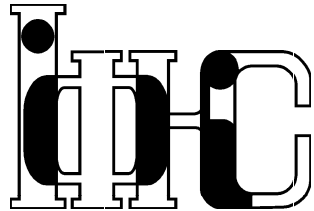


Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

УДК: 530.145

PACS: 05.50.+q; 05.70.Fh; 64.60.-i

ІЗИНГІВСЬКІ ЧИТАННЯ–98 (Львів, 29 квітня 1998)

за редакцією Юрія Головача

Анотація. Збірник містить тексти лекцій про критичні явища, прочитаних підчас "Ізингівських читань" – семінару, присвяченого 98 річчю професора Ернста Ізинга.

ISING LECTURES–98 (Lviv, April, 29 1998)

edited by Yuri Holovatch

Abstract. Texts of lectures on critical phenomena given in the frames of the "Ising lectures" (a workshop dedicated to Professor Ernest Ising 98th anniversary).

ICMP–98–32

ІЗИНГІВСЬКІ ЧИТАННЯ–98

(Львів, 29 квітня 1998)

ISING LECTURES–98

(Lviv, April, 29 1998)

ЛЬВІВ

© Інститут фізики конденсованих систем 1998
Institute for Condensed Matter Physics 1998



Ernest Ising (10.05.1900 – 11.05.1998).

ВСТУП

Розпочаті рік тому Ізингівські читання (див. Журнал фізичних досліджень, т. 1, No 2, 1997, стор. 298) вже можна почати називати традиційними. Організовані вони були, як і минулого року, Інститутом фізики конденсованих систем НАН України спільно з кафедрою теоретичної фізики Львівського державного університету ім. І. Франка.

Модель Ізинга, завдяки якій ім'я цього фізика стало відомим широкому науковому загалу, є, напевно, одним із найяскравіших прикладів як цілий комплекс фізичних проблем можна звести до простої, але надзвичайно ефективною моделі. Багато із того, що було запропоновано пізніше (модель Гайзенберга, модель Поттса, восьмивершинна модель Бакстера, RP^{n-1} моделі) пов'язане з успіхами у вивченні моделі Ізинга і є в тій чи іншій мірі її узагальненням.

Не ставлячи собі за мету буквально використання моделі Ізинга, доповідачі цього річних читань наголошували на математичній чи фізичній спорідненості досліджуваних ними явищ до цієї моделі. Програма читань охоплювала широке коло проблем, зокрема це:

Розрахунок теплоємності в околі λ -переходу в рідкому He^4 (І. Варкарчук, Львівський державний університет ім. І. Франка).

Статистична теорія лавин в процесі самоорганізації (О. Олемської, Сумський державний університет).

Критичні явища в бінарних сумішах (О. Пацаган, ІФКС НАН України).

Поверхневі критичні явища (М. Шпот, ІФКС НАН України).

Оптико-рефракційні дослідження критичних індексів фазових переходів в кристалах (Б. Андрієвський, Львівський державний університет ім. І. Франка).

Вдала побудова програми, на нашу думку, не дозволяла замкнутися як в певному обмеженому колі фізичних проблем, так і на певних методах їх дослідження, даючи деяку панораму як одних, так і других. Енциклопедичність і хороший стиль викладу більшості доповідей, як і академічний інтерес до самої моделі Ізинга дає підстави рекомендувати участь в наступних читаннях більшій кількості молодих вчених та студентів.

Уже після закінчення читань надійшла сумна звістка: в Пеорії (штат Іллінойс, США) 11 травня на 99-му році життя помер професор Ернст Ізинг. Хочеться вірити, що Львівські читання стануть однією із цеглинок в пам'ятнику цьому видатному фізику нашої доби.

Ярослав Ільницький

Зміст

STATISTICAL FIELD THEORY OF HIERARCHICAL AVALANCHE ENSEMBLE (Alexander I. Olemskoi)	4
КРИТИЧНІ ЯВИЩА У БІНАРНИХ СУМІШАХ (Оксана Пацаган)	14
1. Вступ	14
2. Середньопольовий підхід [1], [7] – [9]	15
3. Метод інтегральних рівнянь	16
4. Феноменологічні теорії	17
5. Ієрархічна базисна теорія (HRT)	19
ПОВЕРХНЕВІ КРИТИЧНІ ЯВИЩА (Микола Шпот)	24
1. Модель	25
2. Перенормування	27
3. Спеціальний перехід	29
4. Звичайний перехід	32
5. Довільні вимірності простору: явний розрахунок	34
6. Поверхневі критичні показники тривимірних напівоб- межених систем	34
OPTICAL-AND-REFRACTIVE INVESTIGATIONS OF CRITICAL INDICES OF PHASE TRANSITIONS IN CRYSTALS (Bohdan Andriyevsky)	39
1. Introduction	39
2. Experimental	41
3. Results and Discussion	42
4. Conclusion	47

STATISTICAL FIELD THEORY OF HIERARCHICAL AVALANCHE ENSEMBLE

Alexander I. Olemskoi

*Physical Electronics Department, Sumy State University
2, Rimskii-Korsakov Str., 244007 Sumy UKRAINE
E-mail: Alexander@olem.sumy.ua*

In recent years considerable study has been given to the theory of self-organized criticality (SOC) that explains avalanche dynamics in a variety of systems such as ensemble of grains of sand moving along increasingly tilted surface (sandpile model [1]), intermittency in biological evolution [2], earthquakes and propagation of forest-fires, depinning transitions in random medium and so on (see [3]). The above models had been mostly studied by making use of scaling-type arguments supplemented with extensive computer simulations [4]. By contrast, in this work we put forward the related statistical theory that deals with avalanche ensemble in the course of SOC progressing.

It is known that the SOC process has originated from the evolution of hierarchically subordinated ensemble of avalanches [5,6]. The maximum number of avalanches N is on the bottom hierarchical level $s = 0$ where the avalanche intensity equals f . Correspondingly, there is the only avalanche of the intensity $F \gg f$ on the top level $s = s_0 \gg 1$. The problem is to find the dependencies $N(s)$ and $F(s)$ that define the distribution of avalanche number and their intensity over hierarchical levels $s \in [0, s_0 - 1]$.

The first part of the problem can be approached in terms of geometry by representing the avalanche ensemble as a hierarchical Cayley tree [7,8]. The basic types of the trees are shown in Fig.1: regular tree with integer branching ratio j , regular Fibonacci tree with fractional $j = \tau \approx 1.618$, degenerate tree with the only branching node per level and the tree of our primary concern – irregular tree. Let k be the numbering index for the levels, so that k increases from the top level to the bottom one. The variable

$$s = s_0 - k \quad (1)$$

then defines the distance in the ultrametric space [8,9]. Geometrically, objects of this space correspond to the nodes of the bottom level ($k = s_0$) of a Cayley tree. Since the distance between the nodes is defined by the number of steps to a common ancestor, the distance is eventually the level number (1), counted from the bottom.

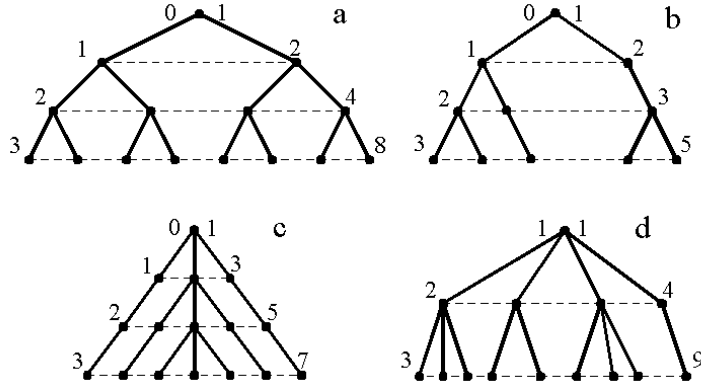


Figure 1. Different types of hierarchical trees (the level number is indicated at left, corresponding number of nodes – at right): a) regular tree with $j = 2$; b) Fibonacci tree; c) degenerate tree with $j = 3$; d) irregular tree.

As it can be seen in Fig.1a, in the simplest case of regular tree with integer branching ratio j the number of avalanches $N_k = j^k$ exponentially decays to zero with the distance s between them:

$$N(s) = N \exp(-s \ln j), \quad N \equiv j^{s_0}. \quad (2)$$

In Eq.(2) the equality (1) is used and the avalanche number N is related to the total number of levels s_0 . For the Fibonacci tree (see Fig. 1b), where $N_k = q\tau^k$, $q \approx 1.171$, $\tau \approx 1.618$ [7], we have

$$N(s) = N \exp(-s \ln \tau), \quad N \equiv q\tau^{s_0}. \quad (3)$$

When Eq.(3) is compared with Eq.(2), it is clear that the exponential decay remains unaltered in the case of fractional branching ratio and characterizes the regularity of tree.

For the degenerate tree (see Fig.1c) $N_k = (j - 1)k + 1$ and Eq.(1) provides the following linear dependence

$$N(s) = N - (j - 1)s, \quad N \equiv (j - 1)s_0 + 1. \quad (4)$$

It can be shown that in the case of irregular tree, displayed in Fig.1d, the power law dependence is realized:

$$N_k = k^a, \quad a > 1. \quad (5)$$

The latter can be regarded as an intermediate case between the exponential Eqs.(2,3) and linear Eq.(4) rates obtained for the limiting cases of regular and degenerate trees, respectively. It is convenient to rewrite Eq.(5) in term of the distance

$$N_k = N(1 - s/s_0)^a, \quad N \equiv s_0^a, \quad a > 1. \quad (6)$$

Formally, the approximation (5) means that a function $N(x)$ defined on the self-similar set of hierarchically subordinated avalanches is homogeneous, $N(kx) = k^a N(x)$.

Let us define F_k as an intensity of avalanches on the k -th level, so that the density of hierarchical current can be taken in the form:

$$g_k = -D(F_k) \frac{dF_k}{dk}, \quad (7)$$

where the effective diffusion coefficient

$$D(F) = DF^{-\alpha} \quad (8)$$

depends on the constant $D > 0$ and the exponent α . The basic assumption of this section is that the total current of all avalanches at given level is independent of the hierarchical level:

$$g_k N_k = const \equiv J. \quad (9)$$

Inserting Eqs.(6-8) into Eq.(9) gives the avalanche intensity

$$F_k = F k^{-b}, \quad b = (a - 1)/(1 - \alpha) > 0 \quad (10)$$

normalized by the maximum value $F \equiv F_{k=1}$. Introducing the distance (1), we get

$$F(s) = f(1 - s/s_0)^{-b}, \quad (11)$$

where the intensity at the bottom level $s = 0$ is

$$f \equiv F s_0^{-b} = F N^{-b/a}. \quad (12)$$

After generalizing Eqs.(10,12), the following scaling relation can be obtained

$$F_k = N^{b/a} f_k k^{-b} \quad (13)$$

where f_k is a slowly varying function. According to Eqs.(7-9), this function obeys the Landau-Khalatnikov equation:

$$\frac{dx}{d\kappa} = -\frac{\partial V}{\partial x}, \quad (14)$$

where

$$\kappa = \ln k^b, \quad x = f_k/f_c, \quad f_c^{1-\alpha} \equiv (J/bD) N^{-(a-1)/a} \quad (15)$$

and the effective potential is

$$V = \frac{x^{1+\alpha}}{1+\alpha} - \frac{x^2}{2}. \quad (16)$$

As indicated in Fig.2, the potential V reaches its maximum value $V_0 = (1-\alpha)/2(1+\alpha)$ at $x = 1$ and decreases indefinitely at $x > 1$. So, in order to initiate the global avalanche formation, a low intensity avalanche with $f < f_c$ at the bottom level needs to penetrate the barrier V_0 of the potential (16). It implies fluctuation mechanism for the SOC regime progressing provided that x is a stochastic variable and we proceed with Langevin-type equation derived from Eq.(14) by adding a Gaussian white noise to the right hand side:

$$\frac{dx}{d\kappa} = -\frac{\partial V}{\partial x} + \zeta, \quad (17)$$

$$\langle \zeta \rangle = 0, \quad \langle \zeta(\kappa)\zeta(\kappa') \rangle = 2D\delta(\kappa - \kappa'), \quad (18)$$

where the noise intensity D equals the diffusion coefficient in Eq.(8).

The usual way to study a set of solutions to the stochastic equation (17) defined in the ultrametric space is to introduce distribution function $w(\kappa, x)$ associated with the probability of solution's realization. It is known that $w(\kappa, x)$ obeys the Fokker-Planck equation [10]:

$$\frac{\partial w}{\partial \kappa} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0, \quad j = -w\frac{\partial V}{\partial x} - D\frac{\partial w}{\partial x}. \quad (19)$$

Since there is no current at the equilibrium state ($j = 0$), the distribution function of avalanche intensities at the bottom level

$$w_0(x) \propto \exp(-V(x)/D) \quad (20)$$

is dictated by the potential (16). In the case of non-equilibrium steady state the probability density w does not depend on the hierarchical level

variable κ and the current j being constant, in compliance with the conservation law (9), can take a nonzero value.

From Eq.(19) the stationary distribution then is expressed in terms of the equilibrium distribution $w_0(x)$ and the current j [11]:

$$\frac{w(f)}{w_0(f)} = \frac{j}{D} \int_{f/f_c}^{\infty} \frac{dx}{w_0(x)}, \quad (21)$$

where the boundary condition $w \rightarrow 0$ as $f \rightarrow \infty$ is taken into account.

