

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

ПИЛЮК Ігор Васильович

УДК 538.9; 536.75; 537.611.2; 538.955-405

**МІКРОСКОПІЧНИЙ ОПИС КРИТИЧНОЇ ПОВЕДІНКИ
ТРИВИМІРНИХ ІЗИНГОПОДІБНИХ СИСТЕМ
З ВИКОРИСТАННЯМ НЕГАУСОВИХ РОЗПОДІЛІВ ФЛУКТУАЦІЙ**

01.04.02 – теоретична фізика

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

дисертації на здобуття наукового ступеня
доктора фізико-математичних наук

ЛЬВІВ – 2009

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Науковий консультант – доктор фізико-математичних наук, професор **Козловський Михайло Павлович**, Інститут фізики конденсованих систем НАН України (м. Львів), завідувач відділу статистичної теорії конденсованих систем

Офіційні опоненти – член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор, заслужений діяч науки і техніки України **Височанський Юліан Миронович**, Ужгородський національний університет (м. Ужгород), завідувач кафедри фізики напівпровідників

– доктор фізико-математичних наук, професор **Левицький Роман Романович**, Інститут фізики конденсованих систем НАН України (м. Львів), провідний науковий співробітник

– доктор фізико-математичних наук, професор, заслужений діяч науки і техніки України **Олемскої Олександр Іванович**, Інститут прикладної фізики НАН України (м. Суми), завідувач лабораторії мікроструктурних досліджень реакторних матеріалів

Захист відбудеться “23” грудня 2009 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, м. Львів, вул. Свенціцького, 1.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту фізики конденсованих систем НАН України за адресою:

79026, м. Львів, вул. Козельницька, 4.

Автореферат розіслано “16” листопада 2009 року.

Вчений секретар

спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01,

кандидат фіз.-мат. наук

Т.Є. Крохмальський

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Сучасний етап розвитку теорії фазових переходів та критичних явищ асоціюється з розробкою мікроскопічних методів опису, які не пов'язані з введенням в розгляд будь-яких додаткових параметрів, а засновані виключно на використанні загальних положень статистичної фізики. Статистична теорія для опису критичної поведінки систем класу універсальності тривимірної моделі Ізинга, яка розвинута в дисертаційній роботі згідно вказаної концепції на основі використання негаусових розподілів флуктуацій параметра порядку з врахуванням впливу мікроскопічних параметрів (характеристик кристалічної ґратки, параметрів потенціалу взаємодії) та зовнішнього поля, ґрунтується на оригінальному методі обчислення статистичної суми системи і формує підвалини перспективного напрямку в сучасній теоретичній фізиці.

Викладена в роботі теорія дає змогу з єдиних позицій дослідити універсальні характеристики критичної поведінки (задачі теорії поля) та термодинаміку системи поблизу точки фазового переходу (задачі теорії твердого тіла, а також предмет розрахунків різноманітних методик). Побудована цілісна картина критичної поведінки системи може бути описана на основі одного підходу і одного кола понять.

Дана робота доповнює попередні роботи цього напрямку досліджень. Вона відрізняється від них новими теоретичними здобутками, отриманими як із застосуванням вищого негаусового (шестирного) розподілу флуктуацій, так і з використанням асиметричного четвірного розподілу та степеневих розкладів за змінними, що є комбінаціями поля і температури. На відміну від існуючих аналітичних методів, в яких приймається до уваги взаємодія найближчих сусідів, розвинутий мікроскопічний опис неуніверсальних критичних характеристик тривимірних ізингоподібних систем враховує потенціал взаємодії експоненційно спадного характеру і є більш загальним, оскільки вибором параметрів такого потенціалу можна змоделювати взаємодію не тільки найближчих, але й віддаленіших спінів частинок.

Актуальність теми. Побудова послідовної теорії фазових переходів і критичних явищ на мікроскопічному рівні та опис на її основі критичної поведінки систем відносяться до одних із основних задач статистичної фізики. Стан проблеми фазових переходів та критичних явищ, наявні теоретичні представлення і перспективи вирішення цієї проблеми викладені в багатьох книгах та статтях.

Науковий інтерес до дослідження фазових переходів та критичних явищ проявляється з точки зору встановлення зв'язку між аномаліями макроскопічних властивостей і характером взаємодій великого числа мікрочастинок. Технологічне значення вказаного дослідження пов'язане

з можливістю контролювати, змінювати і передбачати властивості матеріалів на основі правильного розуміння мікроскопічної природи цих властивостей. Наприклад, тепер зрозуміло, що різке підвищення якості сплавів, одержаних методом спінодального розпаду, поява “високотемпературних” надпровідників, акусто-оптичних модуляторів, магнітних феритів і т.д. стали можливими завдяки явищам, які відповідають за фазові переходи в цих матеріалах [Флєри П., УФН, 1982, **138**, 129].

Гінзбург ще в 1971 р. відніс проблему фазових переходів та критичних явищ до категорії особливо важливих і цікавих [Гинзбург В.Л., УФН, 1971, **103**, 87; 1981, **134**, 469]. З тих пір в цій області досліджень досягнуто величезних успіхів. Досягнення теорії отримали широке визнання, зокрема, в таких напрямках, як пошук точних та наближених розв’язків деяких модельних систем, використання гіпотези масштабної інваріантності (скейлінгу) і ренормгрупових (РГ) уявлень до вивчення критичних та мультикритичних явищ. Методи теорії критичних явищ виявились настільки загальними, що вони знаходять широке застосування в багатьох областях сучасної фізики та інших наук.

Суттєвому прогресу у вирішенні проблеми фазових переходів та критичних явищ сприяли плідні ідеї, закладені в гіпотезах скейлінгу, універсальності і в теорії РГ (див., наприклад, [Wilson K.G., Kogut J., Phys. Rep., 1974, **12**, 75; Kadanoff L.P., Physica A, 1990, **163**, 1; Fisher M.E., Rev. Mod. Phys., 1998, **70**, 653]). Усвідомлення фундаментального значення ідеї про необхідність врахування флуктуацій параметра порядку зіграло засадничу роль в формулюванні теоретичних підходів. На їх основі одержано більшість найважливіших результатів сучасної теорії фазових переходів та критичних явищ, встановлено спостережувані в критичній області основні закономірності, отримано співвідношення між критичними показниками і критичними амплітудами, побудовано рівняння стану, розраховано значення критичних показників і критичних амплітуд. Числові значення критичних показників і критичних амплітуд, одержані на основі РГ та ϵ -розкладу, вважаються одними із досить надійних серед усіх наближених результатів.

Ідеї, що лежали в основі існуючих теорій та підходів, значно збагатили розуміння природи критичних явищ. Однак завершеної строгої і послідовної мікроскопічної теорії фазових переходів другого роду та критичних явищ на теперішній час не існує [Гинзбург В.Л. О физике и астрофизике. – М.: Бюро Квантум, 1995; Гинзбург В.Л. О науке, о себе и о других. – М.: Физматлит, 2003; Камилов И.К., Муртазаев А.К., Алиев Х.К., УФН, 1999, **169**, 773]. Значна частина теоретичних результатів, отриманих останнім часом, ґрунтується на використанні методів РГ. Проте деякі положення і прийоми, які застосовуються в РГ, не можна вважати строго доведеними (див., наприклад, [Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика.

Т. 1. – М.: Мир, 1978; Ма Ш. Современная теория критических явлений. – М.: Мир, 1980]). Відмова від розгляду малих відстаней, де потенціал взаємодії (визначає індивідуальні параметри речовини) відмінний від нуля, автоматично виключає можливість з'ясування індивідуальних особливостей критичних явищ. До того ж залишається не до кінця вирішеним питання про вплив неідеальних рис реальних систем на результати дослідження критичних явищ. Центр ваги теоретичних досліджень змістився тепер до врахування багаточисленних ускладнюючих факторів, властивих реальним системам. До них можуть бути віднесені анізотропія і домішки, багатоспіновий обмін, диполь-дипольна взаємодія, коливання ґратки та ряд інших. Важливими є виявлення і теоретичний опис впливу мікроскопічних параметрів вихідної системи на її поведінку в критичній області, вивчення впливу зовнішнього поля на термодинамічні характеристики системи. Строге дослідження систем методами сучасної теоретичної фізики на основі мікроскопічних гамільтоніанів із врахуванням вказаних зауважень, розвиток мікроскопічної теорії фазових переходів – задача актуальна і досить складна. Побудова математично строгої мікроскопічної теорії фазових переходів виявляється нетривіальним та важким завданням. Основна трудність при побудові мікроскопічної теорії фазових переходів полягає у відсутності явного малого параметра.

В магнетиках мікроскопічний стан системи характеризується величинами локальних намагніченостей. В багатьох магнітних системах електрони, які визначають магнітну поведінку, локалізовані поблизу атомів кристалічної ґратки, а сили, що визначають їх взаємну орієнтацію, створюються короткодійними обмінними взаємодіями. На якісному рівні подібні системи добре описуються моделлю Ізинга. Точний розв'язок (обчислення статистичної суми і кореляційних функцій) знайдено для одновимірної, а також для двовимірної в нульовому зовнішньому полі моделей Ізинга. В інших випадках доводиться вдаватися до наближених методів. Хоча спочатку модель Ізинга була сформульована для ферромагнетиків, вона придатна для опису фазового переходу в будь-якій системі, що характеризується набором змінних, які зв'язані з вузлами кристалічної ґратки, причому на кожному вузлі відповідна змінна може приймати тільки два значення. Магнітний варіант моделі Ізинга та інші інтерпретації (бінарний сплав, ґратковий газ) обговорюються в ряді книг, зокрема в [Дайсон Ф., Монтролл Э., Кац М., Фишер М. Устойчивость и фазовые переходы. – М.: Мир, 1973].

Модель Ізинга є прототипом статистичних систем, які демонструють нетривіальну критичну поведінку степеневого типу. До класу універсальності тривимірної моделі Ізинга належать різноманітні фізичні системи. Важливі приклади відомі з фізики конденсованих систем та фізики високих енергій [Pelissetto A., Vicari E., Phys. Rep., 2002, **368**, 549]. Завдяки своїй

простоті і багатом фізично важливим застосуванням тривимірної моделі Ізинга та представники відповідного класу універсальності належать до найбільш широко досліджуваних систем.

Основна ідея підходу, який використовується в дисертації, базується на запропонованому академіком Юхновським методі поетапного обчислення виразу для статистичної суми тривимірної ізингоподібної системи (див., наприклад, [Юхновский И.Р. Фазовые переходы второго рода. Метод коллективных переменных. – Киев: Наукова думка, 1985]). Такий спосіб розрахунку особливо актуальний в околі точки фазового переходу, де дисперсія гаусового розподілу прямує до безмежності і застосування цього розподілу стає неефективним. Для адекватного опису системи слід використовувати складніші розподіли, які в показнику експоненти, крім квадрату змінної, містять вищі її степені. Цій вимозі задовольняють четвірний та шестирний розподіли флуктуацій, які успішно застосовуються в представленій мікроскопічній теорії.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконана в Інституті фізики конденсованих систем НАН України, із науковою тематикою якого пов'язаний вибраний напрямок досліджень. Представлені в дисертації результати отримані згідно планів робіт в рамках бюджетних тем НАН України “Дослідження фазових переходів першого та другого роду з використанням функціональних методів” (1988-1993 рр., номер державної реєстрації 01 88 0086790), “Дослідження критичної поведінки простих та багатокомпонентних флюїдів та спінових систем” (1994-1998 рр., номер державної реєстрації 01 94 022987), “Дослідження фазових переходів в об'ємних і просторово-обмежених системах та опис на мікроскопічному рівні їх термодинамічних та структурних характеристик” (1999-2001 рр., номер державної реєстрації 0199U000668), “Розвиток кількісної теорії фазових переходів у конденсованих системах” (2002-2004 рр., номер державної реєстрації 0102U000218), “Розробка сучасних теоретичних методів та їх застосування до вивчення властивостей конденсованих систем” (2002-2006 рр., номер державної реєстрації 0102U001794), “Особливості критичної поведінки конденсованих систем під впливом зовнішнього поля, структурного безладу, фрустрацій та анізотропії” (2005-2007 рр., номер державної реєстрації 0105U002081), “Розвиток і застосування методів аналітичної теорії та комп'ютерного експерименту для опису явищ переносу в іон-електронних системах” (2007-2011 рр., номер державної реєстрації 0107U002081), “Аналітичні та чисельні дослідження скейлінгових властивостей та фазових переходів у багаточастинкових системах” (2008-2012 рр., номер державної реєстрації 0108U001152), а також проекту Державного фонду фундаментальних досліджень “Розвиток математичних методів опису фазових переходів у конденсованих системах” (1997-1999 рр., номер державної реєстрації 2.4/173).

