

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

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

Павло Романович Козак, Михайло Павлович Козловський, Зоряна Євгенівна Усатенко

РІВНЯННЯ СТАНУ n -ВЕКТОРНОЇ МОДЕЛІ: МЕТОД КОЛЕКТИВНИХ ЗМІННИХ

Роботу отримано 15 червня 2010 р.

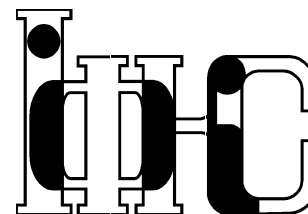
Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділу статистичної теорії конденсованих систем

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-10-06U

П.Р.Козак, М.П.Козловський, З.Є.Усатенко

РІВНЯННЯ СТАНУ n -ВЕКТОРНОЇ МОДЕЛІ:
МЕТОД КОЛЕКТИВНИХ ЗМІННИХ

ЛЬВІВ

УДК: 537.611.2; 538.911; 538.955

PACS: 64.60.ae; 64.60.Bd; 75.30.Kz

Рівняння стану n -векторної моделі: метод колективних змінних

П.Р.Козак, М.П.Козловський, З.Є.Усатенко

Анотація. Досліджено критичну поведінку тривимірної n -векторної моделі у присутності зовнішнього поля. Математичний опис виконано методом колективних змінних (КЗ) в рамках наближення четвірного базисного розподілу без використання підгоночних параметрів. Записано рекурентні співвідношення ренормалізаційної групи (РГ) як функції зовнішнього поля і температури. Отримано аналітичний вираз для вільної енергії системи при температурах $T > T_c$ і різних n . Знайдено рівняння стану n -векторної моделі для загального випадку слабких та сильних полів і записано явну форму відповідної скейлінгової функції для різних значень параметра порядку. Отримані результати якісно узгоджуються з даними симуляцій Монте-Карло.

The equation of state of the n -vector model: collective variable method

P.R.Kozak, M.P.Kozlovskii, Z.E.Usatenko

Abstract. The critical behavior of the three-dimensional n -vector model in the presence of an external field is investigated. Mathematical description is performed with the collective variables (CV) method in the framework of the ρ^4 model approximation at the microscopic level without any adjustable parameters. The recurrence relations of the renormalization group (RG) as functions of the external field and temperature were found. The analytical expression for the free energy of the system for temperatures $T > T_c$ and different n was obtained. The equation of state of the n -vector model for general case of small and large external fields was written. The explicit form of the correspondent scaling function for different values of the order parameter was derived. The obtained results are in qualitative agreement with the data of Monte Carlo simulations.

Подається в Physical Review B

Submitted to Physical Review B

© Інститут фізики конденсованих систем 2010
Institute for Condensed Matter Physics 2010

1. Вступ

Дослідження критичної поведінки реальних 3D магнетиків є важливою задачею фізики конденсованих систем. В даній роботі ми пропонуємо дослідження n -векторної моделі магнетика на тривимірній простій кубічній ґратці в зовнішньому магнітному полі, виконане методом колективних змінних (КЗ). Цей метод був введений в роботах Бома [1], використаний Зубарєвим для систем заряджених частинок [2] і розвинутий для обчислення термодинамічних та структурних характеристик тривимірних систем поблизу точки фазового переходу (ФП) [3]. Дана модель широко відома як класична $O(n)$ векторна модель або, в теоретико-польовому підході, як $O(n)$ інваріантна нелінійна σ -модель. В залежності від компонентності параметра порядку, $O(n)$ векторна модель описує ряд фізичних систем таких як: феромагнетики, антиферомагнетики, критичну точку переходу рідина-газ, бозе-конденсацію, фазові переходи у бінарних сплавах та ін.

Дослідження критичних властивостей класичних $O(n)$ векторних моделей та їхніх часткових випадків проведено з використанням різних методів таких як високо- та низько-температурний розклади, теорії поля, напівмікроскопічної масштабної теорії поля, в рамках методу Монте-Карло. Головна увага при цьому приділялася дослідженню універсальних характеристик системи: критичним показникам та відношенню критичних амплітуд.

Метод КЗ так само як вільсонівський підхід [4] базується на використанні гіпотези масштабної інваріантності та ідеї застосування методу ренормалізаційної групи (РГ) до теорії фазових переходів запропонованої Паташинським, Покровським [5] і Кадановим [6].

Метод РГ був застосований для отримання рівняння стану в роботах Авдеєвої і Мігдал [7] та Брізен, Валас і Вільсон [8], де було отримано вираз для рівняння стану Ізінгівської системи з точністю до ϵ^2 і узагальнено отримані результати на випадок n -векторної моделі [9].

Позитивних результатів досягнуто в напрямку обчислення термодинамічних функцій поблизу критичної точки. У роботах Вегнера [10] було отримано вираз для вільної енергії з врахуванням так званих “несуттєвих” операторів у вільсонівському підході. Рідель і Вегнер [11] запропонували метод масштабних полів для знаходження кросоверних масштабних функцій для вільної енергії та сприйнятливості. Знаходженню масштабних функцій для $T > T_c$ в нульовому магнітному полі поблизу чотирьох вимірів присвячені роботи Фіше-

ра і Агароні [12], Ніколя і Албрігхта [13] та Нельсона [14]. В рамках масивної теорії поля Багнусом і Бервільє [15] були отримані явні вирази для кореляційної довжини, сприйнятливості і теплоємності як функцій температури у неупорядкованій фазі вздовж критичної ізохори для одно-, дво-, трикомпонентних систем. Опис неасимптотичної поведінки здійснювався як кросовер між Вільсон-Фішерівською (біля T_c) і середньопольовою (далеко від T_c) поведінками з використанням трьох підгоночних параметрів. Однак цей кросовер не може реалістично описувати ситуацію в системі, оскільки існують певні фізичні обмеження на використання моделі. Тому в роботах Дома [16, 17] здійснено спробу розрахувати термодинамічні характеристики системи без використання ϵ -розкладу в рамках певної мінімізаційної схеми на основі високо-впорядкованої теорії збурень і пересумування Бореля. Така мінімізація пов'язана з використанням загальних співвідношень між коефіцієнтами теплоємності для апроксимації температурної залежності коефіцієнта $u(t)$ біля четвертого доданку в гамільтоніані Гінзбурга-Ландау. В рамках даної схеми можна отримати неуніверсальну критичну поведінку термодинамічних величин вище та нижче T_c , таких як теплоємність і сприйнятливості як функцій $u(t)$ без додаткових підгоночних параметрів. Однак даний метод не дає можливості дослідити залежність термодинамічних величин від мікроскопічних параметрів взаємодії.

Більших успіхів досягнуто при розрахунку універсальних комбінацій критичних амплітуд. Тут слід відзначити роботи Окабе і Охно [18], Окабе та Идеура [19] з систематичного вивчення відношення критичних амплітуд сприйнятливості методом високо-температурних розкладів, $1/n$ -розкладу і ϵ -розкладу до членів порядку $O(\epsilon^2)$. Брезіном, Ле-Гіо та Цінн-Жюстенон [20] було обчислено універсальні відношення амплітуд для теплоємності, сприйнятливості, кореляційної довжини з використанням Вільсон-Фішерівського ϵ -розкладу.

Для дослідження ФП активно використовується метод Монте-Карло. За допомогою високоточного методу Монте-Карло Ферренбергом та Ландау знайдено критичну температуру і критичні показники для моделі Ізінга [21] та класичної моделі Гайзенберга [22]. В роботах Енгельса отримано відношення критичних амплітуд та рівняння стану для $O(1)$, $O(2)$, $O(4)$ моделей [23–25]. Для $O(3)$ моделі відповідні симуляції проведено в [26].

Ряд нових результатів було отримано при застосуванні до опису фазових переходів методу колективних змінних. Особливістю підходу КЗ є послідовний мікроскопічний підхід і спосіб інтегрування статистичної суми за короткохвильовими модами флуктуацій, який

виконується без застосування теорії збурень. В рамках цього підходу отримано загальні рекурентні співвідношення (РС), які відповідають рівнянням РГ, обчислено критичні показники і відношення критичних амплітуд моделі Ізінга.

Дослідження $O(n)$ моделі дозволяє, в рамках єдиної теорії, отримати результати для критичної поведінки цілого класу систем, таких як модель Ізінга при $n = 1$, XY-модель при $n = 2$, модель Гайзенберга при $n = 3$, модель з двома виродженими ароматами світлових кварків при $n = 4$ та сферична модель при $n \rightarrow \infty$, для якої знайдено точні розв'язки.

Величина n пов'язана з вимірністю параметра порядку системи. Дослідження n -компонентної моделі фазового переходу з допомогою методу КЗ здійснено в [27] з використанням представлення Стратановича-Хаббарда. Метод КЗ використовувався також при вивченні особливостей передперехідної поведінки та опису структурного фазового переходу в системі з багатокомпонентним параметром порядку [28]. Розрахунку термодинамічних характеристик n -компонентної моделі (зокрема теплоємності) при відсутності зовнішнього поля з використанням методу КЗ присвячені роботи [29, 30].

Як відомо, реальні фізичні системи характеризуються наявністю зовнішнього поля. Опис систем з n -компонентним параметром порядку при наявності зовнішнього поля є складною задачею, яка потребує докладного вивчення. Тому, базуючись на дослідженнях проведених в [29, 30] розрахуємо вплив зовнішнього поля на критичну поведінку n -компонентної моделі Стенлі.

2. Модель

Для коректного опису фазових переходів при обчисленні виразу для статистичної суми необхідно використовувати розподіли вищі за гаусові. КЗ дозволяють використовувати розподіли довільного порядку. Запропоноване дослідження базується на використанні четвертого базисного розподілу, який дозволяє якісно добре описати ФП [31]. Використовуємо модель Стенлі. Гамільтоніан цієї моделі, в зовнішньому полі H має вигляд:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{i}} \sum_{\mathbf{j}} \Phi(|\mathbf{i} - \mathbf{j}|) \mathbf{S}_{\mathbf{i}} \mathbf{S}_{\mathbf{j}} - \mathbf{H} \sum_{\mathbf{i}} \mathbf{S}_{\mathbf{i}}, \quad (1)$$

де $\mathbf{S}_{\mathbf{i}} = (S_{\mathbf{i}}^{(1)}, \dots, S_{\mathbf{i}}^{(n)})$ – класичний n -вимірний вектор спіну довжиною m , локалізований в N вузлах d -вимірної кристалічної ґратки з координатами \mathbf{i} , $\Phi(|\mathbf{i} - \mathbf{j}|)$ – потенціал взаємодії між спінами.

Статистична сума є функціональним інтегралом за всіма можливими орієнтаціями вектора спіну з врахуванням того, що довжина цього вектора не перевищує m :

$$Z = \int \prod_{\mathbf{i}} d\mathbf{S}_{\mathbf{i}} \delta(S_{\mathbf{i}} - m) e^{-\beta H}, \quad m > 0. \quad (2)$$

Інтегрування статистичної суми проводимо в просторі колективних змінних. Введемо позначення:

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^c = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{i}} \cos(\mathbf{k}\mathbf{i}) \mathbf{S}_{\mathbf{i}}, \quad (3)$$

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^s = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{i}} \sin(\mathbf{k}\mathbf{i}) \mathbf{S}_{\mathbf{i}}, \quad (4)$$

$$\hat{\rho}_0 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{i}} \mathbf{S}_{\mathbf{i}}, \quad (5)$$

які також є n -компонентними векторами. Колективні змінні $\rho_{\mathbf{k}}$ вводяться шляхом функціонального представлення для операторів флуктуацій спінової густини:

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}} = \int \rho_{\mathbf{k}} J(\rho - \hat{\rho})(d\rho_{\mathbf{k}})^N. \quad (6)$$

В колективних змінних, матимемо:

$$Z = \int \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta \Phi(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + \mathbf{h} \rho_0 \right] J[\rho](d\rho_{\mathbf{k}})^N, \quad (7)$$

де

$$\mathbf{h} = \beta \mathbf{H}.$$

Якобіан переходу від спінових до колективних змінних має вигляд:

$$J[\rho] = \int \prod_{\mathbf{i}} d\mathbf{S}_{\mathbf{i}} \delta(S_{\mathbf{i}} - m) \delta(\rho_0 - \hat{\rho}_0) \prod_{\mathbf{k}}' \delta(\rho_{\mathbf{k}}^c - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^c) \delta(\rho_{\mathbf{k}}^s - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^s). \quad (8)$$

Інтегрування статистичної суми проводиться за загальною схемою [29, 30] яка полягає у розділенні фазового простору на інтервали, в залежності від значень хвильового вектора \mathbf{k} . При цьому потенціал взаємодії між спінами усереднюється на кожному з таких інтервалів. Для Фур'є образу потенціалу взаємодії використовується параболічна апроксимація [32]:

$$\Phi(k) = \begin{cases} \Phi(0)(1 - 2b^2 k^2), & k \in \mathcal{B}' \\ \bar{\Phi} = const, & k \in \mathcal{B}/\mathcal{B}'. \end{cases}$$

Ми використовуватимемо наближення при якому $\bar{\Phi} = 0$. Таке обрізання потенціалу взаємодії не впливає на загальний характер критичної поведінки, але є відчутним при визначенні критичної температури. Для розрахунку статистичної суми n -компонентної моделі при наявності поля використаємо метод запропонований в [33]. Після інтегрування за l шарами отримуємо:

$$Z = 2^{\frac{n}{2}(N_{l+1}-1)} Q_0 Q_1 \dots Q_l Q^{N_{l+1}}(P_l) Z_{l+1}, \quad (9)$$

де Q_l -парціальні статистичні суми l -того рівня.

$$Q_0 = Q^{N'}(u) Q^{N'}(d_0),$$

$$Q^{N'}(u) = J'[0] \exp(u'_0 N'),$$

$$Q_l = Q^{N_l}(P_{l-1}) Q^{N_l}(d_l),$$

$$Q(d_l) = (2\pi)^{\frac{n}{2}} \left(\frac{3}{a_4^{(l)}} \right)^{\frac{n}{4}} U \left(\frac{n-1}{2}, x_l \right) \exp \left(\frac{x_l^2}{4} \right), \quad (10)$$

$$Q(P_l) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \left[s^d \frac{n+2}{3} \frac{a_4^{(l)}}{\varphi(x_l)} \right]^{\frac{n}{4}} U \left(\frac{n-1}{2}, y_l \right) \exp \left(\frac{y_l^2}{4} \right).$$

Функція $\varphi(x_l)$ приведена в додатку. Непроінтегрована частина Z матиме вигляд:

$$Z_{l+1} = \int (d\rho_{\mathbf{k}})^{N_{l+1}} \exp \left\{ \sqrt{N} \mathbf{h} \rho_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} < \mathcal{B}_{l+1}} d^{(l+1)}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{a_4^{(l+1)}}{4! N_{l+1}} \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4 < \mathcal{B}_{l+1}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4} \right\}. \quad (11)$$

Наявність зовнішнього поля приводить до виникнення лінійного доданку в показнику експоненти підінтегрального виразу. Не порушуючи загальності розгляду вважатимемо, що зовнішнє поле напрямлене вздовж однієї з осей (наприклад x) отримуємо:

$$Z_{l+1} = \int (d\rho_{\mathbf{k}})^{N_{l+1}} \exp \left\{ \sqrt{N_{l+1}} a_1^{(l+1)} \rho_0^{(1)} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} < \mathcal{B}_{l+1}} d^{(l+1)}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{a_4^{(l+1)}}{4! N_{l+1}} \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4 < \mathcal{B}_{l+1}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4} \right\}. \quad (12)$$

Для коефіцієнтів біля різних степенів змінних ρ_k маємо наступні рекурентні співвідношення:

$$\begin{aligned} a_1^{(l+1)} &= a_1^{(l)} s^{\frac{d}{2}}, \\ a_2^{(l+1)} &= a_2^{(l)} + d^{(l)}(\mathcal{B}_{l+1}, \mathcal{B}_l)M(x_l), \\ a_4^{(l+1)} &= a_4^{(l)} s^{-d}E(x_l), \end{aligned} \quad (13)$$

де

$$\begin{aligned} M(x_l) &= N(x_l) - 1, \quad N(x_l) = \frac{y_l U_n(y_l)}{x_l U_n(x_l)}, \quad E(x_l) = s^{2d} \frac{\varphi(y_l)}{\varphi(x_l)}, \\ x_l &= \sqrt{\frac{3}{a_4^{(l)}}} d^{(l)}(\mathcal{B}_{l+1}, \mathcal{B}), \quad y_l = s^{\frac{d}{2}} U_n(x_l) \sqrt{\frac{n+2}{\varphi(x_l)}}, \\ N_l &= N' s^{-dl}, \quad N' = N s_0^{-d}. \end{aligned} \quad (14)$$