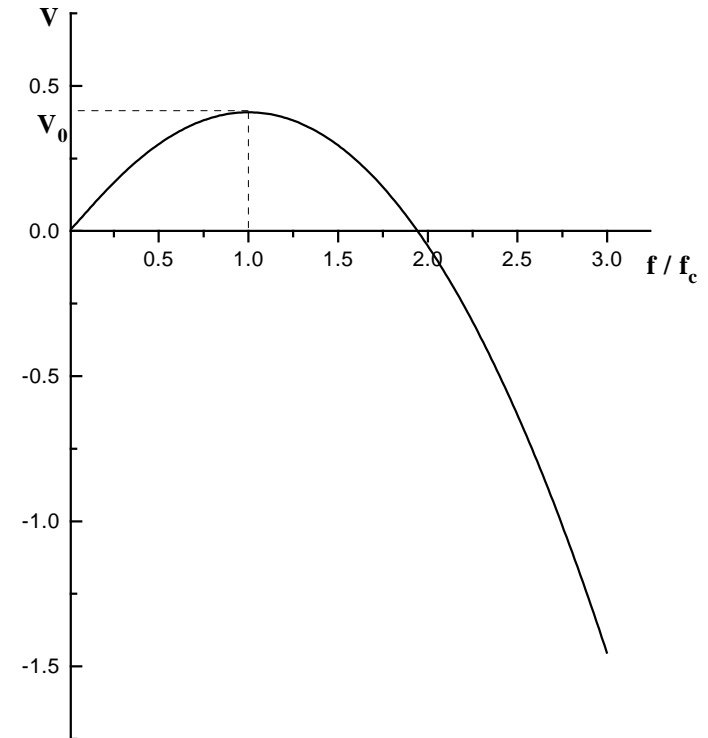


Figure 2. The effective potential (32) as a function of f/f_c at $\alpha = 0.1$.

Given the intensity f Eq.(21) allows the current j to be found. In

trying to do it, special consideration should be given to the fact that the intensity f is bounded from below, $f > G$ [4]. The appearance of the gap G is inherent in hierarchical ensemble of avalanches. Indeed, after merging of avalanches within a hierarchical cluster of the size s_g , all s , such that $s < s_g$, are appeared to be dropped out the consideration as well as low intensities with $f < f(s_g) \equiv G$ (see Fig.1). The expression for the current j then can be derived from Eq.(21) with the second boundary condition $w(G) = w_0(G)$. The result reads

$$j = 2DW \left[1 + \operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{1-\alpha}{2D}} \left(1 - \frac{G}{f_c} \right) \right) \right]^{-1}, \quad (22)$$

where the factor

$$W \propto \exp \left(-\frac{1-\alpha}{1+\alpha} \frac{1}{2D} \right) \quad (23)$$

gives the probability that fluctuation will surmount the barrier of the potential (16). Eq.(22) shows that in the case of small gap, $G \ll f_c$, the current j is about WD , but the current is doubled under $G = f_c$. It can be understood if we picture the effect of the gap as a mirror that reflects diffusing particles at the point $f = G$; if $G \ll f_c$ a particle penetrating the barrier can move along both directions, but in the case of $G = f_c$ the mirror is placed at the point corresponding to the top of the barrier and all particles go down the side where the intensity f grows indefinitely.

Given the current j the stationary distribution function $w(x)$ is defined by Eq.(21), according to which, $w(x) \approx w_0(x)$ in the subcritical region $f < f_c$, while in the supercritical range $f \gg f_c$ we have $w_0(x) \gg w(x)$ due to indefinite increase of $w_0(x)$. As far as the stationary distribution is concerned, it can be derived from the current definition (19), where the last diffusion term is negligible for supercritical intensities: $j \approx -(\partial V/\partial x)w$. The result is that [12] the probability $w(f)$ remains almost unaltered $w(f) \approx w(f_c)$ in the range from f_c up to the boundary value f_g and $w(f) \approx 0$ at $f > f_g$. The growth of f_g is governed by the equation

$$\frac{df_g}{d\kappa} = D \frac{f_g - f_c}{f_g^2}. \quad (24)$$

Since the above picture is essentially statistical, it enables the critical avalanche intensity f_c for the transition point to be found. Indeed, when the definition of the macroscopic current J in Eq.(9) is compared to that of the microscopic current j in Eq.(19), it is apparent that they differ from one another only by the factor $N^{(a-1)/a} \equiv s_0^{a-1}$ dependent

on the total number of avalanches N (see Eq.(6)). On this basis, the last expression of Eq.(15) and Eq.(22) at $G = 0$, $D \ll 1$ give the desired result:

$$f_c = F \exp \left(-\frac{(1+\alpha)^{-1}}{2D} \right), \quad (25)$$

where the pre-exponent factor F determines the probability of the barrier penetrating and cannot be calculated within the framework of the presented approach. Eq.(25) bears a resemblance to the well known result of the superconductivity BCS theory for the temperature of the phase transition and predicts the slow growth of the critical intensity f_c of elementary avalanche with the hierarchical diffusion coefficient D that plays the role of the parameter of effective interaction.

Since the ensemble of hierarchically subordinated avalanches represents a self-similar set, the probability distribution of avalanches $P(F, s)$ in the course of SOC process is a homogeneous function of s [4]:

$$P(F, s) = s^{-\tau} w(f), \quad (26)$$

where $w(f)$ is the stationary distribution of elementary avalanches considered in the previous section and τ is the positive exponent. Physically, Eq.(26) implies that the intensity F , being measured by the scale $(1 - s/s_0)^{-b}$, equals the intensity of an elementary avalanche f in accordance with Eq.(11).

Let us describe now kinetics of the global avalanche formation produced by virtue of the hierarchical coupling established between elementary avalanches. This process can be conceived of as diffusion in ultrametric space that makes the distribution (26) mounted. In order to find the conditional probability $\overline{P}(t)$ that no global avalanche will appear at time t one has to integrate over s the distribution (26) weighted with the function

$$p_s(t) = \exp(-t/t(s)), \quad t(s) = t_0 \exp(F(s)/D) \quad (27)$$

descriptive of Debay relaxation with the time $t(s)$ governed by the barrier height $F(s)$. By using the steepest descent method, it is not difficult to derive the late time ($t \rightarrow \infty$) asymptotic formula

$$\overline{P}(t) = \left(\frac{f}{D} \right)^{\tau/b} \left[1 - \left(\frac{D}{f} \ln \frac{t}{t_{ef}} \right)^{-1/b} \right]^{-\tau}, \quad (28)$$

$$t_{ef} \equiv \frac{\tau}{b} \left(\frac{f}{D} \right)^{1/b} t_0.$$

Eq.(44) has been obtained by assuming that the condition $1 \ll s_m \leq s_0$ is met, where s_m denotes the location of the maximum of integrand and obeys the equation

$$\frac{D\tau}{bf} \frac{(1-x)^{1+b}}{x} = \frac{t}{t_0} \exp\left(-\frac{f}{D}(1-x)^{-b}\right), \quad x \equiv \frac{s_m}{s_0}. \quad (29)$$

Taking into consideration the scaling relation for the number of hierarchical levels s_0 , which is the cut-off parameter,

$$s_0 \propto (f_c - f)^{1/\sigma}, \quad \sigma > 0 \quad (30)$$

we readily come to the conclusion that the condition is satisfied provided

$$f - f_c \ll f, \quad t \gg t_{ef} \exp\left(\left(f_c/D\right)^{-1/b} - 1\right)^{-b}. \quad (31)$$

Clearly, from Eq.(31) the intensity f in Eqs.(28,29) can be replaced by f_c . Note that in accord with Eq.(28) the probability $\mathcal{P}(t) \equiv 1 - \bar{\mathcal{P}}(t)$ of the global avalanche appearance logarithmically increases in time up to the value $\mathcal{P} = 1 - (f_c/D)^{\tau/b}$. In order for the probability \mathcal{P} to be non-negative the factor $F = (e/2)(1 + \alpha)^{-1}$ in Eq.(25) and the effective diffusion coefficient must be bounded from above by the value $D_0 = (1/2)(1 + \alpha)^{-1}$.

The initiated elementary avalanches form statistical ensemble of hierarchically subordinated objects, characterized by intensities f and distances s in ultrametric space (avalanche size [4]). Since the global avalanche formation is caused by effective diffusion in the space, then, similar to Brownian particle with coordinate f at time s , the ensemble can be described by Langevin equation (17) subjected to the noise Eq.(18) with D being the effective diffusion coefficient and corresponding Fokker-Planck equation (19). The stationary intensity distribution and the steady-state current are given by Eqs.(21,22). The condition of current conservation Eq.(9) yields the avalanche intensity distribution (11) over hierarchical clusters in the ultrametric space. The ensemble of elementary avalanches, being weakly dependent on s , is governed by the effective potential (16) that reaches its maximum at the critical intensity (25) (see Fig.2). So, the global avalanche generation requires supercritical elementary avalanche intensity, $f > f_c$, to surmount the barrier V_0 with the characteristic time (cf. Eq.(23))

$$T \propto \exp(V_0/D). \quad (32)$$

This picture bears some resemblance with the formation process of supercritical embryo in the theory of the first-order phase transitions [11].

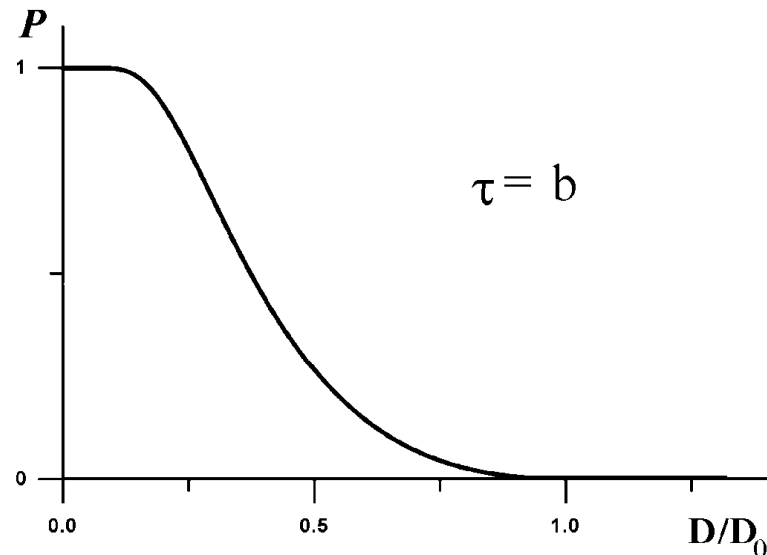


Figure 3. The dependence of the maximum probability $\mathcal{P} \equiv 1 - \bar{\mathcal{P}}$ of the global avalanche appearance on the intensity variance D in ensemble of elementary avalanches.

In the course of phase transformation the next stage is the diffusion growth of the embryo and, analogously, in the case under consideration the above growth implies an increase of the supercritical avalanche in intensity $F(s)$ (Eq.(11)) due to the diffusion growth of hierarchical cluster in ultrametric space.

As a result of the total cluster formation, we have the logarithmically slow large time asymptotics for the probability of the global avalanche appearance:

$$\mathcal{P}(t) = 1 - \bar{\mathcal{P}} \left[1 - \bar{\mathcal{P}}^{1/\tau} \left(\ln \frac{t-T}{t_{ef}} \right)^{-1/b} \right]^{-\tau},$$

$$t_{ef} \equiv (\tau/b) \bar{\mathcal{P}}^{1/\tau} t_0, \quad (33)$$

where time t is counted from the instant T , Eq.(32), and $\bar{\mathcal{P}}$ is the maxi-

mum probability that no global avalanche will occur

$$\overline{\mathcal{P}} = \left(\frac{D_0}{D}\right)^{\tau/b} \exp\left[-\frac{\tau}{b}\left(\frac{D_0}{D} - 1\right)\right]. \quad (34)$$

From Eq.(34) the probability is determined by the ratio of the noise intensity D (see Eq.(18)) and its maximum value $D_0 = (1/2)(1 + \alpha)^{-1}$. The key point is that the maximum probability $\mathcal{P} \equiv 1 - \overline{\mathcal{P}}$ of the global avalanche appearance is completely suppressed under high intensity variance in ensemble of elementary avalanches (see Fig.3).

References

1. P. Bak, C. Tang, K. Wiesenfeld, Phys. Rev. Lett. **59**, 381 (1987).
2. P. Bak, K. Sneppen, Phys. Rev. Lett. **71**, 4083 (1993).
3. T. Halpin-Healy, Y.-C. Zhang, Phys. Rep. **254**, 215 (1995).
4. M. Parzusi, S. Maslov, P. Bak, Phys. Rev. E **53**, 414 (1996).
5. P. Bak, *How nature works: the science of self-organised criticality* (Oxford University Press, 1997).
6. P. Bak, S. Boettcher, Physica D **107**, 143 (1997).
7. A.I. Olemskoi, A.D. Kiselev, *Theory of hierarchical coupling*, preprint, physics/9802035.
8. A.I. Olemskoi, *Fractals in condensed matter physics*, in: Physics Review **18**, Part 1, ed. I.M. Khalatnikov.
9. R. Rammal, G. Thoulouse, M.A. Virasoro, Rev. Mod. Phys. **58**, 765 (1986).
10. H. Risken, *The Fokker-Planck equation* (Springer, Berlin, 1989).
11. E.M. Lifshits, L.P. Pitaevskii, *Physical kinetics* (Nauka, Moscow, 1979) in Russian.
12. Yu.V. Mikhailova, L.A.Maksimov, ZhETF **59**, 1368 (1970) in Russian.

КРИТИЧНІ ЯВИЩА У БІНАРНИХ СУМІШАХ

Оксана Пацаган

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
290011 м. Львів, вул. Свенцицького, 1*

1. Вступ

В той час як фазова поведінка однокомпонентних флюїдів є подібною між собою, бінарні суміші, навіть суміші інертних газів, демонструють велику різноманітність топології фазових діаграм. Наприклад, критичні точки (КТ) газ-рідина (ГР) чистих компонент можуть бути з'єднані неперервною лінією, яка є лінією КТ газ-рідина суміші (випадок суміші $Ar-Kr$). Або, може бути випадок, коли з кожної КТ чистої компоненти починається окрема критична лінія (випадок суміші $Ne-Kr$). Наявність другої лінії КТ вказує на присутність фазового переходу (ФП) змішування- незмішування. Більше того, можливий випадок, коли лінія КТ газ-рідина неперервно переходить у критичну лінію рідина-рідина або газ-газ незмішування. Зручно класифікувати фазову поведінку бінарних сумішей на основі типів критичних і трифазних ліній і за способом їх перетину. Вперше така класифікаційна схема була запропонована ван Коніненбергом і Скоттом [1]. Вона включає три класи і охоплює шість основних типів фазової поведінки бінарних сумішей [2]-[6]:

- Клас 1. Суміші двох компонент з близькими критичними температурами ГР чистих компонент. В таких сумішах КТ чистих компонент неперервно зв'язані критичною лінією. Системи з цього класу є певною мірою ідеальними в термодинамічному сенсі і не демонструють критичної поведінки змішування- незмішування.
- Клас 2. Суміші двох компонент з дуже різними критичними температурами ГР чистих компонент. В цих сумішах нема неперервної лінії, яка зв'язує КТ чистих компонент.
- Клас 3. Дуже складні суміші, які демонструють таке явище як нижня критична точка розчинення. В системах цього класу фазова поведінка спричинена взаємодіями між компонентами, які приводять до високого ступеня впорядкування в рідкій суміші.

