+1} = B' s^{-(\mu_\tau+1)}$ . Еволюція кривих  $d_n(k)$  з ростом  $n$  при  $T > T_c$  та  $T < T_c$  приведена на Рис.6.

Зрозуміло, що від'ємність коефіцієнта  $d_{\mu_\tau+1}(0)$  при другій степені змінної  $\rho_{\mathbf{k}}$  в (8.2) (при позитивності  $a_{\mu_\tau+1}$ ) є свідченням про наявність в системі рівнянь Ейлера

$$-d_{\mu_\tau+1}(k)\rho_{\mathbf{k}} - \frac{a_{\mu_\tau+1}}{3!} \frac{1}{N_{\mu_\tau+1}} \sum_{k_1, k_2, k_3} \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \rho_{\mathbf{k}_3} \delta_{k_1+k_2+k_3} = 0$$

точки біфуркації [4]. Однак твердження про наявність спонтанного параметра порядку може бути передчасним, оскільки  $d_{\mu_\tau+1+m}(k) \geq d_{\mu_\tau+1}(k)$ . Розглянемо детальніше характер зміни коефіцієнтів  $d_{\mu_\tau+m}(0)$  та  $a_{\mu_\tau+m}$  з ростом  $m$  і покажемо, що при  $T < T_c$  в системі виникає відмінний від нуля параметр порядку. Означимо точку виходу системи з КР при  $T < T_c$ . Скористаємося для цього з рівності

$$\frac{r_{\mu_\tau+\delta} - r^*}{r^*} = \delta \quad (8.3)$$

При  $\delta = \delta^*$  вона еквівалентна фізичній умові

$$d_{\mu_\tau+\delta}(B_{\mu_\tau+\delta}) = 0$$

Дійсно, остання умова може бути переписана в вигляді

$$r_{\mu_\tau+\delta} = -\beta\Phi(0)(\alpha')^{-2},$$

а для (8.3) маємо

$$r_{\mu_\tau+\delta} = r^*(\delta + 1) = -\beta\Phi(0)f_0(\delta + 1)$$

Вони співпадають, коли

$$\delta^* = \frac{(\alpha')^{-2}}{f_0} - 1 \approx 0.842$$

Порівняємо отримане значення  $\delta^*$  із значенням  $\delta = 1$ , яке слідує з умови (4.20). Легко бачити, що при температурах вищих і нижчих за критичну величина КР визначається однакою чином при умові  $\delta \geq 1$ . В цьому випадку коефіцієнт  $d_n(0)$  приймає додатні значення при  $n > m_\tau + \delta$  ( $T > T_c$ ), а величина  $d_n(B_n)$  є від'ємною при  $n > m_\tau + \delta$  ( $T < T_c$ ). В подальших розрахунках величина  $\delta$  буде виступати в якості параметра. У випадку  $\delta = 1$  маємо ситуацію, зображену на Рис.6. При  $\delta \geq 1$  поведінка  $d_n(k)$  буде близькою до неї<sup>7</sup>.

<sup>7</sup>Слід, однак, зауважити, що  $\delta$  не може значно перевищувати одиницю. Це пов'язано з тим, що поблизу фіксованої точки величини  $r_n = s^{2n}d_n(0)$  та  $u_n = s^{4n}a_4^{(n)}$  мають бути близькими до  $r^*$  та  $u^*$  відповідно ( $n = m_\tau + \delta$ ).

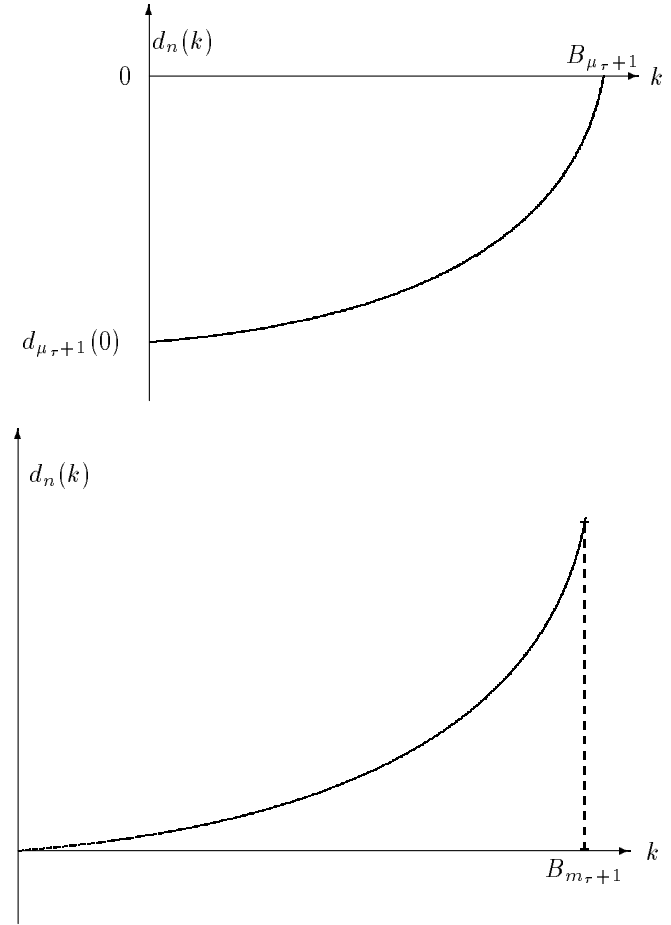


Рис. 6. Означення точки виходу системи з КР. Точка  $B_{m_\tau+1}$  (випа-док а) відповідає температурам  $T > T_c$ . Точка  $B_{\mu_\tau+1}$  (випа-док б) – температурам  $T < T_c$ .

Використаємо умову (8.3) для знаходження величини  $\mu_\tau$ . Приймаючи до уваги розв'язки РС (2.51), знаходимо

$$\mu_\tau = -\frac{\ln(-\tau)}{\ln E_1} + \mu_0 + \mu_\Delta (-\tau)^\Delta - \delta, \quad (8.4)$$

де  $E_1$  – більше власне значення матриці РГ перетворення (2.47),

$$\begin{aligned} \mu_0 &= \ln \left( \frac{f_0 \beta \Phi(0) \delta}{\tilde{c}_{11}} \right) / \ln E_1 \\ \mu_\Delta &= \mu_2 / \ln E_1, \quad \mu_2 = c'_\Delta \Phi_0 \\ c'_\Delta &= (c'_\nu)^\Delta \frac{c_2}{(\beta_c \Phi(0))^2 \delta}, \quad c'_\nu = \frac{\tilde{c}_{11}}{f_0 \beta \Phi(0) \delta}, \quad \Phi_0 = \frac{R^{(0)}}{f_0 \sqrt{\varphi_0}} \end{aligned} \quad (8.5)$$

Вирази для  $\mu_0$  та  $m_0$  із (4.23) є однаковими ( $\mu_0 = m_0$ ). Крім того, виконуються рівності  $c_\nu = c'_\nu$  та  $c_\Delta = c'_\Delta$ . Різні значення приймають лише коефіцієнти  $\mu_2$  та  $m_2$  із (4.25), однак  $\mu_2 = -m_2$ .

Розрахунок вільної енергії при  $T < T_c$  здійснюється на основі (8.1) відповідно до методики, запропонованої вище, для випадку  $T > T_c$ . Вільна енергія зображається у вигляді декількох доданків

$$F = F_0 + F_1 + F'_{\text{кр}} + F_{\text{igr}} \quad (8.6)$$

Вираз для  $F_0$  співпадає з відповідним доданком із (5.1), а для  $F_1$  із (5.8)-(5.10). Вони є однаковими для температур вищих і нижчих за  $T_c$ . Вільна енергія від участку КР при  $T < T_c$  обчислюється згідно до формули

$$F'_{\text{кр}} = \sum_{n=1}^{\mu_\tau} F_n, \quad (8.7)$$

де для  $F_n$  справедливий вираз (5.26). Для виконання операції сумування по  $n$  в (8.7) будемо використовувати співвідношення

$$\begin{aligned} c_1 E_1^{\mu_\tau+1} &= -\beta \Phi(0) f_0 \delta E_1^{1-\delta} (1 + \Phi_0 c'_\Delta (-\tau)^\Delta), \\ E_2^{\mu_\tau+1} &= (c'_\nu)^\Delta (-\tau)^\Delta E_2^{1-\delta}, \\ s^{-3(\mu_\tau+1)} &= s^{3(\delta-1)} c'^{3\nu}_\nu (-\tau)^{3\nu} (1 - 3\nu \Phi_0 c'_\Delta (-\tau)^\Delta), \end{aligned} \quad (8.8)$$

які подібні до (5.39). Після обчислення (8.7) знаходимо

$$\begin{aligned} F'_{\text{кр}} &= -kTN' f_{\text{кр}}^{(0)} - kTN' \left[ \gamma'_5 c'^{3\nu}_\nu (-\tau)^{3\nu} + \right. \\ &\quad \left. + \gamma'_6 c'^{3\nu}_\nu c'_\Delta (-\tau)^{3\nu+\Delta} \right] \end{aligned} \quad (8.9)$$

Для  $f_{\text{кр}}^{(0)}$  маємо співвідношення

$$f_{\text{кр}}^{(0)} = f_{\text{кр}}^{(00)} + f_{\text{кр}}^{(01)} \tau + f_{\text{кр}}^{(02)} \tau^2. \quad (8.10)$$

Коефіцієнти  $f_{\text{кр}}^{(0l)}$  приймають ті самі значення, що і у випадку  $T > T_c$  і приведені в (5.34). Для коефіцієнтів  $\gamma'_5$  та  $\gamma'_6$  маємо

$$\begin{aligned} \gamma'_5 &= -s^{3(\delta-1)} f_{\text{кр}}^{1L} \\ \gamma'_6 &= -s^{3(\delta-1)} f_{\text{кр}}^{3L} \end{aligned} \quad (8.11)$$

Тут  $\gamma'_5 = 1.844$ ,  $\gamma'_6 = 5.878$ .

Для величин  $\gamma_{\text{кр}}^{lL}$  маємо

$$\begin{aligned} f_{\text{кр}}^{(1L)} &= \left( t_{00} - t_{01} \delta E_1^{1-\delta} f_0 (\varphi_0)^{-1/2} + \right. \\ &\quad \left. + t_{03} \delta^2 E_1^{2(1-\delta)} f_0^2 (\varphi_0)^{-1} \right), \\ f_{\text{кр}}^{(3L)} &= f_{\text{кр}}^{(2L)} - 3\nu \Phi_0 f_{\text{кр}}^{(1L)}, \end{aligned}$$

причому

$$\begin{aligned} f_{\text{кр}}^{(2L)} &= \left[ -R^{(0)} \varphi_0^{-1} t_{01} \delta E_1^{1-\delta} + t_{02} \delta \varphi_0^{-1} E_2^{1-\delta} + \right. \\ &\quad \left. + 2R^{(0)} f_0 \varphi_0^{-3/2} t_{03} \delta^2 E_1^{2(1-\delta)} - t_{05} f_0 \varphi_0^{-3/2} \delta^2 (E_1 E_2)^{1-\delta} \right] \end{aligned} \quad (8.12)$$

Слід зауважити, що величини  $f_{\text{кр}}^{(lL)}$  є універсальними і не залежать від мікроскопічних параметрів системи. Для значень параметрів, приведених в (6.13) знаходимо

$$f_{\text{кр}}^{1L} = 1.650, \quad f_{\text{кр}}^{2L} = 1.066, \quad f_{\text{кр}}^{3L} = 5.262$$

Приступимо до розрахунку вкладу до вільної енергії системи від області інверсного гаусового режиму  $F_{\text{igr}}$  із (8.6)

$$F_{\text{igr}} = -kTN \ln Z_{\text{igr}} \quad (8.13)$$

Приймаючи до уваги (8.1), знаходимо

$$Z_{\text{igr}} = 2^{(N_{\mu_\tau+1}-1)/2} Q(P_{\mu_\tau})^{N_{\mu_\tau+1}} \int W_{\mu_\tau+1}(\rho) (d\rho)^{N_{\mu_\tau+1}} \quad (8.14)$$

Для розрахунку вкладу від  $Q(P_{\mu_\tau})$  використаємо представлення (5.12)

$$Q(P_{\mu_\tau}) = z_0 (4\pi\gamma\sqrt{6})^{-1/2} (u_{\mu_\tau})^{1/4} s^{-\mu_\tau} \times \\ \times (1 + p_{11}h_{\mu_\tau} + p_{12}h_{\mu_\tau}^2) \quad (8.15)$$

Обчислимо вираз для  $h_{\mu_\tau} = (r_{\mu_\tau} + q)(u_{\mu_\tau})^{-1/2}$ . Маємо

$$r_{\mu_\tau} = -\beta\Phi(0) \left[ r_{\mu_\tau}^{(0)} + r_{\mu_\tau}^{(1)} c'_\Delta(-\tau)^\Delta \right] \quad (8.16)$$

де

$$r_{\mu_\tau}^{(0)} = f_0(1 + \delta)E_1^{-\delta}, \quad r_{\mu_\tau}^{(1)} = -f_0\delta\Phi_0[E_2^{-\delta} - E_1^{-\delta}]$$

для (6.13) маємо

$$(r_{\mu_\tau}^{(0)} = 0.5640, \quad r_{\mu_\tau}^{(1)} = 1.8325) \quad (8.17)$$

Подібним чином запишемо

$$u_{\mu_\tau} = (\beta\Phi(0))^2 \left[ u_{\mu_\tau}^{(0)} + u_{\mu_\tau}^{(1)} c'_\Delta(-\tau)^\Delta \right] \quad (8.18)$$

Тут

$$u_{\mu_\tau}^{(0)} = \varphi_0 - \sqrt{\varphi_0} f_0 \delta R_1^{(0)} E_1^{-\delta}, \\ u_{\mu_\tau}^{(1)} = \delta(E_2^{-\delta} - R_1^{(0)} R^{(0)} E_1^{-\delta}).$$

для (6.13) маємо

$$(u_{\mu_\tau}^{(0)} = 0.5767, \quad u_{\mu_\tau}^{(1)} = 0.3831) \quad (8.19)$$

В результаті для величини  $h_{\mu_\tau}$  знаходимо

$$h_{\mu_\tau} = h_{\mu_\tau}^{(0)} (1 + h_{\mu_\tau}^{(1)} c'_\Delta(-\tau)^\Delta) \quad (8.20)$$

де введені позначення

$$h_{\mu_\tau}^{(0)} = -\frac{f_0 \delta E_1^{-\delta}}{\sqrt{u_{\mu_\tau}^{(0)}}}, \\ h_{\mu_\tau}^{(1)} = \frac{r_{\mu_\tau}^{(1)}}{f_0 \delta} E_1^\delta - \frac{1}{2} \frac{u_{\mu_\tau}^{(1)}}{u_{\mu_\tau}^{(0)}} \quad (8.21)$$

Підставляючи (8.21), (8.18) в (8.15) знаходимо вклад до вільної енергії від  $Q(P_{\mu_\tau})$

$$F_{6L} = -kTN_{\mu_\tau+1} \ln Q(P_{\mu_\tau}) = -kTN' s^{3(\delta-1)} \times \\ \times \left[ f_{60L} c_\nu'^{3\nu}(-\tau)^{3\nu} + f_{61L} c_\nu'^{3\nu} c'_\Delta(-\tau)^{3\nu+\Delta} \right] + F'_{6L} \quad (8.22)$$

де

$$f_{60L} = \left\{ \ln z_0 - \frac{1}{2} \ln(4\pi\gamma\sqrt{6}) + \right. \\ \left. + \frac{1}{4} \ln u_{\mu_\tau}^{(0)} + p_{11} h_{\mu_\tau}^{(0)} + (p_{12} - \frac{1}{2} p_{11}^2) (h_{\mu_\tau}^{(0)})^2 \right\}, \\ f_{61L} = \left[ \frac{1}{4} u_{\mu_\tau}^{(1)} (u_{\mu_\tau}^{(0)})^{-1} + p_{11} h_{\mu_\tau}^{(0)} h_{\mu_\tau}^{(1)} + \right. \\ \left. + 2(p_{12} - \frac{1}{2} p_{11}^2) h_{\mu_\tau}^{(1)} (h_{\mu_\tau}^{(0)})^2 \right] - 3\nu\Phi_0 f_{60L} \quad (8.23)$$

(або  $f_{60L} = -1.354$ ,  $f_{61L} = -4.495$  при (6.13)). Слід зауважити, що до складу (8.22) входить додатковий член

$$F'_{6L} = -kTN_{\mu_\tau+1} (-\mu_\tau \ln s + \frac{1}{2} \ln \beta\Phi(0)), \quad (8.24)$$

як це мало місце і у випадку  $T > T_c$  (вираз (6.14)).

Ми не будемо звертати на нього особливої уваги, оскільки точно такий самий доданок (з протилежним знаком) буде присутнім в подальших розрахунках (див.(9.5)). В результаті вони компенсують один одного.

Вклад до вільної енергії від множника  $2^{(N_{\mu_\tau+1}-1)/2}$  із (8.14) має вигляд

$$F' = -kTN' s^{3(\delta-1)} \left[ f'_0 (c'_\nu)^{3\nu}(-\tau)^{3\nu} + f'_1 (c'_\nu)^{3\nu} c'_\Delta(-\tau)^{3\nu+\Delta} \right], \quad (8.25)$$

де

$$f'_0 = \frac{1}{2} \ln 2, \quad f'_1 = f'_0 3\nu\Phi_0 \quad (8.26)$$

У випадку (6.13) знаходимо  $f'_0 = 0.347$ ,  $f'_1 = -0.881$ .

Повний вклад до вільної енергії системи від участку інверсного гаусового режиму (вираз для відповідної йому парціальної статистичної суми приведений в (8.15)) включає три доданки. Перші два з них обчислені в (8.22) та (8.25). Третій доданок має вигляд

$$F_{\mu_{\tau+1}} = -kT \ln Z_{\mu_{\tau+1}} \quad (8.27)$$

Для  $Z_{\mu_{\tau+1}}$  маємо

$$Z_{\mu_{\tau+1}} = \int W_{\mu_{\tau+1}}(\rho) (d\rho)^{N_{\mu_{\tau+1}}}, \quad (8.28)$$

де вираз для  $W_{\mu_{\tau+1}}(\rho)$  приведений в (8.2). Запишемо його коефіцієнти  $d_{\mu_{\tau+1}}(0)$  та  $a_{\mu_{\tau+1}}$  у вигляді

$$d_{\mu_{\tau+1}}(0) = s^{-2(\mu_{\tau+1})} r_{\mu_{\tau+1}}, a_{\mu_{\tau+1}} = s^{-4(\mu_{\tau+1})} u_{\mu_{\tau+1}} \quad (8.29)$$

Тоді для  $r_{\mu_{\tau+1}}$  знаходимо

$$r_{\mu_{\tau+1}} = -\beta\Phi(0)(r_{10} + r_{11}c'_{\Delta}(-\tau)^{\Delta}), \quad (8.30)$$

де

$$\begin{aligned} r_{10} &= f_0(1 + \delta E_1^{1-\delta}), \\ r_{11} &= f_0\Phi_0\delta(E_1^{1-\delta} - E_2^{1-\delta}) \end{aligned} \quad (8.31)$$

(для значень параметрів із (6.13) маємо  $r_{10} = 0.9846$ ,  $r_{11} = 0.0632$ ).

Слід зауважити, що як  $r_{\mu_{\tau}}$  так і  $r_{\mu_{\tau+1}}$  (при  $\tau \rightarrow 0$ ) є від'ємними величинами, причому  $|r_{\mu_{\tau+1}}| > |r_{\mu_{\tau}}|$ . Приймаючи до уваги, що

$$r_{\mu_{\tau+l}} = s^{2(\mu_{\tau+l})}(a_2^{(\mu_{\tau+l})} - \beta\Phi(0))$$

бачимо, що зростання  $l$  приводить до росту (за абсолютною величиною)  $r_{\mu_{\tau+l}}$ . Для  $u_{\mu_{\tau+1}}$  маємо

$$u_{\mu_{\tau+1}} = (\beta\Phi(0))^2 [u_{10} + u_{11}c'_{\Delta}(-\tau)^{\Delta}] \quad (8.32)$$

Тут

$$\begin{aligned} u_{10} &= \varphi_0 - R_1^{(0)}\sqrt{\varphi_0}f_0\delta E_1^{1-\delta}, \\ u_{11} &= \delta(E_2^{1-\delta} - R_1^{(0)}R^{(0)}E_1^{1-\delta}) \end{aligned} \quad (8.33)$$

( $u_{10} = 0.5203$ ,  $u_{11} = 1.1507$ ).

Отримані вище формули (8.30), (8.32) дозволяють сформулювати два твердження. Перше з них пов'язане з негативністю і ростом за модулем величини  $r_{\mu_{\tau+l}}$  зі зростанням  $l$ .

Твердження 1. При  $T > T_c$  величина  $r_{m_{\tau+l}}$  є додатною і зростає при збільшенні  $l$ . Наслідком такого росту є встановлення граничного гаусового режиму. У випадку  $T < T_c$  величина  $r_{\mu_{\tau+1}}$  також зростає за абсолютною величиною, залишаючись від'ємною. Ситуація, коли величина  $h_{\mu_{\tau+l}}$  зростає по абсолютній величині, але є від'ємною, приводить до встановлення інверсного гаусового режиму (ІГР) флуктуацій.<sup>8</sup> Вона обумовлена наявністю в системі відмінного від нуля параметра порядку.

Подальші обчислення (8.28) доцільно проводити в термінах зміщених змінних. Виконаємо заміну змінних

$$\rho_{\mathbf{k}} = \rho'_{\mathbf{k}} + \sigma\delta_{\mathbf{k}10} \quad (8.34)$$

В результаті знаходимо [15]

$$\begin{aligned} Z_{\mu_{\tau+1}} &= \exp[E(\sigma) + E(h)] \int \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \leq B_{\mu_{\tau+1}}} \bar{d}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \right. \\ &\quad - \frac{1}{3!} \frac{b_{\mu_{\tau+1}}}{\sqrt{N_{\mu_{\tau+1}}}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_3 \\ \mathbf{k}_i \leq B_{\mu_{\tau+1}}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_3} - \\ &\quad - \frac{1}{4!} \frac{a_{\mu_{\tau+1}}}{\sqrt{N_{\mu_{\tau+1}}}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_i \leq B_{\mu_{\tau+1}}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} + \\ &\quad \left. + \beta\sqrt{N}h\rho_0 \right] (d\rho)^{N_{\mu_{\tau+1}}} \end{aligned} \quad (8.35)$$

Тут введені позначення

$$\begin{aligned} E(\sigma) &= -\frac{1}{2}d_{\mu_{\tau+1}}(0)\sigma^2 - \frac{1}{24} \frac{a_{\mu_{\tau+1}}}{N_{\mu_{\tau+1}}}\sigma^4; \\ E(h) &= \beta\sqrt{N}h\sqrt{N_{\mu_{\tau+1}}}b_{\mu_{\tau+1}}/a_{\mu_{\tau+1}} \end{aligned} \quad (8.36)$$

<sup>8</sup>Зауважимо, що величина  $u_{\mu_{\tau+l}}$  є завжди позитивною. Це слідує з загальних рекурентних співвідношень. В даних розрахунках використовується наближена формула

$$u_{\mu_{\tau+l}} = (\beta\Phi(0))^2 [u_{10} + u_{11}c'_{\Delta}(-\tau)^{\Delta}],$$

яка має місце поблизу фіксованої точки. При  $\tau \rightarrow 0$  знак  $u_{\mu_{\tau+l}}$  визначається величиною

$$u_{10} = \varphi_0 - R_1^{(0)}\sqrt{\varphi_0}f_0\delta E_1^{1-\delta},$$

яка повинна бути додатною.

де  $h$ - мале зовнішнє поле,

$$b_{\mu_{\tau+1}} = \sigma a_{\mu_{\tau+1}} (N_{\mu_{\tau+1}})^{-1/2} \quad (8.37)$$

Величина зміщення  $\sigma$  знаходиться з умови

$$\frac{\partial E(\sigma)}{\partial \sigma} = 0$$

і рівна

$$\sigma = \pm [-6d_{\mu_{\tau+1}}(0)N_{\mu_{\tau+1}}(a_{\mu_{\tau+1}})^{-1}]^{1/2} \quad (8.38)$$

Приймаючи до уваги, що

$$\bar{d}(0) = -2d_{\mu_{\tau+1}}(0) > 0 \quad (8.39)$$

бачимо, що  $\sigma$  приймає дійсні значення

$$\sigma = \pm [3\bar{d}(0)N'(u_{\mu_{\tau+1}})^{-1}s^{\mu_{\tau+1}}]^{1/2} \quad (8.40)$$

Величина  $\sigma$  є пропорційною до параметра порядку. Щоб знайти істинний параметр порядку слід врахувати вклади від змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$  із (8.35). Використаємо для цього методику розрахунку запропоновану в [4,15]. Виділимо в (8.35) вклади від  $\rho_0$  окремо. Маємо

$$\begin{aligned} Z_{\mu_{\tau+1}} = \exp[E(\sigma) + E(h)] \int d\rho_0 \exp \left\{ \beta\sqrt{N}h\rho_0 - \right. \\ \left. - \frac{1}{2}\bar{d}(0)\rho_0^2 - \frac{b_{\mu_{\tau+1}}}{6\sqrt{N_{\mu_{\tau+1}}}}\rho_0^3 - \frac{a_{\mu_{\tau+1}}}{24N_{\mu_{\tau+1}}}\rho_0^4 \right\} \times \\ \times \int (d\rho)^{N_{\mu_{\tau+1}}-1} \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \bar{d}(k)\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}} \right] \times \\ \times \exp(p_0 + p_1\rho_0 + p_2\rho_0^2) \end{aligned} \quad (8.41)$$

Величини  $p_l$  мають вигляд

$$\begin{aligned} p_0 = -\frac{b_{\mu_{\tau+1}}}{6\sqrt{N_{\mu_{\tau+1}}}} \sum_{k_i}^l \rho_{\vec{k}_1} \cdots \rho_{\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_1+\dots+\vec{k}_3} \\ - \frac{a_{\mu_{\tau+1}}}{24N_{\mu_{\tau+1}}} \sum_{k_i}^l \rho_{\vec{k}_1} \cdots \rho_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1+\dots+\vec{k}_4}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p_1 = -\frac{b_{\mu_{\tau+1}}}{2\sqrt{N_{\mu_{\tau+1}}}} \sum_{\mathbf{k}}^l \rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}} \\ - \frac{a_{\mu_{\tau+1}}}{6N_{\mu_{\tau+1}}} \sum_{k_i}^l \rho_{\vec{k}_1} \cdots \rho_{\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_1+\dots+\vec{k}_3}, \\ p_2 = -\frac{a_{\mu_{\tau+1}}}{4N_{\mu_{\tau+1}}} \sum_{\mathbf{k}}^l \rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (8.42)$$

Сума здійснюється по всіх  $|\vec{k}_i| \leq B_{\mu_{\tau+1}}$ , а штрих біля сум по  $k_i$  вказує на відсутність доданків з  $k = 0$ . Виконаємо в (8.41) інтегрування по всіх  $\rho_{\mathbf{k}}$  з  $k \neq 0$ .

$$\begin{aligned} Z_{\mu_{\tau+1}} = \exp[E(\sigma) + E(h) - \beta F_m] \prod_{k \neq 0}^{B_{\mu_{\tau+1}}} (\pi/\bar{d}(k))^{1/2} \times \\ \times \int \exp \left( \sum_{n=1}^4 A_n \rho_0^n \right) d\rho_0 \end{aligned} \quad (8.43)$$

Для  $F_m$  маємо вираз

$$\begin{aligned} -\beta F_m = \frac{1}{4}N_{\mu_{\tau+1}} \left[ -\frac{1}{2}a_{\mu_{\tau+1}}I_1^2 + \frac{1}{3}b_{\mu_{\tau+1}}^2I_3 + \right. \\ \left. + \frac{a_{\mu_{\tau+1}}^2}{12}I_4 + \frac{1}{4}a_{\mu_{\tau+1}}^2I_1^2I_2 \right], \end{aligned} \quad (8.44)$$

а коефіцієнти  $A_n$  виражаються співвідношеннями

$$\begin{aligned} A_1 = \beta\sqrt{N}h + \frac{1}{2}(N_{\mu_{\tau+1}})^{1/2} [-b_{\mu_{\tau+1}}I_1 + \\ + \frac{1}{3}a_{\mu_{\tau+1}}b_{\mu_{\tau+1}}(I_3 + \frac{3}{2}I_1I_2)], \\ A_2 = d_{\mu_{\tau+1}}(0) - \frac{1}{4}a_{\mu_{\tau+1}}I_1 + \frac{1}{8}a_{\mu_{\tau+1}}^2I_1I_2 + \\ + \frac{1}{4}b_{\mu_{\tau+1}}^2I_2 + \frac{1}{3}a_{\mu_{\tau+1}}^2I_3, \\ A_3 = -\frac{1}{6}b_{\mu_{\tau+1}}(N_{\mu_{\tau+1}})^{-1/2}(1 - \frac{3}{2}a_{\mu_{\tau+1}}I_2), \\ A_4 = -\frac{1}{24}a_{\mu_{\tau+1}}(N_{\mu_{\tau+1}})^{-1}(1 - \frac{3}{2}a_{\mu_{\tau+1}}I_2) \end{aligned} \quad (8.45)$$

Значення величин  $I_m$  приведені в [15] і рівні<sup>9</sup>

$$I_m = \alpha_m (\beta \Phi(0))^{-m} s^{2m(\mu_r+1)} \quad (8.46)$$

Коефіцієнти  $\alpha_m$  зображаються у вигляді

$$\alpha_m = \alpha_m^{(0)} (1 + \alpha_m^{(1)} c'_{\Delta}(-\tau)^{\Delta}) \quad (8.47)$$

При  $m = 1$  знаходимо

$$\alpha_1^{(0)} = \frac{1}{2} L^{(0)} / r_{10}, \quad \alpha_1^{(1)} = \frac{r_{11}}{r_{10}} + \frac{L^{(1)}}{L^{(0)}} \quad (8.48)$$

де

$$L^{(0)} = \frac{3}{(x_r^{(0)})^3} (x_r^{(0)} - \arctg x_r^{(0)}),$$

$$L^{(1)} = 3x_r^{(1)} \left[ \frac{1}{1 + (x_r^{(0)})^2} - L^{(0)} \right], \quad (8.49)$$

а  $x_r^{(l)}$  є коефіцієнтами розкладу величини

$$x_r = (\bar{d}(0))^{-1/2} \quad (8.50)$$

в формі

$$x_r = x_r^{(0)} (1 + x_r^{(1)} c'_{\Delta}(-\tau)^{\Delta}) \quad (8.51)$$

де

$$x_r^{(0)} = (2r_{10})^{-1/2}, \quad x_r^{(1)} = r_{11}/(2r_{10}) \quad (8.52)$$

<sup>9</sup>Слід зауважити, що в загальному вигляді величини  $I_m$  мають наступний вигляд

$$I_1 = \frac{1}{N_{\mu_r+1}} \sum_{B_{\mu_r+1}}^{k \neq 0} (\bar{d}(k))^{-1}, \quad I_2 = \sum_r g^2(r),$$

де

$$g(r) = \frac{1}{N_{\mu_r+1}} \sum_{B_{\mu_r+1}}^{k \neq 0} (\bar{d}(k))^{-1} e^{i\bar{k}\bar{r}}, \quad I_3 = \sum_r g^3(r), \quad I_4 = \sum_r g^4(r)$$

Для  $\alpha_2^{(l)}$  знаходимо

$$\alpha_2^{(0)} = (\alpha_1^{(0)})^2 + 6e_1^2(1 + \epsilon_2^2),$$

$$\alpha_2^{(1)} = (\alpha_2^{(0)})^{-1} \left[ 2(\alpha_1^{(0)})^2 \alpha_1^{(1)} + 12e_1^2 g^{(1)}(1 + \epsilon_2^2) \right] \quad (8.53)$$

Тут введені позначення

$$g^{(1)} = 4r_{11}/(1 + 4r_{10}), \quad \epsilon_1 = 6[\pi^2(4r_{10} + 1)]^{-1},$$

$$\epsilon_2 = \frac{1}{2\pi} \left[ \sin(\pi\sqrt{2}) - \pi\sqrt{2}\cos(\pi\sqrt{2}) \right] \approx 3.4861 \cdot 10^{-2}. \quad (8.54)$$

Для  $\alpha_3^{(l)}$  та  $\alpha_4^{(l)}$  маємо

$$\alpha_3^{(0)} = (\alpha_1^{(0)})^3 + 6e_1^3(1 + \epsilon_2^3/\sqrt{2}),$$

$$\alpha_4^{(0)} = (\alpha_1^{(0)})^4 + 6e_1^4(1 + \epsilon_2^4/2),$$

$$\alpha_3^{(1)} = (\alpha_3^{(0)})^{-1} \left[ 3(\alpha_1^{(0)})^3 \alpha_1^{(1)} + 18e_1^3 g^{(1)}(1 + \epsilon_2^3/\sqrt{2}) \right]$$

$$\alpha_4^{(1)} = (\alpha_4^{(0)})^{-1} \left[ 4(\alpha_1^{(0)})^4 \alpha_1^{(1)} + 24e_1^4 g^{(1)}(1 + \epsilon_2^4/2) \right]$$

Числові значення цих коефіцієнтів для (6.13) наступні

$$\alpha_1^{(0)} = 0.3935 \quad \alpha_1^{(1)} = 0.0503$$

$$\alpha_2^{(0)} = 0.2458 \quad \alpha_2^{(1)} = 0.1013$$

$$\alpha_3^{(0)} = 0.0721 \quad \alpha_3^{(1)} = 0.1513$$

$$\alpha_4^{(0)} = 0.0254 \quad \alpha_4^{(1)} = 0.2014 \quad (8.55)$$

Виконаємо тепер в інтегралі (8.43) зворотну заміну змінних до тієї, яка була виконана в (8.34).

$$\rho_0 = \rho'_0 - \sigma \quad (8.56)$$

Це дозволяє повернутися до істинних змінних, пов'язаних з густиною спінового моменту. В результаті такої зміни, для  $Z_{\mu_r+1}$  одержимо

$$Z_{\mu_r+1} = \exp(-\beta F'_{\mu_r+1}) \int \exp \left[ \beta \sqrt{N} \rho_0 h + B \rho_0^2 - \frac{G}{N} \rho_0^4 \right] d\rho_0 \quad (8.57)$$



де

$$\begin{aligned}
-\beta F'_{\mu_{\tau+1}} = N_{\mu_{\tau+1}} & \left[ \frac{3}{4} \bar{d}(0) I_1 + \frac{9}{16} (\bar{d}(0))^2 I_2 - \frac{1}{8} a_{\mu_{\tau+1}} I_1^2 + \right. \\
& + \frac{1}{48} a_{\mu_{\tau+1}}^2 (I_4 + 3I_1^2 I_2) - \frac{1}{8} b_{\mu_{\tau+1}}^2 I_1 I_2 - \\
& \left. - \frac{1}{2} \frac{1}{N_{\mu_{\tau+1}}} \sum'_{k \leq B_{\mu_{\tau+1}}} \ln(\bar{d}_{\mu_{\tau+1}}(k)/\pi) \right] \quad (8.58)
\end{aligned}$$

Показник експоненти підінтегральної функції в (8.58) являє собою мікроскопічний аналог розкладу Ландау (представлення вільної енергії за степенями параметра порядку). Коефіцієнти цього розкладу  $B$  та  $G$  записуються у вигляді

$$B = -\frac{1}{2} B_1 r_{\mu_{\tau+1}} s^{-2(\mu_{\tau+1})}, G = \frac{1}{24} G_1 s_0^3 u_{\mu_{\tau+1}} s^{-(\mu_{\tau+1})} \quad (8.59)$$

Для величин  $B_1$  та  $G_1$  знаходимо

$$\begin{aligned}
B_1 = 1 + \frac{1}{2} \frac{u_{\mu_{\tau+1}}}{r_{\mu_{\tau+1}}} \frac{\alpha_1}{\beta \Phi(0)} - \frac{3}{2} u_{\mu_{\tau+1}} \frac{\alpha_2}{(\beta \Phi(0))^2} - \\
- \frac{1}{12} \frac{(u_{\mu_{\tau+1}})^2}{r_{\mu_{\tau+1}}} \frac{\alpha_1 \alpha_2 + 2\alpha_3}{(\beta \Phi(0))^3}, \\
G_1 = 1 - \frac{3}{2} u_{\mu_{\tau+1}} \frac{\alpha_2}{(\beta \Phi(0))^2} \quad (8.60)
\end{aligned}$$

Виділимо явну температурну залежність в (8.60). Представимо коефіцієнт  $B_1$  в виді

$$B_1 = B_1^{(0)} + B_1^{(1)} c'_\Delta(-\tau)^\Delta \quad (8.61)$$

де

$$\begin{aligned}
B_1^{(0)} = 1 - \frac{1}{2} \frac{u_{10}}{r_{10}} \alpha_1^{(0)} - \frac{3}{2} u_{10} \alpha_2^{(0)} + \\
+ \frac{1}{4} \frac{(u_{10})^2}{r_{10}} (\alpha_1^{(0)} \alpha_2^{(0)} + \frac{2}{3} \alpha_3^{(0)}), \\
B_1^{(1)} = -\frac{1}{2} \frac{u_{10}}{r_{10}} \alpha_1^{(0)} \left( \frac{u_{11}}{u_{10}} + \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{r_{11}}{r_{10}} + \alpha_1^{(1)}) - \frac{3}{2} u_{10} \alpha_2^{(0)} \left( \frac{u_{11}}{u_{10}} + \alpha_1^{(1)} \right) + \\
& + \frac{1}{6} \frac{(u_{10})^2}{r_{10}} \alpha_3^{(0)} \left( 2 \frac{u_{11}}{u_{10}} + \frac{r_{11}}{r_{10}} + \alpha_2^{(1)} \right) + \\
& + \frac{1}{4} \frac{(u_{10})^2}{r_{10}} \alpha_1^{(0)} \alpha_2^{(0)} \left( 2 \frac{u_{11}}{u_{10}} + \frac{r_{11}}{r_{10}} + \alpha_1^{(1)} + \alpha_2^{(1)} \right) \quad (8.62)
\end{aligned}$$

(або при виконанні (6.13)  $B_1^{(0)} = 0.7141$ ,  $B_1^{(1)} = -0.6399$ ). Для  $G_1$  знаходимо

$$G_1 = G_1^{(0)} + G_1^{(1)} c'_\Delta(-\tau)^\Delta \quad (8.63)$$

Тут

$$\begin{aligned}
G_1^{(0)} = 1 - \frac{3}{2} u_{10} \alpha_2^{(0)}, \\
G_1^{(1)} = -\frac{3}{2} \alpha_2^{(0)} (u_{11} + u_{10} \alpha_2^{(1)}) \quad (8.64)
\end{aligned}$$

(де  $G_1^{(0)} = 0.8081$ ,  $G_1^{(1)} = -0.4438$ , при умовах (6.13)).

Використаємо вирази (8.61) та (8.63) для обчислення температурної залежності коефіцієнтів  $B$  та  $G$  із (8.57). Маємо

$$\begin{aligned}
B = \tilde{b}_0 s^{2(\delta-1)} (c'_\nu)^{2\nu} (-\tau)^{2\nu} (1 + \tilde{b}_1 c'_\Delta(-\tau)^\Delta) \\
G = \tilde{g}_0 s^{\delta-1} s_0^3 (c'_\nu)^\nu (-\tau)^\nu (1 + \tilde{g}_1 c'_\Delta(-\tau)^\Delta) \quad (8.65)
\end{aligned}$$

де введені наступні позначення

$$\begin{aligned}
\tilde{b}_0 = \frac{1}{2} r_{10} B_1^{(0)} \beta \Phi(0), \\
\tilde{b}_1 = \frac{r_{11}}{r_{10}} + \frac{B_1^{(1)}}{B_1^{(0)}} - 2\nu \Phi_0, \\
\tilde{g}_0 = \frac{1}{24} u_{10} G_1^{(0)} (\beta \Phi(0))^2, \\
\tilde{g}_1 = \frac{u_{11}}{u_{10}} + \frac{G_1^{(1)}}{G_1^{(0)}} - \nu \Phi_0 \quad (8.66)
\end{aligned}$$

Розрахунком температурної залежності коефіцієнтів  $B$  та  $G$  закінчується процес розрахунку  $Z_{\mu_{\tau+1}}$ , а цим самим і статистичної суми моделі в критичній області температур при  $T < T_c$ . Вираз (8.57) є кінцевим результатом обчислення статистичної суми.

## 9. Вільна енергія та інші термодинамічні функції однокомпонентної 3D моделі $\rho^4$ в низькотемпературному околі $T_c$ .

Розрахована вільна енергія моделі в низькотемпературній області (9.22). Знайдені відношення критичних амплітуд теплоємності, сприйнятливості, інших величин при температурах вищих та нижчих  $T_c$ . Проведені порівняння з відомими результатами.

Запишемо загальний вираз для вільної енергії системи в критичній області при  $T < T_c$ . Згідно до (8.6) вільна енергія складається з чотирьох доданків

$$F = F_0 + F_1 + F'_{\text{кр}} + F_{\text{igr}} \quad (9.1)$$

Перші два приведені в (7.1) та (5.9). Для  $F'_{\text{кр}}$  маємо вираз (8.9)

$$F'_{\text{кр}} = -kTN' f_{\text{кр}}^{(0)} - kTN' \left[ \gamma'_5 c'_\nu{}^{3\nu} (-\tau)^{3\nu} + \gamma'_6 c'_\nu{}^{3\nu} c'_\Delta (-\tau)^{3\nu+\Delta} \right], \quad (9.2)$$

де формула для  $f_{\text{кр}}^{(0)}$  приведена в (8.10). Для  $\gamma'_5$  та  $\gamma'_6$  маємо вирази (8.11).

При розрахунку  $F_{\text{igr}}$  було виділено три типи доданків

$$F_{\text{igr}} = F_{6L} + F' + F_{\mu_{\tau+1}} \quad (9.3)$$

Для двох перших з них маємо вирази (8.22) та (8.25). Для  $F_{\mu_{\tau+1}}$ , згідно до (8.57), записуємо

$$F_{\mu_{\tau+1}} = F'_{\mu_{\tau+1}} + F''_{\mu_{\tau+1}} \quad (9.4)$$

Тут

$$F'_{\mu_{\tau+1}} = -kTN_{\mu_{\tau+1}} [\bar{F}_0 + \bar{F}_1 c'_\Delta (-\tau)^\Delta] - F'_{6L} \quad (9.5)$$

Вираз для  $F'_{6L}$  співпадає з (8.24) і входить з протилежним знаком. Він компенсує вклади до вільної енергії системи в формулі (8.22), які пропорційні до  $(-\tau)^{3\nu} \ln(-\tau)$ .

Для коефіцієнтів  $\bar{F}_l$  отримуємо

$$\begin{aligned} \bar{F}_0 &= \frac{3}{2} r_{10} \alpha_1^{(0)} + \frac{9}{4} r_{10}^2 \alpha_2^{(0)} - \frac{1}{8} u_{10} (\alpha_1^{(0)})^2 + \frac{1}{48} u_{10}^2 (\alpha_4^{(0)} + \\ &\quad + 3(\alpha_1^{(0)})^2 \alpha_2^{(0)}) - \frac{3}{4} r_{10} u_{10} \alpha_1^{(0)} \alpha_2^{(0)} + \frac{1}{2} \ln(\pi s^2) - \\ &\quad - \frac{1}{2} \ln(1 + 2r_{10}) + \frac{1}{3} - 2r_{10} \left( 1 - (\sqrt{2r_{10}}) \operatorname{arctg} \frac{1}{\sqrt{2r_{10}}} \right), \\ \bar{F}_1 &= \frac{3}{2} \alpha_1^{(0)} (r_{11} + r_{10} \alpha_1^{(1)}) + \frac{9}{4} \alpha_2^{(0)} r_{10} (2r_{11} + r_{10} \alpha_2^{(1)}) - \\ &\quad - \frac{1}{8} (\alpha_1^{(0)})^2 (u_{11} + 2u_{10} \alpha_1^{(1)}) + \\ &\quad + \frac{1}{48} u_{10}^2 \left[ \alpha_4^{(0)} \alpha_4^{(1)} + 3(\alpha_1^{(0)})^2 \alpha_2^{(0)} (2\alpha_1^{(1)} + \alpha_2^{(1)}) + 2 \frac{u_{11}}{u_{10}} (\alpha_4^{(0)} + \right. \\ &\quad \left. + 3(\alpha_1^{(0)})^2 \alpha_2^{(0)}) \right] - \frac{3}{4} \alpha_1^{(0)} \alpha_2^{(0)} (r_{10} u_{11} + u_{10} r_{11} + \\ &\quad + r_{10} u_{10} (\alpha_1^{(1)} + \alpha_2^{(1)})) - 3r_{11} \left( 1 - (\sqrt{2r_{10}}) \operatorname{arctg} \frac{1}{\sqrt{2r_{10}}} \right) \end{aligned} \quad (9.6)$$

Приймаючи до уваги останню рівність із (8.8) із (9.5) знаходимо

$$F'_{\mu_{\tau+1}} = -kTN' s^{3(\delta-1)} [f_{70L} (c'_\nu)^{3\nu} (-\tau)^{3\nu} + f_{71L} (c'_\nu)^{3\nu} c'_\Delta (-\tau)^{3\nu+\Delta}] \quad (9.7)$$

де

$$f_{70L} = \bar{F}_0, f_{71L} = \bar{F}_1 - 3\nu \Phi_0 f_{70L} \quad (9.8)$$

(або  $f_{70L} = 2.405$ ,  $f_{71L} = 6.171$ )

Вклад до  $F_{\mu_{\tau+1}}$  від другого доданку рівності (9.4) має вигляд

$$F''_{\mu_{\tau+1}} = -kT \ln Z_{\rho_0} \quad (9.9)$$

Вираз для  $Z_{\rho_0}$  впливає із формули (8.57)

$$Z_{\rho_0} = \int \exp \left[ \beta \sqrt{N} \rho_0 h + B \rho_0^2 - \frac{G}{N} \rho_0^4 \right] d\rho_0 \quad (9.10)$$

Зважаючи на макроскопічний характер змінної  $\rho_0$ , виконаємо в (9.10) заміну змінних

$$\rho_0 = \rho'_0 \sqrt{N} \quad (9.11)$$

Тоді в термінах змінної  $\rho'_0$ , яка не є макроскопічною величиною, маємо

$$Z_{\rho_0} = (N)^{1/2} \int \exp [N\beta h \rho'_0 + NB(\rho'_0)^2 - GN(\rho'_0)^4] d\rho'_0 \quad (9.12)$$

Розрахунок даного інтегралу може бути виконаний за методом перевалу, оскільки підінтегральна функція має різкий максимум в точці  $\bar{\rho}$ . Покладемо  $h = 0$  і знайдемо точку екстремуму експоненти в (9.12).

$$\bar{\rho}^2 = B/2G \quad (9.13)$$

Вираз для  $\bar{\rho}$  із врахуванням (8.65) може бути записаний у вигляді

$$\bar{\rho} = \bar{\rho}_0 (s_0)^{-3/2} s^{(\delta-1)/2} (c'_\nu)^\beta (-\tau)^\beta (1 + \bar{\rho}_1 c'_\Delta (-\tau)^\Delta) \quad (9.14)$$

де  $\beta = \nu/2$ , а для коефіцієнтів  $\bar{\rho}_l$  маємо

$$\bar{\rho}_0 = \left( \tilde{b}_0/2\tilde{g}_0 \right)^{1/2}, \quad \bar{\rho}_1 = \frac{1}{2} \left( \tilde{b}_1 - \tilde{g}_1 \right) \quad (9.15)$$

Вклад до вільної енергії від (9.12), який не зникає в термодинамічній границі, буде

$$F''_{\mu_{\tau+1}} = -kTN [\beta h \bar{\rho} + B\bar{\rho}^2 - G\bar{\rho}^4] \quad (9.16)$$

Тут присутні два різних за своєю природою доданки.

$$F''_{\mu_{\tau+1}} = F'_h + F_\sigma \quad (9.17)$$

Польова частина вільної енергії

$$F'_h = -Nh\bar{\rho}, \quad (9.18)$$

та термодинамічна частина

$$F_\sigma = -kTN(B\bar{\rho}^2 - G\bar{\rho}^4) = -kTN \frac{B^2}{4G} \quad (9.19)$$

Остання пов'язана з наявністю при  $T < T_c$  відмінного від нуля параметра порядку. Приймаючи до уваги (8.65) та (9.14), маємо

$$F_\sigma = -kTN' s^{3(\delta-1)} \left[ f_\sigma^{(0)} (c'_\nu)^{3\nu} (-\tau)^{3\nu} (1 + f_\sigma^{(1)} c'_\Delta (-\tau)^\Delta) \right] \quad (9.20)$$

де

$$f_\sigma^{(0)} = (\tilde{b}_0)^2/4\tilde{g}_0, \quad f_\sigma^{(1)} = 2\tilde{b}_1 - \tilde{g}_1 \quad (9.21)$$

(приймаючи до уваги (6.13) маємо  $f_{sigma}^{(0)} = 1.764$ ,  $f_{sigma}^{(1)} = -0.784$ ).

Запишемо повний вираз для вільної енергії системи в критичній області при  $T < T_c$ . Будемо виходити з формули (9.1). Тоді, підсумовуючи всі вклади, знаходимо

$$F = -kTN(\ln 2 + \tilde{M}_0) - kTN'[\gamma'_0 + \gamma_1\tau + \gamma_2\tau^2] - kTN'[\gamma_{30}(c'_\nu)^{3\nu}(-\tau)^{3\nu} + \gamma_{31}(c'_\nu)^{3\nu}c'_\Delta(-\tau)^{3\nu+\Delta}] - Nh\bar{\rho} \quad (9.22)$$

Для коефіцієнтів  $\gamma_l$  справедливі формули (5.41). Вони приймають одні і ті ж значення при температурах вищих і нижчих за критичну. Для  $\gamma_{l0}$  маємо вирази

$$\gamma_{30} = \gamma'_{30} s^{3(\delta-1)}, \quad \gamma_{31} = \gamma'_{31} s^{3(\delta-1)}, \quad (9.23)$$

де

$$\begin{aligned} \gamma'_{30} &= -f_{кр}^{1L} + f_{60L} + f'_0 + f_{70L} + f_\sigma^{(0)} \\ \gamma'_{31} &= -f_{кр}^{3L} + f_{61L} + f'_1 + f_{71L} + f_\sigma^{(0)} f_\sigma^{(1)} \end{aligned} \quad (9.24)$$

У випадку виконання (6.13) знаходимо

$$\gamma'_{30} = 1.512, \quad \gamma'_{31} = -5.849$$

$$\gamma_{30} = 1.689, \quad \gamma_{31} = -6.534.$$

Подібно до випадку  $T > T_c$  (див. (7.16) та (7.23)) виділимо в коефіцієнтах  $\gamma_{30}$ ,  $\gamma_{31}$  доданки, що відповідають КР та ІГР. Маємо

$$\gamma_{30} = \gamma_{30}^{(кр)} + \gamma_{30}^{(igr)}, \quad (9.25)$$

де

$$\begin{aligned}\gamma_{30}^{(\text{кр})} &= s^{3(\delta-1)}(-f_{\text{кр}}^{(1L)} + f_{60L} + f'_0) \\ \gamma_{30}^{(\text{ирп})} &= s^{3(\delta-1)}(f_{70L} + f_\sigma)\end{aligned}\quad (9.26)$$

Підставляючи відповідні числові значення, знаходимо

$$\gamma_{30}^{(\text{кр})} = -2.968; \quad \gamma_{30}^{(\text{ирп})} = 4.657$$

Для  $\gamma_{31}$  знаходимо

$$\gamma_{31} = \gamma_{31}^{(\text{кр})} + \gamma_{31}^{(\text{ирп})}\quad (9.27)$$

Тут

$$\begin{aligned}\gamma_{31}^{(\text{кр})} &= s^{3(\delta-1)}(-f_{\text{кр}}^{(3L)} + f_{61L} + f'_1) \\ \gamma_{31}^{(\text{ирп})} &= s^{3(\delta-1)}(f_{71L} + f_\sigma^{(0)} f_\sigma^{(1)}),\end{aligned}\quad (9.28)$$

причому

$$\gamma_{31}^{(\text{кр})} = -11.884; \quad \gamma_{31}^{(\text{ирп})} = 5.350$$

Ентропія системи при  $T < T_c$  має вигляд

$$S_- = kN [S_0 + S_1\tau + S_3\tau(-\tau)^{-\alpha} + S_4\tau(-\tau)^{\Delta-\alpha}],\quad (9.29)$$

де вирази для коефіцієнтів  $S_l$  приведені в (7.14), де  $\gamma_3$  слід замінити на  $\gamma_{30}$ , а  $\gamma_4$  на  $\gamma_{31}$ .

Знайдемо ентропію системи при  $T < T_c$ . Скористаємося для цього з виразу (9.22). Тоді, згідно до (7.12) маємо

$$S_L = kN [S_0 + S_1\tau + S_{30} \cdot \tau(-\tau)^{-\alpha} + S_{40}\tau(-\tau)^{\Delta-\alpha}],\quad (9.30)$$

де  $S_0$  та  $S_1$  співпадають з виразами (7.14),

$$\begin{aligned}S_{30} &= s_0^{-3} \cdot 3\nu(c'_\nu)^{3\nu} \gamma_{30} \\ S_{31} &= s_0^{-3}(3\nu + \Delta)(c'_\nu)^{3\nu} c'_\Delta \gamma_{31}\end{aligned}\quad (9.31)$$

Зобразимо ентропію у вигляді двох доданків

$$S_L = S_{\text{кр}}^{(L)} + S_{\text{ирп}},\quad (9.32)$$

де  $S_{\text{кр}}^{(L)}$  відповідає вкладу від участку критичного режиму і має вигляд (див.(7.19))

$$S_{\text{кр}}^{(L)} = kN [S_0 + S_1\tau + S_{30} \cdot \tau(-\tau)^{-\alpha} + S_{40}^{(\text{кр})} \tau(-\tau)^{\Delta-\alpha}],\quad (9.33)$$

Тут

$$\begin{aligned}S_{30}^{(\text{кр})} &= s_0^{-3} \cdot 3\nu(c'_\nu)^{3\nu} \gamma_{30}^{(\text{кр})} \\ S_{31}^{(\text{кр})} &= s_0^{-3}(3\nu + \Delta)(c'_\nu)^{3\nu} c'_\Delta \gamma_{31}^{(\text{кр})}\end{aligned}\quad (9.34)$$

Для вкладу від участку інверсного гаусового режиму  $S_{\text{ирп}}$  знаходимо (див.(7.21))

$$S_{\text{ирп}} = kN [S_{30}^{(\text{ирп})} \tau(-\tau)^{-\alpha} + S_{40}^{(\text{ирп})} \tau(-\tau)^{\Delta-\alpha}],\quad (9.35)$$

де

$$\begin{aligned}S_{30}^{(\text{ирп})} &= s_0^{-3} 3\nu(c'_\nu)^{3\nu} \gamma_{30}^{(\text{ирп})} \\ S_{31}^{(\text{ирп})} &= s_0^{-3}(3\nu + \Delta)(c'_\nu)^{3\nu} c'_\Delta \gamma_{31}^{(\text{ирп})}\end{aligned}\quad (9.36)$$

Температурна поведінка ентропії (9.31) при  $\tau < 0$  приведена на рис.4 (крива 1). Тут же показаний вклад від участку критичного режиму (крива 2). Як і у випадку  $\tau > 0$ , вклад від участку КР приводить до зростання ентропії при пониженні температури.

Теплоємність системи при  $\tau < 0$  має вигляд

$$C_L = kN [C_0 + C_3^{(-)}(-\tau)^{-\alpha} + C_4^{(-)}(-\tau)^{\Delta-\alpha}],\quad (9.37)$$

де коефіцієнт  $C_0$  приймає однакове значення при температурах більших і менших за критичну (див.(7.26)),

$$\begin{aligned}C_3^{(-)} &= 3\nu(3\nu - 1)s_0^{-3}(c'_\nu)^{3\nu} \gamma_{30} \\ C_4^{(-)} &= (3\nu + \Delta)(3\nu + \Delta - 1)s_0^{-3}(c'_\nu)^{3\nu} c'_\Delta \gamma_{31}\end{aligned}\quad (9.38)$$

Представимо  $C_1$  в виді вкладів від участків КР та ІГР. Маємо

$$C_L = C_L^{(\text{кр})} + C_{\text{ирп}} \quad (9.39)$$

Тут

$$C_L^{(\text{кр})} = kN \left[ C_0 + C_{30}^{(\text{кр})} (-\tau)^{-\alpha} + C_{40}^{(\text{кр})} (-\tau)^{\Delta-\alpha} \right], \quad (9.40)$$

де

$$\begin{aligned} C_{30}^{(\text{кр})} &= 3\nu(3\nu-1)s_0^{-3}(c'_\nu)^{3\nu}\gamma_{30}^{(\text{кр})} \\ C_{40}^{(\text{кр})} &= (3\nu+\Delta)(3\nu+\Delta-1)s_0^{-3}(c'_\nu)^{3\nu}c'_\Delta\gamma_{31}^{(\text{кр})} \end{aligned} \quad (9.41)$$

Для  $C_{\text{ирп}}$  маємо

$$C_{(\text{ирп})} = kN \left[ C_3^{(\text{ирп})} (-\tau)^{-\alpha} + C_4^{(\text{ирп})} (-\tau)^{\Delta-\alpha} \right], \quad (9.42)$$

Тут

$$\begin{aligned} C_3^{(\text{ирп})} &= 3\nu(3\nu-1)s_0^{-3}(c'_\nu)^{3\nu}\gamma_{30}^{(\text{ирп})} \\ C_4^{(\text{ирп})} &= (3\nu+\Delta)(3\nu+\Delta-1)s_0^{-3}(c'_\nu)^{3\nu}c'_\Delta\gamma_{31}^{(\text{ирп})} \end{aligned} \quad (9.43)$$

На рис.5 приведена температурна залежність теплоємності та вклади до неї від участків КР та ГГР. Слід наголосити, що вклад до теплоємності від КР є від'ємним, хоча має правильну температурну асимптотику.

Польова частина вільної енергії записується у вигляді

$$F'_h = -Nh\bar{\rho}s_0^{-3/2}s^{\delta-1/2}(c'_\nu)^\beta(-\tau)^\beta(1+\bar{\rho}_1c'_\Delta(-\tau)^\Delta) \quad (9.44)$$

Перш ніж приступити до обчислення інших термодинамічних функцій, як ентропія, теплоємність і т.д., знайдемо сприйнятливості системи. Для цього повернемося до розрахунку інтегралу (9.12). Будемо вважати, що  $h \rightarrow 0$ , однак  $h \neq 0$ . Тоді точка екстремуму підінтегрального виразу знаходиться з рівняння

$$\beta h + 2B\rho_h - 4G\rho_h^3 = 0 \quad (9.45)$$

Коефіцієнти отриманого кубічного рівняння відомі і можна знайти його розв'язки. Оскільки дискримінант відповідного квадратного рівняння від'ємний, то рівняння (9.45) має три різні дійсні корені.

Візьмемо похідну по  $h$ . Тоді, скориставшись співвідношенням для сприйнятливості,

$$\chi = \frac{\partial \rho_h}{\partial h}$$

отримуємо рівняння

$$\beta + 2B\chi - 12G\rho_h^2\chi = 0 \quad (9.46)$$

В границі  $h \rightarrow 0$  знаходимо сприйнятливості системи. В цьому випадку  $\rho_h = \bar{\rho}$  (див.(9.19)) і маємо

$$\chi = \frac{\beta\tilde{\Phi}(0)}{4\tilde{\Phi}(0)}(B)^{-1} \quad (9.47)$$

Або з врахуванням (8.65) знаходимо

$$\chi = \chi_0^{(-)}(-\tau)^{-\gamma}(1 + \chi_1c'_\Delta(-\tau)^\Delta), \quad (9.48)$$

де  $\gamma = 2\nu$ ,

$$\begin{aligned} \chi_0^{(-)} &= s^{2(1-\delta)}(2\Phi(0)r_{10}B_1^{(0)}(c'_\nu)^\gamma)^{-1} \\ \chi_1^{(-)} &= -\tilde{b}_1 = 2\nu\Phi_0 - \frac{r_{11}}{r_{10}} - \frac{B_1^{(1)}}{B_1^{(0)}} \end{aligned} \quad (9.49)$$

Порівняємо (9.48) із аналогічним виразом(7.32) для випадку  $T > T_c$ . Легко бачити, що відношення критичних амплітуд  $\chi_i^{(+)}$  та  $\chi_i^{(-)}$  має характер універсальних величин

$$\begin{aligned} \frac{\chi_0^{(+)}}{\chi_0^{(-)}} &= \left(\frac{c'_\nu}{c_\nu}\right)^\gamma \frac{2r_{10}B_1^{(0)}}{D_0} \\ \frac{\chi_1^{(+)}}{\chi_1^{(-)}} &= \frac{-2\nu\Phi_0 - D_1}{2\nu\Phi_0 - \frac{r_{11}}{r_{10}} - \frac{B_1^{(1)}}{B_1^{(0)}}} \frac{c_\Delta}{c'_\Delta} \left(\frac{c'_\nu}{c_\nu}\right)^\gamma \end{aligned} \quad (9.50)$$

оскільки при  $\tau \rightarrow 0$  маємо, що

$$c_\nu = c'_\nu, c_\Delta = c'_\Delta \quad (9.51)$$

і вираз (9.50) стає універсальною величиною. При цьому

$$\frac{\chi_1^{(+)}}{\chi_1^{(-)}} = 6.14, \quad \frac{\chi_1^{(+)}}{\chi_1^{(-)}} = -0.65$$

При  $\tau \neq 0$  вирази (9.50) будуть мати певну залежність від  $\tau$ , яка повністю визначається температурною поведінкою величин  $c_\nu, c'_\nu$  та  $c_\Delta, c'_\Delta$ .

Розрахунок ентропії, теплоємності та інших термодинамічних функцій при  $T < T_c$  здійснюється за відомими співвідношеннями. Вирази для них формально не відрізняються від (7.13) та (7.25). Необхідно лише замінити коефіцієнт  $\gamma_3$  в (7.14) та (7.26) на  $\gamma_{30}$ , а  $\gamma_4 \rightarrow \gamma_{31}$ . Крім того, величини  $c_\nu$  та  $c_\Delta$  переходять в  $c'_\nu$  та  $c'_\Delta$  відповідно. Це дозволяє знайти відношення критичних амплітуд теплоємності при  $T > T_c$  та  $T < T_c$ . Для основних амплітуд знаходимо

$$\frac{c_3^{(+)}}{c_3^{(-)}} = \left( \frac{c_\nu}{c'_\nu} \right)^{3\nu} \frac{\gamma_3}{\gamma_{30}} \quad (9.52)$$

Для критичних амплітуд, що визначають поправку до скейлінгу, знаходимо

$$\frac{c_4^{(+)}}{c_4^{(-)}} = \left( \frac{c_\nu}{c'_\nu} \right) \frac{c_\Delta}{c'_\Delta} \frac{\gamma_4}{\gamma_{31}} \quad (9.53)$$

Слід підкреслити, що вирази (9.50), (9.52) та (9.53) не залежать від мікроскопічних параметрів системи. Вони містять лише слабку залежність від температури. При  $\tau \rightarrow 0$  маємо

$$\frac{c_3^{(+)}}{c_3^{(-)}} = 0.42, \quad \frac{c_4^{(+)}}{c_4^{(-)}} = -0.06 \quad (9.54)$$

Знайдемо відношення критичних амплітуд теплоємності при  $T > T_c$  та  $T < T_c$  для виразів, які відповідають лише участку КР, тобто області застосування ренормалізаційної групи. Маємо вираз (7.28) при  $\tau > 0$ , та вираз (9.40) для випадку  $\tau < 0$ . Як було встановлено вище, ці вирази є неповними і не описують істинної поведінки. Однак, формально вони подібні до повних виразів (7.25) та (9.37). Маємо

$$\frac{C_3^{(\text{кр})}}{C_{30}^{(\text{кр})}} = \left( \frac{c_\nu}{c'_\nu} \right)^{3\nu} \frac{\gamma_3^{(\text{кр})}}{\gamma_{30}^{(\text{кр})}}$$

Оскільки  $c_\nu = c'_\nu$  при  $\tau \rightarrow 0$ , то

$$\frac{C_3^{(\text{кр})}}{C_{30}^{(\text{кр})}} = \frac{-1.471}{-2.968} = 0.50 \quad (9.55)$$

Для відношення критичних амплітуд теплоємності, що визначають поправки до скейлінгу знаходимо

$$\frac{C_4^{(\text{кр})}}{C_{40}^{(\text{кр})}} = \frac{\gamma_4^{(\text{кр})}}{\gamma_{34}^{(\text{кр})}} = \frac{6.170}{-11.884} = -0.52 \quad (9.56)$$

Порівнюючи (9.55) та (9.56) з (9.54) бачимо, що відношення основних амплітуд теплоємності змінюється несуттєво. Для амплітуд поправок в обох випадках маємо від'ємну величину.

Запропонована вище схема розрахунку термодинамічних характеристик системи є наближеною. Вона реалізована на фізичному рівні строгості. Підвищення точності розрахунків пов'язане, зокрема, з використанням вищих негаусових густин міри. Це не приводить до труднощів принципового характеру. До позитивних сторін здійсненого вище розрахунку відноситься систематичність одержання основних характеристик фазового переходу тривимірних систем. В даній схемі розрахунку можна прослідкувати як за поведінкою неуніверсальних характеристик моделі і їх залежності від мікроскопічних параметрів моделі, так і обчислити універсальні характеристики. Важливим моментом є розрахунок температури фазового переходу на мікроскопічному рівні та дослідження її залежності від співвідношення радіуса ефективної дії потенціалу та параметрів кристалічної ґратки, на якій розглядається модель. Саме можливість дослідження залежності від мікроскопічних параметрів вихідної системи різноманітних фізичних величин поблизу точки фазового переходу створює передумови застосування цього методу розрахунку до опису фазових переходів широкого класу тривимірних систем.

#### Додаток 1.

Дослідження впливу величини області параболічної апроксимації потенціалу (величини  $\alpha'$  в (6)) на критичну поведінку моделі.

Запропонований вище метод опису фазового переходу ґрунтується на модельному підході. При цьому результати обчислень залежать від параметрів, які задають модель. Серед них радіус дії потенціалу  $b$  (або безрозмірний параметр  $b/c$ , де  $c$  – стала ґратки),  $\Phi(0)$  – значення фур'є-образу потенціалу при  $k = 0$ . Крім того, в процесі

розрахунків нами введена величина  $\alpha' (\alpha' > 1)$ . Як було відзначено вище (див. формули (5)-(7)), зростання  $\alpha'$  зменшує область параболічної апроксимації (5) та одночасно дещо збільшує значення величини  $\bar{\Phi}$ . Зокрема, при  $b = b_I$  маємо:

$$\bar{\Phi} = \begin{cases} 0.152 & \text{при } \alpha' = 1.00 \\ 0.197 & \text{при } \alpha' = 1.04 \\ 0.243 & \text{при } \alpha' = 1.10 \end{cases}$$

Не змінюючи загальної картини ФП, величина параметра  $\alpha'$  змінює фактично параметри вихідного потенціалу взаємодії. При цьому критичні показники моделі не змінюються. Значення відношень критичних амплітуд теплоємності і сприйнятливості для температур вищих і нижчих за критичну знаходяться в межах

$$C_+/C_- = 0.425 \pm 0.005$$

$$\chi_+/\chi_- = 6.20 \pm 0.10$$

Слід зауважити, що з ростом  $\alpha'$  ці відношення ближчі до верхньої границі, а при  $\alpha' \rightarrow 1$  маємо мінімальні значення.

Інша ситуація має місце при обчисленні неуніверсальних величин. Зміна  $\alpha'$  впливає на значення температури фазового переходу, оскільки по-суті ми маємо справу з новою моделлю, яка має інші параметри. На рис.Д1 приведена залежність величини  $\beta_c \Phi(0)$  для деяких значень параметра  $\alpha$ . Крива 3 відповідає значенню  $\alpha' = 1.04$  (див. рис.Д1).

#### Додаток 2.

Обчислимо температурну залежність виразу  $\ln Q(d_0)$ , який входить до складу вільної енергії

$$F' = -kTN' \ln Q(d_0)$$

В загальному вигляді для  $Q(d_0)$  маємо формулу (1.23). В наближенні моделі  $\rho^4$  знаходимо

$$\ln Q(d_0) = \frac{1}{2} \ln 2\pi + \frac{1}{4} \ln(3/a_4') + \frac{1}{4} (x')^2 + \ln U(0, x')$$

Коефіцієнт  $a_4'$  визначений в (14) і залежить від температури. Згідно до (3.7) та (4.7) він може бути записаний в вигляді

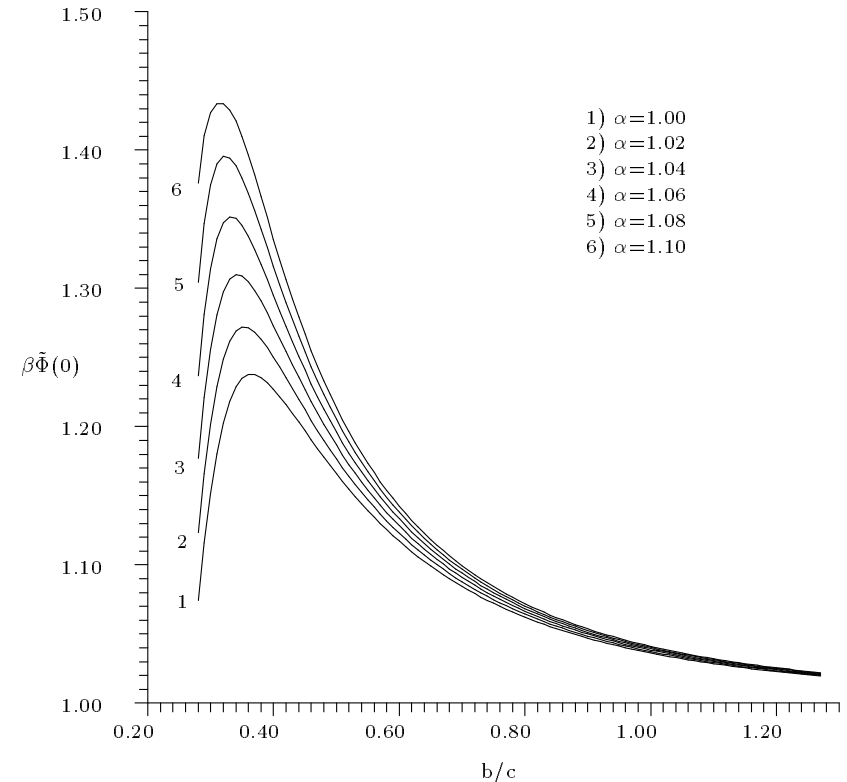


Рис. 7. Характер залежності  $\beta_c \Phi(0)$  від  $b/c$  для різних значень  $\alpha'$  (кривій 1 відповідає  $\alpha' = 1.00$ , кривій 2 -  $\alpha' = 1.02$ , кривій 3 -  $\alpha' = 1.04$  і т.д.). Легко бачити, що при збільшенні  $b/c$  криві для  $\beta_c \Phi(0)$  перестають залежати від параметра  $\alpha'$ . Із збільшенням параметра  $\alpha'$  величина  $\beta_c \Phi(0)$  зростає.

$$a'_4 = a_{40} + a_{41}\tau + a_{42}\tau^2,$$

де коефіцієнти  $a_{4i}$  приведені (4.8).

При малих значеннях  $\tau$  знаходимо

$$-\frac{1}{4}\ln a'_4 = -\frac{1}{4}\ln a_{40} + a_{4c1}\tau + a_{4c2}\tau^2$$

де

$$a_{4c1} = -\frac{1}{4}\frac{a_{41}}{a_{40}}, a_{4c2} = -\frac{1}{4}\left(\frac{a_{42}}{a_{40}} - \frac{1}{2}\left(\frac{a_{41}}{a_{40}}\right)^2\right).$$

Знайдемо вираз для  $x'$ . Відповідно до (1.24), маємо

$$x' = [a'_2 - \beta\Phi(B_1; B')](3/a'_4)^{1/2}$$

Запишемо величину

$$d'_2 = a'_2 - \beta\Phi(B_1, B')$$

у вигляді розкладу за степенями  $\tau$

$$d'_2 = d_{2c0} + d_{2c1}\tau + d_{2c2}\tau^2$$

тут

$$\begin{aligned} d_{2c0} &= a_{20} - (1 - \bar{q})\beta_c\Phi(0), \\ d_{2c1} &= a_{21} + \beta_c\Phi(0)(1 - \bar{q}), \\ d_{2c2} &= a_{22} - \beta_c\Phi(0)(1 - \bar{q}) \end{aligned}$$

Для  $x'$  знаходимо

$$x' = x_0 + x_1\tau + x_2\tau^2,$$

де

$$\begin{aligned} x_0 &= d_{2c0}(3/a_{40})^{1/2} \\ x_1 &= \left(\frac{d_{2c1}}{d_{2c0}} + 2a_{4c1}\right)x_0 \\ x_2 &= \left(\frac{d_{2c2}}{d_{2c0}} + 2\frac{d_{2c1}}{d_{2c0}}a_{4c1} + a_{4c3}\right)x_0 \end{aligned}$$

причому

$$a_{4c3} = \left(\frac{3}{8}\left(\frac{a_{41}}{a_{40}}\right)^2 - \frac{1}{2}\frac{a_{42}}{a_{40}}\right)$$

Запишемо  $\ln U(0, x')$  в вигляді розкладу за степенями  $\tau$

$$\ln U(0, x') = u_{l0} + u_{l1}\tau + u_{l2}\tau^2$$

де

$$\begin{aligned} u_{l0} &= \ln U(0, x_0) \\ u_{l1} &= -\frac{1}{2}x_1(x_0 + U(x_0)) \\ u_{l2} &= -\frac{1}{2}\left[x_2(x_0 + U(x_0)) + \frac{1}{2}x_1^2(1 + U'(x_0))\right] \end{aligned}$$

В результаті

$$\ln Q(d_0) = q_{00} + q_{01}\tau + q_{02}\tau^2$$

де

$$\begin{aligned} q_{00} &= \frac{1}{2}\ln 2\pi + \frac{1}{4}\ln(3/a_{40}) + \frac{1}{4}x_0^2 + u_{l0}, \\ q_{01} &= a_{4c1} + \frac{1}{2}x_0x_1 + u_{l1}, \\ q_{02} &= a_{4c2} + \frac{1}{4}(x_1^2 + 2x_0x_2) + u_{l2}. \end{aligned}$$

У випадку, коли  $x_{00}$  приймає великі значення, для  $q_{0i}$  мають місце наближені співвідношення

$$\begin{aligned} q_{00} &= \frac{1}{2}\ln 2\pi - \frac{1}{2}\ln d_{2c0} - \frac{3}{8}\frac{1}{x_0^2} + \dots \\ q_{01} &= a_{4c1} - \frac{x_1}{2x_0}\left[1 - \frac{3}{2}\frac{1}{x_0^2} + \frac{6}{x_0^4}\right] \\ q_{02} &= a_{4c2} - \frac{1}{2}\frac{x_2}{x_0}\left[1 - \frac{3}{2}\frac{1}{x_0^2} + \frac{6}{x_0^4}\right] + \frac{x_1^2}{4x_0^2}\left[1 - \frac{9}{2}\frac{1}{x_0^2} + 30\frac{1}{x_0^4}\right]. \end{aligned}$$



## Література

1. Yukhnovskii I.R. Riv. Nov. Cim. 1989, v.12, N1, p.1-120.
2. Бом Д. Общая теория коллективных переменных. М.: Мир, 1964. -152с.
3. Юхновский И.Р., Головкин М.Ф. Статистическая теория классических равновесных систем. Київ.: Наукова думка.1985.-372с.
4. Юхновский И.Р. Фазовые переходы второго рода. Метод коллективных переменных. Київ.: Наукова думка.1985.-223с.
5. Юхновский И.Р., Рудаковский Ю.К. Обоснование формы базисного распределения вблизи точки фазового перехода. Докл. АН СССР, 1977. Т.233, N4,-с. 579-582.
6. Козловский М.П., Пылюк И.В., Юхновский И.Р. ТМФ, 1991, т.87, N2, с.293-316.
7. Духовый В.В., Козловский М.П., Пылюк И.В. ТМФ, 1996, т.107, N2, с.288-306.
8. Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V., and Usatenko Z.E. Phys. Stat. Sol. (b), 1996, v.197, p.465-477.
9. Козловський М.П. ТМФ, 1989, т.78, N3, с.422-432.
10. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами. (Под ред. Абрамовиц М., Стиган И.). М.: Наука, 1979,
11. Wilson K.G. Phys. Rev., B, 1971, v.4, N9, p.3174-3183.
12. Вильсон К., Когут Дж. Ренормализационная группа и  $\epsilon$ -разложение. М.: Мир, 1975, 256с.
13. Вакарчук И.А., Рудаковский Ю.К., Юхновский И.Р. ТМФ, 1982, т.50, N2, с.313-320.
14. Вакарчук И.А., Рудаковский Ю.К., Головач Ю.В. УФЖ, 1982, т.27, N11, с.1711-1717.
15. Козловский М.П., Пылюк И.В., Юхновский И.Р. ТМФ, 1991, т.87, N3, с.434-455.
16. Юхновський І.Р., Козловський М.П. УФЖ, 1977, т.22, N7, с.1025-1134.
17. Козловский М.П. Критические свойства модели Изинга. Модель  $\rho^6$ . Приближенный расчет. Препринт ИТФ-82-80Р, Институт теоретической физики АН Украины. Київ, 1982, с.38.
18. Козловский М.П. Критические свойства модели Изинга. Модель  $\rho^6$ . Общие рекуррентные соотношения. Препринт ИТФ-82-104Р. Институт теоретической физики АН Украины. Київ, 1982, с.31.
19. Юхновский И.Р., Мрыглод И.М. Исследование приближенных рекуррентных соотношений  $n$ -компонентной модели для больших

- значений параметра разбиения  $s$ . Препринт ИТФ-84-181Р. Институт теоретической физики АН Украины. Київ, 1984, с.
20. Ідзик І.М. УФЖ, 1991, т.36, N2. с.210-216.
21. Dünweg B. and Landau P.D. Phys. Rev. B., v.48, N19, p.14182-14197.
22. G.A.Bakar. Phys.Rev., 1962, v.126, N6, p.2071-2078.
23. Reich. J.Phys.A., 1984, v.17, p.3553-3558.
24. Гинзбург В.Л. ФТТ, 1960, т.2, N 9, с.2031-2043.
25. Yukhnovskii I.R., Kozlovskii M.P. J. Magnetism and Magnetic Materials, 1995, v.140-144, p.1477-1478.

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

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

Михайло Павлович Козловський  
Ігор Рафаїлович Юхновський

МЕТОД САМОУЗГОДЖЕНОГО ОПИСУ КРИТИЧНОЇ ПОВЕДІНКИ  
ТРИВИМІРНИХ ІЗІНГОПОДІБНИХ СИСТЕМ НА МІКРОСКОПІЧНОМУ  
РІВНІ

Роботу отримано 3 листопада 1997 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу статистичної теорії  
конденсованих систем

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені