НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

На правах рукопису

ПРИТУЛА Орест Олегович

УДК 536.7, 530.145

ВПЛИВ ЗОВНІШНЬОГО МАГНІТНОГО ПОЛЯ НА КРИТИЧНУ ПОВЕДІНКУ ТРИВИМІРНОГО ІЗИНГОПОДІБНОГО МАГНЕТИКА

01.04.02 – теоретична фізика

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т
дисертації на здобуття наукового ступеня кандидата
фізико-математичних наук

Львів – 2006

Дисертацією є рукопис.
Робота виконана в Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України.

Науковий керівник	–	доктор фізико-математичних наук, професор **Козловський Михайло Павлович**, Інститут фізики конденсованих системи НАН України, завідувач відділу статистичної теорії конденсованого стану.
Офіційні опоненти	–	член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор **Стасюк Ігор Васильович**, Інститут фізики конденсованих системи НАН України, завідувач відділу квантової статистики.
	–	доктор фізико-математичних наук, професор **Козицький Юрій Васильович,** Інститут математики Університету Марії Кюрі-Склодовської (м.Люблін, Польща), завідувач кафедрою інформатики.
Провідна організація	–	Київський національний університет імені Тараса Шевченка, фізичний факультет, м. Київ

Захист відбудеться ”___” січня 2007 року о 15 год. 30 хв. на засіданні спеціалізованої вченої ради **Д 35.156.01** при Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України за адресою: 79011 Львів, вул. Свєнціцького, 1.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту фізики конденсованих систем НАН України за адресою: 79026 Львів, вул. Козельницька, 4.

Автореферат розіслано “___ “ грудня 2006 року.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01,
кандидат фіз.-мат. наук Т.Є. Крохмальський

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Аналіз критичних явищ до цього часу викликає значний інтерес дослідників, що працюють в галузях теоретичної і експериментальної фізики. Актуальність даної тематики спричинена ріноманітністю застосування теорії фазових переходів до опису ряду систем як у фізиці, так і у інших галузях науки [Pelissetto A., Vicari E., Phys. Reports, 2002, **368**, 549.]. Критична поведінка тієї чи іншої реальної системи виникає внаслідок колективної взаємодії величезної кількості частинок. Врахувати ці взаємодії за допомогою отримання розв’язків рівнянь руху для кожної окремої частинки є надто складним завданням. Тому в теоретичній фізиці для вирішення таких завдань використовують різноманітні спрощені моделі і наближення, що дозволяють описати основні риси корпоративної поведінки. В загальному випадку модель визначається гамільтоніаном H системи, що дає можливість розрахувати статистичну суму

$$Z = \sum \exp[-\beta H] \tag{1}$$

і, як наслідок, решти фізичних характеристик.

Однією з найбільш простих і наочних моделей, що дозволяє описати поведінку цілого ряду реальних фізичних систем, є добре відома модель Ізинга [Ising E., Zeitschrift für Physik, 1925, **31**, 253]. Одновісні магнетики, прості рідини, бінарні сплави, міцелярні системи – це далеко неповний перелік об'єктів, яким притаманна ізингоподібна поведінка. Критична поведінка класу універсальності тривимірної моделі Ізинга виявлена в системах із сильними і електрослабкими взаємодіями, що спостерігаються у фізиці високих енергій [Rummukainen K., Tsypin M., Kajantie K., Laine M., Shaposhnikov M., Nucl. Phys. B, 1998, **532**, 283]. Вдалим є також застосування моделі Ізинга для опису явищ в суспільстві, зокрема, в економіці та соціології [W.-X. Zhou, D. Sornette, Preprint www.arxiv.org/physics/0503230]. Ще одним фактором, що спричинив популярність цієї моделі, є наявність точних розв'язків у двовимірному випадку, що дозволило апробувати ряд наближених методів для опису більш складних моделей. Не зважаючи на простоту моделі Ізинга, відсутність точного розв'язку у тривимірному випадку надалі залишає задачу актуальною.

Вирішальний вплив на критичну поведінку системи має зовнішнє поле. Для спінової моделі Ізинга воно є магнітним, але в інших статистичних системах роль поля може відігравати хімічний потенціал, як це має місце, зокрема, в системі рідина-газ або температура - при описі електрослабких взаємодій в стандартній моделі. Присутність зовнішнього поля приводить до розмивання фазового переходу II роду (ФП2). Крім того, в таких системах існує фазовий перехід I роду (ФП1) за полем. Отже у цьому випадку поведінка фізичного об'єкта є більш цікавою. Проте, розрахунок критичної поведінки таких систем на мікроскопічному рівні суттєво ускладнюється і вимагає математичних удосконалень відомих на сьогодні теоретичних методів.

В даній роботі для опису тривимірного ізингоподібного магнетика в зовнішньому полі використовується метод колективних змінних, який був розвинутий для дослідження поведінки ряду рівноважних статистичних систем І.Р. Юхновським [Yukhnovskii I. R., Phase Transitions of the Second Order. Collective Variables Method, World Scientific, Singapore, 1987]. Метод дозволяє отримати на мікроскопічному рівні повний набір фізичних характеристик, зокрема, критичних показників, вільної енергії, рівняння стану системи в околі критичної точки, виходячи з мікроскопічного представлення гамільтоніану.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами і темами. Дисертаційна робота виконана в ІФКС НАН України згідно з планами робіт в рамках держбюджетних тем 0102U000218 "Розвиток кількісної теорії фазових переходів у конденсованих системах" та 0105U002081 "Особливості критичної поведінки конденсованих систем під впливом зовнішнього поля, структурного безладу, фрустрацій та анізотропії".

Метою даної дисертації є мікроскопічний опис критичної поведінки ізингоподібного магнетика, що перебуває в зовнішньому магнітному полі, зокрема, дослідження універсальних і неуніверсальних критичних характеристик системи, що включає розрахунок вільної енергії, рівняння стану та сприйнятливості як функцій поля і температури. *Об'єктом дослідження* у цій роботі є тривимірна ізингоподібна система, що перебуває в зовнішньому магнітному полі в околі точки фазового переходу. *Предметом дослідження* є явища, зумовлені впливом зовнішнього поля на таку систему в околі точки фазового переходу другого роду. *Методом дослідження* є мікроскопічний підхід до опису ізингоподібних систем в околі точки фазового переходу [Юхновський І.Р., Козловський М.П., Пилюк І.В. Мікроскопічна теорія фазових переходів у тривимірних системах, Євросвіт, Львів, 2001, 592 с.], який ґрунтується на узагальненому на випадок спінових систем методі колективних змінних (КЗ).

Наукова новизна одержаних результатів.

