

ІНСТИТУТ  
ФІЗИКИ  
КОНДЕНСОВАНИХ  
СИСТЕМ

ICMP-19-01U

I.V. Pylyuk, M.P. Kozlovskii, O.A. Dobush

РІВНЯННЯ СТАНУ КОМІРКОВОЇ МОДЕЛІ ПЛИНУ В  
ОБЛАСТІ НИЖЧЕ ВІД КРИТИЧНОЇ ТЕМПЕРАТУРИ

УДК: 538.9; 536.71; 536.4

PACS: 05.70.Ce, 64.60.F-, 64.70.F-

**Рівняння стану коміркової моделі плин у області нижче від критичної температури**

I.V. Pylyuk, M.P. Kozlovskii, O.A. Dobush

**Анотація.** Техніку, розроблену раніше для побудови рівняння стану коміркової моделі плин у високотемпературній області ( $T > T_c$ ), узагальнено на випадок  $T < T_c$ . Велика статистична сума, термодинамічний потенціал та рівняння стану моделі розраховані в методі колективних змінних з врахуванням негаусового (четвірного) розподілу флуктуацій параметра порядку. Приведено і аналітично розв'язано нелінійне рівняння, яке описує зв'язок між густиною та хімічним потенціалом. Графіки залежності густини від хімічного потенціалу отримано для різних значень відносної температури.

**The equation of state of a cell fluid model in the region below the critical temperature**

I.V. Pylyuk, M.P. Kozlovskii, O.A. Dobush

**Abstract.** A previously elaborated technique for constructing the equation of state of a cell fluid model in the high-temperature region ( $T > T_c$ ) is generalized to the case of  $T < T_c$ . The grand partition function, thermodynamic potential and equation of state of the model are calculated within the framework of the collective variables method, taking into account the non-Gaussian (quartic) distribution of order parameter fluctuations. A nonlinear equation which links the density and the chemical potential is presented and solved analytically. Graphs of the dependence of the density on the chemical potential are obtained for various values of the relative temperature.

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/>)

Ігор Васильович Пилук  
Михайло Павлович Козловський  
Оксана Андріївна Добуш

Рівняння стану коміркової моделі плинину в області нижче  
від критичної температури

Роботу отримано 11 грудня 2018 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом статистичної теорії  
конденсованих систем

Виготовлено при ІФКС НАН України  
© Усі права застережені

## 1. Вступ

Протягом більш як століття увагу науковців привертає поведінка багаточастинкових систем в рідинній і газовій фазах. Задача теоретичного опису властивостей плиннів на рівні мікроскопічних взаємодій між частинками не втратила актуальності і донині [1].

Дослідження поведінки плиннів часто проводиться із застосуванням поняття системи відліку. Роль останньої зазвичай відіграє система твердих кульок (див., наприклад, [2–5]). Новизна підходу, розвинутого в даній праці, полягає у використанні виключно мікроскопічних характеристик моделі (параметрів потенціалу взаємодії) для отримання макроскопічних величин (тиску та інших термодинамічних величин) без залучення системи твердих кульок. Розглядається область температур, нижчих від критичної температури  $T_c$ .

Теоретичний опис простого плинину здійснюється в рамках коміркової моделі. Весь об'єм  $V$  системи  $N$  взаємодіючих частинок умовно ділиться на  $N_v$  комірок об'ємом  $v = V/N_v$  кожна, причому  $v = c^3$ , де  $c$  – лінійний розмір комірки. Зауважимо, що на відміну від моделі ґраткового газу (де вважається, що комірка може містити або не містити лише одну частинку) в даному підході в комірці може перебувати більше однієї частинки. Замість відстані між частинками вводиться відстань між центрами комірок. Потенціал взаємодії комірок має вигляд потенціалу Морзе. Параметри потенціалу взаємодії, які приведені в [6] і необхідні для кількісних оцінок, відповідають даним для натрію із праці [7]. Остання присвячена вивченню кривих рівноваги пара–рідина для металів з використанням Монте-Карло симуляцій та потенціалу Морзе.

Дані дослідження доповнюють результати праці [6], в якій розвинуто спосіб розрахунку рівняння стану для випадку  $T > T_c$ . Вирази для згаданих і не приведених тут величин (зокрема, для безрозмірних параметрів критичної точки) можна знайти в [6].

Стисло опишемо структуру праці. Розділ 2, який слідує після вступу (розділ 1), містить основні вихідні співвідношення, справедливі для температур, нижчих від  $T_c$ . Тут приведено вираз для великої статистичної суми моделі, який необхідно розрахувати для отримання термодинамічного потенціалу, а також формули для величин, що входять в цей вираз. Схема розрахунку термодинамічного потенціалу подана у розділі 3. Основна ідея такого розрахунку в методі колективних змінних полягає в окремому врахуванні вкладів від короткохвильових та довгохвильових флуктуацій параметра порядку. У цьому ж розділі 3 приведено вираз для короткохвильової частини

термодинамічного потенціалу (вклад від критичного режиму флуктуацій). Процедуру розрахунку довгохвильової частини термодинамічного потенціалу (вклад від інверсного гаусового режиму флуктуацій) розвинуто у розділі 4. Використовуючи одержані результати, записано повний вираз для термодинамічного потенціалу. Викладений у розділі 5 спосіб отримання рівняння стану коміркової моделі пилу при  $T < T_c$  з врахуванням негаусових флуктуацій – основне досягнення запропонованого підходу. Короткі підсумки виконаних досліджень містяться у розділі 6.

## 2. Основні співвідношення при температурах, нижчих від критичної

Велика статистична сума пилу нижче від критичної температури  $T_c$  з використанням коміркової моделі в рамках найпростішого негаусового (четвірного) розподілу флуктуацій може бути записана у вигляді

$$\Xi = G_\mu (Q(r_0))^{N_v} \left( \prod_{n=1}^{n'_p} Q_n \right) \Xi_{IGR}. \quad (2.1)$$

Порівнюючи вираз (2.1) із аналогічним виразом  $T > T_c$  [6], знаходимо їхню подібність. Відмінність полягає в заміні величини  $n_p$  на  $n'_p$  та множника  $\Xi_{LGR}$  на  $\Xi_{IGR}$ . Тут, як і при  $T > T_c$ , маємо

$$\begin{aligned} G_\mu &= g_W(\beta W(0))^{N_v/2} e^{N_v(E_\mu - a_0)}, \\ g_W &= \prod_{\vec{k} \in \mathcal{B}} (2\pi\beta W(k))^{-1/2}, \\ E_\mu &= -\frac{\beta W(0)}{2}(M + \tilde{a}_1)^2 + M a_{34} + \frac{1}{2}d(0)a_{34}^2 - \frac{a_4}{24}a_{34}^4, \\ a_{34} &= -a_3/a_4, \\ M &= \mu/W(0) - \tilde{a}_1, \quad \tilde{a}_1 = a_1 + d(0)a_{34} + \frac{a_4}{6}a_{34}^3, \\ d(0) &= (1 - \beta W(0)\tilde{a}_2)/\beta W(0), \quad \tilde{a}_2 = \frac{a_4}{2}a_{34}^2 - a_2, \end{aligned} \quad (2.2)$$

де  $N_v$  – загальне число комірок з об'ємом  $v = c^3$  ( $c$  – лінійний розмір елементарної кубічної комірки),  $\beta = 1/(kT_c)$  – обернена температура,  $W(k)$  – фур'є-образ ефективного потенціалу взаємодії,  $\mu$  – хімічний потенціал. Потенціал взаємодії має вигляд потенціалу Морзе. Як по-

казують розрахунки, у випадку Na (натрію) отримуємо

$$\begin{aligned} a_0 &= -0.3350, & a_1 &= -0.2862, & a_2 &= -0.2073, \\ a_3 &= -0.0938, & a_4 &= 0.0376, & W(0) &= 17.7687. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Величина  $Q(r_0)$  відповідає вкладу до статистичної суми від великих значень хвильового вектора [6], а  $Q_n$  – парціальна статистична сума  $n$ -го шару фазового простору колективних змінних [8]. Добуток в (2.1) ведеться до величини  $n'_p$ , яка визначає точку виходу системи з критичного режиму флуктуацій параметра порядку. При  $T < T_c$   $n'_p$  знаходиться згідно з формулою [9]

$$n'_p = -\frac{\ln(\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)}{2 \ln E_1} - 1. \quad (2.4)$$

Тут

$$\tilde{h} = M(\beta W(0))^{1/2} \quad (2.5)$$

відіграє роль перенормованого зовнішнього поля і є функцією хімічного потенціалу. Температурне поле

$$h_{cm} = \tilde{\tau}_1^{p_0} \quad (2.6)$$

характеризується перенормованою відносною температурою

$$\tilde{\tau}_1 = -\tau \frac{c_{11}}{q} E_2^{n_0}$$

та показником

$$p_0 = \frac{\ln E_1}{\ln E_2},$$

де  $E_l$  – власні значення матриці лінійного перетворення ренормгрупи. Величини  $c_{11}$  та  $q$  приведені в [6], а  $\tau = (T - T_c)/T_c$ . Зауважимо, що у випадку  $T > T_c$  в [6] вводилось температурне поле  $h_c = \tilde{\tau}^{p_0}$ , де  $\tilde{\tau} = \tau c_{11}/q$ . Змінна  $\tilde{\tau}$  відрізняється від  $\tilde{\tau}_1$  відсутністю множника  $E_2^{n_0}$ . Величина  $n_0 = n_p - n'_p$  (при  $\tilde{h} = 0$ ) є різницею між точками виходу із критичного режиму флуктуацій при  $T > T_c(n_p)$  та  $T < T_c(n'_p)$ .