Для зручності введемо позначення

$$\begin{aligned} d^{(l)}(\mathcal{B}_{l+1}, \mathcal{B}) &= d^{(l)}(0) + q s^{-2l}, \quad q = \beta \Phi(0) \bar{q}, \\ a_1^{(l)} &= s^{-l} \omega_l, \quad d^{(l)}(0) = s^{-2l} r_l, \quad a_4^{(l)} = s^{-4l} u_l. \end{aligned} \quad (15)$$

Тоді рекурентні співвідношення (13) можна записати у вигляді:

$$\begin{aligned} \omega_{l+1} &= s^{\frac{d+2}{2}} \omega_l, \\ r_{l+1} &= s^2 [(r_l + q)N(x_l) - q], \\ u_{l+1} &= s^{4-d} u_l E(x_l). \end{aligned} \quad (16)$$

Початкові значення ω_l, r_l, u_l (при $l = 0$):

$$\omega_0 = s_0^{\frac{d}{2}} h', \quad r_0 = a_2 - \beta \Phi(0), \quad u_0 = a_4. \quad (17)$$

Таким чином ми перейшли у параметричний простір РГ перетворення. Точці фазового переходу відповідає фіксована точка з координатами:

$$\omega^* = 0, \quad r^* = -f_n \beta \Phi(0), \quad u^* = \phi_n [\beta \Phi(0)]^2, \quad (18)$$

де

$$f_n = \bar{q} \frac{s^2 [N(x^*) - 1]}{s^2 N(x^*) - 1}, \quad \phi_n = \bar{q}^2 \frac{3}{x^{*2}} \left[\frac{1 - s^{-2}}{N(x^*) - s^{-2}} \right]^2. \quad (19)$$

Тут x^* є розв'язком рівняння [29]:

$$s^{4+d} \varphi(y^*) = \varphi(x^*). \quad (20)$$

Отже при $\tau = 0$, $h = 0$ і $l \rightarrow \infty$ система перебуватиме у фіксованій точці. Очевидно, що біля критичної точки при $\tau \rightarrow 0$, $h \rightarrow 0$ і великих l в параметричному просторі система буде знаходитися в околі фіксованої точки, таку ситуацію називають критичним режимом. В критичному режимі можемо розкласти рекурентні співвідношення за відхиленням від фіксованої точки

$$\begin{pmatrix} \omega_{l+1} - \omega^* \\ r_{l+1} - r^* \\ u_{l+1} - u^* \end{pmatrix} = \mathcal{R} \begin{pmatrix} \omega_l - \omega^* \\ r_l - r^* \\ u_l - u^* \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Елементи матриці \mathcal{R} у лінійному по $(x_l - x^*)$ наближенні мають вигляд:

$$\begin{aligned} R_{11} &= s^{\frac{d+2}{2}}, & R_{12} &= R_{21} = R_{13} = R_{31}, \\ R_{22} &= \sqrt{3} s^2 \mu_1, & R_{23} &= \frac{s^2}{2\sqrt{u^*}} (\mu_0 - \mu_1 x^*), \\ R_{32} &= \sqrt{3u^*} s^{4-d} \omega_1, & R_{33} &= s^{4-d} \left(\omega_0 - \frac{\omega_1 x^*}{2} \right), \end{aligned} \quad (22)$$

де введено позначення:

$$\begin{aligned} \mu_1 &= \mu_0 \left(a_1 - \frac{q_1}{2} \right), & \mu_0 &= \sqrt{\frac{n+2}{3\varphi(x^*)}} s^{\frac{d}{2}} U_n(y^*), \\ a_1 &= \tilde{P}_1 y^* r_1, & r_1 &= \partial_1 - \frac{q_1}{2}, \\ \tilde{P}_m &= \frac{1}{U_n(y^*)} \left[\frac{d^m U_n(y_l)}{dy_l^m} \right]_{y^*}, & \omega_1 &= \omega_0 (b_1 - q_1), \\ \omega_0 &= s^{2d} \frac{\varphi(y^*)}{\varphi(x^*)}, & b_1 &= \tilde{Q}_1 y^* r_1, \\ \tilde{Q}_m &= \frac{1}{\varphi(y^*)} \left[\frac{d^m \varphi(y_l)}{dy_l^m} \right]_{y^*}, & R_{23}^{(0)} &= R_{23} \sqrt{u^*}, \\ R_{32}^{(0)} &= \frac{R_{32}}{\sqrt{u^*}}. \end{aligned} \quad (23)$$

Дія матриці \mathcal{R} дозволяє отримати коефіцієнти статистичної суми наступного шару. Це означає, що для отримання коефіцієнтів довільного l -го шару нам необхідно подіяти l разів на коефіцієнти нульового

рівня:

$$\begin{pmatrix} \omega_l - \omega^* \\ r_l - r^* \\ u_l - u^* \end{pmatrix} = \mathcal{R}^l \begin{pmatrix} \omega_0 - \omega^* \\ r_0 - r^* \\ u_0 - u^* \end{pmatrix}. \quad (24)$$

Матрицю \mathcal{R}^l простіше отримати, якщо звести \mathcal{R} до діагонального вигляду. Для цього перейдемо до бази з власних векторів матриці \mathcal{R} . Власні значення \mathcal{R} є універсальними величинами:

$$E_1 = R_{11}, \quad E_{2,3} = \frac{1}{2} \left[R_{22} + R_{33} \pm \sqrt{(R_{22} - R_{33})^2 + 4R_{23}R_{32}} \right]. \quad (25)$$

Власні вектори мають вигляд:

$$\omega_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \omega_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ R_1 \end{pmatrix}, \quad \omega_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ R \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (26)$$

Обернені до них вектори записуються у формі:

$$v_1 = (1 \ 0 \ 0), \quad v_2 = \frac{1}{D}(0 \ 1 \ -R), \quad v_3 = \frac{1}{D}(0 \ -R_1 \ 1),$$

$$R = \frac{R_{23}}{E_3 - R_{22}}, \quad R_1 = \frac{E_2 - R_{22}}{R_{23}}. \quad (27)$$

Визначник оберненої матриці переходу

$$D = \frac{E_3 - E_2}{E_3 - R_{22}}. \quad (28)$$

Розклавши значення величин коефіцієнтів (16) за власними векторами, остаточно отримуємо:

$$\begin{aligned} \omega_l &= s_0^{\frac{d}{2}} h E_1^l, \\ r_l &= r^* + c_1 E_2^l + c_2 R E_3^l, \\ u_l &= u^* + c_1 R_1 E_2^l + c_2 E_3^l. \end{aligned} \quad (29)$$

Коефіцієнти c_1, c_2 знаходять з початкових умов при $l = 0$.

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{1}{D} [r_0 - r^* - R(u_0 - u^*)], \\ c_2 &= \frac{1}{D} [(u_0 - u^*) - R_1(r_0 - r^*)]. \end{aligned} \quad (30)$$

Власне значення $E_2 > 1$ і відповідає за відхилення від фіксованої точки, $E_3 < 1$ і набагато менше за E_2 тому ним можемо знехтувати. Таке наближення відповідає нехтуванню конфлюентними поправками. Врахувавши те, що в точці фазового переходу $r_l = r^*$, отримуємо рівняння для температури фазового переходу [29]:

$$[\beta_c \Phi(0)]^2 (1 - f_n - R^* \sqrt{\phi_n}) - a_2 \beta_c \Phi(0) + a_4 R^* / \sqrt{\phi_n} = 0, \quad (31)$$

$$R^* = R \sqrt{u^*}. \quad (32)$$

Це рівняння дозволяє записати розв'язки РС як функції температури і зовнішнього поля:

$$\begin{aligned} \omega_l &= s_0^{\frac{d}{2}} h' E_1^l, \\ r_l &= \beta \Phi(0) \left(-f_n + c_{1T} \tau E_2^l + R^* c_{2T} E_3^l / \sqrt{\phi_n} \right), \\ u_l &= [\beta \Phi(0)]^2 \left(\phi_n + c_{1T} \tau \sqrt{\phi_n} R_1^* E_2^l + c_{2T} E_3^l \right). \end{aligned} \quad (33)$$

Отримані коефіцієнти є показниковою функцією l . Для малих значень l відхилення є незначним, а потім різко зростає. Слід зауважити, що значення r_l (коефіцієнта біля квадратичного члена у виразі для статистичної суми) перевищують u_l (коефіцієнта біля четвертого члена) так, що Z_l можемо проінтегрувати у гаусовому наближенні. Знайдемо номер шару для якого розв'язки РС ще будуть лежати в околі фіксованої точки. Розглянемо спочатку відхилення коефіцієнта r_l . Маючи розв'язки рекурентних співвідношень можемо знайти точку виходу з критичного режиму. При відсутності зовнішнього поля її досліджено в [32]. Позначимо точку виходу з КР через m_τ і зукатимемо її з умови відхилення від нерухомої точки:

$$r_{m_\tau+1} - r^* = -\delta r^*, \quad \delta = \frac{\tau}{|\tau|}. \quad (34)$$

На основі цього отримуємо:

$$m_\tau = -\frac{\ln |\tilde{\tau}|}{\ln E_2} - 1, \quad (35)$$

де

$$\tilde{\tau} = \tau \frac{c_{1k}}{f_n} \quad (36)$$

– перенормована приведена температура. У випадку наявності зовнішнього поля точку виходу з критичного режиму визначають з умови:

$$\omega_{n_h+1} - \omega^* = h_0. \quad (37)$$

Величина h_0 задає умову нормування критичної амплітуди кореляційної довжини (при $T = T_c$) і визначається з умови нормування намагніченості M при $T = T_c$. На основі цього отримуємо [34, 35]:

$$n_h = -\frac{\ln \tilde{h}}{\ln E_1} - 1, \quad \tilde{h} = s_0^{\frac{d}{2}} \frac{h'}{h_0}. \quad (38)$$

При наявності поля і температури точка виходу з критичного режиму буде залежати від співвідношення між τ та h . В [31, 36] було встановлено, що існує певне граничне температурне поле h_c , яке розділяє значення полів на сильні та слабкі. Умова розділення полів на сильні та слабкі записується у виді:

$$m_\tau = n_h. \quad (39)$$

Підставляючи вирази для точок виходу з критичного режиму отримуємо:

$$h_c = |\tilde{\tau}|^{p_0}, \quad (40)$$

де критичний показник p_0 може бути записаний у вигляді:

$$p_0 = \frac{\ln E_1}{\ln E_2} = \frac{\nu}{\mu}, \quad \mu = \frac{2}{d+2}. \quad (41)$$

Критичний показник кореляційної довжини ν при $h = 0$ має вигляд

$$\nu = \frac{\ln s}{\ln E_2}. \quad (42)$$

Критичний показник μ описує залежність кореляційної довжини, при $T = T_c$, від поля. Таким чином можемо переписати (35) у вигляді

$$m_\tau = -\frac{\ln h_c}{\ln E_1} - 1. \quad (43)$$

В загальному випадку необхідно поєднати відхилення від фіксованої точки за полем і за температурою. В [36] для точки виходу з критичного режиму, тобто для такого номера шару $l = n_p$ при якому відхилення від фіксованої точки стає великим, має місце рівняння:

$$\left(s_0^{d/2} h' E_1^{n_p+1}\right)^2 + \left(c_{1T} \tau \beta \Phi(0) E_2^{n_p+1}\right)^2 = r^{*2}. \quad (44)$$

Значення n_p можемо знайти чисельно. Однак чисельний розв'язок не дозволяє аналітично врахувати вплив поля і температури на хід критичної поведінки. Тому в [35] введено вираз для узагальненої точки

виходу, який поєднує поле та температуру і дозволяє в граничних випадках (при нульовому полі чи приведеній температурі) перейти до (38) чи (43):

$$n_p = -\frac{\ln(\tilde{h}^2 + h_c^2)}{2 \ln E_1} - 1. \quad (45)$$

Знаючи момент виходу з критичного режиму, процес інтегрування статистичної суми можна розділити на два етапи: інтегрування за четверним розподілом в області критичного режиму, де значення коефіцієнтів r_l і u_l співмірні та інтегрування за гаусовим розподілом (гаусовий режим) для шарів фазового простору з $l > n_p$. Однак, відхилення від фіксованої точки не проходить так різко, щоб чітко розділити критичну область від гаусового режиму. У зв'язку з цим необхідно врахувати перехідну область в якій значення r_l та u_l вже досить далеко від фіксованої точки, проте, ще не дозволяють інтегрувати статистичну суму в гаусовому розподілі. Тому для розрахунку парціальної статистичної суми перехідної області використовують четверний розподіл. Спростує розрахунки те, що для врахування перехідної області достатньо взяти лише один шар з номером $n_p + 1$, а починаючи з $n_p + 2$ у виразі для парціальної статистичної суми можна використовувати гаусовий розподіл. Таким чином, вираз для статистичної суми матиме вигляд:

$$Z = \underbrace{Q_0 Q_1 \dots Q_{n_p}}_{CR} \underbrace{Q_{n_p+1}}_{TR} \underbrace{2^{\frac{n}{2}(N_{n_p+2}-1)} Q^{N_{n_p+2}} (P_{n_p+1}) Z_{n_p+2}}_{LGR}, \quad (46)$$

де CR позначає критичний режим, TR – перехідну область і LGR – граничний гаусовий режим.

При $l > n_p$ коефіцієнти біля КЗ змінюють свою поведінку, що спростує розрахунок статистичної суми. Візьмемо у (10) $l = n_p + 1$, тоді для розрахунку Z_{n_p+2} необхідно врахувати вище чи нижче від T_c знаходиться система. Коефіцієнти

$$\begin{aligned} r_{n_p+2} &= \beta \Phi(0) f_n(-1 + E_2 H_c), \\ u_{n_p+2} &= [\beta \Phi(0)]^2 \phi_n(1 + \Phi E_2 H_c), \\ \Phi &= f_n / \sqrt{\phi_n} R_1^*, \quad H_c = \tilde{\tau} E_2^{n_p+1} \end{aligned} \quad (47)$$

залежать від температури і поля. Значення u_{n_p+2} завжди додатне, що забезпечує збіжність інтегрування (46), r_{n_p+2} є додатним і перевищує u_{n_p+2} при великих τ ($h_c \gg \tilde{h}$). В цьому випадку статистичну суму можна розрахувати у гаусовому наближенні. Але, при малих τ

($h_c \ll \tilde{h}$), r_{n_p+2} зменшується і стає від'ємним, в такому випадку гаусове наближення не можна використовувати. Цю проблему можна подолати ввівши заміну змінних:

$$\rho_{\mathbf{k}}^\alpha = \eta_{\mathbf{k}}^\alpha + \sqrt{N} \sigma_+^\alpha \delta_{\mathbf{k}}, \quad \vec{\sigma}_+ = (\sigma_+, \dots, 0). \quad (48)$$

Тоді Z_{n_p+2} набуде вигляду:

$$\begin{aligned} Z_{n_p+2} = & e^{NE_0(\sigma_+)} \int (d\eta)^{N_{n_p+2}} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{n_p+2}} d^{(n_p+2)}(k) \eta_{\mathbf{k}} \eta_{-\mathbf{k}} \right. \\ & - \frac{a_4^{(n_p+2)}}{12} s_0^3 s^{3(n_p+2)} \sigma_+^2 \left(\sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{n_p+2}} \eta_{\mathbf{k}} \eta_{-\mathbf{k}} + 2 \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{n_p+2}} \eta_{\mathbf{k}}^{(1)} \eta_{-\mathbf{k}}^{(1)} \right) \\ & - \frac{a_4^{(n_p+2)}}{6\sqrt{N_{n_p+2}}} s_0^{\frac{3}{2}} s^{\frac{3}{2}(n_p+2)} \sigma_+ \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_3 \in \mathcal{B}_{n_p+2}} \eta_{\mathbf{k}_1}^{(1)} \eta_{\mathbf{k}_2} \eta_{\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3} \\ & \left. - \frac{a_4^{(n_p+2)}}{24N_{n_p+2}} \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4 \in \mathcal{B}_{n_p+2}} \eta_{\mathbf{k}_1} \dots \eta_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right], \end{aligned} \quad (49)$$

де

$$E_0(\sigma_+) = h' \sigma_+ - \frac{1}{2} d^{n_p+2}(0) \sigma_+^2 - \frac{a_4}{24} s_0^3 s^{3(n_p+2)} \sigma_+^4. \quad (50)$$

Зміщення σ_+ знаходиться з умови:

$$\frac{\partial E_0(\sigma_+)}{\partial \sigma_+} = 0. \quad (51)$$

Ця умова дозволяє прирівняти нулю коефіцієнт біля першого степеня $\eta_0^{(1)}$ і приводить до кубічного рівняння для σ_+ . Розв'язок цього рівняння шукається у вигляді:

$$\sigma_+ = \sigma_0 s^{(n_p+2)/2}. \quad (52)$$

Остаточно отримуємо рівняння:

$$\sigma_0^3 + p \sigma_0 + q = 0, \quad (53)$$

де введено відповідні позначення для коефіцієнтів:

$$p = \frac{6r_{n_p+2}}{u_{n_p+2} s_0^3}, \quad q = -\frac{6h_0 s^{\frac{5}{2}}}{u_{n_p+2} s_0^{\frac{9}{2}}} \frac{\tilde{h}}{\sqrt{\tilde{h}^2 + h_c^2}}. \quad (54)$$

Розв'язки кубічного рівняння залежать від знаку дискримінанта

$$Q = \left(\frac{p}{3}\right)^3 + \left(\frac{q}{2}\right)^2. \quad (55)$$

При $T > T_c$ значення Q завжди додатне. Отже, рівняння (53) має один дійсний і два комплексних розв'язки. Вибираємо дійсний розв'язок:

$$\begin{aligned} \sigma_0 &= A + B, \\ A &= \left(-\frac{q}{2} + \sqrt{Q}\right)^{\frac{1}{3}}, \quad B = \left(-\frac{q}{2} - \sqrt{Q}\right)^{\frac{1}{3}}. \end{aligned} \quad (56)$$

Інтеграл (49) обчислюємо в гаусовому наближенні. Дане інтегрування завершує процес розрахунку статистичної суми:

$$\begin{aligned} Z_{n_p+2} &= e^{NE_0(\sigma_+)} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{n(N_{n_p+2})} \sqrt{\frac{\pi}{d_1(0)}} \sqrt{\frac{\pi}{d_2(0)}}^{n-1} \times \\ &\times \prod'_{\mathbf{k}>0} \frac{1}{d_1(k)} \left(\frac{1}{d_2(k)}\right)^{(n-1)}, \end{aligned} \quad (57)$$

де введено позначення:

$$\begin{aligned} d_i(k) &= r_R^{(i)} + \beta \Phi(0) b^2 k^2, \\ r_R^{(1)} &= s^{-2(n_p+2)} \frac{\tilde{r}_R^{(1)}}{2}, \\ r_R^{(2)} &= s^{-2(n_p+2)} \frac{\tilde{r}_R^{(2)}}{2}, \\ \tilde{r}_R^{(1)} &= r_{n_p+2} + \frac{1}{2} s_0^3 \sigma_0^2 u_{n_p+2}, \\ \tilde{r}_R^{(2)} &= r_{n_p+2} + \frac{1}{6} s_0^3 \sigma_0^2 u_{n_p+2}. \end{aligned} \quad (58)$$

Отже, розділивши фазовий простір колективних змінних на шари відповідно до значень хвильового вектора, ми виділили два основних стани, які відповідають за критичну поведінку. Критичний режим, який відповідає короткохвильовим флуктуаціям і гаусовий режим, який описує довгохвильові флуктуації. Короткохвильові флуктуації залежать від мікроскопічних параметрів моделі, а довгохвильові – визначають критичну поведінку. На відміну від попередніх підходів, ми приділяємо однакову увагу обом процесам, як “несуттєвим короткохвильовим” так і довгохвильовим флуктуаціям.

3. Вільна енергія

Отримавши вирази для статистичної суми ми можемо перейти до обчислення вільної енергії системи

$$F = -kT \ln Z. \quad (59)$$

Описана вище структура статистичної суми дозволяє представити вільну енергію як суму декількох доданків, які відповідають вкладам різних режимів флуктуацій:

$$F = F_0 + F_{CR} + F_{TR} + F_{LGR}. \quad (60)$$

Тут

$$F_0 = -kTN \ln \left[\frac{(2\pi)^{\frac{n}{2}} m^{n-1}}{\Gamma(n/2)} \right] \quad (61)$$

– вільна енергія невзаємодіючих спінів,

$$F_{CR} = -kT \sum_{l=0}^{n_p} \ln Q_l \quad (62)$$

– енергія, яка відповідає критичному режиму,

$$F_{TR} = -kT Q_{n_p+1} \quad (63)$$

– відповідає перехідній області і, відповідно,

$$F_{LGR} = -kT \ln \left[2^{\frac{n}{2}(N_{n_p+1} - N_{n_p})} Q^{N_{n_p+2}} (P_{n_p+1}) Z_{n_p+2} \right] \quad (64)$$

– внесок від граничного гаусового режиму.

Вираз (62) залежить від точки виходу з критичного режиму. Щоб явно визначити цю залежність необхідно просумувати елементи Q_l . Для цього мусимо виділити в цих елементах явну залежність від індекса l . Q_l є функцією y_l . Ця змінна набагато більша за одиницю при будь-яких значеннях температури, що дозволяє використати розклад функції параболічного циліндра $U(a, x)$ в Q_l у ряд за оберненими степенями y_l . Використавши відповідні розклади, отримуємо:

$$F_{CR} = -kTN' f_{CR}^0 - kT \sum_{l=1}^{n_p} N_l f_l, \quad (65)$$

де

$$\begin{aligned} f_l &= \ln U \left(\frac{n-1}{2}, x_l \right) + \frac{x_l^2}{4} + \frac{n}{2} \ln y_{l-1} + \frac{n}{4y_{l-1}^2} (2n+7), \\ f_{CR}^0 &= u'_0 + \frac{x_0^2}{4} + \frac{3u_2'^2}{4u_4'} + \ln U \left(\frac{n-1}{2}, z' \right) + \\ &+ \ln U \left(\frac{n-1}{2}, x_0 \right) + \frac{n}{4} \left[\ln \left(\frac{3}{u_4'} \right) + \ln \left(\frac{3}{a_4} \right) \right]. \end{aligned} \quad (66)$$

Для виділення в f_l залежності від l , розкладемо цю функцію за степенями $x_l - x^*$ і підставимо в отриманий вираз розв'язки рекурентних співвідношень. В результаті просумований вираз матиме вигляд:

$$F_{CR} = -kTN' \left[\gamma'_{01} + \gamma_1 \tau + \gamma_2 \tau^2 - \gamma' (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{\frac{d}{d+2}} \right], \quad (67)$$

де

$$\begin{aligned} \gamma' &= \bar{\gamma}_1 + \bar{\gamma}_2 H_c + \bar{\gamma}_3 H_c^2, \\ \bar{\gamma}_1 &= \frac{f_{cr}^*}{1 - s^{-3}}, \\ \bar{\gamma}_2 &= \frac{f_n d_1 \delta^2}{1 - s^{-3} E_2}, \\ \bar{\gamma}_3 &= \frac{f_n^2 d_3 \delta^4}{1 - s^{-3} E_2^2}. \end{aligned} \quad (68)$$

Для вільної енергії перехідної області отримуємо:

$$\begin{aligned} F_{TR} &= -kTN' f_{n_p+1} (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{\frac{d}{d+2}}, \\ f_{n_p+1} &= \ln U \left(\frac{n-1}{2}, x_{n_p+1} \right) + \frac{x_{n_p+1}^2}{4} + \\ &+ \frac{n}{2} \ln y_{n_p} + \frac{n}{4y_{n_p}^2} (2n+7). \end{aligned} \quad (69)$$

Для гаусового режиму матимемо:

$$\begin{aligned} \ln Z_{n_p+2} &= NE_0(\sigma_+) + \frac{n}{2} (N_{n_p+2} - 1) \ln \frac{\pi}{2} + \frac{n}{2} \ln \pi - \frac{1}{2} \ln d_1(0) \\ &- \frac{n-1}{2} \ln d_2(0) - \sum'_{k>0} \ln d_1(k) - (n-1) \sum'_{k>0} \ln d_2(k). \end{aligned} \quad (70)$$

Для розрахунку сум за k перейдемо від суми до інтегралу. На основі цього матимемо:

$$F_{LGR} = F_0^{(+)} - kTN_{n_p+2} \left\{ n \left[-\frac{1}{2} \ln 2 + \ln s - \frac{1}{4} \ln 3 + \frac{1}{4} \ln u_{n_p+1} - \frac{1}{2} \ln U(x_{n_p+1}) - \frac{n+2}{8y_{n_p+1}^2} \right] - \frac{1}{2} \left[\ln \tilde{r}_R^{(1)} + f'_{G_1} + (n-1) \left(\ln \tilde{r}_R^{(2)} + f'_{G_2} \right) \right] \right\}, \quad (71)$$

де

$$f'_{G_i} = \ln(a_i^2 + 1) - \frac{2}{3} + \frac{2}{a_i^2} - \frac{2}{a_i^3} \arctan a_i, \\ a_i = \frac{\pi b}{c_0} \sqrt{\frac{\beta \Phi(0)}{\tilde{r}_R^{(i)}}}. \quad (72)$$

Для зручності введемо позначення:

$$F_{LGR} = F_0^{(+)} + F_G, \quad (73)$$

де

$$F_0^{(+)} = -kTNE_0(\sigma_+), \\ F_G = -kTN_{n_p+2}f_G, \\ f_G = n \left[-\frac{1}{2} \ln 2 + \ln s - \frac{1}{4} \ln 3 + \frac{1}{4} \ln u_{n_p+1} - \frac{1}{2} \ln U(x_{n_p+1}) - \frac{n+2}{8y_{n_p+1}^2} \right] - \frac{1}{2} \left[\ln \tilde{r}_R^{(1)} + f'_{G_1} + (n-1) \left(\ln \tilde{r}_R^{(2)} + f'_{G_2} \right) \right]. \quad (74)$$

Остаточно отримуємо залежність вільної енергії від поля і температури:

$$F = -kTN \left\{ \ln \left[\frac{(2\pi)^{\frac{n}{2}} m^{n-1}}{\Gamma(\frac{n}{2})} \right] - \frac{1}{s_0^3} (\gamma'_{01} + \gamma_1 \tau + \gamma_2 \tau^2) - e_0 h' \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{\frac{1}{2s}} - (\gamma_s^+ - e_2) \left(\tilde{h}^2 + h_c^2 \right)^{\frac{d}{d+2}} \right\}, \quad (75)$$

де введено позначення:

$$e_0 = \frac{\sigma_0}{\sqrt{s}}, \\ e_2 = \frac{\sigma_0^2}{2s^3} \left(r_{n_p+2} + \frac{1}{12} u_{n_p+2} s_0^3 \sigma_0^2 \right), \\ \gamma_s^+ = \frac{1}{s_0^3} \left(f_{n_p+1} - \gamma' + \frac{f_G}{s^3} \right). \quad (76)$$

4. Параметр порядку.

З виразу для вільної енергії, прямим диференціюванням за полем, отримуємо вираз для параметра порядку системи:

$$M = -\frac{1}{N} \left(\frac{dF}{dh} \right)_T.$$

Структура вільної енергії дозволяє окремо продиференціювати частини, що відповідають різним флуктуаційним процесам. Результат обчислень зводиться до наступного вигляду:

$$M = \sigma_{00}^+ (\tilde{h}^2 + h_c^2)^{\frac{1}{2s}}. \quad (77)$$

Величина σ_{00}^+ залежить від змінної α , яка є відношенням зовнішнього поля до температури:

$$\sigma_{00}^+ = e_0 \left(1 + \frac{1}{5} \frac{\alpha^2}{1 + \alpha^2} \right) + e_{00} \frac{\alpha}{\sqrt{1 + \alpha^2}} + e_{02}, \\ \alpha = \tilde{h}/h_c. \quad (78)$$

Нижче приводимо вирази для відповідних коефіцієнтів, які залежать від α , компонентності та інших параметрів моделі. Методика розрахунку параметра порядку для моделі Ізінга детально описана в [33]. Оскільки ми розглядаємо n -компонентну модель, то в наших позначеннях з'являється залежність від компонентності моделі:

$$e_0 = \frac{\sigma_0}{\sqrt{s}}, \\ e_{00} = \frac{6s_0^{3/2}}{5h_0} (\gamma_s^+ - e_2), \\ e_{02} = \frac{s_0^{3/2}}{h_0} \left(f_{\gamma_1} + \sigma_0^2 q_s \left[1 + \frac{1}{12} q_l \sigma_0^2 \right] \right),$$

$$\begin{aligned}
f_{\gamma_1} &= \frac{1}{s_0^3} \left(\gamma_p + f_p + \frac{f_{gv}}{s^3} \right), \\
f_{gv} &= -\frac{n}{4} \frac{\Phi H_{cd}}{1 + \Phi H_{cd}} + \left[\frac{n(n+2)}{4} \frac{r_{p+1}}{y_{n_p+1}^2} - \frac{nU'(x_{n_p+1})}{2U(x_{n_p+1})} \right] g_{p+1} - \\
&\quad - \frac{1}{2} \left[\frac{\tilde{g}_R^{(1)}}{\tilde{r}_R^{(1)}} + a_g^{(1)} g_a^{(1)} + (n-1) \left(\frac{\tilde{g}_R^{(2)}}{\tilde{r}_R^{(2)}} + a_g^{(2)} g_a^{(2)} \right) \right], \\
q_s &= \frac{\beta\Phi(0)}{2s^3} H_{cd} E_2 f_n, \quad q_l = \beta\Phi(0)\Phi\phi_n \frac{s_0^3}{f_n}, \\
f_p &= \frac{n}{2} \left[r_p g_p \left(1 - \frac{2n+7}{y_{n_p}^2} \right) - g_{p+1} U_n(x_{n_p+1}) \right], \\
\gamma_p &= H_{cd} (\tilde{\gamma}_2 + 2\tilde{\gamma}_3 H_c),
\end{aligned} \tag{79}$$

вирази для $g_R^{(1)}$ і $a_g^{(i)}$ приведено в додатку.

Таким чином, ми аналітично отримали рівняння стану n -компонентної моделі при наявності зовнішнього поля. Його вигляд дозволяє легко переходити до граничних випадків залежності лише від поля чи лише від температури. У зв'язку з цим таке рівняння називають кросоверним. Величина σ_{00}^+ є скейлінговою функцією кросоверного рівняння стану. Вона залежить від відношення поля до температури α . Рівняння (77) дозволяє отримати графік залежності параметра порядку від поля при $T = T_c$ і порівняти її з результатами симуляцій Монте-Карло аналогічних моделей. Графіки таких залежностей приведено на рис. 1–3 для різних компонентностей моделі та параметрів потенціалу взаємодії. На вставках зображено залежності M від h для таких відношень радіуса дії потенціалу до сталої ґратки при яких, отримані теоретично, залежності близькі до симуляції.

Відомі різні форми рівняння стану. Їхній огляд здійснено в [33], де вказано про доцільність використання певних його видів. Отримане нами рівняння (77) легко привести до форми, яка використовується в Монте-Карло симуляціях [23–25]

$$M = h^{1/\delta} f_G(z), \tag{80}$$

де введено позначення:

$$h = H/H_0, \quad z = \frac{\bar{t}}{h^{\beta\delta}}, \quad \bar{t} = \tau \frac{T_c}{T_0}, \tag{81}$$

а f_G є скейлінговою функцією. H_0 і T_0 – деякі сталі нормування. Така форма є еквівалентною до рівняння стану Вайдома-Гріфітса [37]

$$y = f(x), \tag{82}$$

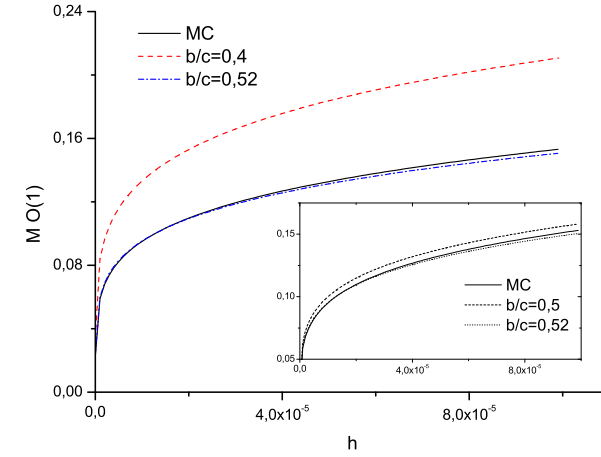


Рис. 1. Залежність параметра порядку від поля при $\tau = 0$ для $n = 1$.

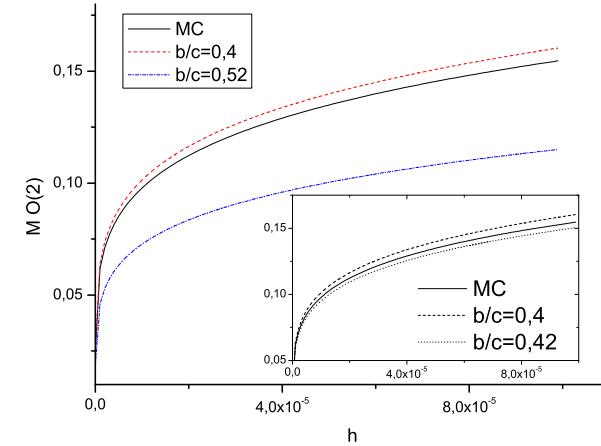


Рис. 2. Залежність параметра порядку від поля при $\tau = 0$ для $n = 2$.

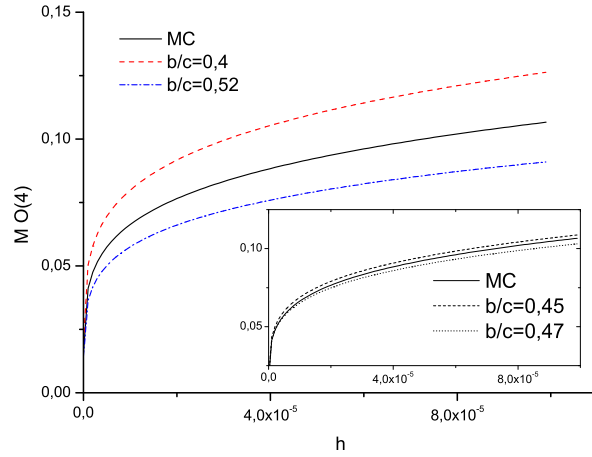


Рис. 3. Залежність параметра порядку від поля при $\tau = 0$ для $n = 4$.

де

$$y \equiv h/M^\delta, \quad x \equiv t/M^{1/\beta}. \quad (83)$$

Скейлінгова функція отримана з (77) має вигляд

$$f_G = \left(s_0^{3/2}/h_o \right)^{\frac{1}{\delta}} \sigma_{00} (1 + \alpha^{-2})^{\frac{1}{2\delta}}. \quad (84)$$

Вона залежить від величини α

$$\alpha = \frac{\tilde{h}}{\tilde{\tau} p_0}. \quad (85)$$

Змінні α і σ пов'язані співвідношенням:

$$\alpha = \frac{s_0^{3/2}}{h_o} \left(\frac{f_n}{c_{1k}} \right)^{p_0} z^{-p_0}, \quad (86)$$

що дає можливість порівняти отриману нами скейлінгову функцію з результатами симуляцій Монте-Карло. На рис. 4–7 зображено графіки скейлінгових функцій для різних компонентностей моделі, де суцільна крива відповідає результатам симуляцій Монте-Карло.

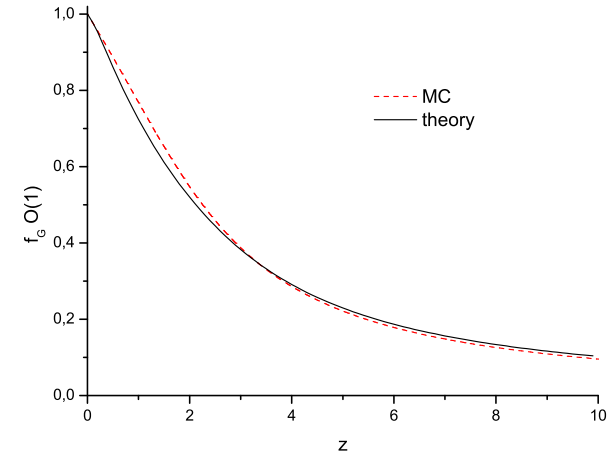


Рис. 4. Скейлінгова функція для $n = 1$ при $b/c = 0.5$, пунктирна крива – результати симуляцій Монте-Карло [23].

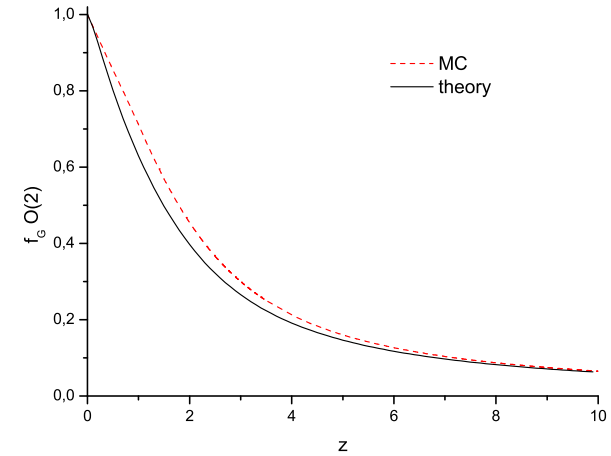


Рис. 5. Скейлінгова функція для $n = 2$ при $b/c = 0.5$, пунктирна крива – результати симуляцій Монте-Карло [24].

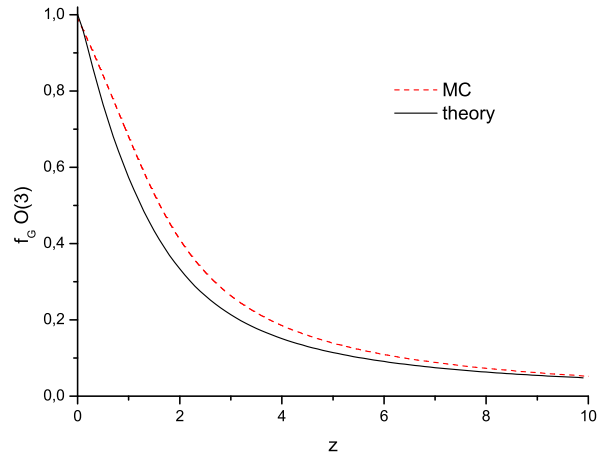


Рис. 6. Скейлінгова функція для $n = 3$ при $b/c = 0.5$, пунктирна крива – результати симуляцій Монте-Карло [26].

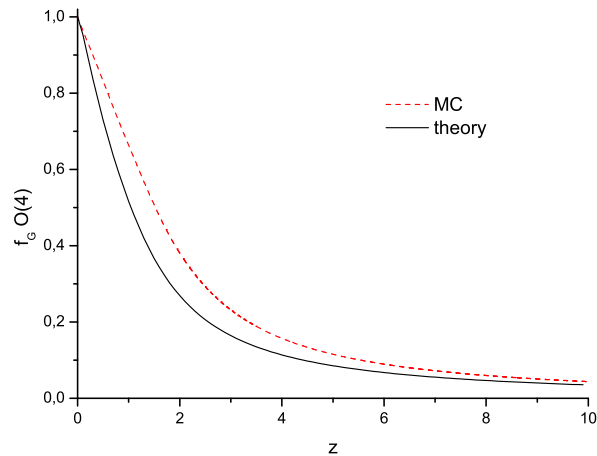


Рис. 7. Скейлінгова функція для $n = 4$ при $b/c = 0.5$, пунктирна крива – результати симуляцій Монте-Карло [25].

5. Висновки

За допомогою методу колективних змінних розраховано статистичну суму n -компонентної моделі при наявності зовнішнього поля для області температур вищих за критичну. Спосіб розрахунку відповідає загальній схемі підходу ренормалізаційної групи. Врахування явного вигляду потенціалу взаємодії дало можливість отримати явну залежність коефіцієнтів лінеаризованих рекурентних співвідношень від температури та мікроскопічних параметрів моделі.

Використання аналітичного виразу для точки виходу з критичного режиму дозволило отримати вирази для рекурентних співвідношень в критичній області які придатні для довільних співвідношень поля і температури. Структура статистичної суми у вигляді добутку парціальних сум, які відповідають за різні флуктуаційні процеси дозволила отримати явний вираз для вільної енергії системи. Прямим диференціюванням за полем отримано вираз для параметра порядку моделі.

Отримано формули, що описують польові залежності параметра порядку n -компонентної моделі з експонентно-спадним потенціалом взаємодії для різних значень відношення b/c (b -радіус дії потенціалу, c -стала простої кубічної ґратки). Встановлено, що для кожного значення компонентності моделі існує певне значення радіуса дії потенціалу b для якого отримана нами залежність близькою до даних Монте-Карло.

Нами розрахований явний вигляд скейлінгової функції (84). Порівняння кривих з даними Монте-Карло показує деяку відмінність поведінки $f_G(z)$ для проміжних значень z . Причиною цього може бути використане наближення, при якому критичний показник кореляційної функції $\eta = 0$ та не приймаються до уваги поправки до скейлінгу. Однак подальше уточнення розрахунків є предметом окремого дослідження.

6. Додаток

Приведемо вирази для величин введених у (10):

$$\begin{aligned}\varphi(x) &= (n+2)U_n^2(x) + 2xU_n(x) - 2, \\ U_n(x) &= \frac{U\left(\frac{n+1}{2}, x\right)}{U\left(\frac{n-1}{2}, x\right)}, \quad x = \sqrt{\frac{3}{a_4}}d(B_1, B'),\end{aligned}$$

$U(a, x)$ – функція параболічного циліндра Вебера.

$$\begin{aligned} Q(d_l) &= (2\pi)^{\frac{n}{2}} \left(\frac{3}{a_4^{(l)}} \right)^{\frac{n}{4}} U \left(\frac{n-1}{2}, x_l \right) \exp \left(\frac{x_l^2}{4} \right), \\ a_4 &= -3s_0^d \frac{n^2}{m^4} (1 - z' U_n(z') - U_o^2), \\ U_0 &= \sqrt{\frac{n+2}{2}} U_n(z'), \quad z' = \sqrt{\frac{3}{u_4'}} u_2'. \end{aligned} \quad (87)$$

Приведені нижче вирази виникають при розрахунку параметра порядку:

$$\begin{aligned} r_{p+m} &= \frac{U'_n(x_{n_p+m})}{U_n(x_{n_p+m})} - \frac{1}{2} \frac{\varphi'(x_{n_p+m})}{\varphi(x_{n_p+m})}, \\ g_{p+m} &= -\frac{\bar{x} E_2^{m-1} H_{cd}}{\sqrt{1 + \Phi E_2^{m-1} H_c}} \left(1 - \frac{H_c \Phi E_2^{m-1}}{2 [1 + \Phi E_2^{m-1} H_c]} \right), \\ \bar{x} &= f_n \sqrt{\frac{3}{\phi_n}}, \\ \tilde{g}_R^{(1)} &= \frac{1}{2} \left[s_0^3 \sigma_0 u_{n_p+2g\sigma} - \beta \Phi(0) E_2 f_n \left(1 + \frac{q_l \sigma_0^2}{2} \right) \right], \\ \tilde{g}_R^{(2)} &= \frac{1}{2} \left[\frac{1}{3} s_0^3 \sigma_0 u_{n_p+2g\sigma} - \beta \Phi(0) E_2 f_n \left(1 + \frac{q_l \sigma_0^2}{6} \right) \right], \\ a_g^{(i)} &= \frac{2a_i}{a_i + 1} - \frac{4}{a_i^3} + 6 \frac{\arctan a_i}{a_i^4} - \frac{2}{a_i^3 (1 + a_i^2)}, \\ g_a^{(i)} &= -\frac{a_i \tilde{g}_R^{(i)}}{\tilde{r}_R^{(i)}}. \end{aligned}$$

Література

1. D. Bohm, *General Theory of Collective Variables [Russian translation]* ("Mir", Moscow, 1964).
2. D. N. Zubarev, RAS USSR ДАН СССР. **95**, 757 (1964).
3. I. R. Yukhnoskii, *Phase Transitions of the Second Order. Collective Variables Methos.* (Singapore. World Scientific., 1987).
4. K. G. Wilson, Phys.Rev.B. **4**, 3174 (1971).
5. A. Z. Patashinskii and V. L. Pokrovskii, JETP ЖЭТФ **50**, 439 (1966).

6. L. P. Kadanoff, Physics. **2**, 263 (1966).
7. G. M. Avdeiva and A. A. Migdal, Lett. JETP Письма в ЖЭТФ. **16**, 253 (1972).
8. E. Bresin, D. J. Wallace, and K. G. Wilson, Phys.Rev.Lett. **29**, 591 (1972).
9. E. Bresin, D. J. Wallace, and K. G. Wilson, Phys.Rev.B. **7**, 232 (1973).
10. F. J. Wegner, Phys.Rev.B. **5**, 4529 (1972).
11. E. K. Riedel and F. J. Wegner, Phys.Rev.B. **9**, 1238 (1973).
12. M. E. Fisher and A. Aharony, Phys.Rev.B. **10**, 2818 (1974).
13. J. F. Nicoll and P. C. Albright, Phys.Rev.B. **31**, 4576 (1984).
14. D. R. Nelson, Phys.Rev.B. **11**, 3504 (1974).
15. C. Bagnuls and C. Bervillier, J.Phys.Lett.(Fr.) **45**, L95 (1984).
16. V. Dohm, Z.Phys.B-Condensed Matter. **60**, 61 (1956).
17. H. J. Krause, R. Schloms, and V. Dohm, Z.Phys.B-Condensed Matter. **79**, 287 (1990).
18. Y. Okabe and K. Ohno, Journ. of the Physical Society of Japan **53**, 3070 (1984).
19. Y. Okabe and K. Ideura, Progress of Theoretical Physics **66**, 1959 (1981).
20. E. Bresin, J. C. L. Guillon, and J. Zinn-Justin, Phys.Lett. **47A**, 285 (1974).
21. A. M. Ferrenberg and D. Landau, Phys.Rev. B **44**, 5081 (1991).
22. K. Chen, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, Phys. Rev. B **48** (1993).
23. J. Engels, L. Fromme, and M. Seniuch, Nucl. Phys. **B655**, 277 (2003).
24. J. Engels, S. Holtmann, T. Mendes, and T. Schulze, Phys.Lett. B **492**, 219 (2000).
25. J. Engels and T. Mendes, Nucl.Phys. **B572**, 289 (2000).
26. M. Campostrini, M. Hasenbusch, A. Pelissetto, P. Rossi, and E. Vicari, Phys.Rev. **B65**, 40 (2002).
27. I. A. Vakarchuk, Y. K. Rudavskii, and Y. V. Holovach, ФМС **4**, 44 (1983).
28. I. R. Yukhnoskii, *Selected works. Physics* (Lviv, 2005).
29. Z. E. Usatenko and M. P. Kozlovskii, Phys. Rev. B **62**, 3599 (2000).
30. Z. E. Usatenko and M. P. Kozlovskii, Materials Science and Engineering A **227**, 732 (1997).
31. M. P. Kozlovskii, I. V. Pylyuk, and O. O. Prytula, Condens. Matter Phys. **7**, 361 (2004).
32. I. R. Yukhnoskii., M. P. Kozlovskii, and I. V. Pylyuk, *Microscopic*

theory of phase transitions in the three-dimensional systems (Lviv, Eurosvit, 2001).

33. M. P. Kozlovskii, Ukrainian Journal of Physics/Reviews **5**, 61 (2009).
 34. M. P. Kozlovskii, Phase Transitions **80**, 3 (2007).
 35. M. P. Kozlovskii, Cond. Matt. Phys. **12**, 151 (2009).
 36. M. P. Kozlovskii, I. V. Pylyuk, and O. O. Prytula, Nucl. Phys. B **753**, 242 (2006).
 37. R. B. Griffiths, Phys. Rev. **158**, 176 (1967).
-

CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

AIMS AND SCOPE: The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

ABSTRACTED/INDEXED IN:

- Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences
- ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alerting Services
- INSPEC
- Elsevier Bibliographic Databases (EMBASE, EMNursing, Compendex, GEOBASE, Scopus)
- "Referativnyi Zhurnal"
- "Dzherelo"

EDITOR IN CHIEF: Ihor Yukhnovskii

EDITORIAL BOARD: T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk, *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Freiburg*; R. Folk, *Linz*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch, *Lviv*; M. Holovko, *Lviv*; O. Ivankiv, *Lviv*; W. Janke, *Leipzig*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; H. Krienke, *Regensburg*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod, *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; N. Plakida, *Dubna*; G. Röpke, *Rostock*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; M. Vavruk, *Lviv*; A. Zagorodny, *Kyiv*

CONTACT INFORMATION:

Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +38(032)2760908; Fax: +38(032)2761978
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>