- На мікроскопічному рівні здійснено опис критичної поведінки тривимірної ізингоподібної системи з врахуванням зовнішнього поля. В рамках моделі ρ^4 отримано ефективні гамільтоніани системи як із врахуванням кубічного доданку, так і при його відсутності, і показано, що вплив поля може бути зведений до лінійного доданку.
- З допомогою знайдених в роботі явних розв'язків рекурентних співвідношень (РС) ізингоподібної системи в зовнішньому полі вперше чисельно отримано розв'язок рівняння для точки виходу з критичного режиму, що визначає розмір критичної (скейлінгової) області як функції поля і температури.
- Запропоновано метод опису ізингоподібної системи поблизу точки фазового переходу в присутності поля, яке залежить від температури. Значення такого поля характеризується параметром Δ. В залежності від знаку цього параметра поведінка такої системи визначається температурною або польовою змінною. Для різних значень цього параметра отримано явні аналітичні вирази для вільної енергії, параметра порядку і сприйнятливості при температурах вищих і нижчих за

температуру фазового переходу. Знайдено значення відповідних критичних показників.

- Вперше отримано аналітичні вирази для вільної енергії, параметра порядку і сприйнятливості ізингоподібної системи в постійному зовнішньому полі як функції поля і температури для високо- і низькотемпературної області. Досліджено кросовер між температурозалежною критичною поведінкою системи і поведінкою, що визначається зовнішнім полем.
- Вперше побудовано скейлінгові функції для рівняння стану і сприйнятливості системи без використання феноменологічних припущень і підгоночних параметрів. Продемонстровано добре якісне узгодження результатів з даними, отриманими в рамках теорії збурень і Монте-Карло (МК) моделювання.

Можна вказати на кілька головних аспектів **практичного і наукового значення одержаних результатів**. Зокрема, розвиток непертурбативних підходів є необхідним для опису систем з електрослабкими і сильними взаємодіями, де виявлено фазові переходи класу універсальності тривимірної моделі Ізинга. Даний підхід дозволяє досліджувати обмежені системи, оскільки вирази для термодинамічних функцій містять явну залежність від кількості частинок. Ці задачі є також актуальними у фізиці високих енергій.

Запропонований підхід застосовується на мікроскопічному рівні і дозволяє аналізувати як колективні ефекти, так і специфіку мікроскопічних взаємодій між частинками. Такі задачі є актуальним для дослідження фазових переходів типу рідина-газ або переходи типу розшарування в рідинах.

Дослідження максимума сприйнятливості системи на температурній шкалі при наявності зовнішнього поля становлять інтерес для експериментаторів, оскільки дають можливість обчислювати одночасно два критичні показники і, як наслідок, всі інші, без надточних вимірювань критичної температури системи.

Особистий внесок здобувача. В спільних публікаціях автору дисертації належить:

- обчислення вільної енергії, параметра порядку і сприйнятливості системи при наявності поля, залежного від температури [1]. Побудова рівняння стану у випадку критичного значення температури [2];
- обчислення вкладів до вільної енергії системи від коротко- і довгохвильових флуктуацій, а також побудова рівняння стану для високотемпературної [3] та низькотемпературної [4] області у випадку, коли поле і температура є незалежними змінними;
- дослідження кросоверу між температурозалежною поведінкою системи і поведінкою, що визначається польовою змінною [3,4,5];
- здійснення поетапного інтегрування статистичної суми з ефективним гамільтоніаном взаємодії, в якому поле представлене лише лінійним доданком; розрахунок ренормгрупових співвідношень і визначення точки виходу з критичного режиму як функції поля і температури. Обчислення вільної енергії системи, а також, побудова скейлінгових функцій для

рівняння стану і сприйнятливості [5];

- дослідження максимуму сприйнятливості системи і його поведінку при зміні зовнішнього поля [4,5];

Автор брав безпосередню участь у проведенні числових розрахунків, аналізі та інтерпретації усіх результатів, отриманих в даній роботі.

Апробація роботи здійснена під час доповідей і обговорень основних результатів дисертації на семінарах Інституту фізики конденсованих систем НАН України. Ці результати також доповідалися, дискутувалися на таких конференціях: VI Українсько-польська та II Східноєвропейська нарада з фізики сегнетоелектриків UPEMFP’ 2002 (Ужгород-Синяк, 6-10 вересня 2002р.), II Міжнародна конференція "Фізика рідкої речовини: сучасні проблеми" (Київ, 12-15 вересня 2003р.), конференція імені Боголюбова "Сучасні проблеми математичної і теоретичної фізики" (Київ, 2004р.), Робоча нарада НАТО “Просторові ефекти та нелінійність у фероїках” (Львів, 2004р.), III міжнародна конференція "Фізика рідкої речовини: сучасні проблеми" (Київ, 27-31 травня 2005р.), конференція "Статистична фізика 2005: актуальні проблеми та новітні застосування" (Львів, 28-30 серпня 2005р.) і є опубліковані у їхніх матеріалах.

Результати, що викладено в дисертації, **опубліковано** в п’яти статтях, виданих у реферованих журналах, зазначених у переліках ВАК України, чотирьох препринтах, а також, в матеріалах та тезах шести міжнародних конференцій.

Структура і об’єм дисертації. Дисертація складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків і списку використаних джерел. Робота викладена на 105 сторінках (разом з літературою – 118 сторінок), включає бібліографічний список, що містить 134 найменування у вітчизняних та закордонних виданнях.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** описано обґрунтування актуальності виконаних досліджень, визначено мету роботи і метод дослідження, відзначено новизну отриманих результатів і особистий внесок здобувача у виконання даних досліджень. Подано також зв’язок роботи з науковими програмами і темами, в розробці яких автор приймав безпосередню участь.

У **першому розділі** "Огляд літератури" на основі літературних джерел проаналізовано основні результати досліджень, виконаних з допомогою інших підходів. Зокрема, проаналізовано роботи, що виконано в рамках теорії збурень та з допомогою комп’ютерного моделювання. Досліджено напрямок незбуреної ренормалізаційної групи (РГ), розглянуто результати, що були отримані з допомогою розв’язку точного рівняння РГ з використанням різного роду наближень для ефективного гамільтоніану системи. Здійснено огляд також попередніх робіт, присвячених дослідженню впливу поля на модель Ізинга та особливостям поетапного інтегрування статистичної суми з допомогою методу КЗ.

Другий розділ під назвою "Обчислення статистичної суми в скейлінговій області для різних значень поля і температури" присвячено опису процедури поетапного інтегрування статистичної суми в рамках моделі ρ^4 та вивченню однокомпонентного магнетика у магнітному зовнішньому полі, що залежить від температури. Зокрема, визначено модель, гамільтоніан якої представлений у вигляді

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{l},\mathbf{j}} \Phi(r_{\mathbf{lj}})\sigma_{\mathbf{l}}\sigma_{\mathbf{j}} - h\sum_{\mathbf{l}} \sigma_{\mathbf{l}}. \qquad (2)$$

Тут $\sigma_{\mathbf{l}}$ - змінна z-компоненти спіна, що приймає значення ± 1. Взаємодія між частинками на вузлах $\mathbf{l}$ і $\mathbf{j}$ простої кубічної гратки визначається короткосяжним експонентноспадним потенціалом $\Phi(r_{\mathbf{lj}})$, де $r_{\mathbf{l},\mathbf{j}} = |\mathbf{l}-\mathbf{j}|$ - відстань між частинками. Його наближений фур'є-образ має вигляд

$$\Phi(k) \simeq \Phi(0)(1-2b^2k^2) \qquad (3)$$

і містить в собі залежність від сталої гратки c і ефективного радіусу взаємодії b, що є мікроскопічними параметрами системи. Другий доданок у гамільтоніані (2) описує вплив зовнішнього поля h. Визначено множину колективних змінних $\rho_{\mathbf{k}}$ і представлено статистичну суму системи у початковому вигляді

$$\begin{aligned} Z \quad \simeq \quad & \int (d\rho)^{N_0} \exp[-a_1\sqrt{N_0}\rho_0 \\ & -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\in B_0} d(k)\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}} - \frac{a_3}{3!}N_0^{-1/2}\sum_{\substack{\mathbf{k}_1,\ldots,\mathbf{k}_3\\ \mathbf{k}_i\in B_0}} \rho_{\mathbf{k}_1}\ldots\rho_{\mathbf{k}_3}\delta_{\mathbf{k}_1+\ldots+\mathbf{k}_3} \\ & -\frac{a_4}{4!}N_0^{-1}\sum_{\substack{\mathbf{k}_1,\ldots,\mathbf{k}_4\\ \mathbf{k}_i\in B_0}} \rho_{\mathbf{k}_1}\ldots\rho_{\mathbf{k}_4}\delta_{\mathbf{k}_1+\ldots+\mathbf{k}_4}], \end{aligned} \qquad (4)$$

що відповідає наближенню моделі ρ^4. Тут $N_0 = s_0^{-d}N$, d – вимірність простору, s_0 =2 є параметром, що визначає параболічну апроксимацію (3) Фур'є-образу потенціалу взаємодії, і $\delta_{\mathbf{k}_1+\ldots+\mathbf{k}_l}$ – символ Кронекера. В процесі розрахунків використовується так зване наближення LPA (local potential approximation), яке не враховує на кожному етапі розрахунку залежності Фур'є-образу потенціалу взаємодії від хвильового вектора. Дане наближення не дозволяє отримати значення критичного показника η парної кореляційної функції, проте, дозволяє розрахувати основні риси поведінки даної моделі поблизу точки фазового переходу.

Значення коефіцієнтів у виразі (4) визначаються з допомогою рівності

$$\begin{aligned} a_1 &= -\frac{1}{2}a'\mu_2(1-3g), \\ a_2 &= \frac{1}{2}\mu_2^2\left[1-3g\left(1-\frac{1}{2}a'^2\right)\right], \\ a_3 &= -\frac{3}{2}\mu_2^3 a' g, \qquad a_4 = \frac{3}{2}\mu_2^4 g. \end{aligned} \qquad (5)$$

Тут $a' = s_0^{d/2}M_1\mu_2$, $\mu_2 = (2/M_2)^{1/2}$ і $g = \frac{1}{6}s_0^{-d}(-M_4)/M_2^2$. Кумулянти $M_1 \approx h'$, $M_2 \approx 1-h'^2$, $M_4 \approx -2+8h'^2$, де $h' = \beta h$, а β є оберненою температурою.

Доданки, що пропорційні непарним степеням КЗ у підінтегральному виразі (4), виникають внаслідок присутності зовнішнього поля. В цьому розділі представлено результати РГ перетворень, що отримано внаслідок поетапного інтегрування статистичної суми (4). Процедура поетапного інтегрування передбачає поетапне відінтегровування змінних, що пов'язані з великими значеннями хвильового вектора. Після здійснення n кроків інтегрування коефіцієнти a_l, $d(k)$ статистичної суми (4) перенормовуються і визначаються як $a_l^{(n)}$, $d_n(k)$ на n-ій блочній гратці з допомогою рекурентних співвідношень, розв'язки яких в лінійному наближенні відхилень від фіксованої точки мають наступний вигляд

$$\begin{aligned}
w_n &= -c_{h1}h'E_1^n - c_{h2}h'T_{13}^{(0)}\left(\varphi_0^{1/2}\beta\Phi(0)\right)^{-1}E_3^n,\\
r_n &= r^* + c_{k1}^{(0)}\beta\Phi(0)\tau E_2^n + c_{k2}T_{24}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}(\beta\Phi(0))^{-1}E_4^n,\\
v_n &= -c_{h2}h'E_3^n,\\
u_n &= u^* + c_{k1}^{(0)}(\beta\Phi(0))^2T_{42}^{(0)}\varphi_0^{1/2}\tau E_2^n + c_{k2}E_4^n.
\end{aligned} \tag{6}$$

Тут $\tilde{a}_1^{(n)} = s^{-n}w_n$, $d_n(0) = s^{-2n}r_n$, $a_3^{(n)} = s^{-3n}v_n$, $a_4^{(n)} = s^{-4n}u_n$, $d_n(k) = d_n(0) + 2\beta\Phi(0)b^2k^2$. Величини $E_1 = 20.977$, $E_3 = 1.838$, $E_2 = 7.374$, $E_4 = 0.397$ є власними значеннями матриці РГ перетворення, τ – зведена температура ($\tau = (T - T_c)/T_c$), w^*, r^*, v^*, u^* - координати фіксованої точки, а решта коефіцієнтів виразу (6) є незалежними від поля величинами.

Ключовим моментом в процесі здійснення розрахунків вільної енергії системи є визначення необхідної кількості ітерацій n. Ця величина $n = n_p$ (названа в подальшому точкою виходу з критичного режиму) визначає так звану скейлінгову область і шукається виходячи з умови лінійності відхилень від фіксованої точки. В наближенні, коли одна із змінних (польова або температурна) домінує над іншою і, таким чином, має визначальний вплив на критичну поведінку системи, величина n_p є функцією однієї змінної. Зокрема

$$n_p = m_\tau = \frac{\ln\tilde{\tau}}{\ln E_2} \tag{7}$$

при домінуванні температурної змінної $\tilde{\tau} = \tau c_{k1}^{(0)}/f_0$, і

$$n_p = n_h = \frac{\ln\tilde{h}}{\ln E_1}, \tag{8}$$

у випадку, коли визначальною у формуванні критичної поведінки є польова змінна $\tilde{h} = h's_0^{d/2}/f_0$. Ці вирази отримано з другого і першого рівняння рекурентних співвідношень (6) відповідно.

На підставі виразів (7) і (8) визначено області слабких і сильних полів по відношенню до величини відхилень температури T від її критичного значення T_c. Графічне зображення таких областей показано на рис.1. Умова $n_h > m_\tau$ відповідає випадку слабких полів (області І та IV), де температурна змінна є домінуючою у формуванні критичної поведінки системи. У випадку $n_h < m_\tau$ маємо критичну поведінку, що контролюється польовою змінною, і система перебуває в області сильних полів (області II та III). Рівність $m_\tau = n_h$ визначає так звану псевдокритичну лінію,

$$h \propto \tau^{p_0}, \tag{9}$$

що позначена на рисунку числами 1 і 2 для $T > T_c$ і $T < T_c$ відповідно. Тут $p_0 = 5\nu/2$, де ν є критичним показником кореляційної довжини. Поблизу псевдокритичної лінії використання виразів (7) і (8) є некоректним, оскільки обидві змінні є однаково важливими у формуванні критичної поведінки системи.

В розділі розглянуто випадок, коли поле змінюється при наближенні температури до її критичного значення $T = T_c$. Така залежність визначається співвідношенням

$$\tilde{h} = \tilde{\tau}^{p_0(1+\Delta)}, \qquad (10)$$

де введено показник Δ, що характеризує траєкторію руху системи до критичної точки. Така задача є актуальною, зокрема, для дослідження псевдоспін-електронної моделі, фазового переходу "рідина-газ" в околі критичної точки. У випадку слабких полів параметр Δ є додатнім ($0 < \Delta < \infty$), а для області сильних полів цей параметр є від'ємним ($-1 < \Delta < 0$). Представлення (10) дозволяє визначити траєкторію руху системи до точки фазового переходу, що не перетинає псевдокритичної лінії при наближенні до температури $T = T_c$ і, таким чином, для опису поведінки системи можна користуватися однією точкою виходу ((7) або (8)) зі скейлінгової області. Приймаючи до уваги залежність (10), у розділі представлено розрахунки неуніверсальних характеристик системи, проведені з врахуванням зовнішнього поля, залежного від температури. Зокрема, розраховано явні аналітичні вирази для вільної енергії, параметра порядку і сприйнятливості системи.

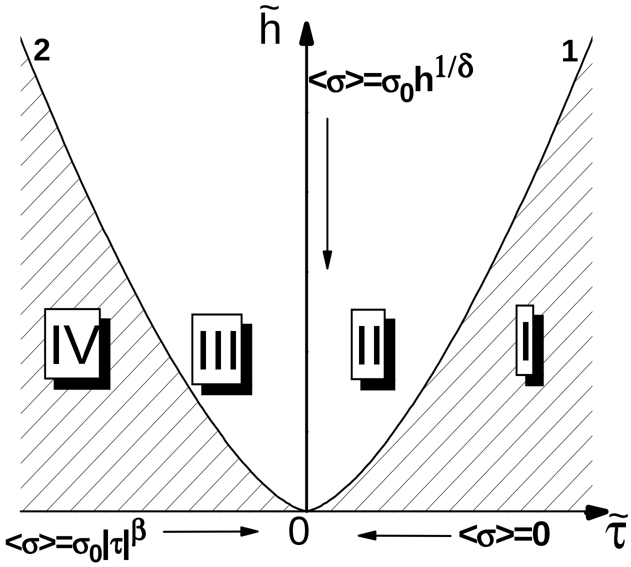

Рисунок 1. Схематичне зображення областей можливого місцезнаходження траєкторій системи при прямуванні її до критичної точки. Криві 1 та 2 відповідають граничному значенню поля при $T > T_c$ та $T < T_c$ відповідно. Області I та IV відповідають слабким полям при $T > T_c$ та $T < T_c$, а області II і III характеризуються сильними значеннями полів.

Третій розділ має назву "Неуніверсальні характеристики системи як функції незалежних змінних поля і температури". Його присвячено випадку поведінки тривимірної ізингоподібної системи, коли зовнішнє поле і температура є незалежними змінними. Після виконання n_p ітерацій розмір ефективної блочної гратки стає співмірним з кореляційною довжиною системи. Цей факт дозволяє в подальших розрахунках користуватися перенормованим гаусовим розподілом флуктуацій параметра порядку системи. В дисертаційній роботі продемонстровано особливості інтегрування статистичної суми після виходу зі скейлінгової області при наявності поля. Умовою використання гаусового розподілу для здійснення заключного кроку інтегрування є додатній знак і домінуюча роль коефіцієнта біля квадратичного доданку колективної змінної у порівнянні з рештою коефіцієнтів біля вищих степенів КЗ. Показано, що у випадку слабких полів і температур, вищих за критичну, така умова виконується після здійснення додаткового кроку інтегрування. Коли поля є сильними або система перебуває нижче критичної точки при будь-яких значення поля, для виконання вищезгадуваної умови достатньо провести зміщення змінних на величину, пропорційну до параметра порядку.

В результаті проведених розрахунків отримано аналітичний вираз для вільної енергії системи для випадку визначення точки виходу з критичного режиму, що задається температурною змінною. При $T > T_c$ він має вигляд

$$F_e^{(+)} = -kTN[\ln\cosh h' + l_0 + l_{1Te}\tilde{\tau}^{3\nu} + l_{11Te}\tilde{h}\tilde{\tau}^{\frac{\nu}{2}} + l_2\tilde{h}^2 + l_3\tilde{\tau} + l_4\tilde{\tau}^2]. \qquad (11)$$

У області температур, нижчих за критичну, для вільної енергії отримано схожий за структурою вираз

$$F_e^{(-)} = -kTN[\ln\cosh h' + l_0 + l_{1\mu e}\tilde{\tau}_1^{3\nu} + l_{11\mu e}\tilde{h}\tilde{\tau}_1^{\frac{\nu}{2}} + l_2\tilde{h}^2 - l_3\tilde{\tau}_1 + l_4\tilde{\tau}_1^2]. \qquad (12)$$

Коефіцієнти l_0, l_2, l_3 і l_4 є сталими величинами. Проте, коефіцієнти l_{1Te} і l_{11Te} у (11) і $l_{1\mu e}$, $l_{11\mu e}$ у (12) містять додаткову залежність від поля внаслідок присутності лінійного доданку у експоненті статистичної суми. Ця залежність дозволяє розширити межі використання виразу для опису критичної поведінки у порівнянні з розкладами за скейлінговою змінною, але у вузькому околі псевдокритичної лінії застосування цих виразів є неможливим. У випадку сильних полів для вільної енергії системи отримано вираз

$$F_{e,h}^{(\pm)} = -kTN\left[\ln\cosh h' + l_0 + l_{1e}^{(\pm)}\tilde{h}^{\frac{6}{5}} + l_{11e}\tilde{\tau}\tilde{h}^{\frac{6}{5}-\frac{1}{p_0}} + l_{12e}\tilde{\tau}^2\tilde{h}^{\frac{6}{5}-\frac{2}{p_0}} + l_2\tilde{h}^2 + l_3\tilde{\tau} + l_4\tilde{\tau}^2\right], \qquad (13)$$

де знаки $\pm$ відповідають випадкам $T > T_c$ і $T < T_c$.

Виходячи з виразів (12) і (11), для вільної енергії знайдено величини параметра порядку і сприйнятливості системи. Проте, як показали результати досліджень величини вкладів до вільної енергії системи від змінних, пов’язаних з різними значенням хвильового вектора, є різними. Основну роль у формуванні фізичних характеристик системи (параметра порядку, сприйнятливості) відіграє вклад, пов’язаний зі змінною ρ_0. Такий результат є фізично обгрунтованим, оскільки з параметром порядку пов’язане середнє значення саме цієї змінної.

На рис. 2 побудовано графічні залежності для параметра порядку від поля при фіксованому додатньому значенні зведеної температури. Криві 1 і 1’ відповідають повному параметру порядку системи, що співпадає з середнім значенням змінної ρ_0. Вклади, пов’язані з ненульовими значеннями хвильового вектора компенсують один одного.

В околі псевдокритичної лінії ($h' \approx h_c$) має місце деяка неузгодженість кривих 1 і 1’. Це пов’язано з тим, що точка виходу зі скейлінгової області є функцією лише однієї змінної.

На рис. 3 побудовано залежність величини ρ_0 як параметра порядку системи від температури для різних значень зовнішнього поля.

У **четвертому розділі** дисертації під назвою "Узагальнений підхід до опису критичної поведінки ізингоподібної системи" побудовано узагальнений опис критичної поведінки системи, що є дійсним у всій площині (поле-температура), включаючи окіл псевдокритичної лінії. Внаслідок виконання заміни змінних, що призводить до занулення коефіцієнта біля кубічного доданку у виразі для експоненти в статистичній сумі системи, остання має простіший вигляд

$$Z \propto \int (d\eta)^{N_0} \exp[-a_1\sqrt{N}_0\rho_0 - \frac{1}{2}\sum_{k<B_0} d(k)\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}} - \frac{a_4}{4!N_0}\sum_{k<B_0}\rho_{\mathbf{k}_1}...\rho_{\mathbf{k}_4}\delta_{\mathbf{k}_1+...+\mathbf{k}_4}]. \qquad (14)$$

Тут

$$a_1 = -s_0^{d/2}h', \qquad d(k) = a_2 + \beta\Phi_0 - \beta\Phi(k),$$
$$a_2 = 1 - 3c_h'', \qquad a_4 = 6c_h''. \qquad (15)$$

Тут $c_h'' = s_0^{-d}(1-4h'^2)/3$. Отже, в цьому випадку вплив поля є представлений лише лінійним доданком ρ_0 з коефіцієнтом a_1, що пропорційний до поля. Слід зазначити, що при використанні моделей вищих наближень (ρ^6, ρ^8 ...) процедура "знищення" кубічного доданку також призводить до зникнення решти непарних доданків КЗ окрім лінійного, що дозволяє точніше врахувати вплив зовнішнього поля. Внаслідок здійснення процедури поетапного інтегрування статистичної суми було отримано рекурентні співвідношеня для коефіцієнтів у виразі для експоненти (див. (14)) і їхні розв'язки

$$\omega_n = \omega^* - s_0^{d/2}h'E_1^n,$$
$$r_n = r^* + c_{k1}^{(0)}\beta\Phi(0)\tau E_2^n + c_{k2}T_{24}^{(0)}(\varphi_0^{1/2}\beta\Phi(0))^{-1}E_4^n,$$
$$u_n = u^* + c_{k1}^{(0)}(\beta\Phi(0))^2T_{42}^{(0)}\varphi_0^{1/2}\tau E_2^n + c_{k2}E_4^n \quad (16)$$

у лінійному наближенні за відхиленнями від фіксованої точки (w^*, r^*, u^*). У порівнянні з результатом, отриманим в попередніх розділах (див. (6)), відхилення від фіксованої точки пов'язані з польовою змінною присутні лише у першому рівнянні для величини ω_n.

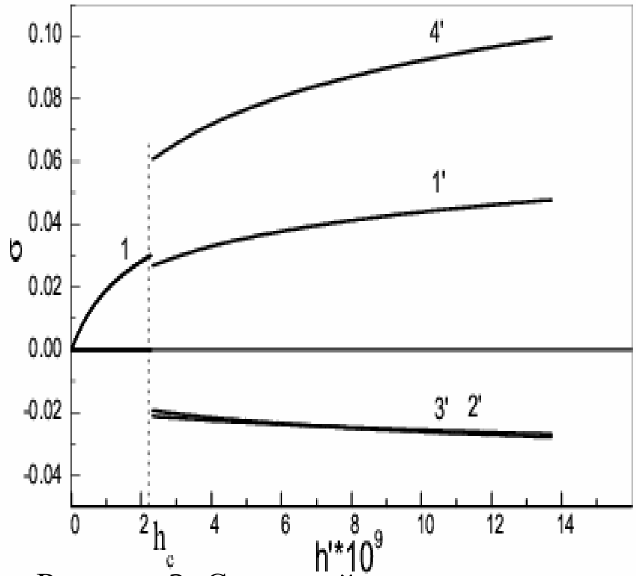

Рисунок 2. Сумарний параметр порядку системи і вклади від різних режимів як функції зовнішнього поля при $\tau = 10^{-5}$. Крива 1' - повний параметр порядку і середнє значення змінної ρ_0 у випадку сильних полів, а крива 1 відповідає випадку слабких полів, 2' - вклад від критичного режиму, 3' - вклад від перехідного режиму, 4' - вклад від режиму довгохвильових флуктуацій, пов'язаних з ненульовими значеннями хвильового вектора.

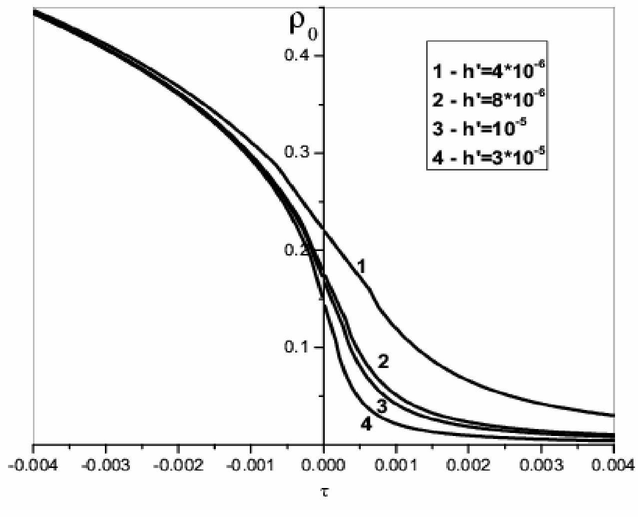

Рисунок 3. Вклад до параметра порядку від змінної ρ_0 як функція температури

Наступною ключовою відмінністю результатів цього розділу у порівнянні з попередніми є визначення точки виходу зі скейлінової області. Оскільки при скінчених значеннях поля і температури відхилення від фіксованої точки формуються, в основному, в перших двох рівняннях РС (16), то точку виходу слід визначати як функцію обох змінних. Для цього запропоновано рівняння

$$(-s_0^{d/2}h'E_1^{n_p+1})^2+(c_{k1}^{(0)}\tau\beta\Phi(0)E_2^{n_p+1})^2=r^{*2}, \tag{17}$$

з якого величину n_p можна визначити лише з допомогою чисельного розв'язку. Рівняння (17) дозволяє встановлювати розмір скейлінгової області для фіксованих значень поля і температури. Залежність $n_p=n_p(\tau,h')$ є принципово важливою у формуванні кросоверу між критичною поведінкою, що визначається температурною змінною і поведінкою системи, що контролюється змінною зовнішнього поля в околі точки фазового переходу.

З огляду на попередні результати, для опису поведінки неуніверсальних характеристик в околі критичної точки враховано вклад від інтегрування за колективною змінною ρ_0. Для випадку температур вищих від критичної, вільна енергія системи представлена у вигляді так званого мікроскопічного аналога вільної енергії Ландау

$$F_{\mathbf{k}=0}^{(+)}=-NkTs^{-3(n_p+1)}[h'\sigma_0 s^{\frac{5}{2}(n_p+1)}-\frac{1}{2}r_{n_p+2}s^{-2}\sigma_0^2-\frac{1}{4!}s_0^d s^{-1}u_{n_p+2}\sigma_0^4]. \tag{18}$$

Відповідне рівняння стану можна представити у вигляді

$$\bar{\rho}_0^{(+)}=\sigma_0(h')s^{-\frac{n_p+1}{2}}. \tag{19}$$

Варто відзначити, що коефіцієнт σ_0 містить також залежність від поля, як корінь кубічного рівняння з лінійним доданком, пропорційним до зовнішнього поля.

На рис. 4 представлена залежність параметра порядку як функція поля, побудована на основі виразу (19) (суцільна лінія), і як похідна від повної енергії системи (штрихована лінія). Результат порівняний з даними, отриманими в рамках Монте-Карло моделювання.

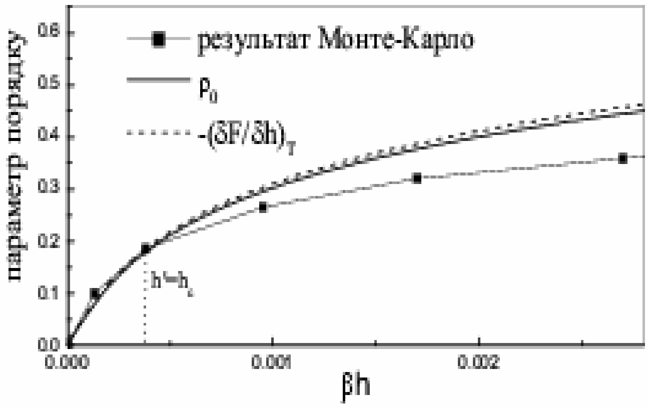

Рисунок 4. Польова залежність параметра порядку при $\tau=5\cdot10^{-3}$. Отримані результати (суцільна лінія - рівняння (19), штрихова - повний параметр порядку, тонка лінія з квадратами - результати методу МК [Tsypin M.M., // Phys. Rev. Lett. - 1994. - 73. p. 2015-2018]).

Незвичною у високотемпературній області є поведінка сприйнятливості системи. При скінчених значеннях поля і температури спостерігається максимум сприйнятливості на температурній шкалі. На рис. 5 побудована дана залежність як похідна від величини $\rho_0^{(+)}$ за польовою змінною при різних значеннях поля. При збільшені величини поля максимум зміщується в високотемпературну область і розмивається. Дослідження максимуму сприйнятливості є актуальними для експе-риментаторів, оскільки з їх допомогою можна обчислювати значення двох критичних показників без надточних вимірювань критичної температури.

Для впорядкованої фази вільна енергія системи має вигляд

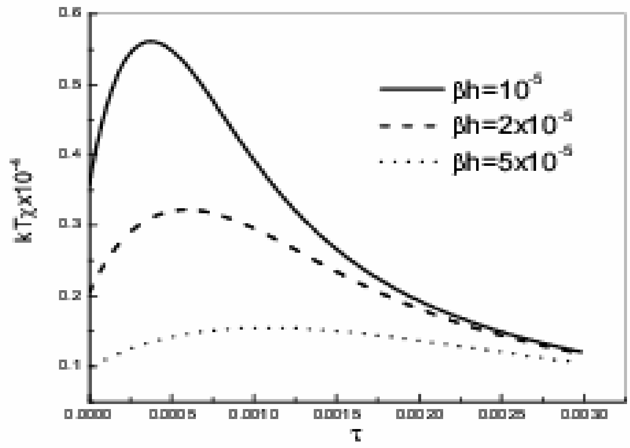

Рисунок 5. Сприйнятливість як функція температури при різних значеннях зовнішнього поля

$$F^{(-)}_{\mathbf{k}=0} = -NkTs^{-3(n_p+1)}[h'\sigma_h s^{\frac{5}{2}(n_p+1)} - \frac{1}{2} r_{n_p+1}\sigma_h^2 - \frac{1}{4!} s_0^d u_{n_p+1}\sigma_h^4] \qquad (20)$$

з рівнянням стану

$$\bar{\rho}_0^{(-)} = \sigma_h (h') s^{-\frac{n_p+1}{2}}. \qquad (21)$$

Для порівняння отриманих результатів доцільно використати представлення неуніверсальних характеристик у скейлінговій формі, оскільки такі представлення є універсальними. Зокрема, для параметра порядку матимемо

$$f_G(z) = M\bar{h}^{-1/\delta} \qquad (22)$$

як функції скейлінгової змінної $z = \bar{t}/\bar{h}^{1/\beta\delta}$. Тут $\bar{h} = h'/D_c$, $M \equiv \bar{\rho}_0$, і $\bar{t} = \tau B'^{1/\beta}$. Тут $B' = \sigma_h (c_{k1}^{(0)}/\bar{q})^{\nu/2}$, $D_c = |r^*|/(\sigma_0^\delta s_0^{d/2})$.

Скейлінгова функція для сприйнятливості має вигляд

$$f_\chi(z) = \chi D_c \bar{h}^{1-1/\delta}, \qquad (23)$$

де $\chi = \partial M/\partial h'$.

Нар рис. 6, 7 подано графічні представлення скейлінгових функцій (22) і (23), відповідно. Результати порівнянні з даними, отриманими в рамках Монте-Карло моделювання і теоретико-польового підходу з використанням теорії збурень. Як видно з рисунків, на якісному рівні отримані в дисертації результати досить добре узгоджуються з найбільш

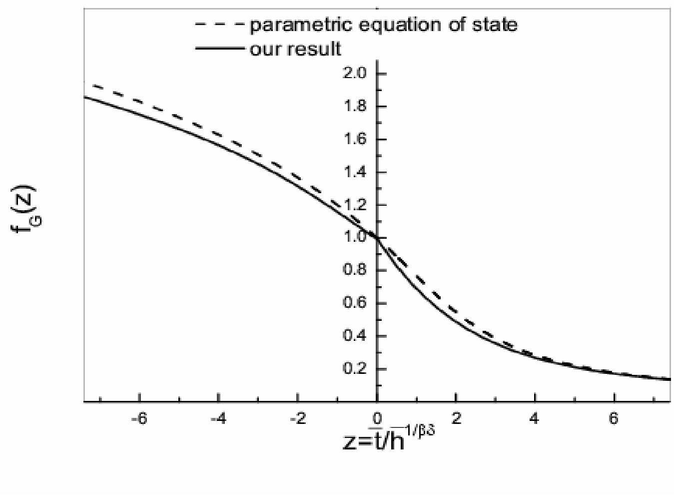

Рисунок 6. Скейлінгова функція параметра порядку (суцільна лінія побудована на основі рівняннь (19) і (21) для $T > T_c$ і $T < T_c$ відповідно, штрихова лінія - параметричне рівняння стану [Engels J., Fromme L., Seniuch V., // Nucl. Phys. B - 2003. - 655. p. 277-299]).

точними на даний час даними. Розбіжності на кількісному рівні пояснюються насамперед наближенням LPA, що впливає на значення критичних показників через відсутність показника η. Крім того, як було показано в попередніх роботах, виконаних в рамках методу колективних змінних при відсутності поля, з допомогою моделі ρ^6 можна покращити результат в кількісному відношенні. Проте, на відміну від інших результатів, результати цієї роботи отримано, виходячи з гамільтоніану системи, що містить мікроскопічні характеристики системи, не містять феноменологічних припущень і підгоночних параметрів.

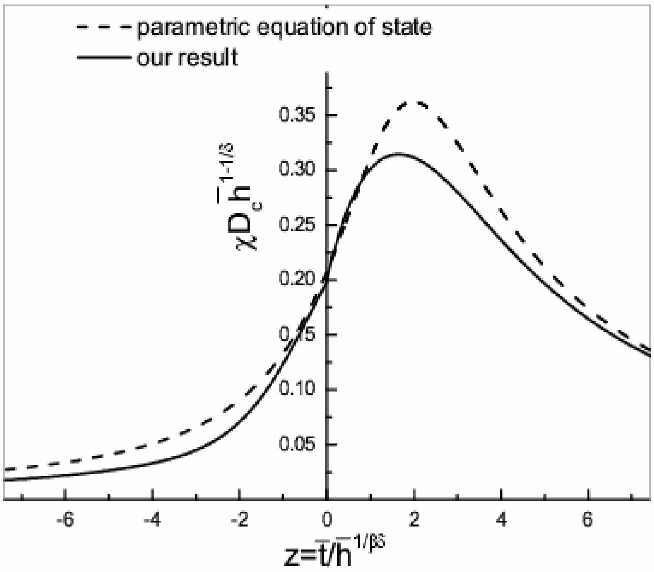

Рисунок 7. Скейлінгова функція сприйнятливості (суцільна лінія - результат методу КЗ, штрихова лінія - результат отриманий в роботі [Engels J., Fromme L., Seniuch V., // Nucl. Phys. B - 2003. - 655. 277-299]).

Основні результати та висновки.

1. Встановлено, що поведінка тривимірної моделі Ізинга в постійному зовнішньому полі повинна описуватися з використанням негаусових розподілів флуктуацій параметра порядку з відповідними рекурентними співвідношеннями, які отримано як результат реномгрупових перетворень. На основі отриманих в роботі явних розв’язків рекурентних співвідношень записано рівняння для точки виходу із критичного режиму флуктуацій, яка залежить як від температури так і від поля, та отримано його чисельний розв’язок. Встановлено розмір критичної (скейлінгової) області, що визначається величиною поля і температури.
2. В рамках мікроскопічного підходу знайдено вирази для вільної енергії, параметра порядку та сприйнятливості моделі Ізинга в зовнішньому полі як функції температури для фіксованого значення поля. Знайдені значення відповідних критичних показників добре узгоджуються з результатами, отриманими в рамках незбуреної теорії критичних явищ при розв’язанні точного ренормгрупового рівняння в наближенні локального потенціалу (LPA).
3. Досліджено величини вкладів до вільної енергії системи поблизу точки фазового переходу від колективних змінних, пов’язаних з різними значеннями хвильового вектора. Встановлено, що вклад пов’язаний з нульовим значенням хвильового вектора є визначальним у формуванні величини параметра порядку.
4. Досліджено випадок зовнішнього магнітного поля, залежного від температури. Введено показник Δ, що дозволяє розглядати різні типи залежності і використовувати відповідні визначення точки виходу.

Показано, що для додатніх значень цього показника поведінка системи визначається температурною змінною і при від'ємних критичну поведінку визначає польова змінна. Отримано явні аналітичні вирази для вільної енергії параметра порядку і сприйнятливості системи як функції поля, що залежить від температури.

5. Побудовано скейлінгові фукції рівняння стану і сприйнятливості системи. Досліджено поведінку сприйнятливості системи як функції температури при різних значеннях зовнішнього поля. Показана наявність максимума цієї функції і її скейліногової форми у високотемпературній області. Його положення на шкалі скейлінгової змінної добре узгоджується з результатами, отриманими в рамках теоретико-польового підходу і МК моделювання. Показано, що зі збільшенням значень зовнішнього поля, максимум сприйнятливості розмивається і зсувається у високотемпературну область.

Результати дисертації опубліковано в таких роботах:

1. Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V., Prytula O.O. Behaviour of a three-dimensional uni-axial magnet near the critical point in an external field.// Condens. Matter Phys. — 2004. — Vol. 7. — p. 361–382.
2. Kozlovskii M. P., Pylyuk I. V., Prytula O. O. Microscopic description of the critical behavior of three-dimensional Ising-like systems in an external field.// Phys. Rev. B — 2006. — Vol 73. p. 174406 1-13.
3. Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V., Prytula O.O. Critical behaviour of a three-dimensional one-component magnet in strong and weak external fields at $T>T_c$.// Physica A — 2006. — Vol. 369. — p. 562-576.
4. Kozlovskii M. P., Pylyuk I. V. , Prytula O. O. Behaviour of the order parameter of the simple magnet in an external field.// Condens. Matter Phys. — 2005. — Vol. 8. — p. 749-760.
5. Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V., Prytula O.O. Free energy and equation of state of Ising-like magnet near the critical point.// Nucl. Phys. B 2006. — Vol 753. — p. 242-251.
6. Козловський М.П., Пилюк І.В., Притула О.О. Поведінка тривимірного магнетика поблизу критичної точки за наявності зовнішнього поля: Препринт ICMP-03-21U. — Львів: ІФКС НАН України, 2003. – 42 с.
7. Козловський М.П., Пилюк І.В., Притула О.О. Термодинамічні функції однокомпонентної моделі магнетика при T>Tc за наявності зовнішнього поля. Препринт ICMP-04-03U. — Львів: ІФКС НАН України, 2004. – 33 с.
8. Козловський М.П., Пилюк І.В., Притула О.О. Термодинамічні функції однокомпонентної моделі магнетика при T<Tc за наявності зовнішнього поля. Препринт ICMP-04-06U. — Львів: ІФКС НАН України, 2004. – 33 с.
9. Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V., Prytula O.O. Free energy and equation of state of Ising-like magnet near the critical point. Preprynt www.arxiv.org/hep-th/0609105, 2006 – 13p.
10 Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V., Prytula O.O. Microscopic analog of the Landau Free Energy of Three-Dimensional Ising-Like Systems.// VI Ukrainian -

Polish and II East-European Meeting on Ferroelectrics Physics, Uzhgorod-Synjak, Ukraine, September 6-10, 2002. — p. 95.

11. Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V., Prytula O.O. Influence of an external field on the critical behaviour of a three-dimensional magnet.// 2nd International Conference "Physics of Liquid Matter: Modern Problems", Kyiv, Ukraine, September 12-15, 2003. — - p. 58.
12. Kozlovskii M.P., Prytula O.O. Behaviour of 3D statistical systems near the phase transition point in an external field.// Bogolyubov Kyiv conference "Modern Problems of Mathematics and Theoretical Physics", Kyiv, Ukraine, 2004. — p. 65
13. Pylyuk I.V., Kozlovskii M.P. and Prytula O.O. Analytic Method of Calculating Thermodynamic Functions for Ising-Like System in an External Field.// Conference "Dimesionality Effects Non-linearity in Ferroics" Ukraine, Lviv, October 19-22, 2004. — p. 87.
14. Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V., Prytula O.O. Influence of an external field on the critical behaviour of a three-dimensional magnet.// 3nd International Conference "Physics of Liquid Matter: Modern Problems", Kyiv, Ukraine, May 27-31, 2005. — p. 101.
15. Kozlovskii M.P, Pylyuk I.V., Prytula O.O Behaviour of the order parameter of the simple magnet in an external field.// Conference "Statistical physics 2005", Ukraine, Lviv, August 28-30, 2005. — p. 144.

Притула О.О. Вплив зовнішнього магнітного поля на критичну поведінку тривимірного ізингоподібного магнетика. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика, Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України, Львів, 2006.

В дисертаційній роботі представлено мікроскопічний опис критичної поведінки тривимірного ізингоподібного магнетика в присутності зовнішнього магнітного поля. Підхід базується на використанні методу колективних змінних, що включає ренормгрупові перетворення коефіцієнтів ефективного гамільтоніану системи як результат поетапного інтегрування статистичної суми. Обчислення виконано з використанням четвірного розподілу флуктуацій параметра порядку. Використовуючи різні способи визначення необхідної кількості кроків інтегрування (точки виходу зі скейлінгової області), отримано відповідні вирази для вільної енергії, параметра порядку і сприйнятливості системи як функції поля і температури. Розглянуто також критичну поведінку системи у випадку зовнішнього поля, що залежить від температури. Досліджено поведінку системи в околі псевдокритичної лінії і встановлено, що для отримання якісних результатів необхідно враховувати одночасне обмеження кореляційної довжини польовою і температурною змінними. Тому точка виходу зі скейлінгової області повинна бути функцією поля і температури. Побудовано скейлінгові функції для параметра порядку і сприйнятливості як універсальні характеристики системи. Результати якісно узгоджуються з даними, отриманими в рамках Монте-Карло моделювання і теоретико-

польового підходу в теорії збурень, проте їх отримано без використання феноменологічних припущень і підгоночних параметрів.

Ключові слова: критична точка, параметр порядку, модель Ізинга.

Притула О.О. Влияние внешнего магнитного поля на критическое поведение трёхмерного изингоподобного магнетика. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика, Институт физики конденсированных систем Национальной академии наук Украины, Львов, 2006.

В дисертационной работе представлено микроскопическое описание критического поведения трёхмерного изингоподобного магнетика в присутствии внешнего магнитного поля. Подход базируется на использовании метода коллективных переменных, который включает ренормгрупповые преобразования коэффициентов эффективного гамильтониана системы как результат поэтапного интегрирования статистической суммы. Расчеты выполнены с использованием четверного распределения флуктуаций параметра порядка. Используя разные способы определения необходимого числа шагов интегрирования (точки выхода из области скейлинга), получено соответсвующие выражения для свободной энергии, параметра порядка и восприимчивости системы как функции поля и температуры. Рассмотрено также критическое поведение системы в случае поля, зависящего от температуры. Исследовано поведение системы в непосредственной близости к псевдокритической линии и установлено, что для получения качественных результатов необходимо принимать во внимание одновременное ограничение корреляционной длины полевой и температурной переменными. Следственно, точка выхода должна быть функцией поля и температуры. Построены также скейлинговые функции для параметра порядка и восприимчивости как универсальные характеристики системы. Результаты качественно согласуются с данными, полученными в рамках Монте-Карло моделирования и теоретико-полевого подхода в теории возмущений, но получены без использования феноменологических предположений и подгоночных параметров.

Ключевые слова: критическая точка, параметр порядка, модель Изинга.

Prytula O.O. Influence of an external magnetic field on the critical behaviour of the tree-dimensional Ising-like magnet. – Manuscript.

Thesis on search of the scientific degree of candidate of physical and mathematical sciences, speciality 01.04.02 – theoretical physics, Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2006.

We study the behavior of a three-dimensional Ising-like system in an external field near the critical point by using the non-Gaussian spin-density fluctuations, namely, the quartic measure density with the odd part of the effective Hamiltonian. The basic idea of the new analytic method for deriving complete expressions of the thermodynamic characteristics is described. Using the renormalization group

transformations, the scaling region size is defined as a function of temperature and field. The critical exponents, which are comparable with ones obtained within the framework of LPA, are calculated. The expressions for the total free energy, order parameter, susceptibility, entropy, and specific heat of the system are obtained as functions of the temperature and field. The contributions to the order parameter, which are related to the integration with respect to the variables with different values of the wave vector, are investigated. It is established that the main contribution is formed by the average value of the variable ρ_0.

The calculations are also performed in the case, when the field and temperature are dependent and related by some expression (the system tends to the critical point along some trajectory), which contains the parameter Δ. The critical behaviour of the system is considered for different values of this parameter Δ.

The crossover between temperature-dependent and field-dependent critical behaviour is investigated. It is established, for obtaining valid result one should consider the point of exit, which determines the scaling region size, as function of two variables, namely, field and temperature. The equation for finding such a function is proposed and solved numerically. From this point of view, the free energy, order parameter and susceptibility are obtained as functions of the temperature and field.

The behaviour of the susceptibility as function of the temperature is investigated for different values of the external field. The characteristic exhibit the maximum, which is shifted in the high-temperature region and smeared with increasing the external field.

The results agree qualitatively with ones obtained within the framework of the parametric representation of the equation of state and Monte-Carlo simulations. The calculations do not involve any parametrization, phenomenological assumptions and adjustable parameters. The approach can be extended to models with a multicomponent order parameter.

Keywords: critical point, order parameter, Ising model.