Ця експериментально вивчена різноманітність фазової поведінки сумішей відображає той факт, що відносна інтенсивність міжмолекулярних взаємодій відіграє вирішальну роль у фізиці таких систем, сприяючи чи перешкоджаючи ФП змішування-незмішування.

Не дивлячись на відомий величезний експериментальний матеріал [2]- [6], теоретичні дослідження присвячені вивченню критичних властивостей бінарних сумішей не представляють собою завершеної картини. Ці теоретичні роботи можна умовно поділити на такі класи:

1. Середньопольовий підхід в дусі теорії ван-дер-Ваальса.
2. Метод інтегральних рівнянь.
3. Феноменологічний підхід.
4. Ієрархічна базисна теорія (HRT).
5. Метод колективних змінних.

Тут ми зупинимся на перших чотирьох підходах.

2. Середньопольовий підхід [1], [7] – [9]

Середньопольовий підхід ґрунтується на рівнянні стану ван-дер-Ваальса, узагальненому ним на випадок суміші ще в кінці минулого століття. Вже тоді на основі свого рівняння стану ним було передбачено існування трьох типів двофазної рівноваги в сумішах: газ-рідина, рідина-рідина і газ-газ [7].

Рівняння стану ван-дер-Ваальса для суміші має такий же вигляд як і для однокомпонентної системи (однофлюїдне наближення) [1]:

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{V^2}$$

з тим що параметри a і b виражаються через лінійну комбінацію парціальних параметрів і є функціями концентрації x :

$$\begin{aligned} a &= (1 - x)^2 a_{11} + 2(1 - x)x a_{12} + x^2 a_{22} \\ b &= (1 - x)^2 b_{11} + 2(1 - x)x b_{12} + x^2 b_{22}. \end{aligned}$$

В цих рівняннях присутні перехресні параметри a_{12} і b_{12} , які виражаються через односортні, наприклад за правилом Лоренца-Бертло:

$$a_{12} = \sqrt{a_{11}a_{22}}, \quad b_{12} = \frac{1}{2} \left(b_{11}^{1/3} + b_{22}^{1/3} \right)^3.$$

В роботах [1]-[9] до такої ван-дер-Ваальсівської суміші ,були застосовані рівняння для визначення КТ:

$$\left(\frac{\partial^2 G}{\partial x^2} \right)_{P,T} = 0, \quad \left(\frac{\partial^3 G}{\partial x^3} \right)_{P,T} = 0$$

(G – вільна енергія Гіббса бінарної суміші) і умови на фазову рівновагу:

$$T^\alpha = T^\beta, \quad P^\alpha = P^\beta, \quad \mu_1^\alpha = \mu_1^\beta, \quad \mu_2^\alpha = \mu_2^\beta.$$

Причому, розглядалися різні співвідношення між параметрами a_{ij} і b_{ij} . В залежності від співвідношення між ними були отримані різні типи фазових діаграм. Фактично, на основі рівняння стану ван-дер-Ваальса передбачено на якісному рівні всі типи фазових діаграм з вищезгаданої класифікаційної схеми [9], крім останнього.

3. Метод інтегральних рівнянь

Другим підходом, який дає класичний опис критичної поведінки бінарних флюїдів, є метод інтегральних рівнянь. В межах цього підходу визначення умов фазового відокремлення в сумішах ґрунтується, як правило, на обчисленні структурного фактору концентрація-концентрація $S_{cc}(k)$ при $k = 0$:

$$S_{cc}(k) = c(1 - c)(1 - c)S_{11}(k) + cS_{22}(k) - 2\sqrt{c(1 - c)}S_{12}(k),$$

де $S_{ij}(k)$ – парціальний структурний фактор, $i, j = 1, 2$ – індекси сорту, c – концентрація частинок другого сорту. При підході до спінодалі ”газ-рідина” або ”змішування-незмішування” $S_{cc}(k = 0)$ розбігається, оскільки, як добре відомо, між $S_{cc}(0)$ і умовою на спінодаль існує зв’язок:

$$S_{cc}(0) = Nk_B T / \left(\frac{\partial^2 G_M}{\partial c^2} \right)_{T,P},$$

де G_M – вільна енергія змішування Гіббса для бінарного флюїду.

Піонерською роботою в цій області була робота Вайсмана [10]. Він розглянув симетричну суміш з однаковими густинами частинок, які взаємодіють через твердий кор плюс потенціал Юкави:

$$U_{ij}(r) = \begin{cases} \infty & \text{якщо } r \leq 1 \\ \frac{K_{ij}}{r} e^{-z(r-1)} & \text{якщо } r > 1 \end{cases}.$$

В моделі Вайсмана частинки того самого сорту ("подібні" частинки) поза кором притягуються і різних сортів ("неподібні" частинки) відштовхуються ($K_{11} = K_{22} = K_{12}$). Вайсман розв'язав середньосферичне наближення (СН) для цієї моделі і показав, що існує область в площині температура-густина, де нема реального розв'язку. Він інтерпретував цей факт як наявність ФП змішування-незмішування. В [11] автори розглянули розширену модель Вайсмана ($K_{11} = K_{22} \neq K_{12}$). Розв'язавши аналітично СН вони показали, що в суміші можуть відбуватися два типи ФП в залежності від співвідношення між K_{11} і K_{12} : ГР і змішування-незмішування. Роботи [12]-[19] присвячені чисельному розрахунку інтегральних рівнянь. Тут розглядалися, з одного боку, більш складні суміші твердих сфер різних розмірів, які взаємодіють через різні потенціали Юкави ($K_{11} \neq K_{22} \neq K_{12}$) [12]-[13],[17]-[19] і з іншого боку, суміші частинок, які взаємодіють з потенціалами Леннарда-Джонса [15]-[16]. Всі роботи демонструють значний прогрес у вивченні властивостей ФП у бінарних сумішах як функцій мікроскопічних взаємодій між частинками. Однак, крім того, що цей підхід дає класичну поведінку, тут існує ще ряд проблем, а саме: 1) термодинамічна несумісність теорії, яка використовує замикання такі як СН, Перкуса-Йевіка і гіперланцюгове; 2) аналітичний розв'язок рівняння Орнштейна-Церніке існує тільки у випадку найпростішого замикання - СН для декількох парних потенціалів; 3) обидва рівняння Перкуса-Йевіка і гіперланцюгове демонструють ліміт стабільності по температурі T для даної суміші при фіксованій концентрації і густині. Якщо температура понижується відносно цього ліміту, осмотична і ізотермічна стисливість зростають і стає все важче отримати числову збіжність. Втрата збіжності числового алгоритму не завжди пов'язана з істинною розбіжністю кореляційних функцій. Тому інтерпретація $T_s(\rho)$ спінодальною лінією суміші не є очевидною.

4. Феноменологічні теорії

Інтерпретація критичних явищ в сумішах все ще значною мірою спирається на феноменологічний підхід. В основі феноменологічного підходу лежать принцип універсальності і гіпотеза ізоморфності.

Властивості систем в околі критичних точок можуть бути зрозумілі на мові принципу універсальності який говорить, що асимптотична термодинамічна поведінка систем, які належать до одного класу універсальності задовільняє скейлінговим законам з універсальними критичними індексами і універсальними скейлінговими

функціями. Спочатку принцип універсальності критичної точки був розвинутий для систем з ізольованою критичною точкою з двома скейлінговими полями: слабим, температурноподібним скейлінговим полем і сильним, впорядковуючим скейлінговим полем, спряженим до параметра порядку пов'язаного з фазовим переходом [20]. Прикладом такої системи є однокомпонентний флюїд. Однак, більшість реальних систем демонструють лінії або поверхні критичних точок в залежності від числа термодинамічних ступенів вільності (наприклад, бінарні суміші). Розширення принципу універсальності критичної точки на системи з більш ніж двома ступенями вільності було запропоновано Гріффіцом і Веелером [22], а також Саамом [23]. Було показано, що термодинамічна поведінка суміші задовільняє тим самим скейлінговим законам з тими самими критичними індексами і скейлінговими функціями як і однокомпонентна система, якщо суміш вивчається при постійному полі ξ , зв'язаному з хімічними потенціалами компонентів, а не при постійній концентрації. Відповідним чином виділена ізоморфна вільна енергія матиме таку саму універсальну неаналітичну залежність від двох характеристичних змінних як і відповідна вільна енергія однокомпонентної системи. Системно залежні константи, а також критичні параметри залежатимуть параметрично від "прихованого" поля ξ .

На практиці експериментальні умови накладають обмеження на вибір термодинамічних змінних: експериментальні дані звичайно отримуються при постійній концентрації. Як було показано Фішером [21], при постійній концентрації характер критичної поведінки суміші мав би змінюватись, оскільки відбувається ренормалізація критичних індексів. Так, ізотермічна стисливість бінарної суміші мала б мати набагато слабшу розбіжність ніж в однокомпонентних флюїдах, а питома теплоємність при постійному об'ємі не мала б мати розбіжності взагалі. Але експерименти часто показують якраз точно ті значення критичних індексів що й однокомпонентні системи. Цей факт може бути пояснений в рамках феноменологічного підходу тим, що існує сильний кросовер, який зменшує асимптотичну область [24]. Це робить важким однозначне підтвердження теоретичних результатів.

Крім того, при розгляді флюїдних сумішей, в яких відбувається на критичній лінії неперервний перехід від КТ газ-рідина до КТ змішування-незмішування, виникає потреба в узагальненні традиційного способу здійснення ізоморфного формулювання критичних явищ. Таке узагальнення було здійснене в роботах М.О. Анісімова зі співавторами [25]-[29]. Зупинимося коротко на основних ідеях,

викладених в цих роботах.

Згідно принципу універсальності термодинаміка однокомпонентного флюїду біля КТ газ-рідина і "нестисливої" бінарної суміші біля КТ рідина-рідина характеризується двома скейлінговими полями:

$$\begin{aligned} h_1 &= g + a(T - T_c) \\ h_2 &= T - T_c + bg, \end{aligned}$$

де g є хімічний потенціал однокомпонентного флюїду чи $g = \mu_1 - \mu_2$ (μ_i – хімічний потенціал частинки сорту i) для двокомпонентної "нестисливої" рідкої суміші. Було показано, що якщо змішування польових змінних не впливає на асимптотичну поведінку однокомпонентного флюїду і "нестисливої" суміші, то у загальному випадку бінарної суміші таке змішування приводить в більшості випадків до змін асимптотичної критичної поведінки. Відповідно до гіпотези ізоморфності, сильно розведені розчини біля КТ газ-рідина і слабо стисливі рідкі суміші біля точки розчинення можуть бути об'єднані у визначенні полів h_1 і h_2 , вводячи "приховані" поля, спряжені до "прихованих" густин, а саме, різницю хімічних потенціалів чистих компонент і концентрації у випадку КТ газ-рідина і хімічний потенціал однієї з компонент і загальну густину у випадку КТ змішування-незмішування. Тоді критичні параметри КТ газ-рідина розведеної суміші будуть функціями $\mu = \mu_1 - \mu_2$, або функціями μ_1 у випадку КТ змішування-незмішування слабо стисливої рідина. Щоб розширити принцип універсальності КТ на загальний випадок, автори припускають, що термодинамічна поведінка суміші все ще характеризується двома скейлінговими полями h_1 і h_2 , які тепер є комбінаціями трьох фізичних змінних $\Delta T = T - T_c$, $\Delta\mu_1 = \mu_1 - \mu_{1c}$, $\Delta\mu = \mu - \mu_c$:

$$\begin{aligned} h_1 &= a_1\Delta\mu_1 + a_2\Delta T + a_3\Delta\mu \\ h_2 &= b_1\Delta\mu_1 + b_2\Delta T + b_3\Delta\mu. \end{aligned}$$

Всі системно залежні параметри, а саме, коефіцієнти a_i і b_i так само як і критичні параметри T_c , μ_{1c} і μ_c залежать параметрично від положення на критичній лінії.

5. Ієрархічна базисна теорія (HRT)

В стандартному підході ренормгрупи флуктуації локального параметра порядку спершу піддаються Фур'є перетворенню, і тоді флуктуації великих хвильових векторів (скажімо $k > Q$) відінтегровуються. В результаті здійснюється перехід до нового ефективного

Гамільтоніану для флуктуацій параметра порядку з $k < Q$. Ця процедура може бути повторена, зменшуючи вектор обрізання Q поки всі флуктуації не будуть взяті до уваги. В такий спосіб генерується послідовність ефективних Гамільтоніанів, кожен з яких описує флуктуації нижче певного обрізання.

Замість того автори [30]-[36] пропонують інший підхід. Вони не здійснюють часткового інтегрування і не обмежують ступені вільності: вони аналізують як вільна енергія і кореляційні функції модифікуються в результаті введення вектора обрізання Q в діаграмний розклад, який визначає спостережувані величини.

Розглядається система класичних частинок з центральним, парно-адитивним міжчастинковим потенціалом $v_{ij}(r)$:

$$v_{ij}(r) = v_{ij}^R(r) + w_{ij}(r),$$

де $v_{ij}^R(r)$ описує відштовхування на малих відстанях, і фізичні властивості суміші, взаємодія в якій описується через $v_{ij}^R(r)$ вважаються відомими. $w_{ij}(r)$ описує притягання. Єдина умова на функцію $w_{ij}(r)$ є існування Фур'є образу. Ієрархічна базисна теорія ґрунтується на наступних кроках.

Розглядається послідовність Q -систем, таких що

$$v_{ij}^Q(r) = v_{ij}^R(r) + w_{ij}^Q(r),$$

де

$$w_{ij}^Q(k) = \begin{cases} \tilde{w}(k) & \text{для } k > Q \\ 0 & \text{для } k > Q \end{cases}.$$

Роль параметра Q є придушувати флуктуації з хвильовими векторами $k < Q$. Тому сім'я Q -систем може вважатися як послідовність, яка наближається до системи з повною взаємодією, де флуктуації на відстанях більших ніж $1/Q$ є сильно придушені. Другий крок полягає у виведенні точних рівнянь еволюції для властивостей Q -систем, якщо вектор обрізання змінюється від Q до $Q - dQ$. Вводиться модифікована вільна енергія Гельмгольца \mathcal{A}^Q для Q -систем так, щоб включити середньопольові вклади, які відповідають різниці взаємодій $w_{ij} - w_{ij}^Q$:

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{A}^Q}{V} &= \frac{\mathcal{A}^Q}{V} - \frac{1}{2}\rho^2[\tilde{w}_{ij}(k=0) - \tilde{w}_{ij}^Q(k=0)] \\ &\quad + \frac{1}{2}\rho_i[w_{ii}(r=0) - w_{ii}^Q(r=0)]. \end{aligned}$$

На основі діаграмних розкладів записується рівняння еволюції, яке керує зміною модифікованої вільної енергії:

$$-\frac{d}{dQ} \left(\frac{-\beta A^Q}{\mathcal{V}} \right) = \frac{1}{2} \int_{k=Q} \frac{d\Omega_{\vec{k}}}{(2\pi)^3} \ln \det [1 + \beta [C^Q(k)]^{-1} \tilde{W}(k)].$$

Тут введені матричні позначення для $C^Q(k)$ і $\tilde{W}(k)$, $c_{ij}^Q(k)$ – Фур'є образ модифікованої прямої кореляційної функції. Це рівняння є першим з нескінченної ієрархії рівнянь. Аналогічні рівняння еволюції записуються для $C^Q(k)$ і для прямих кореляційних функцій вищих порядків. Ця система рівнянь дійсна в усій області густин і температур. Досліджуючи бінарну суміш, автори роблять ряд наближень: 1) обмежуються першим рівнянням ієрархії; 2) припускають, що всі $c_{ij}^Q(k)$ аналітичні в КТ:

$$c_{ij}^Q(k)_{k \rightarrow 0} \sim c_{ij}^Q(0) - b_{ij} k^2 + \dots,$$

де

$$c_{ij}^Q(0) = \frac{\partial^2 A^Q}{\partial \rho_i \partial \rho_j}.$$

Автори показують, що рівняння еволюції в довгохвильовій границі стають ідентичними до рівнянь ренормгрупи для ефективної дії, яка включає два флуктуючі поля. Основні результати цього циклу робіт наступні:

1. Показано, що критичні індекси бінарної суміші є пов'язані до критичних індексів однокомпонентної системи відповідно до феноменологічних припущень;
2. Для суміші $Ne - Xe$ отримано температуру кросовера, $\tau \leq 10^{-8}$;
3. Отримано криву співіснування газ-рідина для симетричної суміші частинок, які взаємодіють з потенціалами Леннарда-Джонса. Дана крива добре узгоджується з результатами, отриманими методами числового моделювання;
4. Автори роблять висновок, що протяжність асимптотичної області не є необхідно малою, для певних бінарних сумішей і при певних режимах вона може бути досягнута експериментально.

Література

1. Scott R.L., van Konynenburg P.H. // Discuss. Faraday Soc., 1970, vol. 49, p.87-102.
2. Rowlinson J.S.: Liquids and Liquid Mixtures. Butterworths-Scientific, London, 1959.
3. Schneider G.M. // Adv.Chem.Phys. 1970, vol. 17, No 1, p. 1-42.
4. Kumar A., Krishnamurthy H.R. and Gopal E.S.R. // Phys. Rep. 1983, vol. 98, p. 57-143.
5. Durenberg A., Schouten J.A., Trappeniers N.J. // Physica A, 1980, vol. 101, No 2-3, p. 895-899.
6. Schneider G.M. // J. Chem. Thermod. 1991, vol. 23, p. 301-326.
7. Ван-дер-Ваальс И.Д., Констамм Ф. // Курс термостатики.-М.: ОНТИ, 1937.
8. Темкин М.И. // Ж. физ. химии, 1959, т. 33, с. 2040-2044.
9. Van Konynenburg P.H., Scott R.L. // Phyl.Trans.R.Soc. London, Ser. A, 1980, vol. 298A, No 1442, p.495-540.
10. Waisman E. // J.Chem.Phys., 1973, vol.59, No 1, p. 495-497.
11. Jędrzejek C., Konior J., Streszewski M. // Phys. Rev. A, 1986, vol.35, No 3, p. 1226-1234.
12. Arrieta E., Jędrzejek C., Marsh K.M. // J.Chem.Phys., 1987, vol.87, No 6, p.3607-3626.
13. Abramo M.C., Caccamo C., Giunta G. // Phys.Rev. A, 1986, vol. 34, No 4, p. 3279-3287.
14. McGuigan D.B., Monson P.A. // Mol.Phys., 1987, vol. 62, No 1, p. 3-18.
15. Caccamo C., Malescio G. // Phys.Rev. A, 1989, vol.40, No 11, p. 6384-6387.
16. Malescio G. // Phys.Rev. A, 1990, vol.42, No 10, p. 6241-6242.
17. Chen X.S., Forstmann F. // J.Chem.Phys., 1992, vol.97, No 5, p. 3696-3703.
18. Malescio G. // J.Chem.Phys., 1992, vol.96, No 1, p. 648-651.
19. Caccamo C., Giunta G. // Mol. Phys., 1993, vol. 78, p. 83-93.
20. Widom B. // J.Chem.Phys., 1965, vol. 43, p 3892-3897.
21. Fisher M.E., // Phys. Rev. 1968, vol. 176, p. 257-272.
22. Griffiths R.B., Wheeler J.C. // Phys. Rev. 1970, vol. A2, p. 1047-1064.
23. Saam W.F. // Phys. Rev. 1970, vol. A2, p. 1461-1466.
24. Sengers J.V., Levelt Sengers J.M.H. // Ann. Rev. Phys. Chem. 1986, vol. 37, p.189-222.
25. Anisimov M.A., Critical phenomena in liquids and liquid crystals, Gordon and Breach, London, 1991.

26. Anisimov M.A., Sengers J.V. // Phys.Lett., 1992, vol. A172, p. 114-118.
27. Anisimov M.A., Gorodetskii E.E., Kulikov V.D., Sengers J.V. // Pis'ma v ZhETF, 1994, vol. 60, p.522-526.
28. Anisimov M.A., Gorodetskii E.E., Kulikov V.D., Sengers J.V. // Phys.Rev. E,1995, vol. 51, p. 1199-1215.
29. Anisimov M.A., Gorodetskii E.E., Kulikov V.D., Povodyrev A.A., Sengers J.V. //Physica A,1995, vol. 220, p. 277-324.
30. Parola A., Reatto L. //Phys. Rev. A., 1991, vol. 44, p. 6600-6615.
31. Parola A., Reatto L. // J. Phys.: Condens. Matter, 1993, vol. 5, p. B165-B172.
32. Parola A., Pini D., Reatto L. // J. Phys.: Condens. Matter, 1994, vol. 6,p. A167-A170.
33. Parola A.,Reatto L.// Advan. in Phys. 1995, vol. 44, No 3, p.211-298.
34. Reatto L., Parola A. // J. Phys.: Condens. Matter, 1996, vol. 8, p. 9221-9231.
35. Pini D., Reatto L.,Parola A. //J. Phys.: Condens. Matter, 1997, vol. 9, p. 1417-1423.
36. Pini D., Parola A., Reatto L. // J.Stat.Phys., 1993, vol. 72, Nos. 5/6, p. 1179-1201.

ПОВЕРХНЕВІ КРИТИЧНІ ЯВИЩА

Микола Шпот

*Інститут фізики конденсованих систем НАН України,
290011 м. Львів, вул. Свенцицького, 1*

За останні 25 років методи теорії поля набули особливої важливості в сучасній теорії фазових переходів і критичних явищ [1–3]. Їх використання привело до величезного прогресу в описі критичних явищ, що відбуваються в безмежно великих "ідеальних" модельних системах. Проте всі реальні об'єкти, що існують у природі, не є ідеальними. Вони мають скінченні розміри, обмежені поверхнями, а також містять різні домішки і структурні неоднорідності. У таких системах відбуваються також специфічні фізичні явища, яких немає в ідеальних системах. Очевидно, що теорія фазових перетворень у системах, максимально наближених до реальних, представляє значний інтерес для експериментаторів і спеціалістів з комп'ютерного моделювання, які з необхідністю мають справу із скінченними об'єктами досліджень. Така теорія є набагато складнішою, і її розвиток представляє також безсумнівний інтерес для теоретичної фізики взагалі. Тут коло нерозв'язаних задач і проблем є значно ширшим, як в теорії ідеальних безмежних систем.

Згадані вище методи теорії поля почали успішно застосовуватися в теорії поверхневих критичних явищ на початку 80-років (див. огляди [4,5]). Головним методом розрахунку був до цього часу ϵ -розклад [1], тобто розклад за малими відхиленнями вимірності простору d від $d = 4$: $\epsilon \equiv 4 - d \ll 1$. Результати розрахунків отримувалися у вигляді коротких (до 1 і 2 порядків) рядів за степенями ϵ . Для отримання фізичних результатів у реальному тривимірному просторі з ϵ -розкладу необхідна екстраполяція до $\epsilon = 1$, що не завжди є простим завданням. Наприклад, отримані таким чином значення для кросового поверхневого показника Φ [4] на 20-30% відрізнялися від результатів чисельних розрахунків методом Монте Карло.

У наших роботах ми узагальнюємо т.зв. масивну теорію поля [3] на напівобмежені системи з плоскою поверхнею. Це дає можливість досліджувати поверхневу критичну поведінку безпосередньо у фізичній вимірності простору $d = 3$ (більш загально - у довільних вимірностях $2 \leq d < 4$) [6]. Таким чином, зокрема, ми отримуємо чисельні значення поверхневих критичних показників для двох типів поверхневих фазових переходів: звичайного ("ordinary") [6] і спеціального [7]. Наші результати [8] в ряді випадків поправля-

ють попередні оцінки, отримані з ϵ - розкладу, і добре узгоджуються як з найновішими даними експериментальних робіт, так і з найкращими результатами чисельних досліджень методами Монте Карло.

Відзначимо також існуючі проблеми в експериментальних дослідженнях критичної поведінки на поверхнях. Як правило, дослідження різних типів поверхонь за допомогою розсіяння рентгенівських променів¹ виявляють певні характерні риси, що відповідають різним типам поверхневих фазових переходів, а саме - звичайного і екстраординарного. Зокрема, не спостерігається кросовер до "чистого" екстраординарного переходу. Така ситуація з експериментальними результатами спонукає також до подальшого теоретичного дослідження характерних особливостей поверхневої критичної поведінки при екстраординарному переході.

1. Модель

Критична поведінка напівобмежених систем з n - компонентним параметром порядку описується ефективним гамільтоніаном типу Ландау - Гінзбурга - Вільсона [4]

$$\mathcal{H}[\phi] = \int_V \left(\frac{1}{2} (\nabla\phi)^2 + \frac{1}{2} m_0^2 \phi^2 + \frac{1}{4!} u_0 |\phi|^4 \right) + \int_{\partial V} \left(\frac{1}{2} c_0 \phi^2 \right). \quad (1)$$

На відміну від просторово-необмежених систем, в даному випадку система "займає" верхню половину d - вимірного простору $V = \mathbb{R}_+^d \equiv \{\vec{x} = (\vec{r}, z) \in \mathbb{R}^d \mid \vec{r} \in \mathbb{R}^{d-1}, z \geq 0\}$, обмежену плоскою поверхнею ∂V при $z = 0$. Поле n - компонентного параметра порядку описується змінною $\phi = \{\phi^a(\vec{x}), a = 1, \dots, n\}$. Початкові, неперенормовані параметри теорії є: "маса" m_0^2 - лінійна функція температури; константа зв'язку $u_0 > 0$, що характеризує флуктуації полів в об'ємі системи; c_0 - локальний поверхневий параметр, що описує відхилення сили поверхневих взаємодій від об'ємних ("surface enhancement" в англійській літературі).

Нас цікавлять критичні явища, що відбуваються у поверхневому шарі такої напівобмеженої системи, коли в її об'ємі при температурі Кюрі T_c відбувається фазовий перехід другого роду. В залежності від сили поверхневих взаємодій c_0 можливі різні типи поверхневих переходів:

1) якщо величина c_0 більша за певну спеціальну величину c_0^{sp} , то поверхневі взаємодії не достатньо сильні для того, щоб на поверхні

¹Короткий огляд сучасної експериментальної ситуації і порівняння з останніми теоретичними результатами приведені в роботі [8].

могло виникнути самостійне впорядкування при $T = T_c$. У цій ситуації критичні особливості локальних поверхневих фізичних величин "індукуються" флуктуаціями параметра порядку в об'ємі V системи, що впорядковується при зниженні температури до величини T_c . Такий поверхневий перехід називається звичайним.

2) коли $c_0 = c_0^{sp}$ і $T \rightarrow T_c$ ($m_0^2 \rightarrow m_{0c}^2$), поверхня ∂V і об'єм V системи впорядковуються одночасно. При цьому поверхневий фазовий перехід називається спеціальним. "Спеціальна" точка фазової діаграми (m_{0c}^2, c_0) є мультикритичною.

3) при $c_0 < c_0^{sp}$ поверхневі взаємодії є достатньо сильними для виникнення поверхневого впорядкування при температурах, вищих за критичну. Як наслідок, при подальшому зниженні температури до $T = T_c$, фазовий перехід в об'ємі системи відбувається вже в присутності далекогосяжного впорядкування на поверхні. Поверхневий перехід, що при цьому відбувається, називається екстраординарним.

Зауважимо, що два останні типи поверхневих фазових переходів можливі тільки в тому випадку, коли вимірність простору d перевищує нижню граничну вимірність $d_*(n)$, при якій можлива поява фази з поверхневим упорядкуванням. Більше деталей подано в роботах [4,8].

Звичайний і спеціальний переходи є "досяжними" з високотемпературної, повністю неупорядкованої фази. Тому їх теоретичний опис є значно простішим за опис екстраординарного переходу. У цьому останньому випадку необхідно мати справу з ненульовим, просторово змінним профілем параметра порядку $\langle \phi(\vec{x}) \rangle$ (як при $T < T_c$, так і при $T \geq T_c$), що суттєво ускладнює розрахунки. А для звичайного і спеціального переходів парна кореляційна функція наближення молекулярного поля (вільний пропагатор) приймає відносно простий вигляд

$$\hat{G}(\vec{p}; z, z') = \frac{1}{2\kappa_0} \left[e^{-\kappa_0|z-z'|} - \frac{c_0 - \kappa_0}{c_0 + \kappa_0} e^{-\kappa_0(z+z')} \right], \quad (2)$$

де

$$\kappa_0 = \sqrt{p^2 + m_0^2}. \quad (3)$$

Корелятор (2) записаний у т.зв. pz -представленні: це — Фур'є-перетворення координатного представлення кореляційної функції $G(\vec{r}; z, z')$ відносно координат \vec{r} , паралельних до поверхні - напрямів, у яких зберігається трансляційна інваріантність. \vec{p} - відповідний $(d-1)$ - вимірний "паралельний" хвильовий вектор. Пер-

ший доданок у правій частині рівняння (2) представляє собою pz -представлення вільного об'ємного трансляційно інваріантного пропагатора. Розклади за теорією збурень з пропагатором (2) можуть бути регуляризовані за допомогою процедури "обрізання" - покладаючи $\hat{G}(\vec{p}; z, z') = 0$ для $|\vec{p}| > \Lambda$, або за допомогою приписів розмірної регуляризації.

2. Перенормування

Головною метою перенормувань в теорії критичних явищ є формування т.зв. "перенормованої теорії", теорія збурень для якої є вільною від ультрафіолетових чи інфрачервоних розбіжностей і не залежною від довільного імпульса обрізання Λ . Нашою теперішньою метою є дослідження поверхневої критичної поведінки напівобмежених систем, що визначаються ефективним гамільтоніаном (1), при температурах, близьких до об'ємної критичної температури T_c . Це означає, що наша теорія повинна включати в себе певну стандартну поведінку об'ємних кореляційних функцій, що описують поведінку полів, віддалених від поверхні.

2.1. Об'ємні кореляційні функції

Для об'ємних кореляційних функцій ми вибираємо стандартні умови нормування масивної теорії поля в просторово необмежених системах [3],

$$\tilde{\Gamma}_{\text{bulk,ren}}^{(2)}(q; u, m) \Big|_{q=0} = m^2, \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial q^2} \tilde{\Gamma}_{\text{bulk,ren}}^{(2)}(q; u, m) \Big|_{q=0} = 1, \quad (5)$$

$$\tilde{\Gamma}_{\text{bulk,ren}}^{(2,1)}(\vec{q}, \vec{Q}; u, m) \Big|_{\vec{q}=\vec{Q}=\vec{0}} = 1, \quad (6)$$

$$\tilde{\Gamma}_{\text{bulk,ren}}^{(4)}(\{\vec{q}_i\}; u, m) \Big|_{\{\vec{q}_i=\vec{0}\}} = m^\epsilon u. \quad (7)$$

Ці умови нормування, як звичайно, стосуються об'ємних вершинних функцій Γ і визначають об'ємні ренормалізаційні Z -фактори, які входять у взаємозв'язки між початковими і перенормованими полями і константами зв'язку

$$\phi = [Z_\phi(u)]^{1/2} \phi_{\text{ren}}, \quad \phi^2 = [Z_{\phi^2}(u)]^{-1} [\phi^2]_{\text{ren}}, \quad (8)$$

$$u_0 = Z_u(u) m^\epsilon u, \quad (9)$$

а також перенормовану масу m^2 . У термінах цієї величини критична границя $T \rightarrow T_c$ досягається при $m^2 \rightarrow 0$, що фізично відповідає розбіжності об'ємної кореляційної довжини при наближенні до критичної точки. В критичній границі перенормована константа зв'язку u переходить в інфрачервоно-стійку нерухому точку $u^* > 0$.

2.2. Поверхневі кореляційні функції

Введемо зв'язні кореляційні функції (кумулянти), що включають в себе як об'ємні, так і поверхневі поля ($N, M, I, I_1 \geq 0$),

$$G^{(N,M;I,I_1)}(\{\vec{x}_i\}, \{\vec{r}_j\}, \{\vec{X}_l\}, \{\vec{R}_l\}; m_0^2, u_0, c_0; \Lambda) = \left\langle \prod_{i=1}^N \phi(\vec{x}_i) \prod_{j=1}^M \phi_s(\vec{r}_j) \prod_{l=1}^I \frac{1}{2} [\phi(\vec{X}_l)]^2 \prod_{m=1}^{I_1} \frac{1}{2} [\phi_s(\vec{R}_m)]^2 \right\rangle_c, \quad (10)$$

і позначимо

$$G^{(N,M)} \equiv G^{(N,M;I=0,I_1=0)}. \quad (11)$$

Для перенормування таких кореляційних функцій нам необхідно ввести нові ренормалізаційні фактори Z_1 і $Z_{\phi_s^2}$, що визначають взаємозв'язки між початковими і перенормованими поверхневими полями

$$\phi_s = [Z_\phi Z_1]^{1/2} [\phi_s]_{\text{ren}}, \quad (\phi_s)^2 = [Z_{\phi_s^2}]^{-1} [(\phi_s)^2]_{\text{ren}}, \quad (12)$$

а також визначити перенормовану поверхневу константу зв'язку c , зв'язану з початковим параметром теорії c_0 через зміщення δc . Таким чином, для перенормованих кореляційних функцій ми матимемо

$$G_{\text{ren}}^{(N,M;I,I_1)}(; m, u, c) = Z_\phi^{-(N+M)/2} Z_1^{-M/2} [Z_{\phi^2}]^I [Z_{\phi_s^2}]^{I_1} G^{(N,M;I,I_1)}(; m_0, u_0, c_0). \quad (13)$$

Ці співвідношення матимуть скінченні границі при $\Lambda \rightarrow \infty$ після відповідної репараметризації величин m_0 , u_0 і c_0 , що входять у кореляційні функції $G^{(N,M;I,I_1)}$.

Для визначення нових ренормгрупових функцій Z_1 , Z_{ϕ^2} і c ми запишемо нові умови нормування для поверхневих кореляційних функцій:

$$\hat{G}_{\text{ren}}^{(0,2)}(p; m, u, c) \Big|_{p=0} = \frac{1}{m+c}, \quad (14)$$

$$\frac{\partial}{\partial p^2} \hat{G}_{\text{ren}}^{(0,2)}(p; m, u, c) \Big|_{p=0} = -\frac{1}{2m(m+c)^2}, \quad (15)$$

$$\hat{G}_{\text{ren}}^{(0,2;0,1)}(\vec{p}, \vec{P}; m, u, c) \Big|_{\vec{p}=\vec{P}=\vec{0}} = (m+c)^{-2}. \quad (16)$$

Рівняння (14) визначає перенормовану поверхневу константу зв'язку c і її взаємозв'язок з вихідним параметром c_0 . Разом з (4) ця умова нормування забезпечує те, що спеціальний поверхневий фазовий перехід відбувається при $m = c = 0$. Звичайний перехід відповідає границі $m \rightarrow 0$ при фіксованому $c > 0$. У цьому режимі перенормована локальна поверхнева сприйнятливості

$$\chi_{11,\text{ren}} \equiv \hat{G}_{\text{ren}}^{(0,2)}(p=0) \rightarrow c^{-1} \quad (17)$$

і залишається, як і повинно бути, скінченною в точці переходу. Дві останні умови нормування визначають нові поверхневі ренормалізаційні фактори Z_1 і $Z_{\phi_s^2}$:

$$Z_1 Z_\phi = -2m(m+c)^2 \quad (18)$$

$$\frac{\partial}{\partial p^2} \hat{G}^{(0,2)}[p; m_0(m, u), u_0(m, u), c_0(c, m, u)] \Big|_{p=0}$$

$$Z_{\phi_s^2}^{-1} = -[Z_1 Z_\phi]^{-1}(m+c)^2 \quad (19)$$

$$\frac{\partial}{\partial c_0} \hat{G}^{(0,2)}[0; m_0(m, u), u_0(m, u), c_0] \Big|_{c_0=c_0(c, m, u)}$$

Підкреслимо, що наш вибір "поверхневих" умов нормування (14) - (16) передбачає, що поверхневі Z - фактори, взагалі кажучи, є функціями як перенормованої константи зв'язку, так і безрозмірної змінної c/m . Таке загальне формулювання дозволяє, в принципі, охопити як граничні випадки спеціального і звичайного фазових переходів, так і кросоверну область між ними.

3. Спеціальний перехід

Для опису спеціального переходу ми працюємо в околі мультикритичної точки, яка досягається при $c = 0$. Покладання $c = 0$ в описаній вище теорії не приводить до будь-яких проблем, за умови, що попередньо було виконано перенормування поверхневої константи зв'язку. При $c = 0$ ми отримуємо ренормалізаційні фактори

$$Z_1^{sp}(u) Z_\phi(u) = -2m^3 \frac{\partial}{\partial p^2} \hat{G}^{(0,2)}[p; m_0(m, u), u_0(m, u), c_0^{sp}(m, u)] \Big|_{p=0}, \quad (20)$$

$$\left[Z_{\phi_s^2}^{sp}(u) \right]^{-1} = -m^2 [Z_1^{sp}(u) Z_\phi(u)]^{-1} \quad (21)$$

$$\frac{\partial}{\partial c_0} \hat{G}^{(0,2)}[0; m_0(m, u), u_0(m, u), c_0] \Big|_{c_0=c_0^{sp}(m, u)}$$

за допомогою яких визначаються перенормовані кореляційні функції $G_{\text{ren,sp}}^{(N,M;I,I_1)}$ при $c = 0$ ($c_0 = c_0^{sp}$) (див. р-ня (13)). Ренормалізаційні фактори $Z_1^{sp}(u)$ і $Z_{\phi_s^2}^{sp}(u)$ забезпечують скінченність перенормованої теорії при спеціальному переході і в його околі.

3.1. Рівняння Каллана-Симанзіка

Критична поведінка при спеціальному переході отримується шляхом дослідження асимптотичної поведінки результуючої масивної теорії з $c = 0$ в границі $m \rightarrow 0$. У цьому випадку перенормовані кореляційні функції $G_{\text{ren,sp}}^{(N,M)}$ задовільняють диференціальним рівнянням з частковими похідними, які є узагальненням відомих рівнянь Каллана-Симанзіка:

$$\left[m \frac{\partial}{\partial m} + \beta(u) \frac{\partial}{\partial u} + \frac{N+M}{2} \eta_\phi(u) + \frac{M}{2} \eta_1^{sp}(u) \right] G_{\text{ren,sp}}^{(N,M)}(; m, u) = \Delta G_{\text{ren}} \quad (22)$$

де

$$\Delta G_{\text{ren}} \equiv -[2 - \eta_\phi(u)] m^2 \int_V d^d X G_{\text{ren,sp}}^{(N,M;1,0)}(; m, u). \quad (23)$$

Коефіцієнтні ренормгрупові функції у цих рівняннях є

$$\beta(u) = m \frac{\partial}{\partial m} \Big|_0 u, \quad (24)$$

$$\eta_\phi(u) = m \frac{\partial}{\partial m} \Big|_0 \ln Z_\phi(u) = \beta(u) \frac{d \ln Z_\phi(u)}{du} \quad (25)$$

і

$$\eta_1^{sp}(u) = m \frac{\partial}{\partial m} \Big|_0 \ln Z_1^{sp}(u) = \beta(u) \frac{d \ln Z_1^{sp}(u)}{du}. \quad (26)$$

Перші дві з них - стандартні об'ємні функції, а $\eta_1^{sp}(u)$ - додаткова, специфічна для проблеми, що розглядається. Символ $|_0$ означає, що похідні беруться при фіксованих неперенормованих параметрах (і імпульсі обрізання Λ). Для дослідження асимптотичної границі достатньо розглядати однорідні рівняння (22) з $\Delta G_{\text{ren}} = 0$.

Для ідентифікації кросоверного показника Φ потрібно розглядати відхилення від мультикритичної точки, $\Delta c_0 = c_0 - c_0^{sp}$, і виконати розклад кореляційних функцій за цим малим відхиленням. При цьому не виникають інфрачервоні розбіжності, так як використовується *масивна* теорія. Аналогом величини Δc_0 у перенормованій теорії виступатиме

$$\Delta c \equiv \left[Z_{\phi_s^2}^{sp}(u) \right]^{-1} \Delta c_0. \quad (27)$$

Перенормовані кореляційні функції залежатимуть від додаткової безрозмірної змінної

$$c \equiv \Delta c / m, \quad (28)$$

а ренормгрупові рівняння для них матимуть у лівій частині додатковий диференціальний оператор

$$- [1 + \eta_c^{sp}(u)] c \frac{\partial}{\partial c}, \quad (29)$$

де з'являється нова коефіцієнтна функція

$$\eta_c^{sp}(u) = m \frac{\partial}{\partial m} \Big|_0 \ln Z_{\phi_s^2}^{sp}(u) = \beta(u) \frac{d}{du} \ln Z_{\phi_s^2}^{sp}(u). \quad (30)$$

3.2. Скейлінгова поведінка в околі спеціального переходу

Розв'язки узагальнених рівнянь Каллана-Симанзіка визначають асимптотичні скейлінгові форми кореляційних функцій поблизу мультикритичної точки. Ми використовуємо відомі співвідношення об'ємної масивної теорії поля

$$m \sim (m_0^2 - m_{0c}^2)^\nu \sim \tau^\nu, \quad (31)$$

$$Z_\phi \sim (u - u^*)^{\eta/\omega} \sim m^\eta, \quad (32)$$

де $\tau \equiv (T - T_c)/T_c$ - мале відносне відхилення від критичної температури, а ν - критичний показник кореляційної довжини. Як звичайно, $(u - u^*) \sim m^\omega$, де $\omega = \beta'(u^*) > 0$, а η - малий критичний індекс.

Аналогічним чином поводять себе і нові "поверхневі" Z - фактори:

$$Z_1^{sp} \sim (u - u^*)^{\eta_1^{sp}(u^*)/\omega} \sim m^{\eta_1^{sp}(u^*)}, \quad (33)$$

$$Z_c^{sp} \sim (u - u^*)^{\eta_c^{sp}(u^*)/\omega} \sim m^{\eta_c^{sp}(u^*)} \quad (34)$$

при $u \rightarrow u^*$ ($m \rightarrow 0$). Використання цих асимптотичних залежностей приводить до співвідношень

$$\Delta c \sim m^{-\eta_c^{sp}(u^*)} \Delta c_0, \quad c \sim m^{-[1 + \eta_c^{sp}(u^*)]} \Delta c_0, \quad (35)$$

з яких впливає ідентифікація скейлінгової змінної $\tau^{-\Phi} \Delta c_0$ і кросоверного показника

$$\Phi = \nu [1 + \eta_c^{sp}(u^*)]. \quad (36)$$

З розв'язків рівнянь Каллана-Симанзіка і наведених вище результатів впливають наступні асимптотичні скейлінгові форми кореляційних функцій в околі спеціального переходу:

$$G^{(N,M)}(\vec{x}, \vec{r}; m_0, u_0, c_0) \sim m^{(N\beta + M\beta_1^{sp})/\nu} \Psi^{(N,M)}\left(m\vec{x}, m\vec{r}, m^{-\Phi/\nu} \Delta c_0\right). \quad (37)$$

Тут β і β_1^{sp} - стандартні об'ємний і поверхневий критичний показники, що характеризують поведінку відповідних намагніченостей. Показник β_1 зв'язаний з поверхневим кореляційним показником $\eta_{||}$ скейлінговим співвідношенням

$$\beta_1 = \frac{\nu}{2} (d - 2 + \eta_{||}), \quad (38)$$

де, у випадку спеціального переходу, $\eta_{||}^{sp}$ визначається через ренормгрупову функцію $\eta_1^{sp}(u)$ як

$$\eta_{||}^{sp} = \eta(u^*) + \eta_1^{sp}(u^*). \quad (39)$$

4. Звичайний перехід

У випадку звичайного переходу необхідно розглядати граничний режим $c/m \rightarrow \infty$. Це пов'язано з відомою трудністю. Справа в тому, що завдяки граничній умові Діріхле, якій задовольняють поверхневі поля при звичайному переході, в границі $c/m = \infty$ кореляційні функції $G^{(N,M>0)}$, що включають хоч одне поле на поверхні, тожньо обертаються в нуль. Але, оскільки при граничних умовах Діріхле ведучим "оператором" поверхневого операторного розкладу [4,5] поля $\phi(\vec{r}, z \rightarrow 0)$ є нормальна похідна цього поля на поверхні $\partial_n \phi(\vec{r})$, то необхідна інформація може бути отримана з розгляду нових кореляційних функцій

$$\mathcal{G}^{(N,M)}(\vec{x}_1, \dots, \vec{r}_M) \equiv \left\langle \left[\prod_{j=1}^N \phi^{a_j}(\vec{x}_j) \right] \left[\prod_{k=1}^M \partial_n \phi^{b_k}(\vec{r}_k) \right] \right\rangle_c. \quad (40)$$

Функції $\mathcal{G}^{N,M}$ не зникають при $c_0 = \infty$, і дають таким чином можливість [6] визначити скейлінгову вимірність поля $\partial_n \phi(\vec{r})$, яка визначає критичний показник поверхневих кореляцій при звичайному переході, η_{\parallel}^{ord} .

Схема розрахунку наступна. Вводиться перенормоване поверхневе поле

$$(\partial_n \phi)_{\text{ren}} = [Z_{1,\infty} Z_{\phi}]^{-1/2} \partial_n \phi, \quad (41)$$

і перенормовані кореляційні функції

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{G}}_{\infty, \text{ren}}^{(N;M)}(\{\vec{p}\}; \{z_j\}; m, u) = \\ Z_{\phi}^{-(N+M)/2} Z_{1,\infty}^{-M/2} \left[\hat{\mathcal{G}}_{\infty}^{(N;M)}(\{\vec{p}\}; \{z_j\}) - \delta_{N,0}^{M,2} \hat{\mathcal{G}}_{\infty}^{(0,2)}(0) \right]. \end{aligned} \quad (42)$$

Новий ренормалізаційний фактор $Z_{1,\infty}(u)$, що відповідає за перенормування величини $\partial_n \phi$, ми визначаємо з умови перенормування

$$\left. \frac{\partial}{\partial p^2} \hat{\mathcal{G}}_{\infty, \text{ren}}^{(0,2)}(p; m, u) \right|_{p=0} = -\frac{1}{2m}. \quad (43)$$

У роботі [8], використовуючи асимптотичний аналіз при $c/m \rightarrow \infty$ наших загальних умов нормування з розділу 2.2, ми показали, що Z -фактор $Z_{1,\infty}(u)$ зв'язаний з Z -фактором $Z_1(u, c/m)$ (що відповідає за перенормування поверхневих *полів* ϕ_s) співвідношенням

$$Z_{1,\infty}(u) = \lim_{c/m \rightarrow \infty} [Z_1(u, c/m)]^{-1}. \quad (44)$$

З використанням цього співвідношення продемонстровано також, що в режимі $c/m \rightarrow \infty$ кожне поверхневе поле ϕ_s вносить свій фактор $m^{(d-2+\eta_{\parallel}^{ord})/2}$ в асимптотичну поведінку кореляційних функцій $G^{(N;M)}$ з р-ня (11). Таким чином показано, що в околі звичайного переходу кореляційні функції $\mathcal{G}_{\infty}^{(N;M)}$ з M нормальними похідними $\partial_n \phi$ і $G^{(N;M)}$ з M поверхневими полями ϕ_s мають однакову асимптотичну критичну поведінку, а запропонована нами нова "с-залежна" схема перенормувань успішно працює у всіх необхідних граничних режимах.

А для явного розрахунку критичних показників звичайного переходу необхідно визначити ренормгрупову функцію

$$\eta_{1,\infty}(u) = m \left. \frac{\partial}{\partial m} \right|_0 \ln Z_{1,\infty}(u) = \beta(u) \frac{\partial \ln Z_{1,\infty}(u)}{\partial u} \quad (45)$$

і відповідний показник критичних кореляцій

$$\eta_{\parallel}^{ord} = 2 + \eta_1^{ord}(u^*) + \eta_{\phi}(u^*), \quad (46)$$

5. Довільні вимірності простору: явний розрахунок

Оскільки наша "масивна" теорія є вільною від інфрачервоних розбіжностей, вона може застосовуватися для всіх вимірностей простору d , $d_*(n) < d < 4$, що представляють інтерес. Загальні вирази для ренормгрупових функцій з довільним d можливо отримати явно в однопетльовому наближенні [7]. Для випадку спеціального переходу ми маємо:

$$\eta_1^{sp}(u^*) = -\frac{n+2}{n+8} \frac{\epsilon}{1+\epsilon} \quad (47)$$

і

$$\eta_c^{sp}(u^*) = \frac{n+2}{n+8} \frac{\epsilon}{1+\epsilon} \left[1 - 2^{\frac{1+\epsilon}{2}} {}_2F_1 \left(\frac{3-\epsilon}{2}, \frac{1+\epsilon}{2}; \frac{3+\epsilon}{2}; \frac{1}{2} \right) \right], \quad (48)$$

де $\epsilon \equiv 4-d > 0$ не обов'язково безмежно мале, а ${}_2F_1(\dots)$ - звичайна гіпергеометрична функція. З наших формул відтворюються при $\epsilon \rightarrow 0$ відомі результати ϵ -розкладу. А при $d=3$ можна отримати чисельні оцінки

$$\eta_1^{sp}(n=0) = \eta_{\parallel}^{sp}(n=0) = -\frac{1}{8} \simeq -0.13, \quad (49)$$

$$\eta_1^{sp}(n=1) = \eta_{\parallel}^{sp}(n=1) = -\frac{1}{6} \simeq -0.17 \quad (50)$$

і

$$\eta_c^{sp}(n=0) = \frac{1}{8} (1 - 4 \ln 2) \simeq -0.22, \quad (51)$$

$$\eta_c^{sp}(n=1) = \frac{1}{6} (1 - 4 \ln 2) \simeq -0.30. \quad (52)$$

Величини, отримані в цьому найпростішому наближенні для η_1^{sp} , дуже добре узгоджуються з результатами наших складних двопетльових розрахунків. Гіршим є узгодження у випадку η_c^{sp} : як виявляється, ряд теорії збурень для цієї функції поводить себе набагато гірше, і для надійних чисельних оцінок необхідно переходити до вищих наближень і застосовувати спеціальні методи пересумувань.

6. Поверхневі критичні показники тривимірних напівобмежених систем

Відповідно до сформульованої вище загальної схеми перенормувань ми виконали явні розрахунки ренормгрупових функцій, що визнача-

ють поверхневі критичні показники, в рамках двопетльового наближення у фізичній вимірності простору $d = 3$. Деталей розрахунків за теорією збурень та обчислень відповідних інтегралів Фейнмана ми не приводимо з огляду на відсутність місця, вони докладно описані в роботі [8]. Приведемо тільки коротко наші результати для двох типів поверхневих переходів: спеціального і звичайного.

6.1. Спеціальний перехід

Двопетльові ренормгрупові η -функції, що безпосередньо визначають критичні показники спеціального поверхневого переходу, є

$$\eta_{\parallel}^{sp}(u) = -\frac{n+2}{2(n+8)}u + \frac{12(n+2)}{(n+8)^2} \left[2A - \frac{n+2}{6}(1 - \ln 2) \ln 2 + \frac{n-10}{48} \right] u^2 \quad (53)$$

і

$$\eta_c^{sp}(u) = -\frac{n+2}{n+8} \left(2 \ln 2 - \frac{1}{2} \right) u - \frac{24(n+2)}{(n+8)^2} \left[A - B - \frac{n+1}{2} \ln 2 + \frac{n+2}{3} \ln^2 2 + \frac{17n+22}{96} \right] u^2. \quad (54)$$

$A = 0.202428$ і $B = 0.678061$ - чисельні значення інтегралів Фейнмана, пов'язаних з двопетльовою діаграмою з трьома еквівалентними внутрішніми лініями, які не вдалося розрахувати аналітично, на відміну від усіх інших внесків. Виходячи з розкладів для $\eta_{\parallel}(u)^{sp}$ і $\eta_c^{sp}(u)$, а також відомих об'ємних функцій $\eta(u)$ і $\nu(u)$, ми генеруємо аналогічні ряди теорії збурень для інших поверхневих показників, використовуючи відомі скейлінгові співвідношення [4]

$$\Delta_1 = \frac{\nu}{2} (d - \eta_{\parallel}), \quad (55)$$

$$\eta_{\perp} = \frac{\eta + \eta_{\parallel}}{2}, \quad (56)$$

$$\beta_1 = \frac{\nu}{2} (d - 2 + \eta_{\parallel}), \quad (57)$$

$$\gamma_{11} = \nu (1 - \eta_{\parallel}), \quad (58)$$

$$\gamma_1 = \nu (2 - \eta_{\perp}), \quad (59)$$

$$\delta_1 = \frac{\Delta}{\beta_1} = \frac{d+2-\eta}{d-2+\eta_{\parallel}}, \quad (60)$$

$$\delta_{11} = \frac{\Delta_1}{\beta_1} = \frac{d-\eta_{\parallel}}{d-2+\eta_{\parallel}}, \quad (61)$$

$$\alpha_1^{sp} = \alpha + \nu - 1 + \Phi = 1 - \nu [d - 2 - \eta_c^{sp}(u^*)], \quad (62)$$

$$\alpha_{11}^{sp} = \alpha + \nu - 2 + 2\Phi = -\nu [d - 3 - \eta_c^{sp}(u^*)]. \quad (63)$$

Як відомо з більш дослідженої об'ємної теорії, розклади такого типу є асимптотичними. Для отримання надійних чисельних оцінок критичних показників з таких рядів, до них необхідно застосовувати спеціальні процедури пересумування. Для кожного ряду теорії збурень (55)-(63) і для оберненого йому ряду ми будемо відповідну таблицю Паде, а також виконуємо пересумування типу Паде-Бореля. Результати чисельних розрахунків приведені у вигляді таблиць у роботах [7,8], поряд із докладним описом способів їх отримання. Тут ми наведемо тільки деякі приклади наших чисельних оцінок, порівнюючи їх з результатами розрахунків типу Монте Карло.

Наші результати для кросоверного показника $\Phi(n)$, $\Phi(1) = 0.539$ (клас універсальності моделі Ізінга) і $\Phi(0) = 0.518$ (клас універсальності полімерних систем) добре узгоджуються з найновішими результатами комп'ютерного моделювання $\Phi(1) = 0.461 \pm 0.015$ [10] і $\Phi(0) = 0.530 \pm 0.007$ [11], $\Phi(0) = 0.496 \pm 0.005$ [12], на відміну від попередніх, явно завищених чисельних оцінок з ϵ -розкладу [4] $\Phi(1) \approx 0.68$ і $\Phi(0) \approx 0.67$.