Мета і задачі дослідження. Метою дисертаційної роботи є розвиток послідовної мікроскопічної теорії для опису критичної поведінки систем класу універсальності тривимірної моделі Ізинга, що здійснюється на основі вищого негаусового (шестирного) розподілу флуктуацій параметра порядку з врахуванням конфлуентних поправок за відсутності зовнішнього поля в гамільтоніані системи, а також з використанням негаусових (четвірного та шестирного) розподілів флуктуацій за наявності однорідного зовнішнього поля. Теорія в рамках четвірної (моделі ρ^4) та шестирної (моделі ρ^6) густин мір будується із перших принципів, починаючи від гамільтоніану системи і закінчуючи явними виразами для універсальних та неуніверсальних величин. У роботі для досягнення вказаної мети необхідно було вирішити *такі задачі*:

- розвинути методіку врахування конфлуентних поправок при знаходженні термодинамічних характеристик системи в наближенні моделі ρ^6 за відсутності зовнішнього поля, дослідити і продемонструвати вплив мікроскопічних параметрів системи на одержані термодинамічні характеристики;
- розробити на мікроскопічному рівні в рамках методу колективних змінних (КЗ) і моделі ρ^6 спосіб отримання рівняння стану системи та використати запропоноване рівняння для дослідження температурної і польової залежності параметра порядку системи;
- реалізувати з використанням асиметричної моделі ρ^4 метод прямого розрахунку явних виразів для вільної енергії та інших термодинамічних характеристик тривимірної ізингоподібної системи в областях так званих слабких та сильних зовнішніх полів;
- поширити методіку інтегрування статистичної суми системи в зовнішньому полі на випадок асиметричної моделі ρ^6 , одержати для вказаної моделі рекурентні співвідношення (РС) з новими спеціальними функціями;
- узагальнити спосіб розрахунку вільної енергії спінової системи з однокомпонентним параметром порядку на випадок моделі ρ^6 з лінійним за полем доданком.

Об'єктом дослідження дисертаційної роботи є поведінка тривимірних ізингоподібних систем в околі критичної точки. *Предмет дослідження* – врахування конфлуентних поправок у виразах для термодинамічних характеристик при використанні вищого негаусового наближення, залежність коефіцієнтів аналога вільної енергії Ландау від мікроскопічних параметрів системи, побудова та розрахунок на мікроскопічному рівні рівняння стану в критичній області, метод отримання та аналіз термодинамічних характеристик системи (вільної енергії, ентропії, теплоємності, середнього спінового моменту, сприйнятливості) як функцій температури, зовнішнього поля і мікроскопічних параметрів.

Основним із використаних *методів дослідження* є метод КЗ, який служить математичним апаратом у даній дисертаційній роботі. Вихідним пунктом постановки задачі в методі КЗ виступає гамільтоніан системи. Далі здійснюється перехід до множини КЗ, розрахунок якобіану переходу від спінових змінних до КЗ призводить до функціоналу статистичної суми, який подібний до функціоналу Гінзбурга–Ландау–Вільсона. Інтегрування короткохвильових мод коливань густини спінового моменту в даному підході відбувається згідно ідей методу РГ без використання традиційної теорії збурень. Виконуване РГ перетворення можна віднести до вільсонового типу. Розв'язки РС, які суттєво використовуються в дисертації при обчисленні вільної енергії системи, отримані із застосуванням методу нерухої точки. Точка виходу системи із критичного режиму (КР) в розділах 2 та 3 знаходиться як розв'язок відповідного рівняння за допомогою методу послідовних наближень. При розрахунку внесків у вільну енергію системи від довгохвильових мод коливань спінової густини використовується метод перевалу (розділи 3, 5, 6). Цьому сприяє наявність різкого максимуму підінтегрального виразу в точці, яка відповідає рівноважному значенню параметра порядку. Теоретичні дослідження на всьому своєму шляху супроводжувались числовими розрахунками.

Наукова новизна одержаних результатів. Розвинутий в дисертаційній роботі мікроскопічний підхід до опису критичної поведінки тривимірних систем з однокомпонентним параметром порядку використовує негаусові розподіли флуктуацій. Використання складніших від гаусового розподілів для обчислення вільної енергії системи відповідає підсумовуванню безмежної кількості гаусових моментів і при цьому не виникає проблеми, пов'язаної із сумуванням різних класів розбіжних (відносно гаусового розподілу) діаграм в критичній точці. Спосіб прямого розрахунку статистичної суми системи з врахуванням щоразу більшої кількості доданків в показнику експоненти негаусового розподілу флуктуацій є альтернативою до використання вищих порядків теорії збурень для гаусового розподілу.

Методику аналітичного розрахунку вільної енергії та інших термодинамічних характеристик систем класу універсальності тривимірної моделі Ізинга розвинуто на мікроскопічному рівні за відсутності зовнішнього поля у вищому негаусовому наближенні (моделі ρ^6). Складовою частиною даної методики виступає розробка способу врахування температурних конфлуентних поправок. В рамках моделі ρ^6 вперше одержано вирази для амплітуд конфлуентних поправок з виділеним неуніверсальним (залежним від мікроскопічних параметрів) множителем. Явні вирази, отримані для термодинамічних характеристик при температурах, вищих і нижчих від критичної, дали можливість дослідити їх залежність від температури та мікроскопічних параметрів системи. Для різних значень радіуса дії потенціалу

взаємодії приведено оцінки основних критичних амплітуд і амплітуд конфлуентних поправок деяких термодинамічних характеристик системи. Порівняння отриманих результатів (наприклад, графіків температурних залежностей середнього спінового моменту й теплоємності) з даними інших авторів демонструє їхнє узгодження.

У вищому негаусовому наближенні з врахуванням поправочних конфлуентних доданків знайдено мікроскопічний аналог вільної енергії Ландау, який визначає частину вільної енергії, що зв'язана з параметром порядку. Із перших принципів одержано загальні вирази для коефіцієнтів аналога розкладу вільної енергії в ряд за степенями параметра порядку, встановлено їхню температурну поведінку. Температурна залежність цих коефіцієнтів, на відміну від теорії Ландау, не постулюється і є неаналітичною. На основі вищого негаусового наближення вперше досліджено залежність коефіцієнтів аналога вільної енергії Ландау від мікроскопічних параметрів системи.

В рамках моделі ρ^6 на мікроскопічному рівні запропоновано метод побудови рівняння стану спінової системи, який заснований на поетапному інтегруванні статистичної суми за КЗ до деякого визначеного номера ефективної блочної структури, певній заміні змінних та використанні умови екстремуму на цьому етапі розрахунку. Отримане рівняння дозволило дослідити параметр порядку як функцію температури, зовнішнього поля і мікроскопічних параметрів системи.

З використанням асиметричної моделі ρ^4 метод прямого розрахунку термодинамічних характеристик тривимірного одновісного магнетика узагальнено на випадок наявності однорідного зовнішнього поля. Завдяки аналітичним обчисленням, розвинутим для областей слабких та сильних полів і температур, вищих та нижчих від T_c , одержано явні вирази для вільної енергії, середнього спінового моменту та сприйнятливості у вигляді степеневих розкладів за змінними, які є комбінаціями поля і температури. Знайдені коефіцієнти розкладів є функціями таких характеристик вихідної системи, як постійна ґратки і параметри потенціалу взаємодії. Вперше отримано явні вирази для ентропії та теплоємності системи біля критичної точки в сильних полях.

Мікроскопічний опис критичної поведінки системи в зовнішньому полі поширено на випадок складнішого розподілу флуктуацій, ніж четвірний. Введено у розгляд нові спеціальні функції, які виникають при побудові теорії на основі асиметричної моделі ρ^6 та входять до складу РС, одержаних для цієї моделі. Розвиток аналітичного способу розрахунку вільної енергії системи, здійсненого в наближенні моделі ρ^6 з лінійним за полем доданком без використання степеневих розкладів за скейлінговою змінною, призвів до таких нових результатів: а) для вказаної моделі вперше враховано узагальнену точку виходу системи із КР, залежну одночасно від температурної

та польової змінних; б) в методі КЗ вперше сформульовано і реалізовано методику обчислення внеску від польової конфлуентної поправки.

Практичне значення одержаних результатів. Виконані дослідження поглиблюють знання про критичні властивості систем ізингового класу універсальності та служать певним методологічним внеском в теоретичний опис критичних явищ. Викладений в дисертації мікроскопічний підхід до дослідження критичної поведінки ізингоподібних систем може бути застосований для побудови теорії критичних явищ у різноманітних тривимірних системах. Теоретичний опис критичної поведінки реальних систем на якомусь етапі розрахунку зводиться до опису фазового переходу в деякій моделі. Розвиток методу розрахунку основних термодинамічних та структурних характеристик одної із базових моделей фазового переходу – тривимірної моделі Ізинга – відкриває шлях до опису складніших фізичних систем. Тому максимально повний розв'язок тривимірної ізингоподібної системи є ключем до опису критичної поведінки багатьох фізичних об'єктів.

Мікроскопічна теорія фазових переходів, розвинута в дисертаційній роботі, може бути використана, зокрема, при дослідженні кристалів з сильно анізотропними взаємодіями, магнітні моменти молекул яких можна вважати направленими тільки “вверх” або “вниз” (наприклад, FeCl_2 , FeCO_3) [Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике. – М.: Мир, 1985]. Прикладами ізингових (анізотропних) ферромагнетиків також служать деякі рідкісноземельні гідроокиси $\text{R}(\text{OH})_3$ (такі як $\text{Tb}(\text{OH})_3$, $\text{Dy}(\text{OH})_3$, $\text{Ho}(\text{OH})_3$) та рідкісноземельні літєві фториди LiRF_4 (LiTbF_4 , LiHoF_4) [Звездин А.К., Матвеев В.М., Мухин А.А., Попов А.И. Редкоземельные ионы в магнитоупорядоченных кристаллах. – М.: Наука, 1985]. Прикладами ізингових антиферромагнетиків є рідкісноземельні ортоалюмінати DyAlO_3 , TbAlO_3 , рідкісноземельні алюмінати-гранати $\text{Dy}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$, $\text{Tb}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$. Модель Ізинга і реальні магнітні матеріали забезпечують зручну можливість взаємовигідної взаємодії теорії та експерименту [Wolf W.P., Braz. J. Phys., 2000, **30**, 794].

Даний підхід та отримані результати щодо впливу параметрів потенціалу взаємодії на критичну температуру, розмір критичної області, критичні амплітуди дають змогу вивчати проблему фазових переходів на мікроскопічному рівні.

Дослідження впливу зовнішнього поля на поведінку системи, якому присвячена друга частина дисертаційної роботи, є актуальним в багатьох галузях науки, зокрема в магнітобіології, що вивчає дію слабких магнітних полів на біосистеми [Бинги В.Н., Савин А.В., УФН, 2003, **173**, 265]. Гамільтоніан, який описує такі процеси, включає деяку обмінну взаємодію спінів, що знаходяться в слабкому зовнішньому полі. Розроблена в дисертації методика розрахунку

термодинамічних характеристик тривимірного ізингового магнетика в зовнішньому полі та одержані при цьому результати корисні для подальшого дослідження та розширення уявлень про вплив зовнішнього поля на критичні властивості системи.

Результати, отримані для тривимірної ізингоподібної системи в зовнішньому полі, можуть бути застосовані для опису критичних точок рідина-газ як однокомпонентного флюїду, так і бінарної флюїдної суміші. Функціонал статистичної суми цих систем відповідає статистичній сумі моделі Ізинга в зовнішньому полі. Новим моментом при описі критичної точки рідина-газ в порівнянні з випадком моделі Ізинга є залежність критичної температури і всіх коефіцієнтів від густини та хімічного потенціалу. Останній є рівнозначний включенню постійного зовнішнього поля в модель Ізинга.

Особистий внесок здобувача. В написаних у співавторстві працях внесок здобувача визначається таким чином. При описі критичної поведінки тривимірної ізингової системи в рамках четвірного розподілу флуктуацій здобувач здійснював аналітичні дослідження та числові розрахунки з врахуванням впливу параметрів потенціалу взаємодії [2], приймав участь у розвитку на мікроскопічному рівні методу розрахунку температури фазового переходу і в процесі дослідження одержаного для критичної температури рівняння запропонував умови вибору фур'є-образу потенціалу для близьких до границі півзони Бріллюена хвильових векторів [3,6,12,13]. З використанням вищого негаусового (шестирного) розподілу флуктуацій у випадку відсутності зовнішнього поля здобувачем розвинуто мікроскопічний метод розрахунку термодинамічних характеристик тривимірної ізингоподібної системи в околі температури фазового переходу, сформульовано і реалізовано при цьому ідею врахування температурних конфлуентних поправок та оцінено залежність одержаних результатів від мікроскопічних параметрів системи [1,8,16-18]. Здобувачеві належить постановка задачі про дослідження залежності коефіцієнтів виразу для аналога вільної енергії Ландау від мікроскопічних параметрів та її вирішення шляхом виконання у вищому негаусовому наближенні відповідних аналітичних та числових розрахунків [19]. Наслідком безпосередньої участі здобувача у розвитку запропонованого на мікроскопічному рівні способу отримання рівняння стану системи в рамках шестирного розподілу стало вивчення ним (на основі числового розв'язку даного рівняння) еволюції параметра порядку із зміною температури та зовнішнього поля [4,7]. При розробці методики розрахунку термодинамічних характеристик системи в зовнішньому полі з використанням ефективних гамільтоніанів з парними та непарними степенями змінної до четвертого включно здобувач приймав участь в постановці конкретних задач, одержанні та обговоренні результатів досліджень [20-23,25]. Здобувачеві належать ідея врахування температурної точки виходу системи із КР при розрахунку вільної

енергії в області слабких полів і польової точки виходу – в області сильних полів [20], а також обчислення в цих областях та аналіз коренів певних рівнянь, які є аналогами рівняння стану системи (для випадку температур $T > T_c$ див. [25], а для $T < T_c$ див. [22]). Реалізація вказаної ідеї і використання степеневих розкладів для коренів рівнянь за комбінаціями поля і температури дозволили здобувачеві розвинути поблизу критичної точки в областях слабких та сильних полів при вищих і нижчих від T_c температурах методику розрахунку явних виразів для термодинамічних характеристик у вигляді вищезгаданих розкладів [23]. Знайдені здобувачем за допомогою даної методики основні результати досліджень та порівняння з оцінками методу Монте-Карло приведено в [21]. Здобувачем виконано інтегрування статистичної суми системи за шарами фазового простору КЗ з врахуванням в гамільтоніані членів парних та непарних порядків включно до шостого, отримано РС між коефіцієнтами гамільтоніанів двох суміжних блочних структур та розглянуто нові спеціальні функції, що входять до складу РС [14]. Здобувачеві належить розвиток аналітичного методу обчислення вільної енергії системи в ненульовому зовнішньому полі із застосуванням узагальненої точки виходу із КР та моделі, парна частина якої містить другий, четвертий і шостий степені змінної, а непарна – член першого порядку, а також пропозиція врахування в методі КЗ конфлуентної поправки за полем. Результати досліджень цього напрямку відображені в [40] та в працях [26] і [39] із переліку [5,9-11,15,24,26,27,29,34,39], який відноситься до робіт, виконаних дисертантом одноосібно.

Апробація результатів дисертації. Основні результати дисертаційної роботи представлялися та обговорювалися на таких наукових зустрічах: Ukrainian-French Symposium “Condensed Matter: Science & Industry” (Lviv, Ukraine, February 20-27, 1993), 19th IUPAP International Conference on Statistical Physics “Statphys 19” (Xiamen, China, July 31 - August 4, 1995), 6th European Magnetic Materials and Applications Conference (Wien, Austria, September 4-8, 1995), International Workshop on Statistical Physics and Condensed Matter Theory (Lviv, Ukraine, September 11-14, 1995), науковий семінар з статистичної теорії конденсованих систем (Львів, Україна, 14-15 березня 1997 р.), International Conference on Magnetism (Cairns, Australia, 27 July - 1 August, 1997), INTAS-Ukraine Workshop on Condensed Matter Physics (Lviv, Ukraine, May 21-24, 1998), XXth IUPAP International Conference on Statistical Physics “Statphys 20” (Paris, France, July 20-24, 1998), перша українська школа-семінар з фізики сегнетоелектриків та споріднених матеріалів (Львів, Україна, 26-28 серпня 1999 р.), XIII International Congress on Mathematical Physics (London, UK, 17-22 July 2000), Workshop on Modern Problems of Soft Matter Theory (Lviv, Ukraine, 27-31 August 2000), 2nd International Pamporovo Workshop on Cooperative Phenomena in Condensed Matter (Pamporovo, Bulgaria, 28th July - 7th August 2001), International Conference “Physics of Liquid Matter:

Modern Problems” (Kyiv, Ukraine, September 14-19, 2001), VI Ukrainian-Polish and II East-European Meeting on Ferroelectrics Physics (Uzhgorod-Synjak, Ukraine, September 6-10, 2002), 2nd International Conference “Physics of Liquid Matter: Modern Problems” (Kyiv, Ukraine, September 12-15, 2003), NATO Advanced Research Workshop “Dimensionality Effects and Non-Linearity in Ferroics” (Lviv, Ukraine, October 19-22, 2004), 3rd International Conference “Physics of Liquid Matter: Modern Problems” (Kyiv, Ukraine, May 27-31, 2005), Annual Conference in Ukraine “Statistical Physics 2005: Modern Problems and New Applications” (Lviv, Ukraine, August 28-30, 2005), VIII Ukrainian-Polish and III East-European Meeting on Ferroelectrics Physics (Lviv, Ukraine, September 4-7, 2006), 4th International Conference “Physics of Liquid Matter: Modern Problems” (Kyiv, Ukraine, May 23-26, 2008).

Окремі результати неодноразово доповідалися на семінарах Інституту фізики конденсованих систем НАН України і відділу статистичної теорії конденсованих систем цього інституту.

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 1 монографію, 25 статей у фахових наукових журналах (серед них 7 статей є одноосібними), 6 препринтів та 21 тези конференцій.

Структура та об’єм дисертації. Дисертаційна робота складається із переліку умовних скорочень, вступу, семи розділів основної частини, загальних висновків, списку використаних джерел з 397 найменувань та додатку, містить 28 рисунків і 16 таблиць. Повний обсяг дисертації – 285 сторінок.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** висвітлено актуальність обраної теми, сформульовано мету і задачі дослідження, відзначено наукову новизну і практичне значення одержаних результатів, визначено особистий внесок здобувача та наведено інформацію щодо апробації результатів дисертації.

Основна частина дисертації починається із короткого огляду літератури з теорії фазових переходів та критичних явищ (див. **перший розділ**). Тут висвітлено важливі віхи у розвитку аналітичних і числових досліджень (теорія середнього поля, теорія Ландау, гіпотези подібності та універсальності, РГ підхід Вільсона, методи числового розрахунку). Описано ідеї, досягнення, недоліки і труднощі різних теорій та підходів. Подано відомості про методи і результати досліджень критичної поведінки тривимірної моделі Ізинга. Обговорено також успіхи у розвитку теорії фазових переходів та критичних явищ, досягнуті завдяки застосуванню методу КЗ до

вивчення властивостей різноманітних систем. Звернуто увагу на важливі питання, які були вивчені і розв'язані при використанні методу КЗ стосовно тривимірної ізингової системи. Розділ 1 містить коротке резюме щодо необхідності проведення досліджень, яким присвячена дана дисертаційна робота.

У **другому розділі** дисертації для температур, вищих від температури фазового переходу T_c , на основі негаусової шестирної густини міри викладено аналітичний спосіб розрахунку термодинамічних характеристик тривимірної ізингоподібної системи з врахуванням температурних конfluентних поправок, методика знаходження яких розкривається в процесі проведення обчислень. Негаусова густина міри за відсутності зовнішнього поля представляється у вигляді експоненційної функції від КЗ, в аргументі якої поряд з квадратичним доданком присутні вищі парні степені змінної з відповідними постійними взаємодії. Найпростішою негаусовою мірою є четвірна, що містить в показнику експоненти другий та четвертий степені змінної. За нею слідує шестирна, в якій є додатковий член, пропорційний до шостого степеня змінної, і т.д. При побудові теорії фазового переходу на основі негаусових густин мір виникають певні спеціальні функції. Вигляд цих спеціальних функцій залежить від вибору наближення густини міри, яке використовується у розрахунках. Так, четвірна густина міри призводить до функцій Бесселя або функцій параболічного циліндра [Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами / Под ред. Абрамовиц М., Стиган И. – М.: Наука, 1979]. При використанні складніших за четвірну густин мір функції параболічного циліндра одного аргументу переходять у більш складні спеціальні функції нового класу з більшою кількістю аргументів. Зокрема, для шестирної густини міри за відсутності зовнішнього поля спеціальні функції містять два аргументи, що визначаються співвідношеннями коефіцієнтів відповідно при другому і четвертому та четвертому і шостому степенях змінної ефективної густини міри. Степеневі представлення спеціальних функцій дали змогу одержати в розділі 2 явний вираз для вільної енергії при $T > T_c$ та на його основі інші термодинамічні функції системи у випадку нульового зовнішнього поля. Дана методика розрахунку ґрунтується на роздільному врахуванні внесків в термодинамічні функції від короткохвильових і довгохвильових мод коливань густини спінового моменту.

Ізингоподібна система з експоненційно спадним потенціалом взаємодії $\Phi(r_{j\ell}) = A \exp(-r_{j\ell}/b)$ (A – стала величина, b – радіус ефективної взаємодії, $r_{j\ell}$ – віддаль між частинками у вузлах j і ℓ) розглядається на простій кубічній ґратці з N вузлами та періодом c . Використання моделі ρ^6 дозволяє не лише вийти за рамки класичного наближення, але й отримати кількісні характеристики фазового переходу другого роду.

На основі результатів аналітичних обчислень прослідковано поведінку температури фазового переходу та розміру критичної області із зміною параметрів потенціалу взаємодії. Розрахунок розміру критичної області для різних величин радіуса дії потенціалу свідчить, що ця область (порядку сотих за відносною температурою при малих радіусах) для великих значень радіуса, швидко зменшуючись з його ростом, стає дуже малою, практично відсутньою.

Основні неаналітичні доданки вільної енергії пов'язані з врахуванням у розв'язках РС для моделі ρ^6 більшого власного значення $E_1 > 1$ матриці лінійного перетворення РГ. Менші власні значення $E_2 < 1$ і $E_3 < 1$ відповідають за виникнення конfluентних поправок, внесок від яких в термодинамічні характеристики системи зростає за абсолютною величиною при відхиленні температури від T_c . Розроблена в рамках вищого негаусового наближення методика розрахунку наступних доданків за основними у виразах для термодинамічних характеристик дала змогу виділити у цих доданках залежність від мікроскопічних параметрів системи, тобто від радіуса дії потенціалу, фур'є-образу потенціалу при нульовому значенні хвильового вектора, постійної ґратки. Обчислені при $T > T_c$ для різних значень радіуса дії потенціалу амплітуди перших конfluентних поправок теплоємності системи

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

та сприйнятливості на одну частинку

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

мають від'ємний знак (див. a_c^+ та a_χ^+ в табл. 1) і для змодельованої (через параметри потенціалу) взаємодії найближчих сусідів узгоджуються із результатами інших авторів. У приведених формулах k – стала Больцмана, $\tau = (T - T_c)/T_c$ – відносна температура, μ_B – магнетон Бора, $\tilde{\Phi}(0)$ – фур'є-образ потенціалу взаємодії при нульовому значенні хвильового вектора, $N' = Ns_0^{-3}$. Параметр s_0 визначає область значень хвильового вектора, де для фур'є-образу потенціалу справедлива параболічна апроксимація. Величини $\alpha = 2 - 3\nu$, $\gamma = 2\nu$ і $\Delta_1 = -\ln E_2 / \ln E_1$ – це відповідно критичні показники теплоємності, сприйнятливості і показник поправки до скейлінгу. Критичний показник кореляційної довжини ν , основні критичні амплітуди A^+ , Γ^+ та амплітуди конfluентних поправок a_c^+ , a_χ^+ розраховуються згідно одержаних виразів. Табл. 1 містить дані для амплітуд при оптимальних значеннях параметра РГ s та різних b . Величина радіуса дії

потенціалу $b = b_I = c/(2\sqrt{3})$ наближено відповідає взаємодії найближчих сусідів, $b = b_{II} = 0.3379c$ – перших і других сусідів, $b = b_{III} = 0.3584c$ – перших, других і третіх сусідів.

У третьому розділі метод обчислення термодинамічних характеристик системи в наближенні моделі ρ^6 за відсутності зовнішнього поля, включаючи конфлуентні поправки, поширюється на випадок температур $T < T_c$. Виходячи із отриманих поблизу T_c коротко- і довгохвильових внесків у вільну енергію, знаходиться повний вираз для неї. Важливим елементом вказаного методу розрахунку є виділення вільної енергії впорядкування.

На основі одержаних співвідношень для різних значень радіуса ефективної взаємодії обчислено компоненти коефіцієнтів аналога вільної енергії Ландау

$$E_0(\rho) = D\rho^6 + G\rho^4 - \tilde{B}\rho^2 - \beta h\rho, \quad (3)$$

який виникає в експоненті підінтегральної функції у виразі для довгохвильової частини статистичної суми системи

$$Z_{\mu_r+1} = e^{-\beta F'_{\mu_r+1}} \sqrt{N} \int e^{-NE_0(\rho)} d\rho. \quad (4)$$

Тут $\beta = 1/(kT)$ – обернена термодинамічна температура, h задає величину зовнішнього поля \mathbf{H} ($h = \mu_B H$). Змінна $\rho = \rho_0 / \sqrt{N}$ зв'язана з КЗ ρ_0 , середнє значення якої асоціюється із параметром порядку. Величина F'_{μ_r+1} характеризує внесок у вільну енергію системи від змінних ρ_k з хвильовими векторами $k \rightarrow 0$, однак $k \neq 0$.

Таблиця 1. Значення коефіцієнтів у виразах для теплоємності C/kN' (1) та сприйнятливості χ (2).

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

Розрахунок параметра порядку досліджуваної системи (середнього спінового моменту) полягає в знаходженні точки екстремуму $\bar{\rho}$ функції $E_0(\rho)$ (3). У цій точці, завдяки наявності множника N в показнику експоненти, підінтегральний вираз в (4) має різкий максимум, а результат обчислення інтегралу методом перевалу містить $E_0(\bar{\rho})$, що за формою співпадає з розкладом вільної енергії в ряд за степенями параметра порядку. Відмінний від нуля при $T < T_c$ середній спіновий момент системи $\langle \sigma \rangle \equiv \bar{\rho}$ у випадку $h = 0$ після явного виділення температури набуває вигляду

$$\langle \sigma \rangle = \langle \sigma \rangle^{(0)} |\tau|^{v/2} (1 + \langle \sigma \rangle^{(1)} |\tau|^{\Delta_1}). \quad (5)$$

Коефіцієнти $\langle \sigma \rangle^{(i)}$ є функціями мікроскопічних параметрів і знайдені для різних значень b . Криві залежності $\langle \sigma \rangle$ від τ зображено на рис. 1. На цьому і на наступних рис. 2 – 5 графічний матеріал приводиться для параметра поділу фазового простору КЗ на шари $s = 3$.

Крім вільної енергії і параметра порядку, за відсутності зовнішнього магнітного поля з точністю до наступних доданків за основними отримано вирази для ентропії, внутрішньої енергії, теплоємності системи. Досліджено структуру коефіцієнтів цих виразів в плані універсальності по відношенню до мікроскопічних параметрів. Як і у випадку $T > T_c$ (розділ 2), обчислено універсальні (не залежні від мікроскопічних параметрів) складові коефіцієнтів неаналітичної частини вільної енергії системи, основні критичні амплітуди та амплітуди конфлуентних поправок теплоємності і сприйнятливості.

Рис. 1. Температурна залежність середнього спінового моменту в рамках моделі ρ^6 для різних значень радіуса дії потенціалу b . Тут $b_I = c/(2\sqrt{3})$, $b_{II} = 0.3379c$, $b_{III} = 0.3584c$.

Одержані в цьому та попередньому розділах вирази для термодинамічних характеристик ізінгоподібної системи в рамках моделі ρ^6 дозволили наглядно проілюструвати їх поведінку в критичній області із зміною радіуса дії потенціалу, а також провести порівняння з результатами як інших авторів, так і для простішої моделі ρ^4 . Еволюцію вільної енергії F/N (в одиницях A), середнього спінового моменту $\langle \sigma \rangle$ і теплоємності C/kN з ростом відношення радіуса дії потенціалу до постійної ґратки демонструють відповідно рис. 2 – 4. У розділі 3 показано, що при

$h=0$ та взаємодії найближчих сусідів модель ρ^6 порівняно з моделлю ρ^4 забезпечує краще кількісне узгодження графіків температурних залежностей середнього спінового моменту й теплоємності ізингової системи з даними праці [Liu A.J., Fisher M.E., Physica A, 1989, **156**, 35].

Рис. 2. Залежність вільної енергії системи в точці фазового переходу ($\tau = 0$) від відношення радіуса дії експоненційно спадного потенціалу взаємодії b до постійної простої кубічної ґратки c .

Рис. 3. Поведінка середнього спінового моменту із збільшенням відношення b/c при $\tau = -10^{-3}$.

Рис. 4. Еволюція теплоємності системи з ростом відношення b/c при $|\tau| = 10^{-3}$.

Детальне дослідження рівняння стану системи виконано у **четвертому розділі**. В цьому розділі запропоновано спосіб, за яким на основі моделі ρ^6 можна отримати рівняння стану тривимірної ізингоподібної системи на мікроскопічному рівні.

Важливе місце відводиться обговоренню умови, яка може бути використана для одержання рівняння стану. Загальна ідея отримання рівняння стану зводиться до обчислення найбільш ймовірного значення КЗ ρ_0 . Після виділення із ρ_0 макроскопічної частини шляхом виконання заміни змінних

$$\rho_k = \rho'_k + \sqrt{N}\eta\delta_k, \quad (6)$$

де δ_k – символ Кронекера, статистична сума системи в наближенні моделі ρ^6 задовольнятиме співвідношенню

$$Z = 2^N 2^{(N'-1)/2} \exp(a'_0 N') \exp(-NE(\eta)) \int W(\rho, \eta) (d\rho)^{N'}. \quad (7)$$

Тут

$$E(\eta) = r\eta^2 + u\eta^4 + v\eta^6 - \beta h\eta, \quad (8)$$

величини $r = (a'_2 - \beta\tilde{\Phi}(0))/2$, $u = a'_4 s_0^3/(4!)$, $v = a'_6 s_0^6/(6!)$ визначаються початковими значеннями коефіцієнтів a'_i вихідного виразу для статистичної суми системи і залежать від мікроскопічних параметрів, $W(\rho, \eta)$ є експоненційною функцією з присутніми в аргументі багатьма доданками

[Юхновський І.Р., Козловський М.П., Пилюк І.В. Мікроскопічна теорія фазових переходів у тривимірних системах. – Львів: Євросвіт, 2001]. Величина η знаходиться з рівняння

$$\frac{\partial \tilde{E}(\eta)}{\partial \eta} = 0, \quad (9)$$

в якому

$$\tilde{E}(\eta) = E(\eta) + E_1(\eta), \quad (10)$$

де $E(\eta)$ задано в (8), а

$$E_1(\eta) = -\frac{1}{N} \ln Z_\eta. \quad (11)$$

Тут

$$Z_\eta = \int W(\rho, \eta) (d\rho)^{N'}. \quad (12)$$

Основна проблема при розв'язуванні рівняння (9) полягає в коректному врахуванні внеску від доданка $E_1(\eta)$. При $E_1(\eta) = \text{const}$ для параметра порядку η одержуються класичні критичні показники $\beta = 1/2$ і $\delta = 3$. Різниця між класичними та істинними критичними показниками пов'язана з нехтуванням залежності від η у виразі для $E_1(\eta)$, що входить до складу (10). Отже, можна зробити висновок, що використання розкладу Ландау (8) для побудови рівняння стану можливе лише за умови, коли величина (11) як функція η не впливає суттєво на $\tilde{E}(\eta)$ із (10). Це справедливо для далеких від точки фазового переходу температур, а не в критичній області. Тут інтегрування за змінними ρ_k в (12) призводить до суттєвої відмінності виразів $E(\eta)$ і $\tilde{E}(\eta)$.

Врахування в (9) доданка $E_1(\eta)$ згідно (10) – (12) становить один із можливих способів розрахунку параметра порядку. Основою цього способу є отримання явного виразу Z_η як функції η . Громіздкий вигляд підінтегральної функції $W(\rho, \eta)$, яка входить в (12), свідчить про досить складний шлях реалізації вказаного способу. Інший спосіб одержання рівняння стану полягає в тому, що інтегрування в більш простому вихідному виразі для статистичної суми системи здійснюється за всіма змінними ρ_k , крім ρ_0 , а обчислення параметра порядку пов'язане із пошуком значення КЗ ρ_0 , при якому має місце екстремум підінтегрального виразу.

В даному розділі запропоновано об'єднаний варіант першого і другого описаних вище способів розрахунку рівняння стану. Спочатку статистична сума інтегрується за “несуттєвими” змінними ρ_k з $B_{n_\tau} < k \leq B'$, де $B' = B/s_0$, $B = \pi/c$ – границя півзони Бріллюена, $B_{n_\tau} = B's^{-n_\tau}$, n_τ – номер шару фазового простору КЗ, після якого відбувається вихід системи із КР. Це відповідає

ідеології другого способу розрахунку. Потім, для блочних структур з номерами $n > n_c$, застосовують перший спосіб отримання рівняння стану. Таким чином, побудова рівняння стану включає в себе такі основні кроки: а) інтегрування статистичної суми системи за “несуттєвими” КЗ з великими значеннями хвильового вектора; б) заміну змінних (еквівалентна виділенню із змінної, зв’язаної з параметром порядку, деякої макроскопічної величини) на певному етапі інтегрування, коли розміри ефективних спінових блоків стають порядку кореляційної довжини системи і при подальшому інтегруванні перевищували б його; в) застосування умови мінімуму до макроскопічної частини блочного гамільтоніану.

При розрахунках враховувався температурний вихід системи із КР. Коефіцієнти ефективної густини міри після виходу із КР аналізувались за допомогою знайдених виразів. Розглянуто області температур $T > T_c$ та $T < T_c$ і представлено об’єднаний варіант рівняння стану. Чисельно розв’язуючи одержане рівняння стану, отримано криві залежностей параметра порядку системи від температури та поля для значення радіуса дії експоненційно спадного потенціалу, яке наближено відповідає взаємодії найближчих сусідів. Загальну поведінку параметра порядку σ в околі критичної точки із зміною температури τ та поля $x = \beta h$ показано у тривимірному просторі на рис. 5.

П’ятий розділ дисертаційної роботи присвячено розробці методу розрахунку термодинамічних характеристик тривимірного одновісного магнетика, що знаходиться в однорідному зовнішньому полі. Аналітичні розрахунки для температур, вищих від T_c , здійснено в областях так званих слабких та сильних полів з використанням четвірної густини міри, в показнику експоненти якої містяться парні та непарні степені змінної включно до четвертого (асиметрична модель ρ^4), та із застосуванням степеневих розкладів за комбінаціями поля і температури. До появи асиметричної моделі призводять введення зовнішнього поля в гамільтоніан системи та його включення в якобіан переходу від спінових змінних до КЗ.

Рис. 5. Температурна і польова залежність розв’язку $\sigma = \sigma(\tau, x)$ рівняння стану тривимірної ізингоподібної системи для випадку $b = c/(2\sqrt{3})$.

Розглянуті випадки полів $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$ та $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ забезпечили при розрахунках присутність малих величин (комбінацій поля і температури), розклади за якими дали змогу отримати при $T > T_c$

термодинамічні характеристики з аналітично виділеною у виразах для них явною залежністю від температури та поля. Одержані вирази ефективні для полів, далеких від \tilde{h}_c . Величина \tilde{h}_c відповідає граничному значенню поля, яке поділяє зовнішні поля на слабкі та сильні і при якому температурний та польовий впливи на систему біля критичної точки є еквівалентними. В підході КЗ \tilde{h}_c визначається із умови рівності величин ділянок КР за температурою та полем, тобто на основі рівності $m_\tau = n_h$. Тут $m_\tau = -\ln \tilde{\tau} / \ln E_2 - 1$ характеризує температурну точку виходу системи із КР при $T > T_c$, а $n_h = -\ln \tilde{h} / \ln E_1 - 1$ є точкою виходу системи із КР за польовою змінною $\tilde{h} = h' / f_0$. Граничне поле \tilde{h}_c зв'язане з нормованою відносною температурою $\tilde{\tau} = c_{k1}^{(0)} \tau / f_0$ співвідношенням $\tilde{h}_c = \tilde{\tau}^{p_0}$, де p_0 виражається через критичні показники ($p_0 = \beta\delta$). У вищеприведених співвідношеннях E_l – власні значення матриці лінійного перетворення РГ, $h' = \beta h$ – безрозмірне поле, величина $c_{k1}^{(0)}$ характеризує один із коефіцієнтів розв'язків РС, а f_0 – одну із координат фіксованої точки. Випадки $n_h > m_\tau$ і $m_\tau > n_h$ відносяться відповідно до областей полів $\tilde{h} < \tilde{h}_c$ і $\tilde{h} > \tilde{h}_c$ та передбачають різні шляхи розрахунку вільної енергії системи. Представлений в цьому та наступному розділах опис критичної поведінки системи в зовнішньому полі залежить від місцезнаходження траєкторії її руху до критичної точки ($\tilde{\tau} = 0, \tilde{h} = 0$), а саме від того, в якій із чотирьох областей (слабкі та сильні поля як при $T > T_c$, так і при $T < T_c$) лежить дана траєкторія.

Введення у розгляд зовнішнього поля призводить до узагальнення опису критичної поведінки системи, не змінюючи при цьому основних ідей та процедур, застосованих за відсутності поля.

Використовуючи температурну точку виходу системи із КР, для температур $T > T_c$ та слабких полів $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$ знайдено окремі внески у вільну енергію від усіх режимів флуктуацій, а також повний вираз для вільної енергії

$$F^{(+)} = -kTN \left[\ln \cosh h' + l_0 + l_{1T} \tilde{\tau}^{3\nu} + l_{12T} \tilde{\tau}^{3\nu} \left(\frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} \right)^2 + l_{14T} \tilde{\tau}^{3\nu} \left(\frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} \right)^4 + l_2 \tilde{h}^2 + l_3 \tilde{\tau} + l_4 \tilde{\tau}^2 \right]. \quad (13)$$

Останній включає в себе парні цілі степені поля. Шляхом прямого диференціювання вільної енергії системи за полем отримано середній спіновий момент

$$\sigma^{(+)} = \tanh h' + \sigma_0 h' + \sigma_2^{(+)} \tilde{\tau}^{\nu/2} \frac{h'}{\tilde{h}_c} + \sigma_3^{(+)} \tilde{\tau}^{\nu/2} \left(\frac{h'}{\tilde{h}_c} \right)^3 \quad (14)$$

та сприйнятливість

$$\chi^{(+)} = \beta \left[1 - \tanh^2 h' + \chi_0 + \chi_1^{(+)} \tilde{\tau}^{-\gamma} \right]. \quad (15)$$

Як впливає із виразу (14), при $h' = 0$ має місце рівність $\sigma^{(+)} = 0$. У випадку $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$ останнім доданком у цьому виразі можна знехтувати. В результаті момент $\sigma^{(+)}$ буде пропорційним до першого степеня поля.

Розрахунок вільної енергії при $T > T_c$ в області сильних полів $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ здійснюється з врахуванням точки виходу із КР за полем. Збираючи обчислені складові вільної енергії, одержано сумарну вільну енергію системи

$$F_h^{(+)} = -kTN \left[\text{ncosh } h' + l_0 + l_1 \tilde{h}^{6/5} + l_{11} \tilde{h}^{6/5} \left(\frac{\tilde{h}_c}{\tilde{h}} \right)^{1/p_0} + l_{12} \tilde{h}^{6/5} \left(\frac{\tilde{h}_c}{\tilde{h}} \right)^{2/p_0} + l_2 \tilde{h}^2 + l_3 \tilde{\tau} + l_4 \tilde{\tau}^2 \right]. \quad (16)$$

Коефіцієнти l_0 , l_2 , l_3 і l_4 приймають ті ж значення, що й для слабких полів $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$. Оскільки \tilde{h}_c визначається через $\tilde{\tau}^{p_0}$, то в $F_h^{(+)}$ (16) присутні цілі степені температури. На основі виразу (16) знайдено середній спіновий момент

$$\sigma_h^{(+)} = \tanh h' + \sigma_{h_0} h' + \sigma_{h_1} (h')^{1/5} + \sigma_{h_2} \tilde{\tau} (h')^{1/5-1/p_0} + \sigma_{h_3} \tilde{\tau}^2 (h')^{1/5-2/p_0}. \quad (17)$$

Сприйнятливість системи при $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ запишеться у вигляді

$$\chi_h^{(+)} = \beta \left[1 - \tanh^2 h' + \chi_{h_0} + \chi_{h_1} (h')^{-4/5} + \chi_{h_2} \tilde{\tau} (h')^{-4/5-1/p_0} + \chi_{h_3} \tilde{\tau}^2 (h')^{-4/5-2/p_0} \right]. \quad (18)$$

Мікроскопічний розрахунок явних співвідношень для ентропії

$$S_h^{(+)} = kN \left[s_{h_0} + s_{h_1} \tilde{h}^\psi + s_{h_2} \tilde{\tau} \tilde{h}^{-\varphi} + s_{h_3} \tilde{\tau} \right] \quad (19)$$

та теплоємності системи

$$C_h^{(+)} = kN \left[c_{h_0} + c_{h_1} \tilde{h}^{-\varphi} \right] \quad (20)$$

у випадку сильних полів виконаний в методі КЗ вперше. Тут $\psi = 6/5 - 1/p_0$, $\varphi = -(6/5 - 2/p_0)$.

Порівняно між собою внески від окремих доданків у виразах для середнього спінового моменту із областей слабких та сильних полів, а також у виразах для ентропії та теплоємності системи в сильних полях. Зокрема відмічено, що при малих значеннях поля основний внесок у середній спіновий момент $\sigma^{(+)}$ (14) забезпечується третім доданком, який відповідає моменту, індукованому полем h' . Доданок $s_{h_1} \tilde{h}^\psi$ у виразі для ентропії $S_h^{(+)}$ (19) суттєвіший, ніж доданок $s_{h_2} \tilde{\tau} \tilde{h}^{-\varphi}$. Асимптотику виразу (20) визначає другий доданок.

Реалізація в рамках асиметричної моделі ρ^4 схеми розрахунку вільної енергії та інших термодинамічних характеристик системи в слабких ($\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$) та сильних ($\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$) полях при $T < T_c$

логічно продовжує дослідження попереднього розділу дисертації і становить зміст **шостого розділу**. Величина граничного поля \tilde{h}_c залежить від температури і для $T < T_c$ задається рівністю $\tilde{h}_c = \tilde{\tau}_1^{p_0}$, де $\tilde{\tau}_1 = -\tilde{\tau}$. Під час обчислень з використанням степеневих розкладів за комбінаціями поля і температури враховують в залежності від величини поля той із двох вказаних нижче флуктуаційних процесів, який має визначальний вплив на критичну поведінку системи.

За наявності зовнішнього поля в системі поблизу критичної точки для параметра порядку виникають два флуктуаційні процеси, які описуються негаусовим розподілом. Перший з них – тепловий, що характеризується величиною $\mu_\tau = -\ln \tilde{\tau}_1 / \ln E_2 - 1$. Він має місце для ефективних блочних структур, розмір яких не перевищує величини $c_\mu = cs_0 s^{d_\tau}$, співмірної із кореляційною довжиною системи $\xi = \xi_0 \tilde{\tau}_1^{-\nu}$ при фіксованому значенні $\tilde{\tau}_1$. Другий флуктуаційний процес описується величиною $n_h = -\ln \tilde{h} / \ln E_1 - 1$ і має польовий характер. В області малих полів $\tilde{h} < \tilde{h}_c$ поведінка системи визначається першим флуктуаційним процесом, оскільки $\mu_\tau < n_h$. При великих значеннях поля $\tilde{h} > \tilde{h}_c$ справедлива зворотня ситуація, тобто $n_h < \mu_\tau$, і основний внесок в поведінку системи дають польові флуктуації параметра порядку. При $\tilde{h} = \tilde{h}_c$ роль температурної та польової змінних є рівнозначною ($\mu_\tau = n_h$). Варто зазначити, що величина \tilde{h}_c відповідає значенню поля, при якому індукований полем момент стає того ж порядку, що і спонтанний (без поля) момент системи.

Обчислюючи окремо, а потім сумуючи внески у вільну енергію системи від короткохвильових і довгохвильових мод коливань спінової густини, у випадку слабких полів $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$ та $T < T_c$ отримано повний вираз для неї

$$F^{(-)} = -kTN \left[\ln \cosh h' + l_0 + l_{1\mu} |\tilde{\tau}|^{3\nu} + l_{11\mu} |\tilde{\tau}|^{3\nu} \frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} + l_{12\mu} |\tilde{\tau}|^{3\nu} \left(\frac{\tilde{h}}{\tilde{h}_c} \right)^2 + l_2 \tilde{h}^2 - l_3 |\tilde{\tau}| + l_4 |\tilde{\tau}|^2 \right] \quad (21)$$

з парними і непарними цілими степенями поля. В одержаному виразі для середнього спінового моменту

$$\sigma^{(-)} = \tanh h' + \sigma_0 h' + \sigma_1^{(-)} |\tilde{\tau}|^{\nu^2} + \sigma_2^{(-)} |\tilde{\tau}|^{\nu^2} \frac{h'}{\tilde{h}_c} \quad (22)$$

два перші доданки є малими в порівнянні із третім та четвертим доданками. Третій член в (22) відповідає спонтанному моменту системи (при $h' = 0$ виконується рівність $\sigma^{(-)} = \sigma_1^{(-)} |\tilde{\tau}|^{\nu^2}$). Сприйнятливість системи, знайдена в слабких полях при нижчих від T_c температурах, має подібний до (15) вигляд. Відношення основних критичних амплітуд при $T > T_c$ та $T < T_c$ для

сприйнятливості (≈ 5.85 на основі даних розрахунків) не залежить від мікроскопічних параметрів системи і узгоджується з результатами інших авторів, які для тривимірних ізингоподібних систем у нульовому зовнішньому полі отримують дані, близькі до 5.

У розділі 6 проаналізовано і порівняно з випадком $T > T_c$ шлях розрахунку термодинамічних характеристик системи в сильних полях $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$. Приведені для цих полів і $T < T_c$ явні вирази для вільної енергії, середнього спінового моменту, сприйнятливості, ентропії та теплоємності системи аналогічні за своїм виглядом до (16) – (20), відповідно.

Результати розрахунків в областях $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$ та $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$ при $T > T_c$ і $T < T_c$ дали змогу дослідити поведінку середнього спінового моменту та сприйнятливості системи в залежності від зміни поля і близькості до T_c . Побудовано графіки польових залежностей вказаних термодинамічних характеристик для різних фіксованих значень температури та прослідковано еволюцію сприйнятливості системи в слабких та сильних полях з ростом температури. Рис. 6 показує, що середній спіновий момент та сприйнятливості системи

Рис. 6. Середній спіновий момент (а – $T > T_c$, б – $T < T_c$) та сприйнятливості (в – $T > T_c$, г – $T < T_c$) системи в сильних полях для різних значень відносної температури τ : ± 0.00001 , ± 0.00005 , ± 0.00010 .

в сильних полях мають слабку температурну залежність (розкид кривих для різних значень температури є малим). Обчислення виконано для параметра РГ s , якому відповідає нульове середнє значення коефіцієнта при другому степені змінної ефективної густини міри у фіксованій точці. Для конкретності покладалось $s_0 = 2$, $b/c = 0.3$, $\bar{\Phi} = 0.05$ ($\bar{\Phi}$ задає величину фур'є-образу потенціалу для значень хвильового вектора, близьких до границі півзони Бріллюена).

Знайдені на основі одержаних формул величини середнього спінового моменту та сприйнятливості системи при різних значеннях поля і температури для змодельованого випадку взаємодії найближчих сусідів узгоджуються з даними Монте-Карло симуляцій для моделі Ізинга на простій кубічній ґратці.

У цьому розділі висвітлено застосування асиметричної моделі ρ^6 та моделі ρ^6 з парними степенями змінної і лінійним пропорційним до зовнішнього поля доданком (або надалі, умовно для лаконічності, моделі ρ^6 з лінійним доданком в непарній частині) до дослідження критичних властивостей тривимірної ізингоподібної системи в зовнішньому полі.

В першому підрозділі цього розділу спінова система в ненульовому зовнішньому полі вивчається за допомогою методу КЗ з використанням густини міри, в показнику експоненти якої присутні парні та непарні степені змінної до шостого включно (асиметрична модель ρ^6). Парна частина моделі містить другий, четвертий і шостий, а непарна – перший, третій і п'ятий степені змінної. Вихідний вираз для статистичної суми системи побудовано у вигляді функціоналу з явно відомими коефіцієнтними функціями. В результаті поетапного обчислення статистичної суми число змінних інтегрування у виразі для неї поступово зменшується. Інтегрування за змінними ρ_k з нульового, першого, ..., n -го шарів фазового простору КЗ призводить до представлення статистичної суми, підінтегральна функція

$$W_6^{(n+1)}(\rho) = \exp \left[-N_{n+1}^{1/2} a_1^{(n+1)} \rho_0 - \frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{n+1}} d_{n+1}(k) \rho_k \rho_{-k} - \sum_{l=3}^6 \frac{a_l^{(n+1)}}{l! N_{n+1}^{l/2-1}} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_l \\ k_j \leq B_{n+1}}} \rho_{k_1} \cdots \rho_{k_l} \delta_{k_1 + \dots + k_l} \right] \quad (23)$$

якого включає в себе залежні від поля перенормовані початкові коефіцієнти. Отримано загальні РС

$$u_l^{(n+1)} = s^{l - \frac{l-2}{2}d} \left[-q \delta_{l-2} + (u_4^{(n)})^{l/4} Y_l(h^{(n)}) \right], \quad l = 1, 2, 3, 4, 5, 6, \quad (24)$$

що зв'язують між собою коефіцієнти підінтегральних функцій двох суміжних блочних структур. Тут введено позначення $u_1^{(n)} = s^n a_1^{(n)}$, $u_2^{(n)} + q = s^{2n} d_n(B_{n+1}, B_n)$, $u_m^{(n)} = s^{mm} a_m^{(n)}$ ($m = 3, 4, 5, 6$). Температурно залежна величина $q = \bar{q} \beta \tilde{\Phi}(0)$ характеризується множником \bar{q} , який відповідає середньому значенню k^2 на інтервалі $(1/s, 1]$. Функції $Y_l(h^{(n)})$ визначаються згідно приведених у розділі виразів, а $d = 3$ – вимірність простору. При нульовому значенні поля коефіцієнти $a_1^{(n)}$, $a_3^{(n)}$, $a_5^{(n)}$ зникають і РС (24) для асиметричної моделі ρ^6 переходять в РС для моделі ρ^6 з тільки парними степенями.

Нові спеціальні функції, що входять в РС, подано у вигляді збіжних рядів за лінійними відхиленнями аргументів від їх значень у фіксованій точці. Представлення РС у вигляді неасимптотичних рядів зв'язано з відмовою від використання традиційної теорії збурень, яка ґрунтується на гаусовій густині міри. Розв'язки приведених РС можуть бути використані для

розрахунку термодинамічних функцій системи і одержання рівняння стану згідно способу, описаного в розділі 4.

Інша частина розділу 7 присвячена розвитку методу розрахунку вільної енергії системи в зовнішньому полі на основі простішої моделі ρ^6 з лінійним членом в непарній частині. Зовнішнє поле не включалося у вираз для якобіану переходу від спінових змінних до КЗ. Такий шлях дослідження призводить до появи вказаної моделі і дозволяє спростити математичний опис, оскільки непарна частина моделі представлена тільки одним лінійним доданком. РС для моделі ρ^6 за наявності зовнішнього поля допускають в області КР розв'язки, що задаються чотирма рівняннями: перше рівняння пов'язане із наявністю поля, а три інші рівняння за формою такі ж, як і за відсутності поля.

Розроблений в підрозділах 7.2 – 7.4 аналітичний метод розрахунку вільної енергії системи відрізняється від викладеного в розділах 5 та 6 способу обчислення вільної енергії ізингового магнетика за наявності зовнішнього поля. По-перше, для густини міри використовується не четвірне (як в розділах 5 та 6), а вище шестирне наближення, яке дає кількісну картину опису критичної поведінки системи. По-друге, розрахунки, на відміну від приведених в розділах 5 та 6, виконуються без залучення степеневих розкладів за скейлінговою змінною, а використана узагальнена точка виходу системи із КР враховує одночасно температурну та польову змінні. Це призводить до того, що отриманий при $T > T_c$ повний вираз для вільної енергії як функція температури, поля і мікроскопічних параметрів системи справедливий не тільки для слабких та сильних полів (як в розділах 5 та 6), але й для проміжних полів (область поблизу граничного значення поля, розміщена між слабкими та сильними полями). Саме ця проміжна між слабкими та сильними полями кросверна область цікава і не проста для аналітичного опису, оскільки тут температурний та польовий впливи на критичну поведінку системи однаково важливі, скейлінгова змінна приймає значення порядку одиниці і степеневі розклади за нею неефективні. Теоретичні дослідження даної частини розділу 7 не вимагають поділу полів на слабкі і сильні та можуть бути використані в околі критичної точки для всіх значень поля, зокрема і для вищезгаданого граничного значення поля. По-третє, при обчисленні вільної енергії системи поряд з основними членами враховуються доданки, що визначають конфлуентні поправки як за температурою, так і за полем. У розділах 5 та 6 такі доданки, внески від яких в проміжній області є одного порядку за величиною, під час розрахунків не приймалися до уваги.

Точка виходу системи із КР визначається не за допомогою окремих співвідношень, справедливих для кожної з областей слабких та сильних полів (як це мало місце в розділах 5 та 6), а задається для всіх полів єдиним виразом

$$n_p = -\frac{\ln(\tilde{h}^2 + \tilde{h}_c^2)}{2 \ln E_1} - 1, \quad (25)$$

який в часткових випадках ($h=0, \tau \neq 0$ або $h \neq 0, \tau=0$) відтворює точки виходу за температурою або за полем. Така узагальнена точка виходу, використана для моделі ρ^6 вперше, дає можливість уникнути проблеми “зшивання” результатів на межі малих та великих полів і розробити спосіб одночасного врахування температурної та польової конфлуентних поправок. Внески у вільну енергію системи від короткохвильових і довгохвильових мод коливань густини спінового моменту розраховано в наближенні моделі ρ^6 згідно техніки, розробленої за відсутності поля і поданої в розділі 2. Закони зміни вільної енергії системи в областях слабких та сильних полів ($F \sim \tilde{\tau}^{3\nu}$ при $\tilde{h} \ll \tilde{h}_c$ та $F \sim \tilde{h}^{6/5}$ при $\tilde{h} \gg \tilde{h}_c$), одержані із знайденого повного виразу

$$F = -kTN[\gamma'_0 + \gamma'_1\tau + \gamma'_2\tau^2 + (\bar{\gamma}_3^{(0)+} + \bar{\gamma}_3^{(1)+}c_{20}^{(0)}H_3)(\tilde{h}^2 + \tilde{h}_c^2)^{3/5} + \frac{\bar{\gamma}_4^+(h')^2}{\beta\tilde{\Phi}(0)}(1 - \bar{g}_1c_{20}^{(0)}H_3)(\tilde{h}^2 + \tilde{h}_c^2)^{-2/5}], \quad (26)$$

узгоджуються з результатами розділу 5 для вільної енергії при $T > T_c$. Конфлуентні поправки за температурою та полем в (26) визначаються доданками, пропорційними до $H_3 = (\tilde{h}^2 + \tilde{h}_c^2)^{\Delta_1/(2p_0)}$, де Δ_1 – показник, що характеризує першу конфлуентну поправку. Здійснюючи диференціювання виразу для вільної енергії F (26) за температурою або полем, можна знайти інші термодинамічні характеристики системи.

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі на мікроскопічному рівні розвинуто опис критичної поведінки тривимірних ізингоподібних систем з використанням негаусових розподілів флуктуацій параметра порядку. Роль основного математичного апарату побудови теорії відіграє метод колективних змінних, який дає змогу обчислити статистичну суму системи і знайти універсальні (критичні показники) та неуніверсальні (температуру фазового переходу, термодинамічні функції) характеристики в єдиному підході.

За результатами проведених досліджень можна зробити такі основні висновки:

1. Статистичний опис критичної поведінки систем класу універсальності тривимірної моделі Ізинга на основі вищого негаусового наближення (моделі ρ^6) розвинуто в нульовому зовнішньому

полі для вищих від T_c температур з врахуванням наступних доданків за основними у виразах для термодинамічних функцій. Розроблена в процесі опису методика розрахунку зростаючих за абсолютною величиною з віддаленням від T_c температурних конфлуентних поправок дозволила в рамках моделі ρ^6 вперше отримати вирази для їх амплітуд з локалізованою в окремому множнику залежністю від мікроскопічних параметрів системи. Знайдені вирази призводять до від'ємних амплітуд конфлуентних поправок теплоємності й сприйнятливості для різних значень радіуса дії потенціалу взаємодії.

2. Мікроскопічний метод розрахунку термодинамічних характеристик системи з використанням моделі ρ^6 та конфлуентних поправок поширено за відсутності зовнішнього поля на випадок низькотемпературної області ($T < T_c$). Результати аналітичних обчислень для $T > T_c$ і $T < T_c$ дали змогу отримати в критичній області графіки температурних залежностей термодинамічних характеристик для різних значень радіуса дії потенціалу та прослідкувати зміну цих характеристик з ростом вказаного радіуса.

3. В рамках моделі ρ^6 одержано вираз для мікроскопічного аналога вільної енергії Ландау, коефіцієнти якого включають в себе як основні, так і поправочні конфлуентні доданки. Встановлена шляхом прямих розрахунків аналітична форма залежності коефіцієнтів цього виразу від температури та мікроскопічних параметрів системи усуває потребу в постулюванні їх температурної залежності (як це має місце у розкладі Ландау) і є основою дослідження їх мікроскопічної залежності.

4. Результати проведених розрахунків термодинамічних характеристик в нульовому зовнішньому полі, їх співставлення з даними інших авторів свідчать про те, що модель ρ^6 в порівнянні з моделлю ρ^4 забезпечує більш адекватний кількісний опис критичної поведінки тривимірного ізингового магнетика. Зокрема, графіки залежностей параметра порядку й теплоємності ізингової системи від температури для відтвореної (через параметри потенціалу) взаємодії найближчих сусідів краще узгоджуються із відповідними результатами інших досліджень у випадку моделі ρ^6 .

5. В підході колективних змінних на основі шестирної густини міри та з врахуванням температурного виходу із критичного режиму запропоновано і розвинуто мікроскопічний метод отримання рівняння стану тривимірної ізингоподібної системи. Одержане рівняння стану дало змогу із залученням числових розрахунків зобразити в критичній області еволюцію параметра порядку системи із зміною температури та поля.

6. Для температур, вищих від T_c , із перших принципів розвинуто аналітичний спосіб обчислення термодинамічних характеристик ізингової системи за наявності однорідного зовнішнього поля.

Явне виділення температурної та польової залежностей у виразах для термодинамічних характеристик системи, отриманих для випадків слабких та сильних зовнішніх полів з використанням асиметричної моделі ρ^4 , стало можливим завдяки застосуванню степеневих розкладів за змінними, що є комбінаціями поля і температури, та врахуванню величин ділянок критичного режиму як функцій однієї із двох змінних, роль якої є домінуючою (температури в області слабких полів або поля в області сильних полів). Вперше на мікроскопічному рівні запропоновано метод розрахунку явних виразів для ентропії та теплоємності системи в області сильних полів.

7. Виконані при $T < T_c$ розрахунки на основі асиметричної моделі ρ^4 доповнюють дослідження при $T > T_c$ і створюють разом з ними цілісну картину поведінки системи біля критичної точки в ненульовому зовнішньому полі. Показано, що одержаний без введення будь-яких феноменологічних параметрів вираз для вільної енергії системи в слабких полях включає в себе при $T > T_c$ тільки парні цілі степені поля, а при $T < T_c$ – парні та непарні цілі степені поля. У сильних полях вільна енергія містить цілі степені температури.

8. В областях слабких та сильних полів досліджено поведінку середнього спінового моменту і сприйнятливості системи як функцій температурної та польової змінних. Величини середнього спінового моменту та сприйнятливості, знайдені із відповідних виразів при різних значеннях поля і температури для змодельованого випадку взаємодії найближчих сусідів, як і універсальне відношення основних критичних амплітуд сприйнятливості в нульовому полі, демонструють узгодження з даними інших методів.

9. Запропоновано спосіб опису критичних властивостей ізінгоподібної системи за наявності зовнішнього поля в наближенні асиметричної моделі ρ^6 . Його основною особливістю при обчисленні статистичної суми системи є інтегрування короткохвильових мод коливань спінової густини без використання теорії збурень, в результаті якого отримано нові спеціальні функції і рекурентні співвідношення між коефіцієнтами ефективних гамільтоніанів суміжних блочних структур при парних та непарних степенях змінної.

10. На основі моделі ρ^6 з лінійним за полем доданком здійснено розрахунок вільної енергії системи, при якому враховано, крім основних, члени, що визначають конфлуентні поправки за температурою та полем. Завдяки використанню узагальненої точки виходу системи із критичного режиму як функції обох змінних (температурної і польової) та аналітичним обчисленням без залучення степеневих розкладів за скейлінговою змінною одержаний вираз для вільної енергії справедливий в околі критичної точки для довільних значень поля (не тільки для граничних випадків слабких та сильних полів, але й в кросоверній області). Спосіб отримання польової

конфлуентної поправки, співмірної в кросоверній області з температурною поправкою, в методі колективних змінних запропоновано вперше.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Юхновський І. Р. Мікроскопічна теорія фазових переходів у тривимірних системах / І. Р. Юхновський, М. П. Козловський, І. В. Пилюк. – Львів : Євросвіт, 2001. – 592 с.
2. Kozlovskii M. P. Entropy and specific heat of the 3D Ising model as functions of temperature and microscopic parameters of the system / M. P. Kozlovskii, I. V. Pylyuk // Phys. Stat. Sol. (b). – 1994. – Vol. 183. – P. 243-249.
3. Козловський М. П. Дослідження залежності температури фазового переходу ізінгоподібних систем від параметрів потенціалу взаємодії / М. П. Козловський, І. В. Пилюк, З. Є. Усатенко // УФЖ. – 1995. – Т. 40, № 10. – С. 1141-1149.
4. Духовый В. В. Расчет на микроскопическом уровне уравнения состояния трехмерной модели Изинга / В. В. Духовый, М. П. Козловский, И. В. Пылюк // ТМФ. – 1996. – Т. 107, № 2. – С. 288-306.
5. Пилюк І. В. Спеціальні функції для дослідження критичних властивостей тривимірної моделі Ізинга в рамках шестирної густини міри / І. В. Пилюк // УФЖ. – 1996. – Т. 41, № 9. – С. 885-894.
6. Kozlovskii M. P. Method of calculating the critical temperature of three-dimensional Ising-like system using the non-Gaussian distribution / M. P. Kozlovskii, I. V. Pylyuk, Z. E. Usatenko // Phys. Stat. Sol. (b). – 1996. – Vol. 197. – P. 465-477.
7. Kozlovskii M. P. Equation of state of the 3D Ising model with an exponentially decreasing potential in the external field / M. P. Kozlovskii, I. V. Pylyuk, V. V. Dukhovii // J. Magn. Magn. Mater. – 1997. – Vol. 169. – P. 335-342.
8. Kozlovskii M. P. Calculation method for the three-dimensional Ising ferromagnet thermodynamics within the frames of ρ^6 model / M. P. Kozlovskii, I. V. Pylyuk, V. V. Dukhovii // Condens. Matter Phys. – 1997. – № 11. – P. 17-49.
9. Пылюк И. В. Критическое поведение трехмерной изинговской системы. Зависимость термодинамических характеристик от микроскопических параметров / И. В. Пылюк // ТМФ. – 1998. – Т. 117, № 3. – С. 442-470.

10. Пылюк И. В. Описание критического поведения изинговского ферромагнетика в приближении модели ρ^6 с учетом конфлуентной поправки. I. Область выше точки фазового перехода / И. В. Пылюк // ФНТ. – 1999. – Т. 25, № 11. – С. 1170-1185.
11. Пылюк И. В. Описание критического поведения изинговского ферромагнетика в приближении модели ρ^6 с учетом конфлуентной поправки. II. Область ниже точки фазового перехода / И. В. Пылюк // ФНТ. – 1999. – Т. 25, № 12. – С. 1271-1281.
12. Kozlovskii M. P. Self-consistent description of the critical behaviour of three-dimensional Ising-like systems: The phase transition temperature as a function of microscopic parameters / M. P. Kozlovskii, V. V. Dukhovii, I. V. Pylyuk // Ukr. J. Phys. – 2000. – Vol. 45, № 4-5. – P. 512-514.
13. Kozlovskii M. P. Dependence of the critical temperature on microscopic parameters in the three-dimensional Ising-like systems / M. P. Kozlovskii, V. V. Dukhovii, I. V. Pylyuk // Condens. Matter Phys. – 2000. – Vol. 3, № 4(24). – P. 727-736.
14. Pylyuk I. V. 3D Ising system in an external field. Recurrence relations for the asymmetric ρ^6 model / I. V. Pylyuk, M. P. Kozlovskii // Condens. Matter Phys. – 2001. – Vol. 4, № 1(25). – P. 15-24.
15. Pylyuk I. V. Thermodynamic characteristics of three-dimensional Ising-like systems as functions of microscopic parameters. The ρ^6 model approximation / I. V. Pylyuk // J. Phys. Stud. – 2001. – Vol. 5, № 3/4. – P. 221-232.
16. Yukhnovskii I. R. Thermodynamics of three-dimensional Ising-like systems in the higher non-Gaussian approximation: Computational method and dependence on microscopic parameters / I. R. Yukhnovskii, M. P. Kozlovskii, I. V. Pylyuk // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 66, № 13. – 134410 (18 pages).
17. Yukhnovskii I. R. Study of the critical behaviour of three-dimensional Ising-like systems on the basis of the ρ^6 model with allowance for microscopic parameters: I. High-temperature region / I. R. Yukhnovskii, I. V. Pylyuk, M. P. Kozlovskii // J. Phys.: Condens. Matter. – 2002. – Vol. 14, № 43. – P. 10113-10129.
18. Yukhnovskii I. R. Study of the critical behaviour of three-dimensional Ising-like systems on the basis of the ρ^6 model with allowance for microscopic parameters: II. Low-temperature region / I. R. Yukhnovskii, I. V. Pylyuk, M. P. Kozlovskii // J. Phys.: Condens. Matter. – 2002. – Vol. 14, № 45. – P. 11701-11715.

19. Kozlovskii M. P. Microscopic analogue of the Landau free energy for three-dimensional Ising-like systems / M. P. Kozlovskii, I. V. Pylyuk, O. O. Prytula // *Condens. Matter Phys.* – 2003. – Vol. 6, № 2(34). – P. 197-204.
20. Kozlovskii M. P. Behaviour of a three-dimensional uniaxial magnet near the critical point in an external field / M. P. Kozlovskii, I. V. Pylyuk, O. O. Prytula // *Condens. Matter Phys.* – 2004. – Vol. 7, № 2(38). – P. 361-382.
21. Pylyuk I. V. Analytic method of calculating thermodynamic functions for Ising-like system in an external field / I. V. Pylyuk, M. P. Kozlovskii, O. O. Prytula // *Ferroelectrics.* – 2005. – Vol. 317. – P. 43-47.
22. Kozlovskii M. P. Behaviour of the order parameter of the simple magnet in an external field / M. P. Kozlovskii, I. V. Pylyuk, O. O. Prytula // *Condens. Matter Phys.* – 2005. – Vol. 8, № 4(44). – P. 749-760.
23. Kozlovskii M. P. Microscopic description of the critical behavior of three-dimensional Ising-like systems in an external field / M. P. Kozlovskii, I. V. Pylyuk, O. O. Prytula // *Phys. Rev. B.* – 2006. – Vol. 73, № 17. – 174406 (13 pages).
24. Pylyuk I. V. Three-dimensional Ising-like system in an external field. Microscopic approach to description of the critical behaviour using the asymmetric ρ^4 model / I. V. Pylyuk // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2006. – Vol. 305. – P. 216-220.
25. Kozlovskii M. P. Critical behaviour of a three-dimensional one-component magnet in strong and weak external fields at $T > T_c$ / M. P. Kozlovskii, I. V. Pylyuk, O. O. Prytula // *Physica A.* – 2006. – Vol. 369. – P. 562-576.
26. Pylyuk I. V. Three-dimensional Ising-like system in an external field: Microscopic calculation of the free energy in the higher non-Gaussian approximation / I. V. Pylyuk // *Phase Transitions.* – 2007. – Vol. 80, № 1-2. – P. 11-16.
27. Pylyuk I. V. The development of the method for the calculation of thermodynamic functions for 3D single-component spin system in the critical region on the basis of sixfold measure density / I. V. Pylyuk // *Abstr., Inf. & Partic. of Ukrainian-French Symposium “Condensed Matter: Science & Industry”*, Lviv, Ukraine, February 20-27, 1993. – Lviv, 1993. – P. 244.
28. Kozlovskii M. Equation of state for 3D Ising model in the external field / M. Kozlovskii, I. Pylyuk, V. Dukhovii // *Progr. and Abstr. of 6th European Magnetic Materials and Applications Conference*, Wien, Austria, September 4-8, 1995. – Wien, 1995. – P. 246.
29. Pylyuk I. Thermodynamic functions of the 3D Ising model in ρ^6 -approximation taking into account the confluent correction / I. Pylyuk // *Progr. and Abstr. of International Workshop on*

- Statistical Physics and Condensed Matter Theory, Lviv, Ukraine, September 11-14, 1995. – Lviv, 1995. – P. 55.
30. Pylyuk I. V. Description of 3D Ising-like system thermodynamics on the basis of non-Gaussian sixth power measure density / I. V. Pylyuk, V. V. Dukhovii // INTAS-Ukraine Workshop on Condensed Matter Physics, Lviv, Ukraine, May 21-24, 1998. – Lviv, 1998. – P. 98.
31. Pylyuk I. V. Investigation of critical behaviour of 3D one-component spin system using the sextic measure density / I. V. Pylyuk, M. P. Kozlovskii, V. V. Dukhovii // Book of Abstr., XXth IUPAP International Conference on Statistical Physics “Statphys 20”, Paris, France, July 20-24, 1998. – Paris, 1998. – P. 33.
32. Kozlovskii M. P. Microscopic calculation of 3D Ising-like system thermodynamics in the ρ^6 model approximation / M. P. Kozlovskii, I. V. Pylyuk // Book of Abstr., XIII International Congress on Mathematical Physics, Imperial College, London, UK, 17-22 July 2000. – London, 2000. – P. 42.
33. Pylyuk I. Three-dimensional Ising system in an external field. Recurrence relations for the ρ^6 model / I. Pylyuk, M. Kozlovskii // Book of Abstr., Workshop on Modern Problems of Soft Matter Theory, Lviv, Ukraine, 27-31 August 2000. – Lviv, 2000. – P. 159.
34. Pylyuk I. V. Thermodynamic characteristics of three-dimensional Ising-like systems as functions of microscopic parameters. The ρ^6 model approximation / I. V. Pylyuk // Quantum Phases and Phase Transitions. Abstr., Progr., Inf. of the 2nd International Pamporovo Workshop on Cooperative Phenomena in Condensed Matter, Pamporovo, Bulgaria, 28th July - 7th August 2001. – Sofia, 2001. – P. 19.
35. Yukhnovskii I. R. Three-dimensional Ising-like system in an external field. Asymmetric ρ^6 model / I. R. Yukhnovskii, M. P. Kozlovskii, I. V. Pylyuk // Abstr. of International Conference “Physics of Liquid Matter: Modern Problems”, Kyiv, Ukraine, September 14-19, 2001. – Kyiv, 2001. – P. 53.
36. Kozlovskii M. P. Microscopic analog of the Landau free energy of three-dimensional Ising-like systems / M. P. Kozlovskii, I. V. Pylyuk, O. O. Prytula // Progr. and Abstr. Book, VI Ukrainian-Polish and II East-European Meeting on Ferroelectrics Physics, Uzhgorod-Synjak, Ukraine, September 6-10, 2002. – Uzhgorod-Synjak, 2002. – P. 95.
37. Pylyuk I. V. Analytic method of calculating thermodynamic functions for Ising-like system in an external field / I. V. Pylyuk, M. P. Kozlovskii, O. O. Prytula // Book of Abstr., NATO Advanced Research Workshop “Dimensionality Effects and Non-Linearity in Ferroics”, Lviv, Ukraine, October 19-22, 2004. – Lviv, 2004. – P. 87.

38. Kozlovskii M. P. Behaviour of the order parameter of the simple magnet in an external field / M. P. Kozlovskii, I. V. Pylyuk, O. O. Prytula // Book of Abstr., Annual Conference in Ukraine “Statistical Physics 2005: Modern Problems and New Applications”, Lviv, Ukraine, August 28-30, 2005. – Lviv, 2005. – P. 144.
39. Pylyuk I. V. Three-dimensional Ising-like system in an external field: Microscopic calculation of the free energy in the higher non-Gaussian approximation / I. V. Pylyuk // Book of Abstr., VIII Ukrainian-Polish and III East-European Meeting on Ferroelectrics Physics, Lviv, Ukraine, September 4-7, 2006. – Lviv, 2006. – P. 109.
40. Pylyuk I. V. Three-dimensional Ising-like system in an external field: Free energy of the ρ^6 model as function of temperature and field / I. V. Pylyuk, M. P. Kozlovskii // Abstr. of the 4th International Conference “Physics of Liquid Matter: Modern Problems”, Kyiv, Ukraine, May 23-26, 2008. – Kyiv, 2008. – P. 120.

АНОТАЦІЯ

Пилук І. В. Мікроскопічний опис критичної поведінки тривимірних ізингоподібних систем з використанням негаусових розподілів флуктуацій. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика, Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України, Львів, 2009.

В дисертаційній роботі розвинуто мікроскопічну теорію для опису критичної поведінки систем класу універсальності тривимірної моделі Ізинга, що використовує негаусові розподіли флуктуацій параметра порядку (шестирний розподіл або модель ρ^6 , асиметричний четвірний розподіл або асиметричну модель ρ^4) і ґрунтується на методі поетапного обчислення виразу для статистичної суми системи. У вищому негаусовому наближенні (моделі ρ^6) вироблено методику врахування конфлуентних поправок при знаходженні термодинамічних характеристик системи за відсутності зовнішнього поля, досліджено і продемонстровано вплив мікроскопічних параметрів системи на одержані поблизу температури фазового переходу термодинамічні характеристики. На мікроскопічному рівні в рамках методу колективних змінних і моделі ρ^6 розроблено спосіб отримання рівняння стану системи в критичній області та використано запропоноване рівняння для побудови графіків залежностей параметра порядку системи від температури та поля. З

використанням асиметричної моделі ρ^4 та степеневих розкладів за комбінаціями поля і температури реалізовано метод прямого розрахунку явних виразів для вільної енергії та інших термодинамічних характеристик тривимірної ізингоподібної системи в областях так званих слабких та сильних зовнішніх полів. Досліджено поведінку середнього спінового моменту та сприйнятливості ізингової системи в залежності від зміни поля і близькості до критичної температури. Поширюючи методику інтегрування статистичної суми системи за наявності зовнішнього поля на випадок асиметричної моделі ρ^6 , одержано для вказаної моделі рекурентні співвідношення з новими спеціальними функціями. Наслідком узагальнення способу розрахунку вільної енергії системи на випадок моделі ρ^6 з лінійним за полем доданком стало отримання виразу для вільної енергії, який, крім основних, містить члени, що визначають температурну та польову конфлуентні поправки, не вимагає поділу полів на слабкі та сильні і справедливий в околі критичної точки для довільних значень поля.

Ключові слова: тривимірна ізингоподібна система, критична поведінка, фазові переходи, негаусові розподіли, мікроскопічні параметри, термодинамічні характеристики, конфлуентні поправки, зовнішнє поле.

АННОТАЦІЯ

Пылюк И. В. Микроскопическое описание критического поведения трехмерных изингоподобных систем с использованием негауссовых распределений флуктуаций. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика, Институт физики конденсированных систем Национальной академии наук Украины, Львов, 2009.

В диссертационной работе развита микроскопическая теория для описания критического поведения систем класса универсальности трехмерной модели Изинга, которая использует негауссовы распределения флуктуаций параметра порядка (шестерное распределение или модель ρ^6 , асимметрическое четверное распределение или асимметрическую модель ρ^4) и основывается на методе поэтапного вычисления выражения для статистической суммы системы. В высшем негауссовом приближении (модели ρ^6) выработана методика учета конфлуентных поправок при нахождении термодинамических характеристик системы в случае отсутствия

внешнего поля, исследовано и продемонстрировано влияние микроскопических параметров системы на полученные вблизи температуры фазового перехода термодинамические характеристики. На микроскопическом уровне в рамках метода коллективных переменных и модели ρ^6 разработан способ получения уравнения состояния системы в критической области и использовано предложенное уравнение для построения графиков зависимостей параметра порядка системы от температуры и поля. С использованием асимметрической модели ρ^4 и степенных разложений по комбинациям поля и температуры реализован метод прямого расчета явных выражений для свободной энергии и других термодинамических характеристик трехмерной изингоподобной системы в областях так называемых слабых и сильных внешних полей. Исследовано поведение среднего спинового момента и восприимчивости изинговой системы в зависимости от изменения поля и близости к критической температуре. Распространяя методику интегрирования статистической суммы системы при наличии внешнего поля на случай асимметрической модели ρ^6 , получены для указанной модели рекуррентные соотношения с новыми специальными функциями. Следствием обобщения способа расчета свободной энергии системы на случай модели ρ^6 с линейным по отношению к полю слагаемым стало получение выражения для свободной энергии, которое, кроме основных, содержит члены, определяющие температурную и полевою конфлуентные поправки, не требует разделения полей на слабые и сильные и справедливо в окрестности критической точки для произвольных значений поля.

Ключевые слова: трехмерная изингоподобная система, критическое поведение, фазовые переходы, негауссовы распределения, микроскопические параметры, термодинамические характеристики, конфлуентные поправки, внешнее поле.

ABSTRACT

Pylyuk I. V. Microscopic description of the critical behaviour of three-dimensional Ising-like systems using the non-Gaussian fluctuation distributions. – Manuscript.

Thesis submitted for the degree of doctor of sciences in physics and mathematics on specialization 01.04.02 – theoretical physics, Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2009.

The microscopic theory, developed in the thesis for describing the critical behaviour of systems belonging to the three-dimensional (3D) Ising universality class, is based on a method for the step-by-step calculation of the partition function of the system. The non-Gaussian distributions for modes of spin-

density oscillations (the sextic distribution or the ρ^6 model, the asymmetric quartic distribution or the asymmetric ρ^4 model) are used. The methods existing at present make it possible to calculate universal quantities (in particular, critical exponents) to a quite high degree of accuracy. The advantage of the approach under investigation lies in the possibility of obtaining and analysing the expressions for thermodynamic characteristics as functions of microscopic parameters of the initial system (the lattice constant and parameters of the interaction potential) that makes this approach useful in describing the phase transitions in a wide class of 3D systems.

The microscopic approach to calculating and investigating the thermodynamic characteristics of a 3D Ising-like system in zero external field is presented within the framework of the higher non-Gaussian approximation (the ρ^6 model). Mathematical description above and below the critical temperature T_c is performed from the first principles of statistical physics, taking into account the confluent corrections (the corrections to scaling). A calculation technique for correction-to-scaling terms is elaborated in the course of determining the thermodynamic characteristics. As a result, a nonuniversal factor determined by microscopic parameters of the system is singled out in the expressions for leading critical amplitudes and confluent correction amplitudes of the thermodynamic characteristics. A microscopic analogue of the Landau free energy is found by direct calculations. The effect of microscopic parameters on the phase-transition temperature, critical region size, thermodynamic characteristics (in particular, the specific heat, susceptibility) and their amplitudes is studied and demonstrated. The results of calculations and their comparison with other authors' data show that the ρ^6 model provides a more adequate quantitative description of the critical behaviour of a 3D one-component spin system than the ρ^4 model.

On the basis of the ρ^6 model, a method for deriving the equation of state for a 3D Ising-like system on a simple cubic lattice with an exponentially decreasing interaction potential is proposed. This equation describes the order parameter of the system as a function of temperature, external field and microscopic parameters in the critical region. Numerical investigation of this function is performed for the case when the potential parameters correspond to the nearest-neighbour interaction. The temperature and field dependences are represented graphically.

Using the asymmetric ρ^4 model and power series in combinations of the temperature and field, an analytic method for calculating the thermodynamic characteristics of a 3D uniaxial magnet near the critical point is developed in the presence of a homogeneous external field. Explicit expressions for the free energy and other thermodynamic characteristics of the system are given as functions of the temperature and field in the regions of the so-called weak and strong external fields for temperatures above and below T_c . The obtained expressions allowed to investigate the average spin moment and

susceptibility depending on the field variation and the proximity to T_c . It is confirmed that the temperature and field variables play the leading roles in the weak and strong fields, respectively. The average spin moment and susceptibility of the system, calculated for various values of the temperature and field from the present formulas, agree with the results obtained by other authors with the help of Monte Carlo simulations.

Extending a method for the layer-by-layer integration of the partition function of the system in an external field to the case of the asymmetric ρ^6 model, the recurrence relations with new special functions are derived for the coefficients of the effective block Hamiltonians. The special functions appearing in the recurrence relations are approximated by power series in linear deviations of the arguments from their values at the fixed point. Representing the recurrence relations between the coefficients of the even and odd powers of the variable in the form of nonasymptotic series relates to rejecting the traditional use of perturbation theory, which is based on the Gaussian distribution.

The generalized point of exit of the system from the critical regime as a function of both the temperature and field variables is applied to the calculation of the free energy of the system within the framework of the ρ^6 model containing the term linear with respect to field. The expression for the free energy, obtained at temperatures above T_c by separating the contributions from the short- and long-wave spin-density oscillation modes, does not involve series expansions in the scaling variable and is valid near the critical point not only in the regions of the weak and strong external fields but also in the crossover region between these fields. In this region, the temperature and field effects on the system are equivalent, the scaling variable is of the order of unity and power series in the scaling variable are not efficient. The free energy is derived with allowance for the leading terms and terms determining the temperature and field confluent corrections.

Keywords: three-dimensional Ising-like system, critical behaviour, phase transitions, non-Gaussian distributions, microscopic parameters, thermodynamic characteristics, confluent corrections, external field.