У виразі (2.1) величина

$$\Xi_{IGR} = 2^{(N_{n'_p+1}-1)/2} [Q(P_{n'_p})]^{N_{n'_p+1}} \Xi_{n'_p+1} \quad (2.7)$$

визначає вклад до великої статистичної суми від довгохвильових флуктуацій параметра порядку. Тут  $N_{n'_p+1} = N_v s^{-3(n'_p+1)}$ ,  $s$  – параметр поділу фазового простору колективних змінних  $\rho_{\vec{k}}$  на шари.

Як і при  $T > T_c$ , розрахунки будемо проводити для  $s = s^* = 3.5977$ . Величина  $Q(P_n)$  означена в [6, 10], а  $\Xi_{n'_p+1}$  задовольняє вираз

$$\begin{aligned} \Xi_{n'_p+1} = & \int (d\rho)^{N_{n'_p+1}} \exp \left[ a_1^{(n'_p+1)} \sqrt{N_{n'_p+1} \rho_0} - \right. \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_{n'_p+1}} g_{n'_p+1}(k) \rho_{\vec{k}} \bar{\rho}_{-\vec{k}} - \\ & \left. - \frac{a_4^{(n'_p+1)}}{4!} N_{n'_p+1}^{-1} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_4 \\ \vec{k}_i \in \mathcal{B}_{n'_p+1}}} \rho_{\vec{k}_1} \dots \rho_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_4} \right]. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Для коефіцієнтів  $a_1^{(n)}$ ,  $g_n(0)$  та  $a_4^{(n)}$  мають місце рекурентні співвідношення, явний вигляд яких поданий в [6]. Там же приведена й величина  $b$ , яка входить у рівність  $g_{n'_p+1}(k) = g_{n'_p+1}(0) + 2bk^2$  і визначає квадратичний за хвильовим вектором доданок.

Відмітимо, що вищезгадану величину  $n_0$  для тривимірної ізінгоподібної системи можна знайти з порівняння відношення критичних амплітуд кореляційної довжини при  $T > T_c$  і  $T < T_c$  із даними числового розрахунку [11]. Для  $s = s^*$  отримуємо  $n_0 = 0.50$  (див. [12]).

### 3. Схема розрахунку термодинамічного потенціалу моделі в області температур $T < T_c$

Як і при  $T > T_c$  [6], термодинамічний потенціал  $\Omega = -kT \ln \Xi$  обчислюватимемо, розділяючи вклади від коротко- і довгохвильових флуктуацій параметра порядку ( $\Omega_{CR}^{(-)}$  і  $\Omega_{IGR}$ , відповідно). При  $T < T_c$  маємо

$$\Omega = \Omega_\mu + \Omega_r + \Omega_{CR}^{(-)} + \Omega_{IGR}. \quad (3.1)$$

Кожний із доданків – вклад певного множника виразу (2.1). Складові  $\Omega_\mu$  і  $\Omega_r$  задовольняють такі ж вирази, що й при  $T > T_c$ .

Доданок  $\Omega_{CR}^{(-)}$  із (3.1) відповідає вкладу до термодинамічного потенціалу від ділянки критичного режиму флуктуацій. Згідно з (2.1), для нього знаходимо

$$\Omega_{CR}^{(-)} = -kT \sum_{n=1}^{n'_p} N_n f_n, \quad (3.2)$$

де  $N_n = N_v s^{-3n}$ , а для функції  $f_n(x_n, y_{n-1})$  отримуємо

$$f_n = \frac{1}{2} \ln y_{n-1} + \frac{9}{4} y_{n-1}^{-2} + \frac{x_n^2}{4} + \ln U(0, x_n). \quad (3.3)$$

Тут  $U(0, x_n)$  – функція параболічного циліндра [13]. Вирази для аргументів  $x_n$  та  $y_{n-1}$  приведені в [14]. Зазначимо, що з врахуванням (2.4) приходимо до рівностей

$$\begin{aligned} s^{-(n'_p+1)} &= \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{\frac{1}{d+2}}, \quad E_1^{n'_p+1} = \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{-\frac{1}{2}}, \\ \tilde{\tau} E_2^{n'_p+1} &= -H_{cm}, \quad H_{cm} = -\tilde{\tau} \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{-\frac{1}{2p_0}}, \\ E_3^{n'_p+1} &= H_{3m}, \quad H_{3m} = \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{\frac{\Delta}{2p_0}}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

де  $p_0$  можна представити як  $p_0 = (d+2)\nu/2$  ( $d = 3$  – вимірність простору,  $\nu = \ln s^* / \ln E_2$  – критичний показник кореляційної довжини),  $\Delta = -\ln E_3 / \ln E_2$  – показник поправки до скейлінгу. Значення параметра ренормгрупи  $s^* = 3.5977$  відповідає випадку, коли величина  $x_n$  у фіксованій точці обертається в нуль ( $x^* = 0$ ) [12]. Для моделі  $\rho^4$  маємо  $\nu = 0.605$ ,  $p_0 = 1.512$ ,  $\Delta = 0.465$ . В результаті розрахунку  $\Omega_{CR}^{(-)}$  (3.2) одержуємо

$$\Omega_{CR}^{(-)} = -kTN_v (\gamma_{01} + \gamma_{02}\tau + \gamma_{03}\tau^2) + \Omega_{CR}^{(s)'}. \quad (3.5)$$

Формули для коефіцієнтів  $\gamma_{0l}$  аналітичної частини цього виразу співпадають із відповідними величинами при  $T > T_c$  (див. [6]). Сингулярна частина має вигляд

$$\Omega_{CR}^{(s)'} = kTN_v \bar{\gamma}^{(-)} s^{-3(n'_p+1)}. \quad (3.6)$$

Тут коефіцієнт

$$\bar{\gamma}^{(-)} = \bar{\gamma}_1 - \bar{\gamma}_2 H_{cm} + \bar{\gamma}_3 H_{cm}^2 \quad (3.7)$$

є функцією  $H_{cm}$ . Постійні величини  $\bar{\gamma}_l$  приведені в [6, 12].

Доданок  $\Omega_{IGR}$  із (3.1) задається формулою

$$\Omega_{IGR} = -kT \ln \Xi_{IGR}, \quad (3.8)$$

де вираз для  $\Xi_{IGR}$  приведений в (2.7). Зауважимо, що  $\Xi_{n'_p+1}$  із (2.8) можна записати у вигляді добутку парціальних статистичних сум окремих шарів побідно до того, як це зроблено для вкладу від ділянки критичного режиму флуктуацій. Тоді для вкладу до термодинамічного потенціалу від інверсного гаусового режиму (подібно

до вкладу до термодинамічного потенціалу від граничного гаусового режиму при  $T > T_c$ ) маємо

$$\Omega_{IGR} = \Omega_{TR}^{(-)} + \Omega'' . \quad (3.9)$$

Тут

$$\Omega_{TR}^{(-)} = -kTN_v f_{n'_p+1} s^{-3(n'_p+1)} . \quad (3.10)$$

Коефіцієнт  $f_{n'_p+1}$  відповідає  $f_n$  із (3.3) при  $n = n'_p + 1$ . Він є функцією  $x_{n'_p+1}$  та величини  $y_{n'_p}$ , яка в свою чергу виражається через  $x_{n'_p}$ . Вираз

$$x_{n'_p+m} = -\bar{x} E_2^{m-1} H_{cm} (1 - \Phi_q E_2^{m-1} H_{cm})^{-1/2} \quad (3.11)$$

можна знайти на основі розв'язків рекурентних співвідношень з врахуванням (3.4). Позначення для  $\bar{x}$  та  $\Phi_q$  такі ж, як і у випадку  $T > T_c$  (див. [6]). Зазначимо, що при розрахунку (3.11) доданками, пропорційними до  $H_{3m} E_3^{m-1}$ , знехтувано, оскільки поблизу точки фазового переходу величина  $H_{3m}$  із (3.4) є малою, а  $E_3 < 1$ .