Наша чисельна оцінка $\alpha_{11}^{sp}(n=1) = -0.182$ передбачає виконання нерівності

$$\alpha_{11}^{sp} < 0 \quad (64)$$

для ізінгівських систем. Ця нерівність є, фактично, критерієм несуттєвості [13] слабкої короткосяжно корельованої замороженої неупорядкованості на поверхні для систем такого типу у тривимірному просторі при спеціальному переході. Цей факт несуттєвості був підтверджений останнім часом симуляціями Монте Карло [14].

6.2. Звичайний перехід

Явний вираз для ренормгрупової функції η_{\parallel}^{ord} , яка визначає поверхневі критичні показники звичайного переходу, у двопетльовому наближенні має вигляд

$$\eta_{\parallel}^{ord}(u) = 2 - \frac{n+2}{2(n+8)}u - \frac{24(n+2)}{(n+8)^2} \left(C + \frac{n+14}{96} \right) u^2. \quad (65)$$

де $C = \frac{107}{162} - \frac{7}{3} \ln \frac{4}{3} - 0.094299 = -0.105063$. Нові ряди теорії збурень для поверхневих показників (55)-(61) ми аналізуємо аналогічно, як і у випадку спеціального переходу [7,8]. Не вдаючись у розрахункові подробиці, наведемо деякі приклади наших чисельних результатів.

Наші оцінки $\gamma_{11}^{ord} = -0.388$ і $\gamma_1^{ord} = 0.680$ для класу універсальності полімерів ($n = 0$) прекрасно узгоджуються з найновішими, і, очевидно, найточнішими даними розрахунків типу Монте Карло [12] $\gamma_{11}^{ord}(0) = -0.383(5)$ і $\gamma_1^{ord}(n=0) = 0.679(2)$. Подібно, для класу універсальності ізінгівських систем наші величини $\beta_1^{ord}(1) = 0.796$ і $\gamma_1^{ord}(1) = 0.769$ є дуже близькими до оцінок методами Монте Карло [15] $0.807(4)$ і $0.760(4)$. Найновіші чисельні оцінки [14] співпадають, в межах їх точності, з нашими.

Ми пропонуємо також чисельні оцінки аналогічної якості для поверхневих показників систем з вищими вимірностями параметра порядку — $n = 2$ і $n = 3$. Для таких систем є дуже мало альтернативних літературних даних, що пов'язано, очевидно, з труднощами їх комп'ютерного моделювання.

Наші чисельні оцінки добре узгоджуються також з наявними експериментальними даними. Поза можливими порівняннями для систем з однокомпонентним параметром порядку [8], приведемо лише один приклад для $n = 3$. Наше значення $\beta_1^{ord}(3) = 0.824$ практично співпадає з класичною експериментальною величиною, отриманою на поверхні (100) нікелю [16], $\beta_1 = 0.825_{-0.040}^{+0.025}$.

Література

1. K. G. Wilson, J. Kogut, Phys. Rep. **12C**, 75 (1974)
2. *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 6, edited by C. Domb and M. S. Green (Academic Press, London, 1976)
3. J. Zinn-Justin, *Euclidean Field Theory and Critical Phenomena* (Oxford University Press, New York 1989)
4. H. W. Diehl, in: *Phase Transitions and Critical Phenomena*, edited by C. Domb and J. L. Lebowitz (Academic, London, 1986), Vol. 10, p. 75.
5. H. W. Diehl, Int. J. Mod. Phys. B **11**, 3503 (1997).
6. H. W. Diehl, M. Shpot, Phys. Rev. Lett. **73**, 3431 (1994).
7. M. Shpot, Cond. Matt. Phys. N **10**, 143 (1997).
8. H. W. Diehl, M. Shpot, Nucl. Phys. B **528**, 595 (1998).
9. K. Symanzik, Lett. Nuovo Cimento **8**, 771 (1973).

10. C. Ruge, S. Dunkelmann, and F. Wagner, Phys. Rev. Lett. **69**, 2465 (1992); C. Ruge, S. Dunkelmann, F. Wagner, and J. Wulff, J. Stat. Phys. **73**, 293 (1993).
11. H. Meirovitch and S. Livne, J. Chem. Phys. **88**, 4507 (1988).
12. R. Hegger and P. Grassberger, J. Phys. A **27** 4069 (1994).
13. H. W. Diehl and A. Nüsser, Z. Phys. B **79**, 69 (1990).
14. M. Pleimling and W. Selke, Eur. Phys. J. B **1**, 385 (1985).
15. C. Ruge and F. Wagner, Phys. Rev. B **52**, 4209 (1995).
16. S. F. Alvarado, M. Campagna, and H. Hopster, Phys. Rev. Lett. **48**, 51 (1982)

OPTICAL-AND-REFRACTIVE INVESTIGATIONS OF CRITICAL INDICES OF PHASE TRANSITIONS IN CRYSTALS

Bohdan Andriyevsky

*The Ivan Franko State University of Lviv, 8 Kyryla and
Mefodiya Street, Lviv, 290005, Ukraine*

1. Introduction

It is known, that critical behaviour of spontaneous polarization P_s at the 2nd order phase transition (PT) in crystal is described by the critical index β ,

$$P_s \sim (T_c - T)^\beta, \quad (1)$$

where T_c is the PT temperature [1].

At the other hand, experimental temperature dependences of crystal's parameters in the range of PT, describing in the frame of Landau theory, can be interpreted usually with the help of the coefficients of thermodynamic potential expansion. According to Landau theory, the elastic Gibbs energy G_1 in the case of uniaxial ferroelectric can be expressed in the very simple polynomial form

$$G_1 = \frac{1}{2}AD^2 + \frac{1}{4}BD^4 + \frac{1}{6}CD^6, \quad (2)$$

where D is electric displacement, A , B and C are coefficients [2]. Here, energy is measured in the non-polar phase and the polynomial is arbitrarily terminated at D^6 . Dielectric equation of state $E_i = \partial G_1 / \partial D_i$ takes on the following form

$$E = AD + BD^3 + CD^5, \quad (3)$$

where E is the electric field. In the first approximation, which is in many cases satisfying, we assume:

$$A = A_o(T - T_c). \quad (4)$$

Coefficient A_o is usually determined from the measurements of dielectric constant as a function of temperature in the paraelectric (PE) phase. In the ferroelectric (FE) phase the coefficients B and C can be

determined from the temperature dependence of P_s ($E=0$, $D=P_s$). The dielectric state equation (3) can be now written as follows

$$P_s^2 = \frac{B}{2C} \left((1 + 4A_o(T_c - T) \frac{C}{B^2})^{1/2} - 1 \right). \quad (5)$$

For the characterisation of the order of the phase transition the parameter $V = \frac{B^2}{A_o C}$ can be used [2]. The physical sense of the parameter is clearly visible in the description of the first-order PT. The polarized state becomes stable at the temperature $T_o = T_c + \frac{3B^2}{16A_o C}$, whereas the upper limit of a superheating is $T_1 = T_c + \frac{B^2}{4A_o C}$. When the line of the first-order phase transition approaches the line of the second order phase transitions, the absolute value of V decreases at the tricritical point $T_o = T_1 = T_c$. We believe that both approaches, based on the formulae (1) or (5) for approximation of temperature dependences of spontaneous polarization, can be useful for describing the critical behavior of ferroelectrics near the PT point. In the first five columns of the table 1 V parameter as well as the parameters of the equation of state A_o , B , C for some ferroelectric crystals are presented [2].

Table 1. Coefficients A , B and C of the dielectric state equation (5), coefficient V , and corresponding critical index β (1) for some ferroelectrics

<i>Crystal</i>	$A_o[\frac{Vm}{K}]$	$B[\frac{Vm^5}{C^3}]$	$C[\frac{Vm^9}{C^5}]$	$V = \frac{B^2}{A_o C}$	β
<i>TGS</i>	$3.7 \cdot 10^7$	$7.5 \cdot 10^{11}$	$5 \cdot 10^{15}$	3.03	0.38
<i>TGSe</i>	$2.63 \cdot 10^7$	$3.97 \cdot 10^{10}$	$3 \cdot 10^{14}$	0.20	0.30
<i>DTG(47DGN)</i>	$1.26 \cdot 10^7$	$6.1 \cdot 10^{13}$	$9.5 \cdot 10^{15}$	$3 \cdot 10^3$	0.50
<i>DMAAS</i>	$3.69 \cdot 10^7$	$3.5 \cdot 10^{11}$	$4.2 \cdot 10^{15}$	0.79	0.33
<i>MAPBB</i>	$5.57 \cdot 10^7$	$1.64 \cdot 10^{12}$	$2.6 \cdot 10^{16}$	1.88	0.36
<i>MAPCB</i>	$11.56 \cdot 10^7$	$7.2 \cdot 10^{12}$	$2.4 \cdot 10^{17}$	1.88	0.37
<i>TAAP</i>	$2.97 \cdot 10^7$	$6.9 \cdot 10^{11}$	$1.5 \cdot 10^{15}$	10.38	0.44
<i>CDP</i>	$1.56 \cdot 10^6$	$1.32 \cdot 10^9$	$1.5 \cdot 10^{13}$	0.07	0.28

On the basis of the values in table 1, we have calculated the temperature dependences of spontaneous polarization by the formula (5), and then obtained corresponding critical index β using the formula (1). The most frequently used in practice the temperature changes of the retardation by birefringence Δn , $\delta D = \delta(l \cdot \Delta n)$, are identified with the changes

of birefringence $\delta\Delta n$. But the geometrical size l and birefringence Δn can have different temperature dependences. The temperature dependences of $D(T)$ and $l(T)$ are usually investigated in different experiments. This restricts an accuracy of determination of corresponding dependence of $\Delta n(T)$ and $l(T)$, and complicates the comparing of these different parameters of crystal in the region of PT. We have proposed the technique of simultaneous determination of temperature dependences of electron susceptibility $\eta = n - 1$ and geometric thickness l of sample.

Temperature dependences of the refractive indices and linear thermal expansion of TGS in the range of PT were already studied [3–5], but the corresponding critical indices have not been determined. The goals of the present investigation were precise measurements of temperature dependences of interferometric retardation of the sample-air type for the TGS in the range of 2nd order PT at 322 K, calculation of the temperature dependences of refractive indices and linear thermal expansion for the main crystal physics directions, and the study of these dependences using the corresponding critical indices 2β .

2. Experimental

Temperature dependences of retardation by the susceptibility η for two interfering beams, one of which has passed through a sample studied, and the other one through an air, were measured with the help of Jamen type home built interferometer (Fig.1).

In this case the retardation D and its temperature dependence $D(T)$ can be written in the form

$$D = l \cdot (n - 1) = l \cdot \eta, D(T) = l(T) \cdot \eta(T), \quad (6)$$

where n is the refractive index of the sample. The laser light of the wavelength $\lambda=632.8\text{nm}$ was used in the experiments.

Proceeding from the relation (6), the temperature changes of relative retardation $\Delta D/D$ along three main crystal physics directions can be written in the form of system of linear equations

$$\frac{\Delta D_{ij}}{D_{ij}} = \frac{\Delta l_i}{l_i} + \frac{\Delta \eta_j}{\eta_j}, \quad (i, j = 1, 2, 3; i \neq j), \quad (7)$$

where index i denotes the direction of light propagation, index j denotes the direction of light polarization. On the basis of six temperature dependences $\Delta D_{ij}/D_{ij}$ measured we have determined the relative temperature changes of geometric thickness $\Delta l_i/l_i$ and susceptibility $\Delta \eta_j/\eta_j$ [6].

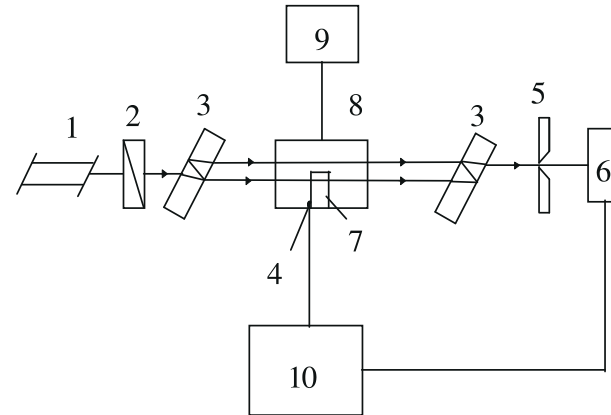


Figure 1. Scheme of the experiment. 1: He-Ne laser; 2: the polarizer; 3: glass plates of Jamen type interferometer; 4: the sample; 5: the diaphragm; 6: the photodiode; 7: the thermocouple; 8: the thermostat; 9: the electrical supply block; 10: the recording block

Results of computer calculations have shown, that the relative errors of temperature changes determination of geometric thickness $\delta l_i/l_i$ and susceptibility $\delta \eta_j/\eta_j$ caused by solving of the system (7) did not exceed 5% of the respective maximum magnitudes $\Delta l_i/l_i$ and $\Delta \eta_j/\eta_j$ for the case of TGS crystal. The initial l_i and η_j values were measured independently at the initial temperature T_0 . In our case ($l=5\text{ mm}$ and $n=1.5$) the error of determination of the interference order was $\delta m(T) \leq 1/4$, that corresponds to the errors of $\delta D/D \sim \delta l/l \sim \delta \eta/\eta \sim 10^{-5}$.

3. Results and Discussion

Temperature dependences of the relative changes of retardation for TGS crystal $\Delta D_{ij}/D_{ij}$ are shown on Fig.2. Refractive indices $n_j(T_0)$ of TGS crystal were taken from the paper [5]. The forms of temperature dependences of geometrical thickness $\Delta l_i/l_i$ and susceptibilities $\Delta \eta_j/\eta_j$ calculated from the system of equations (7) are characterized by similar anomaly at PT temperature.