При розрахунку  $\Omega_{TR}^{(-)}$  (3.10) ми виділяли перехідну область від негаусових до гаусових флуктуацій параметра порядку, яка відповідає одному шару фазового простору колективних змінних. Як впливає із результатів [10], виділення ділянки перехідної області при  $T < T_c$  є необов'язковим. Вводячи цю область для температур  $T < T_c$ , ми слідували викладеній в [6] схемі розрахунку термодинамічного потенціалу при  $T > T_c$ . Це ні в якій мірі не знижує загальності розгляду, однак, дозволяє уніфікувати схему розрахунку.

#### 4. Формування інверсного гаусового розподілу флуктуацій

Тепер можна розрахувати вклад до термодинамічного потенціалу  $\Omega'' = -kT \ln \Xi''$  із (3.9). Для цього потрібно обчислити відповідну йому складову великої статистичної суми

$$\Xi'' = 2^{(N_{n'_p+2}-1)/2} [Q(P_{n'_p+1})]^{N_{n'_p+2}} \Xi_{n'_p+2} , \quad (4.1)$$

де

$$\Xi_{n'_p+2} = \int (d\rho)^{N_{n'_p+2}} \exp \left[ \tilde{h} \sqrt{N_v} \rho_0 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_{n'_p+2}} g_{n_p+2}(k) \rho_{\vec{k}} \rho_{-\vec{k}} - \frac{a_4^{(n'_p+2)}}{4!} N_{n'_p+2}^{-1} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_4 \\ \vec{k}_i \in \mathcal{B}_{n'_p+2}}} \rho_{\vec{k}_1} \dots \rho_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_4} \right] . \quad (4.2)$$

Для коефіцієнтів  $g_{n'_p+2}(k)$  та  $a_4^{(n'_p+2)}$  отримуємо

$$\begin{aligned} g_{n'_p+2}(k) &= g_{n'_p+2}(0) + 2bk^2, \\ g_{n'_p+2}(0) &= s^{-2(n'_p+2)} r_{n'_p+2}, \\ a_4^{(n'_p+2)} &= s^{-4(n'_p+2)} u_{n'_p+2}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

а  $r_{n'_p+2}$  та  $u_{n'_p+2}$  визначаються співвідношеннями

$$\begin{aligned} r_{n'_p+2} &= q(-1 - E_2 H_{cm}), \\ u_{n'_p+2} &= u^*(1 - \Phi_q E_2 H_{cm}). \end{aligned} \quad (4.4)$$

Тут  $u^* = [q(1 - s^{-2})\sqrt{3U}(x^*)[1 + 3/(2y^*)^2]]^2$  – величина  $u_n = s^{4n} a_4^{(n)}$  у фіксованій точці (див. [6]).

Коефіцієнт  $u_{n'_p+2}$  залишається додатнім для довільних значень температури та хімічного потенціалу, завдяки чому інтеграл в (4.2) залишається скінченим. Поведінку коефіцієнта  $r_{n'_p+2}$ , як і аналогічної величини  $r_{n_p+2}$  при  $T > T_c$ , в залежності від зміни  $\tau$  та  $M$  демонструє рис. 1. Як бачимо із рис. 1b, коефіцієнт  $r_{n_p+2}$  з ростом величини хімічного потенціалу  $|M|$  зменшується і при малих значеннях відносної температури  $\tau$  стає від'ємним. Коефіцієнт  $r_{n'_p+2}$  для всіх температур  $T < T_c$  приймає від'ємні значення (див. рис. 1a). Внаслідок цього використання гаусового наближення при розрахунку (4.2) не має сенсу. Ситуацію можна змінити виконанням у виразі (4.2) заміни змінних

$$\rho_{\vec{k}} = \eta_{\vec{k}} + \sqrt{N_v} \sigma_- \delta_{\vec{k}}, \quad (4.5)$$

де  $\sigma_-$  – деяка постійна величина. В результаті заміни (4.5) вираз (4.2) матиме вигляд

$$\begin{aligned} \Xi_{n'_p+2} &= e^{N_v E_0(\sigma_-)} \int (d\eta)^{N_{n'_p+2}} \exp \left[ A'_0 \sqrt{N_v} \eta_0 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_{n'_p+2}} \bar{g}'(k) \eta_{\vec{k}} \eta_{-\vec{k}} - \frac{\bar{b}'}{6} N_{n'_p+2}^{-1/2} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_3 \\ \vec{k}_i \in \mathcal{B}_{n'_p+2}}} \eta_{\vec{k}_1} \dots \eta_{\vec{k}_3} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_3} - \frac{\bar{a}'_4}{24} N_{n'_p+2}^{-1} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_4 \\ \vec{k}_i \in \mathcal{B}_{n'_p+2}}} \eta_{\vec{k}_1} \dots \eta_{\vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \dots + \vec{k}_4} \right] . \end{aligned} \quad (4.6)$$

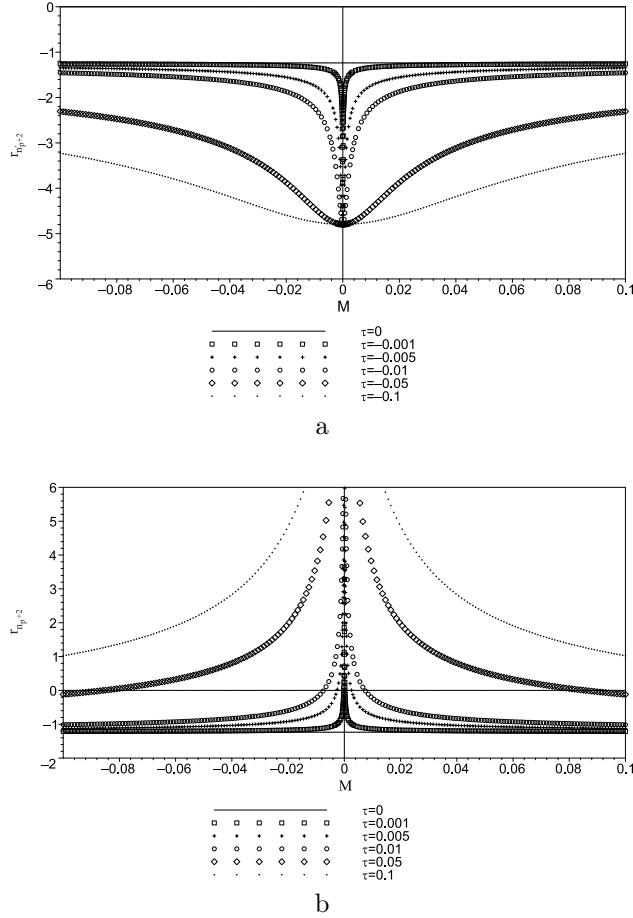


Рис. 1. Залежність величини  $r_{n'_p+2}$  у випадку  $T < T_c$  (рисунок а) та аналогічної величини  $r_{n_p+2}$  при  $T > T_c$  (рисунок б) від хімічного потенціалу  $M$  для різних значень відносної температури  $\tau$ .

Тут

$$E_0(\sigma_-) = \tilde{h}\sigma_- - \frac{r_{n'_p+2}}{2}s^{-2(n'_p+2)}\sigma_-^2 - \frac{u_{n'_p+2}}{24}s^{-(n'_p+2)}\sigma_-^4, \quad (4.7)$$

а для коефіцієнтів  $A'_0$ ,  $\bar{g}'(k)$ ,  $\bar{b}'$  та  $\bar{a}'_4$  одержуємо такі вирази:

$$\begin{aligned} A'_0 &= \tilde{h} - r_{n'_p+2}s^{-2(n'_p+2)}\sigma_- - \frac{u_{n'_p+2}}{6}s^{-(n'_p+2)}\sigma_-^3, \\ \bar{g}'(k) &= \bar{g}'(0) + 2bk^2, \\ \bar{g}'(0) &= r_{n'_p+2}s^{-2(n'_p+2)} + \frac{u_{n'_p+2}}{2}s^{-(n'_p+2)}\sigma_-^2, \\ \bar{b}' &= u_{n'_p+2}s^{-5(n'_p+2)/2}\sigma_-, \quad \bar{a}'_4 = u_{n'_p+2}s^{-4(n'_p+2)}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Для знаходження величини зміщення  $\sigma_-$ , подібно до випадку  $T > T_c$ , використаємо умову

$$\frac{\partial E_0(\sigma_-)}{\partial \sigma_-} = 0. \quad (4.9)$$

З врахуванням (4.7) та виразу для  $A'_0$  із (4.8), отримуємо рівняння

$$A'_0 = 0. \quad (4.10)$$

Його розв'язок будемо шукати у вигляді

$$\sigma_- = \sigma'_0 s^{-(n'_p+2)/2}. \quad (4.11)$$

Для величини  $\sigma'_0$  матимемо кубічне рівняння

$$(\sigma'_0)^3 + p'\sigma'_0 + q' = 0 \quad (4.12)$$

з коефіцієнтами

$$p' = 6 \frac{r_{n'_p+2}}{u_{n'_p+2}}, \quad q' = -6 \frac{s^{5/2}}{u_{n'_p+2}} \frac{\tilde{h}}{(\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)^{1/2}}.$$

В загальному випадку величини  $p'$  та  $q'$  є функціями температури та хімічного потенціалу. Вигляд розв'язків (4.12) залежить від знаку дискримінанта

$$Q = (p'/3)^3 + (q'/2)^2. \quad (4.13)$$

Розрахуємо значення хімічного потенціалу  $M_q$ , при якому виконується рівність  $Q = 0$ . Із співвідношення

$$M_q = \left[ -\frac{8r_{n'_p+2}^3(1 + \alpha_{mq}^2)}{9u_{n'_p+2}s^5\beta W(0)} \right]^{1/2} h_{cm}, \quad (4.14)$$

отриманого з умови  $Q = 0$ , шляхом підстановки в нього величини  $\alpha_{mq} = M_q(\beta W(0))^{1/2}/h_{cm}$  знаходимо

$$M_q = \left[ -\frac{8r_{n'_p+2}^3}{9u_{n'_p+2}s^5\beta W(0)\left(1 + \frac{8r_{n'_p+2}^3}{9u_{n'_p+2}s^5}\right)} \right]^{1/2} h_{cm}.$$

Для  $Q > 0$  дійсний розв'язок  $\sigma'_0$  рівняння (4.12) згідно з формулою Кардано приймає вигляд

$$\sigma'_{0b} = A+B, \quad A = (-q'/2+Q^{1/2})^{1/3}, \quad B = (-q'/2-Q^{1/2})^{1/3}. \quad (4.15)$$

Для  $Q < 0$  маємо три дійсні розв'язки (величина  $\sigma'_0$  приймає три можливі дійсні значення)

$$\begin{aligned} \sigma'_{01} &= 2(-p'/3)^{1/2} \cos(\alpha_r/3), \\ \sigma'_{02,03} &= -2(-p'/3)^{1/2} \cos(\alpha_r/3 \pm \pi/3), \end{aligned} \quad (4.16)$$

де  $\alpha_r$  визначається із співвідношення

$$\cos \alpha_r = -\frac{q'}{2(-p'/3)^{3/2}}. \quad (4.17)$$

Графік залежності коренів кубічного рівняння (4.12) від хімічного потенціалу  $M$  при  $T < T_c$  приведений на рис. 2.

Як показують розрахунки, коефіцієнт квадратичного доданку в експоненті виразу (4.6) порівняно з коефіцієнтами інших доданків приймає велике значення. Виділимо в (4.6) доданки з  $k = 0$  і виконаємо інтегрування за змінними  $\eta_{\vec{k}}$  із  $k \neq 0$  з використанням базисного гаусового розподілу флуктуацій. В нульовому наближенні будемо мати

$$\Xi_{n'_p+2} = e^{N_v E_0(\sigma_-)} \prod_{\substack{k \neq 0 \\ \vec{k} \in \mathcal{B}_{n'_p+2}}} (\pi/\bar{g}'(k))^{1/2} \Xi_{n'_p+2}^{(0)}. \quad (4.18)$$

Тут

$$\begin{aligned} \Xi_{n'_p+2}^{(0)} &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta_0 \exp \left[ A'_0 \sqrt{N_v} \eta_0 - \frac{1}{2} \bar{g}'(0) \eta_0^2 - \frac{\bar{b}'}{6} N_{n'_p+2}^{-1/2} \eta_0^3 - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\bar{a}'_4}{24} N_{n'_p+2}^{-1} \eta_0^4 \right]. \end{aligned} \quad (4.19)$$

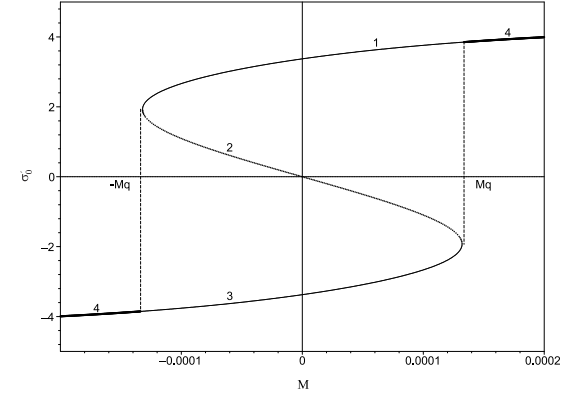


Рис. 2. Розв'язки кубічного рівняння (4.12) як функції хімічного потенціалу  $M$  при  $\tau = -0.005$ . Криві 1, 2, 3 та 4 відповідають випадкам  $\sigma'_0 = \sigma'_{01}$ ,  $\sigma'_0 = \sigma'_{02}$ ,  $\sigma'_0 = \sigma'_{03}$  та  $\sigma'_0 = \sigma'_{0b}$ , відповідно.

Ліквідовуючи кубічний член в експоненті виразу для  $\Xi_{n'_p+2}^{(0)}$  заміною змінної

$$\eta_0 = \rho_0 - \sqrt{N_v} \sigma_- \quad (4.20)$$

і використовуючи метод перевалу при інтегруванні за змінною  $\rho_0$ , для вкладу до термодинамічного потенціалу від (4.18) одержуємо

$$\Omega_{n'_p+2} = -kT N_v E_0(\sigma_-) - \frac{1}{2} kT N_{n'_p+2} \ln \pi + \frac{1}{2} kT \sum_{\substack{k \neq 0 \\ \vec{k} \in \mathcal{B}_{n'_p+2}}} \ln \bar{g}'(k). \quad (4.21)$$

Тут

$$E_0(\sigma_-) = e_0^{(-)} \bar{h} s^{-(n'_p+1)/2} - e_2^{(-)} s^{-3(n'_p+1)}, \quad (4.22)$$

а коефіцієнти  $e_0^{(-)}$  та  $e_2^{(-)}$  задовольняють співвідношення

$$e_0^{(-)} = \sigma'_0 s^{-1/2}, \quad e_2^{(-)} = \frac{(\sigma'_0)^2}{2} s^{-3} \left[ r_{n'_p+2} + \frac{u_{n'_p+2}}{12} (\sigma'_0)^2 \right]. \quad (4.23)$$

Зауважимо, що заміна змінної (4.20) та підстановка  $\rho_0 = \sqrt{N_v} \rho$  в (4.19) приводять до появи різкого максимуму підінтегрального виразу в точці  $\bar{\rho}$ . Умова екстремуму підінтегрального виразу, з якої визначається  $\bar{\rho}$ , та представлення  $\bar{\rho} = \bar{\rho}'' s^{-(n'_p+2)/2}$  ведуть до такого ж кубічного рівняння для  $\bar{\rho}''$  (з такими ж коефіцієнтами), що й для  $\sigma'_0$  (4.12). Величини  $\bar{\rho}''$  і  $\sigma'_0$ , а також  $\bar{\rho}$  і  $\sigma_-$  (4.11) приймають однакові

значення. Це дає змогу подати підінтегральний вираз  $E_0(\bar{\rho})$  в точці  $\bar{\rho}$  як  $E_0(\sigma_-)$  (див. (4.22)) з коефіцієнтами (4.23), де величину  $\bar{\rho}'$  замінено на  $\sigma'_0$ . Замінюючи підсумовування за  $\vec{k} \in \mathcal{B}_{n'_p+2}$  інтегруванням, для останнього доданка виразу (4.21) знаходимо

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \in \mathcal{B}_{n'_p+2}} \ln \bar{g}'(k) &= kTN_{n'_p+2} \left\{ \frac{1}{2} \ln(1 + a_I^2) - (n'_p + 2) \ln s + \right. \\ &\left. + \frac{1}{2} \ln r'_R - \frac{1}{3} + \frac{1}{a_I^2} - \frac{1}{a_I^3} \operatorname{arctg} a_I \right\}, \\ a_I &= \frac{\pi}{c} \left( \frac{2b}{r'_R} \right)^{1/2}, \quad r'_R = r_{n'_p+2} + \frac{u_{n'_p+2}}{2} (\sigma'_0)^2. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Тепер, скориставшись (4.21), запишемо вклад до термодинамічного потенціалу від (4.1) як суму двох доданків

$$\Omega'' = \Omega_0^{(-)} + \Omega'_I. \quad (4.25)$$

Складова

$$\Omega_0^{(-)} = -kTN_v E_0(\sigma_-) \quad (4.26)$$

пов'язана зі зміщенням змінної  $\rho_0$ , яке визначається величиною, що є розв'язком кубічного рівняння. Для іншої складової  $\Omega'_I$  отримуємо

$$\Omega'_I = -kTN_{n'_p+2} f_I, \quad (4.27)$$

де

$$\begin{aligned} f_I &= \left( -\frac{1}{2} \ln 3 + 2 \ln s + \frac{1}{2} \ln u_{n'_p+1} - \ln r'_R - \ln U(x_{n'_p+1}) - \right. \\ &\left. - \frac{3}{4} y_{n'_p+1}^{-2} - f_I'' \right) / 2. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Величина  $r'_R$  означена в (4.24). Для решти величин із (4.28) маємо

$$\begin{aligned} u_{n'_p+1} &= u^*(1 - \Phi_q H_{cm}), \\ x_{n'_p+1} &= -\bar{x} H_{cm} (1 - \Phi_q H_{cm})^{-1/2}, \\ y_{n'_p+1} &= s^{3/2} U(x_{n'_p+1}) \left( 3/\varphi(x_{n'_p+1}) \right)^{1/2}, \\ f_I'' &= \ln(1 + a_I^2) - \frac{2}{3} + \frac{2}{a_I^2} - \frac{2}{a_I^3} \operatorname{arctg} a_I. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Приймаючи до уваги  $\Omega_{TR}^{(-)}$  (3.10) та  $\Omega''$  (4.25), можна знайти вклад до термодинамічного потенціалу  $\Omega_{IGR}$  (3.9).

Підсумуємо одержані вище вклади до термодинамічного потенціалу поблизу критичної точки при  $T < T_c$ . Відповідно до (3.1) термодинамічний потенціал коміркової моделі плинну зображається у вигляді суми декількох доданків. Виділяючи аналітичну та неаналітичну частини термодинамічного потенціалу, отримуємо еквівалентний до (3.1) повний вираз

$$\Omega = \Omega_a + \Omega_s^{(-)} + \Omega_0^{(-)}. \quad (4.30)$$

Аналітичний вклад має вигляд

$$\Omega_a = -kTN_v (\gamma_{01} - \gamma_{02}|\tau| + \gamma_{03}|\tau|^2) + \Omega_{01}, \quad (4.31)$$

де для  $\gamma_{01}$ ,  $\gamma_{02}$ ,  $\gamma_{03}$  та  $\Omega_{01}$  справедливі ті ж формули, що й при  $T > T_c$  (див. [6]). Неаналітичний вклад задовольняє співвідношення

$$\Omega_s^{(-)} = -kTN_v \gamma_s^{(-)} \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{\frac{d}{d+2}}. \quad (4.32)$$

Тут

$$\gamma_s^{(-)} = f_{n'_p+1} - \bar{\gamma}^{(-)} + f_I/s^3. \quad (4.33)$$

Доданок

$$\begin{aligned} \Omega_0^{(-)} &= -kTN_v \left[ e_0^{(-)} \tilde{h} (\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)^{\frac{d-2}{2(d+2)}} - \right. \\ &\left. - e_2^{(-)} (\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)^{\frac{d}{d+2}} \right], \end{aligned} \quad (4.34)$$

який, як і випадку  $T > T_c$ , пов'язаний зі зміщенням змінної  $\rho_0$ , характеризується коефіцієнтами  $e_0^{(-)}$  та  $e_2^{(-)}$ , приведеними в (4.23).

Порівнюючи температурні області вище [6] і нижче (дані розрахунки) від  $T_c$ , слід відмітити, що вирази для термодинамічного потенціалу є функціонально подібними між собою. Основна відмінність полягає в тому, що для  $T < T_c$  значення точки виходу системи з критичного режиму флуктуацій є дещо меншим, ніж аналогічна величина для випадку  $T > T_c$ . З цієї причини маємо різний масштаб виміру температури для кожного з діапазонів температур. Тому, використовуючи отримані результати, можна записати загальну формулу для термодинамічного потенціалу

$$\Omega = \Omega_a + \Omega_s + \Omega_0, \quad (4.35)$$



де аналітична частина  $\Omega_a$  є спільною для обох діапазонів температур, а вклади  $\Omega_s$  та  $\Omega_0$  задаються виразами

$$\Omega_s = \begin{cases} \Omega_s^{(-)}, & \text{при } T < T_c \\ \Omega_s^{(+)}, & \text{при } T \geq T_c \end{cases} \quad (4.36)$$

та

$$\Omega_0 = \begin{cases} \Omega_0^{(-)}, & \text{при } T < T_c \\ \Omega_0^{(+)}, & \text{при } T \geq T_c, \end{cases} \quad (4.37)$$

відповідно. Таким чином, маємо функціональний запис виразу для термодинамічного потенціалу, що залежить як від температури, так і хімічного потенціалу, і справедливий по обидві сторони критичної температури.

## 5. Рівняння стану моделі при $T < T_c$ з врахуванням флуктуацій параметра порядку

Будемо використовувати співвідношення

$$\bar{N} = \frac{\partial \ln \Xi}{\partial \beta \mu}, \quad (5.1)$$

яке дає змогу виразити хімічний потенціал через середнє число частинок  $\bar{N}$  або через середню густину

$$\bar{n} = \frac{\bar{N}}{N_v} = \left( \frac{\bar{N}}{V} \right) v. \quad (5.2)$$

Тут  $v$  – об'єм елементарної комірки.

На основі (5.1) та (5.2) з врахуванням (4.30) для  $T < T_c$  одержуємо

$$\bar{n} = \bar{n}_a + n_s^{(-)} + n_0^{(-)}, \quad (5.3)$$

де

$$\begin{aligned} \bar{n}_a &= \frac{\partial E_\mu}{\partial \beta \mu}, \\ n_s^{(-)} &= \frac{\partial}{\partial \beta \mu} \left[ \gamma_s^{(-)} \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{\frac{d}{d+2}} \right], \\ n_0^{(-)} &= \frac{\partial}{\partial \beta \mu} \left[ e_0^{(-)} \tilde{h} \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{\frac{d-2}{2(d+2)}} - e_2^{(-)} \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{\frac{d}{d+2}} \right]. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Перший доданок із (5.3)

$$\bar{n}_a = -M - \tilde{a}_1 + \frac{a_{34}}{\beta W(0)} \quad (5.5)$$

відповідає аналітичній частині.

Другий доданок із (5.3) зображається у вигляді

$$\begin{aligned} n_s^{(-)} &= \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{\frac{d-2}{2(d+2)}} \left[ \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{1/2} \frac{\partial \gamma_s^{(-)}}{\partial \beta \mu} + \frac{2d}{d+2} \gamma_s^{(-)} \times \right. \\ &\times \left. \frac{1}{(\beta W(0))^{1/2}} \frac{\tilde{h}}{\left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{1/2}} \right]. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Похідна від величини  $\gamma_s^{(-)}$  (4.33) розраховується для кожного із членів, явні вирази яких відомі.

При розрахунку  $n_0^{(-)}$  (див. (5.4)) похідні від  $\sigma'_0$  за  $\beta \mu$  приводять до виразу, тотожного з умовою (4.10). Тому при обчисленні  $n_0^{(-)}$  величину  $\sigma'_0$  вважаємо незалежною від хімічного потенціалу. Маємо

$$\begin{aligned} n_0^{(-)} &= \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{\frac{d-2}{2(d+2)}} \left[ e_0^{(-)} \frac{1}{(\beta W(0))^{1/2}} \left( 1 + \frac{d-2}{d+2} \frac{\tilde{h}^2}{\tilde{h}^2 + h_{cm}^2} \right) - \right. \\ &- \frac{2d}{d+2} e_2^{(-)} \frac{1}{(\beta W(0))^{1/2}} \frac{\tilde{h}}{\left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{1/2}} - \\ &\left. - \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{1/2} \frac{\partial e_2^{(-)}}{\partial \beta \mu} \right]. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Використовуючи (5.3), знаходимо сумарний вклад до середньої густини

$$\bar{n} = -M - \tilde{a}_1 + \frac{1}{\beta W(0)} a_{34} + \sigma_{00}^{(-)} \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{\frac{d-2}{2(d+2)}}. \quad (5.8)$$

Для коефіцієнта  $\sigma_{00}^{(-)}$  маємо

$$\begin{aligned} \sigma_{00}^{(-)} &= e_0^{(-)} \frac{1}{(\beta W(0))^{1/2}} \left( 1 + \frac{d-2}{d+2} \frac{\tilde{h}^2}{\tilde{h}^2 + h_{cm}^2} \right) + \\ &+ e_{00}^{(-)} \frac{\tilde{h}}{\left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{1/2}} + e_{02}^{(-)}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Тут величина  $e_0^{(-)}$  означена в (4.23), а для  $e_{00}^{(-)}$  та  $e_{02}^{(-)}$  знаходимо вирази

$$\begin{aligned} e_{00}^{(-)} &= \frac{2d}{d+2} \frac{1}{(\beta W(0))^{1/2}} \left( \gamma_s^{(-)} - e_2^{(-)} \right), \\ e_{02}^{(-)} &= \left( \frac{\partial \gamma_s^{(-)}}{\partial \beta \mu} - \frac{\partial e_2^{(-)}}{\partial \beta \mu} \right) \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Перші два доданки правої частини рівності (5.9) залежать лише від змінної  $\alpha_m = \tilde{h}/h_{cm}$ . Для того, щоб величина  $\sigma_{00}^{(-)}$  була функцією лише  $\alpha_m$ , необхідно, щоб такою функцією був доданок  $e_{02}^{(-)}$ . Шляхом прямого розрахунку похідних від величин  $\gamma_s^{(-)}$  та  $e_2^{(-)}$  в цьому можна переконатися.

Для похідної від  $e_2^{(-)}$  за  $\beta \mu$  отримаємо

$$\frac{\partial e_2^{(-)}}{\partial \beta \mu} = -\frac{1}{(\beta W(0))^{1/2}} q'_s (\sigma'_0)^2 \left[ 1 + \frac{q_l}{12} (\sigma'_0)^2 \right] (\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)^{-1/2}, \quad (5.11)$$

де

$$\begin{aligned} q'_s &= -\frac{E_2}{2p_0} q s^{-3} H_{cm} \frac{\alpha_m}{(1 + \alpha_m^2)^{1/2}}, \\ q_l &= \Phi_q u^* q^{-1}. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Тут враховано, що

$$\begin{aligned} \frac{\partial r_{n'_p+2}}{\partial \beta \mu} &= \frac{1}{(\beta W(0))^{1/2}} q E_2 H_{cmd} \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{-1/2}, \\ \frac{\partial u_{n'_p+2}}{\partial \beta \mu} &= \frac{1}{(\beta W(0))^{1/2}} u^* \Phi_q E_2 H_{cmd} \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{-1/2}, \\ \frac{\partial H_{cm}}{\partial \beta \mu} &= \frac{\partial H_{cm}}{\partial \tilde{h}} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial \beta \mu} = -\frac{1}{(\beta W(0))^{1/2}} H_{cmd} \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{-1/2}, \\ H_{cmd} &= \frac{H_{cm}}{p_0} \frac{\alpha_m}{(1 + \alpha_m^2)^{1/2}}. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Явний вираз для похідної

$$\frac{\partial \gamma_s^{(-)}}{\partial \beta \mu} = \frac{\partial f_{n'_p+1}}{\partial \beta \mu} - \frac{\partial \bar{\gamma}^{(-)}}{\partial \beta \mu} + s^{-3} \frac{\partial f_I}{\partial \beta \mu} \quad (5.14)$$

є сумою похідних від величин  $\bar{\gamma}^{(-)}$ ,  $f_{n'_p+1}$  та  $f_I/s^3$ , що описують відповідно вклади від області критичного режиму флуктуацій параметра порядку, перехідної області та від області інверсного гаусового режиму.

Перейдемо до розрахунку похідної від величини  $f_{n'_p+1}$  (див. (3.3) при  $n = n'_p+1$ ) за хімічним потенціалом. Враховуючи співвідношення

$$\begin{aligned} \frac{\partial y_{n'_p+m}}{\partial \beta \mu} &= y_{n'_p+m} r'_{p+m} \frac{\partial x_{n'_p+m}}{\partial \beta \mu}, \\ \frac{\partial x_{n'_p+m}}{\partial \beta \mu} &= \frac{1}{(\beta W(0))^{1/2}} g'_{p+m} \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{-1/2}, \\ U'(0, x_{n'_p+m}) &= -\frac{x_{n'_p+m}}{2} U(0, x_{n'_p+m}) - \frac{1}{2} U(1, x'_{n'_p+m}), \end{aligned} \quad (5.15)$$

де

$$\begin{aligned} r'_{p+m} &= \frac{U'(x_{n'_p+m})}{U(x_{n'_p+m})} - \frac{1}{2} \frac{\varphi'(x_{n'_p+m})}{\varphi(x_{n'_p+m})}, \\ g'_{p+m} &= \bar{x} H_{cmd} E_2^{m-1} \left( 1 - \Phi_q H_{cm} E_2^{m-1} \right)^{-1/2} \times \\ &\times \left[ 1 + \frac{\Phi_q}{2} H_{cm} E_2^{m-1} \left( 1 - \Phi_q H_{cm} E_2^{m-1} \right)^{-1} \right], \\ U'(x_{n'_p+m}) &= \frac{1}{2} U^2(x_{n'_p+m}) + x_{n'_p+m} U(x_{n'_p+m}) - 1, \\ \varphi'(x_{n'_p+m}) &= 6U'(x_{n'_p+m})U(x_{n'_p+m}) + 2U(x_{n'_p+m}) + \\ &+ 2x_{n'_p+m} U'(x_{n'_p+m}), \end{aligned} \quad (5.16)$$

знаходимо

$$\frac{\partial f_{n'_p+1}}{\partial \beta \mu} = \frac{1}{(\beta W(0))^{1/2}} f'_p \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{-1/2}. \quad (5.17)$$

Тут

$$f'_p = \frac{1}{2} r'_p g'_p \left( 1 - 9/y_{n'_p}^2 \right) - \frac{1}{2} g'_{p+1} U(x_{n'_p+1}). \quad (5.18)$$

Похідна від величини  $\bar{\gamma}^{(-)}$  (див. (3.7)) за хімічним потенціалом записується у вигляді

$$\frac{\partial \bar{\gamma}^{(-)}}{\partial \beta \mu} = -\frac{1}{(\beta W(0))^{1/2}} \gamma'_p \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{-1/2}, \quad (5.19)$$

де

$$\gamma'_p = H_{cmd} \left( -\bar{\gamma}_2 + 2\bar{\gamma}_3 H_{cm} \right). \quad (5.20)$$

Розрахунок похідної від  $f_I$  (див. (4.28)) за  $\beta \mu$  будемо здійснювати, приймаючи до уваги, що величина  $\sigma'_0$  є функцією хімічного потенціалу. Рівність (4.10) дає змогу отримати співвідношення

$$\frac{\partial \sigma'_0}{\partial \beta \mu} = \frac{1}{(\beta W(0))^{1/2}} g'_\sigma \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{-1/2}, \quad (5.21)$$

з врахуванням якого знаходимо вираз для похідної

$$\frac{\partial r'_R}{\partial \beta \mu} = \frac{1}{(\beta W(0))^{1/2}} g'_R (\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)^{-1/2}. \quad (5.22)$$

Тут

$$\begin{aligned} g'_\sigma &= \frac{s^{5/2}}{r'_R} \frac{1}{1 + \alpha_m^2} - \frac{\sigma'_0}{r'_R} H_{cmd} q E_2 \left(1 + \frac{q_l}{6} (\sigma'_0)^2\right), \\ g'_R &= q E_2 H_{cmd} \left(1 + \frac{q_l}{2} (\sigma'_0)^2\right) + u_{n'_p+2} g'_\sigma \sigma'_0. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Інша одержана формула

$$\frac{\partial a_I}{\partial \beta \mu} = \frac{1}{(\beta W(0))^{1/2}} g_{aI} (\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)^{-1/2}, \quad (5.24)$$

де

$$g_{aI} = -\frac{a_I g'_R}{2r'_R}, \quad (5.25)$$

дозволяє розрахувати похідну від величини  $f_I''$  (див. (4.29)), що входить до складу  $f_I$  (4.28). Маємо

$$\frac{\partial f_I''}{\partial \beta \mu} = \frac{1}{(\beta W(0))^{1/2}} g_{aI} a_{Ig} (\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)^{-1/2}. \quad (5.26)$$

Тут

$$a_{Ig} = \frac{2a_I}{1 + a_I^2} - \frac{4}{a_I^3} + \frac{6}{a_I^4} \arctg a_I - \frac{2}{a_I^3} \frac{1}{1 + a_I^2}. \quad (5.27)$$

Використовуючи (5.22) та (5.26), приходимо до виразу

$$\frac{\partial f_I}{\partial \beta \mu} = \frac{1}{(\beta W(0))^{1/2}} f_{Iv} (\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)^{-1/2}, \quad (5.28)$$

де

$$\begin{aligned} f_{Iv} &= \frac{1}{4} \frac{u^* \Phi_q}{u_{n'_p+1}} H_{cmd} - \frac{1}{2} \left( \frac{g'_R}{r'_R} + g_{aI} a_{Ig} \right) + \\ &+ g'_{p+1} \left( \frac{3}{4} \frac{r'_{p+1}}{y_{n'_p+1}^2} - \frac{1}{2} \frac{U'(x_{n'_p+1})}{U(x_{n'_p+1})} \right). \end{aligned} \quad (5.29)$$

Похідна  $\partial \gamma_s^{(-)}/\partial \beta \mu$  (5.14) після підсумовування вкладів (5.17), (5.19) та (5.28) може бути представлена як

$$\frac{\partial \gamma_s^{(-)}}{\partial \beta \mu} = \frac{1}{(\beta W(0))^{1/2}} f_{\delta_1} (\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)^{-1/2}. \quad (5.30)$$

Тут

$$f_{\delta_1} = f'_p + \gamma'_p + f_{Iv}/s^3. \quad (5.31)$$

Величини  $f'_p$ ,  $\gamma'_p$  та  $f_{Iv}$  залежать лише від параметра  $\alpha_m$ .

Одержані вище вирази (5.10), (5.11) та (5.30) дають змогу подати коефіцієнт  $\sigma_{00}^{(-)}$  (5.9) у явному вигляді. Можемо записати

$$\begin{aligned} \sigma_{00}^{(-)} &= e_0^{(-)} \frac{1}{(\beta W(0))^{1/2}} \left(1 + \frac{d-2}{d+2} \frac{\alpha_m^2}{1 + \alpha_m^2}\right) + \\ &+ e_{02}^{(-)} \frac{\alpha_m}{(1 + \alpha_m^2)^{1/2}} + e_{02}^{(-)}, \end{aligned} \quad (5.32)$$

де

$$e_{02}^{(-)} = \frac{1}{(\beta W(0))^{1/2}} [f_{\delta_1} + q'_s (\sigma'_0)^2 (1 + q_l (\sigma'_0)^2 / 12)]. \quad (5.33)$$

Таким чином, величина  $\sigma_{00}^{(-)}$  є функцією

$$\alpha_m = \frac{\tilde{h}}{h_{cm}} = (\beta W(0))^{1/2} \left( \frac{q}{c_{11}} E_2^{-n_0} \right)^{p_0} \alpha_0.$$

Множник

$$\alpha_0 = \frac{M}{|\tau|^{p_0}} = \frac{\mu/W(0) - \tilde{a}_1}{|\tau|^{p_0}}$$

включає в себе вихідні  $\mu$  та  $\tau$ . На основі формули для  $\sigma_{00}^{(-)}$  (5.32) та відповідного виразу для  $\sigma_{00}^{(+)}$  при  $T > T_c$  (див. [6]) можна описати поведінку величини  $\sigma_{00}$  як функції відносної температури  $\tau$  для обох діапазонів температур  $T < T_c$  та  $T > T_c$  при фіксованому значенні хімічного потенціалу  $M$ .

Приймаючи до уваги співвідношення для  $\tilde{a}_1$ ,  $d(0)$  та  $\tilde{a}_2$  (див. (2.2)), перепишемо рівняння (5.8) в такому вигляді:

$$\bar{n} = n_g - M + \sigma_{00}^{(-)} (\tilde{h}^2 + h_{cm}^2)^{\frac{d-2}{2(d+2)}}. \quad (5.34)$$

Тут

$$n_g = -a_1 - a_2 a_{34} + \frac{a_4}{3} a_{34}^3. \quad (5.35)$$

Коефіцієнт  $\sigma_{00}^{(-)}$  приведений в (5.32). Величина  $\tilde{h}$  як функція  $M$  означена в (2.5).

Нелінійне рівняння (5.34) описує зв'язок між густиною  $\bar{n}$  та хімічним потенціалом  $M$ , заданим в (2.2). Його можна представити у вигляді

$$\bar{n} - n_g + M = \left( \frac{M b_1^{(-)}}{b_2^{(-)}} \right)^{1/5} \sigma_{00}^{(-)} \quad (5.36)$$

або

$$b_3^{(-)} M^{1/5} = \bar{n} - n_g + M, \quad (5.37)$$

де

$$b_1^{(-)} = (\beta W(0))^{1/2}, \quad b_2^{(-)} = \frac{\alpha_m}{(1 + \alpha_m^2)^{1/2}},$$

$$b_3^{(-)} = \left( \frac{b_1^{(-)}}{b_2^{(-)}} \right)^{1/5} \sigma_{00}^{(-)}. \quad (5.38)$$

Використовуючи (5.37), можемо виразити хімічний потенціал  $M$  через середню густину  $\bar{n}$ . Вважаючи, що  $M \ll 1$  і нехтуючи останнім членом в (5.37), одержуємо наближену формулу

$$M = \left( \frac{\bar{n} - n_g}{\sigma_{00}^{(-)}} \right)^5 \frac{b_2^{(-)}}{(\beta W(0))^{1/2}} \quad (5.39)$$

або (враховуючи в (5.39) вирази для  $b_2^{(-)}$  та  $\alpha_m$ )

$$M = \frac{h_{cm}}{(\beta W(0))^{1/2}} \left[ \left( \frac{\bar{n} - n_g}{\sigma_{00}^{(-)}} \right)^{10} \frac{1}{h_{cm}^2} - 1 \right]^{1/2}.$$

Рівняння (5.37) дає змогу прослідкувати еволюцію середньої густини  $\bar{n} \approx n_g + b_3^{(-)} M^{1/5}$  із зміною  $M$  для різних від'ємних значень відносної температури  $\tau$  (див. рис. 3 та рис. 4).

Приймаючи до уваги співвідношення  $pV = kT \ln \Xi$ , а також (4.30) та  $V = N_v v$ , отримуємо таке рівняння стану при  $T < T_c$ :

$$\frac{Pv}{kT} = P_a^{(-)}(T) + E_\mu + \left( \gamma_s^{(-)} - e_2^{(-)} \right) \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{\frac{d}{d+2}} +$$

$$+ e_0^{(-)} \tilde{h} \left( \tilde{h}^2 + h_{cm}^2 \right)^{\frac{d-2}{2(d+2)}},$$

$$P_a^{(-)}(T) = \gamma_a + \gamma_{01} - \gamma_{02} |\tau| + \gamma_{03} |\tau|^2,$$

$$\gamma_a = f'_W - a_0 + \frac{1}{4} \ln \left( \frac{3}{u_0} \right) + \frac{x^2}{4} + \ln U(0, x),$$

$$f'_W = -\frac{1}{2} \ln [1 - (a')^2] + \frac{1}{3} + \frac{1}{(a')^2} - \frac{1}{2(a')^3} \ln \left| \frac{1+a'}{1-a'} \right|. \quad (5.40)$$

Тут  $a' = \pi(2b)^{1/2}/c$ . Величина  $M$ , яка входить у вираз для  $E_\mu$  із (2.2),

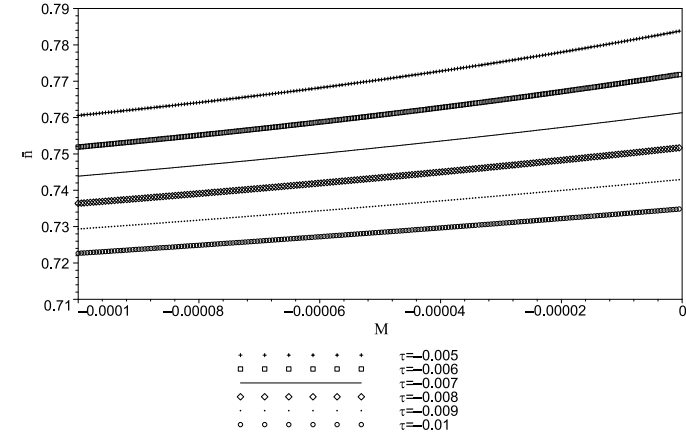


Рис. 3. Густина  $\bar{n}$  при від'ємних значеннях хімічного потенціалу  $M$  для різних  $\tau$ .

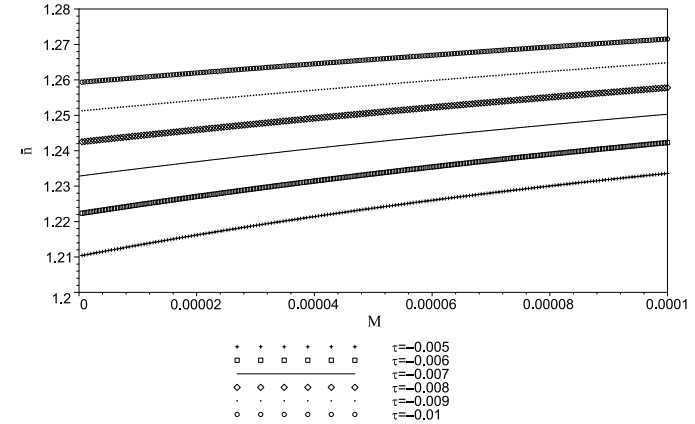


Рис. 4. Густина  $\bar{n}$  при додатніх значеннях хімічного потенціалу  $M$  для різних  $\tau$ .

приведена в (5.39). Для  $\tilde{h}$  із врахуванням (5.39) знаходимо

$$\tilde{h} = \left( \frac{\bar{n} - n_g}{\sigma_{00}^{(-)}} \right)^5 b_2^{(-)}, \quad (5.41)$$

а величина  $h_{cm}$  означена в (2.6). Визначаючи суму  $\tilde{h}^2 + h_{cm}^2$  із (5.34) та підставляючи її у рівняння із (5.40), будемо мати

$$\frac{Pv}{kT} = P_a^{(-)}(T) + E_\mu + \left( \frac{\bar{n} - n_g}{\sigma_{00}^{(-)}} \right)^6 \left[ e_0^{(-)} \frac{\alpha_m}{(1 + \alpha_m^2)^{1/2}} + \right. \\ \left. + \gamma_s^{(-)} - e_2^{(-)} \right]. \quad (5.42)$$

Вираз для  $P_a^{(-)}(T)$  приведений в (5.40).

## 6. Висновки

В низькотемпературній області ( $T < T_c$ ) з врахуванням флуктуацій параметра порядку розвинуто методику отримання рівняння стану коміркової моделі плинну. Як і в [6], математичний опис здійснено в методі колективних змінних з використанням потенціалу Морзе. Розрахунки великої статистичної суми і термодинамічного потенціалу моделі виконано в рамках четвірного розподілу флуктуацій (моделі  $\rho^4$ ). Повний вираз для термодинамічного потенціалу одержано згідно з розробленою при  $T < T_c$  технікою шляхом сумування вкладів від усіх режимів флуктуацій.

З використанням отриманого нелінійного рівняння прослідковано поведінку густини із зміною хімічного потенціалу для різних від'ємних значень відносної температури.

Дана стаття логічно доповнює попередні дослідження при  $T > T_c$  [6]. В результаті такого доповнення створюється цілісна картина опису поведінки плинну в околі критичної точки в рамках коміркової моделі (охоплено як випадок  $T > T_c$ , так і  $T < T_c$ ). При порівнянні температурних областей вище [6] і нижче (дані розрахунки) від  $T_c$  бачимо, що вирази для термодинамічного потенціалу є функціонально подібними між собою. Певна відмінність стосується значення точки виходу системи з критичного режиму флуктуацій, яке для  $T < T_c$  є дещо меншим, ніж аналогічна величина для випадку  $T > T_c$ . Внаслідок цього маємо різний масштаб виміру температури для кожного з діапазонів температур.

Розвинутий підхід може бути застосований до опису фазового переходу в простих рідких лужних металах. Виконані дослідження поглиблюють знання про критичні властивості плиннів та служать певним методологічним внеском у теоретичний опис критичних явищ.

## Література

1. Hansen J.-P., McDonald I.R. Theory of Simple Liquids: With Applications to Soft Matter, 4th Edition. Oxford: Academic Press, 2013, 636 p.
2. Khanna K.N., McLaughlin I.L. The structure factors of liquid alkali metals in the hard-sphere system. J. Phys.: Condens. Matter, 1989, Vol. 1, No. 26, P. 4155-4160.
3. Ben-Amotz D., Stell G. Reformulation of Weeks-Chandler-Andersen perturbation theory directly in terms of a hard-sphere reference system. J. Phys. Chem. B, 2004, Vol. 108, No. 21, P. 6877-6882.
4. Roth R. Fundamental measure theory for hard-sphere mixtures: a review. J. Phys.: Condens. Matter, 2010, Vol. 22, No. 6, 063102 (18 pages).
5. Yukhnovskii I.R. The phase transition of the first order in the critical region of the gas-liquid system. Condens. Matter Phys., 2014, Vol. 17, No. 4, 43001 (27 pages).
6. Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V., Dobush O.A. The equation of state of a cell fluid model in the supercritical region. Condens. Matter Phys., 2018, Vol. 21, No. 4, 43502.
7. Singh J.K., Adhikari J., Kwak S.K. Vapor-liquid phase coexistence curves for Morse fluids. Fluid Phase Equilib., 2006, Vol. 248, No. 1, P. 1-6.
8. Козловский М.П., Пылюк И.В., Юхновский И.Р. Термодинамические функции трехмерной модели Изинга вблизи точки фазового перехода с учетом поправок к скейлингу. I. Случай  $T > T_c$ . ТМФ, 1991, Т. 87, № 2, С. 293-316.
9. Kozlovskii M.P., Romanik R.V. The equation of state of a three-dimensional Ising-like system. J. Phys. Stud., 2009, Vol. 13, No. 4, 4007 (11 pages).
10. Юхновський І.Р., Козловський М.П., Пиллюк І.В. Мікроскопічна теорія фазових переходів у тривимірних системах. Львів: Євро-світ, 2001, 592 с.
11. Engels J., Fromme L., Seniuch M. Numerical equation of state and other scaling functions from an improved three-dimensional Ising model. Nucl. Phys. B, 2003, Vol. 655 [FS], P. 277-299.

12. Козловський М.П. Вплив зовнішнього поля на критичну поведінку тривимірних систем. Львів: Галицький друкар, 2012, 332 с.
13. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами / Под ред. Абрамовиц М., Стиган И. М.: Наука, 1979, 832 с.
14. Козловский М.П., Пылюк И.В., Юхновский И.Р. Термодинамические функции трехмерной модели Изинга вблизи точки фазового перехода с учетом поправок к скейлингу. II. Случай  $T < T_c$ . ТМФ, 1991, Т. 87, № 3, С. 434-455.

## 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; "Referatyvnyj Zhurnal"; "Dzherelo".

**EDITOR IN CHIEF:** Ihor Yukhnovskii.

**EDITORIAL BOARD:** T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk (Associate Editor), *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Coventry*; R. Folk, *Linz*; L.E. Gonzalez, *Valladolid*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch (Associate Editor), *Lviv*; M. Holovko (Associate Editor), *Lviv*; O. Ivankiv (Managing Editor), *Lviv*; Ja. Ilnytskyi (Assistant Editor), *Lviv*; N. Jakse, *Grenoble*; W. Janke, *Leipzig*; J. Jedrzejewski, *Wroclaw*; Yu. Kalyuzhnyi, *Lviv*; R. Kenna, *Coventry*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; O. Lavrentovich, *Kent*; M. Lebovka, *Kyiv*; R. Lemanski, *Wroclaw*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Loktev, *Kyiv*; E. Lomba, *Madrid*; O. Makhanets, *Chernivtsi*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod (Associate Editor), *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; O. Pizio, *Mexico*; N. Plakida, *Dubna*; G. Ruocco, *Rome*; A. Seitsonen, *Zürich*; S. Sharapov, *Kyiv*; Ya. Shchur, *Lviv*; A. Shvaika (Associate Editor), *Lviv*; S. Sokołowski, *Lublin*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; J. Strečka, *Košice*; S. Thurner, *Vienna*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; V. Vlachy, *Ljubljana*; 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)2761978; Fax: +38(032)2761158  
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>