On the basis of known relation for temperature changes of order

parameter p for 2nd order PT in the $T < T_c$ range,

$$\Delta Y_s \sim P_s^2 \sim \tau^{2\beta} = \left(\frac{T_c - T}{T_c - T_{min}} \right)^{2\beta}, \quad (8)$$

we have calculated the double critical indices 2β , replacing P_s^2 value by the spontaneous increases of $\Delta Y_s(T)/\Delta Y_s(T_{min})$ ($Y=D, l$ and η . Here $T_c=49^\circ\text{C}$ is the temperature of PT, T_{min} is lower edge of the temperature range studied ($T_{min}=39^\circ\text{C}$ in our case), $\Delta Y_s(T)$ and $\Delta Y_s(T_{min})$ are spontaneous increments, corresponding to the T_c and T_{min} temperatures. The double critical indices 2β of TGS in the range of $39-49^\circ\text{C}$ are shown in Table 2.

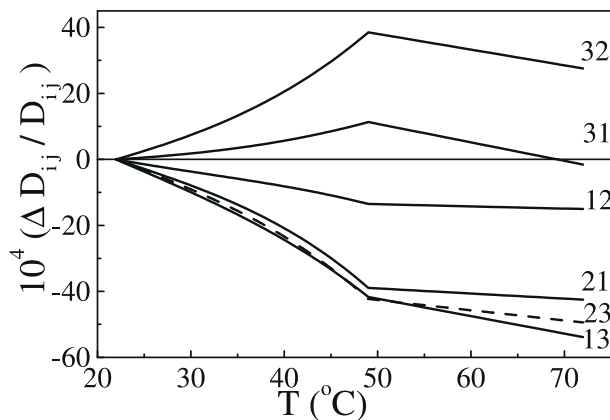


Figure 2. Experimental temperature dependences of the relative changes of optical thickness $\Delta D_{ij}/D_{ij}$ of TGS crystal (indices ij indicate corresponding curves)

The results obtained testify to not exact fulfilment of the functional dependences for quadratic electrooptic effect

$$\Delta n_s \sim P_s^2 \quad (9)$$

and electrostriction

$$\Delta l_s \sim P_s^2. \quad (10)$$

If these effects would displayed in the form indicated, the double critical index 2β would be equal to unity, $2\beta=1$. Therefore we tried to explain this experimental fact.

Table 2. Critical indices 2β , corresponding to the temperature dependences of spontaneous increments of $\Delta D_s/D$, $\Delta l_s/l$ and $\Delta \eta_s/\eta$ for different crystal physics direction of TGS crystal

$2\beta_{12}^{(D)}$	$2\beta_{13}^{(D)}$	$2\beta_{21}^{(D)}$	$2\beta_{23}^{(D)}$	$2\beta_{31}^{(D)}$	$2\beta_{32}^{(D)}$
0.899	0.898	0.888	0.893	0.945	0.924
$2\beta_1^{(l)}$	$2\beta_2^{(l)}$	$2\beta_3^{(l)}$	$2\beta_1^{(\eta)}$	$2\beta_2^{(\eta)}$	$2\beta_3^{(\eta)}$
0.910	0.895	0.923	0.876	0.925	0.877

Analytical relation of the observed temperature dependence of retardation $\Delta D_s/D$ induced by spontaneous polarization can be presented in the most common form

$$\Delta D_s/D(\tau) = a(\tau) \cdot P_s^2(\tau) = a(\tau) \cdot \tau, \quad (11)$$

where $a(\tau)$ is temperature dependent coefficient. It is follows from the character of experimental dependences of spontaneous increases of $\Delta D_s/D$, $\Delta l_s/l$, and $\Delta \eta_s/\eta$, that corresponding $a(\tau)$ coefficients are maximal in the region of PT (Fig.3).

To obtain additional proofs of validity of this viewpoint, we performed experimental study of artificially induced electrooptic effect in TGS crystal in the temperature range of $30-65^\circ\text{C}$. This investigation was carried out in the same arrangement as was done for the effect induced by spontaneous polarization. External electric field of $E \approx 3.5 \text{ kV/cm}$ magnitude was applied to sample at different temperatures along the $[010]$ -direction of spontaneous polarization P_s , and the corresponding induced increments of the retardation $\Delta D_e/D$ were measured. The maximum-like $\Delta D_e/D$ temperature dependence obtained (Fig.4) correlates well with the temperature dependence of $a(\tau)$. This maximum-like character of coefficient mentioned is connected with the non-equality $2\beta < 1$.

Taking into account that the temperature dependences of spontaneous increments of $\Delta Y_s/Y$ parameters can be presented in two forms, $Y(\tau) = \tau^{2\beta}$, and $Y(\tau) = a(\tau)\tau$, one can obtain the relation for the temperature dependence of $a(\tau)$ coefficient

$$a(\tau) = \tau^{2\beta} - 1. \quad (12)$$

In the cases of $2\beta < 1$ and $\tau < 1$, we receive a decreasing dependence of $a(\tau)$ coefficient in the ferroelectric phase at the removal from

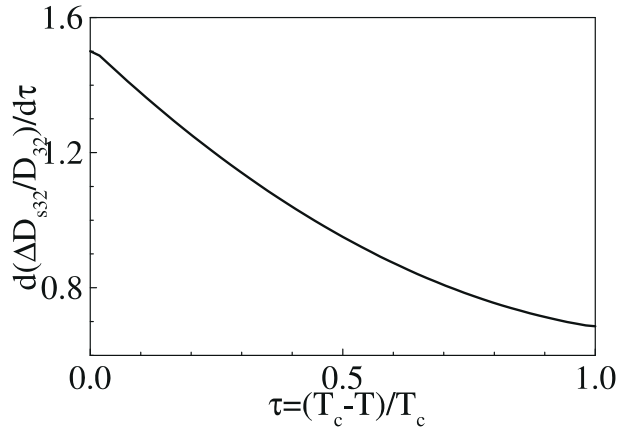


Figure 3. Temperature dependence of the relative temperature derivative $d(\Delta D_{s32}/D_{s32})/d\tau$ in ferroelectric phase.

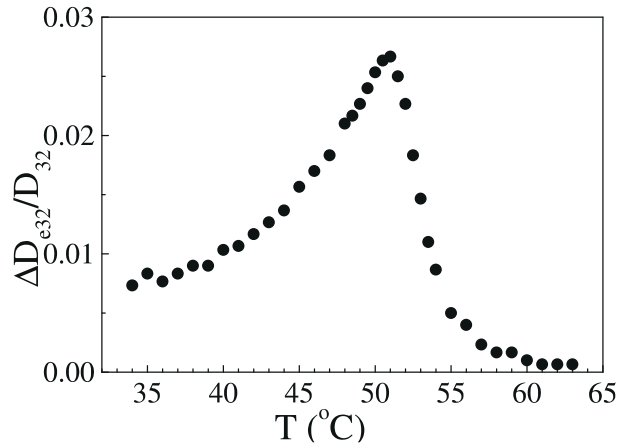


Figure 4. Temperature dependence of the relative optical path difference $\Delta D_{e32}/D_{32}$ of TGS crystal induced by the constant electric field of 3.5 kV/cm magnitude along the [010]-direction

the PT point $\tau = 0$ (Fig. 3). Taking into account all the results obtained, we can summarize for the temperature dependence of the coefficients of quadratic electrooptic and electrostriction effects for TGS crystals (see relations (9) and (10)). Analysis of the Table 2 testifies for certain segregation of the [010] direction of spontaneous polarization. Among the temperature changes of spontaneous increments Δl_i and $\Delta \eta_j$ ($i, j = 1, 2, 3$) the dependence $\Delta l_2(\tau)$ is characterised by the least index 2β , but the dependence $\Delta n_2(\tau)$ is characterised by the greatest one (Table 2). On the other hand, a proximity of the values $2\beta_2^{(l)} \approx 2\beta_2^{(n)}$ (Table 2) is observed on the background of obvious inequalities of similar characteristics for other two main crystal physics directions $2\beta_{1,3}^{(l)} > 2\beta_{1,3}^{(n)}$ (Table 2 and Fig. 5).

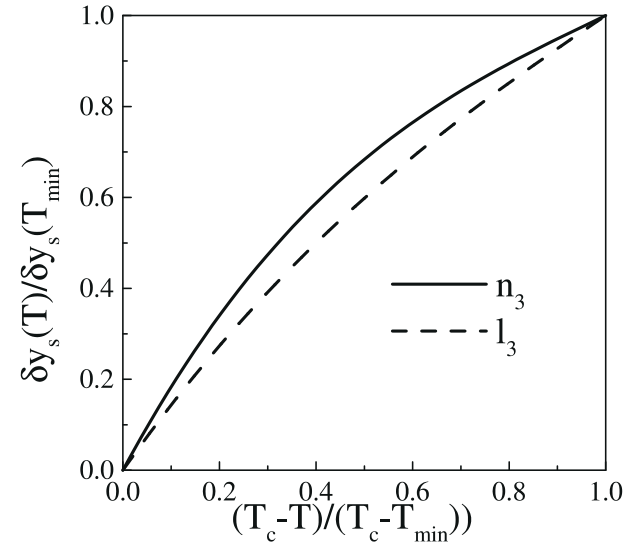


Figure 5. Dependences of normalised spontaneous changes of deformations (l_3) and changes of susceptibilities (η_3) of TGS for the [001] direction on the normalised temperature $(T_c - T)/(T_c - T_{min})$ in the range of 39-49°C

The last features can be interpreted as different rate of the ordering of two subsystems, one of which determines electron susceptibility and the other one is connected with geometric parameters of the crystal's unit cell for the directions [100] and [001]. The equality $2\beta_2^{(l)} \approx 2\beta_2^{(n)}$ for the

direction of spontaneous polarization [010] can be interpreted as good correlation of the mentioned above subsystems in TGS crystal. From such viewpoint, the observable inequalities of the indices $2\beta_{(1,3)}^{(l)} > 2\beta_{1,3}^{(\eta)}$ testify to various speeds of temperature changes of corresponding subsystems of the crystal in the temperature range ($\Delta T \sim 10^\circ\text{C}$) below the PT point. It is seen from Fig. 6 and corresponding to two different indices β_1 and β_2 . The crossing of the curves, corresponding to two different indices β (Fig. 6), will takes place in all cases if the experimental temperature dependence of the parameters studied ($V = \Delta D_s/D$, $\Delta l_s/l$, $\Delta\eta_s/\eta$) will be described by the power like law, $V \sim \tau^{2\beta}$.

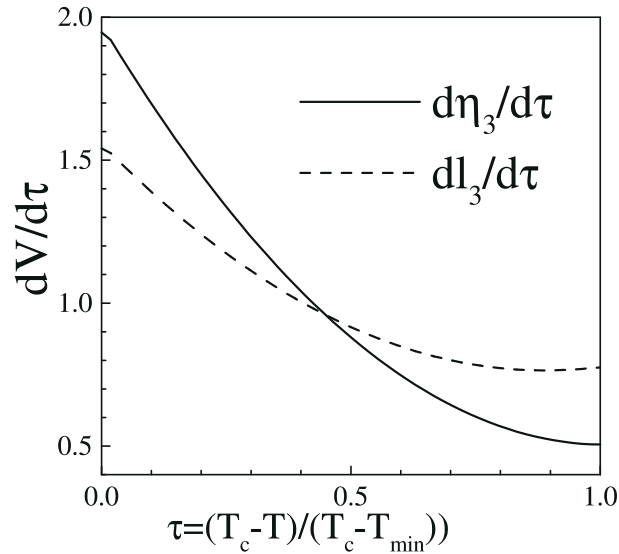


Figure 6. Temperature derivatives of the dependences from Fig. 5.

We suppose that such a peculiarity in the temperature dependence of different parameters can be characteristic for the ordering of another ferroelectric crystals.

4. Conclusion

1. Original laser interferometer technique of Jamen type for measuring the temperature change of retardation of transparent sample

is proposed. The techniques gives possibility to define temperature dependences of geometric thickness $l(T)$ and susceptibility $\eta(T)$ of crystal on the basis of measurement of temperature dependences of the retardation of crystal $D(T) = l(T)\eta(T)$ for different directions of light propagation and polarization.

2. Deviation from the unity of the double critical index 2β for the temperature dependence of retardation of TGS sample induced by spontaneous polarization is explained by significant temperature dependence of the maximum-like character of the coefficient of electrooptic, inverse piezooptic, and electrostriction effects.
3. An anisotropy of the critical indices $2\beta_i^{(l)}$ and $2\beta_i^{(\eta)}$, and nonequality $2\beta_i^{(l)} \neq 2\beta_i^{(\eta)}$ testify for different speeds of temperature changes of different subsystems of the crystal studied, taking place in ferroelectric ordering in the range of $\Delta T \sim 10^\circ\text{C}$ below T_c .

References

1. M.E. Lines., and A.M.Glass. Principles and Application of Ferroelectrics and Related Materials.- Clarendon Press, Oxford, 1977
2. R. Cach. Dielectric non-linear properties of some real ferroelectric crystals.- Wroclaw University Publ., Wroclaw, 1992
3. A.S. Sonin, A.S. Vasilevskaya. Electrooptical crystals.- "Atomizdat" Publ., Moscow, 1971 (in Russian)
4. L.G. Lomova, A.S. Sonin, T.A.Regulskaya. Spontaneous electrooptic effect in the triglycine sulphate single crystals //Kristallografiya.- 1968.- V. 13, No 1.- P. 90-94 (in Russian)
5. N.A. Romanyuk, A.M. Kostetskii, B.V. Andrievskii. Dispersion of the refractive index and some characteristics of absorption spectra for triglycine sulphate crystal's group //Phys. Solid State.- 1977.- V. 19, No 10.- P. 1809-1812
6. A.N.Malyshev. Introduction into calculational linear algebra.- Nauka, Novosibirsk, 1991 (in Russian)

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/>)

ІЗИНГІВСЬКІ ЧИТАННЯ-98 (ЛЬВІВ, 29 КВІТНЯ 1998)

Роботу отримано 19 листопада 1998 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром ІФКС НАН України

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені