

548
1094

И. Р. ЮХНОВСКИЙ

ФАЗОВЫЕ
ПЕРЕХОДЫ
ВТОРОГО РОДА

МЕТОД
КОЛЛЕКТИВНЫХ
ПЕРЕМЕННЫХ

АКАДЕМИЯ НАУК УКРАИНСКОЙ ССР
ИНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

И. Р. ЮХНОВСКИЙ

ФАЗОВЫЕ
ПЕРЕХОДЫ
ВТОРОГО РОДА

МЕТОД
КОЛЛЕКТИВНЫХ
ПЕРЕМЕННЫХ

КИЕВ
НАУКОВА ДУМКА
1985

94

48
74

УДК 548.5.01+538.91—405

Фазовые переходы второго рода. Метод коллективных переменных / Юхновский И. Р.— Киев : Наук. думка, 1985.— 224 с.

В монографии построены основы современной статистической теории фазовых переходов второго рода. В качестве модели физической системы, в которой происходит фазовый переход, рассмотрена трехмерная модель Изинга, являющаяся главной составной частью разнообразных физических моделей фазовых переходов. Теория строится от гамильтониана системы до выражений для термодинамических функций. Найдены явные выражения для свободной энергии, энтропии, теплоемкости, среднего момента, восприимчивости и критической температуры. Построены кривые этих функций, определены значения критических индексов. Получены и обсуждены разностные и дифференциальные формы рекуррентных уравнений и их решений. Рассмотрены обобщения теории на n -компонентные системы, кластерные модели сегнетоэлектриков, бинарные сплавы.

Для физиков, математиков и химиков.
Ил. 33. Табл. 12. Библиогр.: с. 218—223 (132 назв.).

Ответственный редактор *В. Г. Барьяхтар*

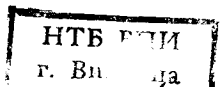
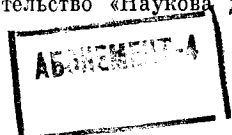
Рецензенты *В. А. Москаленко, Д. Н. Зубарев*

Редакция физико-математической литературы

304385

Ю $\frac{1704020000-341}{M221(04)-85}$ 184-85

© Издательство «Наукова думка», 1985



ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	5
Введение	7
ГЛАВА I. Фазовое пространство коллективных переменных	15
§ 1. Модель Изинга. Гамильтониан	15
§ 2. Свободная энергия. Постановка задачи	18
§ 3. Множество коллективных переменных	19
§ 4. Якобиан перехода к коллективным переменным	21
§ 5. Исходные выражения	25
§ 6. Корреляционные функции	27
§ 7. Уравнения Эйлера	28
§ 8. О базисной плотности меры	32
§ 9. Расчет статистической суммы с помощью гауссовой плотности меры в качестве базисной	33
§ 10. Базисная плотность меры в окрестности критической точки	43
§ 11. Самосогласованное поле в методе коллективных переменных	53
ГЛАВА II. Интегрирование статистической суммы в трехмерной модели Изинга	58
§ 12. Четверная плотность меры	58
§ 13. Фазовое пространство. Разбиение на слои	62
§ 14. Интегрирование статистической суммы	63
§ 15. Рекуррентные соотношения	73
§ 16. Определение критической точки. Начальные параметры	78
§ 17. Решение рекуррентных уравнений при $T > T_c$	82
§ 18. Уравнение для критической температуры	90
§ 19. Области температур и фазового пространства, в которых реализуется критический режим	92
§ 20. Предельный гауссов режим при $t > 0$	96
§ 21. Результаты машинных расчетов	99
ГЛАВА III. Интегрирование статистической суммы в области температур $T < T_c$	116
§ 22. Рекуррентные уравнения и функции	116
§ 23. Решение рекуррентных уравнений при $T < T_c$	119
§ 24. Интегрирование статистической суммы при $T < T_c$	124
§ 25. Параметр порядка в статистической сумме	130
ГЛАВА IV. Учет поправок на усреднение потенциала и на переход на блочную решетку. Критический индекс η	135
§ 26. Поправка на усреднение потенциала	136
§ 27. Изменения в рекуррентных уравнениях и их решениях в связи с учетом поправок на усреднение потенциала	151

ГЛАВА V. Свободная энергия и другие термодинамические функции системы	155
§ 28. Свободная энергия системы при $T \geq T_c$	155
§ 29. Свободная энергия системы в критическом режиме	158
§ 30. Свободная энергия системы в предельном гауссовом режиме	160
§ 31. Полная свободная энергия, внутренняя энергия, энтропия и теплоемкость системы при $T \geq T_c$	163
§ 32. Свободная энергия, энтропия и теплоемкость при $T \leq T_c$	165
ГЛАВА VI. Обобщение метода коллективных переменных на различные задачи	173
§ 33. n -Компонентная модель Стевли	173
§ 34. Системы, содержащие кластеры и взаимодействия разных типов	177
§ 35. Бинарные сплавы	188
§ 36. Специфическая блочная решетка, универсальность ренормализационной группы	199
§ 37. Дифференциальная форма рекуррентных уравнений	204
Заключение	205
Список литературы	218

ПРЕДИСЛОВИЕ

Фазовые переходы представляют собой одну из наиболее интересных и сложных проблем статистической механики, им посвящены работы выдающихся ученых, опубликован ряд монографий и учебников [1, 2, 7, 9, 17, 18, 27, 30, 44, 47, 50, 53, 56]. В последнее десятилетие теория фазовых переходов стала объектом весьма широких и интенсивных исследований, в ходе которых были сформулированы новые концепции, созданы мощные теоретические методы.

В настоящей монографии предложен новый подход к описанию фазовых переходов второго рода, основанный на методе коллективных переменных (КП). Этот метод был развит нами ранее для систем, содержащих заряженные частицы [66], и оказался плодотворным при рассмотрении проблем фазовых переходов. В обеих физических задачах главную роль играют *коллективные эффекты*, выражающиеся в форме результирующего взаимодействия между двумя частицами системы, за которыми «ведется наблюдение». Результирующее взаимодействие складывается из прямого и косвенного — последнее обусловлено взаимодействием остальных частиц системы. Учет косвенных взаимодействий и составляет понятие коллективных эффектов. В физических системах в окрестности точки фазового перехода коллективные эффекты являются основными: результирующее взаимодействие становится дальнедействующим — частицы «чувствуют» друг друга на сколь угодно больших расстояниях. Это дает возможность физической системе в критической точке тонко избирать новый, наиболее выгодный путь развития своего состояния при изменении различных внешних параметров.

Коллективные переменные — это собирательное название особого класса переменных, специфических для каждой отдельной физической системы. Для магнитных систем КП — это переменные, связанные с модами колебаний спинового момента, для сегнетоэлектриков — с модами колебаний кластерных состояний, для систем заряженных частиц — это моды колебаний обобщенного заряда, для бинарных сплавов — моды унарной функции распределения, для системы жидкость — пар — моды отклонений плотности от критической и т. д.

Множество КП содержит переменные, средние значения которых связаны непосредственно с параметрами порядка. Благодаря этому фазовое пространство КП является наиболее естественным для описания фазового перехода.

В методе КП можно строго сформулировать задачу о фазовом переходе, не прибегая к введению дополнительных параметров в свободную энергию системы.

В монографии предпринята попытка получить, начиная от микроскопического гамильтониана системы, явные выражения для термодинамически х

функций в окрестности точки фазового перехода. В ходе изложения на определенных этапах возникают соотношения, связанные с теорией Ландау и методом ренормализационной группы. Предлагаемая теория, основанная на интегрировании базисных плотностей мер, является приближенной. Интегрирование дает удовлетворительные результаты для термодинамических функций и критических индексов. Учет высших моментов позволит получить более стабильные результаты.

При ознакомлении с монографией читатель найдет много не решенных до конца вопросов, которые целесообразно развивать.

Метод КП создавался как естественное развитие идей и методов Н. Н. Боголюбова. Автор и его научные сотрудники, принимавшие участие в разработке отдельных проблем, выражают глубокую благодарность Н. Н. Боголюбову за поддержку и внимание. Развитие метода сопровождалось обсуждениями на семинарах и конференциях, и автор благодарит всех советских и иностранных ученых, с которыми он вел полезные научные дискуссии о фазовых переходах, за их консультации, критику и интерес к работе.

Искреннюю благодарность автор выражает также сотрудникам Института теоретической физики АН УССР и своим коллегам по Львовскому отделению «Статистическая физика» ИТФ АН УССР за участие и сотрудничество в разработке научных проблем и за большую помощь в подготовке рукописи к печати.

ВВЕДЕНИЕ

Состояние равновесной системы в термодинамике полностью описывается соответствующим термодинамическим потенциалом. Так, если в качестве независимых переменных, характеризующих условия, в которых находится система, выбрать температуру T , объем V и внешнее поле \mathcal{H} (например, магнитное), то таким термодинамическим потенциалом будет свободная энергия $F = F(T, V, \mathcal{H})$. В точке фазового перехода второго рода непрерывными являются F и ее первые производные: энтропия $S = -\partial F/\partial T$, давление $p = -\partial F/\partial V$ и средний момент $\langle \sigma \rangle = \partial F/\partial \mathcal{H}$. Вторые же производные: теплоемкость $c_v = T(\partial^2 F/\partial T^2)$, восприимчивость $\chi = \partial^2 F/\partial \mathcal{H}^2$ и сжимаемость $\kappa = \frac{1}{V}(\partial^2 F/\partial V^2)^{-1}$ имеют особенности. Кроме термодинамических функций, свойства равновесных систем можно описывать и с помощью функций распределения. Для пространственно однородных систем одной из важнейших является бинарная функция [4]. Логарифм бинарной функции — «потенциал средней силы» — представляет собой эффективное взаимодействие, возникающее между двумя частицами в термодинамической системе. Этот потенциал зависит от температуры и плотности частиц. Можно показать, что в критической точке он становится дальнедействующим потенциалом, в трехмерном случае, например, пропорциональным $1/r^{1+\eta}$, где r — расстояние между двумя избранными частицами, η — величина порядка сотых. Это говорит о том, что в критической точке существуют дальнедействующие корреляции между частицами и радиус корреляции становится бесконечно большим. Как следствие этого, распределение флуктуаций необходимо описывать законом, отличным от гауссова. Перечисленные свойства являются общими для всех систем, в которых происходит фазовый переход второго рода.

В чем же состоит задача статистической теории, ставящей целью описать фазовый переход второго рода? Рассмотрим ее на примере ферромагнетика. Пусть задан гамильтониан системы и параметры решетки. При абсолютном нуле температуры магнитные моменты атомов ориентированы параллельно друг другу. Это основное состояние, энтропия системы равна нулю. Средний момент на каждый атом равен условной единице. При повышении температуры хаотическое движение усиливается, средний момент уменьшается. Сущность

явления заключается в том, что средний момент, уменьшаясь непрерывно, становится равным нулю не при бесконечно большой температуре, а для всех температур выше критической (T_c). Статистическая теория должна предложить выражение для среднего момента, описывающее и типное поведение этой зависимости.

Кривая энтропии системы как функции температуры имеет форму, приведенную на рис. 1. Здесь же изображена кривая для среднего момента. Уместно поставить вопрос: если для $T > T_c$ средний момент равен нулю, почему энтропия столь резко уменьшается при приближении T к T_c справа? Ведь магнитное упорядочение, которое должно приводить к уменьшению энтропии, возникает слева от T_c .

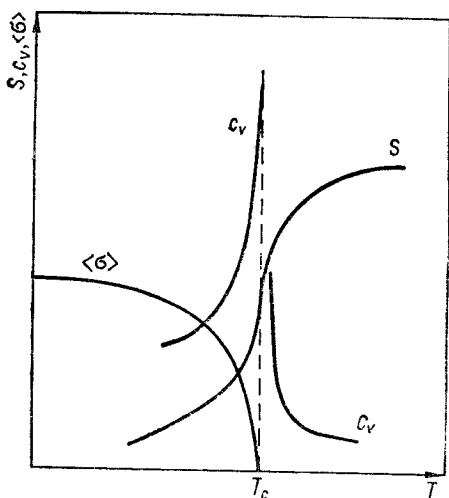


Рис. 1. Кривые энтропии системы, теплоемкости и среднего момента вблизи T_c .

Будет ли падение энтропии в окрестности $T = T_c$ синхронным с возрастанием среднего момента $\langle \sigma \rangle$? Кривые для энтропии и среднего момента дают, пожалуй, наиболее важную информацию о процессе фазового перехода. Из них получают кривые для теплоемкости и магнитной восприимчивости. Теория должна ответить также на вопрос о том, по какому закону возрастает к бесконечности теплоемкость при стремлении температуры к критической и почему кривая теплоемкости слева от точки T_c расположена выше, чем справа. И наконец важнейший вопрос: как связаны точки кривых термодинамических функций с параметрами исходного гамильтониана?

Различные теории самосогласованного поля [16, 44, 120, 121], обобщением которых является теория Ландау [44, 45], в определенной степени отвечали на эти вопросы. Однако предсказываемое в них поведение среднего момента теплоемкости и восприимчивости вблизи T_c не соответствовало экспериментальным фактам. Ход кривых термодинамических функций вблизи критической точки связан с их свойствами однородности относительно температуры и внешних параметров. Однородность подтверждается в экспериментах. Ее показатели были названы критическими индексами. Правильные значения этих индексов для различных моделей вначале были получены численными методами [56, 106]. Большим успехом статистической физики явилось применение методов ренормализационной группы (РГ) к исследованию фазовых переходов. Оно позволило выяснить природу данного явления.

Развитию методов РГ в статистической физике способствовало точное решение Онзагером задачи для двумерной модели Изинга

[113]. Важную роль в определении возможности существования фазового перехода в модельных системах сыграли неравенства Н. Н. Боголюбова [4] для фурье-образов функций Грина и теорема $1/q^2$ для бозе- и ферми-систем [7, 104, 111]. Ренормгрупповые (РГ) исследования были начаты в квантовой теории поля с работ [102, 115]. В работах Гелл-Манна и Лоу с помощью РГ найдены свойства функций Грина в области больших импульсов и введено представление о неподвижной точке преобразования РГ. Полное исследование группы мультипликативных ренормировок в квантовой теории поля выполнено П. Н. Боголюбовым и Д. В. Ширковым. Предложены функциональные, а также дифференциальные формы уравнений РГ. Введено понятие инвариантных зарядов как инвариантов РГ. На их основе рассмотрена ИК и УФ асимптотика функций Грина [3, 5, 6].

Возможность использования РГ соотношений в статистической теории фазовых переходов связана со свойствами однородности термодинамических функций вблизи критической точки, описанными впервые Б. Уайдомом [123], и с поведением корреляционных функций в области $T \approx T_c$, исследованным Л. П. Кадановым, а также А. В. Паташинским и В. Д. Покровским [49, 50]. Л. П. Каданову принадлежит блестящая гипотеза о том, что если вместо исходной решетки рассматривать блочную, каждый блок в которой состоит из s^3 исходных ячеек¹, то в критической точке гамильтониан блочной решетки можно свести к гамильтониалу исходной решетки с помощью масштабных преобразований [107].

К концу шестидесятых годов применение РГ методов к исследованию фазовых переходов было выполнено рядом исследователей [46, 100, 101].

Наибольшими успехами метод РГ обязан выдающимся работам К. Вильсона. Ему удалось на микроскопическом уровне воплотить гипотезу универсальности Каданова в конкретные дифференциальные уравнения [18]. Кроме того, К. Вильсон получил из исходного гамильтониана Гинзбурга — Ландау явную форму для гамильтонианов блочных структур, составил рекуррентные уравнения, применил масштабные преобразования и метод неподвижной точки для их решения, определил критические индексы термодинамических функций [125] и выполнил чрезвычайно важные численные расчеты [126].

Диаграммный вывод рекуррентной формулы Вильсона дан А. М. Поляковым (см. работу [18]).

Метод неподвижной точки при решении рекуррентных уравнений и способ разбивки фазового пространства на слои, предложенные Вильсоном, использованы в настоящей монографии.

После работ К. Вильсона, Л. П. Каданова, В. Д. Покровского и А. В. Паташинского стало ясно, что в области критической точки в каждой системе возникают некие симметричные свойства. Они выражаются в групповых свойствах гамильтонианов совокупности блочных решеток, которые определенным образом возникают из исходной решетки.

¹ s ($s > 1$) — произвольное положительное число.

Появились серии работ, в которых предлагаются различные способы реализации блочных структур, например децимация узлов и блочное преобразование [103, 109, 110, 112, 114]. Успешно развиваются полевые подходы [122], вариационные методы [108], численные расчеты [114]. Представляют несомненный интерес работы, связанные с использованием разложений по малому параметру: $1/n$ [128], где n — число компонент параметра порядка; ϵ -разложения [127]; $2 + \epsilon$ -разложения [48]; $1 + \epsilon$ -разложения [124]; $\sqrt{\epsilon}$ -разложения [59].

Топологические свойства решений рекуррентных уравнений для последовательности блочных гамильтонианов и их связь с поведением системы в критической точке были основными вопросами в РГ теории. При этом термодинамической устойчивости модели, о которой можно судить по явным выражениям для термодинамических функций², достаточного внимания не уделялось [47].

В настоящей монографии предложена статистическая теория фазовых переходов второго рода. Выкладки выполнены для трехмерной модели Изинга. Вначале (гл. 1) вводится фазовое пространство коллективных переменных (КП). Дело в том, что статистическое описание процесса фазового перехода следует проводить в специфическом для каждой физической модели фазовом пространстве. Среди независимых переменных этого пространства должны быть переменные, связанные с параметрами порядка, отличные от нуля значения которых возникают при температуре ниже критической. Такое фазовое пространство образует множество КП [62], каждая из которых является модой колебаний плотности соответствующего данной модели качества: плотности спинового момента в магнетиках, фурье-образа унарной функции распределения в многокомпонентных сплавах и т. д. Переход от исходного конфигурационного пространства в фазовое пространство КП не является унитарным преобразованием. Замена исходного множества независимых переменных, например спиновых переменных у магнетиков, множеством КП должна сопровождаться введением якобиана перехода.

На основе работ [26, 66, 67] найден якобиан. В показатель экспоненты для плотности меры входит энергия системы $E(\rho)$, заданная на множестве КП. $E(\rho)$ представляет собой бесконечный ряд от произведений все возрастающего числа КП. Разложение фурье-образа потенциала по степеням k^2 приводит $E(\rho)$ к форме, сходной с гамильтонианом Гинзбурга — Ландау [20] и формулами Орнштейна — Цернике [56]. Исследование уравнения Эйлера для этой формы убеждает нас в том, что во множестве КП имеется переменная, связанная с параметром порядка. Показано, что в критической области существует базисная плотность меры, которая, в отличие от гауссовой, имеет в экспоненте вторые и четвертые степени КП. Возникла за-

² Например, если в термодинамике использовать только РГ решения, то теплоемкость в области $T > T_c$ будет отрицательной и кривая при приближении T к T_c отклонится вниз, при этом значении критического индекса α будет соответствовать экспериментальному.

дача интегрирования нулевого приближения статистической суммы. Оно имеет вид функционального интеграла, содержащего в качестве подынтегральной функции четверную плотность меры.

Предложенный в настоящей монографии новый способ интегрирования статистической суммы (гл. II) — основное достижение рассматриваемого метода. Как и в работах [125, 126], интегрирование выполняется по слоям фазового пространства КП постепенно, от слоя к слою. В каждом слое потенциал взаимодействия заменяется соответствующим средним значением. Затем предлагается оригинальный прием, в результате которого фазовое пространство в слое $B/s \leq k < B$ дополняется до полного фазового пространства³. Возникает возможность факторизовать подынтегральную функцию и выполинить интегрирование. Этот прием повторяется от слоя к слою. Постепенно число переменных интегрирования в статистической сумме уменьшается. Возникает последовательность статистических сумм. Каждая следующая из них содержит под интегралом плотность меры, в которой число КП в s^3 раз меньше, чем в предыдущей. Получена рекуррентная формула, связывающая две смежные плотности меры. Наличием промежуточного интегрирования она отличается от рекуррентной формулы Вильсона, в которой связь между двумя смежными формулами обеспечивается за счет слагаемого $\exp(-ax^2y^2)$. Приведенные в монографии разностные рекуррентные уравнения дают возможность определить элементы блочных гамилтонианов по известным начальным данным⁴. Показано, что при $T \geq T_c$ рекуррентные уравнения имеют два решения: первое — для области больших значений волнового вектора k , $k > B_{m_\tau}$, второе — для области малых значений k , $k \leq B_{m_\tau}$. Решение, справедливое в области больших значений k , названо критическим режимом (КР). Это решение — РГ типа, но получено методом неподвижной точки после соответствующей подстановки. Второе решение, справедливое для области малых значений k , приближается к распределению гауссова типа и названо предельным гауссовым режимом (ПГР). Найдена точка сшивания обоих решений $B_{m_\tau} = B/s^{m_\tau}$, где m_τ — число, зависящее от температуры $\tau = (T - T_c)/T_c$. При $T \rightarrow T_c$ $B_{m_\tau} \rightarrow 0$, и решение для всех k содержит только КР. Решения рекуррентных уравнений, выполненные на ЭВМ без привлечения метода неподвижной точки, дали возможность определить также область справедливости решений РГ типа. Предложен критерий, определяющий существование КР.

Рекуррентные уравнения содержат два параметра: температуру системы T и параметр деления фазового пространства на слои s . Параметр s задается, а для критической температуры необходимо найти уравнение. Во второй главе дается также определение критической температуры и приводится уравнение для T_c . Все аналити-

³ $B = \pi/c$ — граница полужоны первой зоны Бриллюэна, c — постоянная решетки.

⁴ Благодаря этому не требуется априорного предположения о линейной зависимости коэффициента c_1 от $(T - T_c)/T_c$, принятого в работе [9].

ческие выкладки сопровождаются конкретными численными расчетами, выполненными для такого $s = s^*$, при котором для специальных функций имеются точные соотношения.

При исследовании зависимости результатов от параметра s показано, что расчеты с точностью до четверной плотности меры справедливы только в определенном интервале значений $s \approx 3$. Интегрирование для значений s , близких к единице, можно выполнять в гауссовом базисе, но с учетом соответствующих членов от шестерной и более высокой формы для плотности меры. При этом получаются результаты, совпадающие с соотношениями Вильсона в методе ϵ -разложения. Эти результаты, справедливые вблизи значений $s \approx 1$, нельзя распространять на $s \geq 2$. Чтобы получить термодинамические функции, слабо зависящие от s , следует основываться на шестерной плотности меры.

В гл. III рассмотрено интегрирование статистической суммы при $T < T_c$. И здесь решения при больших k соответствуют РГ типу. Как и при $T \geq T_c$, в случае $T \leq T_c$ существует область волновых векторов \mathbf{k} , $k < B_\mu = B/s^{\mu\tau}$, в которой решения РГ типа становятся несправедливыми (μ_τ — известная функция τ). В этой области возникают решения гауссова типа, названные инверсным гауссовым режимом (ИГР). Области $k < B_\mu$ соответствует прямая блочная решетка с размерами блоков, равными π/B_μ , и «сглаженная» статистическая сумма, содержащая $N_\mu = Ns^{-3\mu\tau}$ переменных ρ . В каждом блоке имеется отличный от нуля средний спиновый момент. Интегрирование в этой статистической сумме выполнено по всем переменным, кроме переменной ρ_0 , связанной с параметром порядка. Статистическая сумма приведена к однократному интегралу. Подынтегральная функция в экспоненте имеет энергию $E(\rho_0)$, которую можно сопоставить со свободной энергией Ландау. Зависимость коэффициентов в $E(\rho_0)$ от температуры — неаналитическая. Значение величины ρ_0 в точке экстремума ρ_0 функции $E(\rho_0)$ является макроскопической величиной и совпадает со значением среднего момента. Найдена восприимчивость $\chi = (\partial \langle \sigma \rangle / \partial \mathcal{H})_T$, где \mathcal{H} — напряженность внешнего поля, и при $T = T_c$ определена величина $\chi'(\mathcal{H}) = (\partial \langle \sigma \rangle / \partial \mathcal{H})_{T_c}$. При этом, естественно, получены и критические индексы: $\alpha' = 0,140$, $\beta \approx 0,322$, $\gamma' \approx 1,215$, $\delta = 3 + 2(1 - 2\eta)/(1 + \eta) = 4,769$.

Затем анализируются поправки, связанные с усреднением потенциала внутри каждого слоя (гл. IV). При учете этих поправок, потребовавшем терпения и сложных преобразований, получено удовлетворительное значение индекса $\eta = 0,040$. Четко показано, что только при $T = T_c$ возникает универсальное, не зависящее от гамма-миллиона задачи, значение индекса η . При $T \neq T_c$ величина η изменяется от слоя к слою и зависит от формы потенциала.

Основная цель термодинамики фазовых переходов — получение выражений для свободной энергии системы и других термодинамических функций как при $T_c < T$, так и при $T > T_c$. Это сделано в гл. V. При $T \geq T_c$ свободная энергия, внутренняя энергия, энтро-

пия и теплоемкость состоят из двух частей (вкладов от КР и ПГР):

$$F = F_{\text{КР}} + F_{\text{ПГР}}.$$

Ряд сложных вопросов возник при расчете $F_{\text{КР}}$. Оказалось, что область КР, $k > B_{m_1}$, в которой рекуррентные уравнения имеют решения РГ типа, вносит отрицательный вклад в теплоемкость системы. Только тщательный анализ и отбор в формулах для свободной энергии выражений, соответствующих условию существования нетривиальной неподвижной точки в рекуррентных уравнениях, позволил получить удовлетворительные результаты для теплоемкости. При $T < T_c$ свободная энергия состоит из трех частей:

$$F = F_{\text{КР}} + F_{\text{ИГР}} + F_{\langle \sigma \rangle}.$$

Здесь $F_{\langle \sigma \rangle}$ — свободная энергия упорядочения, которая возникает в результате интегрирования по коллективной переменной ρ_0 , связанной с параметром порядка. Среднее значение этой переменной оказалось макроскопической величиной (равной координате экстремума плотности меры). Вычисление термодинамических функций показало, что уменьшение энтропии при понижении температуры связано с неожиданными эффектами. Оказалось, что РГ ветвь решений (КР) приводит к возрастанию соответствующей ей ветви энтропии при удалении от критической точки влево, в область низких температур. Это возрастание энтропийной ветви остается и при учете вклада от ИГР. Падение полной энтропии с понижением температуры при $T < T_c$ обеспечивается за счет возникновения упорядочения. Рассчитаны и приведены кривые для энтропии и теплоемкости. Обобщению метода КР на разные модели посвящена шестая глава. Рассмотрена n -компонентная модель Стенли. Введены n -компонентные КР. Рассчитан якобиан. Проинтегрирована статистическая сумма. Исследованы рекуррентные соотношения. Показано, что критический индекс ν корреляционной функции медленно растет с увеличением числа компонент n .

Представляет интерес модель сегнетоэлектрика. Ее гамильтониан содержит некоммутирующие между собой операторы, описывающие далеко- и короткодействующее взаимодействия. Впервые удалось выразить множество КР через операторы Хаббарда для кластера, объединяющего группу частиц, связанных короткодействующими взаимодействиями. Дальнодействующее взаимодействие также выражается через КР, зависящие от волнового вектора и частоты. Найден якобиан перехода, в котором усреднение проводится по системе невзаимодействующих кластеров. Затем выделяется ветка фазового пространства КР, связанная с фазовым переходом, и после перенормировки задача приводится к выкладкам, рассмотренным в предшествующих главах для модели Изинга. Эти результаты легко переносятся на модель Гейзенберга.

Несомненный интерес представляет проблема фазового перехода в сплавах. Рассмотрена специфика задачи для бинарного сплава замещения. Здесь у коллективной переменной, связанной с параметром порядка, индекс k^* не равен нулю. При этом значении $k = k^*$

потенциал взаимодействия имеет абсолютный минимум. Доказано, что в бинарных сплавах замещения, гамма-функции которых состоит из суммы парных взаимодействий, имеет место фазовый переход второго рода независимо от того, есть или нет тройной член в энергии, заданной в представлении КП. В каждой из трех рассмотренных проблем задача о фазовом переходе сведена к подробно изученной модели Изинга.

В монографии рассмотрен ряд вопросов, имеющих эвристическую ценность (гл. VII). Чтобы доказать, что РГ симметрия является объективно существующим свойством в системах в окрестности критической точки, предпринят «специфический» способ деления фазового пространства на слои. При $T < T_c$ ищется блочная структура, в каждом блоке которой существует отличный от нуля средний момент. Здесь параметр деления s является переменной величиной, зависящей от номера слоя. Тем не менее установлено наличие РГ симметрии при $T \rightarrow T_c$.

Рассмотрены также две дифференциальные формы рекуррентных уравнений. Одна из них связана с высокотемпературным разложением, дифференцирование здесь выполняется по $\beta = 1/kT$. Другая, справедливая в области значений s , близких к единице, имеет производные по параметру $t = \ln s$. Получены дифференциальные уравнения Ли для группы непрерывных преобразований. Найдена сходящаяся форма для функции Гелл-Манна — Лоу, построены кривые этой важной функции.

Отдельные главы и параграфы книги представляют оригинальный материал и печатаются впервые. Это относится, например, к гл. IV, в которой рассчитана важная поправка, связанная с усреднением потенциала в слоях. Вопрос об усреднении функций в фазовом слое является в некотором смысле принципиальным в методах равновесной статистической физики. В зависимости от того, усреднять в слое или не усреднять, возникают два возможных способа статистического расчета термодинамических функций. Если усреднять нельзя, интегрирование статистической суммы выполняется при помощи гауссовой плотности меры. В результате возникают вириальные разложения. Если же усреднение в слое возможно, переменные в функциональном интеграле удается разделить, а статистическую сумму свести к произведению парциальных статистических сумм фазовых слоев. Задача для фазового слоя может быть решена точно, без вириальных рядов. Этот вопрос представляет несомненный интерес и ждет решения.

ФАЗОВОЕ ПРОСТРАНСТВО КОЛЛЕКТИВНЫХ ПЕРЕМЕННЫХ

§ 1. МОДЕЛЬ ИЗИНГА. ГАМИЛЬТониАН

Рассмотрим систему частиц, расположенных в узлах идеальной кристаллической решетки (простой кубической с периодом c). Состояние каждой частицы определяется собственным значением z -компоненты ее спина, которое может быть равным либо $+1$ (ориентирован вверх), либо -1 (вниз). Гамильтониан системы имеет вид

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{j}, \mathbf{l}} \Phi(|\mathbf{j} - \mathbf{l}|) \sigma_{\mathbf{j}} \sigma_{\mathbf{l}}. \quad (1.1)$$

Здесь $\Phi(|\mathbf{j} - \mathbf{l}|)$ — потенциал обменного взаимодействия для частиц в узлах \mathbf{j} и \mathbf{l} ; $\sigma_{\mathbf{j}}$ — оператор z -компоненты спина в \mathbf{j} -м узле. В качестве потенциала $\Phi(|\mathbf{j} - \mathbf{l}|)$ можно рассматривать произвольную положительную функцию, принадлежащую к классу L_2 , например экспоненциально убывающий потенциал, соответствующий обменному взаимодействию,

$$\Phi(r) = A_0 e^{-r/b} \quad (1.2)$$

(здесь A_0 — постоянная, r — расстояние между частицами, b — радиус эффективного взаимодействия) или широко известный потенциал взаимодействия между ближайшими соседями

$$\Phi(|\mathbf{j} - \mathbf{l}|) = \begin{cases} J & \text{для } \mathbf{l} = \mathbf{j} + \hat{\mathbf{i}}, \\ 0 & \text{для } \mathbf{l} \neq \mathbf{j} + \hat{\mathbf{i}}, \end{cases}$$

где $\hat{\mathbf{i}}$ — набор единичных векторов, направленных вдоль осей простой кубической решетки:

$$\hat{\mathbf{i}} = \mathbf{i}_0, -\mathbf{i}_0; \mathbf{j}_0, -\mathbf{j}_0; \mathbf{k}_0, -\mathbf{k}_0.$$

Пусть $V = Nc^3$ — объем периодичности, N — число частиц в объеме V , $\pi/c = B$ — полузона первой зоны Бриллюэна. Разложение Фурье имеет вид

$$\Phi(r) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}), \quad (1.3)$$

где $\tilde{\Phi}(\mathbf{k})$ — фурье-образ потенциала $\Phi(r)$. Волновой вектор \mathbf{k} (k_x, k_y, k_z) пробегает все значения внутри первой зоны Бриллюэна:

$$k_i = 2\pi n_i / N'c, \quad i = x, y, z; \quad (1.4)$$

здесь n_i — целые числа, $-N'/2 \leq n_i < N'/2$, $(N')^3 = N$. Для потенциала $\Phi(r) = A_0 \exp(-r/b)$ фурье-образ $\tilde{\Phi}(k)$ имеет вид

$$\Phi(k) = \sum_n A_0 \frac{b^3}{c^3} \frac{8\pi}{[1 + b^2(k + 2nB)^2]^2}, \quad (1.5)$$

где \mathbf{n} — вектор кубической решетки с периодом 1: $\mathbf{n} = n_x \mathbf{i}_0 + n_y \mathbf{j}_0 + n_z \mathbf{k}_0$. Для потенциала, характеризующего взаимодействие между ближайшими соседями,

$$\tilde{\Phi}(k) = 2J (\cos k_x c + \cos k_y c + \cos k_z c). \quad (1.6)$$

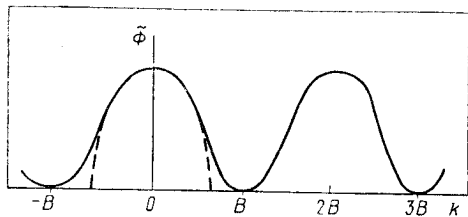


Рис. 2. Фурье-образ потенциала межчастичного взаимодействия как функция k .

Оба потенциала, (1.5) и (1.6), являются периодическими для кубической решетки с периодом $2B$. В дальнейшем будем рассматривать потенциал (1.5), представленный на рис. 2. В конкретных выкладках ограничимся для $\tilde{\Phi}(k)$ параболической аппроксимацией, выполненной вбли-

зи $k = 0$. Для этого разложим $\tilde{\Phi}(k)$ в ряд по степеням k^2 :

$$\tilde{\Phi}(k) = \tilde{\Phi}(0) - pk^2 + tk^4 - \dots, \quad (1.7)$$

где

$$\tilde{\Phi}(0) = A_0 \frac{b^3}{c^3} \sum_n \frac{8\pi}{[1 + b^2 n^2 (2B)^2]^2};$$

$$p = A_0 \frac{b^3}{c^3} 8\pi \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2b^2}{(1 + b^2 n^2 (2B)^2)^3} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4b^4 (2B)^2 n^2}{(1 + b^2 n^2 (2B)^2)^4} \right]; \quad (1.8)$$

$$p \approx 2b^2 \tilde{\Phi}(0).$$

Минимум потенциала (1.5) достигается на границе зоны Бриллюэна в точках $k_i = (2n + 1)B$. В этих точках $\tilde{\Phi}(B)$ меньше $\tilde{\Phi}(0)$ на величину порядка

$$\frac{\tilde{\Phi}(B)}{\tilde{\Phi}(0)} \approx \frac{1}{(1 + b^2 B^2)^2}. \quad (1.9)$$

Определим B' — точку пересечения параболы (1.7) с прямой $\tilde{\Phi}(k) = \tilde{\Phi}(B)$:

$$\tilde{\Phi}(B) = \tilde{\Phi}(0) - pB'^2;$$

$$B'^2 \approx \left[\tilde{\Phi}(0) \left(1 - \frac{1}{(1 + b^2 B^2)^2} \right) \right] p^{-1} \approx \frac{B^2}{(1 + b^2 B^2)^2}. \quad (1.10)$$

Теперь вместо потенциала (1.5) рассмотрим его параболическую аппроксимацию (см. рис. 2):

$$\tilde{\Phi}(k) = \begin{cases} \tilde{\Phi}(0) - pk^2, & 0 \leq k \leq B', \\ \tilde{\Phi}(B), & B' < k \leq B. \end{cases} \quad (1.11)$$

Потенциал (1.2) или (1.5) является весьма общей формой для всех потенциалов короткодействующего типа.

Во многих задачах физики при решении проблемы фазового перехода получается модельный гамильтониан типа гамильтониана Изинга. Так, например, в задаче о фазовом переходе беспорядок — порядок в бинарном сплаве, состоящем из компонентов A и B , исходным является гамильтониан вида

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha=A,B, \\ \beta=A,B, \\ j,l}} \Phi_{\alpha\beta}(j-l) f_{\alpha}(j) f_{\beta}(l) + \mu_A N_A + \mu_B N_B, \quad (1.12)$$

где $\Phi_{\alpha\beta}$ — потенциалы межчастичного взаимодействия Φ_{AA} , Φ_{AB} , Φ_{BB} ; $f_{\alpha}(j) = 1$, если частица сорта α находится в узле j ; $f_{\alpha}(j) = 0$, если частицы сорта α нет в узле j ; μ_A и μ_B — химические потенциалы.

Можно ввести спиновые матрицы $\sigma_j = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$; тогда для двух-компонентной системы

$$f_A(j) = \frac{1 + \sigma_j}{2}, \quad f_B(j) = \frac{1 - \sigma_j}{2}; \quad (1.13)$$

$$\mu_A N_A = \mu_A \sum_j f_A(j) = \frac{1}{2} \mu_A N + \frac{1}{2} \mu_A \sum_j \sigma_j, \quad (1.14)$$

$$\mu_B N_B = \mu_B \sum_j f_B(j) = \frac{1}{2} \mu_B N - \frac{1}{2} \mu_B \sum_j \sigma_j.$$

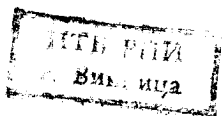
Для гамильтониана получаем

$$H = \frac{1}{8} \sum_{\alpha,\beta} \sum_{j,l} \Phi_{\alpha\beta}(j-l) + \frac{1}{2} N (\mu_A + \mu_B) + \sum_j h \sigma_j + \frac{1}{8} \sum_{j,l} (\Phi_{AA}(j-l) - 2\Phi_{AB}(j-l) + \Phi_{BB}(j-l)) \sigma_j \sigma_l, \quad (1.15)$$

где

$$h = \frac{1}{2} (\mu_A - \mu_B) + \frac{1}{8} \sum_j [\Phi_{AA}(1-j) + \Phi_{AB}(1-j) - \Phi_{BA}(1-j) - \Phi_{BB}(1-j)]. \quad (1.16)$$

Следовательно, гамильтониан содержит «спиновое взаимодействие», энергию спинов в поле h и потенциал, зависящий только от координат частиц. В общем случае, как показано в работах [24, 89], такой гамильтониан содержит, кроме парных, и многочастичные взаимодействия.



Можно привести и другие примеры физических моделей, в которых имеет место фазовый переход второго рода и гамильтонианы которых сводятся к гамильтониану модели Изинга (см. гл. VI).

§ 2. СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Фазовый переход, являющийся равновесным процессом, полностью описывается характеристической функцией термодинамики. В качестве независимых переменных примем температуру T , объем V и внешнее поле \mathcal{H} . Все равновесные свойства системы будут определяться ее свободной энергией $F = F(T, V, \mathcal{H})$. В рассматриваемой задаче $V = Nc^3$, где c — постоянная решетки — величина, считающаяся заданной. Положим $\mathcal{H} = 0$. Тогда единственной переменной является температура системы T . (Вообще-то, вводить в свободную энергию добавочные переменные типа параметров порядка нельзя.)

Как известно, свободная энергия системы выражается через статистическую сумму Z :

$$F = -kT \ln Z, \quad Z = \text{Sp} \exp(-\beta H), \quad (2.1)$$

где Sp обозначает операцию суммирования по всем спиновым состояниям системы; k — постоянная Больцмана; $\beta = (kT)^{-1}$. Зная свободную энергию, находим энтропию и средний момент:

$$-S = (\partial F / \partial T)_{\mathcal{H}}, \quad N \langle \sigma \rangle = (\partial F / \partial \mathcal{H})_T; \quad (2.2)$$

внутреннюю энергию:

$$U = F - T (\partial F / \partial T)_{\mathcal{H}}; \quad (2.3)$$

затем теплоемкость и восприимчивость:

$$c_V = (\partial U / \partial T)_{\mathcal{H}}, \quad \chi = (\partial \langle \sigma \rangle / \partial \mathcal{H})_T, \quad (2.4)$$

а также бинарную корреляционную функцию:

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = \frac{\delta F}{\delta \Phi_{12} | 1 - 2 |}. \quad (2.5)$$

Для успешного описания фазового перехода необходимо удовлетворить некоторые предварительные условия. Во-первых, определить, в чем состоит явление фазового перехода. В данном случае при температуре ниже критической в системе спонтанно возникает отличный от нуля средний момент $\langle \sigma \rangle$:

$$\left(\langle \sigma \rangle = N^{-1} \sum_i \langle \sigma_i \rangle \right) \quad \langle \sigma \rangle = \begin{cases} 0, & T \geq T_c, \\ f(\tau), & T \leq T_c, \end{cases} \quad \tau = \frac{T - T_c}{T_c}. \quad (2.6)$$

Во-вторых, найти правильное фазовое пространство. Множество N независимых переменных этого пространства $\{\rho_k\}^N$ содержит переменную ρ_0 , относительно которой при переходе через критическую точку происходит смещение максимума функции распределения. Индекс 0 этой переменной должен соответствовать точке максимума потенциала взаимодействия $\tilde{\Phi}(k)$, а сама переменная должна быть

связана со средним значением $\langle \sigma \rangle$. Такими переменными, как будет доказано ниже, являются моды колебаний плотности спинового момента. Обозначим их $\rho_{\mathbf{k}}$, где \mathbf{k} пробегает N значений внутри первой зоны Бриллюэна.

Во многих самых различных по характеру физических задачах, в которых взаимодействие между частицами описывается потенциалами, представимыми в форме обобщенных разложений Фурье, легко найти соответствующую заданной задаче систему коллективных переменных (см. гл. VI).

§ 3. МНОЖЕСТВО КОЛЛЕКТИВНЫХ ПЕРЕМЕННЫХ

Рассмотрим следующие операторы колебаний спиновой плотности [26, 60—62, 67—69, 73]:

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^c &= (V\bar{N})^{-1} \sum_{\mathbf{l}} \cos(\mathbf{k}\mathbf{l}) \sigma_{\mathbf{l}}; \\ \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^s &= (V\bar{N})^{-1} \sum_{\mathbf{l}} \sin(\mathbf{k}\mathbf{l}) \sigma_{\mathbf{l}}; \\ \hat{\rho}_0 &= (V\bar{N})^{-1} \sum_{\mathbf{l}} \sigma_{\mathbf{l}};\end{aligned}\tag{3.1}$$

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^c = \hat{\rho}_{-\mathbf{k}}^c; \quad \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^s = -\hat{\rho}_{-\mathbf{k}}^s; \quad \hat{\rho}_{\mathbf{k}+n2B}^c = \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^c; \quad \hat{\rho}_{\mathbf{k}+n2B}^s = \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^s.$$

КП $\rho_{\mathbf{k}}^c$, $\rho_{\mathbf{k}}^s$, ρ_0 определим с помощью соотношений типа аналитического функционала:

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^c &= \int \rho_{\mathbf{k}}^c J(\rho - \hat{\rho}) (d\rho)^N; \\ \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^s &= \int \rho_{\mathbf{k}}^s J(\rho - \hat{\rho}) (d\rho)^N; \\ \hat{\rho}_0 &= \int \rho_0 J(\rho - \hat{\rho}) (d\rho)^N,\end{aligned}\tag{3.2}$$

где $J(\rho - \hat{\rho})$ — оператор перехода:

$$J(\rho - \hat{\rho}) = \left[\prod_{\mathbf{k}}' \delta(\rho_{\mathbf{k}}^c - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^c) \delta(\rho_{\mathbf{k}}^s - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^s) \right] \delta(\rho_0 - \hat{\rho}_0).\tag{3.3}$$

Штрих означает, что произведение по \mathbf{k} осуществляется в верхнем полукубе и что $k \neq 0$; $(d\rho)^N$ — элемент объема:

$$(d\rho)^N = d\rho_0 \prod_{\mathbf{k}}' d\rho_{\mathbf{k}}^c d\rho_{\mathbf{k}}^s.\tag{3.4}$$

Согласно (3.4) положим

$$\rho_{\mathbf{k}}^c = \rho_{-\mathbf{k}}^c; \quad \rho_{\mathbf{k}}^s = -\rho_{-\mathbf{k}}^s.\tag{3.5}$$

В справедливости соотношений (3.2) легко убедиться, если вместо δ -функций подставить их интегральную форму

$$\begin{aligned}J(\rho - \hat{\rho}) &= \int (d\omega)^N \exp \left\{ i2\pi \left[\omega_0 (\rho_0 - \hat{\rho}_0) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \sum_{\mathbf{k}}' (\omega_{\mathbf{k}}^c (\rho_{\mathbf{k}}^c - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^c) + \omega_{\mathbf{k}}^s (\rho_{\mathbf{k}}^s - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^s)) \right] \right\},\end{aligned}\tag{3.6}$$

где

$$(d\omega)^N = d\omega_0 \prod_k' d\omega_k^c d\omega_k^s. \quad (3.7)$$

Так, например, для первого из соотношений (3.2) имеем

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{k_1}^c &= \int \rho_{k_1}^c \int d\omega_{k_1} \exp [i2\pi\omega_{k_1}^c (\rho_{k_1}^c - \hat{\rho}_{k_1}^c)] d\rho_{k_1}^c = \\ &= \int e^{-i2\pi\omega_{k_1}^c \hat{\rho}_{k_1}^c} \frac{1}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \omega_{k_1}^c} \delta(\omega_{k_1}^c) d\omega_{k_1}^c = \\ &= -\frac{1}{2\pi i} \int \delta(\omega_{k_1}^c) \frac{\partial}{\partial \omega_{k_1}^c} \exp [-i2\pi\omega_{k_1}^c \hat{\rho}_{k_1}^c] d\omega_{k_1}^c. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Переменные ω_k^c , ω_k^s , ω_0 являются сопряженными с ρ_k^c , ρ_k^s , ρ_0 . Введем для удобства выкладок и комплексные переменные

$$\rho_k = \rho_k^c - i\rho_k^s, \quad (3.9)$$

соответствующие операторам

$$\hat{\rho}_k = \hat{\rho}_k^c - i\hat{\rho}_k^s, \quad (3.10)$$

а также комплексные сопряженные переменные

$$\omega_k = \frac{1}{2} (\omega_k^c + i\omega_k^s). \quad (3.11)$$

Запишем гамильтониан (1.1) в представлении КП:

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{2} \sum_k \frac{1}{N} \sum_{j,l} \tilde{\Phi}(k) (\exp ik(j-l)) \sigma_j \sigma_l = -\frac{1}{2} \sum_k \tilde{\Phi}(k) \hat{\rho}_k \hat{\rho}_{-k} = \\ &= -\frac{1}{2} \sum_k \tilde{\Phi}(k) \int \rho_k \rho_{-k} J(\rho - \hat{\rho}) (d\rho)^N. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Для статистического оператора $e^{-\beta H}$ имеем

$$\exp(-\beta H) = \int \left(\exp \frac{1}{2} \sum_k \beta \tilde{\Phi}(k) \rho_k \rho_{-k} \right) J(\rho - \hat{\rho}) (d\rho)^N, \quad (3.13)$$

где $J(\rho - \hat{\rho})$ задается формулой (3.6). С помощью переменных ρ_k и ω_k выражение для $J(\rho - \hat{\rho})$ можно записать в более компактной форме:

$$J(\rho - \hat{\rho}) = \int \exp \left[i2\pi \sum_k \omega_k (\rho_k - \hat{\rho}_k) \right] (d\omega)^N. \quad (3.14)$$

Действительно,

$$\begin{aligned} \sum_k \omega_k \rho_k &= \frac{1}{2} \sum_k (\omega_k^c + i\omega_k^s) (\rho_k^c - i\rho_k^s) + \omega_0 \rho_0 = \\ &= \sum_k' (\omega_k^c \rho_k^c + \omega_k^s \rho_k^s) + \omega_0 \rho_0 \end{aligned}$$

и

$$\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}} = (\rho_{\mathbf{k}}^c)^2 + (\rho_{\mathbf{k}}^s)^2.$$

Суммируя выражение (3.13) по спиновым состояниям, получаем статистическую сумму системы

$$Z = \text{Sp } e^{-\beta H} = \int \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta \tilde{\Phi}(k) \rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}}\right) J(\rho) (d\rho)^N. \quad (3.15)$$

Выражение

$$J(\rho) = \text{Sp } J(\rho - \hat{\rho}) \quad (3.16)$$

представляет собой якобиан перехода от множества спиновых переменных к множеству КП. Заметим, что все якобианы можно выразить в форме (3.16). Например, при переходе от декартовой системы координат x, y к полярной $x = \rho \cos \varphi, y = \rho \sin \varphi$ якобиан перехода

$$J(\rho\varphi) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \delta(\rho - \sqrt{x^2 + y^2}) \delta(\varphi - \text{arctg } y/x) = \rho.$$

В формуле (3.15) $\rho_{\mathbf{k}}^c, \rho_{\mathbf{k}}^s, \rho_0$ являются простыми переменными, каждая из которых принимает все действительные значения от $-\infty$ до ∞ .

§ 4. ЯКОБИАН ПЕРЕХОДА К КОЛЛЕКТИВНЫМ ПЕРЕМЕННЫМ

Подставим в формулу (3.16) явное значение функции перехода $J(\rho - \hat{\rho})$, заданное формулой (3.14):

$$\begin{aligned} J(\rho) &= \text{Sp} \int \exp\left[i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} (\rho_{\mathbf{k}} - \hat{\rho}_{\mathbf{k}})\right] (d\omega)^N = \\ &= \int \exp\left(i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}\right) \text{Sp} \exp\left(-i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}}\right) (d\omega)^N; \\ J(\rho) &= \int \exp\left(i2\pi \sum_{\mathbf{k} \leq B} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}\right) \prod_{\mathbf{l}} 2 \text{ch} \left[2\pi i \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{l}) \omega_{\mathbf{k}}\right] (d\omega)^N. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Якобиан $J(\rho)$ всегда будем представлять в экспоненциальной форме. Целесообразно подынтегральное выражение (4.1) также представить в экспоненциальной форме. Переменные $\omega_{\mathbf{k}}$ сопряжены с переменными $\rho_{\mathbf{k}}$, и их можно рассматривать как величины, связанные с модами колебаний напряженности внутреннего поля.

Выполним в (4.1) замену переменных, введя новые переменные $\tilde{\omega}_1$ и $\tilde{\rho}_1$, связанные с $\omega_{\mathbf{k}}$ и $\rho_{\mathbf{k}}$ соотношениями

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}_1 &= (\sqrt{N})^{-1} \sum_{\mathbf{k} \leq B} \omega_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{l}); \\ \tilde{\rho}_1 &= (\sqrt{N})^{-1} \sum_{\mathbf{k} \leq B} \rho_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{l}). \end{aligned} \quad (4.2)$$

Такая замена поможет разделить переменные интегрирования в выражении (4.1) для якобиана $J(\rho)$, и тогда

$$J(\rho) = V\sqrt{2}^{(N-1)} \prod_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{\omega}_1 \exp(i2\pi\tilde{\omega}_1\tilde{\rho}_1) 2 \operatorname{ch}(i2\pi\tilde{\omega}_1). \quad (4.3)$$

Множитель $V\sqrt{2}^{(N-1)}$ равен якобиану преобразования (4.2) при переходе в (4.1) от ω_k к $\tilde{\omega}_1$, так что

$$(d\omega)^N \equiv d\omega_0 \prod_k d\omega_k^c d\omega_k^s = V\sqrt{2}^{(N-1)} \prod_1 d\tilde{\omega}_1. \quad (4.4)$$

Для $\operatorname{ch}(\dots)$ запишем кумулянтную форму

$$\operatorname{ch}(i2\pi\tilde{\omega}_1 + h') = \exp \sum_{n \geq 0} \tilde{D}_n(\tilde{\omega}), \quad (4.5)$$

где

$$\tilde{D}_n(\tilde{\omega}) = (i2\pi)^n \frac{1}{n!} \mathfrak{M}_n(h') \tilde{\omega}_1^n;$$

$$\tilde{D}_0 = \mathfrak{M}_0(h') = \ln \operatorname{ch} h';$$

$$\mathfrak{M}_1 = \partial \mathfrak{M}_0 / \partial h' = \operatorname{th} h' = x;$$

$$\mathfrak{M}_2 = \partial^2 \mathfrak{M}_0 / \partial (h')^2 = 1 - \operatorname{th}^2 h' = y; \quad (4.6)$$

$$\mathfrak{M}_3 = -2xy;$$

$$\mathfrak{M}_4 = -2y^2 + 4x^2y;$$

$$\mathfrak{M}_5 = 16xy^2 - 8x^3y;$$

$$\mathfrak{M}_6 = 16y^3 - 88x^2y^2 + 16x^4y;$$

.....

В случае $h' = 0$

$$\mathfrak{M}_0 = \mathfrak{M}_1 = \mathfrak{M}_3 = \dots = \mathfrak{M}_{2n+1} = 0, \quad (4.7)$$

$$\mathfrak{M}_2 = 1, \quad \mathfrak{M}_4 = -2, \quad \mathfrak{M}_6 = 16.$$

Подставляем (4.5) и (4.7) в (4.3), тогда

$$J(\rho) = V\sqrt{2}^{(N-1)} 2^N \prod_1 J_1(\tilde{\rho}_1), \quad (4.8)$$

где

$$J_1(\tilde{\rho}_1) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{\omega}_1 \exp\left(i2\pi\tilde{\omega}_1\tilde{\rho}_1 + \sum_{n \geq 0} \tilde{D}_n(\tilde{\omega}_1)\right). \quad (4.9)$$

В переменных ρ_k, ω_k

$$J(\rho) = 2^N \int (d\omega)^N \exp\left[i2\pi \sum_k \omega_k \rho_k + \sum_{n \geq 0} D_n(\omega)\right], \quad (4.10)$$

где

$$D_n(\omega) = \frac{(i2\pi)^n}{n!} \frac{\mathfrak{M}_n}{V\sqrt{N}^{(n-2)}} \sum_{k_1, \dots, k_n} \omega_{k_1} \dots \omega_{k_n} \delta_{k_1 + \dots + k_n}. \quad (4.11)$$

В выражении (4.8) переменные интегрирования разделяются. В результате получаются однократные интегралы (4.9). В сумме $\sum_{n \geq 0} \tilde{D}_n(\omega)$ согласно (4.7) все коэффициенты при $\tilde{\omega}_1^{2n}$ отрицательны:

$$\sum_{n \geq 0} \tilde{D}_n(\tilde{\omega}) = -\frac{(2\pi)^2}{2!} \tilde{\omega}_1^2 - \frac{(2\pi)^4}{4!} 2\tilde{\omega}_1^4 - \frac{(2\pi)^6}{6!} 16\tilde{\omega}_1^6 - \dots \quad (4.12)$$

и, таким образом, интеграл (4.9) всегда существует. Аналитическое интегрирование по $\tilde{\omega}_1$ в (4.9) можно выполнить только в определенных приближениях для суммы $\sum_n \tilde{D}_n(\tilde{\omega})$. Так как интеграл в (4.9) является однократным, то расчет $J_I(\rho)$ можно сделать и на ЭВМ со сколь угодно большой степенью точности. В обоих случаях получается следующее общее выражение:

$$J_I(\tilde{\rho}) = C \exp - \sum_{n \geq 1} \frac{a_{2n}}{(2n)!} (\tilde{\rho}_1)^{2n}. \quad (4.13)$$

В переменных ρ_k , где согласно (4.2)

$$\sum_I (\tilde{\rho}_1)^{2n} = V \bar{N}^{-(n-2)} \sum_{k_1, \dots, k_{2n}} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_{2n}} \delta_{k_1 + \dots + k_{2n}},$$

якобиан $J(\rho)$ имеет вид

$$J(\rho) = 2^N V \bar{2}^{N-1} C_0^N \times \\ \times \exp \left[- \sum_{n \geq 1} \frac{a_{2n}}{(2n)!} V \bar{N}^{(2-n)} \sum_{k_1, \dots, k_{2n}} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_{2n}} \delta_{k_1 + \dots + k_{2n}} \right], \quad (4.14)$$

где

$$C_0 = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tilde{\omega}) d\tilde{\omega} = \exp(a_0); \quad (4.15)$$

$$f(\tilde{\omega}) = \exp \sum_{n \geq 1} \tilde{D}_n(\tilde{\omega}). \quad (4.16)$$

Введем обозначение

$$C_{2l} = (2\pi)^{2l} C_0^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\omega}^{2l} f(\tilde{\omega}) d\tilde{\omega}. \quad (4.17)$$

Для коэффициента a_2 на основании (4.13) и (4.9) находим

$$a_2 = - \left(\frac{\partial^2 \ln J_I(\tilde{\rho}_1)}{\partial \tilde{\rho}_1^2} \right)_{\tilde{\rho}_1=0} = C_2; \\ a_2 = - 2C_0^{-1} \frac{\partial C_2}{\partial \tilde{\omega}_1^2}. \quad (4.18)$$

a_{2l}	$t_2(\tilde{\omega})$	$f_4(\tilde{\omega})$	$f_6(\tilde{\omega})$	$f_8(\tilde{\omega})$	$f_{10}(\tilde{\omega})$
a_2	1,0000	0,6449	0,5586	0,5234	0,5055
a_4	0,0000	0,1826	0,1845	0,1819	0,1800
a_6	0,0000	0,3514	0,3629	0,3588	0,3552
a_8	0,0000	1,5766	1,6485	1,6270	1,6075
a_{10}	0,0000	12,4652	13,1794	12,9741	12,7856

Подобным образом находим значения и для коэффициентов a_4 и a_6 :

$$a_4 = - \left(\frac{\partial^4 \ln J_l(\tilde{\rho}_1)}{\partial \tilde{\rho}_1^4} \right)_{\tilde{\rho}_1=0} = -C_4 + 3(C_2)^2, \quad (4.19)$$

$$a_4 = \left[3(a_2)^2 - C_0^{-1} \frac{\partial^2 C_0}{\partial \mathfrak{M}_2^2} \right];$$

$$a_6 = - \left(\frac{\partial^6 \ln J_l(\tilde{\rho}_1)}{\partial \tilde{\rho}_1^6} \right)_{\tilde{\rho}_1=0} = C_6 - 15C_2C_4 + 30(C_2)^3, \quad (4.20)$$

$$a_6 = 8 \left[-C_0^{-1} \frac{\partial^3 C_0}{\partial \mathfrak{M}_2^3} + 15C_0^{-1} \frac{\partial C_0}{\partial \mathfrak{M}_2} C_0^{-1} \frac{\partial^2 C_0}{\partial \mathfrak{M}_2^2} - \right. \\ \left. - 30 \left(C_0^{-1} \frac{\partial C_0}{\partial \mathfrak{M}_2} \right)^3 \right];$$

$$a_{2l} = C_{2l} - \left[\frac{(2l)!}{(2l-2)!2!} C_{2l-2}C_2 + \frac{(2l)!}{(2l-4)!4!} C_{2l-4}C_4 + \dots \right. \\ \left. \dots + \frac{(2l)!}{(2l-2m)!(2m)!} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{l=2m} \right)_{2m \leq l} C_{2l-2m}C_{2m} \right] + \\ + 2! \left[\frac{(2l)!}{2!(2l)^2(2l-4)!} (C_2)^2 C_{2l-4} + \frac{(2l)!}{(2l)(4!)(2l-6)!} C_2C_4C_{2l-6} + \dots \right. \\ \left. \dots + \frac{(2l)!}{(2l)(4!)^2(2l-8)!} (C_4)^2 C_{2l-8} + \frac{(2l)!}{(4!)(6!)(2l-10)!} C_4C_6C_{2l-10} + \dots \right] - \\ - 3! \left[\frac{(2l)!}{3!(2l)^3(2l-6)!} (C_2)^3 C_{2l-6} + \dots \right] + \dots \\ \dots + (-1)^{l-1} (l-1)! \frac{(2l)!}{(2l)^n (l!)} (C_2)^l. \quad (4.21)$$

В табл. 1 приведены значения коэффициентов a_2, a_4, a_6, \dots , полученные в разных приближениях для функции $f(\tilde{\omega})$, заданной формулами (4.11) и (4.16) [43, 52, 69, 73], причем $f_2(\tilde{\omega}) = \exp\left(-\frac{(2\pi)^2}{2} \mathfrak{M}_2 \tilde{\omega}^2\right)$;

$$f_{2n}(\tilde{\omega}) = \exp \left[-\frac{(2\pi)^2}{2} \mathfrak{M}_2 \tilde{\omega}^2 - \dots - \frac{(2\pi)^{2n}}{(2n)!} \mathfrak{M}_{2n} \tilde{\omega}^{2n} \right].$$

Видно, что гауссова форма для $f_2(\tilde{\omega})$ соответствует только гауссовой форме для $J(\tilde{\rho})$. Для четверного приближения $f(\tilde{\omega}) \approx f_4(\tilde{\omega})$ в выражении для $J(\tilde{\rho})$ в экспоненте получаем бесконечный ряд по степеням ρ_1 ; такой же ряд имеет место и для более полных выражений для $f(\tilde{\omega})$: $f_6(\tilde{\omega})$, $f_8(\tilde{\omega})$, ... Интересно, однако, что значения коэффициентов a_{2n} слабо зависят от приближения $f_m(\tilde{\omega})$ для $m > 6$, причем при $m = 6$ a_4 , a_6 , ... принимают максимальные значения.

§ 5. ИСХОДНЫЕ ВЫРАЖЕНИЯ

Полученные в предыдущем параграфе явные выражения для якобиана $J(\rho)$, заданные формулами (4.8), (4.10), (4.13) и (4.14), позволяют найти явное значение подынтегральной функции в формуле (3.15) для статистической суммы Z . Так, в случае (4.14), когда якобиан представляется как явная функция ρ , получаем

$$Z = C \int \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} d(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{4!} N^{-1} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4} a_4 \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} - \frac{1}{6!} N^{-2} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_6} a_6 \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_6} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_6} \dots \right] (d\rho)^N, \quad (5.1)$$

где

$$d(\mathbf{k}) = a_2 - \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}); \quad (5.2)$$

$$C = 2^N \sqrt{2}^{N-1} C_0^N. \quad (5.3)$$

Иногда удобно использовать интегральную форму (4.10) для $J(\rho)$. В этом случае

$$Z = 2^N \int \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right] \times \exp \left[i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} + \sum_{n \geq 1} D_n(\omega) \right] (d\rho)^N (d\omega)^N. \quad (5.4)$$

Здесь выражение $\exp \left(\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right)$ можно заменить интегралом Фурье вдоль оси $(-i\infty, i\infty)$:

$$\exp \left[\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right] = \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}))^{-1} \varphi_{\mathbf{k}} \varphi_{-\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \right] \times \times (d\varphi)^N \left\{ \prod_{\mathbf{k}} [\pi \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})]^{-1/2} \right\} \sqrt{2}^{-1}, \quad (5.5)$$

где

$$\varphi_{\mathbf{k}} = \varphi_{\mathbf{k}}^c + i\varphi_{\mathbf{k}}^s;$$

$$\sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} = \varphi_0 \rho_0 + 2 \sum_{\mathbf{k}}' \varphi_{\mathbf{k}}^c \rho_{\mathbf{k}}^c + \varphi_{\mathbf{k}}^s \rho_{\mathbf{k}}^s;$$

$$(d\varphi)^N = d\varphi_0 \prod_{\mathbf{k}} d\varphi_{\mathbf{k}}^c d\varphi_{\mathbf{k}}^s.$$

Подставляем (5.5) в (5.4) и интегрируем по $\rho_{\mathbf{k}}^c$ и $\rho_{\mathbf{k}}^s$, тогда

$$Z = 2^N \left\{ \prod_{\mathbf{k}} [\pi \beta \tilde{\Phi}(k)]^{-1/2} \right\} \sqrt{2^{-1}} \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} [\beta \tilde{\Phi}(k)]^{-1} \varphi_{\mathbf{k}} \varphi_{-\mathbf{k}} - \sum_{n \geq 1} D_n(\omega) \right\} \delta(\varphi_0 - i2\pi\omega_0) \prod_{\mathbf{k}} \delta(\varphi_{\mathbf{k}}^c - 2i\pi\omega_{\mathbf{k}}^c) \delta(\varphi_{\mathbf{k}}^s - 2i\pi\omega_{\mathbf{k}}^s) (d\varphi)^N (d\omega)^N.$$

В этом выражении можно сначала интегрировать по φ или по ω . Интегрируя по ω , находим

$$Z = 2^N \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} [\beta \tilde{\Phi}(k)]^{-1} \varphi_{\mathbf{k}} \varphi_{-\mathbf{k}} + \sum_{n \geq 1} D_n'(\varphi) \right\} \times \sqrt{2^{-1}} \prod_{\mathbf{k}} [2\pi i \sqrt{\pi \beta \tilde{\Phi}(k)}]^{-1}, \quad (5.6)$$

где

$$D_n'(\varphi) = \frac{\mathfrak{M}_n}{n!} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n} \varphi_{\mathbf{k}_1} \dots \varphi_{\mathbf{k}_n} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n}.$$

Коэффициенты \mathfrak{M}_n чередуются по знаку: $\mathfrak{M}_2 > 0$, $\mathfrak{M}_4 < 0$, $\mathfrak{M}_6 > 0$, $\mathfrak{M}_8 < 0$ и т. д.

Итак, имеем три эквивалентные функциональные формы, (5.1), (5.4) и (5.6), для статистической суммы трехмерной модели Изинга. В дальнейших выкладках будем рассматривать форму (5.1). В работах [10—14, 25, 31, 32, 51] используется форма (5.6). Таким образом, выполнен переход к представлению коллективных переменных в статистической сумме Z для гамильтониана (1.1), который равен сумме парных взаимодействий. В случае гамильтонианов, содержащих парные, тройные, четверные и более сложные формы взаимодействий между частицами, приведенные здесь выкладки позволяют обобщить задачу: якобиан остается неизменным, а гамильтониан будет выражаться полиномом по степеням $\rho_{\mathbf{k}}$.

Для квадратичных по σ гамильтонианов формулу (5.6) можно получить непосредственно из преобразования Фурье [6, 8, 11]. Для $\tilde{\Phi}(k) > 0$

$$\begin{aligned} \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta \tilde{\Phi}(k) \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{-\mathbf{k}} \right] &= \prod_{\mathbf{k}} i (\pi \beta \tilde{\Phi}(k))^{-1/2} \times \\ &\times \int_{-i\infty}^{i\infty} \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} [\beta \tilde{\Phi}(k)]^{-1} \psi_{\mathbf{k}} \psi_{-\mathbf{k}} + i \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \right] (d\psi)^N = \\ &= \prod_{\mathbf{k}} [\beta \tilde{\Phi}(k) \pi]^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} [\beta \tilde{\Phi}(k)]^{-1} \varphi_{\mathbf{k}} \varphi_{-\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \right\} (d\varphi)^N, \end{aligned} \quad (5.7)$$

а для $\tilde{\Phi}(k) < 0$

$$\exp\left[-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{-\mathbf{k}}\right] = \prod_{\mathbf{k}} [\beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \pi]^{-1/2} \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}))^{-1} \omega_{\mathbf{k}} \omega_{-\mathbf{k}} - i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}}\right\} (d\omega)^N. \quad (5.8)$$

Переходя к статистической сумме

$$Z = \text{Sp} \exp\left[\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{-\mathbf{k}}\right],$$

берем в правой части след оператора $\exp\left(-\sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}}\right)$ и приходим к формуле (5.6). Такой прием в методе коллективных переменных был рассмотрен в работах [11—14].

§ 6. КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ

Корреляционная функция между двумя спинами, расположенными в точках 1 и 2, определяется выражением

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = \frac{\text{Sp}(\sigma_1 \sigma_2 \exp(-\beta H))}{Z}. \quad (6.1)$$

Для гамильтониана (1.1) оно переходит в формулу (2.5). В методе КП можем получить корреляционные функции в виде высокогрупповых разложений, справедливые в широкой области температур. Они будут также полезны при исследовании сходимости вблизи критической точки.

Подставим в (6.1) вместо $\exp(-\beta H)$ выражения (3.13), (3.14):

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = Z^{-1} \text{Sp} \left\{ \sigma_1 \sigma_2 \int \exp\left[-\beta H(\rho) + \right. \right. \\ \left. \left. + i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} (\rho_{\mathbf{k}} - \hat{\rho}_{\mathbf{k}})\right] (d\omega)^N (d\rho)^N \right\}$$

и выделим в $\exp\left(-i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}}\right)$ множители, связанные узлами 1 и 2, тогда

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = Z^{-1} \int \exp\left[-\beta H(\rho) + i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}\right] \times \\ \times \text{Sp}_1 \left\{ \sigma_1 \exp\left[-i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \sqrt{N}^{-1} \sigma_1 \exp(i\mathbf{k}\mathbf{1})\right] \right\} \times \\ \times \text{Sp}_2 \left\{ \sigma_2 \exp\left[-i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \sqrt{N}^{-1} \sigma_2 \exp(i\mathbf{k}\mathbf{2})\right] \right\} \times \\ \times \text{Sp}_{3\dots N} \left\{ \prod_{j=3}^N \exp\left[-i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \sqrt{N}^{-1} \sigma_j \exp(i\mathbf{k}\mathbf{j})\right] \right\} (d\rho)^N (d\omega)^N. \quad (6.2)$$

Дополняем $S\rho_3 \dots N$ до $S\rho_1 \dots N$. Шпур по всем спиновым состояниям приводит к выражению

$$\text{th} \left[i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} V \bar{N}^{-1} \exp(i\mathbf{k}1) \right] \text{th} \left[i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} V \bar{N}^{-1} \exp(-i\mathbf{k}2) \right] \times \\ \times 2^N \prod_j \text{ch} \left[\sum_{\mathbf{k}} 2\pi \omega_{\mathbf{k}} V \bar{N}^{-1} \exp(-i\mathbf{k}j) \right]. \quad (6.3)$$

Подставляем его в (6.2). Произведение $\prod_j \text{ch}(\dots)$ записываем в известной уже кумулянтной форме (4.5):

$$\prod_j \text{ch} \left[\sum_{\mathbf{k}} 2\pi \omega_{\mathbf{k}} V \bar{N}^{-1} \exp(i\mathbf{k}j) \right] = \exp \left[\sum_n D_n(\omega) \right],$$

где D_n заданы в (4.11), а \mathfrak{M}_n — в (4.7). В выражениях для $\text{th}(\dots)$ заменяем $i2\pi \omega_{\mathbf{k}}$ на производную $\partial/\partial \rho_{\mathbf{k}}$:

$$\text{th} \left[i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} V \bar{N}^{-1} \exp(-i\mathbf{k}1) \right] \text{th} \left[i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} V \bar{N}^{-1} \exp(-i\mathbf{k}2) \right] \times \\ \times \exp \left(i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \right) = \text{th}(\hat{\Delta}_1) \text{th}(\hat{\Delta}_2) \exp \left(i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \right), \quad (6.4)$$

где

$$\hat{\Delta}_1 = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{k}}} V \bar{N}^{-1} \exp(i\mathbf{k}1). \quad (6.5)$$

После такой замены в (6.2) можно проинтегрировать по ω и получить якобиан $J(\rho)$, заданный формулами (4.10) или (4.14). Для корреляционной функции получаем окончательное выражение

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = Z^{-1} \int \exp(-\beta H(\rho)) \text{th} \hat{\Delta}_1 \text{th} \hat{\Delta}_2 J(\rho) (d\rho)^N, \quad (6.6)$$

где

$$H(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}.$$

§ 7. УРАВНЕНИЯ ЭЙЛЕРА

До сих пор приведенные выше выкладки носили формальный характер. Мы перешли к представлению коллективных переменных, не доказав целесообразности этого шага. Теперь покажем, что избранное фазовое пространство переменных $\rho_{\mathbf{k}}$ наиболее удобно для описания фазового перехода [69, 71].

Обозначим через $E(\rho)$ функцию, стоящую в экспоненте в (5.1):

$$E(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} d(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - (4!)^{-1} N^{-1} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4} a_4 \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} - \\ - (6!)^{-1} N^{-2} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_6} a_6 \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_6} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_6} - \dots \quad (7.1)$$

Таким образом⁵,

$$Z = C \int \exp [E(\rho) (d\rho)^N]. \quad (7.2)$$

Рассмотрим свойства функционала $E(\rho)$. Зависимость от температуры содержится здесь в коэффициенте $d(k) = a_2 - \beta \tilde{\Phi}(k)$. Найдем функцию $\rho^0(k)$, сообщающую максимум функционалу $E(\rho)$. Из условия $\delta E(\rho) = 0$ получаем систему уравнений Эйлера

$$d(k) \rho_{-k} - \frac{a_4}{3! N} \sum_{k_2, k_3, k_4} \rho_{k_2} \rho_{k_3} \rho_{k_4} \delta_{k+k_2+k_3+k_4} - \dots = 0; \quad (7.3)$$

Ее решения ... $\rho^0(k)$... определяют положение центров, относительно которых происходят отклонения фаз плотности спинового момента; ρ_k^0 должны зависеть от температуры и волнового вектора k . Система (7.3) является однородной системой уравнений и поэтому имеет тривиальное решение $\rho_k^0 = 0$ для всех k .

Предположим, что

$$\max \tilde{\Phi}(k) = \tilde{\Phi}(0). \quad (7.4)$$

Это условие справедливо, в частности, для потенциала $\tilde{\Phi}(k)$, заданного формулой (1.5) или более простой формулой (1.14).

Выделим из системы (7.3) уравнение относительно ρ_0 :

$$d(0) \rho_0 + \frac{a_4}{3! N} \rho_0^3 + \frac{1}{2} a_4 \rho_0 \frac{1}{N} \sum_{k \neq 0} \rho_k \rho_{-k} + \frac{a_4}{3! N} \sum_{k_1+k_2+k_3=0} \rho_{k_1} \rho_{k_2} \rho_{k_3} + \dots = 0. \quad (7.5)$$

Уравнения относительно остальных ρ_k примут вид

$$\left(d(k) + \frac{a_4}{2} \frac{1}{N} \rho_0^2 \right) \rho_{-k} + \frac{a_4}{2N} \sum_{k' \neq 0, k} \rho_{k'} \rho_{-k'} \rho_{-k} + \frac{a_4}{2N} \rho_k \rho_{-k} \rho_{-k} + \frac{a_4}{2N} \sum_{k+k_2+k_3=0} \rho_0 \rho_{k_2} \rho_{k_3} + \frac{a_4}{3! N} \sum_{k+k_1+k_2+k_3=0} \rho_{k_1} \rho_{k_2} \rho_{k_3} + \dots = 0; \quad (7.6)$$

Считаем, что последние слагаемые в (7.5) и (7.6) в меньшей степени, чем остальные, влияют на основные свойства уравнений: средние значения этих слагаемых по гауссовому или другому четному распределению равны нулю. Исключаем эти слагаемые и приводим

⁵ Аналогично для (5.6) можно рассматривать

$$\varepsilon(\varphi) = -\frac{1}{2} \sum_k [\beta D(k)]^{-1} \varphi_k \varphi_{-k} + \sum_n D'_n(\varphi).$$

систему уравнений к виду

$$\left[d(0) + \frac{a_4}{2N} \sum_{\substack{\mathbf{k} \\ \mathbf{k} \neq 0}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right] \rho_0 + \frac{a_4}{3!N} \rho_0^3 = 0;$$

.....

$$\left[d(k) + \frac{a_4}{2N} \rho_0^2 + \frac{a_4}{2N} \sum_{\substack{\mathbf{k}' \\ \mathbf{k}' \neq 0, \mathbf{k}}} \rho_{\mathbf{k}'} \rho_{-\mathbf{k}'} \right] \rho_{-\mathbf{k}} + \frac{a_4}{2N} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} = 0; \quad (7.7)$$

.....

Для температур T , при которых $d(0) > 0$ и $d(k) \geq d(0)$, уравнения (7.5)–(7.7) имеют только тривиальное решение $\rho^0(\mathbf{k}) = 0$ для всех \mathbf{k} . Температуру

$$T_1 = \frac{\tilde{\Phi}(0)}{a_2}, \quad (7.8)$$

для которой $d(0, T_1) = 0$, назовем верхней границей критических температур. Так как $a_4 \approx 0,182$ от температуры не зависит, а

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}}' \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \sim \frac{1}{N^2} \sum_{l_1 l_2} \sigma_{l_1} \sigma_{l_2} \sum_{\mathbf{k}}' \exp[i\mathbf{k}(l_1 - l_2)] = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{l}} \sigma_{\mathbf{l}}^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{l}} \sigma_{\mathbf{l}} \right)^2$$

является величиной порядка единицы, то всегда найдется такая температура T_c , $T_c < T_1$, что для $T < T_c$ первое уравнение (7.7) будет иметь для ρ_0 , кроме тривиального $\rho_0 = 0$, также и нетривиальное решение

$$\frac{1}{N} (\rho_0^{(0)})^2 \approx \frac{3!}{a_4} \left[-d(0, T) - \frac{a_4}{2N} \sum_{\substack{\mathbf{k} \\ \mathbf{k} \neq 0}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right], \quad (7.9)$$

где $-d(0, T) > 0$; при $T \rightarrow 0$ $-d(0, T) \rightarrow \infty$. Как видим, $\rho_0^{(0)}$ является макроскопической величиной: $\rho_0^{(0)} \propto \sqrt{N}$. В дальнейшем вернемся к более точному решению уравнения для ρ_0 , учитывающему слагаемые, которые мы исключили при переходе от системы уравнений (7.5), (7.6) к уравнениям (7.7). Покажем, что решениями для остальных $\rho_{\mathbf{k}}$, $\mathbf{k} \neq 0$, будут

$$\rho_{\mathbf{k}}^{(0)} = 0 \text{ для всех } \mathbf{k} \neq 0. \quad (7.10)$$

Предположим, что при $T < T_c$ наряду с решением $\rho_0^{(0)} \neq 0$ существует для некоторого $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1$ ненулевое решение $\rho_{\mathbf{k}_1}^{(0)} \neq 0$. Из системы уравнений (7.7) выделим уравнение относительно $\rho_{\mathbf{k}_1}$, $\mathbf{k}_1 \neq 0$, и подставим в это уравнение значение ρ_0^2 из (7.9); тогда

$$\left\{ d(k_1) + \frac{3!}{2} \left[-d(0) - \frac{a_4}{2N} \sum_{\substack{\mathbf{k} \\ \mathbf{k} \neq 0}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right] + \right. \\ \left. + \frac{a_4}{2N} \sum_{\substack{\mathbf{k}' \\ \mathbf{k}' \neq 0, \mathbf{k}_1}} \rho_{\mathbf{k}'} \rho_{-\mathbf{k}'} \right\} \rho_{-\mathbf{k}_1} + \frac{a_4}{2N} \rho_{-\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{-\mathbf{k}_1} + \dots = 0.$$

По предположению $\rho_{k_1}^{(0)} \neq 0$, поэтому сокращаем на ρ_{k_1} и находим значение $\rho_{k_1, \rho_{-k_1}}$:

$$\frac{2a_4}{N} \rho_{k_1, \rho_{-k_1}} = d(k_1) - 3d(0) - \frac{a_4}{N} \sum_{k \neq 0, k_1} \rho_k \rho_{-k}.$$

Подставляем это решение в формулу (7.9). Приходим к противоречию:

$$\frac{a_4}{3!N} \rho_0^2 = -[d(k_1) - d(0)] < 0.$$

Это значит, что решение $\rho_{\mathbf{k}}^{(0)} \neq 0$, $\mathbf{k} \neq 0$ не имеет места.

С другой стороны, полагая все $\rho_{\mathbf{k}} = 0$ для $\mathbf{k} \neq 0$, находим

$$(1/\sqrt{N}) \rho_0^{(0)} \approx \pm \sqrt{-d(0) 3!/a_4}. \quad (7.11)$$

Предложенное доказательство выполнено в приближении гауссовых средних (см. также [20, 68]). По смыслу $\rho_0^{(0)}$ пропорционально суммарному спиновому моменту системы $\rho_0^{(0)} \propto \sum_I \sigma_I$ (см. (3.1), (3.2)) и в рассматриваемой задаче выступает в роли параметра порядка.

Таким образом, множество КП, введенное для расчета статистической суммы, является естественным фазовым пространством при рассмотрении процесса фазового перехода.

Мы не вводим сознательно извне параметров порядка, поскольку во множестве КП имеются переменные, связанные с ними. Так, в слу-

чае, когда $\max \tilde{\Phi}(k) = \tilde{\Phi}(0)$, такой переменной является ρ_0 . Если строить графики $\exp E(\rho)$ как функции $\rho_{\mathbf{k}}$ и ρ_0 , то при понижении температуры T (при $T < T_c$) происходит смещение точки экстремума на кривой $y = \exp E(\rho)$ (рис. 3). Отсюда ясно, что при расчете статистической суммы мы должны

$$Z = \int \exp E(\rho) (d\rho)^N$$

проинтегрировать по всем переменным $\rho_{\mathbf{k}}$, кроме переменной ρ_0 , и получить однократный интеграл

$$Z_0 = Q_0^{N-1} \int \exp \tilde{E}(\rho_0) d\rho_0, \quad (7.12)$$

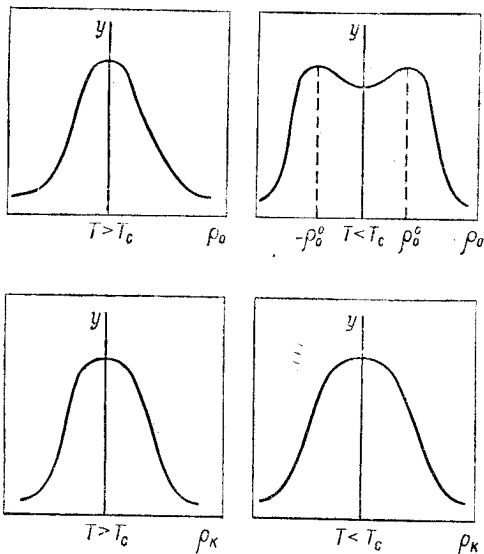


Рис. 3. Графики $y = \exp E(\rho)$ как функции ρ_0 и $\rho_{\mathbf{k}}$.

в котором [44]

$$F_0 = -kT \ln Q_0^{N-1} - kT \tilde{E}(\rho_0) \quad (7.13)$$

представляет собой выражение, близкое по смыслу к свободной энергии Ландау. Эти вопросы подробно рассматриваются дальше.

§ 8. О БАЗИСНОЙ ПЛОТНОСТИ МЕРЫ

Итак, есть три эквивалентных формы для статистической суммы: (5.1), (5.4) и (5.6). Ни одна из них не интегрируется точно, так как переменные под знаком интеграла не разделяются. Например, если Z рассчитывать по формуле (5.1), интегрируя в фазовом пространстве ρ_{k_i} , то не разделяются переменные в слагаемых

$$-\frac{a_4}{4!N} \sum_{k_1, \dots, k_4} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} - \\ - \frac{a_6}{6!N^2} \sum_{k_1, \dots, k_6} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_6} \delta_{k_1 + \dots + k_6} - \dots$$

и в то же время они разделяются в гамильтониане

$$\beta H(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) [(\rho_{\mathbf{k}}^x)^2 + (\rho_{\mathbf{k}}^y)^2].$$

В фазовом пространстве $\tilde{\rho}_i$, наоборот, разделяются переменные в якобиане, который согласно (4.8) представляет собой произведение якобиана от отдельных $\tilde{\rho}_i$, но не разделяются переменные в гамильтониане

$$\beta H(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{I_1, I_2} \beta \Phi(I_1 - I_2) \tilde{\rho}_{I_1} \tilde{\rho}_{I_2}.$$

Кроме указанной трудности, статистическую сумму нельзя считать еще и по той причине, что в показатель подынтегральной функции для якобиана перехода в (5.1) или в (5.4) входит бесконечная сумма слагаемых. Это приводит к необходимости представить статистическую сумму в виде суммы моментов от некоторой базисной плотности меры:

$$W_{n_0}(\rho\rho') = \exp[-\beta H(\rho)] \int (d\omega)^N \exp\left[i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho'_{\mathbf{k}} + \sum_{1 \leq n \leq n_0} D_n(\omega)\right]. \quad (8.1)$$

Число n_0 может быть равным 2, 4, 6, ... Если в выражении (5.4) $\sum_{n \geq 1} D_n(\omega)$ представить в виде

$$\sum_{n \geq 1} D_n(\omega) = \sum_{1 \leq n \leq n_0} D_n(\omega) + \mathcal{D}_{n_0}(\omega), \quad (8.2)$$

то для Z получим следующее разложение:

$$Z = 2^N \int \exp\left[\beta H(\rho) + i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} + \sum_{1 \leq n \leq n_0} D_n(\omega)\right] \times \\ \times \left[1 + \mathcal{D}_{n_0}(\omega) + \frac{1}{2} (\mathcal{D}_{n_0}(\omega))^2 + \dots\right] (d\omega)^N (d\rho)^N. \quad (8.3)$$

После замены

$$\mathcal{D}_{n_0}(\omega) \exp\left(i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}\right) = \hat{\mathcal{D}}_{n_0}\left(\frac{1}{i2\pi} \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{k}}}\right) \exp\left(i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}\right) \quad (8.4)$$

для статистической суммы находим

$$Z = 2^N \int \left\{ \left[1 + \hat{\mathcal{D}}_{n_0}\left(\frac{1}{i2\pi} \frac{\partial}{\partial \rho'_{\mathbf{k}}}\right) + \dots \right] W_{n_0}(\rho \rho') \right\}_{\rho=\rho'} (d\rho)^N. \quad (8.5)$$

Плотность меры $W_{n_0}(\rho \rho')$ будем называть базисной в некоторой области температур, если в этой области произвольный момент будет конечным:

$$\int \left[\left(\hat{\mathcal{D}}_{n_0}\left(\frac{1}{i2\pi} \frac{\partial}{\partial \rho'_{\mathbf{k}}}\right) \right)^n W_{n_0}(\rho \rho') \right]_{\rho=\rho'} (d\rho)^N < \infty. \quad (8.6)$$

Здесь, разумеется, не рассматривается задача о сходимости ряда моментов в целом

$$Z = Z_{n_0} \left(1 + \langle \hat{\mathcal{D}}_{n_0} \rangle_{n_0} + \frac{1}{2!} \langle \hat{\mathcal{D}}_{n_0}^2 \rangle_{n_0} + \dots \right), \quad (8.7)$$

где

$$Z_{n_0} = \int W_{n_0}(\rho \rho) (d\rho)^N; \quad (8.8)$$

$$\langle \hat{\mathcal{D}}_{n_0}^n \rangle_{n_0} = Z_{n_0}^{-1} \int \left[\left(\hat{\mathcal{D}}_{n_0}\left(\frac{1}{i2\pi} \frac{\partial}{\partial \rho'_{\mathbf{k}}}\right) \right)^n W_{n_0}(\rho \rho') \right]_{\rho=\rho'} (d\rho)^N. \quad (8.9)$$

По-видимому, чем больше n_0 , тем лучше сходится ряд моментов. Общепринятой в роли базисной является гауссова плотность меры $n_0 = 2$. В этом случае уже Z_2 несет в себе большую информацию о свойствах системы и соответствует приближению хаотических фаз. Ряд моментов от гауссовой плотности меры в выражении для свободной энергии имеет форму вириального ряда. Вириальные коэффициенты выражаются в виде групповых интегралов, каждый из которых содержит экранированный потенциал $g(|\mathbf{j} - \mathbf{l}|)$. Однако при $T \rightarrow T_c$ гауссовы моменты $\langle (\hat{\mathcal{D}}_2)^n \rangle_2$ стремятся к бесконечности. При больших n в каждом моменте $\langle (\hat{\mathcal{D}}_2)^n \rangle_2$ имеется очень много слагаемых, которые по-разному расходятся при $T \rightarrow T_c$, и поэтому невозможно просуммировать их. Это говорит о том, что гауссова плотность меры не может быть базисной при $T = T_c$ и должна быть заменена новой — негауссовой. Этому вопросу посвящены следующие два параграфа.

§ 9. РАСЧЕТ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЫ С ПОМОЩЬЮ ГАУССОВОЙ ПЛОТНОСТИ МЕРЫ В КАЧЕСТВЕ БАЗИСНОЙ

Положим в (8.1) $n_0 = 2$ и $W_2(\rho \rho') \equiv W_G(\rho \rho')$, тогда [60, 62]

$$\begin{aligned} W_G(\rho \rho') &= 2^N \exp \sum_{\mathbf{k}} \beta \tilde{\Phi}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \times \\ &\times \int (d\omega)^N \exp \left[i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho'_{\mathbf{k}} - \frac{(2\pi)^2}{2} \mathfrak{M}_2 \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \omega_{-\mathbf{k}} \right]. \end{aligned} \quad (9.1)$$

Интегрируем по ω и подставляем вместо $(d\omega)^N$, ω_k и ρ_k их значения из (3.7), (3.9) и (3.11):

$$W_G(\rho\rho') = 2^N \exp\left(\frac{1}{2} \sum_k \beta\tilde{\Phi}(k) \rho_k \rho_{-k}\right) \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_0 \prod_k' d\omega_k^c d\omega_k^s \exp\left[i2\pi\omega_0\rho_0' + \sum_k' (\omega_k^c \rho_k^{c'} + \omega_k^s \rho_k^{s'}) 2\pi - \right. \\ \left. - \pi^2 \mathfrak{M}_2 \sum_k' [(\omega_k^c)^2 + (\omega_k^s)^2] - 2\pi^2 \mathfrak{M}_2 \omega_0^2\right].$$

В результате получаем

$$W_G(\rho\rho') = 2^N \frac{1}{V^2} (\pi\mathfrak{M}_2)^{-N/2} \exp\left[\frac{1}{2} \sum_k \beta\tilde{\Phi}(k) \rho_k \rho_{-k} - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \mathfrak{M}_2^{-1} \sum_k \rho_k' \rho_{-k}'\right]. \quad (9.2)$$

По формуле (8.7) выполняем расчет статистической суммы:

$$Z = Z_G \left(1 + \langle \hat{\mathcal{D}}_2 \rangle_G + \frac{1}{2} \langle \hat{\mathcal{D}}_2^2 \rangle_G + \dots\right). \quad (9.3)$$

Здесь Z_G — гауссово приближение статистической суммы:

$$Z_G = \int W_G(\rho\rho) (d\rho)^N = \\ = \left(\frac{2}{V\pi\mathfrak{M}_2}\right)^N \frac{1}{V^2} \int \exp\left\{-\frac{1}{2} \sum_k \left[\frac{1}{\mathfrak{M}_2} - \beta\tilde{\Phi}(k)\right] \rho_k \rho_{-k}\right\} (d\rho)^N; \quad (9.4) \\ Z_G = 2^N \prod_k' \frac{1}{1 - \mathfrak{M}_2 \beta\tilde{\Phi}(k)}.$$

Интеграл по ρ_k существует при условии

$$\mathfrak{M}_2^{-1} - \beta\tilde{\Phi}(0) > 0. \quad (9.5)$$

В круглых скобках в (9.3) — ряд средних по гауссовому распределению. Согласно (8.2) и (8.5) выражение

$$\langle \hat{\mathcal{D}}_2^n \rangle_G = \left(\frac{2}{V\pi\mathfrak{M}_2}\right)^N \frac{1}{V^2} \int \left\{ \exp\left[\frac{1}{2} \sum_k \beta\tilde{\Phi}(k) \rho_k \rho_{-k}\right] \times \right. \\ \left. \times \left[\sum_{m>2} \hat{D}_m \left(\frac{1}{i2\pi} \frac{\partial}{\partial \rho_k}\right) \right]^n \exp\left(-\frac{1}{2} \mathfrak{M}_2^{-1} \sum_k \rho_k \rho_{-k}\right) \right\} (d\rho)^N Z_G^{-1} \quad (9.6)$$

представляет собой n -й момент. В формуле для свободной энергии это выражение будет главным составляющим n -го вириального коэффициента. Момент $\langle \hat{\mathcal{D}}_2^n \rangle_G$ состоит из средних от всевозможных произведений производных $\partial/\partial \rho_{k_1}, \dots, \partial/\partial \rho_{k_m}$. При этом очевидно, что

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial \rho_k} \right\rangle_G = C \int \exp\left\{-\frac{1}{2} \sum_k [\mathfrak{M}_2^{-1} - \beta\tilde{\Phi}(k)] \rho_k \rho_{-k}\right\} \mathfrak{M}_2^{-1} \rho_{-k} (d\rho)^N = 0. \quad (9.7)$$

Отличные от нуля результаты интегрирования в (9.6) получим, рассматривая спаренные производные вида $\partial^2/\partial\rho_{\mathbf{k}_1}\partial\rho_{-\mathbf{k}_1}$. Среднее от спаренной производной является основным элементом вычислений в (9.6):

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial^2}{\partial\rho_{\mathbf{k}_1}\partial\rho_{-\mathbf{k}_1}} \right\rangle_G &= \left(\frac{2}{V\pi\mathfrak{M}_2} \right)^N \frac{1}{V^2} Z_G^{-1} \int \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta\tilde{\Phi}(k) \rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}} \right] \times \\ &\times \frac{\partial^2}{\partial\rho_{\mathbf{k}_1}\partial\rho_{-\mathbf{k}_1}} \exp \left[-\frac{1}{2} \mathfrak{M}_2^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}} \right] (d\rho)^N = \left(\frac{2}{V\pi\mathfrak{M}_2} \right)^N \frac{1}{V^2} Z_G^{-1} \times \\ &\times \int [(\mathfrak{M}_2)^{-2} \rho_{\mathbf{k}_1}\rho_{-\mathbf{k}_1} - \mathfrak{M}_2^{-1}] \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} [\mathfrak{M}_2^{-1} - \beta\tilde{\Phi}(k)] \rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}} \right\} (d\rho)^N. \end{aligned}$$

Воспользуемся формулой (9.4) для Z_G , тогда

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial^2}{\partial\rho_{\mathbf{k}}\partial\rho_{-\mathbf{k}}} \right\rangle_G &= \left(\frac{1}{\mathfrak{M}_2^2} \frac{\partial}{\partial(\beta\tilde{\Phi}(k))} - \mathfrak{M}_2^{-1} \right) \ln Z_G; \\ \left\langle \frac{\partial^2}{\partial\rho_{\mathbf{k}}\partial\rho_{-\mathbf{k}}} \right\rangle_G &= \frac{\beta\tilde{\Phi}(k)}{1 - \mathfrak{M}_2\beta\tilde{\Phi}(k)}. \end{aligned} \quad (9.8)$$

Выражение

$$\tilde{g}(k) = \frac{\beta\tilde{\Phi}(k)}{1 - \mathfrak{M}_2\beta\tilde{\Phi}(k)} \quad (9.9)$$

является фурье-образом экранированного потенциала системы, так что

$$\left\langle \frac{\partial^2}{\partial\rho_{\mathbf{k}}\partial\rho_{-\mathbf{k}}} \right\rangle_G = \tilde{g}(k). \quad (9.10)$$

Как уже говорилось, в (9.6) мы должны рассматривать только произведения спаренных производных.

Чтобы получить явное выражение для (9.3), рассмотрим последовательно $\langle \hat{\mathcal{D}}_2 \rangle_G$, $\langle \hat{\mathcal{D}}_2^2 \rangle_G$, ...:

$$\hat{\mathcal{D}}_2 = \sum_{n>2} \hat{D}_n \left(\frac{1}{i2\pi} \frac{\partial}{\partial\rho_{\mathbf{k}}} \right). \quad (9.11)$$

В \hat{D}_n , заданном выражениями (4.11) и (8.4), будем предполагать, что в условии $\delta_{\mathbf{k}_1+\dots+\mathbf{k}_n}$ сумма $\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n$ является неприводимой, т. е. не распадается на равные нулю суммы меньшего порядка, чем n , например, не может быть случаев $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = 0$, $\mathbf{k}_3 + \dots + \mathbf{k}_n = 0$ или $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 = 0$, $\mathbf{k}_4 + \dots + \mathbf{k}_n = 0$, ... Тогда

$$\langle \hat{\mathcal{D}}_2 \rangle_G = 0, \quad (9.12)$$

так как каждое $\langle \hat{D}_n \rangle_G = 0$. Для среднего $\langle \hat{\mathcal{D}}_2^2 \rangle_G$ имеем

$$\langle \hat{\mathcal{D}}_2^2 \rangle_G = \sum_{n>2} \langle \hat{D}_n \hat{D}_n \rangle_G, \quad (9.13)$$

ибо в силу неприводимости сумм по \mathbf{k} в \hat{D}_n

$$\langle \hat{D}_n \hat{D}_m \rangle_G = 0 \text{ при } m \neq n. \quad (9.14)$$

В формуле (9.13) следует выполнить всевозможные спаривания производных и как результат интегрирования по $\rho_{\mathbf{k}}$ каждой спаренной производной поставить в соответствие экранированный потенциал $\tilde{g}(k)$, заданный формулой (9.9). Итак, согласно (4.11)

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{D}_2^2 \rangle_G &= \sum_{n>2} \frac{\mathfrak{M}_n^2}{N^n (n!)^2} \sum_{j, l} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n \\ \mathbf{k}'_1, \dots, \mathbf{k}'_n}} \exp [i (\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n) \mathbf{j} + \\ &+ i (\mathbf{k}'_1 + \dots + \mathbf{k}'_n) \mathbf{l}] \left\langle \frac{\partial^n}{\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \partial \rho_{\mathbf{k}_n}} \frac{\partial^n}{\partial \rho_{\mathbf{k}'_1} \dots \partial \rho_{\mathbf{k}'_n}} \right\rangle_G = \\ &= \sum_{n>2} \frac{\mathfrak{M}_n^2}{N^n n!} \sum_{j, l} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n} \exp [i (\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n) (\mathbf{j} - \mathbf{l})] g(\mathbf{k}_1) \dots g(\mathbf{k}_n) = \\ &= \sum_{n>2} \frac{\mathfrak{M}_n^2}{n!} \sum_{j, l} g^n(|\mathbf{j} - \mathbf{l}|), \end{aligned} \quad (9.15)$$

где

$$g(|\mathbf{j} - \mathbf{l}|) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{g}(k) \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{j} - \mathbf{l})) \quad (9.16)$$

— экранированный потенциал. Сопоставляем кумулянты \mathfrak{M}_n с производными $\mathfrak{M}_n = (\partial^n / \partial h^n) \text{ch } h$ и вводим операторный «экранированный потенциал»

$$\hat{g}(|\mathbf{j} - \mathbf{l}|) = \frac{\partial^2}{\partial h_j \partial h_l} g(|\mathbf{j} - \mathbf{l}|). \quad (9.17)$$

Тогда

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \langle \mathcal{D}_2^2 \rangle_G &= \frac{1}{2} \sum_{j, l} \left[\exp(\hat{g}(|\mathbf{j} - \mathbf{l}|)) - 1 - \hat{g}(|\mathbf{j} - \mathbf{l}|) - \right. \\ &\left. - \frac{1}{2} \hat{g}^2(|\mathbf{j} - \mathbf{l}|) \right] G_j G_l |_{h=0}, \quad G_j = \text{ch } h_j. \end{aligned} \quad (9.18)$$

Это выражение имеет форму хорошо известного второго вириального коэффициента \mathcal{B}_2 для систем заряженных частиц, размещенных на решетке [60, 66, 67]:

$$\mathcal{B}_2 = \frac{1}{2} \sum_{j, l} (e^{g(j-l)} - 1 - g(j-l) - \frac{1}{2} g^2(j-l)), \quad (9.19)$$

где

$$g(j-l) = e_j e_l g(|\mathbf{j} - \mathbf{l}|); \quad (9.20)$$

e_j, e_l — заряды в узлах \mathbf{j} и \mathbf{l} .

Таким образом, существует соответствие между выражениями для свободной энергии системы заряженных частиц и свободной энергии в модели Изинга. Используя эту аналогию, запишем выражение для свободной энергии в виде вириального ряда [66]

$$F = F_G - kT (\mathcal{B}_2 + \mathcal{B}_3 + \mathcal{B}_4 + \dots), \quad (9.21)$$

где

$$F_G = -NkT \ln 2 + \frac{kT}{2} \sum_k \ln [1 - \mathfrak{M}_2 \beta \tilde{\Phi}(k)]; \quad (9.22)$$

$\mathcal{B}_2, \mathcal{B}_3, \mathcal{B}_4$ — вириальные коэффициенты, явные выражения для которых представим в форме следующих диаграмм:

 тонкая линия

— оператор $\hat{g}(|j-1|)$;

 жирная линия

— оператор $f(|j-1|) + \hat{g}(|j-1|)$;

 жирная линия
с черточкой

— оператор $f(|j-1|)$;

 жирная линия
с двумя черточками

— оператор $f(|j-1|) - \frac{1}{2} \hat{g}^2(|j-1|)$;

темный кружок ● — полевая вершина $\sum_1 \dots \ln \operatorname{ch} h_1 |_{h_1=0}$;

светлый кружок ○ — фиксированная вершина $\frac{\partial}{\partial h_1} \ln \operatorname{ch} h_1 |_{h_1=0}$.

Здесь $f(|j-1|) = [\exp \hat{g}(|j-1|)] - 1 - \hat{g}(|j-1|)$. Тогда

$$\mathcal{B}_2 = \frac{1}{2} \text{---} \text{---} \text{---} ; \quad (9.24)$$

$$\mathcal{B}_3 = \frac{1}{2 \cdot 3} \left(\text{---} \text{---} \text{---} + 3 \text{---} \text{---} \text{---} \right) ; \quad (9.25)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_4 = & \frac{1}{2 \cdot 4} \left[\text{---} \text{---} \text{---} \text{---} + 2 \left(\text{---} \text{---} \text{---} + 2 \text{---} \text{---} \text{---} \right) + \right. \\ & + 2 \text{---} \text{---} \text{---} + 4 \left(\text{---} \text{---} \text{---} + 2 \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} \right) + \\ & \left. + \frac{1}{3} \text{---} \text{---} \text{---} \right]. \end{aligned} \quad (9.26)$$

Таким образом, высокогрупповые разложения для простейшей спиновой системы получены для неприводимых сумм в кумулянтах D_n в разложении (9.3).

В этом же приближении определим парную корреляционную функцию спинов $\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle$. Это среднее равно функциональной производной от свободной энергии по потенциалу $\Phi(j-1)$:

$$\langle \sigma_1 \sigma_1 \rangle = - \frac{\delta F}{\delta \Phi(|j-1|)} = \frac{\delta \ln Z}{\delta (\beta \Phi(j-1))}. \quad (9.27)$$

Функциональные производные рассчитываются по методике, описанной в работе [66]; в результате получается выражение, подобное классической корреляционной функции системы заряженных частиц с учетом соответствия (9.23).

Рассмотрим в качестве примера функциональную производную от первых двух слагаемых в выражении (9.24) для F . Доказав, что при этом получаются выражения, подобные соответствующим приближениям для функции $F_2(r) - 1$ для систем заряженных частиц, перенесем готовые результаты на спиновые системы. Подставляя в формулу (9.27) ряд (9.24), получаем

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = \frac{\delta \ln Z_G}{\delta \beta \Phi(1-2)} + \frac{\delta \mathcal{B}_2}{\delta \beta \Phi(1-2)} + \frac{\delta \mathcal{B}_3}{\delta \beta \Phi(1-2)} + \dots \quad (9.28)$$

Если бы $\mathcal{B}_2, \mathcal{B}_3, \dots$ были простыми функционалами от потенциала $\Phi(1-j)$, то вариационная производная по $\Phi(1-2)$ преобразовывала бы в каждой диаграмме две полевые вершины в две фиксированные и снимала одну тонкую линию. Однако вириальные коэффициенты в свободной энергии (9.24) являются простыми функционалами от экранированного потенциала $g(1-j)$, который в свою очередь является функционалом от потенциала Φ . Поэтому в (9.28) имеем не явные функциональные производные. Рассмотрим первое слагаемое. Воспользуемся выражением (9.4) для Z_G :

$$\begin{aligned} \frac{\delta \ln Z_G}{\delta \beta \Phi(1-2)} &= - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\delta}{\delta \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})} \sum_{\mathbf{k}'} \ln(1 - \mathfrak{M}_2 \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}')) \frac{\delta \beta \Phi(\mathbf{k})}{\delta \beta \Phi(1-2)} = \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{N} e^{i\mathbf{k}(1-2)} \left[\mathfrak{M}_2 + \mathfrak{M}_2^2 \frac{\beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})}{1 - \mathfrak{M}_2 \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})} \right] = \\ &= \mathfrak{M}_2 \delta_{12} + \hat{g}(1-2) \frac{\partial}{\partial h_1} \frac{\partial}{\partial h_2} G_1 G_2 |_{h_1=h_2=h}, \end{aligned} \quad (9.29)$$

где произведена замена

$$\mathfrak{M}_2 = \frac{\partial^2}{\partial h_1^2} G_1 |_{h_1=h} \quad (9.30)$$

и введен операторный экранированный потенциал, определенный в (9.17). Теперь рассмотрим

$$\frac{\delta \mathcal{B}_2}{\delta \Phi(12)} = \frac{1}{2} \sum_{l,m} \frac{\delta \mathcal{B}_2}{\delta g(lm)} \frac{\delta g(lm)}{\delta \Phi(12)}. \quad (9.31)$$

Производная $\delta\mathcal{B}_2/\delta g$ (1m) согласно (9.24) равна:

$$\frac{\delta\mathcal{B}_2}{\delta g(1m)} = [e^{\hat{g}(1m)} - 1 - \hat{g}(1m)] \frac{\partial^2}{\partial h_1 \partial h_m} G_1 G_m |_{h_1=h_m=h}. \quad (9.32)$$

Для g (1m) запишем соответствующее этой функции интегральное уравнение (см. (9.9)):

$$g(1m) - \mathfrak{M}_2 \sum_n \beta \Phi(1n) g(nm) = \beta \Phi(1m). \quad (9.33)$$

Берем функциональную производную

$$\begin{aligned} \frac{\delta g(1m)}{\delta \beta \Phi(12)} - \mathfrak{M}_2 [\delta_{11} g(2m) + \delta_{12} g(1m)] - \\ - \mathfrak{M}_2 \sum_n \beta \Phi(1n) \frac{\delta g(nm)}{\delta \beta \Phi(12)} = \delta_{11} \delta_{m2} + \delta_{12} \delta_{m1} \end{aligned} \quad (9.34)$$

и получаем уравнение для $\delta g(1m)/\delta \Phi(12)$, которое можем решить с помощью преобразования свертки

$$\begin{aligned} \frac{\delta g(1m)}{\delta \Phi(12)} = \delta_{11} \delta_{m2} + \delta_{m1} \delta_{12} + [\delta_{11} g(2m) + \delta_{12} g(1m) + \delta_{m1} g(12) + \\ + \delta_{m2} g(11)] \mathfrak{M}_2 + \mathfrak{M}_2^2 (g_{11} g_{m2} + g_{1m} g_{12}). \end{aligned} \quad (9.35)$$

Подставляя (9.32) и (9.35) в (9.31) и выполняя замену (9.30), находим функциональную производную по потенциалу Φ от второго вириального коэффициента в свободной энергии:

$$\begin{aligned} \frac{\delta\mathcal{B}_2}{\delta \Phi(12)} = \left\{ e^{\hat{g}(12)} + \sum_m [e^{\hat{g}(1m)} \hat{g}(m2) + \hat{g}(1m) e^{\hat{g}(m2)}] G_m + \right. \\ \left. + \sum_{l,m} [\hat{g}(1m) e^{\hat{g}(ml)} \hat{g}(l2) G_l G_m] - 1 - \sum_m [\hat{g}(1m) + \hat{g}(m2)] G_m - \right. \\ \left. - \sum_{lm} \hat{g}(1l) \hat{g}(lm) G_l G_m - g(12) - 2 \sum_m \hat{g}(1m) \hat{g}(m2) G_m - \right. \\ \left. - \sum_{lm} \hat{g}(1l) \hat{g}(lm) \hat{g}(m2) G_l G_m \right\} \frac{\partial^2}{\partial h_1 \partial h_2} G_1 G_2 |_{h_1=h_2=h}. \quad (9.36) \end{aligned}$$

Здесь есть слагаемые, которые содержат только две фиксированные вершины; две фиксированные и одну полевую (одна сумма \sum); две фиксированные и две полевые вершины $\left(\text{две суммы } \sum_l \sum_m \right)$. Слагаемые, содержащие полевые вершины, необходимо отнести к вариационным производным $\delta\mathcal{B}_3/\delta \Phi(12)$, $\delta\mathcal{B}_4/\delta \Phi(12)$. Здесь эти производные не рассматриваются. Группируем выражения (9.29) и (9.36). С точностью до слагаемых, не содержащих полевых вершин, получим

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = \frac{\partial^2}{\partial h_1 \partial h_2} (e^{\hat{g}(12)} - 1) G_1 G_2 |_{h_1=h_2=0}. \quad (9.37)$$

Это выражение по форме совпадает с соответствующей частью корреляционной функции $F_2(r) - 1$ для плазмы. Результаты для плазмы можем перенести на модель Изинга с учетом соотношений (9.23).

В итоге бинарная корреляционная функция с точностью до диаграмм с двумя полевыми вершинами имеет вид

$$\begin{aligned}
 \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = & (e^{\hat{g}^{(12)}} - 1) [\mathfrak{M}_1(h_1) \mathfrak{M}_1(h_2) + \text{diagram} - \text{diagram} + \\
 & + \text{diagram} - \text{diagram} - \text{diagram} + \text{diagram} + \text{diagram} - \\
 & - \text{diagram} + \text{diagram} - \text{diagram} + \frac{1}{2} (\text{diagram} - \text{diagram} - \\
 & - \text{diagram} + \text{diagram} + \text{diagram}) + \dots]. \quad (9.38)
 \end{aligned}$$

Расчет бинарной корреляционной функции может быть также выполнен по формуле (6.6). Для этого оба гиперболических тангенса, $\text{th } \hat{\Delta}_1$ и $\text{th } \hat{\Delta}_2$, разложим в ряды по степеням $\hat{\Delta}_1$ и $\hat{\Delta}_2$:

$$\text{th } \hat{\Delta}_1 = c_1 \hat{\Delta}_1 + \frac{c_3}{3!} (\hat{\Delta}_1)^3 + \frac{c_5}{5!} (\hat{\Delta}_1)^5 + \dots, \quad (9.39)$$

где

$$\begin{aligned}
 c_1 &= \frac{\partial \text{th } h}{\partial h} = \frac{\partial^2 \ln \text{ch } h}{\partial h^2} \Big|_{h=0} = \mathfrak{M}_2; \\
 c_3 &= \left(\frac{\partial^4 \ln \text{ch } h}{\partial h^4} \right)_{h=0} = \mathfrak{M}_4; \\
 c_{2n-1} &= \left(\frac{\partial^{2n} \ln \text{ch } h}{\partial h^{2n}} \right)_{h=0} = \mathfrak{M}_{2n}.
 \end{aligned}$$

В формуле (6.6) в качестве базисной выбирается гауссова плотность меры. В результате, как и в выражении (9.3), для бинарной корреляционной функции получаем

$$\begin{aligned}
 \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = & \frac{\int \exp[-\beta H(\rho)] \text{th } \hat{\Delta}_1 \text{th } \hat{\Delta}_2 \left(1 + \hat{\mathcal{D}}_2 + \frac{1}{2} \hat{\mathcal{D}}_2^2 + \dots\right) \times \\
 & \times \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{1}{\mathfrak{M}_2} \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}\right) (d\rho)^N}{Z_G \left(1 + \langle \hat{\mathcal{D}}_2 \rangle_G + \frac{1}{2} \langle \hat{\mathcal{D}}_2^2 \rangle_G + \dots\right)}. \quad (9.40)
 \end{aligned}$$

Сначала положим $\hat{\mathcal{D}}_2 = 0$, тогда спаривание производных происходит только между $\text{th } \hat{\Delta}_1$ и $\text{th } \hat{\Delta}_2$. Для корреляционной функции имеем выражение, подобное (9.37):

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle_G \Big|_{\hat{\mathcal{D}}_2=0} = \langle \text{th } \hat{\Delta}_1 \text{th } \hat{\Delta}_2 \rangle_G = \frac{\partial^2}{\partial h_1 \partial h_2} (e^{\hat{g}^{(12)}} - 1) G_1 G_2 \Big|_{h_1=h_2=0}. \quad (9.41)$$

Теперь учитываем в (9.40) операторы $\hat{\mathcal{D}}_2$. В произведении

$$\text{th } \hat{\Delta}_1 \text{ th } \hat{\Delta}_2 \exp \hat{\mathcal{D}}_2$$

выписываем всевозможные спаривания между собой операторов D_n . Обозначим символом $C_n(\dots)$ все спаривания, выполненные внутри выражения (...). Тогда

$$\begin{aligned} C_n(\text{th } \hat{\Delta}_1 \text{ th } \hat{\Delta}_2 \exp \hat{\mathcal{D}}_2) &= C_n(\text{th } \hat{\Delta}_1 \text{ th } \hat{\Delta}_2) C_n(\exp \hat{\mathcal{D}}_2) + \\ &+ C_n(\text{th } \hat{\Delta}_1 \text{ th } \hat{\Delta}_2 \hat{\mathcal{D}}_2) C_n(\exp \hat{\mathcal{D}}_2) + \\ &+ \frac{1}{2} C_n(\text{th } \hat{\Delta}_1 \text{ th } \hat{\Delta}_2 \hat{\mathcal{D}}_2^2) C_n(\exp \hat{\mathcal{D}}_2) + \dots \end{aligned} \quad (9.42)$$

Подставляя это выражение в формулу (9.40) и интегрируя по ρ , для $\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle$ получаем выражение (9.38). При этом диаграммы с одной полевой вершиной возникают при гауссовом усреднении выражения

$$\langle C_n(\text{th } \hat{\Delta}_1 \text{ th } \hat{\Delta}_2 \hat{\mathcal{D}}_2) \rangle_G = e^{\hat{g}(12)} \left(\text{diagram 1} - \text{diagram 2} \right). \quad (9.43)$$

Расписанные в виде ряда по степеням экранированного потенциала, эти диаграммы имеют вид

$$e^{\hat{g}(12)} \left(\text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots + \text{diagram 4} + \dots \right), \quad (9.44)$$

Совокупности n линий g , соединяющим две вершины, ставится в соответствие обратный факториал $1/n!$. Например, для диаграммы



имеем следующее явное выражение:

$$\begin{aligned} e^{\hat{g}(12)} \text{diagram} &= e^{\hat{g}(12)} \sum_1 \hat{g}(|1-1|) \frac{1}{3!} \hat{g}^3(|1-2|) G_1 \times \\ &\times \text{th } h_1 \cdot \text{th } h_2 |_{h_1=h_2=h_1=0}; \end{aligned} \quad (9.45)$$

аналогично

$$\begin{aligned} e^{\hat{g}(12)} \text{diagram} &= e^{\hat{g}(12)} \sum_1 \frac{1}{2!} \hat{g}^2(|1-1|) \frac{1}{2!} \hat{g}^2(|1-2|) G_1 \times \\ &\times \text{th } h_1 \text{ th } h_2 |_{h_1=h_2=h_1=0} \end{aligned} \quad (9.46)$$

и в общем виде

$$\begin{aligned} e^{\hat{g}(12)} \text{diagram}^n &= e^{\hat{g}(12)} \sum_1 \frac{1}{m!} \hat{g}^m(|1-1|) \frac{1}{n!} \hat{g}^n(|1-2|) \times \\ &\times G_1 \text{th } h_1 \text{ th } h_2 |_{h_1=h_2=h_1=0}. \end{aligned} \quad (9.47)$$

Первые три диаграммы в (9.44) возникают в результате спаривания оператора \hat{D}_4 , входящего в состав $\hat{\mathcal{D}}_2$ в формуле (9.43); диаграмма (9.47) — одна из диаграмм, возникающих в результате спаривания

оператора \hat{D}_{m+n} , который также входит в состав \hat{D}_2 . Диаграммы с двумя полевыми вершинами возникают в (9.42) в результате спариваний в операторе \hat{D}_2^2 :

$$\left\langle \text{Cn} \left(\text{th } \hat{\Delta}_1 \text{ th } \hat{\Delta}_2 \frac{1}{2} \hat{D}_2^2 \right) \right\rangle_G = \exp(\hat{g}(12)) \times$$

$$\times [\text{диаграммы с двумя полевыми вершинами (9.38)}]. \quad (9.48)$$

Записанные в виде ряда по степеням экранированного потенциала, диаграммы с двумя полевыми вершинами имеют вид

$$\left\langle \text{Cn} \left(\text{th } \hat{\Delta}_1 \text{ th } \hat{\Delta}_2 \frac{1}{2} \hat{D}_2^2 \right) \right\rangle_G = \exp(\hat{g}(12)) \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \right.$$

$$\left. + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \dots + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \dots \right]. \quad (9.49)$$

Первые четыре диаграммы возникают в результате спаривания в (9.44) двух операторов $\hat{D}_4 \hat{D}_4$, которые входят в состав $\frac{1}{2} \hat{D}_2^2$. Для диаграмм с n полевыми вершинами имеем

$$\left\langle \text{Cn} \left(\text{th } \hat{\Delta}_1 \text{ th } \hat{\Delta}_2 \frac{1}{n!} \hat{D}_2^n \right) \right\rangle_G = (\exp g(12)) \times$$

$$\times (\text{диаграммы с } n \text{ полевыми вершинами}). \quad (9.50)$$

Мы рассматриваем ряды для свободной энергии и для бинарной корреляционной функции. При этом в выражениях для кумулянтов ограничиваемся слагаемыми с неприводимыми замкнутыми суммами $\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n = 0$. В действительности эти суммы приводимы и спаривания возникают уже внутри каждого оператора D_n . Учет этого фактора приводит к перенормировке вершины и экранированного потенциала, возникает аналог первого вириального коэффициента, который соответствует полному спариванию внутри D_n . В перенормированном варианте вместо \mathfrak{M}_2 будет другая постоянная, однако общая структура вириальных рядов не изменится. Соответствующие результаты приведены в работах [27, 61]. Для дальнейших целей достаточны выражения (9.38) — (9.50), которые были найдены в результате спаривания неприводимых сумм. Приводимые суммы частично рассмотрены в § 21.

Как вытекает из выражений (9.38) или (9.40), сходимость групповых интегралов зависит от поведения экранированного потенциала $g(|1-j|)$, заданного формулами (9.9) и (9.16). Поведение $g(|1-j|)$ на больших расстояниях $r = |j-1|$ определяется формой фурье-образа $\tilde{g}(k)$ при малых значениях k . Полагая согласно (1.11) $\beta\tilde{\Phi}(k) = \beta\tilde{\Phi}(0) - qk^2$, для $\tilde{g}(k)$ при малых значениях k имеем

$$\tilde{g}(k) \xrightarrow{k \rightarrow 0} \frac{\beta\tilde{\Phi}(0)}{1 - \mathfrak{M}_2 \beta\tilde{\Phi}(0) + \mathfrak{M}_2 q k^2} = \frac{\beta\tilde{\Phi}(0) (\mathfrak{M}_2 q)^{-1}}{x^2 + k^2}, \quad (9.51)$$

где

$$\kappa^2 = \xi^{-2} = [1 - \mathfrak{M}_2 \tilde{\Phi}(0)] (\mathfrak{M}_2 q)^{-1}; \quad (9.52)$$

ξ — радиус «экранирования», который будет и эффективным радиусом корреляции для бинарной корреляционной функции.

Действительно, как вытекает из (9.41),

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle_{G, r=|1-2| \rightarrow \infty} \sim \hat{g}(|1-2|) G_1 G_2 - \mathfrak{M}_2 \frac{\beta \tilde{\Phi}(0)}{q} \frac{e^{-r/\xi}}{r}. \quad (9.53)$$

В точке

$$T'_c = \mathfrak{M}_2 \tilde{\Phi}(0) \quad (9.54)$$

и обращается в ноль, а экранированный потенциал $g(r)$, а с ним и бинарная корреляционная функция ведут себя на больших расстояниях r как r^{-1} . Такое поведение $g(r)$ приводит к расходимости некоторых групповых интегралов в формулах (9.24) — (9.26) для свободной энергии и соответственно в формулах (9.38) для бинарной корреляционной функции. Возникновение расходимостей при $T \rightarrow T'_c$ интуитивно вполне понятно из элементарных оценок групповых интегралов: так как каждая полевая вершина вносит в корреляционную функцию вклад, пропорциональный r^3 , а экранированный потенциал при $T \approx T'_c$ ведет себя как r^{-1} , то становится ясным, что диаграммы, у которых много полевых вершин и мало линий g (меньше, чем в среднем по три на каждую полевую вершину), будут расходиться при $T \rightarrow T'_c$. В связи с этим вириальные разложения (9.21) и (9.38) становятся некорректными при $T = T'_c$, и расчет статистической суммы и бинарной корреляционной функции следует вести по-другому. Оказывается, в качестве базисной следует выбрать новую негауссову плотность меры.

§ 10. БАЗИСНАЯ ПЛОТНОСТЬ МЕРЫ В ОКРЕСТНОСТИ КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКИ

Исследуем поведение групповых интегралов в бинарной корреляционной функции (9.38). Согласно формулам (9.43) — (9.47) диаграммы с одной полевой вершиной в (9.38) возникают от спаривания оператора \mathcal{D}_2 ; согласно (9.48) спаривание оператора \mathcal{D}_2^2 приводит к диаграммам с двумя полевыми вершинами и т. д.

Выясним поведение корреляционной функции (9.38) и интегралов в выражениях для свободной энергии (9.21) — (9.26) в пространственной области, расположенной внутри сферы с радиусом, равным радиусу корреляции ξ , при предельном переходе $T \rightarrow T'_c$. Наряду с условием $\xi \rightarrow \infty$ должно выполняться условие $r/\xi \ll 1$. Рассмотрим бинарную корреляционную функцию [63, 64]. Полученные оценки будут справедливы и для свободной энергии, исследование которой выполнено в работах [75, 98, 99].

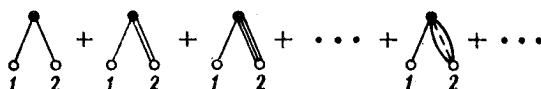
Начнем с исследования диаграмм (9.43) — (9.47) с одной полевой вершиной и двумя фиксированными вершинами. Обозначим через R расстояние между фиксированными вершинами: $R = |1 - 2|$. Нас будет интересовать поведение диаграмм для больших значений R при $\kappa \rightarrow 0$ и $\kappa R < 1$. В качестве экранированного потенциала $g(r)$ используем функцию (9.53)₁ справедливую в приближении больших расстояний:

$$g(r) \approx A [\exp(-r/\xi)]/r, \quad (10.1)$$

где

$$A = \beta \tilde{\Phi}(0) \mathfrak{M}_2 q^{-1}. \quad (10.2)$$

Расстояние r будем считать величиной непрерывной, и каждой полевой вершине в диаграммах поставим в соответствие вместо суммы по узлам \sum_1 интеграл по координатам $\int dr$. Приступая к оценке асимптотического поведения (9.44)₁, рассмотрим более общий ряд диаграмм



$$+ \dots + \dots \quad (10.3)$$

Первая диаграмма возникла бы в (9.43) в результате спаривания оператора \hat{D}_2 , вторая — оператора \hat{D}_3 , третья — \hat{D}_4 и т. д. Значения $\text{th } h_1 \cdot \text{th } h_2$ для светлых кружков в диаграмме (10.3) выписывать не будем. Для первой диаграммы в биполярной системе координат имеем

$$I_{11} = \bigwedge = \mathfrak{M}_2 \frac{2\pi}{R} \int_c^\infty r dr g(r) \int_{|R-r|}^{R+r} S dS g(S). \quad (10.4)$$

Выделим две области интегрирования: «далекую» и «близкую». «Далекой» считается область изменения r вне сферы радиуса R , «близкой» — область внутри этой сферы в сферическом слое $R/m \leq r \leq R$, где m — конечное число. Что происходит на очень малых расстояниях — нас в данный момент не интересует, полагаем, что там все сходится. Соответственно этому

$$I_{11} = u_{11} + w_{11}, \quad (10.5)$$

где u_{11} — интеграл по близкой области:

$$\begin{aligned} u_{11} &= \frac{2\pi}{R} \mathfrak{M}_2 \int_0^R r dr g(r) \int_{R-r}^{r+R} S dS g(S) = \\ &= A^2 \frac{2\pi}{R} \mathfrak{M}_2 e^{-\kappa R} \left(\frac{e^{-2\kappa R} - e^{-2\kappa c}}{2\kappa} + R - c \right); \end{aligned} \quad (10.6)$$

$c = R/m$, а w_{11} — интеграл по далекой области:

$$w_{11} = \frac{2\pi}{R} \mathfrak{M}_2 \int_R^\infty r dr g(r) \int_{r-R}^{r+R} S dS g(S) = A^2 \mathfrak{M}_2 \frac{2\pi}{\kappa} \frac{\text{sh } \kappa R}{\kappa R} e^{-2\kappa R}. \quad (10.7)$$

В предельном переходе $\kappa \rightarrow 0$, $\kappa R < 1$, $\frac{\text{sh } \kappa R}{\kappa R} \approx 1$ имеем

$$u_{11} \approx \kappa^{-1} f_1'(\kappa R) = 2\pi e^{-\kappa R} \frac{R^2 - c^2}{R} A^2 \mathfrak{M}_2, \quad (10.8)$$

где

$$\begin{aligned} f_1'(\kappa R) &= 2\pi \kappa R A^2 \mathfrak{M}_2 e^{-\kappa R}; \\ w_{11} &\approx \kappa^{-1} f_1''(\kappa R); \\ f_1''(\kappa R) &= 2\pi A^2 \mathfrak{M}_2 e^{\kappa R}. \end{aligned} \quad (10.9)$$

Как видим, обе части диаграммы при $\kappa \rightarrow 0$, $\kappa R < 1$ расходятся пропорционально κ^{-1} и имеют, естественно, одинаковую размерность. Пропорциональность величин u_{11} , R в (10.8) и w_{11} , ξ можно объяснить тем, что полевая вершина вносит в интегрирование вклад, пропорциональный R^{-3} , а g^2 — вклад, пропорциональный R^{-2} . В общем случае для любой из диаграмм (10.3) имеем

$$I_{1n} = u_{1n} + w_{1n}, \quad (10.10)$$

где

$$u_{1n} = 2\pi \mathfrak{M}_{n+1} A^{n+1} \left[\frac{e^{-\kappa R}}{\kappa R} \int_0^R \frac{e^{-(n-1)\kappa r} - e^{-(n+1)\kappa r}}{r^{n-1}} dr \right]; \quad (10.11)$$

$$w_{1n} = 4\pi \mathfrak{M}_{n+1} A^{n+1} \frac{\text{sh } \kappa R}{\kappa R} \int_R^\infty \frac{e^{-(n+1)\kappa r}}{r^{n-1}} dr. \quad (10.12)$$

Диаграмма I_{1n} возникает в результате спаривания оператора \hat{D}_{n+1} в полевой вершине в (9.43). В выражении для u_{1n} под интегралом можем разложить экспоненты в ряд и убедиться, что при $\kappa \rightarrow 0$ $u_{1n} \rightarrow \text{const}$ для всех n .

Интегрируя по r , для u_{1n} находим

$$\begin{aligned} u_{1n} = 2\pi \mathfrak{M}_{n+1} A^{n+1} \frac{e^{-\kappa R}}{\kappa R} \left\{ \frac{E_{n-1}[(n-1)\kappa c]}{c^{n-2}} - \frac{E_{n-1}[(n-1)\kappa R]}{R^{n-2}} - \right. \\ \left. - \frac{E_{n-1}[(n+1)\kappa c]}{c^{n-2}} + \frac{E_{n-1}[(n+1)\kappa R]}{R^{n-2}} \right\}, \end{aligned} \quad (10.13)$$

где

$$\int_x^\infty \frac{e^{-\kappa r}}{r^n} dr = \frac{1}{x^{n-1}} E_n(\kappa x),$$

$E_n(\kappa x) = \int_1^\infty \frac{e^{-\kappa xt}}{t^n} dt$ — интегральная показательная функция;

$$E_n(\kappa x) = e^{-\kappa x} \alpha_n(\kappa x) + \frac{(-\kappa x)^{n-1}}{(n-1)!} E_1(\kappa x), \quad n > 1; \quad (10.14)$$

$$\alpha_n(\kappa x) = \frac{1}{n-1} - \frac{\kappa x}{(n-1)(n-2)} + \dots + \frac{(-\kappa x)^{n-2}}{(n-1)!}; \quad \alpha_1 = 0.$$

Явные значения E_n и $c = R/m$ подставляем в (10.13). В результате убеждаемся, что $u_{1n} \sim 1/R^{n-2}$. Придерживаясь условия $\kappa R \ll 1$, выделяем в u_{1n} безразмерную часть:

$$u_{1n} = \kappa^{n-2} f'_n(\kappa R), \quad (10.15)$$

где

$$f'_n(\kappa R) = 2\pi \mathfrak{M}_{n+1} A^{n+1} \frac{e^{-\kappa R}}{(\kappa R)^{n-1}} \left\{ E_{n-1} \left[(n-1) \kappa \frac{R}{m} \right] m^{n-2} - \right. \\ \left. - E_{n-1} [(n-1) \kappa R] - E_{n-1} \left[(n+1) \frac{\kappa R}{m} \right] m^{n-2} + E_{n-1} [(n+1) \kappa R] \right\}.$$

Для далекой части w_{1n} получаем

$$w_{1n} = 4\pi \mathfrak{M}_{n+1} A^{n+1} \frac{\text{sh } \kappa R}{\kappa R} \frac{E_{n-1} [(n+1) \kappa R]}{R^{n-2}} = f'_n(\kappa R) \kappa^{n-2}. \quad (10.16)$$

При $n = 2$ (спаривание оператора D_3) имеем специальный случай:

$$u_{12} = 4\pi \mathfrak{M}_3 A^3 \frac{e^{-\kappa R}}{\kappa R} [E_1(\kappa c) - E_1(3\kappa c) - E_1(\kappa R) + E_1(3\kappa R)], \quad (10.17)$$

где

$$E_1(\kappa c) = -\gamma - \ln \kappa c - \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(\kappa c)^n}{n \cdot n!};$$

$\gamma = 0,5772$ — постоянная Эйлера. В предельном переходе $\kappa \rightarrow 0$ u_{12} остается конечной величиной. Для далекой части w_{12} находим

$$w_{12} \sim 4\pi \mathfrak{M}_3 A^3 \frac{\text{sh } \kappa R}{\kappa R} E_1(3\kappa R); \quad (10.18)$$

при $\kappa \rightarrow 0$ имеем логарифмическую расходимость:

$$w_{12} \sim 4\pi \mathfrak{M}_3 A^3 \frac{\text{sh } \kappa R}{\kappa R} \ln 3\kappa R. \quad (10.19)$$

Функции u_{1n} и w_{1n} сходятся при $\kappa \rightarrow 0$ и $n \geq 3$. Как вытекает из (10.13) и (10.16), функция $I_{1n}(R)$ при больших значениях R ведет себя как $1/R^{n-2}$. Это можно объяснить таким образом: в результате интегрирования $\int \dots dr$, которое соответствует полевой вершине в (9.43), исходная степень $g^{n+1}(r) \sim r^{-(n+1)}$ уменьшается на 3 и тогда $I_{1n}(R) \sim R^{-(n-2)}$.

Итак, выполненное исследование диаграмм с одной полевой вершиной при $\kappa \rightarrow 0$, $R \rightarrow \infty$, $\kappa R < 1$ показало, что диаграммы, возникающие в (9.43) при спаривании в полевой вершине операторов \hat{D}_2 и \hat{D}_3 , расходятся; спаривание же операторов \hat{D}_4 , \hat{D}_5 , ..., \hat{D}_n приводит после интегрирования к сходящимся диаграммам. В операторе \hat{D}_2 нет операторов \hat{D}_2 , \hat{D}_3 , \hat{D}_5 , поэтому все диаграммы (9.43) — (9.47) сходятся. Операторы \hat{D}_{2n+1} отсутствуют потому, что в задаче

(1.1) нет внешнего неоднородного поля $\mathcal{H}(R)$. А оператор \hat{D}_2 , приводящий к наиболее сильной расходимости (10.9), внесен в базисную плотность меры (8.1), в данном случае в гауссову базисную плотность меры, заданную выражением (9.4).

Оценки (10.15) — (10.19) дают возможность проследить за асимптотическим поведением диаграмм с двумя и более полевыми вершинами в выражениях (9.43) — (9.50). При этом наиболее сильно будут расходиться диаграммы с большим числом полевых вершин и малым числом линий g , соединяющих эти вершины. В каждой диаграмме выделим близкую (u) и далекую (w) части.

Рассмотрим диаграммы с двумя полевыми вершинами. Начнем с простейшего примера, с диаграммы

$$I_{111} = \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \\ \bullet \end{array} \cdot \quad (10.20)$$

Она возникла бы в (9.48) при спаривании вместо $\frac{1}{2!} \hat{D}_2^2$ операторов $\frac{1}{2} (\hat{D}_2)^2$. Таких операторов нет в \hat{D}_2 , они внесены в базисную плотность меры в (9.1), в формулах (9.48) и (9.49) нет и диаграммы (10.20). Однако рассмотрение этих интегралов полезно. Это была бы диаграмма, которая имеет наиболее сильную расходимость при $\kappa \rightarrow 0$, $R \rightarrow \infty$, $\kappa R < 1$. Выделим в диаграмме (10.20) близкую и далекую части. Обе будут иметь расходимости одинакового порядка по κ , но различные зависимости от R . Воспользуемся выражениями (10.5)₂, (10.8), (10.9) для I_{111} :

$$I_{111} = \frac{2\pi}{R} \mathfrak{M}_2 \int_0^\infty r dr g(r) \int_{|r-R|}^{r+R} S dS [u_{11}(S) + w_{11}(S)] = u_{111} + w_{111}, \quad (10.21)$$

где

$$\begin{aligned} u_{111} &= \frac{2\pi}{R} \mathfrak{M}_2 \int_0^R r dr g(r) \int_{R-r}^{R+r} S dS [u_{11}(S) + w_{11}(S)]; \\ w_{111} &= \frac{2\pi}{R} \mathfrak{M}_2 \int_R^\infty r dr g(r) \int_{r-R}^{R+r} S dS [u_{11}(S) + w_{11}(S)]. \end{aligned} \quad (10.22)$$

Подставляя вместо $u_{11} + w_{11}$ их значения, получаем явные выражения для u_{111} и w_{111} . Так,

$$u_{111} = u_{111}^{(1)} + u_{111}^{(2)}, \quad (10.23)$$

где

$$u_{111}^{(1)} = \frac{2\pi}{R} \mathfrak{M}_2^2 A^3 \int_0^R e^{-\kappa r} dr \int_{R-r}^{R+r} \frac{2\pi}{\kappa^2} \left[\frac{e^{-\kappa S}}{2} (e^{-2\kappa S} - e^{-2\kappa c}) + \right.$$

$$+ e^{-\kappa S} \kappa (S - c) \Big] dS; \quad (10.24)$$

$$u_{111}^{(2)} = \frac{2\pi}{R} \mathfrak{M}_2^2 A^3 \int_c^R e^{-\kappa r} dr \int_{R-r}^{R+r} \frac{2\pi}{\kappa^2} e^{-\kappa S^2} \operatorname{sh} \kappa S dS. \quad (10.25)$$

Нас интересует u_{111} в предельном переходе $\kappa \rightarrow 0$, $\kappa R < 1$, поэтому можем разложить в ряд выражения под внутренним интегралом:

$$\int_{R-r}^{R+r} \frac{2\pi}{\kappa^2} [e^{-\kappa S} \kappa^2 (S^2 - c^2)] dS = 4\pi \left[\frac{1}{3} r^3 + rR^2 (1 - m^{-2}) \right].$$

В результате

$$u_{111}^{(1)} = \frac{8\pi^2}{R} \mathfrak{M}_2^2 A^3 \int_c^R \left[\frac{1}{3} r^3 e^{-\kappa r} + e^{-\kappa r} rR^2 (1 - m^{-2}) \right] dr. \quad (10.26)$$

После интегрирования и подстановки границ в пределе $\kappa \rightarrow 0$, $\kappa R < 1$, $R \rightarrow \infty$ получаем

$$u_{111}^{(1)} = 8\pi^2 \mathfrak{M}_2^2 A^3 \left[\frac{1}{12} (1 - m^{-4}) + \frac{1}{2} (1 - m^{-2}) \right] \frac{m^2 - 1}{m^2} R^3 e^{-\kappa R}. \quad (10.27)$$

Выполним такие же расчеты для $u_{111}^{(2)}$:

$$\begin{aligned} u_{111}^{(2)} &= \frac{2\pi}{R} \mathfrak{M}_2^2 A^3 \int_c^R dr \exp(-\kappa r) \int_{R-r}^{R+r} \frac{2\pi}{\kappa^2} e^{-2\kappa S} \operatorname{sh} \kappa S dS = \\ &= 4\pi^2 \mathfrak{M}_2^2 A^3 \kappa^{-1} R^2 (1 - m^{-2}) \exp(-\kappa R). \end{aligned} \quad (10.28)$$

Если принять во внимание предельный переход $\kappa \rightarrow 0$, $R \rightarrow \infty$, $\kappa R < 1$ и учесть, что

$$R^3 = \kappa^{-3} (\kappa R)^3 \quad \text{и} \quad R^2 \kappa^{-1} = (\kappa R)^2 / \kappa^3,$$

то величина $u_{111}^{(1)} + u_{111}^{(2)}$ расходится таким образом:

$$u_{111} = u_{111}^{(1)} + u_{111}^{(2)} \sim \kappa^{-3}. \quad (10.29)$$

Далекая часть w_{111} также состоит из двух слагаемых: $w_{111}^{(1)}$, содержащего u_{11} , и $w_{111}^{(2)}$, содержащего w_{11} . Первое из них

$$w_{111}^{(1)} = \frac{2\pi}{R} \mathfrak{M}_2^2 A^3 \int_R^\infty e^{-\kappa r} dr \int_{r-R}^{r+R} u_{11}(S) S dS. \quad (10.30)$$

Во втором интеграле подставляем (10.6) для u_{11} и выполняем те же разложения, что при расчете (10.23), в результате в предельном переходе $\kappa \rightarrow 0$, $R \rightarrow \infty$, $\kappa R < 1$

$$\begin{aligned} w_{111}^{(1)} &= \frac{2\pi}{R} \mathfrak{M}_2^2 A^3 \int_R^\infty dr e^{-\kappa r} 4\pi \left(\frac{1}{3} R^3 + Rr^2 \right) = \\ &= 8\pi^2 \mathfrak{M}_2^2 A^3 e^{-\kappa R} \left(\frac{4}{3} \frac{R^2}{\kappa} + 2 \frac{R}{\kappa^2} + \frac{2}{\kappa^3} \right). \end{aligned}$$

В рассматриваемом предельном переходе это выражение расходится пропорционально κ^{-3} . Так же ведет себя и второе слагаемое:

$$\begin{aligned} w_{111}^{(2)} &= \frac{2\pi}{R} \mathfrak{M}_2 A \int_R^\infty dr e^{-\kappa r} \int_{r-R}^{r+R} S dS w_{11}(S) = \\ &= \frac{4\pi^2}{R} \mathfrak{M}_2^2 A^3 \int_R^\infty dr e^{-\kappa r} \int_{r-R}^{r+R} \frac{\text{sh } \kappa S}{\kappa^2} e^{-\kappa r S} dS. \end{aligned}$$

В предельном переходе $\kappa \rightarrow 0$, $R \rightarrow \infty$, $\kappa R < 1$

$$w_{111}^{(2)} = 4\pi^2 \mathfrak{M}_2^2 A^3 e^{-\kappa R} \frac{1}{2} \frac{1}{\kappa^3}. \quad (10.34)$$

Как видим, характер поведения всех четырех частей диаграммы одинаков, все они пропорциональны κ^{-3} . Поэтому в дальнейшем рассмотрении будем заниматься лишь какой-нибудь одной частью, например связанной только с далекими слагаемыми [63, 64].

При оценке диаграммы $I_{131} = \boxed{\text{---}} \text{---}$, образованной спариванием операторов \hat{D}_4^2 , воспользуемся результатом (10.16) для случая $n = 3$ и рассмотрим вклады от далеких частей:

$$\begin{aligned} w_{131}^{(2)} &\approx \frac{\mathfrak{M}_4^2 A^5}{R} \int_R^\infty E_2(4\kappa r) dr \int_{r-R}^{r+R} e^{-\kappa S} dS = \\ &= \mathfrak{M}_4^2 A^5 \int_R^\infty E_2(4\kappa r) e^{-\kappa r} \frac{\text{sh } \kappa R}{\kappa R} dr \sim \mathfrak{M}_4^2 A^5 \frac{\text{sh } \kappa R}{\kappa R} \frac{1}{\kappa} e^{-5\kappa R}, \quad (10.32) \end{aligned}$$

где принято [55] $E_{n-1}(\kappa x) \sim e^{-\kappa x}/(n-2)$, $n > 2$.

Таким образом, в предельном переходе $\kappa \rightarrow 0$, $R \rightarrow \infty$, $\kappa R < 1$ диаграмма w_{131} расходится пропорционально κ^{-1} .

Для диаграммы I_{151} , возникающей при спаривании \hat{D}_6^2 , имеем согласно (10.13) следующую интегральную оценку:

$$I_{151} \sim \mathfrak{M}_6^2 A^7 \frac{1}{R} \int_R^\infty \frac{E_4(6\kappa r)}{r^2} dr \int_{r-R}^{r+R} e^{-\kappa S} dS \sim \kappa f_6(\kappa R), \quad (10.33)$$

где $f_6(\kappa R) = \mathfrak{M}_6^2 A^7 \frac{\text{sh } \kappa R}{\kappa R} \frac{e^{-7\kappa R}}{\kappa R}$ — сходящаяся функция κR . При $\kappa \rightarrow 0$ вклад I_{151} в асимптотическое поведение бинарной корреляционной функции пропорционален κ .

Для других диаграмм с двумя полевыми вершинами находим

$$I_{171} \sim \mathfrak{M}_8 A^9 \frac{\text{sh } \kappa R}{\kappa R} \frac{e^{-9\kappa R}}{R^3} = \kappa^3 f_8(\kappa R); \quad (10.34)$$

$$I_{1n1} \sim \kappa^{n-4} f_{n+1}(\kappa R). \quad (10.35)$$

Диаграмма I_{171} возникает в результате спаривания операторов

$\frac{1}{2} \hat{D}_8^2$ в формуле (9.49), а диаграмма I_{1n1} — в результате спаривания операторов $\frac{1}{2} \hat{D}_{n+1}^2$. Как видим, вклад операторов с большими n в асимптотическое поведение бинарной корреляционной функции при $\kappa \rightarrow 0$ исчезающе мал. Асимптотические оценки (10.8), (10.9), (10.15), (10.16), (10.27)—(10.35) можно легко получить с помощью масштабных преобразований.

В рассмотренных диаграммах каждую линию сопоставим с величиной, пропорциональной κ :

$$g(r) \sim \kappa A \frac{e^{-\kappa r}}{\kappa r} = \kappa g(\kappa r),$$

а интеграл по координатам, соответствующий полевой вершине, — с величиной

$$d\mathbf{r} = \frac{1}{\kappa^3} d(\kappa \mathbf{r}).$$

В результате получим следующие асимптотические оценки диаграмм:

$$\text{Diagram 1} \sim \kappa^2 \kappa^{-3} = \kappa^{-1}; \quad (10.36)$$

$$\text{Diagram 2} \sim \kappa^3 \kappa^{-3} = \kappa^0; \quad (10.37)$$


$$\text{Diagram 3} \sim \kappa^4 \kappa^{-3} = \kappa^1;$$

$$\text{Diagram 4} \sim \kappa^{n+1} \kappa^{-3} = \kappa^{n-2};$$

$$\text{Diagram 5} \sim \kappa^3 \kappa^{-6} = \kappa^{-3}; \quad (10.38)$$

$$\text{Diagram 6} \sim \kappa^5 \kappa^{-6} = \kappa^{-1};$$

$$\text{Diagram 7} \sim \kappa^{n+2} \kappa^{-6} = \kappa^{n-4}.$$

Все приведенные здесь оценки совпадают с результатами расчетов, за исключением оценки (10.37) для диаграммы , которая согласно (10.18) при $\kappa \rightarrow 0$, $\kappa R < 1$ пропорциональна $\ln \kappa R$. С помощью масштабной оценки можно выяснить асимптотическое поведение любой диаграммы в бинарной корреляционной функции, и она

будет верна во всех случаях, за исключением тех, в которых оценка пропорциональна κ^0 , — в этих случаях истинная оценка, подобно (10.18), будет пропорциональна $\ln \kappa R$.

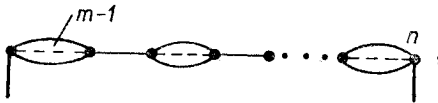
Выполним масштабную оценку диаграммы (9.50). Рассмотрим среднее

$$\left\langle \text{Cn} \left[\text{th } \hat{\Delta}_1 \text{ th } \hat{\Delta}_2 \frac{1}{n!} (D_m)^n \right] \right\rangle_G. \quad (10.39)$$

Эта диаграмма имеет n полевых вершин. Из каждой вершины исходит m линий g . Множитель $\exp \hat{g}$ (12) и фиксированные вершины диаграммы не учитываются. Для конкретности вместо $\text{th } \hat{\Delta}_1 \text{ th } \hat{\Delta}_2$ подставим $\hat{\Delta}_1 \hat{\Delta}_2$ и рассмотрим среднее

$$\left\langle \text{Cn} \left[\hat{\Delta}_1 \hat{\Delta}_2 \frac{(D_m)^n}{n!} \right] \right\rangle_G. \quad (10.40)$$

Этому случаю соответствует диаграмма



имеющая n вершин и $\frac{1}{2} nm + 1$ линий. При $\kappa \rightarrow 0$ она пропорциональна

$$\kappa \left(-3n + \frac{1}{2} nm + 1 \right) = \kappa \frac{1}{2} n(m-6) + 1. \quad (10.41)$$

Таким образом, в общем случае в ряде (9.38) бинарной корреляционной функции при $T \rightarrow T'_c$ и $\kappa \rightarrow 0$ возникают расходящиеся диаграммы. Все они образуются при спаривании операторов D_m , где $m < 6$. Отобразить и просуммировать эти диаграммы, по-видимому, невозможно. Чтобы не появились расходящиеся диаграммы, необходимо операторы D_2 и D_4 сохранить в экспоненте. Таким образом, мы вновь приходим к формуле (8.3). Сформулируем доказанную выше теорему.

Теорема о базисной плотности меры в критической точке.

1. При температуре $T = T'_c$, определяемой соотношением (9.54), в ряде (9.38) для бинарной корреляционной функции и в вириальном разложении для свободной энергии возникают в результате усреднения операторов $(D_4)^n$ расходящиеся интегралы.

2. Если в (9.3) или в (9.40) из оператора \mathcal{D}_2 исключить оператор D_4 , записав $\mathcal{D}_2 = D_4 + \bar{\mathcal{D}}$, то в выражениях

$$Z = 2^N \int \exp[-\beta H(\rho)] \left(1 + \bar{\mathcal{D}} + \frac{1}{2} (\bar{\mathcal{D}})^2 + \dots \right) \times \\ \times \exp \left(-\frac{1}{2} \mathfrak{M}_2^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right) (d\rho)^N$$

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = Z^{-1} \int \exp[-\beta H(\rho)] \text{th } \Delta_1 \text{th } \Delta_2 \left(1 + \bar{\mathcal{D}} + \frac{1}{2} (\bar{\mathcal{D}})^2 + \dots \right) \times \\ \times \exp\left(-\frac{1}{2} \mathfrak{M}_2^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}\right) (d\rho)^N$$

не будет расходящихся интегралов ни при какой температуре⁶.

3. Плотность меры вида

$$W_4(\rho) = 2^N \int \exp[-\beta H(\rho)] \exp\left[i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} + D_2(\omega) + D_4(\omega)\right] (d\omega)^N \quad (10.42)$$

является базисной в окрестности температур, содержащих критическую точку.

Как следует из формулы (10.41), оператор \hat{D}_6 является граничным. Среднее вида (10.39), (10.40) относительно оператора D_6 может приводить к логарифмическим расходимостям:

$$\left\langle C_n \left[\hat{\Delta}_1 \hat{\Delta}_2 \frac{1}{n!} (D_6)^n \right] \right\rangle_G \sim \ln \kappa R, \quad (10.43)$$

так что в общем случае, например, при рассмотрении критической точки пар — жидкость, базисной является шестерная плотность меры

$$W_6(\rho) = 2^N \int e^{-\beta H(\rho)} \exp\left[i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} + D_2 + D_4 + D_6\right] (d\omega)^N. \quad (10.44)$$

В D -мерном случае экранированный потенциал (10.1) ведет себя асимптотически:

$$g(r) \sim A' e^{-r/\xi} r^{-D+2}$$

для $D \geq 3$. В результате для базисной плотности меры в формуле (8.1) имеем следующее правило для определения n_0 .

На основании (10.41) в предельном переходе $\kappa \rightarrow 0$, $\kappa R < 1$ сходящимися диаграммами будут выражения, рассчитанные с помощью базисной плотности меры $W_{n_0}(\rho)$, для которой при любом n

$$-Dn + nn_0 \frac{1}{2} (D-2) > 0.$$

Таким образом,

$$n_0 = 2D/D - 2. \quad (10.45)$$

Если в трехмерном случае оператор D_6 является граничным, а распределение $W_4(\rho)$ описывает основные события, то в четырехмерном случае $n_0 = 4$ и базисным является распределение Гаусса. В двумерном случае $n_0 = \infty$ и в яcobiane перехода необходимо учитывать полную экспоненту, т. е. задача должна иметь точное решение.

⁶ За исключением логарифмических расходимостей, порождаемых усреднением операторов $(D_6)^m$.

§ 11. САМОСОГЛАСОВАННОЕ ПОЛЕ В МЕТОДЕ КОЛЛЕКТИВНЫХ ПЕРЕМЕННЫХ

В каждой приближенной задаче конечный результат можно существенно улучшить с помощью вариационного принципа. Фазовое пространство КП, как показано в § 7, содержит переменную, соответствующую параметру порядка. Интегрирование в статистической сумме можно выполнить по всем переменным, кроме переменной, соответствующей параметру порядка. Относительно этой переменной или величины, термодинамически сопряженной с ней, можно построить минимизационную процедуру. Так возникает задача на самосогласованное поле в методе КП.

Решение задачи начнем с представления гамильтониана системы. Из состава КП исключим переменные ρ_0 и ω_0 , связанные с самосогласованным полем. Запишем гамильтониан системы (1.1) (см. также (3.12)) в виде

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k} \\ \mathbf{k} \neq 0}} \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{2} \frac{1}{N} \tilde{\Phi}(0) \sum_{j,1} \sigma_j \sigma_1 - \mathcal{H} \sum_j \sigma_j. \quad (11.1)$$

Для статистического оператора вместо (3.13) получаем

$$\exp(-\beta H) = \int \exp\left(-\frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}\right) J_{cc}(\rho - \hat{\rho}) (d\rho)^{N-1}, \quad (11.2)$$

где

$$(d\rho)^{N-1} = \prod_{\substack{\mathbf{k} \\ \mathbf{k} \neq 0}} d\rho_{\mathbf{k}}^e d\rho_{\mathbf{k}}^s; \quad (11.3)$$

$$J_{cc} = \exp\left(\frac{\beta \tilde{\Phi}(0)}{2N} \sum_{j,1} \sigma_j \sigma_1 + \beta h \sum_j \sigma_j\right) J(\rho - \hat{\rho}). \quad (11.4)$$

Для $J(\rho - \hat{\rho})$ имеем выражение (3.14), из которого следует исключить переменные ω_0 , ρ_0 и оператор $\hat{\rho}_0$. В формуле (11.2) берем шпур и переходим к статистической сумме

$$Z = \int \exp\left[\frac{1}{2} \beta \sum_{\substack{\mathbf{k} \\ \mathbf{k} \neq 0}} \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}\right] J_{cc}(\rho) (d\rho)^N, \quad (11.5)$$

где $J_{cc}(\rho)$ — новый якобиан системы

$$J_{cc}(\rho) = \text{Sp} \left\{ \exp \left[\frac{1}{2N} \beta \hat{\Phi}(0) \sum_{j,1} \sigma_j \sigma_1 + \beta \mathcal{H} \sum_j \sigma_j \right] J(\rho - \hat{\rho}) \right\}. \quad (11.6)$$

От якобиана (3.16) он отличается тем, что получен путем усреднения по «системе отсчета» [66]. В (11.6) в качестве системы отсчета принимается физическая модель с гамильтонианом

$$H_c = -\frac{1}{2N} \hat{\Phi}(0) \sum_{j,1} \sigma_j \sigma_1 - \mathcal{H} \sum_j \sigma_j. \quad (11.7)$$

Оператор $\exp \left[\frac{1}{2N} \beta \tilde{\Phi}(0) \sum_{j,1} \sigma_j \sigma_1 \right]$ преобразуем к виду

$$\exp \left(\frac{\beta \tilde{\Phi}(0)}{2N} \sum_{j,1} \sigma_j \sigma_1 \right) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{N}{2\beta \tilde{\Phi}(0)} \varphi^2 + \varphi \sum \sigma_j \right\} \times \\ \times d\varphi \left(\sqrt{\frac{2\beta \tilde{\Phi}(0) \pi}{N}} \right)^{-1} \quad (11.8)$$

и воспользуемся этим выражением при расчете якобиана $J_{cc}(\rho)$ в формуле (11.6). Подставим в выражение для $J_{cc}(\rho - \hat{\rho})$ формулу (3.14) для $J_{cc}(\rho)$, тогда

$$J_{cc}(\rho) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{N}{2\beta \tilde{\Phi}(0)} \varphi^2 \right) \text{Sp} \left\{ \exp \left[(\varphi + \beta \mathcal{H}) \sum \sigma_j + \right. \right. \\ \left. \left. + i2\pi \sum_{\substack{\mathbf{k} \\ \mathbf{k} \neq 0}} \omega_{\mathbf{k}} (\rho_{\mathbf{k}} - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}) \right] \right\} (d\omega)^{N-1} d\varphi \left(\sqrt{\frac{2\beta \tilde{\Phi}(0) \pi}{N}} \right)^{-1}.$$

Расписываем $\hat{\rho}_{\mathbf{k}}$ согласно (3.10), берем Sp и получаем следующее выражение для якобиана перехода к КП с выделенной системой отсчета:

$$J_{cc}(\rho) = \left[\frac{N}{2\pi \beta \tilde{\Phi}(0)} \right]^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{N}{2\beta \tilde{\Phi}(0)} \varphi^2 + i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \right] \times \\ \times 2^N \prod_{\mathbf{j}} \text{ch} \left(\varphi + \beta \mathcal{H} - i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{N}} \omega_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{j}} \right) (d\omega)^{N-1} d\varphi. \quad (11.9)$$

Так же, как и в (4.5), записываем для ch (...) кумулянтную форму:

$$\prod_{\mathbf{j}} \text{ch} \left(\varphi + \beta \mathcal{H} - \frac{i2\pi}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{j}} \right) = [\text{ch}(\varphi + \beta \mathcal{H})]^N \exp \left[\sum_{n \geq 1} D_n(\omega) \right], \quad (11.10)$$

где, подобно (4.11) и (4.6),

$$D_n(\omega) = \frac{(-i2\pi)^n}{n!} \frac{\mathfrak{M}_n}{\sqrt{N}^{n-2}} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n} \omega_{\mathbf{k}_1} \dots \omega_{\mathbf{k}_n} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n}; \\ \mathfrak{M}_n = (\partial^n / \partial \varphi^n) \ln \text{ch}(\varphi + \beta \mathcal{H}). \quad (11.11)$$

В отличие от (4.7) здесь \mathcal{H} и φ не равны нулю: \mathcal{H} — энергия системы во внешнем поле, φ — безразмерная энергия эффективного внутреннего поля. Все \mathfrak{M}_n отличны от нуля.

Статистическая сумма (11.5) описывается теперь интегралами:

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[- (N/2\beta \tilde{\Phi}(0)) \varphi^2 + N \ln 2 \text{ch}(\varphi + \beta \mathcal{H}) \right] \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \sum_{\mathbf{k} \neq 0} [\beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + i 2\pi \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}] + \sum_{n \geq 1} D_n(\omega) \right\} \times \\ \times (d\omega)^{N-1} (d\rho)^{N-1} d\varphi (N/2\pi\beta\tilde{\Phi}(0))^{1/2}. \quad (11.12)$$

Таким образом, статистическая сумма приведена к интегрированию по коллективным переменным. Оно уже выполнено в § 9, и теперь воспользуемся готовыми результатами.

Полагая в (11.12) $\tilde{\Phi}(\mathbf{k}) = 0$, получаем задачу нулевого приближения для самосогласованного поля

$$Z_0 = (N/2\pi\beta\tilde{\Phi}(0))^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{N}{2\beta\tilde{\Phi}(0)} \varphi^2 + N \ln 2 \operatorname{ch}(\varphi + \beta\mathcal{H}) \right] d\varphi. \quad (11.13)$$

В экспоненте под интегралом имеем узкий высокий максимум. Его положение определяется соотношением

$$-\frac{N}{\beta\tilde{\Phi}(0)} \varphi + N \operatorname{th}(\varphi + \beta\mathcal{H}) = 0 \quad (11.14)$$

и находится из известного графического построения, приведенного на рис. 4. Корень уравнения $\bar{\varphi}$ определяет средний момент системы. Разлагая th в ряд, находим известные соотношения метода самосогласованного поля

$$\frac{\bar{\varphi}}{\beta\tilde{\Phi}(0)} = \mathfrak{M}_2^{(0)}(\varphi + \beta\mathcal{H}) + \frac{1}{3!} \mathfrak{M}_4^{(0)}(\varphi + \beta\mathcal{H})^3 + \dots$$

и при $\mathcal{H} = 0$

$$\pm \bar{\varphi} = \{3! [(\beta\tilde{\Phi}(0))^{-1} - \mathfrak{M}_2^{(0)}] / |\mathfrak{M}_4| \}^{1/2}. \quad (11.15)$$

Выполним теперь интегрирование по $\omega_{\mathbf{k}}$ и $\rho_{\mathbf{k}}$ в выражении (11.12). Ограничимся выражениями с точностью до четвертого вириального коэффициента, приведенными в § 9 (см. формулы (9.21)–(9.26)). Для Z имеем

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{N}{2\beta\tilde{\Phi}(0)} \varphi^2 + N \ln [2 \operatorname{ch}(\varphi + \beta\mathcal{H})] - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \ln [1 - \mathfrak{M}_2 \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})] + \mathcal{B}_2 + \mathcal{B}_3 + \mathcal{B}_4 + \dots \right\} d\varphi. \quad (11.16)$$

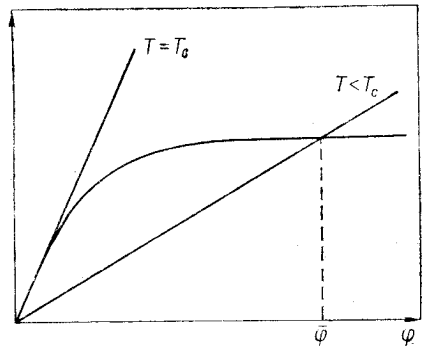


Рис. 4. Графический способ определения параметра порядка в теории самосогласованного поля.

В вириальных коэффициентах $\mathcal{B}_2, \mathcal{B}_3, \mathcal{B}_4, \dots$ каждая полевая вершина сопоставляется с суммой $\sum_1 \dots \ln \text{ch} (\varphi_1 + \beta \mathcal{H})$ (см. (9.23)), а «заряд»

$\partial/\partial h_1$ в экранированном потенциале $\hat{g}(|j-1|)$, задаваемом формулой (9.17), — с производной $\partial/\partial \varphi$, так что

$$\hat{g}(|1-j|) = (\partial/\partial \varphi_1) (\partial/\partial \varphi_1^*) g(|1-j|).$$

В (11.16) необходимо взять производные $\partial/\partial \varphi_j, \partial/\partial \varphi_1, \dots$ и затем положить все $\varphi_j, \varphi_1, \dots$ равными φ . Для нахождения точки экстремума в (11.16) берем производную по φ , в результате вместо (11.15) получаем уравнение

$$-\frac{\bar{\varphi}}{\beta \tilde{\Phi}(0)} + \text{th}(\bar{\varphi} + \beta \mathcal{H}) + \sum_k \frac{\mathfrak{M}_3 \beta \tilde{\Phi}(k)}{1 - \mathfrak{M}_2 \beta \tilde{\Phi}(k)} + \frac{\partial}{\partial \varphi} (\mathcal{B}_2 + \mathcal{B}_3 + \mathcal{B}_4 + \dots) = 0. \quad (11.17)$$

Как известно,

$$\mathfrak{M}_3 = -2 \text{th}(\varphi + \beta \mathcal{H}) \mathfrak{M}_2.$$

Взяв производную от вириальных коэффициентов, также получим выражение, пропорциональное $\text{th}(\varphi + \beta \mathcal{H})$. (Действительно, производная берется от полевой вершины и приводит к замене в ней $\ln \text{ch}(\beta \mathcal{H} + \varphi)$ на $\text{th}(\varphi + \beta \mathcal{H})$.) При этом форма вириального коэффициента не изменится. Производная относится также к экранированному потенциалу $g(j-1)$:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \varphi} \sum_k \frac{1}{N} \tilde{g}(k) \exp[i\mathbf{k}(j-1)] = \\ & = \sum_k \frac{1}{N} \frac{\beta \tilde{\Phi}(k)}{1 - \mathfrak{M}_2 \beta \tilde{\Phi}(k)} \frac{\mathfrak{M}_3 \beta \tilde{\Phi}(k)}{1 - \mathfrak{M}_2 \beta \tilde{\Phi}(k)} = \sum_m g(j-m) g(m-1) \mathfrak{M}_3 \end{aligned}$$

и в результате увеличивает на единицу число полевых вершин в диаграмме. Введем новую полевую вершину $H_1 = \sum_1 \dots \text{th}(\varphi_1 + \beta \mathcal{H}) = \blacksquare$. В результате для производной от второго вириального коэффициента получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{B}_2}{\partial \varphi} &= \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{1}{2} \sum_{1,m} \left[e^{\hat{g}(|1-m|)} - 1 - \hat{g}(|1-m|) - \frac{\hat{g}^2(|1-m|)}{2} \right] G_1 G_m = \\ &= \sum_{1,m} \left[e^{\hat{g}(|1-m|)} - 1 - \hat{g}(|1-m|) - \frac{\hat{g}^2(|1-m|)}{2} \right] H_1 G_m + \\ &+ \sum_{j,1,m} [e^{\hat{g}(|j-m|)} - 1 - \hat{g}(|j-m|)] \hat{g}(|j-1|) \hat{g}(|m-1|) G_j H_1 G_m; \end{aligned} \quad (11.18)$$

аналогично

$$\frac{\partial \mathcal{B}_3}{\partial \varphi} = \frac{1}{2} \begin{array}{c} \triangle \\ \hline \hline \hline \end{array} + \frac{1}{2} \begin{array}{c} \triangle \\ \hline \hline \hline \end{array} + \begin{array}{c} \triangle \\ \hline \hline \hline \end{array} + \dots \\ + \frac{1}{2} \begin{array}{c} \square \\ \hline \hline \hline \hline \end{array} + \frac{1}{2} \begin{array}{c} \square \\ \hline \hline \hline \hline \end{array} + \begin{array}{c} \square \\ \hline \hline \hline \hline \end{array} + \begin{array}{c} \square \\ \hline \hline \hline \hline \end{array} + \dots \quad (11.19)$$

Как видим, каждое слагаемое пропорционально $\text{th}(\varphi + \beta \mathcal{H})$. Поэтому в уравнении (11.17) th можно вынести за скобки и снова привести его к виду (11.14):

$$\frac{\varphi}{\beta \tilde{\Phi}(0)} = \text{th}(\varphi + \beta \mathcal{H}) \left[1 - \frac{2}{N} \sum_k \frac{\mathfrak{M}_2 \beta \tilde{\Phi}(k)}{1 - \mathfrak{M}_2 \beta \tilde{\Phi}(k)} + \frac{1}{\text{th}(\varphi + \beta \mathcal{H})} \left(\frac{\partial \mathcal{B}_2}{\partial \varphi} + \frac{\partial \mathcal{B}_3}{\partial \varphi} + \dots \right) \right]. \quad (11.20)$$

В результате при графическом решении задачи изменится наклон тангенсоиды, т. е. в зависимости от формы приближения будет изменяться значение критической температуры. Значение же критических индексов будет определяться основной формой зависимости от температуры, которая содержится в экранированных потенциалах в виде

$$\beta \tilde{\Phi}(k) / [1 - \mathfrak{M}_2 \beta \tilde{\Phi}(k)].$$

Следовательно, критические индексы зависят от температуры соответственно теории Ландау.

Формула (11.20) представляет собой сложное уравнение для самосогласованного поля, которое можно рассчитывать в различных приближениях. Оно полезно вне так называемой критической области. В критической области в каждом виртуальном коэффициенте возникают расходящиеся интегралы, вследствие чего следует применять негауссово базисное распределение. Для последнего также может быть построен метод самосогласованного поля.

**ИНТЕГРИРОВАНИЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЫ
В ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА**

§ 12. ЧЕТВЕРНАЯ ПЛОТНОСТЬ МЕРЫ

Приступим к основной задаче — интегрированию статистической суммы в приближении базисной плотности меры $W_4(\rho)$, заданной формулой (4.42):

$$Z = 2^N \int e^{-\beta H(\rho)} \exp \left[i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} + D_2 + D_4 \right] (d\omega)^N (d\rho)^N. \quad (12.1)$$

Значения D_2 и D_4 приведены в формулах (4.11). Назовем это приближение четверным [70—75]. Интегрирование по ω можно выполнить аналитическим путем. Для этого согласно (4.2) перейдем от $\omega_{\mathbf{k}}$ к $\tilde{\omega}_1$. Переменные под интегралом в (12.1) разделяются и по формулам (4.10)—(4.13) находим

$$Z = C \int \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} d(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{4!} \frac{1}{N} a_4 \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \times \right. \\ \left. \times \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} - \frac{1}{6!} a_6 \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_6} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_6} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_6} + \dots \right] (d\rho)^N, \quad (12.2)$$

где

$$d(k) = a_2 - \beta \tilde{\Phi}(k); \quad (12.3)$$

$$C = 2^N \sqrt{2}^{N-1} [Q(\mathfrak{M}_2 \mathfrak{M}_4)]^N; \quad (12.4)$$

$$Q(\mathfrak{M}_2 \mathfrak{M}_4) = \int_{-\infty}^{\infty} f_4(\tilde{\omega}) d\tilde{\omega}; \quad (12.5)$$

$$f_4(\tilde{\omega}) = \exp(\tilde{D}_2 + \tilde{D}_4). \quad (12.6)$$

Коэффициенты a_2 , a_4 , a_6 , ... определяем по формулам (4.16)—(4.21). Для этого достаточно знать явное выражение для C_0 (см. (4.15)), роль которого здесь играет

$$Q(\mathfrak{M}_2 \mathfrak{M}_4) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{(2\pi)^2}{2} \mathfrak{M}_2 \tilde{\omega}^2 - \frac{(2\pi)^4}{4!} |\mathfrak{M}_4| \tilde{\omega}^4 \right] d\tilde{\omega}. \quad (12.7)$$

Интеграл $Q(\mathfrak{M}_2 \mathfrak{M}_4)$ выражается через функции Бесселя мнимого аргумента, а также через функции параболического цилиндра и с

помощью обозначений [23]

$$\pi^2 \mathfrak{M}_2 = \nu, \quad \frac{(2\pi)^4}{4!} |\mathfrak{M}_4| = \mu$$

приводится к стандартной форме

$$Q(\mathfrak{M}_2 \mathfrak{M}_4) = 2 \int_0^{\infty} \exp(-\mu x^4 - 2\nu x^2) dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\nu}{\mu}} \exp\left(\frac{\nu^2}{2\mu}\right) K_{1/4}\left(\frac{\nu^2}{2\mu}\right). \quad (12.8)$$

Здесь $K_{1/4}(\nu^2/2\mu)$ — функция Бесселя мнимого аргумента. Обозначим через \mathfrak{B} аргумент функции Бесселя:

$$\mathfrak{B} = \frac{\nu^2}{2\mu} = \frac{3}{4} \frac{\mathfrak{M}_2^2}{|\mathfrak{M}_4|} = \frac{3}{8}. \quad (12.9)$$

Для функции $Q(\mathfrak{M}_2 \mathfrak{M}_4)$ получаем

$$Q(\mathfrak{M}_2 \mathfrak{M}_4) = \frac{V \sqrt[4]{2} \sqrt[3]{3}}{2\pi} (|\mathfrak{M}_4|)^{-1/4} \mathfrak{B}^{1/4} e^{\mathfrak{B}} K_{1/4}(\mathfrak{B}), \quad (12.10)$$

где

$$\begin{aligned} \sqrt[4]{2} \sqrt[3]{3} K_{1/4}(\mathfrak{B}) &= \frac{\pi}{\Gamma\left(\frac{3}{4}\right)} \left[1 - 4\gamma (\mathfrak{B}/2)^{1/2} + \frac{3}{4} (\mathfrak{B}/2)^2 - \frac{16}{5} \gamma (\mathfrak{B}/2)^{3/2} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{8}{21} (\mathfrak{B}/2)^4 - \frac{32}{45} \gamma^2 (\mathfrak{B}/2)^{5/2} + \dots \right]; \quad (12.11) \\ \gamma &= \frac{\Gamma(3/4)}{\Gamma(1/4)} = 0,338; \quad \Gamma(3/4) = 1,225. \end{aligned}$$

В случае $\mathfrak{M}_2 = 1$, $\mathfrak{M}_4 = -2$

$$Q(\mathfrak{M}_2 \mathfrak{M}_4) = \frac{\sqrt[4]{12}}{2\pi} \left(\frac{3}{8}\right)^{1/4} e^{3/8} K_{1/4}\left(\frac{3}{8}\right) = 0,348. \quad (12.12)$$

Заменой переменных

$$\tilde{\omega} = \sqrt[4]{\frac{4!}{(2\pi)^4 |\mathfrak{M}_4|^2}} V \sqrt{t} \quad (12.13)$$

интеграл (12.7) можно свести к функции параболического цилиндра

$$\begin{aligned} Q(\mathfrak{M}_2 \mathfrak{M}_4) &= \sqrt[4]{\frac{4!}{2(2\pi)^4 |\mathfrak{M}_4|}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2/2 - yt} \frac{dt}{\sqrt{t}} = \\ &= \left(\frac{4!}{2(2\pi)^4 |\mathfrak{M}_4|}\right)^{1/4} e^{y^2/4} U(0y) \Gamma(1/2), \quad (12.14) \end{aligned}$$

где

$$y = \sqrt[3]{\frac{\mathfrak{M}_2}{|\mathfrak{M}_4|^{1/2}}}. \quad (12.15)$$

В случае положительных \mathfrak{M}_2 оба выражения, (12.10) и (12.14), эквивалентны ⁷. При отрицательных значениях \mathfrak{M}_2 предпочтительнее использовать функции параболического цилиндра. Исходим из выражения (12.10) и по формулам (4.16)–(4.21) рассчитываем коэффициенты a_2, a_4, a_6, \dots для интеграла (12.2). Для производных $\partial^n / \partial \mathfrak{M}_2^n$ имеем

$$\frac{\partial \ln Q}{\partial \mathfrak{M}_2} = 2\mathfrak{M}_2^{-1} \mathfrak{Z} (1 - K(\mathfrak{Z})), \quad (12.16)$$

где

$$K(\mathfrak{Z}) = K_{1/2}(\mathfrak{Z}) / K_{1/4}(\mathfrak{Z}) > 1; \quad (12.17)$$

$$Q^{-1} \frac{\partial^2 Q}{\partial \mathfrak{M}_2^2} = \frac{3}{2} |\mathfrak{M}_4|^{-1} [1 + 4\mathfrak{Z} (1 - K)], \quad (12.18)$$

$$Q^{-1} \frac{\partial^3 Q}{\partial \mathfrak{M}_2^3} = \frac{3\mathfrak{Z}}{\mathfrak{M}_2 |\mathfrak{M}_4|} [2 - 3(1 - K) + 8\mathfrak{Z} (1 - K)], \dots$$

В результате

$$a_2 = \frac{4}{\mathfrak{M}_2} (\mathfrak{Z})^{1/2} \mathcal{H}(\mathfrak{Z}) = \sqrt{12} |\mathfrak{M}_4|^{-1/2} \mathcal{H}(\mathfrak{Z}); \quad (12.19)$$

$$a_4 = 6 |\mathfrak{M}_4|^{-1} \mathcal{L}(\mathfrak{Z}); \quad (12.20)$$

$$a_6 = |\mathfrak{M}_4|^{-3/2} \mathcal{F}(\mathfrak{Z}), \quad (12.21)$$

где

$$\mathcal{H}(\mathfrak{Z}) = \sqrt{\mathfrak{Z}} (K(\mathfrak{Z}) - 1);$$

$$\mathcal{L}(\mathfrak{Z}) = 6\mathcal{H}^2(\mathfrak{Z}) + 4\mathfrak{Z}^{1/2} \mathcal{H}(\mathfrak{Z}) - 1; \quad (12.22)$$

$$\mathcal{F}(\mathfrak{Z}) = 12\sqrt{\mathfrak{Z}} [-2 - 12(K(\mathfrak{Z}) - 1) + 8\mathfrak{Z}(K(\mathfrak{Z}) - 1) + 60(K(\mathfrak{Z}) - 1)^2 + 60\mathfrak{Z}(K(\mathfrak{Z}) - 1)^3].$$

В случае $\mathfrak{Z} = 3/8$

$$a_2 \approx 0,645, \quad a_4 \approx 0,183, \quad a_6 \approx 0,351. \quad (12.23)$$

Итак, видим, что при интегрировании четверной плотности меры в выражении (12.1) можно получить аналитические выражения. Гауссова форма (9.1) в ω -представлении после интегрирования по ω переходила в гауссову форму (9.2) в ρ -представлении. В отличие от этого в рассматриваемом случае четверного базисного распределения (12.1) при интегрировании по ω получалось выражение (12.2), в котором под интегралом в экспоненте имеются все степени ρ_k . При расчете статистической суммы потребуется делать определенные приб-

$${}^2U(0, y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} (y/2)^{1/2} K_{1/4}(y^2/4), \quad \text{где } y^2/4 = \mathfrak{Z}.$$

лижения. Первое из них уже состоит в том, что вместо полного выражения (см. (8.3))

$$Z = 2^N \int \exp[-\beta H(\rho)] \left(1 + \mathcal{D}_4 + \frac{1}{2} \mathcal{D}_4^2 + \dots\right) \times \\ \times \exp\left(i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} + D_2 + D_4\right) (d\omega)^N (d\rho)^N, \quad (12.24)$$

где

$$\mathcal{D}_4 = D_6 + D_8 + \dots,$$

будем исходить из формы (12.1), в которой ограничимся четверным базисным распределением. Теорему о четверной базисной плотности меры в критической точке считаем справедливой, если плотность меры задана и в $\rho_{\mathbf{k}}$ -представлении. По этой причине в (12.2) отбрасываем слагаемые

$$-\frac{1}{6!} \frac{1}{N^2} a_6 \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_6} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_6} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_6} - \\ - \frac{1}{8!} \frac{1}{N^3} a_8 \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_8} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_8} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_8} + \dots$$

и вместо (12.2) рассматриваем выражение

$$Z_4 = \int W_4(\rho) (d\rho)^N, \quad (12.25)$$

содержащее под интегралом четверную базисную плотность меры

$$W_4(\rho) = C \exp E_4(\rho), \quad (12.26)$$

где

$$E_4(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} d(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \\ - \frac{1}{4!} \frac{1}{N} a_4 \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4}; \quad (12.27)$$

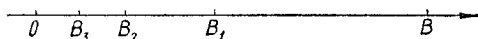
$$d(\mathbf{k}) = a_2 - \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}); \quad a_2 = 0,645; \quad a_4 = 0,183. \quad (12.28)$$

В дальнейшем индекс «4» опустим и будем писать $E_4 = E$, $Z_4 = Z$. Всякое приближение «чревато последствиями». И то, что берутся только четверные базисные плотности меры, приводит к зависимости результатов расчетов от способа деления фазового пространства на слои. Только для определенных способов деления фазового пространства на слои четверные базисные распределения будут «точными». В общем же случае в (12.2) и (12.24), кроме второй и четвертой степени, необходимо учитывать также и более высокие степени ρ [13, 14, 36, 38, 43]. Тем не менее четверное базисное распределение дает возможность полностью описать все качественные стороны фазового перехода второго рода.

Как указывалось в ряде работ [18, 29, 50, 107, 126] (см. также § 7), возникающие в критической точке особенности связаны с длинноволновыми модами флуктуаций спинового момента и описываются в основном переменными $\rho_{\mathbf{k}}$ с малыми значениями индекса \mathbf{k} , среди которых главной является переменная ρ_0 . Однако под интегралом в (12.25) все переменные между собой связаны. Поэтому интегрирование будем вести поэтапно, начиная с интегралов по переменным $\rho_{\mathbf{k}}$, имеющим большие значения \mathbf{k} , и заканчивая переменными $\rho_{\mathbf{k}}$, значения \mathbf{k} которых малы. Суммирование по \mathbf{k} в (12.1) и (12.25) производится в пределах первой зоны Бриллюэна. Согласно (1.4), (1.5) и (3.1) — $-B \leq k_x < B$, $-B \leq k_y < B$, $-B \leq k_z < B$, $B = \pi/c$. Не снижая общности задачи, для упрощения выкладок перейдем к сферической зоне Бриллюэна, считая $|\mathbf{k}| < B$. Там, где это будет важно, введем соответствующие поправки.

Отрезки $(0B)$ делим на интервалы (B_1B) , (B_2B_1) , ..., $(B_{i+1}B_i)$, ..., причем $B > B_1 > B_2 > \dots \geq 0$. Каждому интервалу соответствует слой индексов \mathbf{k} в зоне Бриллюэна, а каждому слою индексов — слой

Рис. 5. Деление отрезка полузоны Бриллюэна на интервалы.



в фазовом пространстве $\rho_{\mathbf{k}}$. Совокупность переменных $\rho_{\mathbf{k}}$ принадлежит к первому слою, если $B_1 \leq k < B$. Затем идет второй слой переменных $\rho_{\mathbf{k}}$, для которых $B_2 \leq k < B_1$, ..., i -й слой, для которых $B_i \leq k < B_{i-1}$, и т. д. В статистической сумме (12.25) интегрирование по $\rho_{\mathbf{k}}$ будем вести поэтапно: сначала проинтегрируем по переменным $\rho_{\mathbf{k}}$, принадлежащим к первому слою, затем по переменным второго слоя и т. д. Так постепенно будем уменьшать число переменных в подынтегральных функциях, что в результате приведет к их сглаживанию. Существует несколько причин для такого способа интегрирования. Первая из них — чисто формальная: базисную плотность меры (12.26) невозможно факторизовать. Однако этого можно достичь в каждом отдельном слое, если в нем потенциал $\beta\Phi(k)$ заменить соответствующим данному слою средним значением. Вторая причина — принципиальная: после интегрирования по переменным $\rho_{\mathbf{k}}$ в первом слое в новой подынтегральной функции переменные будут иметь индексы \mathbf{k} , значения которых ограничены новой зоной Бриллюэна: $k < B_1$. Такой зоне соответствует прямая решетка с периодом $c_1 = \pi/B_1$: от исходной решетки спинов с периодом c переходим к блочной решетке с периодом $c_1 > c$. Так, постепенно интегрируя по слоям, рассматриваем события в последовательности блочных решеток с соответственно увеличивающимися периодами блоков и с соответствующими каждой блочной структуре энергиями $E(\rho)$, $E^{(1)}(\rho)$, $E^{(2)}(\rho)$, ... Каждая из энергий характеризуется набором коэффициентов $d(k)$, a_4 ; $d^{(1)}(k)$, $a_4^{(1)}$; $d^{(2)}(k)$, $a_4^{(2)}$, ..., множество которых в критической точке образует две циклические подгруппы.

Таким образом, интегрируя в Z постепенно по слоям фазового

пространства, мы раскрываем замечательные свойства новой симметрии, возникающей в системе в критической точке.

Обозначим через s параметр деления отрезка $(0B)$ на интервалы (B_1B) , (B_2B_1) , ... (рис. 5) [126]. Точки деления будут иметь следующие значения: $B_1 = B/s$; $B_2 = B/s^2$; ...; $B_n = B/s^n$, ... Соответственно этим точкам получится последовательность блочных решеток (табл. 2).

Таблица 2

Номер блочной решетки	Период прямой решетки	Период обратной решетки (полузона Бриллюэна)	«Число частиц» в объеме V
Исходная	c	$B = \pi/c$	N
1	$c_1 = sc$	$B_1 = \pi/c_1 = B/s$	$N_1 = Ns^{-3}$
2	$c_2 = s^2c$	$B_2 = \pi/c_2 = B/s^2$	$N_2 = Ns^{-6}$
n	$c_n = s^n c$	$B_n = \pi/c_n = B/s^n$	$N_n = Ns^{-3n}$

Кроме указанного, общепринятого, способа разбиения, рассмотрим еще другой, «специфический», для которого $s(n, T)$, где n — номер интервала, T — температура системы, будет переменной величиной (см. § 36).

§ 14. ИНТЕГРИРОВАНИЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЫ

Интегрирование величины Z , заданной формулой (12.25) [68, 70—77], начнем с переменных ρ_k , принадлежащих к первому слою, $B_1 \leq k < B$; в этом слое находится $N - N_1$ переменных ρ_k . В интервале $B_1 \leq k < B$ потенциал заменяем средним значением, полагая

$$\sum_{k \leq B} \beta \tilde{\Phi}(k) \rho_k \rho_{-k} = \sum_{k < B_1} \beta \tilde{\Phi}(k) \rho_k \rho_{-k} + \sum_{B_1 \leq k < B} [\beta \tilde{\Phi}(B_1 B) + \Delta \tilde{\Phi}(k)] \rho_k \rho_{-k}, \quad (14.1)$$

где $\tilde{\Phi}(B_1 B)$ — среднее значение $\tilde{\Phi}(k)$ в интервале $[B_1 B]$;

$$\Delta \tilde{\Phi}(k) = \beta \tilde{\Phi}(k) - \beta \tilde{\Phi}(B_1 B). \quad (14.2)$$

Элемент объема фазового пространства записываем в виде

$$(d\rho)^N = (d\rho)^{N_1} (d\rho)^{N-N_1} = (d\rho)^{N_1} \prod_{B_1 \leq k < B} d\rho_k^c d\rho_k^s. \quad (14.3)$$

Для тех переменных ρ_k (ρ_k^c , ρ_k^s), по которым будет производиться интегрирование, введем новые обозначения: $\rho_k \equiv \eta_k$, $k \geq B_1$. Статистическую сумму приводим к виду

$$Z = \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\sum_{k \leq B_1} d(k) \rho_k \rho_{-k} + \sum_{B_1 \leq k < B} d(B_1 B) \eta_k \eta_{-k} - \sum_{B_1 \leq k < B} \Delta \tilde{\Phi}(k) \eta_k \eta_{-k} \right] - \frac{a_4}{n!} \frac{1}{N} \left[\sum_{k_1, \dots, k_n} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_n} \delta_{k_1 + \dots + k_n} + \right. \right.$$

$$\begin{aligned}
& + 4 \sum_{k_1, \dots, k_4} \rho_{k_1} \rho_{k_2} \rho_{k_3} \rho_{k_4} \eta_{k_1} \delta_{k_1 + \dots + k_4} + 4 \sum_{k_1, \dots, k_4} \rho_{k_1} \eta_{k_2} \eta_{k_3} \eta_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} + \\
& + 6 \sum_{k_1, \dots, k_4} \rho_{k_1} \rho_{k_2} \eta_{k_3} \eta_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} + \\
& + \sum_{k_1, \dots, k_4} \eta_{k_1} \dots \eta_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} \Big\} (d\rho)^{N_1} (d\eta)^{N-N_1}, \quad (14.4)
\end{aligned}$$

где

$$(d\eta)^{N-N_1} = \prod_{\substack{k, \\ B_1 \leq k < B}} d\eta_k^c d\eta_k^s. \quad (14.5)$$

В (14.4) временно положим $\Delta\tilde{\Phi}(k) = 0$. Тогда все коэффициенты в слагаемых, которые зависят от η_k , — постоянные величины, а переменные η_k связаны между собой и с переменными ρ_k только через символы Кронекера. Выражения, зависящие от η_k , можно было бы факторизовать с помощью замены переменных

$$\tilde{\eta}_i = \sqrt{N}^{-1} \sum_{\substack{k, \\ 0 \leq h < B}} \eta_k e^{ikh}, \quad (14.6)$$

но для этого, как видим, нужно N переменных η_k , а их только $N - N_1$. Поэтому в (14.4) сделаем следующую подстановку: увеличим число переменных η_k до N , суммы $\sum_{B_1 \leq k < B} \eta_k \dots$ дополним до полных сумм: $\sum_{0 \leq k < B} \eta_k \dots$, число интегралов по η_k также возьмем равным N , $d\eta^{N-N_1}$ заменим на $(d\eta)^N$. Но, чтобы выражение не изменилось, введем под интеграл добавочное условие

$$\prod_{0 \leq h < B_1} \delta(\eta_k), \quad (14.7)$$

требующее, чтобы все η_k для $k < B_1$ были тождественно равны нулю. Изложенное преобразование является основным приемом в предлагаемом методе приближенного решения трехмерной задачи Изинга. Впервые оно было введено в работах [70—73]. Эквивалентное ему более простое преобразование интеграла в (14.4) имеет вид

$$\begin{aligned}
Z = \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k < B_1} [d(k) - d(B_1 B)] \rho_k \rho_{-k} + \frac{1}{2} \sum_{B_1 \leq h < B} \Delta\tilde{\Phi}(k) \eta_k \eta_{-k} - \right. \\
\left. - \frac{1}{2} \sum_{h < B} d(B_1 B) \eta_k \eta_{-k} - \frac{1}{4!} \frac{1}{N} a_4 \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4, \\ h_i \leq B}} \eta_{k_1} \dots \eta_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} \right\} \times \\
\times \prod_{0 \leq h < B_1} \delta(\eta_k - \rho_k) (d\eta)^N (d\rho)^{N_1}. \quad (14.8)
\end{aligned}$$

Здесь мы не выписываем «утомительных» разделений для четверного члена и вместо (14.7) требуем, чтобы для $k < B_1$ переменные η_k совпадали с переменными ρ_k .

Интегрируем по переменным η_k .

Заменяем δ -функции $\delta(\eta_{\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}})$ интегральной формой:

$$Z = \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} < B_1} [d(\mathbf{k}) - d(B_1 B)] \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right\} \exp \Delta \times \\ \times \exp \left[-\frac{1}{2} d(B_1 B) \sum_{\mathbf{k} < B} \eta_{\mathbf{k}} \eta_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{4!} \frac{1}{N} a_4 \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ (k_i \leq B)}} \eta_{\mathbf{k}_1} \dots \eta_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right] \times \\ \times \exp \left[i2\pi \sum_{\mathbf{k} < B_1} \nu_{\mathbf{k}} (\eta_{\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}}) \right] (d\rho)^{N_1} (d\nu)^{N_1} (d\eta)^N, \quad (14.9)$$

где

$$\Delta = \frac{1}{2} \sum_{B_1 \leq \mathbf{k} < B} \Delta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \eta_{\mathbf{k}} \eta_{-\mathbf{k}}. \quad (14.10)$$

С помощью замены (14.6) можно разделить переменные интегрирования, но мешает $\exp \Delta$. Выражение Δ , как вытекает из (14.1) и (14.2), диагонально в представлении $\eta_{\mathbf{k}}$ и недиагонально в представлении $\tilde{\eta}_{\mathbf{l}}$. Тем не менее в (14.9) выполняем преобразование (14.6). В результате

$$\Delta = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_2} \Delta \Phi(|\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2|) \tilde{\eta}_{\mathbf{l}_1} \tilde{\eta}_{\mathbf{l}_2}, \quad (14.11)$$

где

$$\Delta \Phi(|\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2|) = \frac{1}{N} \sum_{B_1 \leq \mathbf{k} < B} \Delta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \exp [i\mathbf{k}(\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2)],$$

а функция $\exp \left[i2\pi \sum_{\mathbf{k} < B_1} \nu_{\mathbf{k}} (\eta_{\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}}) \right]$ принимает вид

$$\exp \left[-i2\pi \sum_{\mathbf{k} < B_1} \nu_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \right] \exp \left(i2\pi \sum_{\mathbf{l}} \tilde{\nu}_{\mathbf{l}} \tilde{\eta}_{\mathbf{l}} \right),$$

где

$$\tilde{\nu}_{\mathbf{l}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} < B_1} \nu_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{l}). \quad (14.12)$$

Можно достичь разделения переменных, если в произведении

$$e^{\Delta} \exp \left(i2\pi \sum_{\mathbf{l}} \tilde{\nu}_{\mathbf{l}} \tilde{\eta}_{\mathbf{l}} \right)$$

заменить Δ оператором

$$\hat{\Delta} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_2} \frac{1}{(2\pi i)^2} \Delta \Phi(|\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2|) \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\nu}_{\mathbf{l}_1} \partial \tilde{\nu}_{\mathbf{l}_2}} \quad (14.13)$$

и операторный множитель $\exp \hat{\Delta}$ вынести из-под интегралов по $\tilde{\eta}_{\mathbf{l}}$. В результате для Z получим такую исходную для интегрирования по η форму:

$$Z = C \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} < B_1} [d(\mathbf{k}) - d(B_1 B)] \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - i2\pi \sum_{\mathbf{k} < B_1} \nu_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \right\} \times$$

$$\times \exp \hat{\Delta} V \bar{2}^{-N+1} (d\rho)^{N_1} \prod_1 \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{1}{2} d (B_1 B) \tilde{\eta}_1^2 - \frac{1}{4!} a_4 \tilde{\eta}_1^4 + i 2\pi \tilde{\eta}_1 \tilde{\nu}_1 \right] d\tilde{\eta}_1 \right\} (d\nu)^{N_1}. \quad (14.14)$$

Здесь

$$(d\eta)^N = d\eta_0 \prod_k' d\eta_k^c d\eta_k^s = V \bar{2}^{-N+1} \prod_1 d\tilde{\eta}_1. \quad (14.15)$$

Интегрирование по $\tilde{\eta}$ выполняем рассмотренным уже ранее способом. Получаем однократные интегралы вида (4.9). В результате

$$\prod_1 \int \exp \left[-\frac{1}{2} d (B_1 B) \tilde{\eta}_1^2 - \frac{1}{4!} \tilde{\eta}_1^4 + i 2\pi \tilde{\eta}_1 \tilde{\nu}_1 \right] d\tilde{\eta}_1 = \left[Q \left(\frac{d}{(2\pi)^2}, \frac{a_4}{(2\pi)^4} \right) \right]^N I_1(\tilde{\nu}_1), \quad (14.16)$$

где

$$d = d (B_1 B);$$

$$I_1(\tilde{\nu}_1) = \prod_1 \exp \left(-\frac{1}{2} S_2 \tilde{\nu}_1^2 - \frac{1}{4!} S_4 \tilde{\nu}_1^4 - \frac{1}{6!} S_6 \tilde{\nu}_1^6 - \dots \right); \quad (14.17)$$

$Q \left(\frac{d}{(2\pi)^2}, \frac{a_4}{(2\pi)^4} \right)$ — выражение, в точности совпадающее с (12.5) и (12.10), если только вместо \mathfrak{M}_2 подставить $d/(2\pi)^2$, а вместо $|\mathfrak{M}_4|$ — коэффициент $a_4/(2\pi)^4$:

$$Q \left(\frac{d}{(2\pi)^2}, \frac{a_4}{(2\pi)^4} \right) = [12a_4^{-1}]^{1/4} z^{1/4} e^z K_{1/4}(z), \quad (14.18)$$

где z — новый аргумент функций Бесселя:

$$z = \frac{3}{4} (d (B_1 B))^2 / a_4. \quad (14.19)$$

Коэффициенты S_2 , S_4 и S_6 раскрываются по формулам (4.16) — (4.21) или (12.16) — (12.22). И снова вместо \mathfrak{Z} следует подставить z , вместо \mathfrak{M}_2 — $d/(2\pi)^2$ и вместо $|\mathfrak{M}_4|$ — $a_4/(2\pi)^4$, так что

$$S_2 = (2\pi)^2 V \bar{12} a_4^{-1/2} \mathcal{H}(z) = (2\pi)^2 \frac{4}{d (B_1 B)} V \bar{z} \mathcal{H}(z);$$

$$S_4 = (2\pi)^4 6 a_4^{-1} \mathcal{L}(z) = (2\pi)^4 \frac{8}{[d (B_1 B)]^2} z \mathcal{L}(z); \quad (14.20)$$

$$S_6 = (2\pi)^6 a_4^{-3/2} \mathcal{F}(z),$$

где функции \mathcal{H} , \mathcal{L} и \mathcal{F} заданы формулами (12.22):

$$\mathcal{H}(z) = V \bar{z} (K(z) - 1);$$

$$\mathcal{L}(z) = 6\mathcal{H}^2(z) + 4V \bar{z} \mathcal{H}(z) - 4;$$

$$K(z) = K_{3/4}(z)/K_{1/4}(z).$$

Выражение (14.16) подставляем в (14.14). Используем оператор $e^{\hat{\Delta}}$:

$$(\exp \hat{\Delta}) I(\tilde{v}_i) = (1 + \Delta_1 + \Delta_2 + \dots) I(\tilde{v}_i), \quad (14.21)$$

где согласно (14.13) и (14.17)

$$\begin{aligned} \Delta_1 = & \frac{1}{2} \sum_{I_1 I_2} \Delta \Phi(|I_1 - I_2|) \frac{1}{(2\pi i)^2} \left(S_2^2 \tilde{v}_{I_1} \tilde{v}_{I_2} - S_2 \delta_{I_1 I_2} + \right. \\ & \left. + \frac{S_4^2}{(3!)^2} \tilde{v}_{I_1}^3 \tilde{v}_{I_2}^3 - \frac{1}{2} S_4 \tilde{v}_{I_1}^2 \delta_{I_1 I_2} + \frac{1}{3!} S_4 S_2 \tilde{v}_{I_1}^3 \tilde{v}_{I_2} \right). \end{aligned} \quad (14.22)$$

Для Δ_2 , кроме квадрата $\frac{1}{2} \Delta_1^2$, имеем еще вклады от производных вида

$$\frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi i)^4} \sum_{I_1 I_2 I_3} \Delta \Phi(|I_1 - I_3|) \Delta \Phi(|I_3 - I_2|) \frac{\partial^4}{\partial \tilde{v}_{I_1}^2 \partial \tilde{v}_{I_2}^2 \partial \tilde{v}_{I_3}^2}, \quad (14.23)$$

а также вклады от замкнутых производных

$$\frac{1}{4} \frac{1}{(2\pi i)^4} \sum_{I_1 I_2} [\Delta \Phi(|I_1 - I_2|)]^2 \frac{\partial^4}{\partial \tilde{v}_{I_1}^2 \partial \tilde{v}_{I_2}^2}. \quad (14.24)$$

Теперь, чтобы получить окончательный результат интегрирования по η_k , подставляем вместо \tilde{v}_i их значения. Имеем полные суммы по I

$$\begin{aligned} \sum_I \tilde{v}_I^2 &= \sum_k v_k v_{-k}; \\ \sum_I \tilde{v}_I^4 &= \frac{1}{N} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \leq B_1}} v_{k_1} \dots v_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4}. \end{aligned} \quad (14.25)$$

Кроме того,

$$C \frac{1}{\sqrt{2^{N-1}}} = 2^N [Q(\mathfrak{M}_2 \mathfrak{M}_4)]^N.$$

После подстановки (14.16) — (14.25) в (14.14) имеем новое выражение для статистической суммы

$$\begin{aligned} Z = & 2^N \tilde{Q}_1 \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k < B_1} [d(k) - d(B_1 B)] \rho_k \rho_{-k} \right\} \times \\ & \times (1 + \Delta_1 + \Delta_2 + \dots) \exp \left(i 2\pi \sum_k v_k \rho_k \right) \times \\ & \times \exp \left(-\frac{1}{2} S_2 \sum_{k < B_1} v_k v_{-k} - \frac{1}{4!} \frac{1}{N} S_4 \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \leq B_1}} v_{k_1} \dots v_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} - \right. \\ & \left. - \frac{1}{6!} \frac{1}{N^2} S_6 \sum_{\substack{k_1, \dots, k_6 \\ k_i \leq B_1}} v_{k_1} \dots v_{k_6} \delta_{k_1 + \dots + k_6} \right) (d\rho)^{N_1} (dv)^{N_1}, \end{aligned} \quad (14.26)$$

где выражение

$$\tilde{Q}_1 = \left[Q(\mathfrak{M}_2 \mathfrak{M}_4) Q \left(\frac{d}{(2\pi)^2}, \frac{a_4}{(2\pi)^4} \right) \right]^N \quad (14.27)$$

имеет смысл парциальной статистической суммы фазового слоя переменных ω_k , которые можно рассматривать как переменные, связанные с внутренним полем;

$$\begin{aligned}
 \Delta_1 &= \frac{1}{2} \frac{1}{N} \sum_{B_1 \leq k < B} \Delta \tilde{\Phi}(k) \sum_{l_1, l_2} \exp [ik(l_1 - l_2)] \frac{1}{(2\pi i)^2} \times \\
 (1) \quad &\times \left\{ S_2^2 N^{-1} \sum_{k_1, k_2} v_{k_1} v_{k_2} \exp i(k_1 l_1 + k_2 l_2) - \right. \\
 (2) \quad &\quad \left. - S_2 \delta_{l_1, l_2} + \right. \\
 (3) \quad &+ (S_4/3!)^2 N^{-3} \sum_{k_1, \dots, k_6 \leq B_1} v_{k_1} v_{k_3} v_{k_5} \exp i(k_1 + k_3 + k_5) l_1 \times \\
 (4) \quad &\quad \times v_{k_2} v_{k_4} v_{k_6} \exp i(k_2 + k_4 + k_6) l_2 - \\
 (5) \quad &\quad \left. - \frac{1}{2} S_4 \left(\sqrt{N}^{-1} \sum_{h \leq B_1} v_k \exp ik l_1 \right)^2 \delta_{l_1, l_2} + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{3!} S_2 S_4 N^{-2} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4, \\ k_i \leq B_1}} v_{k_1} v_{k_2} v_{k_3} v_{k_4} \exp [i(k_1 + k_2 + k_3) l_1] \exp ik_4 l_2 \right\}.
 \end{aligned} \tag{14.28}$$

При суммировании по l_1 и l_2 исчезают первое и пятое слагаемые, возникают несовместимые символы Кронекера: $\delta_{kk_1} = 0$ и $\delta_{kk_2} = 0$ ($B_1 \leq k < B$, $0 \leq k_1 < B_1$ и $0 \leq k_2 < B_1$) для первого слагаемого и $\delta_{k_4 k} = 0$ ($k_4 < B_1$, $k \geq B_1$) — для пятого. Далее, если в (14.1) для среднего значения потенциала в слое $B_1 \leq k < B$ брать среднее геометрическое:

$$\tilde{\Phi}(B_1 B) = \sum_{B_1 \leq k < B} \tilde{\Phi}(k) / (N - N_1), \tag{14.29}$$

то

$$\sum_{B_1 \leq k < B} \Delta \tilde{\Phi}(k) = 0 \tag{14.30}$$

и в (14.28) исчезают второе и четвертое слагаемые, а для Δ_1 получаем

$$\begin{aligned}
 \Delta_1 &= \frac{1}{(2\pi i)^2} \frac{1}{2} \sum_{B_1 \leq k < B} \Delta \tilde{\Phi}(k) \left(\frac{S_4}{3!} \right)^2 N^{-4} \sum_{l_1, l_2} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_6, \\ k_i \leq B_1}} v_{k_1} \dots v_{k_6} \times \\
 &\quad \times \exp [i(k_1 + k_3 + k_5 + k) l_1] \exp [i(k_2 + k_4 + k_6 - k) l_2].
 \end{aligned} \tag{14.31}$$

Здесь снова каждое v_k заменяем производной $-\frac{1}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \rho_k}$, относящейся в (14.26) к функции $\exp(-i2\pi \sum_k v_k \rho_k)$. После такой замены Δ_1 становится оператором

$$\begin{aligned}
 \hat{\Delta}_1 &= (2\pi)^{-8} (S_4/3!)^2 \sum_{k_1, \dots, k_6} \frac{\partial^6}{\partial \rho_{k_1} \dots \partial \rho_{k_6}} N^{-4} \frac{1}{2} \sum_k \Delta \tilde{\Phi}(k) \sum_{l_1, l_2} \times \\
 &\quad \times \exp [i(k_1 + k_3 + k_5 + k) l_1 + i(k_2 + k_4 + k_6 - k) l_2],
 \end{aligned} \tag{14.32}$$

который не зависит от v_k . Подобные расчеты можно выполнить и для оператора Δ_{2i} , который перейдет в некий оператор $\hat{\Delta}_2$, действующий на $\exp i2\pi \sum_k v_k \rho_k$. Эти преобразования внесем в формулу (14.26); при этом выражение для Z не изменится, лишь Δ_1 и Δ_2 перейдут в $\hat{\Delta}_1$ и $\hat{\Delta}_2$:

$$\begin{aligned} & (1 + \Delta_1 + \Delta_2 + \dots) \exp \left(i2\pi \sum_k v_k \rho_k \right) = \\ & = (1 + \hat{\Delta}_1 + \hat{\Delta}_2 + \dots) \exp \left(i2\pi \sum_k v_k \rho_k \right), \end{aligned}$$

а интегралы по v_k примут вид

$$\begin{aligned} & \int \exp \left(-i2\pi \sum_{k < B_1} v_k \rho_k \right) \exp \left(-\frac{1}{2} S_2 \sum_{k < B_1} v_k v_{-k} - \right. \\ & \left. - \frac{1}{4!} \frac{1}{N} S_4 \sum v_{k_1} \dots v_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} - \dots \right) (dv)^{N_1}. \end{aligned} \quad (14.33)$$

Они аналогичны по форме якобиану перехода к N_1 коллективным переменным ρ_k .

Выражение (14.26) с изменениями (14.32), (14.33) не является окончательным результатом интегрирования по первому слою. Чтобы интегрировать по v_k , эти переменные под интегралом в (14.33) следует разделить. Коэффициенты S_2, S_4, \dots — величины постоянные и зависимость от k содержится только в символах Кронекера. Поэтому факторизовать подынтегральное выражение по v можно в переменных \tilde{v}_m , связанных с v_k фурье-преобразованием. Так как число переменных v_k равно N_1 и $0 \leq k < B_1$, то и число переменных \tilde{v}_m должно быть равным N_1 . По этой причине считать независимыми переменными N величин \tilde{v}_i , заданных в (14.12), нельзя. Чтобы проинтегрировать в (14.26) или в (14.33) по v_k , вводим новые переменные:

$$\begin{aligned} \tilde{v}_m &= \frac{1}{\sqrt{N_1}} \sum_{0 \leq k < B_1} v_k \exp ikm; \\ v_k &= \frac{1}{\sqrt{N_1}} \sum_m \tilde{v}_m \exp ikm. \end{aligned} \quad (14.34)$$

Здесь векторы m нумеруют узлы новой кубической решетки с периодом $c_1 = sc$, соответствующей зоне Бриллюэна $0 \leq k < B_1$;

$$B_1 = B/s = \pi/c_1; \quad m = (m_x i_0 + m_y j_0 + m_z k_0) c_1;$$

m_x, m_y, m_z — целые числа. Для волнового вектора k имеем

$$k_i = \frac{2\pi}{N_i} \frac{n_i}{c} = \frac{2\pi n_i}{N_{1i} c_1}; \quad i = x, y, z; \quad -\frac{N_{1i}}{2} \leq n_i < \frac{N_{1i}}{2};$$

(14.35)

$$N_i = N_x = N_y = N_z; \quad N_i^3 = N; \quad N_{1i} = N_{1x} = N_{1y} = N_{1z}; \quad N_{1i}^3 = N_1.$$

Объем периодичности кристалла остается неизменным:

$$V = Nc^3 = N_1 c_1^3.$$

В переменных \tilde{v}_m для квадратичного члена имеем

$$\sum_{k < B_1} v_k v_{-k} = \sum_m \tilde{v}_m^2. \quad (14.36)$$

В четверном слагаемом

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N} \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} v_{k_1} v_{k_2} v_{k_3} v_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} = \\ & = \frac{1}{N^2} \sum_{k_1, \dots, k_4} v_{k_1} \dots v_{k_4} \sum_1 \exp [i (\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4) l] \end{aligned} \quad (14.37)$$

делаем подстановку

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N} \sum_1 \exp [i (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4) l] = \\ & = \frac{1}{N_1} \sum_m \exp [i (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4) m] + \Omega (\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4), \end{aligned} \quad (14.38)$$

где

$$\begin{aligned} \Omega (\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4) & = \frac{1}{N_1} \sum_m \exp [i (\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4) m] \times \\ & \times \left\{ s^{-3} \sum_{\Delta l} (\exp [i (\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4) \Delta l] - 1) \right\}. \end{aligned}$$

Суммирование в $\sum_{\Delta l}$ производится по всем s^3 узлам Δl исходной решетки, которые находятся внутри одного блока решетки m . Считаем, что $\sum_{\Delta l}$ не зависит от m . Функция $\Omega (\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4)$ равна нулю, когда $\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4 = 0$ и когда $\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4 \neq 0$, за исключением случаев $\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4 = 2B_1 n$, где $2nB_1$ — вектор новой обратной решетки. В этом случае в выражении

$$\Omega (n2B_1) = s^{-3} \sum_{\Delta l} \exp (in2B_1 \Delta l) - 1 \quad (14.39)$$

в аргументе экспоненты есть величина

$$\frac{n2\pi}{c_1} \Delta l \approx n \frac{2\pi}{s},$$

поэтому Ω (и $2B_1$) меньше единицы, в чем легко убедиться для каждого конкретного s . В результате для четверного слагаемого в (14.33) после преобразований (14.34) и (14.38) получаем

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N} \sum_{k_1, \dots, k_4} v_{k_1} \dots v_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} = \\ & = \frac{1}{N_1 s^3} \frac{1}{N_1} \sum_{k_1, \dots, k_4} v_{k_1} \dots v_{k_4} \sum_m e^{i(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4)m} + \Delta_4 = \\ & = \frac{1}{s^3} \sum_m \tilde{v}_m^4 + \Delta_4, \end{aligned} \quad (14.40)$$

где

$$\Delta_4 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4} v_{\mathbf{k}_1} \dots v_{\mathbf{k}_4} \Omega(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4). \quad (14.41)$$

Можем подвести итоги. В (14.26) Δ_1 и Δ_2 заменяем операторами вида (14.32), а четверное слагаемое — выражением (14.40); тогда окончательный результат интегрирования по $\rho_{\mathbf{k}}$ в первом слое имеет вид

$$\begin{aligned} Z = & 2^N \tilde{Q}_1 \int \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} < B_1} [\beta \tilde{\Phi}(k) - \beta \tilde{\Phi}(B_1 B)] \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right\} \times \\ & \times (1 + \hat{\Delta}_1 + \hat{\Delta}_2 + \dots) (1 + \hat{\Delta}_4 + \dots) \exp \left(i 2\pi \sum_{\mathbf{k} < B_1} v_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \right) \times \\ & \times \exp \left[-\frac{1}{2} (2\pi)^2 \sum_{\mathbf{k} \leq B_1} P_2 v_{\mathbf{k}} v_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{4!} \frac{(2\pi)^4}{N_1} P_4 \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_i \leq B_1}} v_{\mathbf{k}_1} \dots v_{\mathbf{k}_4} \times \right. \\ & \left. \times \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4}^{(B_1)} \right] (d\mathbf{v})^{N_1} (d\rho)^{N_1}, \end{aligned} \quad (14.42)$$

где

$$\begin{aligned} P_2 = & (2\pi)^{-2} S_2; \quad P_4 = (2\pi)^{-4} s^{-3} S_4; \\ \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4}^{(B_1)} = & N_1^{-1} \sum_{\mathbf{m}} \exp i(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4) \mathbf{m}; \end{aligned} \quad (14.43)$$

$$\begin{aligned} \hat{\Delta}_4 = & -\frac{1}{4!} P_4 \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4} \frac{\partial^4}{\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \partial \rho_{\mathbf{k}_4}} \Omega(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4) (2\pi)^{-4}; \\ \beta \tilde{\Phi}(k) - \beta \tilde{\Phi}(B_1 B) = & -[d(k) - d(B_1 B)]. \end{aligned} \quad (14.44)$$

Выражение (14.42) подобно исходной формуле (12.1) для Z . Интеграл представляет собой статистическую сумму укрупненной системы: под интегралом имеется $N_1 = N/s^3$ переменных $\rho_{\mathbf{k}}$ и $v_{\mathbf{k}}$. Роль кумулянтов \mathfrak{M}_2 и $|\mathfrak{M}_4|$, которые входили в (12.1), теперь играют величины P_2 и P_4 . Однако изменилось выражение для потенциала и прибавились поправки, связанные с операторами $\hat{\Delta}_1$, $\hat{\Delta}_2$ и $\hat{\Delta}_4$. Выполним в (14.42) интегрирование по всем $v_{\mathbf{k}}$, что будет соответствовать переходу от формулы (12.1) к формуле (12.2). Перейдем от переменных $v_{\mathbf{k}}$ к переменным $\tilde{v}_{\mathbf{m}}$ согласно (14.34) (якобиан перехода равен $\sqrt{2}^{N_1-1}$) и, воспользовавшись выражениями (14.36), (14.40) и (14.44), факторизуем подынтегральное выражение для Z :

$$\begin{aligned} Z = & 2^N \tilde{Q}_1 \int \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} < B_1} (\beta \tilde{\Phi}(k) - \beta \tilde{\Phi}(B_1 B)) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right] \times \\ & \times (1 + \hat{\Delta}_1 + \hat{\Delta}_2 + \dots) (1 + \hat{\Delta}_4 + \dots) \prod_{\mathbf{m}} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i 2\pi \tilde{v}_{\mathbf{m}} \tilde{\rho}_{\mathbf{m}}) \times \right. \\ & \left. \times \exp \left[-\frac{(2\pi)^2}{2} P_2 \tilde{v}_{\mathbf{m}}^2 - \frac{(2\pi)^4}{4!} P_4 \tilde{v}_{\mathbf{m}}^4 \right] d\tilde{v}_{\mathbf{m}} \right\} \sqrt{2}^{N_1-1} (d\rho)^N. \end{aligned} \quad (14.45)$$

Интегралы по \tilde{v}_m полностью совпадают по форме с выражениями (4.8), (4.13) (проинтегрировав по \tilde{v}_m , получим якобиан перехода в системе блочных КП):

$$\begin{aligned}
 Z &= 2^N \tilde{Q}_1 \sqrt{2}^{N_1-1} [Q(P_2 P_4)]^{N_1} \times \\
 &\times \int \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{k \leq B_1} [\beta \tilde{\Phi}(k) - \beta \tilde{\Phi}(B_1 B)] \rho_k \rho_{-k} \right\} \times \\
 &\times (1 + \hat{\Delta}_1 + \hat{\Delta}_2 + \dots) (1 + \hat{\Delta}_4 + \dots) \exp \left(-\frac{1}{2} R_2 \sum_{k \leq B_1} \rho_k \rho_{-k} - \right. \\
 &\left. - \frac{1}{4!} \frac{1}{N_1} R_4 \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4, \\ h_i \leq B_1}} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4}^{(B_1)} \right) (d\rho)^{N_1}, \quad (14.46)
 \end{aligned}$$

где по аналогии с (12.10)⁸

$$Q(P_2 P_4) = \frac{\sqrt[4]{12}}{2\pi} (P_4)^{-1/4} \mathfrak{Z}^{1/4} e^{3\mathfrak{Z}} K_{1/4}(\mathfrak{Z}); \quad (14.47)$$

$$\mathfrak{Z} = \frac{3}{4} \frac{P_2^2}{P_4}. \quad (14.48)$$

Величины R_2 и R_4 определяются выражениями (12.19) и (12.20):

$$R_2 = \sqrt{12} (P_4)^{-1/4} \mathcal{H}(\mathfrak{Z}) = (4/P_2) \sqrt{\mathfrak{Z}} \mathcal{H}(\mathfrak{Z}); \quad (14.49)$$

$$R_4 = \frac{6}{P_4} \mathcal{L}(\mathfrak{Z}) = \frac{8}{P_2^2} \mathfrak{Z} \mathcal{L}(\mathfrak{Z}); \quad (14.50)$$

.....

Итак, выполнено интегрирование по коллективным переменным ρ_k , которые принадлежат к первому фазовому слою $B_1 < k \leq B$. От формулы (12.25) осуществлен переход к формуле (14.46), при этом число переменных под интегралом уменьшено на $N - N_1$.

Дальнейшие расчеты выполним в двух приближениях: в нулевом — будем пренебрегать поправками, которые вносятся операторами $\hat{\Delta}_1, \hat{\Delta}_2, \hat{\Delta}_4, \dots$; в первом приближении эти поправки будут учтены (см. гл. 4).

В формуле (14.46) пренебрежем операторами $\hat{\Delta}_1, \hat{\Delta}_2$ и $\hat{\Delta}_4$ и введем новые обозначения:

$$a_2^{(1)} = \beta \tilde{\Phi}(B_1 B) + R_2; \quad (14.51)$$

$$a_4^{(1)} = R_4; \quad (14.52)$$

$$d^{(1)}(k) = a_2^{(1)} - \beta \tilde{\Phi}(k); \quad (14.53)$$

⁸ Аргумент z в (14.18) не следует смешивать с величиной \mathfrak{Z} , заданной формулой (12.9).

$$2^N \tilde{Q}_1 [Q(P_2 P_4)]^{N_1} \sqrt{2^{N_1-1}} = C \mathfrak{A}_1, \quad (14.54)$$

где значение C задано в (12.4), а

$$\mathfrak{A}_1 = \left[Q \left(\frac{d(B_1 B)}{(2\pi)^2}, \frac{a_4}{(2\pi)^4} \right) \right]^N [Q(P_2, P_4)]^{N_1} \sqrt{2^{N_1-N}} \quad (14.55)$$

— парциальная статистическая сумма первого фазового слоя. Тогда в приближении $\hat{\Delta}_1 = \hat{\Delta}_2 = \dots = \hat{\Delta}_4 = 0$ для Z_2 по аналогии с (12.25), можем записать выражение

$$Z = \int W_4^{(1)}(\rho) (d\rho)^{N_1}, \quad (14.56)$$

где

$$W_4^{(1)}(\rho) = C \mathfrak{A}_1 \exp E_4^{(1)}(\rho); \quad (14.57)$$

$$E_4^{(1)}(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{k < B_1} d^{(1)}(k) \rho_k \rho_{-k} - \\ - \frac{1}{4!} \frac{1}{N_1} \sum_{k_1, \dots, k_4} a_4^{(1)} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4}. \quad (14.58)$$

Таким образом, для статистической суммы, заданной на фазовом пространстве N_1 переменной ρ_k , получено новое выражение. Под интегралом оно имеет «сглаженную» плотность меры $W^{(1)}(\rho)$ и эффективный гамильтониан $E_4^{(1)}(\rho)$ с новыми значениями коэффициентов $d^{(1)}$ и $a_4^{(1)}$. Как и формула (12.25), выражение (14.56) ограничено четверным базисным распределением.

§ 15. РЕКУРРЕНТНЫЕ СООТНОШЕНИЯ

Формулы (12.22), (14.20), (14.43), (14.48) — (14.53) позволяют установить связь между $d^{(1)}$ и $a_4^{(1)}$ и исходными величинами d и a_4 . Начнем с выражения (14.51) для $a_2^{(1)}$. Вместо R_2 подставляем его значение (14.49), а вместо P_2 — формулы (14.43) и (14.20):

$$a_2^{(1)} = \beta \bar{\Phi}(B_1 B) + R_2; \\ R_2 = (4/P_2) \sqrt{\bar{\mathfrak{J}}} \mathcal{H}(\bar{\mathfrak{J}}); \\ P_2 = [4/d(B_1 B)] \sqrt{\bar{z}} \mathcal{H}(z) = \sqrt{12/a_4} \mathcal{H}(z). \quad (15.1)$$

В результате

$$a_2^{(1)} = \beta \Phi(B_1 B) + d(B_1 B) \mathcal{N}, \quad (15.2)$$

где

$$\mathcal{N} = \frac{\sqrt{\bar{\mathfrak{J}}} \mathcal{H}(\bar{\mathfrak{J}})}{\sqrt{\bar{z}} \mathcal{H}(z)}. \quad (15.3)$$

Прибавляя и вычитая с правой стороны a_2 , находим

$$a_2^{(1)} = a_2 + d(B_1 B) M; \quad (15.4)$$

$$M = N - 1 = \frac{V \sqrt{3} \mathcal{K}(z)}{V z \mathcal{K}'(z)} - 1. \quad (15.5)$$

Формула (15.4) является окончательным выражением для $a_2^{(1)}$. Для коэффициента при четверном слагаемом в (14.58) согласно (14.52), (14.43) и (14.20) получаем

$$a_4^{(1)} = (6/P_4) \mathcal{L}(z); \quad (15.6)$$

$$P_4 = (6/s^3) \frac{1}{a_4} \mathcal{L}(z).$$

Окончательное выражение для $a_4^{(1)}$ имеет вид

$$a_4^{(1)} = \frac{N}{N_1} \frac{\mathcal{L}(z)}{\mathcal{L}'(z)} a_4. \quad (15.7)$$

Как видим, зависимость $a_2^{(1)}$ и $a_4^{(1)}$ от $\beta \tilde{\Phi}(B_1 B)$, a_2 и a_4 является сложной, «двухуровневой»: на первом уровне имеем исходные аргументы

$$d(B_1 B) = a_2 - \beta \tilde{\Phi}(B_1 B), \quad a_1, \quad z = \frac{3}{4} [d(B_1 B)]^2 / a_4;$$

из них, в результате интегрирования по η , возникают параметры второго уровня P_2 , P_4 и $\mathfrak{Z} = \frac{3}{4} \frac{P_2^2}{P_4}$, из которых уже после интегрирования по ν находим выражения для $a_2^{(1)}$ и $a_4^{(1)}$. Явное выражение для \mathfrak{Z}_1 имеет вид

$$\mathfrak{Z} = \frac{3}{2} \frac{N}{N_1} \frac{\mathcal{K}^2(z)}{\mathcal{L}(z)}. \quad (15.8)$$

Таким образом, выполнено интегрирование в первом фазовом слое в статистической сумме (12.25) и получены выражения (14.56)–(14.58). В ходе преобразований были сделаны три приближения: пренебрежение поправками на усреднение потенциала $\hat{\Delta}_1, \hat{\Delta}_2, \dots$ поправками, связанными с переходом на новую решетку $\hat{\Delta}_4$, и ограничение четверной базисной плотности меры⁹. Пока эти приближения будут иметь силу и в дальнейшем. В выражении (14.56) можно выполнить интегрирование по ρ_k во втором фазовом слое, в котором $B_2 \leq k < B_1$, затем в третьем, где $B_3 \leq k < B_2$, и в n -м, $B_n \leq k < B_{n-1}$. В каждом интервале значений k потенциал $\tilde{\Phi}(k)$ заменяем средним значением, записывая

$$H(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{n \geq 0} \sum_{B_{n+1} \leq k < B_n} [\tilde{\Phi}(B_{n+1} B_n) + \Delta \tilde{\Phi}_n] \rho_k \rho_{-k}; \quad (15.9)$$

$$\Delta \tilde{\Phi}_n = \tilde{\Phi}(k) - \tilde{\Phi}(B_{n+1} B_n) \quad (15.10)$$

⁹ В дальнейшем эти поправки будут учитываться.

и, как уже говорилось, на какое-то время пренебрегаем поправкой $\Delta\Phi_n$. В результате статистическую сумму можно проинтегрировать полностью и получить ее в виде произведения парциальных статистических сумм отдельных слоев:

$$Z = C\mathfrak{A}_1\mathfrak{A}_2 \dots \mathfrak{A}_n \dots, \quad (15.11)$$

где \mathfrak{A}_n — парциальная статистическая сумма n -го слоя. По аналогии с (14.93)

$$\mathfrak{A}_n = \left[Q \left(\frac{d^{(n-1)}}{(2\pi)^2}, \frac{a_4^{(n-1)}}{(2\pi)^4} \right) \right]^{N_{n-1}}; \quad (15.12)$$

$$[Q(P_2^{(n-1)}P_4^{(n-1)})]^{N_n} \sqrt{2}^{N_n - N_{n-1}},$$

где Q задано формулой (12.10), а

$$N_n = N/s^{3n}.$$

Параллельно с этим получаем выражения для базисных плотностей мер все более сглаженных структур. Так, после интегрирования в n последовательно расположенных слоях исходное выражение (12.25), подобно (14.56), переходит в интеграл:

$$Z = \int W_4^{(n)}(\rho) (d\rho)^{N_n}, \quad (15.13)$$

где

$$W_4^{(n)}(\rho) = C\mathfrak{A}_1 \dots \mathfrak{A}_n \exp E_4^{(n)}(\rho); \quad (15.14)$$

$$E_4^{(n)}(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{h < B_n} d^{(n)}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} -$$

$$-\frac{1}{4!} \frac{1}{N_n} a_4^{(n)} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ (k_i \leq B_n)}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4}; \quad (15.15)$$

$$d^{(n)}(k) = a_2^{(n)} - \beta \tilde{\Phi}(k).$$

Здесь функция $W_4^{(n)}(\rho)$ — плотность меры в n -й блочной структуре системы, период блока которой $c_n = s^n c$, полузона Бриллюэна $B_n^* = B/s^n = \pi/c_n$ и число узлов в объеме периодичности $V N_n = N/s^{3n}$; $E_4^{(n)}(\rho)$ — n -й блочный гамильтониан, зависящий от N_n переменных $\rho_{\mathbf{k}}$, связанных с колебаниями плотности спинового момента в блоках. Наименьшая длина волны этих колебаний соответствует переменной $\rho_{\mathbf{k}}$ для $k = B_n$ и равна $\pi/B_n = c_n$ — периоду блока.

Обобщая выражения (15.1) — (15.8), выпишем рекуррентные соотношения, возникающие после интегрирования в n последовательно расположенных слоях:

$$a_2^{(n+1)} = a_2^{(n)} + \mathcal{M}^{(n)} a^{(n)}(B_{n+1} B_n); \quad (15.16)$$

$$a_4^{(n+1)} = a_4^{(n)} \frac{N_n}{N_{n+1}} \frac{\mathcal{L}(3^{(n)})}{\mathcal{L}(z^{(n)})}; \quad (15.17)$$

$$M^{(n)} = \frac{V \sqrt{3^{(n)}} \mathcal{K}(3^{(n)})}{V z^{(n)} \mathcal{K}(z^{(n)})} - 1; \quad (15.18)$$

$$\mathfrak{B}^{(n)} = \frac{3}{2} \frac{N_n}{N_{n+1}} \frac{\mathcal{K}^2(z^{(n)})}{\mathcal{L}(z^{(n)})}; \quad (15.19)$$

$$z^{(n)} = 3 [a_2^{(n)} - \beta \bar{\Phi}(B_{n+1} B_n)]^2 (4a_4^{(n)})^{-1}; \quad (15.20)$$

$$N_{n+1} = N_n (B_{n+1}/B_n)^{-3} = N_n/s^3; \quad N_n c_n^3 = N c^3 = V; \quad (15.21)$$

$$\mathcal{H}(z) = V \bar{z} (K_{3/4}(z)/K_{1/4}(z) - 1); \quad (15.22)$$

$$\mathcal{L}(z) = 6\mathcal{H}^2(z) + 4V \bar{z} \mathcal{H}(z) - 1.$$

Здесь \mathcal{L} , \mathcal{H} и \mathfrak{B} — монотонные функции своих аргументов. Для малых значений z имеем следующие разложения:

$$\mathcal{H}(z) = V \bar{z} \gamma [1 - 1,607 \sqrt{x} + 1,828x - 1,474x^{3/2} + \dots];$$

$$\mathcal{L}(z) = [(12\gamma^2 - 1) - 1,701 \sqrt{x} + 4,206x - 7,150x^{3/2} + \dots]; \quad (15.23)$$

$$\mathfrak{B}^{(n)}(z) = \mathfrak{B}_0 \frac{N_{n-1}}{N_n} (1 + 1,374 \sqrt{x} + 1,199x + 0,379x^{3/2} + \\ + 0,040x^2 + \dots),$$

где

$$x = z/2; \quad \gamma = \Gamma(3/4) \Gamma(1/4) \approx 0,338; \quad \Gamma(1/4) = 3,626; \quad \Gamma(3/4) = 1,225;$$

$$\mathfrak{B}_0 = 3\gamma^2/(12\gamma^2 - 1) \approx 0,924.$$

При больших z

$$\mathcal{H}(z) = \frac{1}{4V \bar{z}} \frac{[1 - (15/32)z^{-1} + \dots]}{[1 - (3/32)z^{-1} + \dots]};$$

$$\mathcal{L}(z) = \frac{3}{32} z^{-2} \left(1 - \frac{21}{8} z^{-1} + \frac{447}{64} z^{-2} - \dots \right); \quad (15.24)$$

$$\mathfrak{B}^{(n)}(z) = z \frac{N_{n-1}}{N_n} \left(1 + \frac{15}{8} \frac{1}{z} - \frac{75}{64} z^{-2} + \dots \right).$$

Как видим, как при малых, так и при больших значениях z функции $\mathcal{H}(z)$ и $\mathcal{L}(z)$ сходятся очень медленно. Это говорит о том, что в конкретных расчетах следует рассматривать только разложения типа рядов Тейлора в окрестности определенной точки. Значения функций [55] $\mathcal{H}(z)$, $V \bar{z} \mathcal{H}(z)$, $\mathcal{L}(z)$ и \mathfrak{B}/s^3 приведены в табл. 3. Они справедливы для случая $d^{(n)}(B_{n+1} B_n) > 0$. (Случай $d^{(n)}(B_{n+1} B_n) < 0$ рассматривается отдельно.)

Как видим, \mathfrak{B} всегда больше z , функция M всегда положительна и при $d^{(n)}(B_{n+1} B_n) > 0$

$$a_2^{(n+1)} > a_2^{(n)}. \quad (15.25)$$

При оценке правой части уравнения (15.17) для a_4 заметим, что функция \mathcal{L} всегда положительна и $a_4^{(n)} > 0$. Из табл. 3 вытекает, что для

всех $s > 1$, $\beta > 1$ и при оценке $\mathcal{L}(\beta)$ можно воспользоваться [55] разложением (15.24); для $z^{(n)} > 1$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\beta^{(n)}) &\approx (\beta/32) (\beta^{(n)})^{-2} [1 - 21/8 (\beta^{(n)})^{-1} + \dots] \approx \\ &\approx \frac{3}{32} \left(\frac{N_{n+1}}{N_n} \right)^2 (z^{(n)})^{-2} \frac{[1 - (21/8) (\beta^{(n)})^{-1} + \dots]}{[1 + (15/8) (z^{(n)})^{-1} - \dots]}; \end{aligned} \quad (15.26)$$

для $z^{(n)} < 1$ и $x^{(n)} = z^{(n)}/2$

$$\mathcal{L}(\beta^{(n)}) = \frac{3}{32} \left(\frac{N_{n+1}}{N_n} \right)^2 (\beta_0)^{-2} \frac{1 - (21/8) (\beta^{(n)})^{-1}}{1 + 1,374 (z^{(n)})^{1/2} - \dots}. \quad (15.27)$$

Таким образом, в правой части уравнения (15.17) отношение $\mathcal{L}(\beta^{(n)})/\mathcal{L}(z^{(n)})$ всегда пропорционально s^{-6} и удобно ввести обозна-

Таблица 3

z	$\mathcal{K}(z)$	$\sqrt{z} \mathcal{K}(z)$	$\mathcal{P}(z)$	β/s^2
0	0,477981	0	0,370839	0,924446
0,1	0,342889	0,108431	0,139163	1,267286
0,5	0,244043	0,172564	0,047858	1,876717
1,0	0,197417	0,197417	0,023511	2,486504
2,0	0,153518	0,217107	0,004833	3,595206
3,0	0,130402	0,225863	0,003482	4,652868
5,0	0,104721	0,234163	0,002450	6,714176
∞	0	0,250	$(\beta/32) z^{-2}$	z

чения

$$\frac{\mathcal{L}(\beta^{(n)})}{\mathcal{L}(z^{(n)})} = \left(\frac{N_{n+1}}{N_n} \right)^2 \mathcal{G}^{(n)} = s^{-6} \mathcal{G}^{(n)}, \quad (15.28)$$

где функция $\mathcal{G}^{(n)}$ имеет величину порядка единицы. Теперь уравнение (15.17) для $a_i^{(n+1)}$ представим таким образом:

$$a_i^{(n+1)} = a_i^{(n)} \frac{N_{n+1}}{N_n} \mathcal{G}^{(n)}. \quad (15.29)$$

Из этого уравнения следует, что $a_i^{(n)}$ — монотонно убывающая функция n , причем

$$a_i^{(n+1)}/a_i^{(n)} \sim N_{n+1}/N_n = 1/s^3. \quad (15.30)$$

Наша задача — решение рекуррентных уравнений (15.16) и (15.17) (или (15.29)). В конечном счете необходимо получить явные выражения для свободной энергии и других термодинамических функций, а также для бинарной корреляционной функции. Прежде, однако, следует выяснить, в какой области температур рассматривается задача. Рассмотрение будем сопровождать конкретными расчетами, доводя «до числа» все получаемые величины и соотношения. Для этого выберем конкретную форму потенциала $\tilde{\Phi}(k)$ и начальные параметры задачи и ограничим область температур.

§ 16. ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКИ.
НАЧАЛЬНЫЕ ПАРАМЕТРЫ

Для определения критической точки предположим, что выражение (15.13) проинтегрировано по всем слоям фазового пространства КП ρ_k и в пределе $n \rightarrow \infty$ требуется еще проинтегрировать плотность меры от переменной ρ_0 , которая связана с параметром порядка. Критическая температура — это точка бифуркации соответствующего уравнения Эйлера, записанного относительно ρ_0 . Согласно (7.11) значение параметра порядка ρ_0 определяется уравнением

$$\sqrt{N} \rho_0 = \pm \left(- \frac{d^{(n)}(0) N_n}{a_4^{(n)}} 3! \right)_{n \rightarrow \infty}^{1/2},$$

из которого вытекает, что если $n \rightarrow \infty$, то

$$\begin{aligned} d^{(n)}(0) < 0 & \text{ при } T < T_c; \\ d^{(n)}(0) > 0 & \text{ при } T > T_c; \\ d^{(n)}(0) = 0 & \text{ при } T = T_c. \end{aligned} \quad (16.1)$$

Исходя из этого дадим следующее определение T_c : критической температурой называется температура T_c , для которой в рекуррентных уравнениях (15.16), (15.17) имеет место предел

$$\lim_{n \rightarrow \infty} d^{(n)}(B_{n+1}B_n) = 0; \quad \lim_{n \rightarrow \infty} B_n = 0, \quad (16.2)$$

где

$$d^{(n)}(B_{n+1}B_n) = a_2^{(n)} - \beta \Phi(B_{n+1}B_n);$$

$\beta \Phi(B_{n+1}B_n)$ — среднее значение $\beta \tilde{\Phi}(k)$ на интервале $B_{n+1} < k \leq B_n$; $B_n = B/s^n$. При этом согласно (16.1) при $T = T_c$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} d^{(n)}(B_n) \geq 0; \quad \lim_{n \rightarrow \infty} d^{(n)}(B_{n+1}) \leq 0. \quad (16.3)$$

К сожалению, более точное определение критической температуры сформулировать нельзя. Значение T_c , как и другие физические величины, является функцией параметра s .

Определим теперь область температур, в которой будет вестись рассмотрение задачи. Для этого сначала выберем конкретную форму потенциала взаимодействия $\tilde{\Phi}(k)$. Воспользуемся для $\tilde{\Phi}(k)$ аппроксимацией, полагая, что вне сферы радиуса $B' = (\sqrt{2}b)^{-1}$ потенциал равен нулю, а внутри нее справедлива параболическая аппроксимация (см. рис. 2)

$$\tilde{\Phi}(k) = \begin{cases} \beta \tilde{\Phi}(0) (1 - 2b^2k^2) & \text{при } k < B', \\ 0 & \text{при } B' \leq k < B. \end{cases} \quad (16.4)$$

Параметры блочной решетки и число блоков N' в объеме периодичности V равны:

$$\begin{aligned} B' &= (\sqrt{2}b)^{-1}; \quad c' = \sqrt{2}\pi b; \\ N' &= N \frac{c^3}{c'^3} = N \left(\frac{c}{b\sqrt{2}\pi} \right)^3. \end{aligned} \quad (16.5)$$

Проинтегрируем статистическую сумму (12.25) по всем ρ_k с индексами $B' \leq k < B$. Удобнее это сделать в исходной форме (12.1). Здесь гамильтониан

$$H(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{k < B'} \tilde{\Phi}(k) \rho_k \rho_{-k} \quad (16.6)$$

имеет согласно (16.4) отличные от нуля значения для $k < B'$. Поэтому интегрирование по ρ_k с $B' \leq k < B$ будет относиться в (12.1) только к якобиану и

$$\int \exp \left(i2\pi \sum_{B' \leq k < B} \omega_k \rho_k \right) (d\rho)^{N-N'} = \prod_{B' \leq k < B} \delta(\omega_k). \quad (16.7)$$

Затем в (12.1) интегрируем по соответствующим ω_k , в результате в $D_2(\omega)$, $D_4(\omega)$, ... все ω_k с $B' \leq k < B$ становятся равными нулю. Исходное выражение принимает вид

$$\begin{aligned} Z &= 2^N \int \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{k < B'} \beta \tilde{\Phi}(k) \rho_k \rho_{-k} + i2\pi \sum_k \omega_k \rho_k - \frac{(2\pi)^2}{2} \sum_{k < B'} \mathfrak{M}_2 \omega_k \omega_{-k} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{(2\pi)^4}{4!} \frac{\mathfrak{M}_4}{N} \sum_{k_i < B'} \omega_{k_1} \dots \omega_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} \right] (d\rho)^{N'}. \end{aligned} \quad (16.8)$$

Теперь, чтобы получить соответствующую (12.25) новую форму для Z , интегрируем по ω . Для этого переходим от ω_k к $\tilde{\omega}_l$:

$$\tilde{\omega}_l = \sqrt{N'}^{-1} \sum_{k < B'} \omega_k \exp(ikl'). \quad (16.9)$$

Вместо кумулянтов \mathfrak{M}_2 и \mathfrak{M}_4 вводим \mathfrak{M}'_2 и \mathfrak{M}'_4 :

$$\mathfrak{M}'_2 = \mathfrak{M}_2; \quad \mathfrak{M}'_4 = \frac{N'}{N} \mathfrak{M}_4 = \left(\frac{c}{b} \frac{1}{\pi \sqrt{2}} \right)^3 \mathfrak{M}_4 \quad (16.10)$$

и интегрируем по $\tilde{\omega}_l$, точно так, как это делалось и при переходе от (12.1) к (12.25). В результате

$$\begin{aligned} &\int \exp \left[i2\pi \sum_{k < B'} \omega_k \rho_k - \frac{(2\pi)^2}{2} \mathfrak{M}_2 \sum_{k < B'} \omega_k \omega_{-k} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{(2\pi)^4}{4!} \frac{1}{N'} |\mathfrak{M}'_4| \sum_{k_1, \dots, k_4} \omega_{k_1} \dots \omega_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} \right] (d\omega)^{N'} = \\ &= \sqrt{2}^{N'-1} [Q(\mathfrak{M}'_2, \mathfrak{M}'_4)]^{N'} \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{k < B'} a'_2 \rho_k \rho_{-k} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{4!} \frac{1}{N'} a'_4 \sum_{k_1, \dots, k_4} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} \right), \end{aligned} \quad (16.11)$$

где

$$\begin{aligned}
 Q(\mathfrak{M}_2, \mathfrak{M}'_4) &= \frac{\sqrt[4]{12}}{2\pi} \frac{1}{|\mathfrak{M}'_4|^{1/4}} \mathfrak{Z}'^{1/4} e^{\mathfrak{Z}'} K_{1/4}(\mathfrak{Z}'); \\
 \mathfrak{Z}' &= \frac{3}{4} \frac{\mathfrak{M}_2^2}{|\mathfrak{M}'_4|}; \quad \mathfrak{Z}' = \frac{3}{8} \left(\frac{b\sqrt{2}\pi}{c} \right)^3; \\
 a'_2 &= \sqrt{12} |\mathfrak{M}'_4|^{-1/4} \mathcal{H}(\mathfrak{Z}'); \\
 a'_4 &= 6 |\mathfrak{M}'_4|^{-1} \mathcal{L}(\mathfrak{Z}').
 \end{aligned} \tag{16.12}$$

Как следует из табл. 3, $\sqrt{\mathfrak{Z}'} \mathcal{H}(\mathfrak{Z}')$ является монотонно возрастающей функцией \mathfrak{Z}' , а величина \mathfrak{Z}' пропорциональна b^3 . Поэтому с ростом радиуса эффективного действия потенциала величина a'_2 приближается вплотную к единице при $\mathfrak{Z}' \rightarrow \infty$, $a'_2 \rightarrow 1/\mathfrak{M}_2$. В противоположность этому при возрастании b , если учесть асимптотическое поведение $\mathcal{L}(\mathfrak{Z}')$, величина a'_4 убывает пропорционально $1/b^3$. В дальнейших выкладках при выполнении числовых оценок положим $b = c$, так что

$$\mathfrak{Z}' = \frac{3}{8} (\sqrt{2}\pi)^3 = 32,887$$

и для a'_2 и a'_4 имеем следующие исходные значения:

$$a'_2 = 0,989; \quad a'_4 = 0,021; \tag{16.13}$$

$$N' = N/(\pi\sqrt{2})^3; \quad Q'(\mathfrak{M}'_2, \mathfrak{M}'_4) = 0,398 = \exp(-0,922).$$

Исходная формула для статистической суммы имеет вид

$$Z = C' \int \exp E'_4(\rho) (d\rho)^{N'}, \tag{16.14}$$

где

$$C' = 2^N [Q(\mathfrak{M}'_2, \mathfrak{M}'_4)]^{N'} \sqrt{2}^{N'-1}; \tag{16.15}$$

$$\begin{aligned}
 E'_4(\rho) &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} < B'} d(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \\
 &- \frac{1}{4!} \frac{1}{N'} a'_4 \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \leq B'}} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4}
 \end{aligned} \tag{16.16}$$

и

$$\begin{aligned}
 d(k) &= d(0) + q'k^2; \\
 d(0) &= a'_2 - \beta\tilde{\Phi}(0); \quad q' = 2b^2\beta\tilde{\Phi}(0);
 \end{aligned} \tag{16.17}$$

$$\tilde{\Phi}(B') = 0; \quad d(B') = a'_2.$$

При интегрировании статистической суммы (16.14) по слоям фазового пространства КП получим все те же формулы § 15, только N следует заменить на N' , а начальные значения a_2 и a_4 — значениями

a_2' и a_4' , заданными в формуле (16.13). Для потенциала $\tilde{\Phi}(k)$ с полным правом можно использовать параболическую аппроксимацию.

Определим теперь область температур $T_n < T < T_b$, внутри которой будет вестись дальнейшее рассмотрение. Согласно (15.25) при интегрировании по слоям функция $d^{(n)}(k)$ возрастает. Поэтому верхнюю границу температурного интервала определим условием

$$T_b = \tilde{\Phi}(0)/a_2'. \quad (16.18)$$

В качестве нижнего края температурной области рассмотрим температуру T_n , при которой среднее (например, среднее геометрическое) от $d(k)$ на всем отрезке OB' будет равным нулю:

$$a_2 - \beta_n \tilde{\Phi}(0) (1 - \beta_n) = 0; \quad (16.19)$$

$$T_n = (\beta_n) \tilde{\Phi}(0)/a_2'.$$

При $T = T_n$ $d(0) = -\frac{3}{2} a_2'$. Область температур, в которой будет вестись рассмотрение, ограничена таким образом:

$$T_n < T < T_b. \quad (16.20)$$

Множество функций $d(k)$, рассматриваемых как функции параметра T , ограничено сверху кривой 1 (рис. 6):

$$d_b(k) = 2b^2 a_2' k^2; \quad d(0) = 0; \quad (16.21)$$

$$d(B') = a_2'$$

и снизу кривой 2:

$$d(k) = -\frac{3}{2} a_2' + \frac{5}{2} 2b^2 a_2' k^2;$$

$$d(0) = -\frac{3}{2} a_2'; \quad d(B') = a_2'.$$

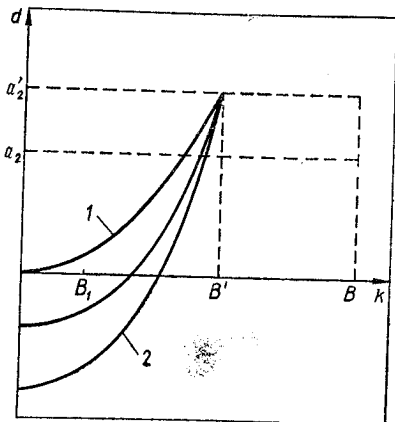


Рис. 6. Кривые $d(k)$ для двух граничных температур:

$$1 - T = T_b = \tilde{\Phi}(0)/a_2'; \quad 2 - T = T_n = (\beta_n) \tilde{\Phi}(0)/a_2'.$$

Кривая $d(k)$, соответствующая $T = T_c$, находится внутри этой области. Для всех рассматриваемых кривых $d(k)$ среднее значение $d(B'B')$ положительно для произвольного B' . При этом для каждой из них

$$d(0) < 0, \quad d(B') > 0. \quad (16.22)$$

Мы рассмотрели специальный случай для потенциала $\tilde{\Phi}(k)$, когда существует интервал $[B'B)$, на котором $\Phi(B'B)$ можно считать равным нулю. Такое рассмотрение не уменьшает общности задачи. В общем случае, приведенном на рис. 2, среднее значение $\tilde{\Phi}(k)$ на интервале $[B'B)$ равно постоянной величине. Это приводит к услож-

нению выражения (16.8), и вместо (16.7) возникают интегралы

$$\int \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{B' \leq k < B} \beta \tilde{\Phi}(B'B) \rho_k \rho_{-k} + i2\pi \sum_{B' \leq k < B} \rho_k \omega_k \right] (d\rho)^{N-N'} = \\ = \left[1 + \frac{1}{2} \sum_k \beta \tilde{\Phi}(B'B) \frac{1}{(2\pi i)^2} \frac{\partial^2}{\partial \omega_k \partial \omega_{-k}} + \dots \right] \prod_k \delta(\omega_k).$$

В интервале температур $T_n < T < T_v$ среднее $\Phi(B'B)$ является величиной, значительно меньшей единицы, и вклад операторного множителя приводит к поправкам, которые следует учитывать или не учитывать в зависимости от конкретной задачи.

§ 17. РЕШЕНИЕ РЕКУРРЕНТНЫХ УРАВНЕНИЙ ПРИ $T > T_c$

Будем решать рекуррентные уравнения (15.16), (15.17), принимая в качестве исходных данных значения (16.13) [68, 85]. Пусть зона Бриллюэна B' является сферической. Фазовое пространство разделено на слои, причем первый слой соответствует интервалу $B_1 \leq k < B'$, $B_1 = B'/s$; n -й слой — интервалу $B_n \leq k < B_{n-1}$, $B_n = B'/s^n$. Среднее значение потенциала в n -м слое

$$\beta \tilde{\Phi}(B_{n+1}B_n) = \beta \tilde{\Phi}(0) - q/s^{2n}; \quad (17.1) \\ q/s^{2n} = 2b^2 \beta \tilde{\Phi}(0) \langle k^2 \rangle_{B_{n+1}B_n} = \bar{q} \beta \tilde{\Phi}(0)/s^{2n}.$$

В случае среднего геометрического

$$q = \frac{3}{5} \frac{1-s^5}{1-s^3} \beta \tilde{\Phi}(0) = \bar{q} \beta \tilde{\Phi}(0). \quad (17.2)$$

Для функции $d^{(n)}(k)$ имеем

$$d^{(n)}(B_{n+1}B_n) = a_2^{(n)} - \beta \tilde{\Phi}(0) + q/s^{2n}; \quad (17.3)$$

$$d^{(n+1)}(B_{n+2}B_{n+1}) = a_2^{(n+1)} - \beta \tilde{\Phi}(0) + q/s^{2(n+1)}. \quad (17.4)$$

Уравнение (15.16) для $a_2^{(n+1)}$ запишем относительно $d^{(n+1)}(B_{n+1}B_n)$:

$$d^{(n+1)}(B_{n+2}B_{n+1}) = d^{(n)}(B_{n+1}B_n) \mathcal{N}^{(n)} - \Delta_n. \quad (17.5)$$

Для $a_4^{(n+1)}$ переписываем уравнение (15.29) в виде

$$a_4^{(n+1)} = s^{-3} \mathcal{E}^{(n)} a_4^{(n)}, \quad (17.6)$$

где

$$\Delta_n = \frac{q}{s^{2n}} (1-s^{-2}); \quad \mathcal{N}^{(n)} = \frac{V \overline{\mathcal{Z}^{(n)}} \mathcal{X}(\mathcal{Z}^{(n)})}{V \overline{z^{(n)}} \mathcal{X}(z^{(n)})}; \quad \mathcal{E}^{(n)} = s^6 \frac{\mathcal{L}(\mathcal{Z}^{(n)})}{\mathcal{L}(z^{(n)})}. \quad (17.7)$$

В уравнении (17.5) функция $\mathcal{N}^{(n)}$ всегда больше единицы. В правой части уравнения имеем две тенденции: первое слагаемое стремится увеличить результат, а второе, наоборот, уменьшить.

Теорема 1. Для $\tau = \frac{T - T_c}{T_c} > 0$ уравнения (17.5), (17.6) имеют предельную точку

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} d^{(n)}(B_{n+1}B_n) &= \text{const}; \\ \lim_{n \rightarrow \infty} a_4^{(n)} &= \lim_{n \rightarrow \infty} a_4^{(n\tau)} s^{-3(n-n\tau)} = 0; \\ \lim_{n \rightarrow \infty} z^{(n)} &= \infty. \end{aligned}$$

Доказательство. Согласно определению критической точки (16.1) и (16.2) при $\tau > 0$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} d^{(n)}(B_{n+1}B_n) > 0.$$

Далее, на основании (15.24) и (15.26) и данных табл. 3 (см. выше) при $z \rightarrow \infty$

$$\lim_{z^{(n)} \rightarrow \infty} \mathfrak{Z}^{(n)}(z^{(n)}) = s^3 z^{(n)}; \quad \lim_{z^{(n)} \rightarrow \infty} \mathcal{N}^{(n)}(z^{(n)}) = 1;$$

кроме того,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \Delta_n = 0.$$

Отсюда следует

$$\lim_{n \rightarrow \infty} d^{(n+1)}(B_{n+2}B_{n+1}) = \lim_{n \rightarrow \infty} d^{(n)}(B_{n+1}B_n) = \text{const} > 0. \quad (17.8)$$

Из (15.24), (15.26) — (15.28) имеем

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathfrak{E}^{(n)}(z^{(n)}) = 1.$$

Поэтому

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_4^{(n)}}{a_4^{(n-1)}} = s^{-3}. \quad (17.9)$$

Как видим, при температурах выше критической плотность меры в решетках, построенных из очень больших блоков, становится гауссовой. Возникающие при $\tau > 0$, $n \rightarrow \infty$ пределы (17.8) и (17.9) назовем *предельным гауссовым режимом* (ПГР).

Рассмотрим теперь тот особый случай, когда поведение первого и второго слагаемых в правой части (17.5) будет одинаковым. Тогда получим решения РГ типа.

Теорема 2. При $T = T_c$ рекуррентные уравнения (17.5) и (17.6) имеют особые решения, называемые в дальнейшем критическим режимом (КР) и для которых при всех n

$$d^{(n)}(B_{n+1}B_n) = \frac{r_n + q}{s^{2n}}; \quad a_4^{(n)} = \frac{u_n}{s^{4n}}; \quad (17.10)$$

$$\begin{aligned}\lim_{n \rightarrow \infty} r_n &= r^* = \text{const}; \\ \lim_{n \rightarrow \infty} u_n &= u^* = \text{const}; \\ \lim_{n \rightarrow \infty} z_n &= z^* = \text{const}.\end{aligned}\tag{17.11}$$

Выражения

$$\frac{d^{(n)}(B_{n+1}B_n)}{r_n + q} = s^{-2n}; \quad \frac{a_*^{(n)}}{u_n} = s^{-4n}\tag{17.12}$$

образуют элементы циклической полугруппы. При этом величина $d^{(n)}(0)$, рассматриваемая как функция n ,

$$d^{(n)}(0) = a_2^{(n)} - \beta \tilde{\Phi}(0),$$

должна вести себя как s^{-2n} .

Доказательство теоремы приводится ниже, в § 17 и 18.

Выполним в уравнениях (17.5) и (17.6) подстановку (17.10). Получим следующие уравнения для r_n и u_n :

$$\begin{aligned}r_{n+1} &= s^2(r_n + q) \mathcal{N}^{(n)} - s^2q; \\ u_{n+1} &= s \mathcal{E}^{(n)} u_n.\end{aligned}\tag{17.13}$$

Это сложные нелинейные разностные уравнения. По условию задачи (см. (16.22)) $d(0) < 0$, поэтому всегда $r_n < 0$ (см. (16.3)), а $u_n > 0$. Чтобы доказать теорему, необходимо решить уравнения (17.13). Кроме зависимости от n , они содержат два параметра: параметр деления фазового пространства на слои s , который задается сверху, и температуру T_c . Для определения T_c необходимо добавочное уравнение, соответствующее определениям (16.1) — (16.3). Как вытекает из вида функций $\mathcal{N}^{(n)}(z^{(n)})$ и $\mathcal{E}^{(n)}(z^{(n)})$, коэффициенты $d^{(n)}$ и $a^{(n)}$, а также r_n и u_n в (17.10) имеют непрерывную зависимость от температуры. Отсюда следует, что решения (17.10) должны быть справедливыми в некоторой области значений n и для $|\tau| \neq 0$. Поэтому систему уравнений (17.13) будем решать при произвольных T , а затем найдем уравнение для T_c и определим область температур $\tau < \tau^*$, внутри которой существует решение типа (17.10) и содержится предел (17.11) при $\tau \rightarrow 0$. Область значений n и $\tau < \tau^*$, внутри которой существует решение вида (17.10), называется областью критического режима, а само решение (17.10) — критическим режимом (КР). Непосредственной подстановкой легко убедиться, что одним из частных решений системы (17.13) является неподвижная точка

$$\begin{aligned}z^{(n)} &= z^* = \text{const}; \quad r_n = r^* = \text{const}; \\ u_n &= u^* = \text{const}.\end{aligned}\tag{17.14}$$

Уравнение для z^* получим, сокращая обе части второго уравнения (17.13) на $u_{n+1} = u_n > 0$:

$$s \mathcal{E}(z^*) = 1.\tag{17.15}$$

Из этого уравнения для каждого s находим соответствующее решение

$$\sqrt{z^*} = \left(\frac{3}{4}\right)^{\frac{1}{2}} (r^* + q) \sqrt{u^*}.$$

В это уравнение не входят явно ни температура, ни исходный потенциал $\beta\Phi$, поэтому z^* является универсальной функцией s . Определив из (17.15) $z^* = z^*(s)$, из первого уравнения (17.13) находим r^* . Положим

$$r^* = -\beta\Phi(0)\bar{r}, \quad \text{где } \bar{r} = \frac{s^2(\mathcal{N}(z^*) - 1)}{s^2\mathcal{N}(z^*) - 1} \bar{q}; \quad (17.16)$$

$$u^* = \bar{u} [\beta\Phi(0)]^2 \quad \text{и} \quad \bar{u} = \frac{3}{4} (z^*)^{-1} \frac{(1 - s^{-2})^2}{[\mathcal{N}(z^*) - s^{-2}]^2} \bar{q}^2. \quad (17.17)$$

Таблица 4

s	\bar{r}	\bar{u}	$\sqrt{z^*}$	s	\bar{r}	\bar{u}	$\sqrt{z^*}$
1,75	0,1562	0,1747	1,1116	3,58	0,6107	0,8865	0,0015
2,00	0,2153	0,2497	0,7781	8,5862	0,6122	0,8894	0,0000
2,50	0,3382	0,4245	0,3938	4,00	0,7167	1,0885	-0,0895
3,00	0,4640	0,6263	0,1713	5,00	0,9671	1,6044	-0,2478

Результат (17.16) является важным и позволит получить уравнение для критической температуры. Согласно (17.16) и (17.12) \bar{r} всегда меньше единицы и

$$|r^*| < \beta\Phi(0); \quad (17.18)$$

\bar{r}/\bar{q} и \bar{u}/\bar{q}^2 , подобно z^* , являются универсальными функциями s ; явные решения уравнений (17.15) — (17.17) приведены в табл. 4.

Итак, найдены частные решения уравнений (17.13). Чтобы получить общее решение, воспользуемся, следуя Вильсону [18], методом неподвижной точки. Границы применимости линейного приближения можно контролировать сравнением результатов с решениями уравнений (17.5), (17.6) на ЭВМ [43]. В линейном приближении вместо уравнений (17.13) имеем

$$\begin{aligned} r_{n+1} - r^* &= R_{11}(r_n - r^*) + R_{12}(u_n - u^*); \\ u_{n+1} - u^* &= R_{21}(r_n - r^*) + R_{22}(u_n - u^*), \end{aligned} \quad (17.19)$$

где

$$\begin{aligned} R_{11} &= \left(\frac{\partial r_{n+1}}{\partial r_n}\right)^* = s^2 \left[\mathcal{N}(z^*) + \sqrt{z^*} \frac{\partial \mathcal{N}(z^*)}{\partial \sqrt{z^*}} \right]; \\ R_{12} &= \left(\frac{\partial r_{n+1}}{\partial u_n}\right)^* = -\frac{s^2}{\sqrt{3}} \frac{z^*}{\sqrt{u^*}} \frac{\partial \mathcal{N}(z^*)}{\partial \sqrt{z^*}} = \frac{1}{\sqrt{u^*}} R_{12}^0; \end{aligned} \quad (17.20)$$

$$R_{21} = \left(\frac{\partial u_{n+1}}{\partial r_n} \right)^* = s \frac{\sqrt{3}}{2} u^{*1/2} \frac{\partial \mathcal{E}(z^*)}{\partial \sqrt{z^*}} = \sqrt{u^*} R_{21}^0;$$

$$R_{22} = \left(\frac{\partial u_{n+1}}{\partial u_n} \right)^* = s \left(\mathcal{E}(z^*) - \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{z^*} \frac{\partial \mathcal{E}(z^*)}{\partial \sqrt{z^*}} \right).$$

Символ $()^*$ означает, что для $\sqrt{z^*}$ следует воспользоваться его значением из (17.15). Так как $\sqrt{z^*}$ при заданном s имеет одни и те же значения для всевозможных $\beta\tilde{\Phi}(0)$, то матричные элементы R_{11} , R_{12}^0 , R_{21}^0 , R_{22} являются универсальными. Собственные значения матрицы $R = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{pmatrix}$ таковы:

$$E_{1,2} = \frac{1}{2} \left[R_{11} + R_{22} \pm (R_{11} + R_{22}) \sqrt{1 - 4 \frac{R_{11}R_{22} - R_{12}R_{21}}{(R_{11} + R_{22})^2}} \right]. \quad (17.21)$$

Произведение $R_{12}R_{21} = R_{12}^0R_{21}^0$ под корнем, как и R_{11} , R_{22} , не зависит от $\beta\tilde{\Phi}(0)$, поэтому собственные значения E_1 и E_2 являются универсальными величинами. Как следует из (17.20), матричные элементы R_{11} и R_{12} пропорциональны s^2 , а множители пропорциональности¹⁰ определяются соотношениями

$$\frac{R_{11}}{s^2} \sim \left(\frac{d}{d\sqrt{z}} \frac{\sqrt{3} \mathcal{K}(3)}{\mathcal{K}(z)} \right)_{z=z^*} \sim \frac{0,85}{4\gamma};$$

$$\frac{R_{12}^0}{s^2} \sim \left(\frac{\sqrt{3} \mathcal{K}(3)}{\mathcal{K}(z)} \right)_{z=z^*} \sim \frac{1}{4\gamma} \frac{1}{\sqrt{6}}.$$

Таким образом, R_{11} всегда больше R_{12}^0 . Матричные элементы R_{21}^0 и R_{22} не зависят от s , так как функция $\mathcal{E}(z^*)$ согласно (17.15) равна s^{-1} . В общем R_{11}/s^2 , R_{12}^0/s^2 , R_{21}^0 и R_{22} — величины одного порядка. Величина под корнем в (17.21) меньше единицы, и корень можно разложить в ряд. Тогда

$$E_1 \approx R_{11} + R_{22} + \frac{R_{12}R_{21} - R_{11}R_{22}}{R_{11} + R_{22}} \sim s^2;$$

$$E_2 \approx \frac{R_{11}R_{22} - R_{12}R_{21}}{R_{11} + R_{22}} < 1. \quad (17.22)$$

Собственное значение E_1 всегда больше единицы, а E_2 меньше единицы. Точные значения матричных элементов R_{ij} и собственных значений E_i для различных z рассчитаны М. П. Козловским [34] и приведены в табл. 5.

Как видим, E_2 действительно слабо зависит от s . Имеется точка $s = s^*$, для которой z^* близко к нулю, и при решении рекуррентных уравнений, разлагая функции \mathcal{K} , \mathcal{L} и \mathcal{Z} по степеням $\sqrt{x} = \sqrt{z/2}$, можно получить почти точные результаты [77]. Под $\sqrt{z/2}$ понимаем

¹⁰ Рассматривается случай $3 > 1$, $z < 1$,

величину $\sqrt[3]{s} d(B_1 B) / \sqrt{a_4}$, причем $d(B_1 B)$ берется со своим знаком. Дальнейшие аналитические выкладки будем сопровождать конкретными числовыми данными, рассчитанными для случая $s = s^* \approx 3,5862$. Параметр s^* , для которого $z^* = 0$, находим из уравнения (17.15):

$$s^* \mathcal{G}(0) = 1. \quad (17.23)$$

Рекуррентные уравнения (17.19) записываем в явном виде [35, 76]:

$$r_{n+1} = s^2 \left[r_n + \sqrt{u_n} \left(\mu_1 + \mu_2 \frac{(r_n + q)}{\sqrt{u_n}} + \mu_3 \left(\frac{r_n + q}{u_n} \right)^2 + \dots \right) \right]; \quad (17.24)$$

$$u_{n+1} = s u_n \left[\alpha + \alpha_1 \frac{r_n + q}{\sqrt{u_n}} + \alpha_2 \left(\frac{r_n + q}{\sqrt{u_n}} \right)^2 + \dots \right], \quad (17.25)$$

Таблица 5

s	R_{11}	R_{12}^0	R_{21}^0	R_{22}	E_1	E_2
1,25	1,526	0,120	0,105	0,819	1,544	0,801
2,00	3,270	0,974	0,578	0,740	3,476	0,535
3,00	5,912	2,650	1,009	0,900	6,398	0,414
3,58	7,613	3,837	1,174	0,999	8,235	0,377
5,00	12,208	7,332	1,438	1,206	13,095	0,319

где

$$\begin{aligned} \mu_1 &= 0,604 - 0,245s^{-3} + o(s^{-6}); \\ \mu_2 &= -0,406 + 0,035s^{-3} + o(s^{-6}); \\ \mu_3 &= +0,170 + 0,070s^{-3} + o(s^{-6}); \\ \alpha &= 0,296 - 0,841s^{-3} + o(s^{-6}); \\ \alpha_1 &= 0,333 - 0,239s^{-3} + o(s^{-6}); \\ \alpha_2 &= 0,040 - 0,462s^{-3} + o(s^{-6}). \end{aligned} \quad (17.26)$$

Напомним, что КР означает близость величины $(2/\sqrt{3}) \sqrt{u_n} \sqrt{z^{(n)}} \mathcal{N}^{(n)}$ к q , и поэтому в (7.24) необходимо учитывать по крайней мере первую степень $r_n + q$ [33]. Для неподвижной точки $\sqrt{z^*} = 0$ из (17.26) находим явную форму уравнения (17.23):

$$s^* \alpha = 1 \quad (17.27)$$

и $s^* \approx 3,5862$. Из (15.3), (17.16) и (17.17) получаем $\mathcal{N}(0) = \infty$, $\bar{r} = \bar{q}$ и, значит,

$$\begin{aligned} r^* &= -q = -\bar{q} \bar{\beta} \bar{\Phi}(0); \quad \bar{q} = 0,612; \\ \mathfrak{B}^*(0) &= \mathfrak{B}_0 (s^*)^3; \quad \mathfrak{B}_0 = \frac{3\gamma^2}{12\gamma^2 - 1} = 0,924; \end{aligned} \quad (17.28)$$

$$\begin{aligned} \sqrt{u^*} &= q \sqrt{u'}; \quad \sqrt{u'} = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{(1 - (s^*)^{-2}) \mathcal{K}(0)}{\sqrt{3^*} \mathcal{K}(3^*)} = 1,540; \\ \sqrt{\bar{u}^*} &= \sqrt{\bar{u}} \beta \Phi(0); \quad \sqrt{\bar{u}} = \sqrt{u'} \bar{q} = 0,943. \end{aligned} \quad (17.29)$$

Матричные элементы имеют следующие значения:

$$\begin{aligned} R_{11} &= (s^*)^2 (1 + \mu_2) = 7,613; \quad R_{21} = s \alpha_1 \sqrt{u^*} = 1,174 \sqrt{u^*}; \\ R_{12} &= \frac{1}{2} (s^*)^2 \frac{\mu_1}{\sqrt{u^*}} = \frac{3,837}{\sqrt{u^*}}; \quad R_{22} = s^* \alpha = 0,999; \\ E_1 &= s^2 (1 + \mu_2) + s \frac{\alpha_1 \mu_1}{2} + \frac{1}{4} (\alpha + s^{-1})^2 = 8,235; \\ E_2 &= \frac{s}{2} \frac{(1 + \mu_2) (\alpha + s^{-1}) - \alpha_1 \mu_1}{1 + \mu_2 + s^{-1/2} (\alpha + s^{-1})} = 0,337. \end{aligned} \quad (17.30)$$

Для других значений s неподвижная точка z^* определяется из уравнения (17.15). Линеаризовать рекуррентные уравнения следует путем разложения функций $\mathcal{N}(z)$ и $\mathcal{E}(z)$ в ряды Тейлора в окрестности точки $z = z^*(s)$. Например, для $s = 5$ при решении уравнения $\mathcal{E}(z(5)) = 5^{-1}$ получаем $\sqrt{z^*} = -0,248$, $z^* = 0,061$. Тогда система рекуррентных уравнений принимает вид

$$\begin{aligned} r_{n+1} &= s^2 \left[-q + 0,447 \sqrt{u_n} + 0,282 \sqrt{\bar{u}_n} \times \right. \\ &\quad \left. \times \left(\frac{r_n + q}{\sqrt{u_n}} \sqrt{3} - 2 \sqrt{z^*} \right) \right]; \\ u_{n+1} &= s \left[0,200 u_n + 0,166 u_n \left(\frac{r_n + q}{\sqrt{u_n}} \sqrt{3} - 2 \sqrt{z^*} \right) \right]. \end{aligned} \quad (17.31)$$

Собственные векторы матрицы R равны:

$$\begin{aligned} w_1 &= \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E_1 - R_{11}}{R_{12}} \end{pmatrix}; \quad v_1^+ = w^{-1} \left(1 - \frac{R_{12}}{R_{11} - E_2} \right); \\ w_2 &= \begin{pmatrix} \frac{R_{12}}{E_2 - R_{11}} \\ 1 \end{pmatrix}; \quad v_2^+ = w^{-1} \left(\frac{R_{11} - E_1}{R_{12}} - 1 \right); \\ w &= \frac{E_1 - E_2}{R_{11} - E_2}. \end{aligned} \quad (17.32)$$

В случае $s = s^*$

$$\begin{aligned} w_1 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0,162 \sqrt{u^*} \end{pmatrix}; \quad w = 1,086; \\ w_2 &= \begin{pmatrix} -\frac{0,530}{\sqrt{u^*}} \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (17.33)$$

Теперь можно решить уравнения (17.19) при начальных условиях (16.13), которые будут соответствовать значениям r_n и u_n при $n = 0$ и согласно (17.10) имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} r_0 + q &= d(B_1 B) = a_2 - \beta \tilde{\Phi}(0) + q; \\ r_0 &= a_2 - \beta \tilde{\Phi}(0); \end{aligned} \quad (17.34)$$

$$u_0 = a_4^{(0)} \equiv a_4; \quad a_2 = 0,989; \quad u_0 = 0,021.$$

Начальный вектор представим в виде разложения по w_1 и w_2 :

$$\begin{pmatrix} r_0 - r^* \\ u_0 - u^* \end{pmatrix} = c_1 w_1 + c_2 w_2. \quad (17.35)$$

Умножая обе части уравнения сначала на v_1^+ , а затем на v_2^+ , находим соответственно c_1 и c_2 :

$$\begin{aligned} c_1 &= [r_0 - r^* + (u_0 - u^*) \mathcal{R}] w^{-1} = \\ &= [a_2 - \beta \tilde{\Phi}(0) - r^* + (a_4 - u^*) \mathcal{R}] w^{-1}; \\ c_2 &= [-(r_0 - r^*) \mathcal{R}' + (u_0 - u^*)] w^{-1} = \\ &= [-(a_2 - \beta \tilde{\Phi}(0) - r^*) \mathcal{R}' + (a_4 - u^*)] w^{-1}, \end{aligned} \quad (17.36)$$

где

$$\mathcal{R} = \frac{R_{12}}{R_{11} - E_2}; \quad \mathcal{R}' = \frac{E_1 - R_{11}}{R_{12}}.$$

Общее решение уравнений (17.19) имеет вид

$$\begin{pmatrix} r_n - r^* \\ u_n - u^* \end{pmatrix} = c_1 E_1^n w_1 + c_2 E_2^n w_2. \quad (17.37)$$

Оно, естественно, имеет общую форму РГ решений, полученных Вильсоном, отличаясь от них явными выражениями для c_1 и c_2 . Подставляем выражения (17.37) в формулы (17.10) и получаем в результате общее решение рекуррентных уравнений в критическом режиме

$$d^{(n)}(B_{n+1} B_n) = \frac{r^* + c_1 E_1^n - c_2 \mathcal{R} E_2^n + q}{s^{2n}}; \quad (17.38)$$

$$a_4^{(n)} = \frac{u^* + c_1 \mathcal{R}' E_1^n - c_2 E_2^n}{s^{2n}}. \quad (17.39)$$

Теперь следует найти области температур $\tau < \tau^*$ и значений n , в которых эти решения справедливы. Напомним, что при больших n решением рекуррентных уравнений является предельный гауссов режим (17.8), (17.9).

§ 18. УРАВНЕНИЕ ДЛЯ КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ

Критическая температура — это точка, в которой отсутствует гауссов режим. Найдем уравнение для критической температуры T_c [68, 79, 85, 131]. По определению (16.2) при T_c среднее значение $d^{(n)}(B_{n+1}B_n)$ на интервале $B_{n+1} \leq k < B_n$ должно приближаться к нулю, и, кроме того, согласно (16.3) в пределе $n \rightarrow \infty$

$$d^{(n)}(B_n)_{T=T_c} \geq 0, \quad d^{(n)}(0)_{T=T_c} \leq 0, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} B_n = 0. \quad (18.1)$$

Подставим вместо $d^{(n)}(B_n)$ и $d^{(n)}(0)$ их значения из (17.38); при $n \rightarrow \infty$

$$\frac{r^* + c_1(T_c) E_1^n - c_2(T_c) \mathcal{R}(T_c) E_2^n}{s^{2n}} + \frac{\beta_c \tilde{\Phi}(0)}{s^{2n}} \geq 0; \quad (18.2)$$

$$\frac{r^* + c_1(T_c) E_1^n - c_2(T_c) \mathcal{R}(T_c) E_2^n}{s^{2n}} \leq 0.$$

Из формул (17.16) — (17.18) вытекает, что $|r^*| < \beta_c \tilde{\Phi}(0)$, $r^* < 0$; кроме того, $E_1 > 1$, $E_2 < 1$, c_1 , c_2 и \mathcal{R} — ограниченные функции T . Для выполнения условия (18.2) необходимо, чтобы при $T = T_c$

$$c_1(T_c) = 0. \quad (18.3)$$

Неравенства (16.3) и (18.1) являются сильными условиями, которые позволяют получить уравнение для критической температуры, не прибегая к гипотезе о линейной зависимости $c_1(T)$ от τ (см. [18]). Подставив в (18.3) выражение (17.36) для c_1 , для критической температуры T_c получим уравнение

$$a_2 - \beta_c \tilde{\Phi}(0) - r^*(T_c) + [a_4 - u^*(T_c)] \frac{R_{12}^0}{R_{11} - E_2} \frac{1}{\sqrt{u^*(T_c)}} = 0. \quad (18.4)$$

Оно дополняет систему рекуррентных уравнений (17.5), (17.6). Произведя замену

$$r^*(T_c) = -\bar{r} \beta_c \tilde{\Phi}(0), \quad u^*(T_c) = \bar{u} (\beta_c \tilde{\Phi}(0))^2,$$

получим для T_c квадратное уравнение

$$(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^2 \left(1 - \bar{r} + \frac{R_{12}^0}{R_{11} - E_2} \sqrt{\bar{u}} \right) - a_2 \beta_c \tilde{\Phi}(0) - \frac{a_4 R_{12}^0}{\sqrt{\bar{u}} (R_{11} - E_2)} = 0, \quad (18.5)$$

в котором свободный член является малой величиной. Для $s = s^* \approx 3,5862$ имеем

$$0,888 [\beta_c \tilde{\Phi}(0)]^2 - 0,989 \beta_c \tilde{\Phi}(0) - 0,012 = 0. \quad (18.6)$$

Решая уравнение (18.5), находим

$$\beta_c \tilde{\Phi}(0) = \frac{a_2 \pm \left[a_2^2 + 4 \frac{a_4 R_{12}^0}{(\bar{u})^{1/2} (R_{11} - E_2)} \left(1 - \bar{r} + \frac{R_{12}^0 (\bar{u})^{1/4}}{R_{11} - E_2} \right) \right]^{1/4}}{2 (1 - \bar{r} + R_{12}^0 (R_{11} - E_2)^{-1} (\bar{u})^{1/2})}. \quad (18.7)$$

Выражение под корнем положительно и больше a_2 , перед корнем берется знак $+$. В случае $s = s^*$, $a_2 = a_2'$, $a_4 = a_4'$ (см. (16.13))

$$\beta_c \tilde{\Phi}(0) = 1,128, \quad T_c = \frac{\tilde{\Phi}(0)}{1,128} = 0,876 \frac{\tilde{\Phi}(0)}{a_2}. \quad (18.8)$$

Как видим, значение критической температуры существенно зависит от a_2' и a_4' , т. е. от того, каким образом получена параболическая аппроксимация потенциала.

Теперь можно полностью доказать теорему 2 (см. выше). В критической точке предельный гауссов режим отсутствует, так как по условию (16.2) $\lim d^{(n)}(B_{n+1}B_n) = 0$ и соотношение

$$d^{(n+1)}(B_{n+2}B_{n+1}) = \mathcal{N}^{(n)} d^{(n)}(B_{n+1}B_n),$$

на основании которого получено решение (17.8) для ПГР, становится неопределенным. При $T = T_c$ из (17.38), (17.39) и (18.3) получаем

$$d^{(n)}(B_{n+1}B_n) = \frac{r^* + q - c_2(T_c) \mathcal{R}(T_c) E_2^n}{s^{2n}}; \quad (18.9)$$

$$a_4^{(n)} = \frac{u^* + c_2 E_2^n}{s^{4n}}; \quad (18.10)$$

при $n \rightarrow \infty$

$$d^{(n)}(B_{n+1}B_n) = (r^* + q) s^{-2n}; \quad (18.11)$$

$$a_4^{(n)} = u^* s^{-4n}. \quad (18.12)$$

Величины $d^{(n)}$ и $a_4^{(n)}$ являются элементами двух циклических подгрупп. Выражения (18.11) и (18.12) — единственные нетривиальные решения рекуррентных уравнений (17.5) и (17.6) при $T = T_c$. При $\tau \rightarrow 0$ решения (17.38) и (17.39) переходят в (18.9) и (18.10). Чтобы доказать это, представим коэффициент $c_1(T)$ в другой форме. Для этого из правой части соотношения (17.38) вычтем условие $c_1(T_c) = 0$, выражаемое уравнением (18.4). В результате для $c_1(T)$ получим

$$c_1 = \{(\beta_c - \beta) \tilde{\Phi}(0) + r^*(T_c) - r^*(T) + \mathcal{R}^0 [a_4(u^*(T_c))^{-1/4} - a_4(u^*(T))^{-1/4} + \sqrt{u^*(T_c)} - \sqrt{u^*(T)}]\}. \quad (18.13)$$

Вынося за скобки τ , находим

$$c_1 = \tilde{\tau} \tilde{c}_1, \quad (18.14)$$

где

$$\tilde{c}_1 = \beta \tilde{\Phi}(0) \tilde{c}_{11} + [\beta_c \tilde{\Phi}(0)]^{-1} \tilde{c}_{12};$$

$$\tilde{c}_{11} = (1 - \bar{r} + \mathcal{R}^0 V \bar{u}) w^{-1}; \quad (18.15)$$

$$\tilde{c}_{12} = a_4 \mathcal{R}^0 (\bar{u})^{-1/2} w^{-1}.$$

Для $s = s^* \approx 3,5862$ и для значений (16.13)

$$\tilde{c}_1 = 0,818\beta\tilde{\Phi}(0) + 0,011[\beta_c\tilde{\Phi}(0)]^{-1}. \quad (18.16)$$

Таким образом, c_1 действительно является линейной функцией τ и при $\tau \rightarrow 0$ общее решение (17.38) переходит в решение (18.9).

Выпишем явную зависимость коэффициента c_2 от температуры. Из формулы (17.36) имеем

$$c_2 = c_{21} + c_{22}\beta\tilde{\Phi}(0) + c_{23}[\beta\tilde{\Phi}(0)]^2, \quad (18.17)$$

где

$$c_{21} = a_4 w^{-1};$$

$$c_{22} = -a_2 (E_1 - R_{11}) V \bar{u} (R_{12}^0)^{-1} w^{-1}; \quad (18.18)$$

$$c_{23} = [(1 - r)(E_1 - R_{11}) V \bar{u} (R_{12}^0)^{-1} - \bar{u}] w^{-1};$$

в случае $s = s^* \approx 3,5862$ и для значений (16.13)

$$c_{21} = 0,019; \quad c_{22} = -0,139; \quad c_{23} = -0,764. \quad (18.19)$$

Как видим, коэффициенты \tilde{c}_{12} , c_{21} и c_{22} зависят от начальных значений a_2 и a_4 , которые определяют якобиан рассматриваемой задачи.

§ 19. ОБЛАСТИ ТЕМПЕРАТУР И ФАЗОВОГО ПРОСТРАНСТВА, В КОТОРЫХ РЕАЛИЗУЕТСЯ КРИТИЧЕСКИЙ РЕЖИМ

Определим те области температур и значений n , в которых справедливы решения (17.38), (17.39) [68, 131]. Рассмотрим сначала случай $\tau > 0$. Согласно теореме 1 § 17 рекуррентные уравнения при $\tau > 0$ и $n \rightarrow \infty$ имеют предельную точку (17.8), (17.9). Ренормгрупповые решения (17.38), (17.39) такому пределу не удовлетворяют; действительно,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} d^{(n)}(T) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{r^* + q + c_1 E_1^n}{s^{2n}} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{c_1 E_1^n}{s^{2n}} = 0; \quad (19.1)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_4^{(n)}(T) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{c_1 \mathcal{R}' E_1^n}{s^{4n}} > \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\text{const}}{s^{3n}}.$$

Согласно (17.30) и табл. 5 § 17 $E_1 \sim s^2 (1 + \mu_2)$ для s , близких к s^* , и $E_1 < s^2$. Следовательно, для $\tau > 0$ критический режим существует только для n , меньших некоторого n_τ . Поэтому следует определить два критерия: первый — найти область температур $\tau < \tau^*$, в которой имеет место КР, и второй — определить значения $n < n_\tau$, при которых в области $\tau < \tau^*$ справедливы решения (17.38), (17.39).

Определение. Критической называется область температур $\tau < \tau^*$, внутри которой решения рекуррентных уравнений (17.5), (17.6) для некоторых $n < n_\tau$ близки к решениям ренормгруппового типа (17.38), (17.39), соответствующим КР.

В этих решениях слагаемые, пропорциональные E_2^n , описывают «вход» в КР, а пропорциональные E_1^n — «выход» из КР. Чтобы существовал КР, необходимо, чтобы выход из него при $n \rightarrow 1$ не превышал входа. Следовательно, величина τ^* равна меньшему из корней двух уравнений:

$$c_2 \mathcal{R} E_2 = c_1 E_1 \text{ для (17.38)}$$

и

$$c_2 E_2 = c_1 \mathcal{R}' E_1 \text{ для (17.39)}.$$

Для первого уравнения имеем

$$\tau_1^* = \left| \frac{c_2 \mathcal{R} E_2}{c_1 E_1} \right|; \quad (19.2)$$

для второго

$$\tau_2^* = \left| \frac{c_2 E_2}{c_1 \mathcal{R}' E_1} \right|. \quad (19.3)$$

Согласно оценкам (18.17) — (18.19) для c_2 , (18.14) — (18.16) для c_1 и (17.30) для R_{ij} и E_1, E_2 , «в нулевом» приближении можно написать

$$\begin{aligned} \tilde{c}_1 &\approx c_{11} \beta \tilde{\Phi}(0); & c_2 &\approx -c_{23} [\beta \tilde{\Phi}(0)]^2; \\ \mathcal{R} &\approx \frac{1}{2} s^2 \frac{\mu_1}{\sqrt{u^*}} [s^2 (1 + \mu_2) - E_2]^{-1}; \\ \mathcal{R}' &\approx 2 [E_1 - s^2 (1 + \mu_2)]^2 \mu_1^{-1} \sqrt{u^*} s^{-2}. \end{aligned}$$

При этом ни c_{23} , ни c_{11} не зависят от исходных данных. Так как $\sqrt{u^*} = \sqrt{u} \beta \tilde{\Phi}(0)$, то величины $\beta \tilde{\Phi}(0)$ в числителе и знаменателе сокращаются, а τ_1^* и τ_2^* по оценке «в нулевом» приближении будут отвлеченными числами. В случае $s = s^*$

$$\tau_1^* \approx 0,024; \quad \tau_2^* \approx 0,283. \quad (19.4)$$

Таким образом, значение температурной области КР

$$\tau^* \approx 0,02. \quad (19.5)$$

Если наложить условие, чтобы вход в КР превалировал над выходом из него при всех $n \leq m$, то в результате τ_1^* и τ_2^* уменьшились бы на множитель

$$(E_2/E_1)^{(m-1)} = (0,045)^{m-1} \text{ для } s = s^*. \quad (19.6)$$

Рассмотрим второй критерий. Для каждой температуры $\tau < \tau^*$ определим точку окончания КР, которая будет начальной точкой

входа в ПГР. Согласно (17.8) и (17.9) эта точка должна удовлетворять условию

$$z^{(n\tau)} \gg 1, \quad \mathfrak{Z}^{(n\tau)} \gg 1, \quad (19.7)$$

где

$$\begin{aligned} z^{(n\tau)} &= \frac{3}{4} (r_{n\tau} + q)^2 (u_{n\tau})^{-1} = \\ &= \frac{3}{4} \frac{(r^* + q + c_1 E_1^{n\tau} - c_2 \mathcal{R} E_2^{n\tau})^2}{u^* + \mathcal{R}' c_1 E_1^{n\tau} + c_2 E_2^{n\tau}}. \end{aligned} \quad (19.8)$$

Так как \mathcal{R}' — малая величина, например для $s = s^*$

$$\mathcal{R}' = 0,153\beta_c \tilde{\Phi}(0) = 0,153 \cdot 1,128 = 0,172,$$

то под $n\tau$ будем понимать величину показателя n , при котором

$$c_1 \mathcal{R}' E_1^{n\tau} = u^*. \quad (19.9)$$

В этом случае $c_1 E_1^{n\tau} > 1$, $c_1 E_1^{n\tau} > u^*$, а $(c_1 E_1^{n\tau})^2 \gg u^*$, и тогда в (19.8) $z^{(n\tau)} \gg 1$. Действительно,

$$\begin{aligned} z^{(n\tau)} &\approx \frac{3}{4} \frac{(c_1 E_1^{n\tau})^2}{u^* + c_1 \mathcal{R}' E_1^{n\tau}}; \\ z^{(n\tau)} &\approx \frac{3}{4} \left(\frac{u^*}{\mathcal{R}'} \right)^2 (2u^*)^{-1} = \frac{3}{8} \frac{u^*}{(\mathcal{R}')^2} \gg 1. \end{aligned} \quad (19.10)$$

Для $s = s^*$

$$z^{(n\tau)} = \frac{3}{8} \frac{0,889}{(0,153)^2} = 14,247. \quad (19.11)$$

В формулу (19.9) подставляем $c_1(T) = \tau \tilde{c}_1$ и определяем $n\tau$:

$$n\tau = -\frac{\ln \tau}{\ln E_1} + \ln \left(\frac{(\bar{u})^{1/2} R_{12}^0}{E_1 - R_{11}} \frac{1}{\tilde{c}_{11}} \right) (\ln E_1)^{-1}. \quad (19.12)$$

В случае $s = s^*$

$$n\tau = -\frac{\ln \tau}{\ln E_1} + 0,930. \quad (19.13)$$

В частности, для $\tau = \tau^*$ имеем

$$n_{\tau^*} = -\frac{\ln 0,02}{\ln E_1} + 0,930 = 2,783. \quad (19.14)$$

Заметим, что согласно (17.38) и (17.39) температура τ^* определялась для $n = 1$.

Интересно найти и знак $d^{(n\tau)}(0)$. Согласно (17.38)

$$d^{(n\tau)}(0) = \frac{r^* + c_1 E_1^{n\tau} - c_2 \mathcal{R} E_2^{n\tau}}{s^{2n\tau}} \approx \frac{r^* + c_1 E_1^{n\tau}}{s^{2n\tau}}. \quad (19.15)$$

Подставляя из (19.9)

$$c_1 E_1^{m_\tau} = u^*/\mathcal{R}',$$

находим

$$d^{(n_\tau)}(0) \approx (r^* + u^*/\mathcal{R}') s^{-2n_\tau} > 0. \quad (19.16)$$

Так как всегда $u^*/\mathcal{R}' > r^*$, то, например, для $s = s^*$

$$d^{(n_\tau)}(0) \approx (-0,612 + 5,490) \beta \tilde{\Phi}(0) s^{-2n_\tau} > 0. \quad (19.17)$$

Эти результаты можно подтвердить на основании общих рекуррентных соотношений, например соотношения (15.16).

Найдем теперь точку m_τ , для которой (рис. 7)

$$d^{(m_\tau+1)}(0) = 0. \quad (19.18)$$

Для всех $n > m_\tau$ кривые $d^n(k)$ будут находиться над осью абсцисс. В точке выхода из КР величина $a_2^{m_\tau}$ описывается уравнением (см. (15.16))

$$a_2^{(m_\tau)} - \beta \tilde{\Phi}(0) + \mathcal{M}^{(m_\tau)} d^{(m_\tau)}(B_{m_\tau+1} B_{m_\tau}) = 0,$$

где $\mathcal{M}^{(m_\tau)} = \mathcal{N}^{(m_\tau)} - 1$. Для $d^{(m_\tau)}(0)$ находим

$$d^{(m_\tau)}(0) = - \frac{\mathcal{N}^{(m_\tau)} - 1}{\mathcal{N}^{(m_\tau)}} \frac{q}{s^{2m_\tau}}. \quad (19.19)$$

Вместо $d^{(m_\tau)}(0)$ подставляем его значение из (17.38) и сокращаем на s^{-2m_τ} , тогда

$$r^* + c_1 E_1^{m_\tau} \approx - \frac{\mathcal{N}^{(m_\tau)} - 1}{\mathcal{N}^{(m_\tau)}} q,$$

при этом r^* всегда отрицательно. Окончательное выражение имеет вид

$$m_\tau = - \frac{\ln \tau}{\ln E_1} + \frac{\ln \tilde{c}_1^{-1} (|r^*| - (\mathcal{N}^{(m_\tau)} - 1) q / \mathcal{N}^{(m_\tau)})}{\ln E_1}. \quad (19.20)$$

Из соотношения (17.16) следует, что $r^* = -[\mathcal{N}(z^*) - 1] q [\mathcal{N}(z^*) - s^{-2}]^{-1}$, поэтому аргумент у второго логарифма в правой части всегда положителен. Для оценки величины $\mathcal{N}^{(m_\tau)}(z^{(m_\tau)})$ можно сделать подстановку

$$z^{(m_\tau)} = (3/4) (q^2/u^*), \quad (19.21)$$

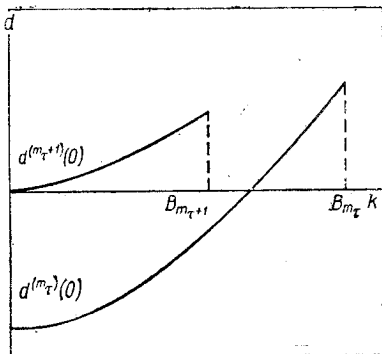


Рис. 7. График $d^{(m_\tau+1)}(k)$ при $\tau > 0$; штриховая линия соответствует $d^{(m_\tau)}(k)$.

так как по условию (19.18) $r_{m_\tau+1} = 0$, а u_n является медленно меняющейся функцией n (\mathcal{R}' — малая величина). В частности, для $s = s^*$ получаем

$$z^{(m_\tau)} \approx 0,316. \quad (19.22)$$

Из табл. 3 (см. выше) находим

$$\mathcal{N}(0,316) = 1,611; \quad \tilde{c}^{-1} [1 - (\mathcal{N} - 1)/\mathcal{N}] q = 0,324$$

и

$$m_\tau \approx -\frac{\ln \tau}{\ln E_1} - 0,306. \quad (19.23)$$

Отметим некоторые интересные особенности. Во-первых, из (19.13) и (19.23) следует, что

$$m_\tau < n_\tau \quad (19.24)$$

и вблизи $n = n_\tau$ кривая $d^{(n)}(k)$ целиком находится над осью абсцисс (см. рис. 7). Во-вторых, из (19.22) и (19.10) имеем

$$z^{(m_\tau)} < 1, \quad a z^{(n_\tau)} \gg 1, \quad (19.25)$$

хотя точка n_τ отдалена от точки m_τ на $\Delta n \approx 1$ или $\Delta n \approx 2$. С точки m_τ начинается стремительный подъем кривых $d^{(n)}(k)$ вверх, над осью абсцисс. Величина n_τ всегда больше единицы для $\tau < \tau^*$. Таким образом, доказано, что решения КР или РГ справедливы при T_c для всех n , следовательно, для всех $0 \leq k \leq B'$, а при $T > T_c$ — только для $n < n_\tau$, т. е. для $k > B'/s^{n_\tau}$. В области $T > T_c$ и $k \leq B'/s^{n_\tau}$ решения РГ должны переходить в новые, соответствующие ПГР.

§ 20. ПРЕДЕЛЬНЫЙ ГАУССОВ РЕЖИМ ПРИ $\tau > 0$

Для температур $\tau > 0$ и $\tau < \tau^*$ при $n \geq n_\tau$ необходимо найти новые решения, соответствующие ПГР и предельным соотношениям (17.8), (17.9). В области $n > n_\tau$ [43, 78, 84, 131] согласно (19.10) и (19.11) справедливы неравенства

$$z^{(n)} \gg 1, \quad \mathfrak{Z}^{(n)} \gg 1.$$

Для функций $\mathcal{H}(z)$, $\mathcal{H}(\mathfrak{Z})$, $\mathcal{L}(z)$ и $\mathcal{L}(\mathfrak{Z})$ и для \mathfrak{Z} берутся ряды (15.24). Тогда

$$\begin{aligned} \mathcal{N}^{(n)} &= 1 - \frac{3}{8} (z^{(n)})^{-1} (1 - s^{-3}) + \dots; \\ \mathcal{E}^{(n)} &= 1 - \left\{ 9 - \frac{21}{s^3} \right\} (8z^{(n)})^{-1} + \dots \end{aligned} \quad (20.1)$$

В разложении функции $\mathcal{N}^{(n)}$ с точностью до z^{-1} имеется единичный элемент, а в разложении функции $\mathcal{E}^{(n)}$ — нет. Как показано М. П. Козловским [36], если в промежуточном интегрировании в

(14.26) и (14.33) учесть слагаемое $P_6 v^6$, то $\mathcal{N}^{(n)}$ и $\mathcal{E}^{(n)}$ примут вид ¹¹

$$\mathcal{N}^{(n)} = 1 - \frac{3}{8} (z^{(n)})^{-1} (1 - s^{-3}) + \dots ;$$

$$\mathcal{E}^{(n)} = 1 - (9 - 24s^{-3} + 12s^{-6}) (8z^{(n)})^{-1} + \dots \quad (20.2)$$

Как вытекает из (19.16) и (19.17), $d^{(n)}(0) > 0$ для $n \geq n_\tau$ и для плотности меры $W_n(\rho) \sim \exp E^{(n)}(\rho)$ блочный гамильтониан

$$E^{(n)}(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{k < B_n} d^{(n)}(k) \rho_k \rho_{-k} -$$

$$-\frac{1}{4!} \frac{1}{N_n} a_4^{(n)} \sum_{k_1, \dots, k_4} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4}$$

представляет собой отрицательно определенную форму. При $\tau \rightarrow 0$ $n_\tau \rightarrow \infty$ и $B_{n_\tau} \rightarrow 0$.

В предельном гауссовом режиме в качестве базисной можно было бы выбрать гауссову плотность меры, а влияние четверного слагаемого учесть по теории возмущений [68]. Это соответствовало бы разложениям по степеням z^{-1} . Кроме того, при использовании гауссовой плотности меры под интегралом имеются разделяющиеся переменные и интегрирование по ρ_k можно выполнить сразу для всех ρ_k с $0 \leq k < B_{n_\tau}$. При $T > T_c$ среднее значение переменной ρ_0 равно нулю, и при интегрировании по ρ_k с $k \leq B_{n_\tau}$ можно не выделять интегрирования по ρ_0 , если не интересоваться значением восприимчивости при $T > T_c$. При $T > T_c$ интегрирование по слоям с четверной базисной плотностью меры можно выполнить до конца.

В качестве функций $\mathcal{N}^{(n)}$ и $\mathcal{E}^{(n)}$ возьмем их значения из (20.1):

$$\mathcal{N}^{(n)} \approx 1 + \frac{3}{8} (z^{(n)})^{-1} (1 - s^{-3}) + \dots ; \quad \mathcal{E}^{(n)} = 1. \quad (20.3)$$

В рассматриваемом случае при $\tau > 0$ и $n > n_\tau$

$$z^{(n)} \gg 1, \quad \mathfrak{Z}^{(n)} \gg 1.$$

Рекуррентные уравнения (17.5) и (17.6) запишем в виде

$$d^{(n+1)} = d^{(n)} \left[1 - \frac{3}{8} (z^{(n)})^{-1} (1 - s^{-3}) + \dots \right] - q_1/s^{2n};$$

$$a_{n+1} = s^{-3} a_n, \quad (20.4)$$

где $q_1 = q(1 - s^{-2})$. В качестве начальных значений выбираются следующие:

$$d^{(n_\tau)} = \frac{r_{n_\tau} + q}{s^{2n_\tau}} ; \quad a_4^{(n_\tau)} = \frac{u_{n_\tau}}{s^{4n_\tau}}. \quad (20.5)$$

¹¹ При учете членов с P_6 в (14.45) появляются поправки, пропорциональные z^{-2} для $d^{(n)}$, и поправки, пропорциональные z^{-1} в $a_4^{(n)}$ (см. также работы [14, 21]).

Здесь величина n_τ задана в (19.12), $\tau < \tau^*$; для $d^{(n_\tau)}$ и $a_4^{(n_\tau)}$ имеем выражения (17.38) и (17.39). Для $d^{(n_\tau+1)}$ и $a_4^{(n_\tau+1)}$ получаем

$$d^{(n_\tau+1)} = d^{(n_\tau)} - \frac{1}{2} a_4^{(n_\tau)} (d^{(n_\tau)})^{-1} (1 - s^{-3}) - q_1/s^{2n_\tau}; \quad (20.6)$$

$$a_4^{(n_\tau+1)} = a_4^{(n_\tau)} s^{-3}. \quad (20.7)$$

В решении для $d^{(n_\tau+2)}$ вторым слагаемым в правой части (20.6) можно пренебречь, от шага к шагу оно уменьшается пропорционально s^{-3} , так что

$$d^{(n_\tau+2)} = d^{(n_\tau+1)} - q_1/s^{2(n_\tau+1)}, \quad (20.8)$$

$$a_4^{(n_\tau+2)} = a_4^{(n_\tau+1)} s^{-3} = a_4^{(n_\tau)} s^{-6};$$

$$d^{(n_\tau+3)} = d^{(n_\tau+1)} - (q_1/s^{2(n_\tau+1)}) (1 + s^{-2});$$

$$d^{(n_\tau+m)} = d^{(n_\tau+1)} - (q_1/s^{2(n_\tau+1)}) (1 + s^{-2} + \dots + s^{-2(m-2)}) = \\ = d^{(n_\tau+1)} - q/s^{2(n_\tau+1)} (1 - s^{-2(m-1)}); \quad (20.9)$$

$$a_4^{(n_\tau+m)} = a_4^{(n_\tau)} s^{-3m}. \quad (20.10)$$

В пределе $m \rightarrow \infty$

$$\lim_{m \rightarrow \infty} d^{(n_\tau+m)} = d^{(n_\tau+1)} - q/s^{2(n_\tau+1)}; \quad (20.11)$$

$$\lim_{m \rightarrow \infty} a_4^{(n_\tau+m)} = \lim_{m \rightarrow \infty} a_4^{(n_\tau)} / s^{3m} = 0. \quad (20.12)$$

Объединяя результаты этого параграфа с решениями (17.38) и (17.39), находим полное решение рекуррентных уравнений:

$$d^{(n)} (B_{n+1} B_n) =$$

$$= \begin{cases} \frac{r^* + c_1 E_1^n - c_2 \mathcal{R} E_2^n + q}{s^{2n}}, & n \leq n_\tau, \\ d^{(n_\tau)} (1 - 3/s (z^{(n_\tau)})^{-1} (1 - s^{-3})) - q_1/s^{2n_\tau}, & n = n_\tau + 1, \\ d^{(n_\tau+1)} - q/s^{2(n_\tau+1)} (1 - s^{-2(m-1)}), & n = n_\tau + m, m \geq 2, \end{cases} \quad (20.13)$$

$$a_4^{(n)} = \begin{cases} \frac{u^* + c_1 \mathcal{R}' E_1^n + c_2 E_2^n}{s^{4n}}, & n \leq n_\tau, \\ a_4^{(n_\tau)} / s^{-3m}, & n = n_\tau + m, m \geq 1, \end{cases} \quad (20.14)$$

где согласно (19.14)

$$d^{(n_\tau)} (B_{n_\tau+1} B_{n_\tau}) = \frac{r^* + c_1 E_1^{n_\tau} - c_2 \mathcal{R} E_2^{n_\tau} + q}{s^{2n_\tau}}. \quad (20.15)$$

Представляет интерес сравнить эти результаты с результатами машинного расчета рекуррентных соотношений, выполненных в работах [78—80, 85].

§ 21. РЕЗУЛЬТАТЫ МАШИННЫХ РАСЧЕТОВ

Рассмотрим результаты различных численных расчетов, выполненных В. А. Коломийцем и М. П. Козловским с помощью метода КП для трехмерной модели Изинга [38, 43, 81, 84]. Сравним их с результатами аналитических исследований, приведенных в настоящей главе. Начнем с наиболее общей формы рекуррентных уравнений, решение которой является не столь уж сложной для техники ЭВМ задачей. Дело в том, что коэффициенты в этих уравнениях выражаются через однократные интегралы. Они представляют собой моменты от базисной плотности меры, для которой можно составить выражение, содержащее в экспоненте произвольное число членов. Вместо уравнений (15.1) и (15.6) запишем

$$a_2^{(n+1)} = \beta \tilde{\Phi}(B_{n+1}B_n) + (2\pi)^2 Q^{-1}(\varphi_n) \int_{-\infty}^{\infty} v^2 \varphi_n(v) dv; \quad (21.1)$$

$$a_4^{(n+1)} = (2\pi)^4 \left\{ -Q^{-1}(\varphi_n) \int_{-\infty}^{\infty} v^4 \varphi_n(v) dv + 3 \left[Q^{-1}(\varphi_n) \int_{-\infty}^{\infty} v^2 \varphi_n(v) dv \right]^2 \right\}; \quad (21.2)$$

$$a_6^{(n+1)} = (2\pi)^6 \left\{ Q^{-1}(\varphi_n) \int_{-\infty}^{\infty} v^6 \varphi_n(v) dv - \right. \\ \left. - 15Q^{-2}(\varphi_n) \int_{-\infty}^{\infty} v^2 \varphi_n(v) dv \int_{-\infty}^{\infty} v^4 \varphi_n(v) dv + \right. \\ \left. + 30 \left[\int_{-\infty}^{\infty} v^2 \varphi_n(v) dv \right]^3 Q^{-3}(\varphi_n), \right. \quad (21.3)$$

$$\dots \dots \dots \varphi_n(v) = \exp \left\{ \sum_{m \geq 1} P_{2m}^{(n)} v^{2m} (2\pi)^{2m} [(2m)!]^{-1} \right\}; \quad (21.4)$$

$$Q(\varphi_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n(v) dv; \quad (21.5)$$

$$P_2^{(n)} = Q^{-1}(f_n) \int_{-\infty}^{\infty} \eta^2 f_n(\eta) d\eta; \quad (21.6)$$

$$P_4^{(n)} = \frac{N_{n+1}}{N_n} \left[-Q^{-1}(f_n) \int_{-\infty}^{\infty} \eta^4 f_n(\eta) d\eta + 3(P_2^{(n)})^2 \right]; \quad (21.7)$$

$$P_6^{(n)} = \left(\frac{N_{n+1}}{N_n} \right)^2 \left[Q^{-1}(f_n) \int_{-\infty}^{\infty} \eta^6 f_n(\eta) d\eta - 15Q^{-2}(f_n) \times \right.$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} \eta^2 f_n(\eta) d\eta \int_{-\infty}^{\infty} \eta^4 f_n(\eta) d\eta + 30 (Q^{-1} \int \eta^2 f(\eta) d\eta)^3 \Big]; \quad (21.8)$$

$$f_n(\eta) = \exp \left[-\frac{1}{2} d^{(n)} (B_{n+1} B_n) \eta^2 - \sum_{m \geq 2} \left(a_{2m}^{(n)} \eta^{2m} \frac{1}{(2m)!} \right) \right]; \quad (21.9)$$

$$Q(f_n) = \int_{-\infty}^{\infty} f_n(\eta) d\eta. \quad (21.10)$$

Таблица 6

$\beta \widehat{D}(0)$	n_0	$d^{(n)}(0)$	$d^{(n)}(B_{n+1} B_n)$	T
0,7000000	1	+0,783816 · 10 ⁻¹	+0,194632 · 10 ⁰	$T > T_0$
0,8000000	2	+0,150987 · 10 ⁻¹	+0,483130 · 10 ⁻¹	$T > T_0$
0,8500000	3	-0,144160 · 10 ⁻¹	-0,539348 · 10 ⁻²	$T < T_0$
0,8250000	3	+0,233609 · 10 ⁻²	+0,108992 · 10 ⁻¹	$T > T_0$
0,8375000	4	-0,363781 · 10 ⁻²	-0,146458 · 10 ⁻²	$T < T_0$
0,8312500	5	+0,385682 · 10 ⁻³	+0,924976 · 10 ⁻³	$T > T_0$
0,8343750	5	-0,115886 · 10 ⁻²	-0,617551 · 10 ⁻³	$T < T_0$
0,8328125	6	-0,261723 · 10 ⁻³	-0,126646 · 10 ⁻³	$T < T_0$
0,8320312	6	0,765355 · 10 ⁻⁴	+0,211533 · 10 ⁻³	$T > T_0$
0,8324219	7	-0,596714 · 10 ⁻⁴	-0,258852 · 10 ⁻⁴	$T < T_0$
0,8322266	9	0,211615 · 10 ⁻⁴	+0,233181 · 10 ⁻⁴	$T > T_0$
0,8322998	9	-0,374528 · 10 ⁻⁵	-0,160043 · 10 ⁻⁵	$T < T_0$
0,8322876	10	+0,119762 · 10 ⁻⁶	0,694710 · 10 ⁻⁶	$T > T_0$
0,8322937	10	-0,128735 · 10 ⁻⁵	-0,748158 · 10 ⁻⁶	$T < T_0$
0,8322884	11	+0,383419 · 10 ⁻⁷	0,205921 · 10 ⁻⁶	$T > T_0$
0,8322889	13	-0,287173 · 10 ⁻⁷	-0,855788 · 10 ⁻⁸	$T < T_0$

Остановимся сначала на расчетах в рамках четверной базисной плотности меры. Параметр деления $s = 2$. Начальные значения коэффициентов $a_2 = 0,644929$, $a_4 = 0,182590$, причем считаем, что с самого начала для потенциала справедливо параболическое приближение. Все детали процесса фазового перехода рассчитаны на ЭВМ. Здесь рассмотрим только некоторые результаты.

1. Начнем с определения критической температуры. Интегрирование производим по формулам (21.1)–(21.8). Как отмечалось в § 18, критическая температура определяется условиями

$$\lim_{n \rightarrow \infty} d^{(n)}(B_{n+1} B_n) = 0; \quad d^{(n)}(B_n) \geq 0; \quad d^{(n)}(0) \leq 0,$$

причем, если при интегрировании в n -м слое

$$d^{(n)}(0, T) > 0, \text{ то } T > T_c;$$

если же

$$d^{(n)}(0, T) < 0 \text{ и } d^{(n)}(B_{n+1} B_n) < 0, \text{ то } T < T_c.$$

Рассматриваем область температур $T_H < T < T_B$ [82], где

$$T_B = \tilde{\Phi}(0)/a_2; \quad T_H = (1/2)(\tilde{\Phi}(0)/a_2); \quad a_2 < \beta\tilde{\Phi}(0) \leq 2a_2.$$

Результаты приведены в табл. 6 (здесь n_0 — номер слоя, после которого кривая $d^{(n)}(kT)$ выходит над осью абсцисс в случае $T > T_c$,

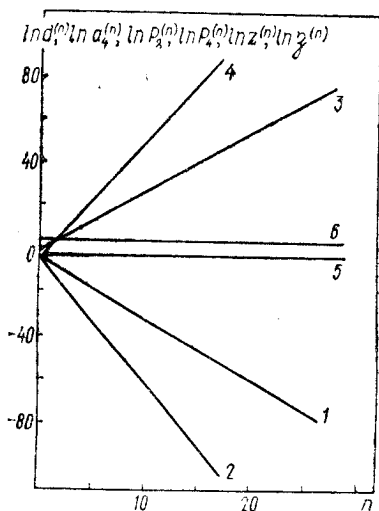


Рис. 8. Критический режим коэффициентов $\ln d^n(I)$; $\ln a_4^{(n)}(2)$; $\ln P_2^{(n)}(3)$; $\ln P_4^{(n)}(4)$ и переменных $\ln z^{(n)}(5)$; $\ln Z^{(n)}(6)$ при $T = T_c$; $s = 2$.

или же $d^{(n)}(0, T)$ и среднее значение $d^{(n)}(B_{n+1}B_n)$ становятся отрицательными при $T < T_c$). В итоге ¹²

$$\beta_c \tilde{\Phi}(0) = 0,832288294. \quad (21.14)$$

Сравнивая этот результат с (18.8), видим, что значение T_c существенно зависит от начальных данных: здесь $a_2 \approx 0,645$, там $a_2 \approx 0,989$.

2. Рассмотрим решение рекуррентных уравнений при $T = T_c$ и $T \neq T_c$. На рис. 8 приведены кривые для значений $d^{(n)}$, $a_4^{(n)}$, $z^{(n)}$, $Z^{(n)}$, $P_2^{(n)}$ и $P_4^{(n)}$ при $T = T_c$, на рис. 9 — кривые, описывающие решение рекуррентных уравнений при $T > T_c$ и $T < T_c$. Отчетливо виден выход из КР и вход в ПР (рис. 9).

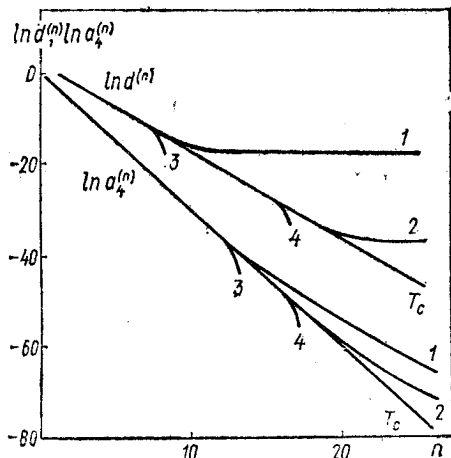


Рис. 9. Схема выхода системы из критического режима; кривые 1, 2 соответствуют температурам $T_1 > T_2 > T_c$ ($T_1 = 0,7748987 \tilde{\Phi}(0)/a_2$, $T_2 = 0,7748865 \times \tilde{\Phi}(0)/a_2$), 3, 4 — температурам $T_3 < T_4 < T_c$ ($T_3 = 0,7748846 \tilde{\Phi}(0)/a_2$, $T_4 = 0,7748852 \tilde{\Phi}(0)/a_2$).

¹² Заметим, что в гауссовом приближении для данной модели критическая температура определяется из условия

$$\beta_{c\Gamma} \tilde{\Phi}(0)/a_2 = 1; \quad T_{c\Gamma} = \tilde{\Phi}(0)/a_2; \quad T_c/T_{c\Gamma} = 0,7748858.$$

3. Рассмотрим вопрос о границах применимости метода неподвижной точки для решения РГ уравнений. Заменим в уравнении (21.1) $a_2^{(n)}$ на $d^{(n)}(0) = a_2^{(n)} - \beta \tilde{\Phi}(0)$, произведем подстановку (17.10), дополнив ее подстановками

$$a_0^{(n)} = v_n s^{-6n}, \dots, P_{2m}^{(n)} = s^{2m \cdot n} p_{2m}^{(n)} \quad (21.12)$$

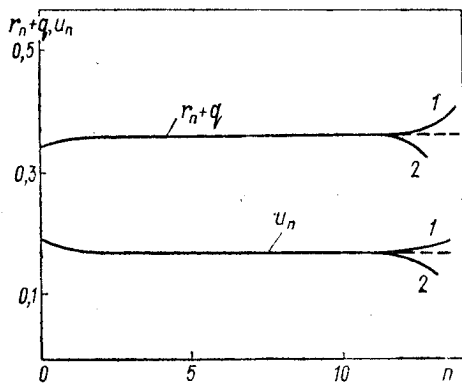


Рис. 10. Решения уравнений (21.13) для температур $\tau_1 = 1,50 \cdot 10^{-9}$ (1) и $\tau_2 = -8,48 \cdot 10^{-8}$ (2); штриховая линия — значения, соответствующие $\tau = 0$.

и введем вместо v переменные $\omega = s^n v$. В результате из уравнений (21.1) и (21.2) получаем следующие уравнения для r_n , u_n , v_n и $p_{2m}^{(n)}$:

$$\begin{aligned} r_{n+1} &= s^2(-q + \\ &+ (2\pi)^2 Q^{-1}(\tilde{\varphi}_n) \int \omega^2 \tilde{\varphi}_n(\omega) d\omega); \\ u_{n+1} &= s^4 (2\pi)^4 \times \\ &\times \left\{ -Q^{-1}(\tilde{\varphi}_n) \int_{-\infty}^{\infty} \omega^4 \tilde{\varphi}_n(\omega) d\omega + \right. \\ &+ 3 \left[Q^{-1}(\tilde{\varphi}_n) \times \right. \\ &\left. \left. \times \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 \tilde{\varphi}_n(\omega) d\omega \right]^2 \right\}; \quad (21.13) \end{aligned}$$

$$v_{n+1} = s^6 (2\pi)^6 \left\{ Q^{-1}(\tilde{\varphi}_n) \int_{-\infty}^{\infty} \omega^6 \tilde{\varphi}_n(\omega) d\omega + \dots \right\};$$

$$\tilde{\varphi}_n(\omega) = \exp \sum_{m \geq 1} p_{2m}^{(n)} \omega^{2m} (2\pi)^{2m} [(2m)!]^{-1}.$$

В соотношения (21.6)—(21.10) также следует ввести подстановки (17.10) и (21.12). Они будут сопровождаться заменой $\eta = s^n x$. В результате, например, для (21.6) получим

$$p_2^{(n)} = Q^{-1}(\tilde{f}_n) \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \tilde{f}_n(x) dx.$$

Вместо функции $f_n(\eta)$, определяемой формулой (21.9), имеем функцию $\tilde{f}_n(x)$:

$$\tilde{f}_n = \exp \left[-\frac{1}{2} (r_n + q) x^2 - \frac{u_n x^4}{4!} - \frac{v_n x^6}{6!} - \dots \right].$$

На рис. 10 приведены кривые, описывающие решения для $\tau_1 > 0$ и $\tau_2 < 0$. Видно, что чем ближе T к T_c , тем на большем интервале значений n функции r_n и u_n сохраняют постоянные значения. Следовательно, в КР уравнения (21.13) можно решать методом неподвижной точки. Можно рассмотреть их линейное приближение и, зная

точные решения (см. рис. 10), найти границы применения метода РГ.

Для определенности положим $s = 2$. Тогда согласно результатам машинных расчетов координаты фиксированной точки таковы:

$$\begin{aligned} r^* &= -0,1700; & u^* &= 0,1557; \\ z^* &= 0,6054; & \mathfrak{Z}^* &= 16,0921. \end{aligned}$$

Рекуррентные соотношения (21.13) запишем в виде системы двух линейных уравнений

$$\begin{pmatrix} r_{n+1} - r^* \\ u_{n+1} - u^* \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} r_n - r^* \\ u_n - u^* \end{pmatrix}. \quad (21.14)$$

В нашу задачу входит вычисление элементов R_{ij} матрицы преобразования (21.14). Однако при выполнении численных расчетов более удобно пользоваться соотношениями, не включающими координат фиксированной точки r^* , u^* . Это дает возможность непосредственно найти область с заданной фиксированной точкой, а также изучить эволюцию собственных значений матрицы R в линейном приближении уравнений (21.13).

Введем величины

$$g_n = r_n - r_{n-1}, \quad a_n = u_n - u_{n-1}. \quad (21.15)$$

Тогда вместо уравнений (21.14) получим

$$\begin{pmatrix} g_{n+1} \\ a_{n+1} \end{pmatrix} = R_n \begin{pmatrix} g_n \\ a_n \end{pmatrix}, \quad (21.16)$$

где элементы R_{ij} задаются соотношениями

$$\begin{aligned} R_{11}^{(n)} &= D_n (g_{n+1} a_{n-1} - g_n a_n); & R_{12}^{(n)} &= D_n (g_n g_n - g_{n+1} g_{n-1}); \\ R_{21}^{(n)} &= D_n (a_{n+1} a_{n-1} - a_n a_n); & R_{22}^{(n)} &= D_n (a_n g_n - g_{n-1} a_{n+1}). \end{aligned} \quad (21.17)$$

Здесь

$$D_n^{-1} = g_n a_{n-1} - g_{n-1} a_n. \quad (21.18)$$

В КР элементы $R_{ij}^{(n)}$ являются постоянными, не зависящими от τ величинами. Собственные значения $E_{1,2}^{(n)}$ матрицы определяются формулой

$$E_{1,2}^{(n)} = \frac{1}{2} \{R_{11}^{(n)} + R_{22}^{(n)} \pm [(R_{11}^{(n)} - R_{22}^{(n)})^2 + 4R_{12}^{(n)} R_{21}^{(n)}]^{1/2}\}, \quad (21.19)$$

причем значению $E_1^{(n)}$ соответствует «+», а $E_2^{(n)}$ — «-». Из графиков рис. 11 следует, что имеются три различные области зависимости собственных значений $E_1^{(n)}$, $E_2^{(n)}$ от n . Первая соответствует КР. При $s = 2$

$$E_1 = 3,480, \quad E_2 = 0,504. \quad (21.20)$$

Отсюда следует, что в КР существует фиксированная точка типа седла. Здесь применимы соотношения (21.14) и (21.19).

Во второй области $n \approx n_c$ собственные значения быстро начинают отклоняться от фиксированных значений и линейное приближение (21.14) становится неприменимым, так как оно не соответствует общим рекуррентным соотношениям. Собственные значения E_1 и E_2 сильно зависят от n .

Третья область, соответствующая ПГР (рис. 11), характеризуется новыми собственными значениями:

$$E_1 = 3,480, E_2 = 4,000. \quad (21.24)$$

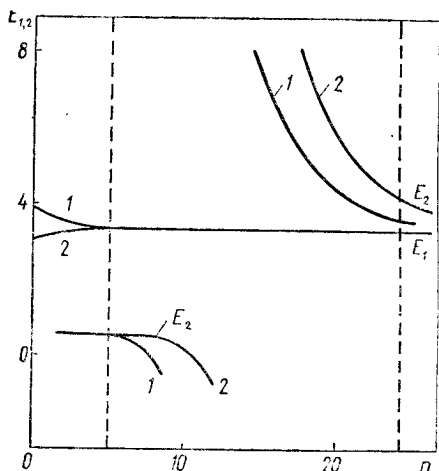


Рис. 11. Эволюция собственных значений $E_{1,2}$ с ростом n для температур T_1 и T_2 при $s = 2$. Кривой 1 соответствует $T_1 > T_c$ ($T_1 = 0,77489870 \tilde{\Phi}(0)/a_2$), кривой 2 — $T_2 < T_c$ ($T_2 = 0,774846 \tilde{\Phi}(0)/a_2$).

Результаты решений для ПГР, следует выбрать точку n_c , ибо только для $n \geq n_c z^{(n_c)} \gg 1$, в то время как $z^{(m_c)} \ll 1$. Область фазовых слоев между m_c и n_c является переходной. Поэтому для функций $\mathcal{H}(z)$ и $\mathcal{L}(z)$ необходимы точные значения.

Данные машинного и аналитического расчета рекуррентных уравнений (17.13) [80] приведены в табл. 7 для $\tau = 1,5 \cdot 10^{-2}$.

Таблица 7

n	m	$r_n + q$ (КР, формула (20.13))	$r_n + q$ (уравнение (21.13), машинное решение)	$(r_n + q)s^{2m}$ (ПГР, формула (20.13))	u_n (КР, формула (20.14))	u_n (уравнение (21.13), машинное решение)	$u_{n_c} s^{m_c}$ (ПГР, формула (20.14))
0		0,365	0,365		0,183	0,183	
1		0,369	0,369		0,178	0,178	
5		0,373	0,373		0,173	0,173	

Здесь реализуется фиксированная точка типа неустойчивого узла. Однако она не является физической. Исследование по линейному приближению становится неверным. В действительности для больших значений $s = 2$ имеет место ПГР (см. также рис. 9).

Наконец приведем численное сравнение машинных решений с аналитическими, выполненными в гл. III. Параметр деления $s = 2$. Решения состоят из двух частей. Первая соответствует критическому режиму, решение основано на методе неподвижной точки — это решение РГ типа. Вторая часть — предельный гауссов режим. Точка сшивания n_c определена формулой (19.12). Фактически имеются две точки сшивания, n_c и m_c . Для того чтобы использовать результаты

n	m	$r_n + q$ (КР, формула (20.13))	$r_n + q$ (уравнение (21.13), машинное решение)	$(r_n + q) s^{2m}$ (ПГР, фор- мула (20.14))	u_n (КР, формула (20.15))	u_n (уравне- ние (21.13), машинное решение)	$u_n \tau^m$ (ПГР, формула (20.14))
10		0,374	0,374		0,173	0,173	
12		0,378	0,377		0,173	0,173	
14		0,416	0,426		0,174	0,174	
15		0,520	0,556		0,186	0,189	
16		0,880	1,025		0,216	0,227	
Переход от КР к ПГР							
17	0	2,129	2,785	2,129	0,323	0,344	0,323
18	1	6,459	9,694	8,516	0,693	0,638	0,646
19	2	21,474	37,230	34,064	2,013	1,259	1,292
20	3	73,536	147,322	136,256	6,428	2,513	2,584

В этой таблице n — номер слоя интегрирования; m — номер слоя в ПГР;

$$r_0 + q = 0,645 - \beta_c \tilde{\Phi}(0) (1 - 2b^2 \langle k^2 \rangle_{BB'}) = 0,365,$$

$$u_0 = a_4 = 0,183.$$

Для ПГР

$$d^{(n_\tau + m)} \approx d^{(n_\tau)}; \quad a_4^{(n_\tau + m)} \approx \frac{a^{(n_\tau)}}{s^{3m}};$$

$$d^{(n_\tau + m)} \approx \frac{r_{n_\tau} + q}{s^{2n_\tau}} = \frac{(r_{n_\tau} + q) s^{2m}}{s^{2(n_\tau + m)}}; \quad a^{n_\tau + m} \approx \frac{u_{n_\tau} s^m}{s^{4(n_\tau + m)}}.$$

Величины R_{ij} , E_1 и E_2 заданы в табл. 5. Для КР при $s = 2$ $r^* = -0,203 \beta \tilde{\Phi}(0)$; $u^* = 0,221 [\beta \tilde{\Phi}(0)]^2$; $c_{11} = 0,897$. Значения n_τ и m_τ определены по формулам (19.12) и (19.20):

$$n_\tau = -\frac{\ln \tau}{1,246} + \frac{1}{1,246} \ln \left(\frac{V \sqrt{u} R_{12}^0}{E_1 - R_{11}} \frac{1}{c_{11}} \right) \approx 17,108;$$

$$m_\tau = -\frac{\ln \tau}{1,246} - 1,130 \approx 15,176; \quad r_{m_\tau} \approx 0.$$

Переход к ПГР выполнен начиная со слоя $n = 17$, для этого номера считаются справедливыми решения РГ типа. Видна степень несовпадения РГ решений с машинными в переходной области. Кроме того, видно, что u_n отклоняется от решений РГ типа значительно медленнее, чем $r_n + q$.

4. Сравнение машинных и аналитических расчетов требуется для решения еще одного важного вопроса — о зависимости результатов расчета от s — параметра деления фазового пространства на слои. Необходимо выяснить, с чем связана эта зависимость и как ее можно уменьшить.

Рассмотрим сначала указанную зависимость в рекуррентных уравнениях. Подстановка (17.10) вместе с усредненным потенциалом

приводит к уравнениям (17.13), (21.13) для r_n и u_n , которые решаются с помощью метода неподвижной точки. Как вытекает из табл. 5, собственные значения E_1 , E_2 и значения неподвижных точек r^* , u^* яв-

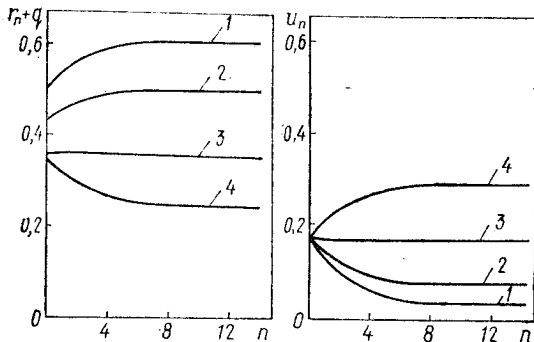


Рис. 12. Эволюция величин $r_n + q$ и u_n как функций n при $T = T_c$ для $s = 1,25$ (1); 1,50 (2); 2,0 (3); 2,50 (4).

ляются функциями s . На рис. 12 представлены значения $r_n + q$ и u_n как функции номера слоя для различных s при $T = T_c$. В этом случае

$$r_n + q = r^* + q + c_2 \mathcal{R} E_2^n; \quad u_n = u^* + c_2 E_2^n. \quad (21.22)$$

Слагаемые $c_2 \mathcal{R} E_2^n$ и $c_2 E_2^n$ описывают вход в режим неподвижной точки. Для разных s вход имеет разную протяженность. Этот факт еще более ярко иллюстрирует рис. 13 [43, 78, 84]. Кривые для u_n начинаются с одной и той же точки $u_0 = a_4$. Для $r_n + q$ кривые начинаются с разных точек, так как разные средние значения соответствуют потенциалу в первом интервале деления фазового пространства на слои. Этот первый интервал $B_1 B$ мало существен при решении вопросов РГ, однако его вклад в определение величины критической температуры и свободной энергии значителен. На рис. 13 приведены кривые, описывающие результаты расчетов, выполненных в предположении, что квадратичная аппроксимация для потенциала (16.5) справедлива во всей области значений $0 \leq k < B$. Кривые для $r_n + q$ и u_n представлены на рис. 12 в разных масштабах, так как величины фазового слоя при разных s различны. Координате $n = 1$ соответствует на оси k точка B/s , координате $n = 2$ — точка B/s^2 и т. д. Кроме того, r_n и u_n входят в подстановку (17.10) с

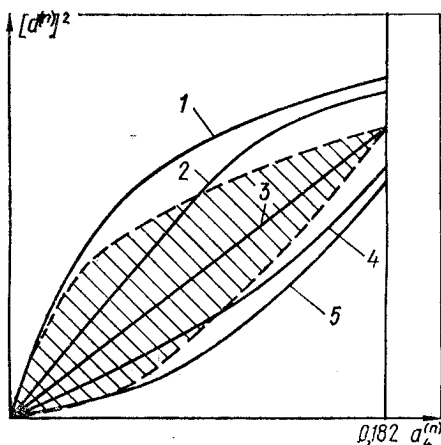


Рис. 13. Вход в режим неподвижной точки согласно решениям (21.13) при $T = T_c$ для $s = 1$ (1); 1,8 (2); 2,05 (3); 2,60 (4); 3,0 (5).

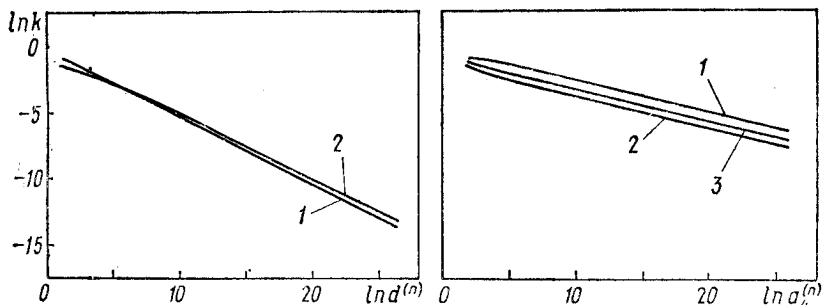


Рис. 14. Критический режим для d^n и $a_4^{(n)}$ как функций k при $T = T_c$ для $s = 1,8$ (1); 3,5 (2) и 2,5 (3).

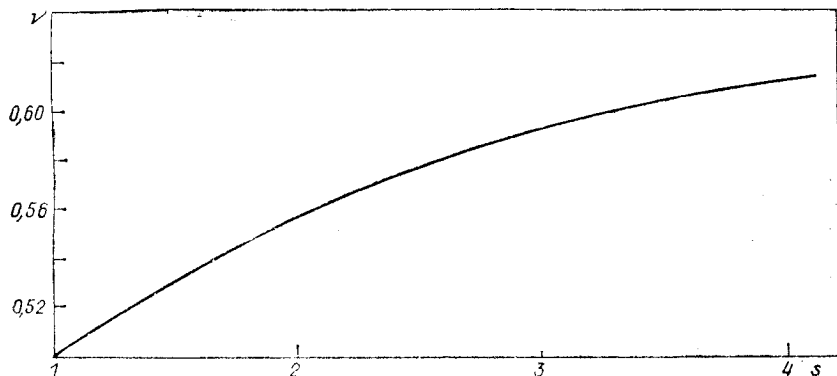


Рис. 15. Зависимость критического индекса ν как функции s для четверного базисного распределения.

разными знаменателями при одном и том же n . Если ввести логарифмический масштаб $\ln k = \ln B - n \ln s$, а вместо $r_n + q$ и u_n писать $\ln d^{(n)}$ и $\ln a_4^{(n)}$ при $T = T_c$, то получим линии, приведенные на рис. 14. Видим, что прямые расположены близко друг к другу, однако различаются между собой в области значений s , стремящихся к единице, и при больших s . Эта зависимость результатов от s обусловлена аппроксимациями, допущенными при выполнении расчетов.

Первая аппроксимация относится к усреднению потенциала. Она влияет на выбор начальных средних значений и на величины T_c и термодинамических функций. Первый интервал усреднения очень велик. Расчеты здесь можно выполнять и с помощью гауссовой плотности меры, так как для первого интервала $d(k) > 0$, $B_1 \leq k < B$. При интегрировании в слоях с большими номерами n усреднение потенциала вносит незначительную количественную поправку (см. гл. III).

Вторая аппроксимация связана с обрывом рядов в экспоненте в подынтегральных функциях в выражениях (14.45), (14.46), (15.14) на членах четвертой степени (мы все время ограничиваемся четвер-

ным базисным распределением). Это приводит к зависимости результатов от s (естественно, при учете более высоких степеней в экспоненте эта зависимость может быть уменьшена).

Различаем три области значений s : 1) «средняя», где $1,5 \leq s \leq 3,58$; 2) область значений s , близких к единице и для которых $\ln s$ — малая величина, и 3) область больших s , когда $1/s$ — малая величина. Рассмотрим поведение критического индекса ν как функции s при четверном базисном распределении и при учете поправок, свя-

Таблица 8

Номер строки	Значения ν при различных s				
	2,0	2,5	3,0	3,5	4
1	0,685	0,642	0,620	0,606	0,597
	0,557	0,587	0,602	0,611	0,617
2	0,682	0,641	0,620	0,606	0,597
	0,553	0,583	0,599	0,609	0,615
3	0,684	0,641	0,620	0,606	0,597
	0,550	0,582	0,599	0,609	0,615

занных с более высоким, чем четвертый, порядком плотности меры. Расчеты для «средних» значений s выполнены в работах [37, 91, 79, 80]. На рис. 15 представлено значение критического индекса ν как функции s . Видим, что ν зависит от s . Исследуем этот вопрос.

Рассмотрим интеграл (12.25) с четверным базисным распределением (12.26), (12.27). В результате интегрирования по η получаем выражение (14.42), которое, строго говоря, следует записать в виде

$$\begin{aligned}
 Z = C \int \exp [E_4(\rho\eta) (d\rho)^{N_1} (d\eta)^{N-N_1}] = C \left[Q \left(\frac{d}{(2\pi)^2}, \frac{a_4}{(2\pi)^4} \right) \right]^N \times \\
 \times \int \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{k \leq B_1} [\beta \tilde{\Phi}(k) - \beta \tilde{\Phi}(B_1 B)] \rho_k \rho_{-k} \right\} \exp \left(i 2\pi \sum_{k \leq B_1} \rho_k \nu_k \right) \times \\
 \times \exp \left[- \sum_{n \geq 1} \frac{(2\pi)^{2n}}{(2n)!} P_{2n} N_1^{-n+1} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}} \nu_{\mathbf{k}_1} \dots \nu_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}} \right] (d\rho)^{N_1} (d\nu)^{N_1}.
 \end{aligned}
 \tag{21.23}$$

В интегралах по ν_k в (14.42) оставляем только четверное базисное распределение, полагая

$$\begin{aligned}
 \exp \left[- \sum_{n \geq 1} \frac{(2\pi)^{2n}}{(2n)!} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}} P_{2n} N^{-n+1} \nu_{\mathbf{k}_1} \dots \nu_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}} \right] \approx \\
 \approx \exp \left[- \frac{(2\pi)^2}{2} P_2 \sum_{k \leq B_1} \nu_k \nu_{-k} - \frac{(2\pi)^4}{4!} \frac{1}{N_1} P_4 \sum \nu_{\mathbf{k}_1} \dots \nu_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right].
 \end{aligned}
 \tag{21.24}$$

Таким способом интегрировался каждый слой. Учет более высоких слагаемых в экспоненте в выражении (21.23) был выполнен в работах [14, 36, 38, 43, 80]. Принципиальные трудности при этом не

возникают, так как в соотношения (21.1)–(21.10) входят однократные интегралы. В табл. 8 приведены значения индекса ν , рассчитанные в работах [35–37, 77] по формулам (17.24), (17.25). Берется первое (при учете μ_2 и α_1) приближение по $(r_n + q)/\sqrt{u_n}$ (верхние значения в каждой строке), а затем второе (учет μ_3 и α_2) приближение по $[(r_n + q)/\sqrt{u_n}]^2$ (нижние значения). В промежуточном интегрировании по ν в (21.1) и (21.2) взяты функции $\varphi(\nu)$, содержащие P_2, P_4 (первая строка в таблице); P_2, P_4, P_6 (вторая строка); P_2, P_4, P_6, P_8 (третья строка). При этом в (17.24), (17.25) соответственно изменялись значения коэффициентов μ_1, μ_2, μ_3 и $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ (они приведены в работах [34, 37]). Для сравнения на рис. 16 представлены результаты машинных расчетов, выполненных В. А. Коломийцем [43].

Из приведенных на рис. 16 кривых и таблицы вытекает, что по мере увеличения точности результатов промежуточного интегрирования по ν_k в (21.1) и (21.2) индекс ν как функция s стремится к некоторому предельному значению $\bar{\nu} = \nu(s)$.

Продолжим наши рассуждения. Выполнив в (21.23) интегрирование по ν_k , получим выражение (14.46) или (14.56), в котором вместо четверного распределения, заданного формулами (14.57) и (14.58), следовало бы написать в экспоненте бесконечный ряд по ρ :

$$Z = \int W^{(1)}(\rho) (d\rho)^{N_1}, \quad (21.25)$$

где

$$W^{(1)}(\rho) = C \mathcal{M}_1 \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_k d^{(1)} \rho_k \rho_{-k} - \sum_{n \geq 2} \frac{a_{2n}^{(1)}}{(2n)!} N^{-n+1} \sum_{k_1, \dots, k_{2n}} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_{2n}} \delta_{k_1 + \dots + k_{2n}} \right].$$

Этот ряд снова обрываем на четвертой степени. Поправки можно считать различным образом. Рассмотрим результаты, которые можно получить при учете шестерного распределения. Рекуррентные соотношения для плотности вероятности $W_6^{(1)}(a^{(1)}, a_4^{(1)}, a_6^{(1)})$ — модели ρ^6 приведены в работах [36, 37]. В промежуточном интегрировании по ν_k использовались функции, содержащие P_2, P_4, P_6 и P_2, P_4, P_6, P_8 . Рекуррентные соотношения записывались для $d^{(n)}, a_4^{(n)}$ и $a_6^{(n)}$. На рис. 17 приведен график параметра $\sqrt{2}x^* = \sqrt{6}(r^* + q)/\sqrt{u^*}$ как функции s для модели ρ^6 . Как видим, точка $s = s^* \approx 3,58$ для

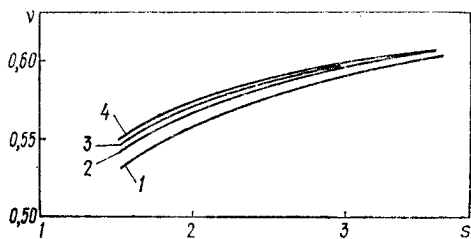


Рис. 16. Результаты расчетов ν на ЭВМ, выполненных для уравнений (21.15) с помощью функций $\varphi(\nu)$, заданных формулой (21.4) в приближениях P_2, P_4 (1); P_2, P_4, P_6 (2); P_2, P_4, P_6, P_8 (3); $P_2, P_4, P_6, P_8, P_{10}$ (4). Видно сгущение к некоторому пределу, зависящему от s .

модели ρ^6 сдвигается к значению $s^* \approx 3$. Происходит существенная стабилизация результатов.

Таким образом, в области «средних» значений s результаты, получаемые с помощью четверного базисного распределения, являются хорошим пулевым приближением для свободной энергии. Полную свободную энергию можем получить как сумму моментов от четверного базисного распределения. При этом необходимо построить групповые разложения для свободной энергии, подобные разложениям для гауссова базисного распределения (см. § 9).

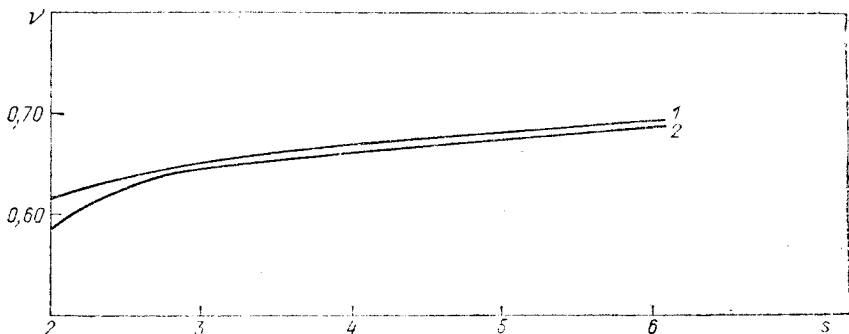


Рис. 17. Значения критического индекса ν для модели ρ^6 в приближениях P_2, P_4, P_6 (1) и P_2, P_4, P_6, P_8 (2).

Рассмотрим теперь область значений s , близких к единице. Как вытекает из приведенных выше таблиц и рисунков, поправки отклонения в окрестности $s=1$ являются наиболее значительными. Заметим, что в этой области рекуррентные уравнения (21.13) содержат малую величину $\ln s$, и метод неподвижной точки можно сочетать с разложениями по степеням $\ln s$ вблизи точки $s=1$. Из представленных в табл. 4 значений $\sqrt{z^*}$ как функции s следует, что при $s < 2$ и $s \rightarrow 1$ $\sqrt{z^*}$ и, следовательно, $z^{(n)}$ стремительно возрастают. Это означает, что в окрестности $s=1$ справедливы разложения по степеням $(z^*)^{-1}$ или $(z^{(n)})^{-1}$. При $s \rightarrow 1$ статистическая сумма (21.23) должна свестись к исходному выражению. Поэтому в формулах (15.18)—(15.27), в рекуррентных уравнениях (17.5), (17.6) или в точных соотношениях (21.1)—(21.10) при разложениях функций $\mathcal{M}(z)$, $\mathcal{N}(z)$ и $\mathcal{E}(z)$ в ряды по степеням z^{-1} существенно иметь правильный единичный элемент: при $s \rightarrow 1$

$$a_2^{(n+1)} \rightarrow a_2^{(n)}; \quad a_4^{(n+1)} \rightarrow a_4^{(n)}; \quad \tilde{\Phi}(B_{n+1}B_n) \rightarrow \tilde{\Phi}(B_n).$$

При $s > 1$, когда $s^{-3} \ll 1$, «проблема» единичного элемента не возникает. Между тем из разложений (15.27) видно, что функция $\mathcal{E}(z)$ не имеет единичного элемента уже при слагаемом, пропорциональном z^{-1} . Это связано с точностью интегрирования по ν_k .

Рассмотрим более подробно вопрос о том, что происходит с функциями $P_{2m}^{(n)}$ при $s \rightarrow 1$. Так как при этом $z^{(n)}$ — величина, существенно большая единицы (см. табл. 4), то для оценки поведения $P_2^{(n)}$

$P_4^{(n)}$, $P_6^{(n)}$ интегрирование по η в (21.6), (21.10) можно выполнить с гауссовой плотностью меры в качестве базисной. Воспользуемся результатами § 9, в частности, на основании (9.2), (9.15) и (9.21) запишем

$$Q_0(f_n) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{\pi}{d(B_1 B)}}^N \exp(\mathcal{B}'_2 + \mathcal{B}'_3 + \mathcal{B}'_4 + \dots), \quad (21.26)$$

где \mathcal{B}'_i — аналог i -го вирального коэффициента. Функция $(d(B_1 B))^{-1}$ играет в нем роль экранированного потенциала $g(k)$ (см. (9.9)). По аналогии с (9.15) и (9.24)

$$\mathcal{B}'_2 = -\frac{1}{2} N \sum_{n \geq 2} \left[\frac{a_{2n}^2}{(d(B_1 B))^{2n}} \right] \frac{1}{(2n)!} + N \sum_{n \geq 2} (-1)^{n-1} \frac{(2n-1)!!}{(2n)!} \frac{a_{2n}}{(d(B_1 B))^n}. \quad (21.27)$$

Приводимые суммы пропорциональны a_{2n} . Сопоставляя a_{2n} с полевой вершиной с n выходящими лучами, а d^{-1} — с полевой линией, подобно тому, как это сделано в (9.23)–(9.26), запишем \mathcal{B}'_2 , \mathcal{B}'_3 и \mathcal{B}'_4 в виде рядов диаграмм¹³:

$$\begin{aligned} \mathcal{B}'_2 &= -\frac{N}{2} \left\{ \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \dots \right\} + \text{приводимые суммы вида } \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \dots; \\ \mathcal{B}'_3 &= -\frac{N}{2 \cdot 3} \left\{ \text{diagram 5} + \text{diagram 6} + \text{diagram 7} + \dots \right\}; \\ \mathcal{B}'_4 &= \frac{N}{3 \cdot 4} \left\{ \text{diagram 8} + \text{diagram 9} + \text{diagram 10} + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (21.28)$$

Согласно (21.6)–(21.10)

$$\begin{aligned} P_2 &= -2 \frac{\partial \ln Q_0}{\partial a_2}; \\ P_4 &= \frac{1}{s^2} \left[4! \frac{\partial \ln Q_0}{\partial a_4} + 3P_2^2 \right]; \\ P_6 &= \frac{1}{s^6} \left[-6! \frac{\partial \ln Q_0}{\partial a_6} - (15 \cdot 2 \cdot 4!) \frac{\partial \ln Q_0}{\partial a_4} \frac{\partial \ln Q_0}{\partial a_2} + 30(P_2^3) \right]; \\ &\dots \end{aligned} \quad (21.29)$$

¹³ В общем случае при интегрировании с гауссовой плотностью меры можно было бы $d(k)$ не усреднять. Для \mathcal{B}'_2 тогда имели бы выражение $\mathcal{B}'_2 = -\frac{1}{2} \sum_{n \geq 3} \sum_{\mathbf{l}} N^{-n} \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_n} \frac{1}{n!} \frac{(a_n(\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_n))^2}{d(\mathbf{k}_1) \dots d(\mathbf{k}_n)} \exp[i(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n) \cdot \mathbf{l}] + \dots$; нетрудно получить явные выражения и для \mathcal{B}'_3 , \mathcal{B}'_4 , ...

Так как P_2, P_4, P_6, \dots возникают в результате операций кумулянтного типа, то наиболее низкую степень зависимости P_4 от d, a_4, a_6, a_8 и P_6 от d, a_4, a_6, a_8, \dots получим, рассматривая для каждой величины P_{2m} только производные $\partial/\partial a_{2m}$ от неприводимых сумм (21.28):


$$\begin{aligned}
 P_2 &\approx d^{-1} [1 + o(z^{-1})]; \\
 P_4 &\approx \frac{\partial(\mathcal{B}'_2 + \mathcal{B}'_3 + \dots)}{\partial a_4} \approx \frac{a_4}{d^4} \left[1 + o(z^{-1}) + \frac{a_6}{d^4} (1 + o(z^{-1})) \right] + \dots; \\
 P_6 &\approx \frac{\partial(\mathcal{B}'_2 + \mathcal{B}'_3 + \dots)}{\partial a_6} \approx \frac{a_6}{d^6} [1 + o(z^{-1})] + \\
 &\quad + \frac{a_4^2}{d^7} [1 + o(z^{-1})] + \dots; \\
 P_8 &\approx \frac{\partial(\mathcal{B}'_2 + \mathcal{B}'_3 + \dots)}{\partial a_8} \approx \frac{a_8}{d^8} [1 + o(z^{-1})] + \frac{a_4 a_6}{d^9} [1 + o(z^{-1})] + \dots
 \end{aligned}
 \tag{21.30}$$

Если ограничиваться четверным базисным распределением, полагая $a_6 = a_8 = \dots = 0$, то наимизшие степени $d^{-1}, z^{-1} = (4/3) (a_4/d^2)$ для

$$P_2 \sim d^{-1} [1 + az^{-1} + bz^{-2} + \dots] \text{ возникают от производной } \frac{\partial \ln Z_G}{\partial a_2};$$

$$P_4 \sim d^{-2} z^{-1} [1 + a_1 z^{-1} + \dots] - \text{от } \partial \mathcal{B}'_2 / \partial a_4;$$

$$P_6 \sim d^{-3} z^{-2} [1 + a_2 z^{-1} + \dots] - \text{от } \partial \mathcal{B}'_3 / \partial a_6.$$

Слагаемое, пропорциональное a_4^2 , обусловлено производной $\partial \mathcal{B}'_3 / \partial a_6$, тогда в \mathcal{B}'_3 рассматривается диаграмма . Чтобы найти слагаемое, пропорциональное наимизшей степени a_4 в выражении для P_{2m} , следует взять производную $\partial/\partial a_{2m}$ от диаграммы



Она имеет $(2m - 2)/2 + 1 = m$ полевых вершин и принадлежит к вириальному коэффициенту \mathcal{B}'_m . Производная $\partial \mathcal{B}'_m / \partial a_{2m}$ пропорциональна

$$a_4^{(m-1)} / d^{(3m-2)} = (3/4)^{(m-1)} d^{-m} z^{-(m-1)}.$$

При расчетах, выполненных в работах [10, 14, 70, 77, 34—36], получены следующие значения P_{2m} :

$$\begin{aligned}
 P_2 &= \frac{1}{d} \left[1 - \frac{3}{8} z^{-1} + \frac{24}{64} z^{-2} - \frac{297}{512} z^{-3} + o\left(\frac{1}{z^4}\right) \right]; \\
 P_4 &= \frac{1}{s^3} \frac{1}{d^2} \left[\frac{1}{z} - \frac{21}{8} z^{-2} + \frac{447}{64} z^{-3} + o\left(\frac{1}{z^4}\right) \right]; \\
 P_6 &= \frac{1}{s^6} \frac{1}{d^3} \left[\frac{1}{8} z^{-2} - \frac{144}{64} z^{-3} + o\left(\frac{1}{z^4}\right) \right].
 \end{aligned}
 \tag{21.31}$$

Величина z^{-1} является малым параметром задачи при $s \rightarrow 1$. Поэтому рекуррентные уравнения можно решать, используя разложения по обратным степеням z^{-1} . Это означает следующее: если используется четверное базисное распределение в фазовом пространстве ρ_k и требуется получить рекуррентные соотношения (21.13) с точностью до z^{-1} , то в формуле (21.4) для $\varphi(v)$ можно писать $\varphi(v) = \varphi^{(1)}(v)$:

$$\varphi^{(1)}(v) = \exp\left[-\frac{(2\pi)^2}{2} P_2 v^2\right] \left[1 - \frac{(2\pi)^4}{4!} P_4 v^4\right]. \quad (21.32)$$

После интегрирования по v для функций P_2 и P_4 следует ограничиться приближениями

$$P_2 \approx \frac{1}{d} \left(1 - \frac{3}{8} z^{-1}\right); \quad P_4 \approx s^{-3} d^{-2} z^{-1},$$

а в уравнениях (21.1) и (21.2) для $a_2^{(1)}$, $a_4^{(1)}$ или в уравнениях (21.13) для $r_n^{(1)}$ и $u_n^{(1)}$ следует оставлять только выражения, пропорциональные z^{-1} . Если рекуррентные соотношения (21.2) выписываются с точностью до $1/z^2$, то вместо $\varphi(v)$ берется $\varphi^{(2)}(v)$, причем учитывается P_6 :

$$\begin{aligned} \varphi^{(2)}(v) = \exp\left[-\frac{(2\pi)^2}{2} P_2 v^2\right] & \left\{1 - \frac{(2\pi)^4}{4!} P_4 v^4 + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \left[\frac{(2\pi)^4}{4!} P_4 v^4\right]^2 - \frac{(2\pi)^6}{6!} P_6 v^6\right\}; \end{aligned} \quad (21.33)$$

здесь

$$P_2 = d^{-1} \left(1 - \frac{3}{8} z^{-1} + \frac{24}{64} z^{-2}\right);$$

$$P_4 = d^{-2} s^{-3} \left(z^{-1} - \frac{21}{8} z^{-2}\right);$$

$$P_6 = d^{-3} s^{-6} \frac{1}{8} z^{-2}.$$

После интегрирования суммируются все слагаемые с точностью до z^{-2} . (Подробные вычисления предлагается выполнить читателю.)

Данный способ решения рекуррентных уравнений рассмотрен в работах [13, 14, 119] и назван g -разложением. Приведем окончательную форму рекуррентных уравнений, записанных с точностью до z^{-2} :

$$\begin{aligned} & r_{n+1} = s^2 \times \\ & \times \left[r_n + \frac{3}{8} (z^{(n)})^{-1} (1 - s^{-3}) + \frac{3}{64} (z^{(n)})^{-2} (5 - 12s^{-3} + 7s^{-6}) (r_n + q) \right]; \\ & u_{n+1} = s \frac{3}{4} (r_n + q)^2 \left[(z^{(n)})^{-1} - \frac{9}{8} (z^{(n)})^{-2} (1 - s^{-3}) \right] = \\ & = s u_n \left[1 - \frac{9}{8} (z^{(n)})^{-1} (1 - s^{-3}) \right]. \end{aligned} \quad (21.34)$$

При $s = 1$ $r_n = r_{n+1}$, $u_n = u_{n+1}$. Величина $z^{(n)}$ в неподвижной точке определяется уравнением

$$z^* = \frac{9}{8} (1 - s^{-D}) (1 - s^{D-4})^{-1}.$$

При $s \rightarrow 1$ $z^* = 27/8$, $D = 3$.

Собственные значения матрицы R уравнения в линейном приближении по $r - r^*$, $u - u^*$ равны:

$$E_1 = s^2 \left[1 - \frac{1}{3} (1 - s^{-4}) \right]; \quad E_2 = 2 - s.$$

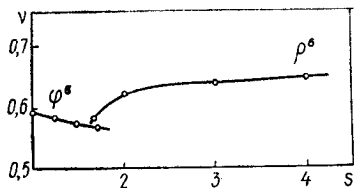


Рис. 18. Зависимость критического индекса ν от s .

Для n -компонентной модели [94]

$$E_1 = s^2 \left[1 + \frac{n+2}{n+8} (s^{D-4} - 1) \right];$$

$$E_2 = 2 - s^{4-D}.$$

Приведенные выкладки справедливы для $D - 4 < 0$ и $s < 2$. Найденные с точностью до z^{-1} собственные значения равны:

$$E_1 = s^2; \quad E_2 = s^{4-D}.$$

Для критического индекса ν получаем:

$$\nu = \frac{\ln s}{\ln E_1} = \left\{ 2 + \frac{\ln \left[1 + \frac{1}{3} (s^{D-4} - 1) \right]}{\ln s} \right\}^{-1};$$

при $s \rightarrow 1$

$$\nu = \left[2 - (4 - D) \frac{1}{3} \right]^{-1} = \frac{3}{5}. \quad (21.35)$$

Для n -компонентной модели и $D < 4$

$$\nu = \left\{ 2 + \frac{\ln \left[1 + \frac{n+2}{n+8} (s^{D-4} - 1) \right]}{\ln s} \right\}^{-1}. \quad (21.36)$$

Положим $4 - D = \varepsilon$, тогда формула (21.36) совпадает с выражением для ν , получаемым методом ε -разложения (с точностью до линейного приближения по ε):

$$\nu = \frac{1}{2} + \frac{n+2}{n+8} \varepsilon + \frac{1}{4} \frac{n+2}{n+8} \varepsilon^2 \ln s + \dots \quad (21.37)$$

Как функция s ($s < 2$) индекс ν , определяемый формулами (21.35) и (21.37) (модель φ^6), имеет вид кривой, приведенной на рис. 18. Для сравнения на этом же рисунке изображена кривая для $\nu(s)$, полученная М. П. Козловским [36] для модели ρ^6 при $s \geq 2$ и $z^* < 1$.

Таким образом, при определенном учете поправок к расчетам, выполненным с помощью четверной базисной плотности меры, можно

получить выражения, не зависящие от s . Вместе с тем нулевое приближение статистической суммы с четверной плотностью меры, выполненное для случая $s \sim 3$ [82], дает удовлетворительный результат без учета вириальных членов.

В целом же очевидно, что переменные под интегралом в выражении (5.1) никогда не смогут быть разделены. Интегрирование по слоям фазового пространства позволяет раскрыть РГ закономерности, имеющие определенное физическое содержание. Поэтому в статистической сумме интегрирование необходимо проводить по слоям фазового пространства. Обрыв же плотности вероятностей до базисной формы и суммирование моментов является операцией приближенной, а значит, зависимость от s будет возникать всегда. Здесь важно находить области стационарной свободной энергии как функции s и для таких s выполнять интегрирование.

§ 22. РЕКУРРЕНТНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ФУНКЦИИ

Исследование модели Изинга при температурах ниже критической представляет собой задачу, важную для объяснения природы возникающего в системе упорядочения. Она выходит за рамки интересов теории магнетизма и найдет применение, например, при изучении системы жидкость — пар, при описании фазовых переходов первого рода и в ряде других задач. При $T < T_c$ имеется существенное различие в поведении рекуррентных уравнений по сравнению со случаем $T > T_c$. Оно состоит в том, что при больших значениях n коэффициент $d^{(n)}(B_{n+1}B_n)$ становится отрицательным, а параметр $\sqrt{z^{(n)}} = \sqrt{z/2} \sqrt{(d^{(n)})^2/a_4^{(n)}}$ — неопределенным. Однако, как уже указывалось в работах [72, 80, 131], если положить $\sqrt{z^{(n)}} = (\sqrt{z/2}) d^{(n)}(B_{n+1}B_n)/\sqrt{a_4^{(n)}}$, где $d^{(n)}(B_{n+1}B_n)$ имеет свой знак, то разложения (15.23) для функций $\mathcal{H}(z)$ и $\mathcal{L}(z)$ остаются справедливыми и для отрицательных $d^{(n)}$. Это обусловлено тем, что фактически используются не сами функции $K_{1/4}(z)$ и $K_{3/4}(z)$, а величины $K_{3/4}(z)/K_{1/4}(z)$ или $\sqrt{z} K_{1/4}(z)$, которые выражаются рядами по степеням $d^{(n)}(B_{n+1}B_n)/\sqrt{a_4^{(n)}}$. Возникающие трудности связаны с асимптотическими выражениями для функций $\mathcal{H}(z)$ и $\mathcal{L}(z)$ при больших отрицательных значениях $\sqrt{z^{(n)}}$. Поэтому, следуя работам [36, 37], перепишем рекуррентные соотношения для функций параболического цилиндра $U(0, x^{(n)})$ и $U(1, x^{(n)})$, где $x^{(n)} = \sqrt{z} d^{(n)}(B_{n+1}B_n)/\sqrt{a_4^{(n)}}$. Эти функции являются аналитическими на всей оси действительных значений $x^{(n)}$, и поэтому дополнительные определения не нужны. Рекуррентные соотношения (17.5) и (17.6), составленные относительно $d^{(n+1)}(0)$ и $a_4^{(n+1)}$, имеют вид

$$d^{(n+1)}(0) = d^{(n)}(0) + \mathcal{M}^{(n)} d^{(n)}(B_{n+1}B_n); \quad (22.1)$$

$$a_4^{(n+1)} = a_4^{(n)} \frac{N_n}{N_{n+1}} \frac{\Phi(y_n)}{\Phi(x_n)}; \quad (22.2)$$

$$\mathcal{M}^{(n)} = \frac{y^{(n)} U(y^{(n)})}{x^{(n)} U(x^{(n)})} - 1; \quad \mathcal{N}^{(n)} = \mathcal{N}^{(n)} - 1; \quad (22.3)$$

$$\varphi(x^{(n)}) = 3U^2(x^{(n)}) + 2x^{(n)}U(x^{(n)}) - 2; \quad (22.4)$$

$$U(x^{(n)}) = \frac{U(1, x^{(n)})}{U(0, x^{(n)})}; \quad (22.5)$$

$$y^{(n)} = s^{3/2} \frac{U(x^{(n)})}{\sqrt{\varphi(x^{(n)})}} \sqrt{3}. \quad (22.6)$$

Здесь $U(1, x)$ и $U(0, x)$ — функции параболического цилиндра, или функции Вебера. Они связаны с функциями $K_{1/4}$ и $K_{3/4}$ соотношениями

$$U(0, x) = \sqrt{\frac{x}{2\pi}} K_{1/4}\left(\frac{x^2}{4}\right); \quad (22.7)$$

$$U(1, x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{x}{2}\right)^{3/2} \left[K_{3/4}\left(\frac{x^2}{4}\right) - K_{1/4}\left(\frac{x^2}{4}\right) \right]; \quad (22.8)$$

$$\sqrt{z} \mathcal{H}(z) = \frac{x}{4} U(x); \quad \mathcal{H}(z) = \frac{U(x)}{2}; \quad \mathcal{L}(z) = \frac{1}{2} \varphi(x).$$

В дальнейшем будут рассматриваться случаи больших положительных и больших отрицательных значений x . Для больших положительных значений x в соответствии с выражениями (22.8) и (15.24)

$$U(x) = \frac{1}{x} \left[1 - \frac{3}{2} \frac{1}{x^2} + O\left(\frac{1}{x^4}\right) \right]; \quad (22.9)$$

для больших отрицательных x

$$\begin{aligned} U(0, -x) &= \sqrt{\pi} V(0, x); \\ U(1, -x) &= 2\sqrt{\pi} V(1, x). \end{aligned} \quad (22.10)$$

Для $V(0, x)$ и $V(1, x)$ имеем следующие разложения при больших x [55]:

$$\begin{aligned} V(1, x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{x^2/4} \sqrt{x} \times \\ &\times \left[1 + \frac{\frac{1}{2} \left(-\frac{1}{2}\right)}{2x^2} + \frac{\frac{1}{2} \left(-\frac{1}{2}\right) \left(-\frac{3}{2}\right) \left(-\frac{5}{2}\right)}{2 \cdot 4 \cdot x^4} + \dots \right]; \\ V(0, x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{x^2/4} \frac{1}{\sqrt{x}} \times \\ &\times \left[1 + \frac{\frac{1}{2} \frac{3}{2}}{2x^2} + \frac{\frac{1}{2} \frac{3}{2} \frac{5}{2} \frac{7}{2}}{2 \cdot 4x^4} + \dots \right]. \end{aligned} \quad (22.11)$$

В результате функция $U(-x)$ при больших x равна:

$$U(-x) = 2x \frac{1 + \frac{1}{4} \frac{1}{2x^2} - \dots}{1 + \frac{3}{4} \frac{1}{2x^2} + \dots} = 2x \left(1 - \frac{1}{2x^2} - \frac{0,797}{x^4} - \dots \right). \quad (22.12)$$

Здесь возникает существенно новая зависимость: $U(-x) \sim x$, а не $\sim 1/x$, как в (22.9). Для функции $\varphi(-x)$ при больших x из (22.12) и (22.4) имеем

$$\begin{aligned} \varphi(-x) &= 3U^2(-x) - 2xU(-x) - 2 = \\ &= 8x^2 \left(1 - \frac{3}{2} \frac{1}{x^2} - \frac{5}{2} \frac{0,797}{x^4} - \dots \right), \end{aligned} \quad (22.13)$$

поэтому аргумент $y(-x)$, аналог аргумента $2\mathfrak{Z}^{1/2}$ для $\tau > 0$, при больших x определяется по формуле

$$y(-x) = s^{3/2} \frac{2x \left(1 - \frac{1}{2} \frac{1}{x^2} - \dots \right) \sqrt{3}}{2x \sqrt{2} \left(1 - \frac{3}{2} \frac{1}{x^2} + \dots \right)^{1/2}} = s^{3/2} \sqrt{\frac{3}{2}} \left(1 + \frac{1}{x^2} - \dots \right). \quad (22.14)$$

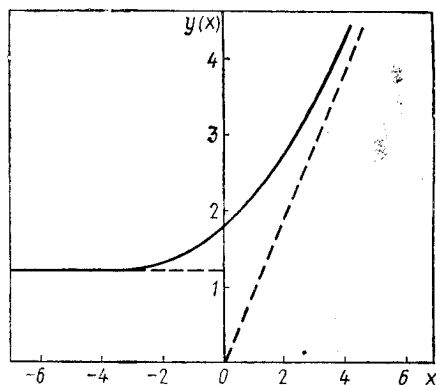


Рис. 19. График $y = y(x)$ ($y^2/4 = 3$).

Итак, рекуррентные соотношения при $\tau < 0$ имеют иной вид, чем при $\tau > 0$. График $y(x)$ для всех значений x приведен на рис. 19.

Для больших положительных y в соответствии с (22.8) и (15.24)

$$\begin{aligned} \varphi(y) &= \frac{3,000}{y^4} \times \\ &\times \left[1 - \frac{21}{2} \frac{1}{y^2} + O\left(\frac{1}{y^4}\right) \right]. \end{aligned} \quad (22.15)$$

$\mathcal{N}(-x^{(n)})$ определяется по формуле

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(-x^{(n)}) &= -\frac{1 - \frac{3}{2} \frac{1}{(y^{(n)})^2} - \dots}{2(x^{(n)})^2 \left[1 - \frac{1}{2} \frac{1}{(x^{(n)})^2} - \dots \right]} = \\ &= -\frac{\alpha(s)}{2(x^{(n)})^2} \left(1 + \frac{1}{2(x^{(n)})^2} + \dots \right), \end{aligned} \quad (22.16)$$

где

$$\alpha(s) = 1 - \frac{3}{2} \frac{1}{(y^{(n)})^2}; \quad (22.17)$$

при

$$\begin{aligned} s = 2 & \quad \alpha(s) = 0,917; \\ s = 3 & \quad \alpha(s) = 0,963; \\ s = 3,58 & \quad \alpha(s) = 0,978. \end{aligned} \quad (22.18)$$

В результате при больших отрицательных значениях x рекуррентные уравнения (22.1) и (22.2) принимают вид

$$d^{(n+1)}(0) = \mathcal{N}^{(n)} d^{(n)}(B_{n+1}B_n) - qs^{-2n} = \\ = -\frac{\alpha(s)}{2(x^{(n)})^2} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{1}{(x^{(n)})^2} + \dots\right) d^{(n)}(B_{n+1}B_n) - qs^{-2n}, \quad (22.19)$$

где

$$d^{(n)}(B_{n+1}B_n) < 0; \\ a_4^{(n+1)} \approx \frac{1}{s^3} \frac{3,000}{\left(\frac{3}{2}\right)^4 8 (x^{(n)})^2} a_4^{(n)}. \quad (22.20)$$

Подставляем $x_n^{(n)} = \sqrt{3} d^{(n)}(B_{n+1}B_n) / \sqrt{a_4^{(n)}}$, тогда

$$a_4^{(n+1)} \cong \frac{1}{s^3} \frac{3}{(1,5)^4 24 [d^{(n)}(B_{n+1}B_n)]^2} a_4^{(n)^2} \approx \frac{1}{s^3} \frac{0,593}{24 [d^{(n)}(B_{n+1}B_n)]^2} (a_4^{(n)})^2. \quad (22.21)$$

Рассмотрим случай $d^{(n)}(B_{n+1}B_n) < 0$. Так как в системе существует отличный от нуля средний момент, то заменой переменных выделим свободную энергию, соответствующую этому моменту. В результате $d^{(n)}$ изменится на положительную постоянную величину. Следовательно, в знаменатель выражения (22.21) будет входить постоянная величина и $a_4^{(n)}$ будет стремительно убывать.

§ 23. РЕШЕНИЕ РЕКУРРЕНТНЫХ УРАВНЕНИЙ ПРИ $T < T_c$

Для малых значений $z^{(n)}$ или $x^{(n)}$ и отрицательных $d^{(n)}(B_{n+1}B_n)$ рекуррентные уравнения (17.5), (17.6), (17.13) и даже уравнения (17.24) и (17.25) остаются в силе, но с тем отличием, что величина $r_n + q$ может быть отрицательной. Остаются справедливыми и уравнения репермгруппы (17.19) и их решения (17.38) и (17.39). Различия между случаями $T > T_c$ и $T < T_c$ возникают при сравнении решений в области, соответствующей ПГР [130, 132].

Полное решение рекуррентных уравнений при $T < T_c$ состоит из двух частей. Первая соответствует КР и значениям n , меньшим некоторого n_γ . Здесь для $d^{(n)}$ и $a_4^{(n)}$ имеем выражения (17.38) и (17.39). Исследуем их поведение как функций n .

Существует несколько особых точек n_α , n_β , n_γ , n_δ и n_τ , в которых характер поведения $d^{(n)}$ и $a_4^{(n)}$ изменяется. В точке n_α обращается в нуль величина $d^{(n_\alpha)}(B_{n_\alpha+1}B_{n_\alpha})$ (рис. 20):

$$d^{(n_\alpha)}(B_{n_\alpha+1}B_{n_\alpha}) = r_{n_\alpha} + q = 0. \quad (23.1)$$

В точке n_β функция $d^{(n_\beta)}(B_{n_\beta+1}B_{n_\beta})$ достигает минимума и является отрицательной:

$$\min d^{(n)} = d^{(n_\beta)} < 0. \quad (23.2)$$

В точке n_γ кривая $d^{(n)}$ имеет перегиб:

$$d^{(n_\gamma+2)}(B_{n_\gamma+3}B_{n_\gamma+2}) - 2d^{(n_\gamma+1)}(B_{n_\gamma+2}B_{n_\gamma+1}) + d^{(n_\gamma)}(B_{n_\gamma+1}B_{n_\gamma}) = 0. \quad (23.3)$$

Исходя из решений ренормгруппы при $T < T_c$, находим еще и точку n_δ , в которой выражение (17.39) обращается в нуль:

$$u_{n_\delta} = u^* + c_1 \mathcal{R}' E_1^{n_\delta} + c_2 E_2^{n_\delta} = 0. \quad (23.4)$$

Значение $U^{(n_\delta)} = 0$ не может быть реализовано, так как согласно уравнениям (17.6) и (22.21) величина $a_4^{(n)}$ всегда положительна и не обращается в нуль при конечных значениях n . Для всех $n \geq n_\delta$ решения РГ типа становятся несправедливыми. Точка n_δ соответствует точке n_τ , определяемой формулой (19.9).

Найдем значения точек n_α , n_β , n_γ , n_δ . Для точки n_α уравнение имеет вид

$$r^* + q + c_1 E_1^{n_\alpha} - c_2 \mathcal{R} E_2^{n_\alpha} = 0, \quad (23.5)$$

где $c_1 = \tilde{\tau} \tilde{c}_1$, $\tilde{\tau} < 0$, $\tilde{c}_1 > 0$, $-c_2 > 0$, $\mathcal{R} > 0$. Нуль достигается благодаря постепенному возрастанию величины $|c_1 E_1^{n_\alpha}|$. Формула (23.5) представляет собой общее уравнение для определения n_α . В случае $r^* + q > 0$ и больших n_α , когда $r^* + q > -c_2 \mathcal{R} E_2^{n_\alpha}$ и $c_1 E_1^{n_\alpha} \approx r^* + q$,

$$n_\alpha \cong -\frac{\ln |\tau|}{\ln E_1} + \frac{\ln [(r^* + q)/\tilde{c}_1]}{\ln E_1}. \quad (23.6)$$

При $s = s^* \approx 3,5862$ и $r^* + q = 0$

$$n_\alpha \approx -\frac{\ln |\tau|}{\ln (E_1/E_2)} + \frac{\ln (|c_2| \mathcal{R} / \tilde{c}_1)}{\ln (E_1/E_2)}. \quad (23.7)$$

Величина $|c_2| \mathcal{R} \tilde{c}_1^{-1}$ слабо зависит от $\beta \tilde{\Phi}(0)$. Подставляя $c_2 \approx \approx c_{23} [\beta \tilde{\Phi}(0)]^2 = 0,764 [\beta \tilde{\Phi}(0)]^2$, $\tilde{c}_1 = 0,818 \beta \tilde{\Phi}(0)$, $\mathcal{R} = 0,566/\beta \tilde{\Phi}(0)$, $\ln (E_1/E_2) = 3,088$, находим

$$n_\alpha = -\frac{\ln |\tau|}{3,088} - \frac{0,637}{3,088} = -\frac{\ln |\tau|}{3,088} - 0,206. \quad (23.8)$$

Для точки n_β условие экстремума имеет вид

$$d^{(n_\beta+1)}(B_{n_\beta+2}B_{n_\beta+1}) = d^{(n_\beta)}(B_{n_\beta+1}B_{n_\beta}). \quad (23.9)$$

Подставляя вместо $d^{(n_\beta)}$ и $d^{(n_\beta+1)}$ их значения из (17.38) и (17.39), для точки n_β получаем уравнение

$$(r^* + q)(1 - s^{-2}) + c_1 E_1^{n_\beta} (1 - E_1 s^{-2}) - c_2 \mathcal{R} E_2^{n_\beta} (1 - E_2 s^{-2}) = 0, \quad (23.10)$$

причем

$$(r^* + q)(1 - s^{-2}) - c_2 \mathcal{R} E_2^{n_\beta} (1 - E_2 s^{-2}) > 0. \quad (23.11)$$

В случае $r^* + q \neq 0$ и при больших n_β , когда

$$(r^* + q)(1 - s^{-2}) \gg -c_2 \mathcal{R} E_2^{n_\beta} (1 - E_2 s^{-2}),$$

в выражении (23.9) можно пренебречь третьим слагаемым, тогда

$$|c_1| E_1^{n_\beta} = (r^* + q) \frac{s^2 - 1}{s^2 - E_1}; \quad (23.12)$$

$$n_\beta \approx n_\alpha + n_{\alpha\beta}, \quad (23.13)$$

где

$$n_{\alpha\beta} = \ln \frac{1 - s^{-2}}{1 - E_1 s^{-2}} / \ln E_1 > 0; \quad E_1 s^{-2} < 1; \quad n_\beta > n_\alpha.$$

В случае $s = s^* \approx 3,5862$ и $r^* + q = 0$

$$n_\beta = n_\alpha + n'_{\beta\alpha}. \quad (23.14)$$

Здесь

$$n'_{\beta\alpha} = \frac{\ln |(1 - E_2 s^{-2}) / (1 - E_1 s^{-2})|}{\ln (E_1 / E_2)}; \quad (23.15)$$

$$n'_{\beta\alpha} \approx \frac{0,999}{3,084} \approx 0,324,$$

откуда

$$n_\beta = -\frac{\ln |\tau|}{3,084} + 0,153. \quad (23.16)$$

Точка n_β находится очень близко к точке n_α .

Для n_γ — точки перегиба кривой $d^{(n)}$ — согласно (23.3) имеем уравнение

$$(r^* + q)(s^{-2} - 1)^2 + c_1 E_1^{n_\gamma} (E_1 s^{-2} - 1)^2 - c_2 \mathcal{R} E_2^{n_\gamma} (E_2 s^{-2} - 1)^2 = 0. \quad (23.17)$$

В случае $r^* + q > 0$ и для больших n_γ

$$|c_1| E_1^{n_\gamma} = (r^* + q) \frac{(s^2 - 1)^2}{(s^2 - E_1)^2}. \quad (23.18)$$

Сравнивая это выражение с (23.12), видим, что $n_\gamma > n_\beta$. Для $s = s^*$ и $r^* + q = 0$

$$|c_1| \left(\frac{E_1}{E_2} \right)^{n_\gamma} = -c_2 \mathcal{R} \left(\frac{s^2 - E_2}{s^2 - E_1} \right)^2; \quad (23.19)$$

$$n_\gamma = -\frac{\ln |\tau|}{\ln (E_1 / E_2)} + \frac{\ln \left[-\frac{c_2 \mathcal{R}}{c_1} \left(\frac{s^2 - E_2}{s^2 - E_1} \right)^2 \right]}{\ln (E_1 / E_2)}.$$

Сравнивая с (23.12)–(23.15), находим

$$n'_\gamma = n'_\beta + n'_{\beta\alpha} = n'_\alpha + 2n'_{\beta\alpha}.$$

Точки n_α , n_β и n_γ расположены очень плотно, следуют одна за другой через один шаг. Результаты машинных расчетов подтверждают этот факт.

Рассмотрим наконец точку n_δ , определяемую из условия

$$u_{n_\delta} = 0, \text{ или } u^* + c_1 \mathcal{R}' E_1^{n_\delta} + c_2 E_2^{n_\delta} = 0. \quad (23.20)$$

Согласно (18.18) $c_2 \approx c_{23} \ll u^*$. Поэтому всегда $u^* \gg c_2 E_2^{n_\delta}$ и

$$n_\delta = -\frac{\ln |\tau|}{\ln E_1} + \frac{\ln (u^*/c_1 \mathcal{R}')}{\ln E_1}. \quad (23.21)$$

Так как $u^*/\tilde{c}_1 \mathcal{R}' \gg (r^* + q)/\tilde{c}_1$, то $n_\delta > n_\beta$. Интересно, что и n_δ в нулевом приближении не зависит от $\beta \hat{\Phi}(0)$. В случае $s = s^*$

$$n_\delta = -\frac{\ln |\tau|}{2,108} + 0,930. \quad (23.22)$$

Здесь

$$n_\delta > n_\gamma > n_\beta > n_\alpha.$$

Найдем соответствующие значения $x^{(n)} = 2\sqrt{z^{(n)}}$. Как уже отмечалось, точки n_α , n_β , n_γ расположены близко друг к другу. Несмотря на это, скорость изменения величины $a_4^{(n)}$ является очень большой. Это вызвано тем, что в выражении

$$a_4^{(n)} = \frac{u^* + c_1 E_1^{n_\alpha} \mathcal{R}' + c_2 E_2^n}{s_4^{4n}}$$

величина u^* положительна, а c_1 и c_2 отрицательны. При этом $c_1 E_1^{n_\alpha} \mathcal{R}'$ несмотря на малость \mathcal{R}' , резко возрастает и приближается по значению к u^* . От этого величина $a_4^{(n)}$ быстро уменьшается, а $x^{(n)} = \sqrt{3} a^{(n)}/\sqrt{a_4^{(n)}}$ возрастает. В области $n \approx n_\alpha$

$$x^{(n)} \sim x^{(n_\alpha)} = 0. \quad (23.23)$$

Для области минимума

$$x^{(n_\beta)} \equiv x^{(\beta)} = \sqrt{3} \frac{c_1 E_1^{n_\alpha} n_{\beta\alpha} \ln E_1 - c_2 \mathcal{R}' E_2^{n_\alpha} n_{\beta\alpha} \ln E_2}{\sqrt{u^* + c_1 \mathcal{R}' E_1^{n_\beta}}}. \quad (23.24)$$

Принимая во внимание (23.5), подставляем в (23.24) выражения

$$E_1^{n_\beta} = E_1^{n_\alpha} (1 + n_{\beta\alpha} \ln E_1 + \dots);$$

$$E_2^{n_\beta} = E_2^{n_\alpha} (1 + n_{\beta\alpha} \ln E_2 + \dots).$$

Получаем

$$x^{(\beta)} = \sqrt{3} \frac{c_1 E_1^{n\alpha} n_{\beta\alpha} \ln E_1 - c_2 \mathcal{R} E_2^{n\alpha} n_{\beta\alpha} \ln E_2}{\sqrt{u^* + c_1 \mathcal{R}' E_1^{n\beta}}} \quad (23.25)$$

Здесь $c_1 E_1^{n\alpha} \sim r^* + q$ и $x^{(\beta)} \geq \sqrt{3} \frac{(r^* + q) \ln E_1}{\sqrt{u^* + c_1 \mathcal{R}' E_1^{n\beta}}} n_{\beta\alpha}$.

Так как

$$r^* + q < q \text{ и } \sqrt{u^* + c_1 \mathcal{R}' E_1^{n\beta}} < q,$$

то $x^{(\beta)}$ является величиной порядка единицы. В точке n_γ величина $x^{(n_\gamma)} \equiv x_\gamma$ резко возрастает. Действительно, в случае (23.18)

$$\begin{aligned} |x_\gamma| &= \sqrt{3} \left| \frac{r^* + q + c_1 E_1^{n_\gamma} - c_2 \mathcal{R} E_2^{n_\gamma}}{\sqrt{u^* + c_1 \mathcal{R}' E_1^{n_\gamma} + c_2 E_2^{n_\gamma}}} \right| \sim \\ &\sim \sqrt{3} \left| \frac{(r^* + q) \left[1 - \left(\frac{s^2 - 1}{s^2 - E} \right)^2 \right]}{\sqrt{u^* - \mathcal{R}' \left(\frac{s^2 - 1}{s^2 E} \right)^2}} \right| > \sqrt{3} \frac{(r^* + q) \left(\frac{s^2 - 1}{s^2 - E_1} \right)^2}{\sqrt{u^*}} > 1, \end{aligned} \quad (23.26)$$

причем здесь учтен только числитель. В действительности же при этом и знаменатель быстро стремится к нулю и все выражение $|x_\gamma|$ резко возрастает. Каждую из точек n_α , n_β , n_γ можно принять как граничную при переходе от критического режима к низкотемпературному аналогу предельного гауссова режима. Однако точки n_α , n_β , n_γ не имеют себе подобных при $T > T_c$. Это может привести к несовпадению значений критических индексов системы при $T > T_c$ и $T < T_c$. Граничными точками n_τ , которые больше всего соответствуют друг другу при $T > T_c$ и $T < T_c$, являются точка m_τ для $T > T_c$ — начиная с нее кривая полностью выходит в область над осью абсцисс и точка μ_τ для $T < T_c$ — начиная с нее кривая $d^{(\mu_\tau)}(k)$ полностью уходит под ось абсцисс. Первая уже определена соотношением (19.20), а вторая — соотношением

$$d^{(\mu)}(B_{\mu_\tau}) = 0, \quad (23.27)$$

или

$$a_2^{(\mu_\tau)} - \beta \tilde{\Phi}(0) + \tilde{q} B_{\mu_\tau}^2 = 0; \quad \tilde{q} = 2b^2 \beta \tilde{\Phi}(0); \quad 2b^2 B^2 = 1.$$

Подставляя решения (17.38), находим

$$r^* + c_1 E_1^{\mu_\tau} - c_2 \mathcal{R} E_2^{\mu_\tau} + \beta \tilde{\Phi}(0) = 0. \quad (23.28)$$

Так как согласно (17.16) для $s < s^*$ $|r^*| \leq q$, то всегда $r^* + \beta \tilde{\Phi}(0) > 0$ и можно не обращать внимания на $c_2 \mathcal{R} E_2^{\mu_\tau}$. В резуль-

тате

$$-c_1 E_1^{\mu_\tau} \approx r^* + \beta \tilde{\Phi}(0)$$

и

$$\mu_\tau = -\frac{\ln |\tau|}{\ln E_1} + \frac{\ln [(r^* + \beta \tilde{\Phi}(0)) / \tilde{c}_1]}{\ln E_1}, \quad T < T_c. \quad (23.29)$$

Для сравнения запишем из (19.20) выражение для m_τ :

$$m_\tau = -\frac{\ln \tau}{\ln E_1} + \frac{\ln (|r^*| / \tilde{c}_1)}{\ln E_1}, \quad T > T_c.$$

Таблица 9

τ	m_τ	μ_τ	$2\sqrt{z(m_\tau)}$	$x(\mu_\tau)$
0,01	2,044	1,8280	1,030	-0,978
10^{-3}	3,1353	2,9189	1,062	-0,820
10^{-4}	4,2261	4,0097	1,074	-0,770
10^{-5}	5,3170	5,1006	1,077	-0,754
10^{-6}	6,4078	6,1914	1,079	-0,748
10^{-8}	8,5894	8,3731	1,079	-0,746
10^{-10}	10,7712	10,5548	1,079	-0,746

Как видим, μ_τ ($\tau < 0$) и m_τ ($\tau > 0$) близки друг к другу; их значения для $s = s^*$ приведены в табл. 9. Здесь же представлены значения параметров x_{μ_τ} и $2\sqrt{z(m_\tau)}$, которые являются величинами, близкими к единице. Для $n = n_{m_\tau} + 1$ при $T > T_c$ и для $n = \mu_\tau + 1$ при $T < T_c$ параметры $\sqrt{z(m_{\tau+1})}$ и $x_{\mu_\tau} + 1$ становятся величинами существенно больше единицы.

§ 24. ИНТЕГРИРОВАНИЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЫ ПРИ $T < T_c$

Будем считать, что статистическая сумма проинтегрирована по всем слоям с номерами $n < \mu_\tau$. Соответствующие парциальные суммы считаются известными и определяются значениями коэффициентов $d^{(n)}(B_{n+1}B_n)$ и $a^{(n)}$, для которых справедливы решения (17.38) и (17.39). Это область критического режима при $T < T_c$ [132].

Теперь рассмотрим фазовую область $n > \mu_\tau$. Имеем следующее исходное выражение для статистической суммы:

$$Z = C \mathfrak{Z}_1 \dots \mathfrak{Z}_{\mu_\tau} Z_{\mu_\tau}; \quad (24.1)$$

$$Z_{\mu_\tau} = \int e^{E_{\mu_\tau}(\rho)} (d\rho)^{N_{\mu_\tau}}; \quad (24.2)$$

$$E_{\mu_\tau}(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{k < B_\mu} d^{(\mu_\tau)} \rho_k \rho_{-k} - \frac{a_k^{(\mu_\tau)}}{4! N_\tau} \sum_{k_i < B_\mu} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4). \quad (24.3)$$

Здесь

$$d^{(\mu\tau)}(k) = \frac{r^* + c_1 E_1^{\mu\tau} - c_2 \mathcal{R} E_2^{\mu\tau}}{s^{2\mu\tau}} + \tilde{q} k^2 < 0; \quad (24.4)$$

$$a_4^{(\mu\tau)} = \frac{u^* + c_1 E_1^{\mu\tau} \mathcal{R}' + c_2 E_2^{\mu\tau}}{s^{4\mu\tau}}; \quad (24.5)$$

$$B_{\mu\tau} = \frac{B'}{s^{\mu\tau}}; \quad N_{\mu\tau} = \frac{N'}{s^{3\mu\tau}}; \quad \tilde{q} = 2b^2 \beta \tilde{\Phi}(0). \quad (24.6)$$

По определению точки $B_{\mu\tau}$ (см. (23.27)) квадратичное слагаемое под интегралом в выражении для $Z_{\mu\tau}$ имеет устойчивый знак плюс, а $d^{(\mu\tau)}(k) < 0$. В блочной структуре, описываемой $Z_{\mu\tau}$, существует отличный от нуля средний спиновый момент. Выделим из $Z_{\mu\tau}$ свободную энергию, которая соответствует возникшему в системе упорядочению. Для этого под интегралом в (24.2) введем замену переменных

$$\rho_{\mathbf{k}} = \rho_{\mathbf{k}}' + \sqrt{N} \langle \sigma \rangle \delta_{\mathbf{k},0}. \quad (24.7)$$

Одновременно включим постоянное внешнее поле, которое бы «держало» выделенный средний момент, прибавляя к исходному гамильтониану (1.1), или, что то же самое, к блочному гамильтониану $E_{\mu\tau}(\rho)$ слагаемое

$$V\sqrt{N} \beta \mathcal{H} \rho_0. \quad (24.8)$$

Для $E_{\mu\tau}(\rho)$ имеем (штрих у ρ_0 опущен)

$$\begin{aligned} E_{\mu\tau}(\rho) = & -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} d^{(\mu\tau)}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \\ & - \frac{a_4^{(\mu\tau)}}{4! N_{\mu\tau}} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4) - \\ & - \frac{a_4^{(\mu\tau)}}{3! N_{\mu\tau}} \langle \sigma \rangle V\sqrt{N} \sum_{\mathbf{k}_i \neq 0} \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \rho_{\mathbf{k}_3} \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) - \\ & - \frac{a_4^{(\mu\tau)}}{4N_{\mu\tau}} \langle \sigma \rangle^2 N \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{a_4^{(\mu\tau)}}{3! N_{\mu\tau}} \langle \sigma \rangle^3 V\sqrt{N}^3 \rho_0 - d^{(\mu\tau)}(0) \langle \sigma \rangle V\sqrt{N} \rho_0 + \\ & + V\sqrt{N} \mathcal{H} \beta \rho_0 - \frac{N^2}{3! N_{\mu}} a_4^{(\mu\tau)} \langle \sigma \rangle^4 - \frac{1}{2} N \langle \sigma \rangle^2 d^{(\mu\tau)}(0) + \\ & + N \mathcal{H} \beta \langle \sigma \rangle - \frac{a_4^{(\mu\tau)} V\sqrt{N} \langle \sigma \rangle}{2N_{\mu\tau}} \rho_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{a_4^{(\mu\tau)}}{3! N_{\mu\tau}} \rho_0^3 V\sqrt{N} \langle \sigma \rangle - \\ & - \frac{a_4^{(\mu\tau)} N}{4N_{\mu\tau}} \langle \sigma \rangle^2 \rho_0^2, \quad k < B_{\mu}. \end{aligned} \quad (24.9)$$

Параметр смещения $\langle \sigma \rangle$ определим из минимума макроскопической части $-\beta F_M$ гамильтониана $E_{\mu\tau}(\rho)$:

$$-\beta F_M = N \left[\frac{1}{2} |d^{(\mu\tau)}(0)| \langle \sigma \rangle^2 - \frac{1}{4} a_4^{(\mu\tau)} s_0^3 s^{3\mu\tau} \langle \sigma \rangle^4 \right]. \quad (24.10)$$

Соответствующее $\mu\tau$ число переменных

$$N_{\mu\tau} = N' / s^{3\mu\tau} = N (s_0^{-3} s^{-3\mu\tau}), \quad s_0 = \pi \sqrt{2}.$$

Рассмотрим уравнение

$$\frac{\partial F_M}{\partial \langle \sigma \rangle} = 0. \quad (24.11)$$

В результате его решения получаем

$$\langle \sigma \rangle^2 = \frac{3! |d^{(\mu\tau)}(0)|}{a_4^{(\mu\tau)} s_0^3 s^{3\mu\tau}}. \quad (24.12)$$

Значения $\langle \sigma \rangle$ подставим в гамильтониан (24.9) и выделим в нем переменную ρ . После сокращений получим следующее выражение для $E_{\mu\tau}(\rho)$:

$$\begin{aligned} E_{\mu\tau}(\rho) = & -\beta F_M - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \bar{d}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \\ & - \frac{f}{3! \sqrt{N_\mu}} \sum_{\mathbf{k}_i} \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \rho_{\mathbf{k}_3} \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) - \\ & - \frac{1}{4} \frac{a_4^{(\mu\tau)}}{N_\mu} \sum_{\mathbf{k}_i} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4) - \\ & - \frac{f}{2 \sqrt{N_\mu}} \rho_0 \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{a_4^{(\mu\tau)}}{4 N_\mu} \rho_0^2 \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \\ & - \frac{a_4^{(\mu\tau)}}{3! N_\mu} \rho_0 \sum_{\mathbf{k}_i} \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \rho_{\mathbf{k}_3} \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) + \\ & + h \sqrt{N} \rho_0 - \frac{1}{2} \bar{d}(0) \rho_0^2 - \frac{f}{3! \sqrt{N_\mu}} \rho_0^3 - \frac{a_4^{(\mu\tau)}}{4! N_\mu} \rho_0^4, \quad h < B_\mu, \quad (24.13) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \bar{d}(\mathbf{k}) &= 3 |d^{(\mu)}(0)| - |d^{(\mu)}(\mathbf{k})| = 2 |d^{(\mu)}(0)| + \tilde{q} k^2; \\ f &= \sqrt{3! |d^{(\mu)}(0)| / a_4^{(\mu)}}; \quad h = \beta \mathcal{H}; \\ -\beta F_M &= N \left(h \langle \sigma \rangle + \frac{1}{4} |d^{(\mu)}(0)| \langle \sigma \rangle^2 \right). \end{aligned} \quad (24.14)$$

Штрих у знака суммы обозначает, что слагаемое с $k = 0$ отсутствует. Знак у квадратичных членов $\sum_{\mathbf{k} < B_\mu} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}$ и ρ_0^2 строго отрицательный,

так как вместо слагаемого $d^{(\mu)}(k) = d^{(\mu)}(0) + \tilde{q}k^2$, которое входило в (24.3) и было отрицательным, в (24.13) имеется коэффициент $\bar{d}(k) = 2|d^{(\mu)}(0)| + \tilde{q}k^2$, строго положительный для всех k , включая $k=0$. Подставим гамильтониан (24.13) в исходную формулу (24.2). Проинтегрируем по всем ρ_k при $k \neq 0$. Интегралы можно считать в гауссовом базисе

$$e^{-\frac{1}{2} \sum_{k < B_\mu} \bar{d}(k) \rho_k \rho_{-k}}, \quad (24.15)$$

так как $\bar{d}(k) > 0$. Все остальные, зависящие от ρ_k , слагаемые разлагаем в ряд

$$Z_\mu = e^{-\beta F_M} \int \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{k < B_\mu} \bar{d}(k) \rho_k \rho_{-k} \right] \times \\ \times \left\{ 1 + H'(\rho) + \frac{1}{2} [H'(\rho)]^2 + \dots \right\} d\rho^{N_\mu-1} \int \exp [E'_\mu(\rho_0)] d\rho_0, \quad (24.16)$$

где

$$E'_\mu(\rho_0) = -\frac{1}{2} \bar{d}(0) \rho_0^2 - \frac{f}{3! \sqrt{N_\mu}} \rho_0^3 - \frac{a_4^{(\mu)}}{4! N_\mu} \rho_0^4 + \sqrt{N} h \rho_0; \quad (24.17)$$

$$H'(\rho) = p_0 + p_1 \rho_0 + p_2 \rho_0^2; \quad (24.18)$$

$$p_0 = -\frac{f}{3! \sqrt{N_\mu}} \sum'_{k_i < B_\mu} \rho_{k_1} \rho_{k_2} \rho_{k_3} \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) - \\ - \frac{a_4^{(\mu)}}{4! N_\mu} \sum'_{k_i < B_\mu} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4); \quad (24.19)$$

$$p_1 = -\frac{f}{2 \sqrt{N_\mu}} \sum'_{k < B_\mu} \rho_k \rho_{-k} - \frac{a_4^{(\mu)}}{3! N_\mu} \sum'_{k_i < B_\mu} \rho_{k_1} \rho_{k_2} \rho_{k_3} \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3); \quad (24.20)$$

$$p_2 = -\frac{a_4^{(\mu)}}{4 N_\mu} \sum'_{k < B_\mu} \rho_k \rho_{-k}. \quad (24.21)$$

Обозначим среднее по гауссовой мере угловыми скобками:

$$\langle \dots \rangle_G = \int \dots \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{k < B_\mu} \bar{d}(k) \rho_k \rho_{-k} \right] (d\rho)^{N_\mu-1} / Z_G; \quad (24.22)$$

$$Z_G = \int \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{k < B_\mu} \bar{d}(k) \rho_k \rho_{-k} \right] (d\rho)^{N_\mu-1} = \prod_{k < B_\mu} \left[\frac{\pi}{\bar{d}(k)} \right]^{1/2}.$$

В (24.16) отличными от нуля будут интегралы только от спаренных производных типа $\rho_k \rho_{-k}$, причем

$$\langle \rho_k \rho_{-k} \rangle = \frac{1}{\bar{d}(k)}. \quad (24.23)$$

Поэтому

$$\begin{aligned}
 \langle p_0 \rangle &= -\frac{3a_4^{(\mu)}}{4!} N_\mu \left[\frac{1}{N_\mu} \sum_{k < B_\mu} \frac{1}{\bar{d}(k)} \right]^2 = -\frac{1}{8} a_{4(\mu)} N_\mu \mathcal{F}_1^2; \\
 \langle p_0^2 \rangle &= \frac{1}{3!} f^2 N_\mu \sum_r \left(\frac{1}{N_\mu} \sum_{k < B_\mu} \frac{e^{ikr}}{\bar{d}(k)} \right)^3 = \frac{1}{3!} f^2 N_\mu \sum_r g^3(r); \\
 \langle p_1 \rangle &= -\frac{f}{2\sqrt{N_\mu}} \sum_{k < B_\mu} [1/\bar{d}(k)]; \\
 \langle p_2 \rangle &= -\frac{1}{4} \frac{a_4^{(\mu)}}{N_\mu} \sum_{k < B_\mu} [1/\bar{d}(k)].
 \end{aligned} \tag{24.24}$$

Сумма \sum_r берется по узлам блочной решетки с периодом $c_\mu = s^\mu s_0 c$.

Расчеты выполнены с точностью до $(x^{(\mu)})^{-2}$; члены, пропорциональные $(x^{(\mu)})^{-4}$, не учитываются.

Заметим, что они выражаются сложными диаграммами. Например, для свободного члена (не зависящего от ρ_0) следовало бы рассматривать в (24.19) такие выражения:

$$\begin{aligned}
 &\frac{1}{4!} \frac{f^4}{(3!)^4 N_\mu^2} \left\{ 4! 3^4 \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \\ \text{---} \text{---} \end{array} + 4! 3^4 \cdot 2 \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{---} \text{---} \end{array} \right\} - \\
 &- \frac{1}{2} 4! 3^3 \frac{f^2}{(3! \sqrt{N_\mu})^2} \frac{a_4^{(\mu)}}{4! N_\mu} \begin{array}{c} \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{---} \end{array} + \frac{1}{2} 4! \left(\frac{a_4^{(\mu)}}{4! N_\mu} \right)^2 \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{---} \text{---} \end{array} \cdot \tag{24.25}
 \end{aligned}$$

Этот пример говорит о том, какое большое число сложных диаграмм, вычисляемых с помощью гауссовых моментов, учтено в исходном четверном базисном распределении.

Собирая в (24.16) ряд по средним $\langle p_0 \rangle$, $\langle p_1 \rangle$, $\langle p_2 \rangle$ в экспоненту получаем

$$Z_{\mu_\tau} = \exp[-\beta(F_M + F_{RPA} + \Delta F_M)] \int_{-\infty}^{\infty} \exp[E''(\rho_0)] d\rho_0; \tag{24.26}$$

$$E''(\rho_0) = (\sqrt{N} h + \langle p_1 \rangle) \rho_0 - \frac{1}{2} (\bar{d}(0) - 2 \langle p_2 \rangle) \rho_0^2 - \frac{a_4^{(\mu)}}{4! N_\mu} \rho_0^4,$$

где

$$\begin{aligned}
 -\beta F_{RPA} &= \ln \prod'_{\mathbf{k} \neq 0} \sqrt{\frac{\pi}{\bar{d}(k)}} = -\frac{1}{2} \sum_{k < B_\mu} \ln \frac{\bar{d}(k)}{\pi}; \\
 -\beta \Delta F_\mu &= \langle p_0 \rangle + \frac{1}{2} (\langle p_0^2 \rangle - \langle p_0 \rangle^2).
 \end{aligned} \tag{24.27}$$

Последний интеграл статистической суммы связан с параметром порядка. Упраздним в экспоненте кубический член, полагая

$$\rho_0 = \rho'_0 + g. \tag{24.28}$$

Оказывается, что

$$g = -\sqrt{N} \langle \sigma \rangle = -\sqrt{N_\mu} f/a_4^{(\mu)}. \quad (24.29)$$

Для статистической суммы Z_μ получаем

$$Z_\mu = \exp[-\beta(F_\mu + F_{RPA} + \Delta F_\mu + \Delta F_g)] \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\sqrt{N} h \rho_0 + B \rho_0^2 - \frac{1}{N} G \rho_0^4\right) d\rho_0, \quad (24.30)$$

где

$$-\beta \Delta F_g = -\frac{a_4^{(\mu)}}{4! N_\mu} g^4 - \frac{f}{3! \sqrt{N_\mu}} g^3 - \frac{1}{2} (\bar{d}(0) - 2 \langle p_2 \rangle) g^2 + \\ + (\sqrt{N} h + \langle p_1 \rangle) g; \quad (24.31)$$

$$B = \frac{1}{2} |d^{(\mu)}(0)| - \frac{a_4^{(\mu)}}{4N_\mu} \sum_{\substack{h < B_\mu, \\ k \neq 0}} \frac{1}{\bar{d}(k)}; \quad G = \frac{1}{4!} \frac{N}{N_\mu} a_4^{(\mu)}. \quad (24.32)$$

Сумму $\frac{1}{N_\mu} \sum_{\substack{h < B_\mu, \\ k \neq 0}} [1/\bar{d}(k)]$ легко рассчитать:

$$\mathcal{J}_1 = \frac{1}{N_\mu} \sum_{\substack{h < B_\mu, \\ k \neq 0}} \frac{1}{\bar{d}(k)} = \frac{1}{N_\mu} \sum_{\substack{h < B_\mu, \\ k \neq 0}} \frac{1}{2 |d^{(\mu)}(0)| + \tilde{q} k^2} \approx \\ \approx \frac{6}{\pi} \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{N_\mu} \int_0^{\pi/c_\mu} \frac{k^2 dk}{2 |d^{(\mu)}(0)| + \tilde{q} k^2} = \frac{1}{2 |d^{(\mu)}(0)|} \tilde{\mathcal{L}}_1(x), \quad (24.33)$$

$$\text{где} \quad \tilde{\mathcal{L}}_1(x) = 3 \frac{x - \text{arctg } x}{x^3}; \quad \tilde{\mathcal{L}}_1(x) = 1 + O(x^2); \quad (24.34)$$

$$x = \frac{\pi}{c_\mu} \sqrt{\frac{\tilde{q}}{2 |d^{(\mu)}(0)|}}; \quad c_\mu = c s^\mu s_0; \quad \tilde{q} = 2b^2 \beta \tilde{\Phi}(0); \quad b = c.$$

Множитель $6/\pi$ связан с условием нормировки таким образом:

$$\frac{1}{N_\mu} \sum_{h < B_\mu} 1 = 1, \quad (24.35)$$

или

$$\frac{1}{3} \frac{6}{\pi} \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{N_\mu} \left(\frac{\pi}{c_\mu}\right)^3 = 1.$$

Просуммируем в (24.30) все слагаемые, входящие в выражение для свободной энергии, и обозначим их через $-\beta \mathcal{F}_\mu$:

$$-\beta(F_M + F_{RPA} + \Delta F_\mu + \Delta F_g) = -\beta \mathcal{F}_\mu.$$

После сокращений получаем

$$-\beta \mathcal{F}_\mu = \frac{N}{s^{3\mu} s_0^3} \left(\frac{3}{2} |d^{(\mu)}(0)| \mathcal{G}_1 - \frac{1}{8} a_4^{(\mu)} \mathcal{G}_1^2 + \frac{1}{2} |d^{(\mu)}(0)| a_4^{(\mu)} \sum_r g^3(r) - \frac{1}{2N_\mu} \sum_{\substack{k < B_\mu \\ k \neq 0}} \ln \frac{\bar{d}(k)}{\pi} \right); \quad g(r) = \frac{1}{N_\mu} \sum'_{k < B_\mu} e^{ikr} [\bar{d}(k)]^{-1}. \quad (24.36)$$

Выражение в скобках рассчитано с точностью до $(1/x^{(\mu)})^2$ и не имеет явной зависимости от s^μ [см. (24.33)].

§ 25. ПАРАМЕТР ПОРЯДКА В СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЕ

Записывая формулу (24.30) для Z_μ в виде

$$Z_\mu = e^{-\beta \mathcal{F}_\mu} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(\sqrt{N} h \rho_0 + B \rho_0^2 - \frac{1}{N} G \rho_0^4 \right) d\rho_0, \quad (25.1)$$

получаем выражение, содержащее зависящую от параметра порядка часть свободной энергии. Выделим в коэффициентах B и G явную зависимость от τ . Коэффициент $\sqrt{N}h$ от τ не зависит. Для коэффициента B из формул (24.32) получаем выражение

$$B = \frac{1}{2} |d^{(\mu)}(0)| - \frac{a_4^{(\mu)}}{8 |d^{(\mu)}(0)|} \tilde{\mathcal{L}}_1(x).$$

Подставляем в него значения $d^{(\mu)}(0)$ и $a_4^{(\mu)}$ из (24.5); для $\mathcal{L}_1(x)$ берем его значение из (24.34). Тогда

$$B = \frac{1}{2} |r_\mu| s^{-2\mu} \left(1 - \frac{1}{4} \frac{u_\mu}{|r_\mu|^2} \tilde{\mathcal{L}}_1(x) \right); \quad (25.2)$$

$$s^{-2\mu} = \left(\frac{\tilde{c}_1}{|r^* + \beta \tilde{\Phi}(0)|} \right)^{2\nu};$$

$$\nu = \frac{\ln s}{\ln E_1}. \quad (25.3)$$

Выделим явную зависимость от τ :

$$B = |\tau|^{2\nu} B_0, \quad (25.4)$$

где

$$B_0 = \frac{1}{2} |r_\mu| \left(1 - \frac{1}{4} \frac{u_\mu}{|r_\mu|^2} \tilde{\mathcal{L}}_1(x) \right) \left(\frac{\tilde{c}_1}{|r^* + \beta \tilde{\Phi}(0)|} \right)^{2\nu}.$$

Аналогичным образом находим

$$G = \frac{u_\mu}{4!} s^{-\mu} s_0^3 = |\tau|^\nu G_0, \quad (25.5)$$

где

$$G_0 = \left(\frac{\tilde{c}_1}{|r^* + \beta \tilde{\Phi}(0)|} \right)^v \frac{u_\mu}{4!} s_0^3.$$

Для r_μ и u_μ имеем

$$\begin{aligned} r_\mu &= r^* + c_1 E_1^\mu - c_2 \mathcal{R} E_2^\mu; \\ u_\mu &= u^* + c_1 \mathcal{R}' E_1^\mu + c_2 E_2^\mu. \end{aligned} \quad (25.6)$$

Переменная ρ_0 в (25.1) является макроскопической величиной. Полагаем

$$\rho_0 = \sqrt{N} \rho. \quad (25.7)$$

Подставляя в (25.1) значения B и G из (25.2) и (25.4), получаем интеграл

$$Z_\mu = e^{-\beta \mathcal{F}_\mu} \sqrt{N} \int e^{-NE_0(\rho)} d\rho. \quad (25.8)$$

Выражение

$$E_0(\rho) = G_0 |\tau|^v \rho^4 - B_0 |\tau|^{2v} \rho^2 - h\rho \quad (25.9)$$

можно трактовать как ту часть свободной энергии, которая связана с параметром порядка. В отличие от теории Ландау зависимость коэффициентов этой части энергии от температуры является неаналитической. Так, например, для $s = s^* \approx 3,5862$

$$v = \frac{\ln 3,586}{\ln 8,235} = 0,605. \quad (25.10)$$

Благодаря множителю N в показателе степени подынтегральное выражение в (25.8) имеет резкий максимум в точке $\bar{\rho}$, соответствующей равновесному значению параметра порядка. Величина $\bar{\rho}$ совпадает со средним значением ρ . Среднее значение $\bar{\rho}$ находим из условия экстремума

$$\frac{\partial E_0(\rho)}{\partial \rho} = 0. \quad (25.11)$$

Получаем кубическое уравнение

$$\bar{\rho}^3 + v\bar{\rho} + w = 0, \quad (25.12)$$

где

$$v = -\frac{B_0 |\tau|^v}{2G_0} = -|\tau|^v \tilde{v}, \quad \tilde{v} = \frac{1}{2} \frac{B_0}{G_0}; \quad (25.13)$$

$$w = -\frac{h}{4G_0 |\tau|^v} = -|\tau|^{-v} \tilde{w}, \quad \tilde{w} = \frac{h}{4G_0}. \quad (25.14)$$

Исследуем дискриминант уравнения

$$Q = \left(\frac{v}{3} \right)^3 + \left(\frac{w}{2} \right)^2.$$

После подстановки значений v и w имеем

$$Q = -|\tau|^{3v} \left(\frac{\tilde{v}}{3}\right)^3 + |\tau|^{-2v} \left(\frac{\tilde{w}}{2}\right)^2. \quad (25.15)$$

Предположим, что внешнее поле отсутствует, тогда $\tilde{w} = 0$. Кубическое уравнение имеет отрицательный дискриминант и три различных действительных корня; один из них равен нулю, а два других равны по величине и противоположны по знаку:

$$\bar{\rho}_1 = 0; \quad \bar{\rho}_2 = +\sqrt{-v}; \quad \bar{\rho}_3 = -\sqrt{-v}.$$

Подставляя значение v , получаем

$$\bar{\rho}_{2,3} = \pm |\tau|^{\frac{v}{2}} \sqrt{B_0/2G_0}. \quad (25.16)$$

В общем случае поле изменяет знак дискриминанта. Будем считать, что напряженность поля стремится к нулю, $Q < 0$ и среди трех действительных корней один — наибольший. В этом случае

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_1 &= 2 \sqrt{-\frac{v}{3}} \cos \frac{\varphi + 4\pi}{3}; \\ \bar{\rho}_2 &= 2 \sqrt{-\frac{v}{3}} \cos \frac{\varphi}{3}; \\ \bar{\rho}_3 &= 2 \sqrt{-\frac{v}{3}} \cos \frac{\varphi + 2\pi}{3}, \end{aligned} \quad (25.17)$$

где $\cos \varphi = -t = -\frac{1}{2} w \frac{1}{(\sqrt{-v/3})^3}$. Так как поле настолько слабое, что t считается малой величиной, то

$$\varphi = \arccos(-t) = \frac{\pi}{2} + t + \frac{t^3}{6} + \dots$$

Подставляя это значение φ в выражения (25.17), находим

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_1 &= \frac{2}{3} \sqrt{-\frac{v}{3}} t; \\ \bar{\rho}_2 &= \sqrt{-v} \left(1 - \frac{t}{3\sqrt{3}} - \frac{t^2}{18} - \dots\right); \\ \bar{\rho}_3 &= -\sqrt{-v} \left(1 + \frac{t}{3\sqrt{3}} - \frac{t^2}{18} + \dots\right). \end{aligned} \quad (25.18)$$

Как видим, во внешнем поле происходит смещение корней, пропорциональное величине поля. Корень $\bar{\rho}_2$ увеличивается по модулю. Его и будем считать средним моментом системы при $T < T_c$ и $h \rightarrow 0$:

$$\langle \sigma \rangle = \sqrt{-v} \left(1 - \frac{t}{3\sqrt{3}}\right) = |\tau|^{\frac{v}{2}} \sqrt{\tilde{v}} \left(1 - \frac{1}{3\sqrt{3}} \frac{w}{2 \sqrt{\left(-\frac{v}{3}\right)^3}}\right); \quad (25.19)$$

здесь

$$v = -|\tau|^v \tilde{v};$$

$$\tilde{v} = \frac{3! |r_\mu|}{u_\mu} \left(1 - \frac{1}{4} \frac{u_\mu}{|r_\mu|^2} \tilde{\mathcal{L}}_1(x) \right) \left(\frac{\tilde{c}_1}{|r^* + \beta \tilde{\Phi}(0)|} \right)^v; \quad (25.20)$$

$$w = -|\tau|^{-v} \tilde{w};$$

$$\tilde{w} = 3! \hbar \frac{1}{u_\mu} \left(\frac{|r^* + \beta \tilde{\Phi}(0)|}{\tilde{c}_1} \right)^v. \quad (25.21)$$

Для восприимчивости имеем

$$\left. \frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial \hbar} \right|_{\hbar \rightarrow 0} = |\tau|^{-2v} \frac{\tilde{v}}{2v\hbar}. \quad (25.22)$$

Итак, рассмотрен случай, когда внешнее поле исчезающе мало. Однако при сколь угодно малом, но неисчезающем поле при $T \rightarrow T_c$ знак дискриминанта Q , как это следует из (25.15), меняется на обратный, Q становится положительной величиной. В этом случае уравнение (25.12) имеет один действительный корень и два комплексно-сопряженных. Действительный корень равен

$$\sqrt[3]{-\frac{w}{2} + V\bar{Q}} + \sqrt[3]{-\frac{w}{2} - V\bar{Q}}.$$

Подставляя вместо w и Q их значения, получаем

$$\langle \sigma \rangle = \sqrt[3]{|\tau|^{-v} \frac{\tilde{w}}{2} + \sqrt{|\tau|^{-2v} \left(\frac{\tilde{w}}{2} \right)^2 - |\tau|^{3v} \left(\frac{\tilde{v}}{3} \right)^3}} +$$

$$+ \sqrt[3]{|\tau|^{-v} \frac{\tilde{w}}{2} - \sqrt{|\tau|^{-2v} \left(\frac{\tilde{w}}{2} \right)^2 - |\tau|^{3v} \left(\frac{\tilde{v}}{3} \right)^3}}. \quad (25.23)$$

Здесь $\hbar \neq 0$ и $\tilde{w} \neq 0$. При $\tau \rightarrow 0$ величина, пропорциональная $|\tau|^{3v}$, исчезает и

$$\langle \sigma \rangle = \sqrt[3]{|\tau|^{-v} \tilde{w}}. \quad (25.24)$$

Чтобы исключить τ , подставляем из (25.19)

$$|\tau|^{v/2} \approx \langle \sigma \rangle / \sqrt{\tilde{v}}. \quad (25.25)$$

Тогда

$$\langle \langle \sigma \rangle \rangle^{1/3} = \sqrt[3]{\tilde{v} \tilde{w}' \hbar^{1/3}}, \quad (25.26)$$

или

$$\langle \sigma \rangle = \sqrt[5]{\tilde{v} \tilde{w}' \hbar^{1/5}}; \quad \tilde{w} = \hbar \tilde{w}'. \quad (25.27)$$

Приведенное выражение представляет собой зависимость между средним моментом ρ и внешним полем в точке T_c . Таким образом, найдены точки экстремума функции $E_0(\rho)$ в формуле (25.9). Разлагаем $E(\rho)$ в ряд в окрестности точки экстремума $\rho = \bar{\rho}_2$. Под интегралом в (25.8) имеется резкий максимум, в результате

$$Z_\mu = \exp(-\beta \mathcal{F}_\mu) V \bar{N} \exp[-NE_0(\bar{\rho}_2)] \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{N}{2} E_0''(\bar{\rho}_2) (\rho - \bar{\rho}_2)^2\right] d\rho = \\ = \sqrt{\frac{2\pi}{E_0''(\bar{\rho}_2)}} \exp[-\beta \mathcal{F}_\mu - NE_0(\bar{\rho}_2)] \quad (25.28)$$

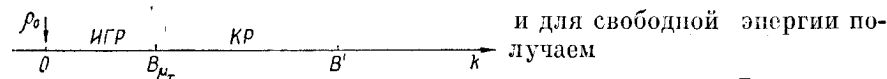


Рис. 21. Область режимов при $T < T_c$.

$$F_\mu = \mathcal{F}_\mu + \theta N E_0(\bar{\rho}_2), \quad (25.29)$$

где

$$E_0(\bar{\rho}_2) = -|\tau|^{3\nu} \frac{B_0^2}{4G_0} - h|\tau|^{3\nu/2} \sqrt{\frac{B_0}{2G_0}}. \quad (25.30)$$

Значения B_0 и G_0 заданы выражениями (25.4) и (25.5). Назовем область $n > \mu_\tau$ инверсным гауссовым режимом (ИГР). Он отличается от ПГР, соответствующего $T > T_c$, тем, что в системе возникает отличный от нуля средний момент. Работу создания этого момента $-\beta F_\mu$, заданную в (24.14), необходимо было выделить с помощью преобразования (24.7). Оставшееся выражение представляло собой статистическую сумму флуктуаций гауссова типа вокруг среднего момента. Однако это был предварительный сдвиг. Интегрирование продолжалось до получения однократного интеграла по параметру порядка, представленного формулой (24.26). Этот однократный интеграл является макроскопической величиной. Решение уравнений (25.11), (25.12) дает истинное значение среднего момента системы, а $NE_0(\bar{\rho}_2)$ — энергию его образования. Схема интегрирования при $T < T_c$, приведенная на рис. 21, заключается в следующем. От B' до $B_{\mu_\tau} = B' s^{-\mu_\tau}$ интеграл берется в критическом режиме, от B_{μ_τ} до $k > 0$ — в гауссовом и наконец при интегрировании по ρ_0 — в режиме четверной базисной плотности меры.

**УЧЕТ ПОПРАВОК НА УСРЕДНЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА
И НА ПЕРЕХОД НА БЛОЧНУЮ РЕШЕТКУ.
КРИТИЧЕСКИЙ ИНДЕКС η**

В этой главе вновь обратимся к рекуррентным соотношениям (17.5) и (17.6), возникающим при интегрировании статистической суммы по слоям фазового пространства, внося в них поправки на усреднение потенциала и на переход на блочную решетку [87]. В качестве исходных формул будем рассматривать выражения (14.45) и (14.46). В результате учета поправок, связанных с действием в (14.46) операторов $\hat{\Delta}_1, \hat{\Delta}_2, \hat{\Delta}_3, \dots$ снова получим выражения вида (14.56) — (14.58), но с новыми значениями $d^{(1)}(k)$ и $a_4^{(1)}$. Согласно (14.53)

$$d^{(1)}(k) = a_2^{(1)} - \beta\tilde{\Phi}(k) = a_2^{(1)} - \beta\tilde{\Phi}(0)(1 - 2b^2k^2).$$

Теперь коэффициент $d^{(1)}(k)$ определяется по формуле

$$d^{(1)}(k) + \Delta d^{(1)}(k) = a_2^{(1)} + \Delta a_2^{(1)} - \beta\tilde{\Phi}(0) + 2b^2\beta\tilde{\Phi}(0)(1 + \alpha^{(1)})k^2;$$

для $a_4^{(1)}$ также получается новое значение $a_4^{(1)} + \Delta a_4^{(1)}$. Рассмотрим здесь только поправку $\alpha^{(1)}$ и ограничимся утверждением, что поправки $\Delta a_2^{(1)}$ и $\Delta a_4^{(1)}$ являются очень малыми и несущественными (см. по этому вопросу оригинальные работы [68, 87, 88]).

Значение поправки $\alpha^{(1)}$ будет изменяться от слоя к слою. В результате интегрирования в первом слое в коэффициенте $d^{(1)}(k) + \Delta d^{(1)}(k)$ появляется множитель $1 + \alpha^{(1)}$, после интегрирования во втором слое в выражении

$$d^{(2)}(k) + \Delta d^{(2)}(k) = a_2^{(2)} + \Delta a_2^{(2)} - \beta\tilde{\Phi}(0)[1 - 2b^2(1 + \alpha^{(1)})(1 + \alpha^{(2)})k^2]$$

он заменяется произведением $(1 + \alpha^{(1)})(1 + \alpha^{(2)})$; в результате n последовательных интегрирований получим выражение

$$d^{(n)}(k) + \Delta d^{(n)}(k) = a_2^{(n)} + \Delta a_2^{(n)} - \beta\tilde{\Phi}(0)[1 - 2b^2(1 + \alpha^{(1)})(1 + \alpha^{(2)}) \dots (1 + \alpha^{(n)})k^2].$$

Каждый коэффициент $\alpha^{(m)}$ зависит от m , температуры и параметров исходного гамильтониана. Принципиальная метаморфоза свойств

коэффициентов $\alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(m)}$ наступает при критической температуре. Покажем, что при $T = T_c$ все $\alpha^{(m)}$ становятся универсальными и одинаковыми по величине. Этот факт изменяет форму зависимости корреляционной функции при $T = T_c$ и является весьма важным. Он приводит также к изменению формы подстановки (17.10) при решении рекуррентных уравнений (17.5), (17.6) и изменению поведения функций $d^{(n)}$ и $a_4^{(n)}$ в критическом режиме.

§ 26. ПОПРАВКА НА УСРЕДНЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА

Поправка на усреднение потенциала возникает уже в формулах (14.1) и (14.4) [68, 87, 88]:

$$\Delta_1 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Delta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \eta_{\mathbf{k}} \eta_{-\mathbf{k}},$$

где

$$\Delta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) = \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) - \beta \tilde{\Phi}(B_1, B).$$

Затем в формуле (14.13) Δ_1 переходит в оператор $\hat{\Delta}_1$:

$$\hat{\Delta}_1 = \frac{1}{(2\pi i)^2} \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_2} \Delta \Phi(|\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2|) \frac{\partial^2}{\partial \tilde{v}_{\mathbf{l}_1} \partial \tilde{v}_{\mathbf{l}_2}},$$

где

$$\Delta \Phi(|\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2|) = \frac{1}{N} \sum_{B_1 \leq h \leq B} \Delta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2)}.$$

Раскрываем действие оператора $e^{\hat{\Delta}_1}$ на функцию $I(\mathbf{v})$ и в формуле (14.22) получаем результат от производных в первом порядке по $\hat{\Delta}_1$. От всего выражения остается только слагаемое (14.31), которое в данном случае имеет вид

$$\begin{aligned} e^{\hat{\Delta}_1} I(\mathbf{v}) &= (1 + \tilde{\Delta}_1 + \dots) I(\mathbf{v}) = \\ &= \left\{ 1 + \frac{1}{(2\pi i)^2} \sum_{B_1 \leq h < B} \Delta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \left(\frac{S_4}{3!} \right)^2 \frac{1}{N^4} \sum_{\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_2} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_6} \exp [i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_5 + \right. \\ &\quad \left. + \mathbf{k}) \mathbf{l}_1] \times v_{\mathbf{k}_1} \dots v_{\mathbf{k}_6} \exp [i(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4 + \mathbf{k}_6 - \mathbf{k}) \mathbf{l}_2] + \dots \right\} I(\mathbf{v}). \end{aligned}$$

Прежде чем перейти к формуле (14.32), заменим ядро $\Delta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})$ в (14.31) неким более общим выражением. Для этого рассмотрим в (14.21) разложение в ряд производных

$$\begin{aligned} e^{\hat{\Delta}} I(\mathbf{v}_1) &= \left[1 + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi i)^2} \sum_{\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_2} \Delta \Phi(|\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2|) \frac{\partial^2}{\partial \tilde{v}_{\mathbf{l}_1} \partial \tilde{v}_{\mathbf{l}_2}} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \frac{1}{2^2} \frac{4}{(2\pi i)^4} \sum_{\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_2, \mathbf{l}_3} \Delta \Phi(|\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_3|) \Delta \Phi(|\mathbf{l}_3 - \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -I_2) \frac{\partial^2}{\partial \tilde{v}_{1_1} \partial \tilde{v}_{1_3}} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{v}_{1_3} \partial \tilde{v}_{1_2}} + \dots + \\
& + \frac{1}{2^n} \frac{1}{n!} \frac{2^n n!}{2} \frac{1}{(2\pi i)^{2n}} \sum_{I_1, \dots, I_n} \Delta\Phi(|I_1 - I_3|) \Delta\Phi(|I_3 - I_4|) \dots \\
& \dots \Delta\Phi(|I_n - I_2|) \frac{\partial^2}{\partial \tilde{v}_{1_1} \partial \tilde{v}_{1_3}} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{v}_{1_3} \partial \tilde{v}_{1_4}} \dots \frac{\partial^2}{\partial \tilde{v}_{1_n} \partial \tilde{v}_{1_2}} + \dots \Big] \times \\
& \times \exp\left(-\frac{1}{2} S_2 \sum_1 v_1^2 - \frac{1}{4!} S_4 \sum_1 v_1^4\right). \quad (26.1)
\end{aligned}$$

Производные $\partial/\partial\tilde{v}_{1_1}$ и $\partial/\partial\tilde{v}_{1_2}$ будем называть внешними, а $\partial/\partial\tilde{v}_{1_3}$, $\partial/\partial\tilde{v}_{1_4}$, ... — внутренними. В качестве результата дифференцирования по внешним производным берется третье слагаемое в формуле (14.28), или, что то же самое, выражение (14.31), а в качестве результата дифференцирования по внутренним производным — только второе слагаемое в (14.28). Суммируя по I_3, I_4, \dots, I_n , получаем преобразование свертки, а для (26.1) — ряд

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{(2\pi i)^2} \sum_{B_1 \leq k \leq B} \frac{1}{2} \left(\frac{S_4}{3!}\right)^2 \frac{1}{N^4} \sum_{I_1 I_2} \sum_{k_1 \dots k_6} \exp[i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_5 + \mathbf{k}) I_1] \times \\
& \times \exp[i(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4 + \mathbf{k}_6 - \mathbf{k}) I_2] \frac{\Delta\tilde{\Phi}(k)}{N} v_{k_1} \dots v_{k_6} \times \\
& \times \left[1 + \frac{S_2}{(2\pi)^2} \Delta\tilde{\Phi}(k) + \left(\frac{S_2}{(2\pi)^2} \Delta\tilde{\Phi}(k)\right)^2 + \dots\right] I(v). \quad (26.2)
\end{aligned}$$

Это приводит к замене фурье-образа $\frac{\Delta\tilde{\Phi}(k)}{N}$ выражением $\frac{1}{N} \Delta\tilde{g}(k)$, где

$$\Delta\tilde{g}(k) = \frac{\Delta\tilde{\Phi}(k)}{1 - [S_2/(2\pi)^2] \Delta\tilde{\Phi}(k)}. \quad (26.3)$$

Теперь вместо (14.32) имеем новый оператор $\hat{\Delta}_g$:

$$\begin{aligned}
& \hat{\Delta}_g = \frac{1}{(2\pi)^8} \sum_{k_1 \dots k_6} \left(\frac{S_4}{3!}\right)^2 \frac{\partial^6}{\partial \rho_{k_1} \dots \partial \rho_{k_6}} \frac{1}{N^3} \times \\
& \times \frac{1}{2} \sum_{B_1 \leq k \leq B} \frac{1}{N} \Delta\tilde{g}(k) \sum_{I_1 I_2} \exp[i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_5 + \mathbf{k}) I_1] \times \\
& \times \exp[i(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4 + \mathbf{k}_6 - \mathbf{k}) I_2]. \quad (26.4)
\end{aligned}$$

По структуре он аналогичен оператору $\hat{\Delta}_1$, только роль $\Delta\tilde{\Phi}$ в (14.32) играет $\Delta\tilde{g}(k)$ в (26.4). Как будет показано дальше, знаменатель в (26.3) всегда положителен и меньше единицы. Поэтому $\Delta\tilde{g}(k) > \Delta\tilde{\Phi}(k)$, а для $s = 3$ $\Delta\tilde{g}(k) \approx 1,546 \Delta\tilde{\Phi}(k)$. В формуле (14.46) для

статистической суммы рассчитаем поправку, вносимую оператором $\hat{\Delta}_g$. Исходное выражение имеет следующий вид:

$$Z = C \mathfrak{M}_1^N \int \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{h < B_1} [\tilde{\beta} \Phi(h) - \tilde{\beta} \Phi(B_1 B)] \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} (1 + \hat{\Delta}_g + \dots) \right\} \times \\ \times \exp \left[-\frac{1}{2} R_2 \sum_{h < B_1} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{4!} \frac{1}{N_1} R_4 \sum \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right] (d\rho)^{N_1}. \quad (26.5)$$

Мы не ставим здесь цель рассчитать точную поправку от $\hat{\Delta}_g$. Ограничимся отысканием вкладов от нее в слагаемые, пропорциональные $h^2 \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}$. Рассмотрим также соответствующие вклады от поправок второго и третьего порядка: $\hat{\Delta}_g^2$ и $\hat{\Delta}_g^3$. Коэффициенты R_2 и R_4 в (26.5) существенно различаются между собой по величине. Как вытекает из (14.49) и (14.50),

$$R_2^2 = \frac{16}{P_2^2} 3 [\mathcal{H}(3)]^2;$$

$$R_4 = \frac{8}{P_2^2} 3 \mathcal{L}(3); \quad P_2 = \frac{\sqrt{12}}{\sqrt{a_4}} \mathcal{H}(z).$$

При оценке величин будем считать, что z близко к нулю, а $3 \sim s^3 3_0$; тогда из (15.23) и (15.24) находим

$$R_2^2 \approx 16 \frac{a_4}{12} 3 \frac{1}{463} \frac{1}{2\gamma^2} = \frac{1}{24} \frac{1}{\gamma^2} a_4;$$

$$R_4 \approx \frac{3}{32} 83 \frac{1}{3^2} \frac{a_4}{12} \frac{1}{2\gamma^2} = \frac{1}{32} \frac{1}{\gamma^2} a_4 \frac{1}{3}.$$

Так как $3 \sim s^3 3_0 \gg 1$, то R_4 на порядок меньше R_2^2 . (В приведенных численных оценках поправки, пропорциональные $1/s^3$, не учитывались.) Поэтому будем рассматривать действие оператора $\hat{\Delta}_g$ только на $\exp \left(-\frac{1}{2} R_2 \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right)$. Для этого выделим в $\hat{\Delta}_g$ три спаренные производные вида

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \partial \rho_{-\mathbf{k}}}, \quad \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{k}_2} \partial \rho_{-\mathbf{k}_2}}, \quad \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{k}_3} \partial \rho_{-\mathbf{k}_3}}.$$

Обратим внимание на символы Кронекера

$$\sum_{\mathbf{l}_1} \exp [i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_5 + \mathbf{k}) \mathbf{l}_1] \sum_{\mathbf{l}_2} \exp [i(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4 + \mathbf{k}_6 - \mathbf{k}) \mathbf{l}_2];$$

они не позволяют спаривать производные с индексами \mathbf{k}_i и \mathbf{k}_j принадлежащими одному и тому же символу, например $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3 \neq \neq 0$, ибо тогда $\mathbf{k}_5 + \mathbf{k} = 0$, что невозможно, так как $k_5 < B_1$, а $k > > B_1$. Спариваются производные $\partial/\partial \rho_{\mathbf{k}}$ с индексами \mathbf{k} различной четности, например \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 , \mathbf{k}_3 и \mathbf{k}_4 , \mathbf{k}_5 и \mathbf{k}_6 .

Таким образом, для производных в операторе $\hat{\Delta}_g$, заданных формулой (26.4), имеем

$$\sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_6} \frac{\partial^6}{\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \partial \rho_{\mathbf{k}_6}} \exp [i (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_5 + \mathbf{k}) \mathbf{l}_1 + i (\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4 + \mathbf{k}_6) \mathbf{l}_2] =$$

$$= 6 \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_5} \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \partial \rho_{-\mathbf{k}_1}} \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{k}_3} \partial \rho_{-\mathbf{k}_3}} \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{k}_5} \partial \rho_{-\mathbf{k}_5}} \exp [i (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_5 + \mathbf{k}) (\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2)].$$

В исходном выражении (26.5) каждая спаренная производная, действуя на экспоненту справа, дает

$$-R_2 + R_2^2 \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}};$$

слагаемые, содержащие R_4 , не учитываются. В целом, раскрывая операцию

$$\hat{\Delta}_g \exp \left(-R_2 \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{4!} R_4 \frac{1}{N} \sum \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \rho_{\mathbf{k}_3} \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} \right),$$

получаем следующую поправку:

$$\Delta_g = \left(\frac{S_4}{3! (2\pi)^4} \right)^2 \sum_{h_1, h_3, h_5 \leq B_1} \frac{1}{2} \sum_{B_1 < h < B} \frac{1}{N} \Delta g (h) \times$$

$$\times \exp [i (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_5 + \mathbf{k}) (\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2)] \frac{6}{N^3} (-R_2^3 + 3R_2^2 \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{-\mathbf{k}_1} + \dots) \times$$

$$\times \exp \left(-\frac{1}{2} R_2 \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{4!} \frac{1}{N} \sum R_4 \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right). \quad (26.6)$$

Это и есть искомая поправка на усреднение потенциала в первом порядке теории возмущений по $\Delta\Phi(k)$ (или по $\Delta g(k)$). Она найдена для слагаемых, пропорциональных $\rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}$. Поправка пропорциональна множителю $[S_4/(2\pi)^4]^2$. Такой же множитель будет входить в поправки во втором и третьем порядках теории возмущений по $\Delta\tilde{\Phi}$. В дальнейшем они также будут учтены.

Рассчитаем поправку Δ_g . Выполним в (26.6) суммирование по \mathbf{k}_3 и \mathbf{k}_5 . Так как \mathbf{l}_1 и \mathbf{l}_2 — векторы исходной решетки, перейдем в суммах по \mathbf{k}_3 и \mathbf{k}_5 к исходной зоне Бриллюэна:

$$\sum_{\mathbf{k} < B_1} = \sum_{h < B} - \sum_{B_1 \leq h \leq B}.$$

Тогда

$$\mathcal{J}_1 = \frac{1}{N'} \sum_{h_3 < B_1} e^{i\mathbf{k}_3(\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2)} = \delta_{\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2} - \mathcal{Y}(x);$$

$$\mathcal{Y}(x) = \frac{1}{N'} \sum_{h < h \leq B_1} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2)} = \frac{6}{\pi} \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{N'} \int_{B_1 < h \leq B'} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2)} d\mathbf{k}. \quad (26.7)$$

После интегрирования имеем

$$\mathcal{Y}(x) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{x^3} \left[(\sin \pi x - \pi x \cos \pi x) - \left(\sin \frac{\pi x}{s} - \frac{\pi x}{s} \cos \frac{\pi x}{s} \right) \right] \frac{6}{\pi} =$$

$$= \left[\frac{1}{\sqrt{2x^3}} \mathcal{J}_{3/2}(\pi x) - \frac{1}{\sqrt{2xs^3}} \mathcal{J}_{3/2} \left(\frac{\pi x}{s} \right) \right] \frac{6}{\pi}, \quad (26.8)$$

где

$$x = \frac{|l_1 - l_2|}{c'}; \quad \frac{V}{N'} = c'^3; \quad c' = \sqrt{2} \pi c;$$

$\mathcal{J}_{3/2}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \left(\frac{\sin z}{z} - \cos z \right)$ — сферическая функция Бесселя.

В результате для сумм по k_3 и k_5 в (26.6) получаем выражение

$$\frac{1}{N'^2} \sum_{k_3, k_5 < B_1} \exp [i(\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_5) (\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2)] = (\delta (\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2) - \mathcal{Y} (x))^2. \quad (26.9)$$

Для суммы по k имеем

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_2 &= \frac{1}{N'} \sum_{B_1 < k \leq B'} \Delta g (k) e^{ik(\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2)} = \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{N'} \frac{6}{\pi} 4\pi \int_{B_1}^{B'} \frac{\sin kl}{kl} \frac{q - 2b^2 k^2 \tilde{\beta}\tilde{\Phi} (0)}{1 - P_2 (q - 2b^2 \tilde{\beta}\tilde{\Phi} (0) k^2)} k^2 dk. \quad (26.10) \end{aligned}$$

Здесь

$$q = \bar{q} \tilde{\beta}\tilde{\Phi} (0); \quad \bar{q} = \frac{3}{5} \frac{1 - s^{-5}}{1 - s^{-3}}; \quad 2b^2 B'^2 = 1; \quad 2b^2 B_1^2 = s^{-2}.$$

При $T = T_c$

$$P_2 = S_2 / (2\pi)^2 = 2 \sqrt{3} \mathcal{H} (z^*) (u^*)^{-1/2}; \quad u^* = \bar{u} [\tilde{\beta}\tilde{\Phi} (0)]^2$$

и величины $P_2 q$ и $P_2 \tilde{\beta}\tilde{\Phi} (0)$ не зависят от гамильтониана задачи.

Для упрощения расчетов заменим функцию

$$\frac{1}{(1 - P_2 q) + 2b^2 P_2 \tilde{\beta}\tilde{\Phi} (0) k^2}$$

средним значением¹⁴ на промежутке $(B_1 B')$ и обозначим его бук-

¹⁴ Рассматривается среднее геометрическое

$$2b^2 P_2 \tilde{\beta}\tilde{\Phi} (0) t = \frac{3 \int_{B_1}^{B'} \frac{k^2 dk}{k^2 - a^2}}{B_1^3 - B'^3},$$

где

$$a^2 = \frac{P_2 q - 1}{2b^2 P_2 \tilde{\beta}\tilde{\Phi} (0)};$$

$$t = (P_2 \tilde{\beta}\tilde{\Phi} (0))^{-1} \frac{3}{1 + s^{-1} + s^{-2}} + \frac{3}{2(1 - s^{-3})} a' \ln \frac{(1 - a') (s^{-1} + a')}{(1 + a') (s^{-1} - a')};$$

$a' = a/B'$ для $s = 3$; $P_2 = 1,736 [\tilde{\beta}\tilde{\Phi} (0)]^{-1}$; $a' = 0,214$; $t = 1,546$.

вой t :

$$t = \left\langle \frac{1}{1 - P_2 q + 2b^2 P_2 \beta \tilde{\Phi}(0) k^2} \right\rangle_{B_1 B'} \quad (26.11)$$

для $s = 3,00$, $t = 1,546$. Тогда после интегрирования (26.10) получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_2 &= \frac{1}{N'} \sum_{B_1 < k \leq B} \Delta g(k) e^{ikl} \approx \\ &\approx \frac{t}{N'} \sum_{B_1' < k < B'} (q - \beta \tilde{\Phi}(0) 2b^2 k^2) e^{ikl} = tq [\mathcal{Y}(x) - \mathcal{X}(x)]. \end{aligned} \quad (26.12)$$

Функция $\mathcal{Y}(x)$ задана формулой (26.8), а для $\mathcal{X}(x)$ имеем

$$\begin{aligned} \mathcal{X}(x) &= \frac{2b^2 \beta \tilde{\Phi}(0)}{q} \frac{1}{N'} \sum_{B_1 < h \leq B'} k^2 e^{ikh} = \\ &= \frac{2b^2 \beta \tilde{\Phi}(0)}{q} \frac{6}{\pi} \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi \frac{V}{N'} \int_{B_1}^{B'} \frac{\sin kl}{kl} k^4 dk. \end{aligned}$$

Переходим от l к $x = Uc'$. Учитывая, что $2b^2 B'^2 = 1$, $V/N' = c'^3$, $B' = \pi/c'$, интегрируем по k :

$$\begin{aligned} \mathcal{X}(x) &= \frac{3}{\pi^2} \frac{1}{q} \frac{1}{x^2} \left\{ \left[3 \frac{\sin \pi x}{\pi x} - \cos \pi x + 6 \frac{\cos \pi x}{(\pi x)^2} - 6 \frac{\sin \pi x}{(\pi x)^3} \right] - \right. \\ &\left. - \frac{1}{s^3} \left[3 \frac{\sin(\pi x/s)}{(\pi x/s)} - \cos \frac{\pi x}{s} + 6 \frac{\cos(\pi x/s)}{(\pi x/s)^2} - 6 \frac{\sin(\pi x/s)}{(\pi x/s)^3} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (26.13)$$

Выраженная через функции Бесселя, функция $\mathcal{X}(x)$ имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{X}(x) &= \frac{6}{\pi} \frac{1}{q} \frac{1}{\sqrt{2x^3}} \left[\mathcal{J}_{3/2}(\pi x) - \frac{2}{\pi x} \mathcal{J}_{5/2}(\pi x) - \right. \\ &\left. - \frac{1}{s^{3/2}} \mathcal{J}_{3/2}\left(\frac{\pi x}{s}\right) + \frac{2}{\pi x s^{3/2}} \mathcal{J}_{5/2}\left(\frac{\pi x}{s}\right) \right]. \end{aligned} \quad (26.14)$$

Возвращаемся к формуле (26.6). Для поправки, пропорциональной $\rho_{\mathbf{k}\rho-\mathbf{k}}$, имеем

$$\Delta_q = \frac{1}{4} \left(\frac{S_4}{(2\pi)^4} R_2^2 \right)^2 \left(\frac{6}{\pi} \right)^3 \sum_1 \mathcal{J}_1^2(x) tq [\mathcal{Y}(x) - \mathcal{X}(x)] \sum_{h < B_1} \rho_{\mathbf{k}\rho-\mathbf{k}} e^{ikh}. \quad (26.15)$$

Как следует из (26.8) и (26.13), $\mathcal{Y}(x)$ и $\mathcal{X}(x)$ являются четными функциями x , поэтому фурье-образ

$$\sum_1 e^{ikl} \mathcal{J}_1^2(x) [\mathcal{Y}(x) - \mathcal{X}(x)] \quad (26.16)$$

будет четной функцией k . Функции $\mathcal{Y}(x)$ и $\mathcal{X}(x)$ убывают пропорционально $1/x^2$, функция $\mathcal{J}_1^2(x)$ убывает как $1/x^4$, и, чтобы рассчитать в (26.16) свободный член и член, пропорциональный k^2 , достаточно

разложить e^{ikl} в ряд и найти

$$A_1 = \sum_1 \mathcal{F}_1^2(x) [\mathcal{Y}(x) - \mathcal{X}(x)]; \quad (26.17)$$

$$\mathcal{B}_1 = \sum_1 l^2 \cos^2 \theta \mathcal{F}_1^2(x) [\mathcal{Y}(x) - \mathcal{X}(x)].$$

Для поправки Δ_g получаем искомое выражение:

$$\Delta_g = \frac{1}{4} \left[\frac{S_4}{(2\pi)^4} R_2^2 \right]^2 t q \sum_{k < B_1} (A_1 - \mathcal{B}_1 k^2) \rho_k \rho_{-k}. \quad (26.18)$$

Определим постоянную \mathcal{B}_1 :

$$\mathcal{B}_1 = \sum_1 l^2 \cos^2 \theta [\delta_l - \mathcal{Y}(x)]^2 [\mathcal{Y}(x) - \mathcal{X}(x)]. \quad (26.19)$$

Величина \mathcal{B}_1 всегда положительна. Это следует из того, что формулу (26.12) для $\mathcal{F}_2 = t q [\mathcal{Y}(x) - \mathcal{X}(x)]$ можно представить в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_2 &= t \frac{6}{\pi} \frac{V}{N'} \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi \int_{B_1}^{B'} \frac{\sin kl}{kl} \beta \tilde{\Phi}(0) (\bar{q} - 2b^2 k^2) k^2 dk = \\ &= t \frac{6}{\pi} \frac{V}{N'} \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi B^3 \int_{1/s}^1 \frac{\sin \pi k x}{\pi k x} \beta \tilde{\Phi}(0) (\bar{q} - \kappa^2) \kappa^2 dx; \end{aligned}$$

при $x=0 \int_{1/s}^1 (\bar{q} - \kappa^2) \kappa^2 dx = 0$ по определению величины q .

Действительно, полагая в (26.8) и (26.13) $x=0$, находим

$$\mathcal{Y}(0) = \frac{3}{\pi^2} \frac{1}{x^2} \left[-\frac{4^2}{3!} + \frac{4^2}{2!} - \frac{1}{s} \left(-\frac{4^2}{s^2 3!} + \frac{4^2}{s^2 2!} \right) \right] = 1 - \frac{1}{s^3}; \quad y = \pi x;$$

$$\mathcal{X}(0) = \frac{3}{5} \bar{q}^{-1} \left(1 - \frac{1}{s^5} \right); \quad \bar{q} = \frac{3}{5} \left(1 - \frac{1}{s^3} \right)^{-1} \left(1 - \frac{1}{s^5} \right).$$

В результате $\mathcal{Y}(0) = \mathcal{X}(0)$.

При $x \neq 0$ в интеграле

$$\int_{1/s}^1 (q - \kappa^2) \kappa^2 \frac{\sin \pi k x}{\pi k x} d\kappa$$

область больших κ , где κ^4 преобладает над κ^2 , подавляется и $\mathcal{F}_2(x) > 0$.

Выполним прямой расчет величины \mathcal{B}_1 , суммируя в (26.19) по узлам исходной решетки I. Рассматривается конкретная кубическая решетка с периодом c' . Параметр деления s принят равным $s=3$, что близко к s^* . Число узлов, по которым будем производить суммирование, составляет $8s^3$. На рис. 22 представлена элементарная ячейка первой блочной решетки. Результаты расчетов для функций $\mathcal{Y}(x)$ и $\mathcal{X}(x)$ приведены в табл. 10.

На основании данных таблицы величину \mathcal{B}_1 , определяемую формулой (26.19), записываем в виде

$$\mathcal{B}_1 = c^2 \sum_x \mathcal{B}_1(x) \rho(x), \quad (26.20)$$

где

$$\mathcal{B}_1(x) = x^2 \cos^2 \theta \mathcal{Y}^2(x) [\mathcal{Y}(x) - \mathcal{Z}(x)],$$

$\rho(x)$ — число узлов, которые находятся на одинаковом расстоянии x от начала координат и отрезки x которых имеют один и тот же угол наклона θ к оси z .

Для рассматриваемого случая $s = 3$

$$\mathcal{B}_1 = 0,01319. \quad (26.21)$$

Интересно оценить вклад отдельных слоев решетки. Так, вклад в \mathcal{B}_1 от первой координационной сферы, связанной с расстояниями $x = 1, \sqrt{2}, \sqrt{3}$, составляет $\mathcal{B}_1^{(1)} = 0,0173$; от второй, объединяющей расстояния $x = 2, \sqrt{5}, \sqrt{6}, \sqrt{8}, \sqrt{9}, \sqrt{12}$, $\mathcal{B}_1^{(2)} = -0,0046$; от третьей для $x = 3, \sqrt{10}, \sqrt{11}, \dots, \sqrt{27}$ $\mathcal{B}_1^{(3)} = 0,0005$; суммарное значение $\mathcal{B}_1 = 0,01319$.

Из таблицы видно, что хорошую оценку величины \mathcal{B}_1 можно получить, рассматривая корреляции только между ближайшими соседями, т. е. при $x = 1$, в этом случае $\mathcal{B}_1 = 0,01204$.

Для величины \mathcal{A}_1 , определяемой формулой (26.17), имеем

$$\mathcal{A}_1 = \sum_x \mathcal{Y}_2^2(x) [\mathcal{Y}(x) - \mathcal{Z}(x)] = \sum_x \mathcal{A}(x) \rho(x) \approx 0,006. \quad (26.22)$$

Найденные значения \mathcal{A}_1 и \mathcal{B}_1 следует подставить в формулу (26.18) для поправки первого порядка Δ_g . Этой поправке, ради наглядности дальнейших рассуждений, поставим в соответствие диаграмму

a

$$\rho_k \text{ --- } \underbrace{\text{wavy line}}_{\text{a}} \text{ --- } \rho_k \quad (26.23)$$

Здесь волнистая линия сопоставляется с функцией $\mathcal{Y}(x)$, связанной с суммой \mathcal{J}_1 (см. формулу (26.7)), а сплошная линия — с функцией $t\bar{q} [\mathcal{Y}(x) - \mathcal{Z}(x)]$, которая согласно (26.10) и (26.12) связана с потенциалом $\Delta\Phi(k)$.

Выражение (26.18) представляет собой главный результат от поправки на усреднение потенциала в первом порядке теории возмущений. Он пропорционален величине $(S_4/(2\pi)^4)^2$.

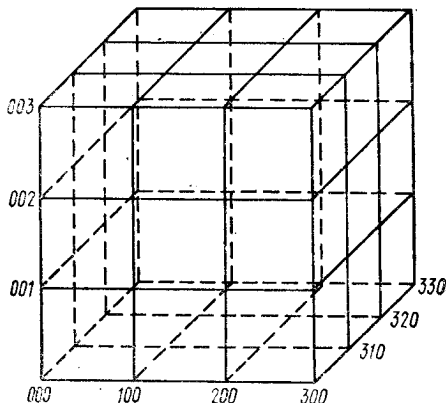


Рис. 22. Элементарная ячейка первой блочной решетки ($s = 3$).

x	$\mathcal{Y}(x)$	$\mathcal{L}(x)$	$\mathcal{Y}(x) - \mathcal{L}(x)$	$\mathcal{B}_1(x) = \mathcal{Y}'(x) [\mathcal{Y}(x) - \mathcal{L}(x)]$	$\cos^2 \theta$	$\rho(x)$	$\rho(x) \mathcal{B}_1(x)$
1	0,2708	0,1887	0,0821	$6,0218 \cdot 10^{-3}$	1	2	0,0120
$\sqrt{2}$	-0,0220	-0,1019	0,0789	$3,8323 \cdot 10^{-5}$	$1/2$	8	$3,0658 \cdot 10^{-4}$
$\sqrt{3}$	-0,1076	-0,1611	0,0536	$6,1997 \cdot 10^{-4}$	$1/3$	8	$4,9598 \cdot 10^{-3}$ 0,0173
2	-0,0991	-0,1024	$3,2828 \cdot 10^{-3}$	$2,5807 \cdot 10^{-4}$	1	2	$5,1615 \cdot 10^{-4}$
$\sqrt{5}$	-0,0593	-0,0382	-0,0210	$-7,4056 \cdot 10^{-5}$ $-2,9622 \cdot 10^{-4}$	$1/5$ $4/5$	8 8	$-5,9245 \cdot 10^{-4}$ $-2,3698 \cdot 10^{-3}$
$\sqrt{6}$	-0,0192	0,0172	-0,0365	$-1,3516 \cdot 10^{-5}$ $-5,4066 \cdot 10^{-5}$	$1/6$ $4/6$	16 8	$-2,1626 \cdot 10^{-4}$ $-4,3253 \cdot 10^{-4}$
$\sqrt{8}$	0,0216	0,0579	-0,0363	$-6,7693 \cdot 10^{-5}$	$4/8$	8	$-5,4155 \cdot 10^{-4}$
$\sqrt{9}$	0,0225	0,0500	-0,0275	$-1,3935 \cdot 10^{-5}$ $-5,5740 \cdot 10^{-5}$	$1/9$ $4/9$	8 16	$-1,1148 \cdot 10^{-4}$ $-8,9184 \cdot 10^{-4}$
$\sqrt{12}$	$-5,8406 \cdot 10^{-3}$	$-6,8692 \cdot 10^{-3}$	$1,0285 \cdot 10^{-3}$	$1,4034 \cdot 10^{-7}$	$4/12$	8	$1,1228 \cdot 10^{-6}$ 0,0127
3	0,0225	0,0500	-0,0275	$-1,2541 \cdot 10^{-4}$	1	2	$-2,5083 \cdot 10^{-4}$

10 5-339	$\sqrt{10}$	0,0156	0,0325	-0,0170	$-1,1111 \cdot 10^{-6}$	$1/_{10}$	8	$-3,2889 \cdot 10^{-5}$
					$-3,7000 \cdot 10^{-5}$	$9/_{10}$	8	$-2,9600 \cdot 10^{-4}$
	$\sqrt{11}$	$4,9831 \cdot 10^{-3}$	0,0120	$-6,9939 \cdot 10^{-3}$	$-1,7366 \cdot 10^{-7}$	$1/_{11}$	16	$-2,7786 \cdot 10^{-6}$
					$-1,5630 \cdot 10^{-6}$	$9/_{11}$	8	$-1,2504 \cdot 10^{-5}$
	$\sqrt{13}$	-0,0146	-0,0211	$6,4671 \cdot 10^{-3}$	$5,5288 \cdot 10^{-6}$	$4/_{13}$	8	$4,4231 \cdot 10^{-5}$
					$1,2440 \cdot 10^{-5}$	$9/_{13}$	8	$9,9519 \cdot 10^{-5}$
	$\sqrt{14}$	-0,0201	-0,0294	$9,2533 \cdot 10^{-3}$	$3,7578 \cdot 10^{-6}$	$1/_{14}$	16	$6,0125 \cdot 10^{-5}$
					$1,5651 \cdot 10^{-5}$	$4/_{14}$	16	$2,4050 \cdot 10^{-4}$
					$3,3820 \cdot 10^{-5}$	$9/_{14}$	16	$5,4113 \cdot 10^{-4}$
	$\sqrt{17}$	-0,0170	-0,0229	$5,8752 \cdot 10^{-3}$	$6,8368 \cdot 10^{-6}$	$4/_{17}$	16	$1,0939 \cdot 10^{-4}$
					$1,5383 \cdot 10^{-5}$	$9/_{17}$	8	$1,2306 \cdot 10^{-4}$
	$\sqrt{18}$	-0,0116	-0,0144	$2,8289 \cdot 10^{-3}$	$3,4356 \cdot 10^{-6}$	$9/_{18}$	8	$2,7484 \cdot 10^{-5}$
	$\sqrt{19}$	$-5,4359 \cdot 10^{-3}$	$-5,1996 \cdot 10^{-3}$	$-2,3628 \cdot 10^{-4}$	$-6,9820 \cdot 10^{-9}$	$1/_{19}$	8	$-5,5856 \cdot 10^{-8}$
					$-6,2838 \cdot 10^{-8}$	$9/_{19}$	16	$-1,0954 \cdot 10^{-6}$
	$\sqrt{22}$	0,0104	0,0165	$-6,1066 \cdot 10^{-3}$	$-2,6354 \cdot 10^{-6}$	$4/_{22}$	8	$-2,1083 \cdot 10^{-5}$
					$-5,9297 \cdot 10^{-6}$	$9/_{22}$	16	$-9,4875 \cdot 10^{-5}$
	$\sqrt{27}$	0,0118	0,0132	$-1,3608 \cdot 10^{-3}$	$-1,7060 \cdot 10^{-6}$	$9/_{27}$	8	$-1,3648 \cdot 10^{-5}$

Примечание. В таблице приведены данные к прямому расчету поправки $\Delta_g = -\frac{1}{4} \left(\frac{S_1}{(2\pi)^4} R_2^2 \right)^2 \sum_{\mathbf{k} < B_1} \mathcal{B}_{i,k^2} \rho_{\mathbf{k} \rho - \mathbf{k}}$.

Чтобы получить весь вклад, пропорциональный множителю $[S_4/(2\pi)^4]^2$, следует рассмотреть соответствующие диаграммы *a* и *b* диаграммы во втором и третьем порядках теории возмущений:

$$\text{---} \circ \text{---} \quad \text{---} \circ \text{---} \quad . \quad (26.24)$$

Они возникают в выражении (14.21) следующим образом. Представим оператор (14.21) в виде

$$\begin{aligned} e^{\hat{\Delta}} I(\tilde{v}_1) &= \left(1 + \hat{\Delta} + \frac{1}{2} \hat{\Delta}^2 + \frac{1}{3!} \hat{\Delta}^3 + \dots \right) I(\tilde{v}_1) = \\ &= \left(1 + \Delta_1 + \frac{1}{2} \hat{\Delta} \Delta_1 + \frac{1}{3!} \hat{\Delta}^2 \Delta_1 \right) I_1(\tilde{v}_1), \end{aligned} \quad (26.25)$$

где поправка Δ_1 задана формулами (14.26) и (14.31). Для слагаемого $\hat{\Delta} \Delta_1$ согласно (14.13) и (14.31) имеем

$$\begin{aligned} \hat{\Delta} \Delta_1 &= \frac{1}{2} \frac{1}{2} \sum_{l_1 l_2} \left(\frac{1}{2\pi i} \right)^2 \Delta \Phi(l_1 l_2) \frac{\partial^2}{\partial \tilde{v}_1 \partial \tilde{v}_2} \frac{1}{2} \sum_{l_1 l_2} \Delta \Phi(l_1 l_2) \left(\frac{S_4}{3!} \right)^2 \tilde{v}_1^3 \tilde{v}_2^3 = \\ &= \left(\frac{1}{2} \right)^2 \sum_{l_1 l_2} \Delta \Phi(l_1 l_2) \Delta \Phi(l_1 l_2) \left(\frac{S_4}{2!} \right)^2 \tilde{v}_1^2 \tilde{v}_2^2 \frac{1}{(2\pi i)^4}. \end{aligned} \quad (26.26)$$

После перехода от \tilde{v}_1 к v_k получаем

$$\begin{aligned} \hat{\Delta} \Delta_1 &= \frac{1}{(2\pi)^4} \left(\frac{1}{2} \right)^2 \sum_{l_1 l_2} [\Delta \Phi(l_1 l_2)]^2 \left(\frac{S_4}{2!} \right)^2 \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} v_{k_1} v_{k_2} v_{k_3} v_{k_4} \times \\ &\times \frac{1}{N^2} \exp [i(k_1 + k_2) l_1 + i(k_3 + k_4) l_2]. \end{aligned} \quad (26.27)$$

Для слагаемого $\frac{1}{3!} (\hat{\Delta}^2 \Delta_1)$ аналогичным образом находим

$$\begin{aligned} \frac{1}{3!} \hat{\Delta}^2 \Delta_1 &= \frac{1}{3!} \frac{1}{2} \sum_{l_1} \sum_{l_2} [\Delta \Phi(l_1 l_2)]^3 \times \\ &\times S_4^2 \left(\frac{1}{2\pi i} \right)^6 \sum_{k_1 k_2} v_{k_1} v_{k_2} \exp (i k_1 l_1 + i k_2 l_2). \end{aligned} \quad (26.28)$$

Теперь подобно тому, как это сделано в (14.32), каждое v_k заменяем производной $\frac{1}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \rho_k}$ и при выполнении дальнейших выкладок приходим к исходному для этого параграфа выражению (26.5), которое переписываем в виде

$$\begin{aligned} Z &= c \mathcal{N}_1 \int \exp \left\{ \sum_{h < B_1} [\beta \tilde{\Phi}(h) - \beta \tilde{\Phi}(B_1, B)] \rho_k \rho_{-k} \right\} \times \\ &\times (1 + \hat{\Delta}_g + \hat{\Delta}_2 + \hat{\Delta}_3 + \dots) \times \\ &\times \exp \left(-\frac{1}{2} R_2 \sum_k \rho_k \rho_{-k} - \frac{1}{4!} \frac{1}{N} \sum_{k_1 \dots k_4} R_4 \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} \right) (d\rho)^N, \end{aligned} \quad (26.29)$$

Потенциал $\Delta\Phi(l)$ по определению равен $\Delta\Phi(l) = \frac{1}{N} \sum_{B_1 < k \leq B'} \Delta\tilde{\Phi}(k) e^{ikl}$.

По формулам (26.3) $\Delta\tilde{\Phi}(k)$ заменяем на $\Delta\tilde{g}(k)$; далее при расчеге суммы берем приближение (26.11) (что вовсе не обязательно) и вместо $\Delta\Phi(l)$ подставляем результат (26.12). Для поправки Δ_2 получаем выражение

$$\Delta_2 = -\frac{1}{4} \left[\frac{S_1}{(2\pi)^4} \right]^2 R_2^3 (tq)^2 (c')^2 \mathcal{B}_2 \sum_k k^2 \rho_k \rho_{-k}, \quad (26.35)$$

где

$$\mathcal{B}_2 = \sum_x x^2 \cos^2 \theta \mathcal{Y}(x) [\mathcal{Y}(x) - \mathcal{X}(x)]^2.$$

Аналогичным путем для диаграммы с берем в интеграле (26.29) вклады от оператора $\tilde{\Delta}_3$, описываемого формулой (26.34), и приходим к выражению

$$\Delta_3 = -\frac{1}{12} \left[\frac{S_1}{(2\pi)^4} \right]^2 R_2^2 \sum_k k^2 \rho_k \rho_{-k} \sum_l (\Delta\Phi(l))^3 l^2 \cos^2 \theta. \quad (26.36)$$

С помощью преобразований (26.2), (26.3) и упрощений (26.11) поправка Δ_3 в окончательной форме приобретает вид

$$\Delta_3 = -\frac{1}{12} \left[\frac{S_1}{(2\pi)^4} \right]^2 R_2^2 (tq)^3 (c')^2 \mathcal{B}_3 \sum_k k^2 \rho_k \rho_{-k}, \quad (26.37)$$

где

$$\mathcal{B}_3 = \sum_x x^2 \cos^2 \theta [\mathcal{Y}(x) - \mathcal{X}(x)]^3.$$

Значения сумм \mathcal{B}_2 и \mathcal{B}_3 и поправок Δ_2 и Δ_3 находим из табл. 11: при $s = 3$

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_2 &= \sum_x \rho(x) \mathcal{B}_2(x) = 1,488 \cdot 10^{-4}, \\ \mathcal{B}_3 &= \sum_x \rho(x) \mathcal{B}_3(x) = 2,717 \cdot 10^{-4}. \end{aligned} \quad (26.38)$$

Сравнивая полученные значения с (26.21), видим, что и \mathcal{B}_2 , и \mathcal{B}_3 существенно меньше \mathcal{B}_1 .

Таким образом, рассчитаны вклады от диаграмм



Здесь волнистая линия сопоставляется с функцией $\mathcal{Y}(x)$, а сплошная — с потенциалом $\Delta g(x)$ или $t\bar{q}[\mathcal{Y}(x) - \mathcal{X}(x)]$. Диаграммы представляют собой сумму поправок на усреднение потенциала первого, второго и третьего порядков по теории возмущений. Выбранные слабые пропорциональны $[S_4/(2\pi)^4]^2$ и соответственно коэффициентам

x	$\mathcal{B}_2(x) = x^2 \cos^2 \theta \times$ $\times \mathcal{F}(x) (\mathcal{F}(x) -$ $- \mathcal{L}(x))^2$	$\rho(x) \mathcal{B}_2(x)$	$\mathcal{B}_3(x) = x^2 \cos^2 \theta \times$ $\times (\mathcal{F}(x) - \mathcal{L}(x))^3$	$\rho(x) \mathcal{B}_3(x)$
1	$1,8254 \cdot 10^{-3}$	$3,6508 \cdot 10^{-3}$	$5,5333 \cdot 10^{-4}$	$1,1066 \cdot 10^{-3}$
$\sqrt{2}$	$-1,3732 \cdot 10^{-4}$	$-1,0986 \cdot 10^{-3}$	$4,9208 \cdot 10^{-4}$	$3,9366 \cdot 10^{-3}$
$\sqrt{3}$	$-3,0870 \cdot 10^{-4}$	$-2,4696 \cdot 10^{-3}$ $8,2585 \cdot 10^{-5}$	$1,5370 \cdot 10^{-4}$	$1,2297 \cdot 10^{-3}$ $6,2729 \cdot 10^{-3}$
2	$-4,2732 \cdot 10^{-6}$	$-8,5463 \cdot 10^{-6}$	$1,4610 \cdot 10^{-7}$	$2,8302 \cdot 10^{-7}$
$\sqrt{5}$	$-2,6290 \cdot 10^{-5}$ $-1,0516 \cdot 10^{-4}$	$-2,1032 \cdot 10^{-4}$ $-8,4130 \cdot 10^{-4}$	$-9,3333 \cdot 10^{-6}$ $-3,7333 \cdot 10^{-5}$	$-7,4667 \cdot 10^{-5}$ $-2,9867 \cdot 10^{-4}$
$\sqrt{6}$	$-2,5609 \cdot 10^{-5}$ $-1,0243 \cdot 10^{-4}$	$-4,0974 \cdot 10^{-4}$ $-8,1949 \cdot 10^{-4}$	$-4,8519 \cdot 10^{-5}$ $-1,9408 \cdot 10^{-4}$	$-7,7631 \cdot 10^{-4}$ $-1,5526 \cdot 10^{-3}$
$\sqrt{8}$	$1,1403 \cdot 10^{-4}$	$9,1224 \cdot 10^{-4}$	$-1,9208 \cdot 10^{-4}$	$-1,5367 \cdot 10^{-3}$
$\sqrt{9}$	$1,7012 \cdot 10^{-5}$ $6,8048 \cdot 10^{-5}$	$1,3609 \cdot 10^{-4}$ $1,0888 \cdot 10^{-3}$	$-2,0768 \cdot 10^{-5}$ $-8,3073 \cdot 10^{-5}$	$-1,6614 \cdot 10^{-4}$ $-1,3292 \cdot 10^{-3}$
$\sqrt{12}$	$-2,4714 \cdot 10^{-8}$	$-1,9771 \cdot 10^{-7}$ $-1,5250 \cdot 10^{-4}$	$4,3522 \cdot 10^{-9}$	$3,4817 \cdot 10^{-8}$ $-5,7340 \cdot 10^{-3}$
3	$1,5311 \cdot 10^{-4}$	$3,0621 \cdot 10^{-4}$	$-2,0768 \cdot 10^{-5}$	$-4,1536 \cdot 10^{-5}$
$\sqrt{10}$	$4,4783 \cdot 10^{-6}$ $4,0305 \cdot 10^{-5}$	$3,5826 \cdot 10^{-5}$ $3,2244 \cdot 10^{-4}$	$-4,8763 \cdot 10^{-6}$ $-4,3905 \cdot 10^{-5}$	$-3,9026 \cdot 10^{-5}$ $-3,5124 \cdot 10^{-4}$
$\sqrt{11}$	$2,4374 \cdot 10^{-7}$ $2,1937 \cdot 10^{-6}$	$3,9000 \cdot 10^{-6}$ $1,7550 \cdot 10^{-5}$	$-3,4210 \cdot 10^{-7}$ $-3,0789 \cdot 10^{-6}$	$-5,4737 \cdot 10^{-6}$ $-2,4631 \cdot 10^{-5}$
$\sqrt{13}$	$-2,4457 \cdot 10^{-6}$ $-5,5029 \cdot 10^{-6}$	$-1,9566 \cdot 10^{-5}$ $-4,4023 \cdot 10^{-5}$	$1,0819 \cdot 10^{-6}$ $2,4342 \cdot 10^{-6}$	$8,6551 \cdot 10^{-6}$ $1,9474 \cdot 10^{-5}$
$\sqrt{14}$	$-1,7255 \cdot 10^{-6}$ $-6,9020 \cdot 10^{-6}$ $-1,5529 \cdot 10^{-5}$	$-2,7608 \cdot 10^{-5}$ $-1,1043 \cdot 10^{-4}$ $-2,4847 \cdot 10^{-4}$	$7,9230 \cdot 10^{-7}$ $3,1692 \cdot 10^{-6}$ $7,1307 \cdot 10^{-6}$	$1,2677 \cdot 10^{-5}$ $5,0707 \cdot 10^{-5}$ $1,1409 \cdot 10^{-4}$
$\sqrt{17}$	$-2,3550 \cdot 10^{-6}$ $-5,2987 \cdot 10^{-6}$	$-3,7680 \cdot 10^{-5}$ $-4,2390 \cdot 10^{-5}$	$8,1118 \cdot 10^{-7}$ $1,8252 \cdot 10^{-6}$	$1,2979 \cdot 10^{-5}$ $1,4601 \cdot 10^{-5}$
$\sqrt{18}$	$-8,3667 \cdot 10^{-7}$	$-6,6934 \cdot 10^{-6}$	$2,0376 \cdot 10^{-7}$	$1,6300 \cdot 10^{-6}$
$\sqrt{19}$	$-3,0349 \cdot 10^{-10}$ $-2,7314 \cdot 10^{-9}$	$-2,4276 \cdot 10^{-9}$ $-4,3702 \cdot 10^{-8}$	$-1,3192 \cdot 10^{-11}$ $-1,1873 \cdot 10^{-10}$	$-1,0553 \cdot 10^{-10}$ $-1,8996 \cdot 10^{-9}$
$\sqrt{22}$	$1,5494 \cdot 10^{-6}$ $3,4861 \cdot 10^{-6}$	$1,2395 \cdot 10^{-5}$ $5,5777 \cdot 10^{-5}$	$-9,1087 \cdot 10^{-7}$ $-2,0495 \cdot 10^{-6}$	$-7,2870 \cdot 10^{-6}$ $-3,2791 \cdot 10^{-5}$
$\sqrt{27}$	$1,9669 \cdot 10^{-7}$	$1,5736 \cdot 10^{-6}$	$-2,2678 \cdot 10^{-8}$	$-1,8142 \cdot 10^{-7}$

Примечание. Значения $\rho(x)$ приведены в табл. 10.

R_2^4 , R_2^3 и R_2^2 . Окончательная формула имеет вид

$$\Delta = \Delta_g + \Delta_2 + \Delta_3 = -\frac{1}{4} \left(\frac{S_4}{(2\pi)^4} \right)^2 [R_2^4 t q \mathcal{B}_1 + R_2^3 (tq)^2 \mathcal{B}_2 + \\ + R_2^2 (tq)^3 \mathcal{B}_3] (c')^2 \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}, \quad (26.39)$$

где

$$\frac{S_4}{(2\pi)^4} = s^3 P_4; \quad P_4 = \frac{6}{s^3} \frac{1}{a_4} \mathcal{L}(z); \\ q = \beta \bar{\Phi}(0) 2b^2 (B')^2 \bar{q}; \quad R_2 = \frac{\sqrt{12}}{\sqrt{P_4}} \mathcal{H}(\beta); \\ \mathcal{B}_1 = \sum_x x^2 \cos^2 \theta \mathcal{Y}^2(x) [\mathcal{Y}(x) - \mathcal{X}(x)]; \quad (26.40) \\ \mathcal{B}_2 = \sum_x x^2 \cos^2 \theta \mathcal{Y}(x) [\mathcal{Y}(x) - \mathcal{X}(x)]^2; \\ \mathcal{B}_3 = \sum_x x^2 \cos^2 \theta [\mathcal{Y}(x) - \mathcal{X}(x)]^3.$$

Полученные выражения возникли в результате интегрирования в первом слое фазового пространства КР. При интегрировании во втором слое получится подобное выражение, только вместо S_4 , R_2 , β , z и c' будут соответственно $S_4^{(n)}$, $R_2^{(n)}$, $\beta^{(n)}$, $z^{(n)}$ и c_1 . Тогда поправка типа $\sum_{\mathbf{k}} k^2 \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}$, связанная с усреднением потенциала в n -м слое, будет определяться по формуле

$$\Delta^{(n)} = -\frac{1}{4} \left[\frac{S_4^{(n)}}{(2\pi)^4} \right]^2 [(R_2^{(n)})^4 (t^{(n)} q^{(n)}) \mathcal{B}_1^{(n)} + (R_2^{(n)})^3 (t^{(n)} q^{(n)})^2 \mathcal{B}_2^{(n)} + \\ + (R_2^{(n)})^2 (t^{(n)} q^{(n)})^3 \mathcal{B}_3^{(n)}] c_n^2 \sum_{h \leq B_n} k^2 \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}. \quad (26.41)$$

В общем случае поправки $\Delta^{(1)}$, $\Delta^{(2)}$, ..., $\Delta^{(n)}$, ... разные. В случаях $T > T_c$ и $T < T_c$ при больших n , когда критический режим прекращает свое существование и плотность меры в системе блочных гамильтонианов становится гауссовой, поправки на усреднение потенциала и на переход на блочную решетку исчезают. Вместо них появляются новые поправки, связанные с вириальным разложением для свободной энергии. Исключением является случай $T = T_c$. В критической точке КР имеет место для всех n , а при достаточно больших n аргументы $z^{(n)}$ и $\beta^{(n)}$ становятся равными их значениям в неподвижной точке:

$$\beta^{(n)} = \beta^*; \quad z^{(n)} = z^*.$$

Тогда для величин, входящих в состав $\Delta^{(n)}$ в (26.41), получаем

$$P_4^{(n)} = \frac{6}{s^3} \frac{s^{4n}}{u^*} \mathcal{L}(z^*); \quad u^* = \bar{u} (\beta \bar{\Phi}(0))^2;$$

$$R_2^{(n)} = \left(\frac{12}{P_4^{(n)}} \right)^{1/2} \mathcal{H}(\mathfrak{Z}^*); \quad \mathcal{H}(\mathfrak{Z}^*) = \frac{1}{4} (s^3 \mathfrak{Z}_0)^{-1/2};$$

$$q^{(n)} = 2b^2 B_n^2 \beta \bar{\Phi}(0) \bar{q} = 2b^2 B'^2 \beta \bar{\Phi}(0) \bar{q} s^{-2n}; \quad (26.42)$$

$$c_n^2 = c'^2 s^{2n};$$

$$P_4^{(n)} = \frac{6}{s^3} \frac{\mathcal{L}(z^*)}{\bar{u} \beta \bar{\Phi}(0)} s^{4n}; \quad S_4^{(n)} = (2\pi)^4 s^3 P_4^{(n)}.$$

В результате

$$\Delta^{(n)} = -\frac{1}{2} \alpha \sum_{\mathbf{k}} 2b^2 \beta \bar{\Phi}(0) k^2 \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}, \quad (26.43)$$

где

$$\alpha = \frac{9}{32} (\mathfrak{Z}_0)^{-2} t^* \bar{q} \pi^2 \mathcal{B}_1 +$$

$$+ \frac{1}{2} \left(\frac{3}{4} \right)^{3/2} \pi^2 (\mathfrak{Z}_0)^{-3/2} \left[\frac{6\mathcal{L}(z^*)}{\bar{u}} \right]^{1/2} t^{*2} \bar{q}^2 \mathcal{B}_2 +$$

$$+ \frac{9}{4} \pi^2 \frac{\mathcal{L}(z^*)}{\bar{u}} \frac{1}{\mathfrak{Z}_0} t^{*3} \bar{q}^3 \mathcal{B}_3. \quad (26.44)$$

В формулах (26.21) и (26.38) приведены значения \mathcal{B}_1 , \mathcal{B}_2 и \mathcal{B}_3 для $s = 3$, здесь $\bar{q} = 0,620$; $t = 1,546$; $z^* = 0,029$; $\mathcal{L}(z^*) = 0,216$; $\bar{u} = 0,626$; $\mathfrak{Z}^* = s^3 \mathfrak{Z}_0$; $\mathfrak{Z}_0 = 0,924$. Вычислим α :

$$\alpha = 3,118 \cdot 0,013 + 4,773 \cdot 1,5 \cdot 10^{-4} +$$

$$+ 7,286 \cdot 2,717 \cdot 10^{-4} = 0,041 + 0,0007 + 0,0020 = 0,044. \quad (26.45)$$

Следовало бы еще учесть связанные с переходом на блочную решетку поправки, порождаемые функцией $\Omega(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4)$, которая определена выражениями (14.38), (14.39), (14.41) и (14.44). Легко убедиться, что поправки первого порядка по Δ_4 в (14.42) равны нулю. Кроме того, обращаются в нуль те поправки второго порядка, которые связаны с множителем $S_4^2 R_2^5$. Вследствие этого поправку, связанную с переходом на блочную решетку, будем считать несущественной.

§ 27. ИЗМЕНЕНИЯ В РЕКУРРЕНТНЫХ УРАВНЕНИЯХ И ИХ РЕШЕНИЯХ В СВЯЗИ С УЧЕТОМ ПОПРАВОК НА УСРЕДНЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА

Найдем новую форму рекуррентных уравнений (17.5), (17.6), возникающую при учете поправок. Возвратимся к процессу интегрирования статистической суммы в первом слое КП $\rho_{\mathbf{k}}$, $B_1 < k \leq B'$. Начиная с формулы (14.46), учтем поправки $\hat{\Delta}_1$, $\hat{\Delta}_2$, $\hat{\Delta}_3$, ... и пренебрежем поправками $\hat{\Delta}_4$, связанными с переходом на блочную решетку. Получим формулы (14.56)–(14.58), в которые следует подставить новое значение $d^{(1)}(k)$; согласно (14.51), (14.53) и (26.44) оно теперь

примет вид

$$\bar{d}^{(1)}(k) = d^{(1)}(k) + \alpha_1 2b^2 \beta \bar{\Phi}(0) k^2 = a_2^{(1)} - \beta \bar{\Phi}(0) (1 - 2b^2 (1 + \alpha_1) k^2), \quad (27.1)$$

где α_1 — значение поправки α для первого слоя. При $T \neq T_c$ α_1 отлично от α . При интегрировании во втором слое в качестве $d^{(1)}(B_2 B_1)$ берется уже величина

$$\bar{a}^{(1)}(B_2 B_1) = a_2^{(1)} - \beta \bar{\Phi}(0) \left(1 - 2b^2 \frac{1 + \alpha_1}{s^2} \bar{q} \right). \quad (27.2)$$

Новое значение $z^{(1)}$ определяется формулой

$$\bar{z}^{(1)} = \frac{3}{4} \frac{[\bar{d}^{(1)}(B_2 B_1)]^2}{a_4^{(1)}}. \quad (27.3)$$

После интегрирования во втором слое снова появляется поправка типа (26.43):

$$\Delta^{(2)} = -\frac{1}{2} \alpha_2 \sum_{k < B_2} 2b^2 \beta \Phi(0) (1 + \alpha_1) k^2 \rho_{k,0-k}; \quad (27.4)$$

она прибавляется к слагаемому

$$-\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_2} \bar{d}^{(2)} \rho_{k,0-k} = -\frac{1}{2} \sum_{k < B_1} [\bar{a}_2^{(2)} - \beta \tilde{\Phi}(0) (1 - 2b^2 (1 + \alpha_1) k^2)] \rho_{k,0-k}$$

и приводит к новому значению коэффициента при $\rho_{k,0-k}$:

$$\bar{a}^{(2)} = \bar{a}_2^{(2)} - \beta \tilde{\Phi}(0) [1 - 2b^2 (1 + \alpha_1) (1 + \alpha_2) k^2]. \quad (27.5)$$

При интегрировании в третьем слое берется новое среднее значение:

$$\bar{a}^{(2)}(B_3 B_2) = \bar{a}_2^{(2)} - \beta \tilde{\Phi}(0) \left[1 - 2b^2 \frac{(1 + \alpha_1)(1 + \alpha_2)}{s^4} \bar{q} \right]. \quad (27.6)$$

Продолжая интегрирование, определяем поправки вплоть до n -го слоя. Приходим к средним (17.4), с помощью которых записываются рекуррентные соотношения (17.5) и (17.6). Эти средние принимают вид

$$\begin{aligned} \bar{d}^{(n)}(B_{n+1} B_n) &= a_2^{(n)} - \beta \tilde{\Phi}(0) + \frac{q_n}{s^{2n}}; \\ \bar{a}^{(n+1)}(B_{n+2} B_{n+1}) &= a_2^{(n+1)} - \beta \tilde{\Phi}(0) + \frac{q_{n+1}}{s^{2(n+1)}}, \end{aligned} \quad (27.7)$$

где

$$\begin{aligned} q_n &= (1 + \alpha_n) (1 + \alpha_{n-1}) \dots (1 + \alpha_1) q; \\ q_{n+1} &= (1 + \alpha_{n+1}) q_n. \end{aligned}$$

В близкой к критической точке окрестности все коэффициенты $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ можно считать равными между собой. В этом случае в (27.7) вместо q_n / s^{2n} можно было бы писать

$$q_n / s^{2n} = q / s^{2n}, \quad (27.8)$$

где

$$\xi = s/\sqrt{1+\alpha} \simeq se^{-\alpha/2} = se^{-\alpha(\ln s/2 \ln s)} = s^{1-\eta/2}; \quad \eta = \alpha/\ln s; \quad (27.9)$$

при $s = 3$ $\eta = 0,040$.

При $T = T_c$ η является универсальным параметром [18, 47] и называется малым критическим индексом. Для рекуррентных уравнений, связывающих между собой $d^{(n+1)}$ ($B_{n+2}B_{n+1}$) и $d^{(n)}$ ($B_{n+1}B_n$), $a_i^{(n+1)}$ и $a_i^{(n)}$, будем иметь те же формулы (17.5) и (17.6), только вместо Δ_n следует подставить значение

$$\Delta'_n = \frac{q_n}{s^{2n}} \left(1 - \frac{1 + \alpha_{n+1}}{s^2} \right), \quad (27.10)$$

где q_n задано в (27.7). Если все α_n разные, решить рекуррентные уравнения с помощью подстановки (17.10) нельзя. Следует предположить, что существует область температур, внутри которой все $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ можно считать одинаковыми, равными некоторому α . Тогда согласно (27.8)

$$\Delta'_n = \frac{q}{\xi^{2n}} \left(1 - \frac{1}{\xi^2} \right), \quad (27.11)$$

и решения модифицированной системы уравнений (17.5) и (17.6), содержащей вместо Δ_n (см. (17.7)) величину Δ'_n , описываемую (27.11), можно искать с помощью модифицированной подстановки (см. (17.10))

$$d^{(n)}(B_{n+1}B_n) = \frac{r_n + q}{\xi^{2n}}; \quad a_i^{(n)} = \frac{u_n}{\xi^{4n}}. \quad (27.12)$$

Для r_n и u_n получаем систему уравнений

$$\begin{aligned} r_{n+1} &= \xi^2(r_n + q) \mathcal{N}^{(n)}(z^{(n)}) - \xi^2 q; \\ u_{n+1} &= \frac{\xi^4}{s^3} \mathcal{G}^{(n)}(z^{(n)}) u_n, \end{aligned} \quad (27.13)$$

которая должна заменить систему уравнений (17.13). Уравнение (17.15) для неподвижной точки z^* приобретает вид

$$\xi^4 s^{-3} \mathcal{G}^{(n)}(z^{(n)}) = 1. \quad (27.14)$$

Таким образом, z^* является функцией от s и ξ . В настоящей работе будем считать, что величина z^* остается такой же, как и в уравнении (17.15), и что результаты (17.16) и (17.17) справедливы и в случае (27.13). Другими словами, не будем принимать во внимание смещение неподвижной точки r^* , u^* , связанное с заменой s на ξ . Матричные элементы R_{11} , R_{22} , R_{12} и R_{21} , задаваемые формулами (17.20), будут пропорциональны: $\xi^2 - (R_{11} \text{ и } R_{12})$ и $\xi^4 s^{-3} - (R_{21} \text{ и } R_{22})$. В связи с этим собственное значение E_1 немного уменьшается: $E_1 \rightarrow E'_1$; здесь

$$E'_1 = E_1 s^{-\eta}. \quad (27.15)$$

Учет поправки α приводит и к сдвигу критической точки. Эти детали, однако, здесь учитываться не будут. Будем считать, что поправка (26.43) влияет главным образом на замену общих решений (17.38), (17.39) выражениями

$$d^{(n)}(B_{n+1}B_n) = \frac{r^* + c_1 E_1'^n - c_2 \mathcal{R} E_2^n + q}{\xi^{2n}} ;$$

$$a_i^{(n)} = \frac{u^* + c_1 \mathcal{R}' E_1'^n + c_2 E_2'^n}{\xi^{4n}} .$$
(27.16)

На этом приближенный учет поправок при усреднении потенциала окончим. Естественно, что расчеты можно выполнить более тщательно, например, вычислить экранированный потенциал Δq , заданный формулой (26.3), найти смещения неподвижных точек и т. д.

**СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ И ДРУГИЕ
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ СИСТЕМЫ**

§ 28. СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ СИСТЕМЫ ПРИ $T \gg T_c$

Вычисление свободной энергии является обычно конечной целью исследований в равновесной статистической физике, основанной на каноническом распределении Гиббса. Имея явное выражение для свободной энергии как функции температуры, плотности и внешнего поля, можно легко найти все термодинамические параметры и корреляционные функции системы (см. § 2).

Как известно, свободная энергия системы равна логарифму от статистической суммы:

$$F = -kT \ln Z. \quad (28.1)$$

В предыдущих главах было выполнено интегрирование по всем слоям фазового пространства коллективных переменных (КП) и получено полное выражение для статистической суммы системы, которая равна произведению парциальных статистических сумм отдельных слоев:

$$Z = C \mathfrak{M}_1 \mathfrak{M}_2 \dots \mathfrak{M}_n \dots \quad (28.2)$$

Согласно (14.54)¹⁵

$$C = 2^N [Q(\mathfrak{M}_2 \mathfrak{M}'_4)]^{N'} \sqrt{2}^{N'-1}, \quad (28.3)$$

где 2^N — статистическая сумма идеальной системы спинов;

$$Q(\mathfrak{M}_2 \mathfrak{M}_4) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\mathfrak{Z}'/\mathfrak{M}_2} e^{\mathfrak{Z}' K_{1/4}(\mathfrak{Z}')}$$

— статистический вес фазового пространства КП. В формуле (28.2) \mathfrak{M}_1 — парциальная статистическая сумма первого фазового слоя КП (см. (14.55)):

$$\mathfrak{M}_1 = \left[Q \left(\frac{d(B_1 B)}{(2\pi)^2}, \frac{a_4}{(\pi^2)^4} \right) \right]^{N'} [Q(P_2 P_4)]^{N_1} \sqrt{2}^{N_1 - N'}. \quad (28.4)$$

¹⁵ В выражении для $Q(\mathfrak{M}_2 \mathfrak{M}_4)$ \mathfrak{M}_4 следует заменить на \mathfrak{M}'_4 :

$$|\mathfrak{M}'_4| = S_0^{-3} |\mathfrak{M}_4| = 2(\pi \sqrt{2})^{-3}; \quad \mathfrak{Z}' = \frac{3}{8} (\sqrt{2}\pi)^3;$$

$s_0 = \pi \sqrt{2}$ (см. § 16).

По формуле (12.10) получаем

$$Q \left[\frac{d(B_1 B)}{(2\pi)^2}, \frac{a_4}{(2\pi)^4} \right] = \sqrt[4]{\frac{12}{a_4}} z e^{z K_{1/4}}(z); \quad z = \frac{3}{4} \frac{(d(B_1 B))^2}{a_4}; \quad (28.5)$$

$$Q(P_2 P_4) = \frac{1}{2\pi} \sqrt[4]{\frac{12}{P_4}} \mathfrak{B} e^{3 K_{1/4}}(\mathfrak{B}); \quad \mathfrak{B} = \frac{3}{4} P_2^2 / P_4,$$

\mathfrak{N}_n — парциальная статистическая сумма n -го слоя, заданная формулой (15.12), аналогичной формулам (28.5):

$$\mathfrak{N}_n = \left[Q \left(\frac{d^{n-1}(B_{n+1} B_n)}{(2\pi)^2}, \frac{a_4^{(n-1)}}{(2\pi)^4} \right) \right]^{N_{n-1}} [Q(P_2^{(n-1)}, P_4^{(n-1)})]^{N_n} \times \\ \times \sqrt[4]{2^{N_n - N_{n-1}}}. \quad (28.6)$$

Выражения для $Q(d^{(n-1)} \dots)$ и $Q(P_2^{(n-1)} \dots)$ преобразуем, выразив $P_2^{(n-1)}$ и $P_4^{(n-1)}$ через $d^{(n-1)}$ и $a_4^{(n-1)}$:

$$Q(d^{(n-1)} \dots) = \sqrt[4]{\frac{12z^{(n-1)}}{a_4^{(n-1)}}} \exp z^{(n-1)} K_{1/4}(z^{(n-1)}); \quad (28.7)$$

$$Q(P_2^{(n-1)} \dots) = \pi^{-1} \frac{\sqrt[4]{a_4^{(n-1)}}}{[\sqrt[4]{12 \mathcal{K}(z^{(n-1)})}]^{1/2}} \sqrt[4]{3^{(n-1)}} e^{3^{(n-1)}} K_{1/4}(3^{(n-1)})$$

(см. формулы (14.43) и (14.20)). Теперь можно раскрыть произведение парциальных статистических сумм (28.2) и рассчитать свободную энергию системы (28.1).

Представим F в виде суммы трех слагаемых:

$$F = F_0 + F_{\text{КР}} + F_{\text{ПГР}}, \quad (28.8)$$

где

$$F_0 = -kT \ln C \quad (28.9)$$

(постоянная C задана формулой (28.3));

$$F_{\text{КР}} = \sum_{n=1}^{n_{\tau}+1} F_n^{(\text{КР})} \quad (28.10)$$

— свободная энергия системы в критическом режиме;

$$F_{\text{ПГР}} = \sum_{n=n_{\tau}+2}^{\infty} F_n^{(\text{ПГР})} \quad (28.11)$$

— свободная энергия в предельном гауссовом режиме. Критический режим заканчивается, а предельный гауссов режим начинается в точке n_{τ} , которая определена в § 19 двумя альтернативными выражениями. Для первого из них [68, 92, 131] КР охватывает значения n , равные n_{τ} , для которых $z^{(n_{\tau})} \gg 1$. Для второго выражения точка n_{τ} определяет начало фазовой области $k \leq B_{m_{\tau}+1}$ (см. рис. 7), внутри которой становится базисной гауссова плотность меры для переменных ρ_k ; при этом $z^{(n_{\tau})} \ll 1$, как это следует из (19.20) —

(19.22). Сравнение теории с результатами машинного расчета показывает, что точка n_τ является слишком далекой и «сшивать» КР следует раньше.

К этому же выводу приходим и в результате исследования теплоемкости. Как и свободная энергия, теплоемкость системы состоит из суммы двух вкладов: вклада от КР (отрицательного), который соответствует ренормгрупповой симметрии в системе, и вклада от ПГР (положительного). Чтобы суммарная теплоемкость была положительной, необходимо выбирать выход из критического режима по возможности коротким и вход в предельный гауссов режим соответственно «ранним». Этим условиям удовлетворяет заданная формулой (19.20) точка m_τ , которую и будем принимать как точку сшиваия решений КР и ПГР. При этом, однако, аргумент $z^{(n)}$, как это вытекает из (19.22), меньше единицы, и поэтому при расчете суммы (28.11) использовать решения (20.4)—(20.13) нельзя. Между фазовыми слоями, в которых справедлив КР, и теми слоями ПГР, в которых выполняются соотношения вида (20.4)—(20.13), расположены переходные фазовые слои, в которых аргумент $z^{(n)}$ меньше или порядка а единицы. Парциальные свободные энергии этих слоев зависят от «промежуточных» значений аргументов $d^{(m_\tau+1)}$, $a_4^{(m_\tau+1)}$, $d^{(m_\tau+2)}$, $a_4^{(m_\tau+2)}$, для которых необходимо выписывать точные выражения. Это усложняет решения.

Можно пойти по другому пути: начиная с точки $m_\tau + 1$, т. е. для всех ρ_k с $k \leq B_{m_\tau+1}$, статистическую сумму рассчитывать с гауссовой плотностью меры.

При окончании действия КР в точке $m'_\tau = m_\tau + 1$, как следует из рис. 7, для всех $k < B_{m'_\tau}$ функция $d^{(m'_\tau)}(k)$ положительна и в этой области статистическую сумму

$$Z_{m'_\tau} = \int \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{k < B_{m'_\tau}} d^{(m'_\tau)}(k) \rho_k \rho_{-k} - \frac{1}{4!} \frac{1}{N_{m'_\tau}} \sum_{k_1, \dots, k_4} a_4^{(m'_\tau)} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} \right] (d\rho)^{N_{m'_\tau}} \quad (28.12)$$

можно интегрировать с помощью гауссовой базисной плотности меры. Вместо (28.11) полагаем

$$F_{\text{ПГР}} = -kT \ln Z_{m'_\tau}. \quad (28.13)$$

Теперь найдем явные выражения для обеих частей свободной энергии: первой — соответствующей КР и заданной формулой (28.10) и второй, (28.13), которая соответствует ПГР. Для F_0 согласно (28.3) и (28.9) имеем следующее значение:

$$F_0 = -NkT \ln 2 - \frac{N' - 1}{2} kT \ln 2 - N' kT \ln 0,473. \quad (28.14)$$

§ 29. СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ СИСТЕМЫ В КРИТИЧЕСКОМ РЕЖИМЕ

В формуле (28.10) $F_n^{(KP)}$ обозначает парциальную свободную энергию в n -м фазовом слое:

$$F_n = -kT \ln \mathfrak{A}_n, \quad (29.1)$$

где \mathfrak{A}_n задается выражениями (28.6), (28.7). В КР аргумент $z^{(n)}$ будем считать величиной меньше единицы: $z^{(n)} \sim z^* < 1$, например, для $s = s^* \approx 3,5862$ $z^* \approx 0$, а аргумент $\mathfrak{Z}^{(n)}$ — величиной больше единицы: $\mathfrak{Z}^{(n)} \approx \mathfrak{Z}_0 s^3$, где $\mathfrak{Z}_0 = 0,924$. В связи с этим функции Бесселя в (28.6) и (28.7) можем выразить таким образом:

$$\begin{aligned} \sqrt[4]{2z^{(n)}} K_{1/4}(z^{(n)}) &\approx \frac{\pi}{\Gamma(3/4)} [1 - 4\gamma (z^{(n)}/2)^{1/2}] e^{-z^{(n)}}, \\ \sqrt{\mathfrak{Z}^{(n)}} \exp(\mathfrak{Z}^{(n)}) K_{1/4}(\mathfrak{Z}^{(n)}) &\approx \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left[1 - \frac{3}{32} (\mathfrak{Z}^{(n)})^{-1} \right]; \\ \gamma &= \Gamma(3/4)/\Gamma(1/4) \approx 0,338; \quad \Gamma(3/4) \approx 1,225; \\ \mathcal{H}(z^{(n)}) &= \sqrt{2} \gamma [1 - 1,607 (z^{(n)}/2)^{1/2}]. \end{aligned} \quad (29.2)$$

Парциальная статистическая сумма в КР становится равной:

$$\begin{aligned} F_n^{(KP)} &= -kT \left[N_{n-1} \ln Q(d^{(n-1)} \dots) + \right. \\ &\left. + N_n \ln Q(P_2^{(n-1)} \dots) - \frac{N_{n-1} - N_n}{2} \ln 2 \right]. \end{aligned}$$

Выделяя явную зависимость от n (см. (28.7), (29.2)), получаем

$$\begin{aligned} F_n^{(KP)} &= -N'kT \left[(n-1) s^{-3(n-1)} (\ln s) (1 - s^{-3}) + \right. \\ &\left. + s^{-3(n-1)} \left(\ln \lambda_{n-1} + s^{-3} \ln \bar{\omega}_{n-1} - \frac{1 - s^{-3}}{2} \ln 2 \right) \right], \end{aligned} \quad (29.3)$$

где

$$\begin{aligned} \lambda_{n-1} &= \left(\frac{12z^{(n-1)}}{u_{n-1}} \right)^{1/4} (\exp z^{(n-1)}) K_{1/4}(z^{(n-1)}) \approx \\ &\approx \left(\frac{6}{u_{n-1}} \right)^{1/4} [\pi/\Gamma(3/4)] [1 - 4\gamma (z^{(n-1)}/2)^{1/2}]; \end{aligned} \quad (29.4)$$

$$\begin{aligned} \bar{\omega}_{n-1} &= \pi^{-1} (u_{n-1})^{1/4} [V\sqrt{12} \mathcal{H}(z^{(n-1)})]^{-1/2} (\mathfrak{Z}^{(n-1)})^{1/2} \exp \mathfrak{Z}^{(n-1)} K_{1/4}(\mathfrak{Z}^{(n-1)}) \approx \\ &\approx \frac{1}{V\pi} \frac{(u_{n-1})^{1/4}}{(4V\bar{\delta}\gamma)^{1/2}}. \end{aligned} \quad (29.5)$$

Для $\ln \lambda_{n-1}$ имеем

$$\begin{aligned} \ln \lambda_{n-1} &\approx \ln \frac{\sqrt[4]{6}\pi}{\Gamma(3/4)} - 4\gamma (z^{(n-1)}/2)^{1/2} - \frac{1}{4} \ln u_{n-1} \approx \\ &\approx 1,390 - 4\gamma (z^{(n-1)}/2)^{1/2} - \frac{1}{2} \ln u_{n-1}. \end{aligned} \quad (29.6)$$

Слагаемое $\ln [1 - 4\gamma (z^{(n-1)}/2)]$ разложено в ряд по степеням $4\gamma \left(\frac{z^{(n-1)}}{2} \right)$.

Рассмотрим теперь аргумент $z^{(n-1)}$:

$$z^{(n-1)} \approx \frac{3}{4} \frac{(r^* + q + c_1 E_1^{n-1})^2}{(u^* + c_1 \mathcal{R}' E_1^{n-1})}.$$

Здесь $n \leq m_\tau < n_\tau$, а согласно определениям (19.9) и (19.23)

$$u^* > c_1 \mathcal{R}' E_1^{n-1},$$

так что в знаменателе в выражении для $z^{(n)}$ можно оставить только u^* , и тогда

$$(z^{(n-1)}/2)^{1/2} \approx (3/s)^{1/2} (r^* + q + c_1 E_1^{n-1}) / \sqrt{u^*}. \quad (29.7)$$

Ограничимся случаем $r^* + q \geq 0$. В частности, для $s = s^* \approx 3,5862$ и $r^* + q = 0$

$$(z^{(n-1)}/2)^{1/2} = \left(\frac{3}{8}\right)^{1/2} c_1 E_1^{n-1} / \sqrt{u^*}. \quad (29.8)$$

Это значение подставляем в формулу (29.6) для $\ln \lambda_{n-1}$:

$$\ln \lambda_{n-1} = 1,390 - 4\gamma \left(\frac{3}{8}\right)^{1/2} \left(\frac{r^* + q}{\sqrt{u^*}} + \frac{c_1 E_1^{n-1}}{\sqrt{u^*}}\right) - \frac{1}{4} \ln u^*. \quad (29.9)$$

Вклад от $\ln \bar{\omega}_{n-1}$ несуществен, так как согласно (29.3) он умножается на малую величину s^{-3} :

$$\ln \bar{\omega}_{n-1} \approx \frac{1}{4} \ln u_n + \ln (2\pi \sqrt{24} \gamma)^{-1/2} = \frac{1}{4} \ln u_n - 1,171. \quad (29.10)$$

В результате для парциальной свободной энергии $F_n^{(\text{KP})}$ получаем выражение

$$\begin{aligned} F_n^{(\text{KP})} = & -N'kTs^{-3(n-1)} \left\{ (n-1) (\ln s) (1-s^{-3}) - \right. \\ & - \frac{1}{4} (1-s^{-3}) \ln u^* + [1,043 (1-s^{-3}) + 0,219s^{-3}] - \\ & \left. - 2\gamma \left(\frac{3}{2}\right)^{1/2} (u^*)^{-1/2} (r^* + q + c_1 E_1^{n-1}) \right\}. \quad (29.11) \end{aligned}$$

Здесь $2\gamma (3/2)^{1/2} = 0,828$. Это выражение суммируем по n и находим часть свободной энергии системы, соответствующую КР (области решений ренормгруппы):

$$F_{\text{KP}} = \sum_{n=1}^{m_\tau+1} F_n^{(\text{KP})},$$

или

$$\begin{aligned} F_{\text{KP}} = & -N'kT \left\{ \left[-m'_\tau s^{-3m'_\tau} + s^{-3} \frac{(1-s^{-3m'_\tau})}{1-s^{-3}} \right] \ln s + \right. \\ & \left. + \frac{1-s^{-3m'_\tau}}{1-s^{-3}} \left[1,043 (1-s^{-3}) + s^{-3} 0,219 - 0,828 (r^* + q) (u^*)^{-1/2} - \right. \right. \end{aligned}$$

$$-\frac{1}{4}(1-s^{-3})\ln u^*] - 0,828c_1/\sqrt{u^*}[1-(s^{-3}E_1)^{m'_\tau}(1-s^{-3}E_1)^{-1}];$$

$$m'_\tau = m_\tau + 1.$$

Пренебрежем здесь поправками, пропорциональными s^{-3} . Окончательное выражение для $F_{\text{КР}}$ имеет вид

$$F_{\text{КР}} = -N'kT \left\{ -m'_\tau s^{-3m'_\tau} + \ln s \right. \\ \left. + (1-s^{-3m'_\tau}) \left[1,043 - 0,828(p^* + q)/\sqrt{u^*} - \frac{1}{4} \ln u^* \right] - \right. \\ \left. - 0,828 \left[\left(1 - \frac{E_1}{s^3} \right)^{m'_\tau} / (1 - E_1 s^{-3}) \right] c_1 / \sqrt{u^*} \right\}; \quad m'_\tau = m_\tau + 1. \quad (29.12)$$

Согласно (19.20) $m_\tau \sim -\ln \tau / \ln E_1$ и первое слагаемое в выражении для $F_{\text{КР}}$ пропорционально $\tau^{3\nu} \ln \tau$, где $\nu = \ln s / \ln E_1$. Если бы такое слагаемое осталось в выражении для полной свободной энергии системы, это привело бы к нарушению свойств однородности термодинамических функций.

§ 30. СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ СИСТЕМЫ В ПРЕДЕЛЬНОМ ГАУССОВОМ РЕЖИМЕ

Вторая часть полной свободной энергии системы — свободная энергия в ИГР равна логарифму статистической суммы $Z_{m'_\tau}$, заданной формулой (28.12). В выражении для $Z_{m'_\tau}$ будем интегрировать с гауссовой плотностью меры, для чего представим формулу (28.12) в виде

$$Z_{m'_\tau} = \int \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{k < B}^{m'_\tau} d^{(m'_\tau)}(k) \rho_k \rho_{-k} - \right. \\ \left. - \frac{1}{8} a_4^{(m'_\tau)} N_\tau^{-1} \sum_{k_1} \rho_{k_1} \rho_{-k_1} \sum_{k_2} \rho_{k_2} \rho_{-k_2} - \right. \\ \left. - \frac{1}{4!} a_4^{(m'_\tau)} N_\tau^{-1} S \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} \right] (d\rho)^{N_\tau}. \quad (30.1)$$

Символ S обозначает неприводимую сумму векторов $k_1 + \dots + k_4$, $N_\tau \equiv N_{m'_\tau} = N' s^{-3m'_\tau}$. Во втором слагаемом в экспоненте заменим $N_\tau^{-1} \sum_{k_1 < B}^{m'_\tau} \rho_{k_1} \rho_{-k_1}$ средним значением, полагая

$$-\frac{1}{8} a_4^{(m'_\tau)} N_\tau^{-1} \sum_{k_1} \rho_{k_1} \rho_{-k_1} \sum_{k_2} \rho_{k_2} \rho_{-k_2} \approx -\frac{1}{2} A \sum_k \rho_k \rho_{-k}; \quad (30.2)$$

$$A = \frac{1}{4} a_4^{(m'_\tau)} N_\tau^{-1} \sum_{k < B}^{m'_\tau} \langle \rho_k \rho_{-k} \rangle; \quad A > 0. \quad (30.3)$$

Величину A необходимо найти.

Третье слагаемое в экспоненте выражения (30.1) разлагаем в ряд. Отличными от нуля будут интегралы от четных произведений сумм S . Для Z_{m_τ}' можем написать:

$$Z_{m_\tau}' = \int \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{k < B_{m_\tau}'} (d^{(m_\tau)'}) (k) + A \right] \rho_k \rho_{-k} \times \\ \times \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{4!} a_4^{(m_\tau)'} N_\tau^{-1} S \rho_{k_1} \cdots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} \right)^2 + \dots \right] (d\rho)^{N_\tau}. \quad (30.4)$$

В нулевом приближении

$$Z_{m_\tau}^0 = \int \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{k < B_{m_\tau}'} (d^{(m_\tau)'}) (k) + A \right] \rho_k \rho_{-k} (d\rho)^{N_\tau}. \quad (30.5)$$

Здесь

$$d^{(m_\tau)'}) (k) = d^{(m_\tau)'}) (0) + 2b^2 \beta \tilde{\Phi} (0) k^2.$$

Согласно определению (19.28) $d^{(m_\tau)'}) (0) = 0$ (см. также рис. 7), поэтому

$$d^{(m_\tau)'}) (k) + A = A + 2b^2 \beta \tilde{\Phi} (0) k^2. \quad (30.6)$$

Интегрирование в (30.5) выполняется по формулам § 9; получаем

$$Z_{m_\tau}^0 = \prod_k' \pi [A + 2b^2 \beta \tilde{\Phi} (0) k^2]^{-1}.$$

Штрих у знака произведения обозначает, что векторы k пробегают значения в верхней полусфере. Найдем нулевое приближение для свободной энергии в ПГР:

$$F_{\text{ПГР}}^0 = -kT \ln Z_{m_\tau}^0 = \\ = \frac{1}{2} kT \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{6}{\pi} 4\pi \int_0^{B_{m_\tau}'} k^2 dk \ln [A + 2b^2 \beta \tilde{\Phi} (0) k^2] - N_\tau kT \ln \sqrt{\pi}. \quad (30.7)$$

В результате интегрирования находим

$$F_{\text{ПГР}}^0 = N_\tau s^{-3m_\tau'} \frac{kT}{2} \left\{ \ln [\beta \tilde{\Phi} (0) + A'] - 2m_\tau' \ln s - \frac{2}{3} + 2r - \right. \\ \left. - 2r^{3/2} \operatorname{arctg} \frac{1}{\sqrt{r}} - \ln \pi \right\}; \quad (30.8)$$

$$r = (A/\beta \tilde{\Phi} (0)) s^{2m_\tau'}; \quad A' = A s^{2m_\tau'}.$$

Определим величину A . На основании формул (30.4) и (30.8) имеем

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N_\tau} \sum_{\substack{k < B \\ m_\tau}} \langle \rho_k \rho_{-k} \rangle = \\ & = \frac{1}{N_\tau} \frac{2}{kT} \frac{\partial F_{\text{ПГР}}}{\partial A} = \frac{s^{2m'_\tau}}{\beta \tilde{\Phi}(0)} [3 - 3\sqrt{r} \operatorname{arctg}(r^{-1/2})]. \end{aligned} \quad (30.9)$$

Напомним, что

$$\begin{aligned} A' &= s^{2m'_\tau} A = u_{m'_\tau} s^{-2m'_\tau} \frac{1}{4N_\tau} \sum_{\substack{k < B \\ m_\tau}} \langle \rho_k \rho_{-k} \rangle; \\ A' &= [u_{m'_\tau} / 4\beta \tilde{\Phi}(0)] (3 - 3\sqrt{r} \operatorname{arctg} r^{-1/2}), \end{aligned} \quad (30.10)$$

и поэтому

$$r = \frac{3}{4} \bar{u}_{m'_\tau} (1 - \sqrt{r} \operatorname{arctg} r^{-1/2}); \quad (30.11)$$

величина r меньше единицы, так как

$$\bar{u}_{m'_\tau} \simeq u^* / [\beta \tilde{\Phi}(0)]^2 \approx 0,889.$$

Разлагая arctg при больших $r^{-1/2}$, получаем

$$\begin{aligned} r &= \frac{3}{4} \bar{u}_{m'_\tau} \left[1 - \sqrt{r} \left(\frac{\pi}{2} - \sqrt{r} + \dots \right) \right]; \\ \left(1 - \frac{3}{4} \bar{u}_{m'_\tau} \right) r + \frac{3}{8} \pi \bar{u}_{m'_\tau} \sqrt{r} - \frac{3}{4} u_{m'_\tau} &= 0, \end{aligned}$$

откуда

$$\sqrt{r} = \frac{-\frac{3}{8} \pi u_{m'_\tau} \pm \left[\frac{9\pi^2}{64} \bar{u}_{m'_\tau}^2 + 3\bar{u}_{m'_\tau} \left(1 - \frac{3}{4} \bar{u}_{m'_\tau} \right) \right]^{1/2}}{2 \left(1 - \frac{3}{4} \bar{u}_{m'_\tau} \right)}. \quad (30.12)$$

В случае $s = s^* \approx 3,5862$ и $\bar{u}_{m'_\tau} \approx \bar{u} = 0,889$

$$\sqrt{r} = 0,543; \quad r = 0,295. \quad (30.13)$$

Для суммы структурных факторов находим

$$N_\tau^{-1} \sum_{\substack{k < B \\ m_\tau}} \langle \rho_k \rho_{-k} \rangle = \frac{\beta \tilde{\Phi}(0) r}{u_{m'_\tau}} s^{2m'_\tau} \sim \frac{r}{\beta \tilde{\Phi}(0) \bar{u}} s^{2m'_\tau}. \quad (30.14)$$

С учетом поправки на усреднение потенциала (см. § 27)

$$\frac{1}{N_\tau} \sum_{\substack{k < B \\ m_\tau}} \langle \rho_k \rho_{-k} \rangle = \frac{\beta \tilde{\Phi}(0) r}{u_{m'_\tau}} \xi^{2m'_\tau}, \quad (30.15)$$

где

$$\xi = s^{1-\eta/2}.$$

Выражение для свободной энергии ПГР будет иметь вид

$$F_{\text{ПГР}} = Ns^{-3m'_\tau kT} \left\{ \frac{1}{2} \ln [\beta \tilde{\Phi}(0) (1 + \tau)] - m'_\tau \ln s - \frac{1}{3} + \tau - \tau^{3/2} \left(\frac{\pi}{2} - \sqrt{\tau} + \dots \right) - \frac{1}{2} \ln \pi \right\}. \quad (30.16)$$

Приведем также численное значение $F_{\text{ПГР}}$ для случая $s = s^*$:

$$F_{\text{ПГР}} = Ns^{-3m'_\tau kT} (-m'_\tau \ln s - 0,586). \quad (30.17)$$

§ 31. ПОЛНАЯ СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ, ВНУТРЕННЯЯ ЭНЕРГИЯ, ЭНТРОПИЯ И ТЕПЛОЕМКОСТЬ СИСТЕМЫ ПРИ $T \geq T_c$

Как было установлено в предыдущем параграфе, полная свободная энергия системы определяется общей формулой

$$F = F_0 + F_{\text{КР}} + F_{\text{ПГР}},$$

которая после подстановки соответствующих значений принимает вид

$$\begin{aligned} F \approx & -NkT \ln 2 - N'kT [\ln Q(\mathfrak{M}_2 \mathfrak{M}_4)] \sqrt{2}^{N'-1} - \\ & -NkT \left\{ (1 - s^{-3m'_\tau}) \left[1,043 - 0,828 (r^* + q) (u^*)^{-1/2} - \frac{1}{4} \ln u^* \right] - \right. \\ & \left. - 0,828 \frac{c_1}{\sqrt{u^*}} \left[1 - \left(\frac{E_1}{s^3} \right)^{m'_\tau} \right] \left(1 - \frac{E_1}{s^3} \right)^{-1} \right\} + \\ & + NkTs^{-3m'_\tau} \left[\frac{1}{2} \ln (\beta \tilde{\Phi}(0) + A') - \frac{1}{3} + \tau - \tau^{3/2} \operatorname{arctg}(\tau)^{-1/2} - \frac{1}{2} \ln \pi \right]. \end{aligned} \quad (31.1)$$

Здесь $m'_\tau = m_\tau + 1$, c_1 задается формулами (18.14) — (18.16), A' — формулой (30.10), τ — выражениями (30.11) — (30.13).

Чтобы получить явную зависимость от τ , распишем $s^{-3m'_\tau}$. Согласно определению (19.18)

$$d^{(m'_\tau)}(0) = 0, \quad \text{или} \quad c_1 E_1^{m'_\tau} = |r^*|,$$

откуда

$$m'_\tau = \frac{\ln(|r^*|/c_1)}{\ln E_1} = -\frac{\ln \tau}{\ln E_1} + \frac{\ln(|r^*|/c_1)}{\ln E_1}. \quad (31.2)$$

Тогда

$$s^{-3m'_\tau} = \Xi \tau^{2\nu}, \quad (31.3)$$

где

$$v = \frac{\ln s}{\ln E_f}; \quad \Xi = s^{-3} \frac{\ln|r^*| - \ln c_1}{\ln E_1}. \quad (31.4)$$

Подставляя значения этих величин в выражение для F , получаем

$$F = F_0 - NkT [(1 - \Xi\tau^{3v})f_1 - (1 - |r^*|/c_1\Xi\tau^{3v})c_1f_2 + f_3\tau^{3v}\Xi], \quad (31.5)$$

где

$$\begin{aligned} f_1 &= 1,043 - 0,828 (r^* + q)/\sqrt{u^*} - (1/4) \ln u^*; \\ f_2 &= 0,828 (1 - E_1/s^3)^{-1} (u^*)^{-1/2}; \\ f_3 &= -\frac{1}{2} \ln [\beta\tilde{\Phi}(0) + A'] + \frac{1}{3} - \tau + \tau^{3/2} \arctg \frac{1}{\sqrt{\tau}} + \frac{1}{2} \ln \pi. \end{aligned} \quad (31.6)$$

Численные значения констант в случае $s = s^* \approx 3,5862$, $r^* + q = 0$ для $T = T_c$ такие:

$$\begin{aligned} f_1(T_c) &= 1,072; \quad f_3(T_c) = 0,586; \\ f_2(T_c) &= 1,070 (\beta_c\Phi(0))^{-1}; \quad f_2(T_c)|r^*| = 0,655; \\ \Xi(T_c) &= 1,692. \end{aligned} \quad (31.7)$$

Таким образом, с изменением температуры изменяются и значения коэффициентов f_1 , f_2 , f_3 и Ξ .

Внутреннюю энергию находим из уравнений Гиббса — Гельмгольца:

$$U = F - T \frac{\partial F}{\partial T},$$

при этом производная по температуре равна сумме

$$\frac{\partial}{\partial T} + \frac{1}{T_c} \frac{\partial}{\partial \tau}.$$

Во всех дальнейших расчетах будем пренебрегать зависимостью функций от T , принимая $T = T_c$, и рассматривать только зависимость от τ

$$U = NkT^2/T_c 3v\Xi\tau^{(3v-1)} (-f_1 + |r^*|f_2 + f_3) + \frac{NT_c^2}{T_c} \tilde{c}_1 f_2, \quad (31.8)$$

а для теплоемкости $c_V = \frac{1}{T_c} \frac{\partial U}{\partial \tau}$ — зависимость

$$c_V = N'k \frac{T^2}{T_c^2} 3v(3v-1)\Xi\tau^{3v-2} (-f_1 + |r^*|f_2 + f_3) \quad (31.9)$$

(график теплоемкости приведен ниже на рис. 24). При $s = s^*$ для выражения в скобках получаем значение

$$-f_1 + |r^*|f_2 + f_3 = -0,417 + 0,586 = 0,169. \quad (31.10)$$

Как видим, вклад в теплоемкость от фазовой области КР, пропорциональный $(-f_1 + |r^*|f_2) = -0,417$, является отрицательным,

что свидетельствует о термодинамической неустойчивости этого режима. Напомним, что КР означает установление в системе ренормгрупповой симметрии.

При подсчете свободной энергии и других термодинамических функций при КР оказалось важным учесть в формуле (29.6) первую поправку, пропорциональную \sqrt{z} . Это означает, что рассчитывать свободную энергию следует с той же степенью точности, что и при решении уравнений ренормгруппы.

Фазовая область ПГР является всегда термодинамически устойчивой. Для $F_{\text{ПГР}}$ было рассмотрено только нулевое приближение. Учет поправки

$$-\frac{1}{2} \left\langle \left[\frac{1}{4!} (a_i^{(m)}) / N_\tau \right] S_{\rho_{k_1}} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} \right\rangle_G$$

в формуле (30.4) приведет к увеличению коэффициента f_3 в (31.6) и, следовательно, увеличит положительную часть теплоемкости. (Соответствующие расчеты предлагается выполнить читателю.) Среднее значение спинового момента системы при $T > T_c$ равно нулю.

Вычислив свободную энергию системы при $T \geq T_c$, можно ответить на вопрос о том, почему убывает энтропия системы при приближении T к T_c сверху. Энтропия определяется как

$$S = -\partial F / \partial T.$$

Дифференцируя (31.5) по температуре, находим

$$S = S_0 - \partial F_{\text{КР}} / \partial T - \partial F_{\text{ПГР}} / \partial T = S_0 + S_{\text{КР}} + S_{\text{ПГР}}. \quad (31.11)$$

Вклад от КР (ренормгрупповая симметрия) описывается в (31.5) слагаемыми, содержащими функции f_1 и f_2 , а вклад в ПГР — слагаемыми с f_3 . Для $S_{\text{КР}}$ и $S_{\text{ПГР}}$ получаем

$$S_{\text{КР}} \simeq kN' \left[f_1 - \tilde{c}_1 f_2 + \frac{1}{2} - 3v \Xi \tau^{3v-1} (f_1 - |r^*| f_2) \right];$$

$$S_{\text{ПГР}} \simeq kN' 3v \Xi \tau^{3v-1} f_3. \quad (31.12)$$

В критической точке, как и следовало ожидать, гауссова ветка решений исчезает и

$$S(T = T_c) = S_{\text{КР}}(T = T_c) \simeq kN' \left(f_1 - \tilde{c}_1 f_2 + \frac{1}{2} \right). \quad (31.13)$$

При удалении от критической точки ветка $S_{\text{КР}}$ убывает, $S_{\text{ПГР}}$ возрастает и суммарная энтропия также возрастает, так как $f_3 > f_1 - |r^*| f_2$.

Как видим, без учета ПГР невозможно получить правильные выражения для термодинамических функций.

§ 32. СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ, ЭНТРОПИЯ И ТЕПЛОЕМКОСТЬ ПРИ $T \leq T_c$

При температуре ниже критической вновь имеются две области в фазовом пространстве КП. Одна из них соответствует КР и простирается до фазового слоя с номером μ_τ , который был определен в § 23 (зна-

чение μ_τ определяется формулой (23.29)). Другая область называется ИГР — инверсным гауссовым режимом. Этой области соответствуют отличное от нуля значение параметра порядка и гауссова плотность меры для флуктуаций плотности спинового момента [130, 132].

Свободная энергия при $T < T_c$ (см. (31.1))

$$F = F_0 + F_{\text{КР}} + F_{\text{ИГР}}, \quad (32.1)$$

где F_0 определяется выражением (28.14). Для $F_{\text{КР}}$ можно воспользоваться результатами (28.10) и соответственно (29.12), в которых вместо m_τ подставим величину μ_τ , определенную формулами (23.27) и (23.29). В результате получаем

$$F_{\text{КР}} = -N'kT \left\{ -\mu_\tau s^{-3\mu_\tau} \ln s + \right. \\ \left. + (1 - s^{3\mu_\tau}) \left[1,043 - 0,828 \frac{|r^* + q|}{\sqrt{u^*}} - \frac{1}{4} \ln u^* \right] - \right. \\ \left. - [(1 - (E_1/s^3)^{\mu_\tau}) / (1 - E_1/s^3)] 0,828 \cdot c_1 / \sqrt{u^*} \right\}, \quad (32.2)$$

где

$$\mu_\tau = -\frac{\ln |\tau|}{\ln E_1} + \frac{\ln (|r^* + \beta \tilde{\Phi}(0)| \tilde{c}_1^{-1})}{\ln E_1}. \quad (32.3)$$

Хотя имеется полная формальная аналогия между выражениями для свободной энергии (29.12) и (32.2), тем не менее они различаются между собой знаком коэффициента c_1 в последнем члене. При $\tau > 0$ $c_1 > 0$, при $\tau < 0$ $c_1 < 0$, и это существенно влияет на вклад в теплоемкость от $F_{\text{КР}}$. Этот вклад при $\tau < 0$ будет отрицательным и по величине примерно в полтора раза больше соответствующего вклада от $F_{\text{КР}}$ при $\tau > 0$. Отсюда следует, что критический режим при $\tau < 0$ является более неустойчивым, чем при $\tau > 0$.

Выделим в (32.2) в $s^{-3\mu_\tau}$ и в $E_1^{\mu_\tau}$ зависимость от температуры τ :

$$s^{-3\mu_\tau} = |\tau|^{3\nu} \mathcal{A}^{3\nu}; \quad E_1^{\mu_\tau} = +(\mathcal{A}|\tau|)^{-1}, \quad (32.4)$$

где

$$\nu = \frac{\ln s}{\ln E_1}; \quad \mathcal{A} = \frac{\tilde{c}_1}{r^* + \beta \tilde{\Phi}(0)}.$$

Окончательное выражение для $F_{\text{КР}}$ имеет вид

$$F_{\text{КР}} = -kTN' [-\mu_\tau \mathcal{A}^{3\nu} |\tau|^{3\nu} \ln s + (1 - \mathcal{A}^{3\nu} |\tau|^{3\nu}) \tilde{\varphi}_1 + \\ + |\tau| (1 - \mathcal{A}^{3\nu-1} |\tau|^{3\nu-1}) \tilde{\varphi}_2], \quad (32.5)$$

где

$$\tilde{\varphi}_1 = \ln \frac{\pi \sqrt[4]{6}}{\Gamma(\frac{3}{4})} - \frac{1}{2} \ln 2 - \frac{1}{4} \ln u^* - \gamma \sqrt{6} \frac{r^* + q}{\sqrt{u^*}} =$$

$$= 1,043 - 0,828 \frac{r^* + q}{\sqrt{u^*}} - 0,250 \ln u^*; \quad (32.6)$$

$$\Phi_2 = \frac{c_1}{\sqrt{u^*}} \frac{\gamma \sqrt{6}}{1 - s^{-3} E_1} \simeq 0,828 \frac{\tilde{c}_1}{\sqrt{u^*}} (1 - s^{-3} E_1)^{-1}.$$

Рассмотрим теперь часть свободной энергии, соответствующую ИГР. Согласно формуле (25.29)

$$F_{\text{ИГР}} = \mathcal{F}_\mu + kTN E_0(\langle \sigma \rangle). \quad (32.7)$$

Здесь \mathcal{F}_μ задано выражением (24.36); $E_0(\langle \sigma \rangle)$ представляет собой свободную энергию, связанную с существованием в системе отличного от нуля параметра порядка $\langle \sigma \rangle$, который равен ρ_2 — второму корню секулярного уравнения в (25.18). Значение $\langle \sigma \rangle = \rho_2$ приведено в (25.19).

Рассмотрим сначала \mathcal{F}_μ . По формуле (24.36)

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_\mu = & -kTN' s^{-3\mu\tau} \left[\left(3/2\right) |d^{(\mu\tau)}(0)| \mathcal{J}_1 - (1/8) a_i^{(\mu\tau)} \mathcal{J}_1^2 + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} |d^{(\mu\tau)}(0)| a_i^{(\mu\tau)} \sum_r g^3(r) - \frac{1}{2} N_\mu^{-1} \sum_{h \leq B_\mu} (\ln \bar{d}(k) - \ln \pi) \right]. \quad (32.8) \end{aligned}$$

Для \mathcal{J}_1 имеем выражение (24.33); $d^{(\mu\tau)}(0)$ определяется из соотношения (23.27), $|d^{(\mu\tau)}(0)| = \beta \tilde{\Phi}(0) / s^{2\mu\tau}$; $g(r)$ задается в (24.36); третьи и четвертые слагаемые в (32.8) предстоит определить. Начнем с функции $g(r)$, которая представляет собой экранированный потенциал, соответствующий флуктуациям в ИГР:

$$\begin{aligned} g(r) = & N_\mu^{-1} V / (2\pi)^3 \frac{6}{\pi} 4\pi \frac{1}{r} \int_0^{B_\mu} \frac{k \sin kr dk}{2 |d^{(\mu\tau)}(0)| + \tilde{q} k^2}; \\ g(0) = & \mathcal{J}_1 = \tilde{\mathcal{L}}_1 (1/\sqrt{2}) (2 |d^{(\mu)}(0)|)^{-1}. \quad (32.9) \end{aligned}$$

Интеграл не выражается в элементарных функциях. Для всех $k < B_\mu$, $2 |d^{(\mu\tau)}(0)| > \tilde{q} k^2$, и можно разложить знаменатель в ряд или просто заменить в нем k^2 его средним значением, результат от этого изменится незначительно. Выберем второй, более простой путь, заменив k^2 на $B_\mu^2/2$ и $\tilde{q} B_\mu^2/2$ — на $2b^2 \beta \tilde{\Phi}(0) (B')^2 / (2s^{2\mu\tau}) = \beta \tilde{\Phi}(0) / (2s^{2\mu\tau})$, тогда

$$g(r) = \frac{6}{5} \frac{V}{N_\mu} \frac{1}{\pi^3} \frac{1}{r} \frac{s^{2\mu\tau}}{\beta \tilde{\Phi}(0)} \left(-\frac{1}{r} k \cos kr + \frac{1}{r^2} \sin kr \right).$$

Введем безразмерную длину $y = \pi r / c_\mu$ и сделаем замену $V / N_\mu = c_\mu^3$, $B_\mu = \pi / c_\mu$, $g(r) = g(y)$; получим

$$g(y) = (6/5) (s^{2\mu} / \beta \tilde{\Phi}(0)) (\sin y - y \cos y) y^{-3}. \quad (32.10)$$

При учете поправки на усреднение

$$g(y) = \frac{6}{5} \frac{\tau^{2\mu}}{\beta\tilde{\Phi}(0)} \frac{1}{y^3} (\sin y - y \cos y); \quad \xi = s^{1-n/2}. \quad (32.11)$$

Экранированный потенциал сравнительно медленно убывает с расстоянием, имеет свою характерную единицу длины $c_\mu = cs^{\mu_\tau}$, где согласно (23.29) $s^{\mu_\tau} \sim |\tau|^{-\nu}$ ($\nu = \ln s / \ln E_1 \sim 0,6$).

Теперь вычислим $\sum_r g^3(r)$ в выражении (32.8) для \mathcal{F}_μ . Сумму по узлам r блочной решетки представим как сумму по координационным сферам:

$$\begin{aligned} \sum_r g^3(r) &= g^3(0) + 6g^3(1) + 12g^3(\sqrt{2}) + 8g^3(\sqrt{3}) + \dots \\ &\dots = \alpha_g (s^{2\mu_\tau} / \beta\tilde{\Phi}(0))^3, \end{aligned} \quad (32.12)$$

где $\alpha_g \approx 0,069$. Соответствующий вклад в \mathcal{F}_μ в (32.8) определяется таким образом:

$$\frac{1}{2} |d^{(\mu_\tau)}(0)| a_k^{(\mu_\tau)} \sum_r g^3(r) \approx \frac{\alpha_g}{2} / [\beta\tilde{\Phi}(0)]^2. \quad (32.13)$$

Последнее слагаемое в формуле (32.8) уже рассчитывалось для случая $\mu_\tau = m_\tau$ — см. формулу (30.8); теперь в эту формулу вместо A следует подставить $2\beta\tilde{\Phi}(0) s^{-2\mu_\tau}$ и вместо $r - \sqrt{2}$. Здесь удобно воспользоваться функцией $\tilde{\mathcal{L}}_1(x)$ для $x = 1/\sqrt{2}$, заданной в (24.34), тогда

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2N_\mu} \sum_{k \leq B_\mu} \ln \bar{d}(k) / \pi = \\ &= \frac{1}{3} [1 - \tilde{\mathcal{L}}_1(1/\sqrt{2})] - \frac{1}{2} \ln(3\beta\tilde{\Phi}(0)/\pi) + \mu_\tau \ln s. \end{aligned} \quad (32.14)$$

Все величины, входящие в \mathcal{F}_μ в (32.8), вычислены; в результате получаем

$$\mathcal{F}_\mu = -N'kT \mathcal{A}^{3\nu} |\tau|^{3\nu} (\tilde{\Phi}_3 + \mu_\tau \ln s), \quad (32.15)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_3 &= (3/4) \tilde{\mathcal{L}}_1(1/\sqrt{2}) - (1/32) \tilde{u} [\tilde{\mathcal{L}}_1(1/\sqrt{2})]^2 + \alpha_g \tilde{u} / 2 + \\ &+ (1/3) [1 - \tilde{\mathcal{L}}_1(1/\sqrt{2})] - (1/2) \ln(3\beta\tilde{\Phi}(0)/\pi); \\ \tilde{u} &= \bar{u} - \frac{E_1 - R_{11}}{R_{12}^0} (1 - \bar{r}) \sqrt{\bar{u}} \approx \bar{u}. \end{aligned} \quad (32.16)$$

Рассмотрим величину $E(\langle \sigma \rangle)$, заданную в (25.30). Из коэффициента $B_0^2/2G_0$ выделим множитель $\mathcal{A}^{3\nu}$, общий для всех слагаемых в

свободной энергии:

$$B_0^2/2G_0 = \mathcal{A}^{3\nu}\varphi_4; \quad \mathcal{A} = \tilde{c}_1/(r^* + \beta\tilde{\Phi}(0)); \quad (32.17)$$

$$\varphi_4 = ({}^3/2\tilde{u}) [1 - ({}^1/4)\tilde{u}\tilde{\mathcal{L}}_1(1/\sqrt{2})]^2;$$

B_0 и G_0 заданы в (25.2) – (25.5). В результате имеем

$$E_0(\langle\sigma\rangle) = -|\tau|^{3\nu}\mathcal{A}^{3\nu}\varphi_4. \quad (32.18)$$

Теперь явное выражение для полной свободной энергии при $T < T_c$, заданной формулой (32.1), примет вид

$$F = F_0 - N'kT [(1 - \mathcal{A}^{3\nu}\tau^{3\nu})\tilde{\varphi}_1 + (|\tau| - \mathcal{A}^{3\nu-1}|\tau|^{3\nu})\tilde{\varphi}_2 + \\ + \mathcal{A}^{3\nu}|\tau|^{3\nu}(\tilde{\varphi}_3 + \varphi_4) + h\langle\sigma\rangle]. \quad (32.19)$$

Значения $\tilde{\varphi}_1$ и $\tilde{\varphi}_2$ даны в (32.6), $\tilde{\varphi}_3$ описывается формулой (32.16), φ_4 – (32.17). Полученная формула справедлива в узком интервале температур вблизи критической точки $\tau < \tau^*$, $\tau^* \approx 0,01$.

Рассмотрим энтропию S при $T < T_c$. Представляется интересным найти вклад в энтропию от КР, ИГР, а также вклад, связанный с энергией упорядочения (32.18). Полная энтропия выражается суммой:

$$S = S_0 + S_{\text{КР}} + S_{\mu} + S_{\langle\sigma\rangle}, \quad (32.20)$$

где температурно-независимая положительная константа

$$S_0 = -\frac{\partial F_0}{\partial T} = kN \left\{ \ln 2 + \frac{1}{S_0^3} \ln \left[\frac{V^2}{\pi} \sqrt{3'} e^{3'} K_{1/4}(3') \right] \right\}; \quad (32.21)$$

вклад от критического режима

$$S_{\text{КР}} = -\frac{\partial F_{\text{КР}}}{\partial T} = kN' \frac{\partial}{\partial T} \{ T [(1 - \mathcal{A}^{3\nu}|\tau|^{3\nu})\tilde{\varphi}_1 + \\ + (|\tau| - \mathcal{A}^{3\nu-1}|\tau|^{3\nu})\tilde{\varphi}_2] \}; \quad (32.22)$$

вклад от фазовой области ρ_k , $0 < k < B_{\mu}$, в ренормализованном гауссовом базисе

$$S_{\mu} = -\frac{\partial \mathcal{F}_{\mu}}{\partial T} = kN' \frac{\partial}{\partial T} (T \mathcal{A}^{3\nu} |\tau|^{3\nu} \tilde{\varphi}_3) \quad (32.23)$$

и наконец вклад от интегрирования по переменной ρ_0 , связанной с возникновением в системе параметра порядка,

$$S_{\langle\sigma\rangle} = kN \frac{\partial}{\partial T} [T E_0(\langle\sigma\rangle)] = kN' \varphi_4 \frac{\partial}{\partial T} (T \mathcal{A}^{3\nu} |\tau|^{3\nu}). \quad (32.24)$$

Слагаемое, связанное с внешним магнитным полем, опущено.

Так как рассматривается малая окрестность критической точки T_c , то берутся во внимание наинизшие степени τ . Чтобы найти энтропию, удобно выразить явно температурную зависимость величин \mathcal{A} и $\tilde{\varphi}_1, \dots, \tilde{\varphi}_4$. При этом следует учесть, что $T = T_c(1 + \tau)$.

Для коэффициента \tilde{c}_1 согласно (18.14) имеем

$$\tilde{c}_1 = \beta_c \tilde{\Phi}(0) \frac{\tilde{c}_{11}}{1 + \tau} + \frac{\tilde{c}_{12}}{\beta_c \tilde{\Phi}(0)};$$

тогда

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_c + \tau \frac{\tilde{c}_{12}}{|\beta_c \tilde{\Phi}(0)|^2} (1 - \bar{r})^{-1}, \quad (32.25)$$

где

$$\mathcal{A}_c = \frac{\tilde{c}_1(T_c)}{r^*(T_c) + \beta_c \tilde{\Phi}(0)}.$$

Далее,

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_1 &= \varphi_1 + \frac{1}{2} \ln(1 + \tau); \\ \varphi_1 &= \ln \frac{\pi \sqrt[4]{\bar{6}}}{\Gamma(3/4)} - \frac{1}{2} \ln 2 - \frac{1}{4} \ln u^*(T_c) - \frac{\gamma \sqrt{\bar{6}} (\bar{q} - \bar{r})}{\sqrt{\bar{u}}}; \end{aligned} \quad (32.26)$$

$$\bar{q} = \frac{3}{5} \frac{(1 - s^{-5})}{(1 - s^{-3})};$$

$$\tilde{\varphi}_2 = \varphi_2 + \tau \varphi_2';$$

$$\varphi_2 \simeq \frac{\tilde{c}_1(T_c)}{\sqrt{u^*(T_c)}} (1 - s^{-3} E_1)^{-1} \gamma \sqrt{\bar{6}}; \quad (32.27)$$

$$\varphi_2' \simeq \tilde{c}_{12} |\beta_c \tilde{\Phi}(0) \sqrt{u^*(T_c)} (1 - s^{-3} E_1)|^{-1} \gamma \sqrt{\bar{6}};$$

$$\tilde{\varphi}_3 = \varphi_3 + \frac{1}{2} \ln(1 + \tau);$$

$$\begin{aligned} \varphi_3 &= {}^{(3/4)} \tilde{\mathcal{L}}_1 (1/\sqrt{\bar{2}}) - {}^{(1/32)} \tilde{u} [\mathcal{L}_1 (1/\sqrt{\bar{2}})]^2 + \alpha_g \tilde{u} / 2 + \\ &+ {}^{(1/3)} [1 - \tilde{\mathcal{L}}_1 (1/\sqrt{\bar{2}})] - {}^{(1/2)} \ln 3 \beta_c \tilde{\Phi}(0) / \pi. \end{aligned} \quad (32.28)$$

Подставляем (32.25) — (32.28) в формулы (32.21) — (32.24) и выполняем дифференцирование по температуре T :

$$\begin{aligned} S_{\text{KP}} &= kN' \left[\varphi_1 - \varphi_2 + \frac{1}{2} + 3\nu \mathcal{A}_c^{3\nu} (\varphi_1 + \varphi_2 / \mathcal{A}_c) |\tau|^{3\nu-1} \times \right. \\ &\quad \left. \times 2 |\tau| (\varphi_2 + \varphi_2') + \frac{1}{2} \ln(1 + \tau) \right]; \end{aligned} \quad (32.29)$$

$$S_\mu = -kN' 3\nu \mathcal{A}_c^{3\nu} \varphi_3 |\tau|^{3\nu-1}; \quad (32.30)$$

$$S_{\langle \sigma \rangle} = -kN' 3\nu \mathcal{A}_c^{3\nu} \varphi_4 |\tau|^{3\nu-1}. \quad (32.31)$$

Слагаемые, пропорциональные $|\tau|^{3\nu}$, $|\tau|^2$, $|\tau|^{3\nu+1}$, опущены, но учтены слагаемые $|\tau|^{3\nu-1}$ и $|\tau|$, близкие по величине при $\nu \approx 0,6$. Пол-

ная энтропия системы

$$S = kN \left\{ \ln 2 + s_0^{-3} \left[\ln \left(\frac{V\sqrt{2}}{\pi} \sqrt{3'} e^{3'K_{1/2}}(3') \right) \right] + \varphi_1 - \varphi_2 + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} - 3vA_c^{3v} (\varphi_3 + \varphi_4 - \varphi_1 - \varphi_2/A_c) |\tau|^{3v-1} + \right. \\ \left. + 2|\tau|(\varphi_2 + \varphi_2') + \frac{1}{2} \ln(1 + \tau) \right\}. \quad (32.32)$$

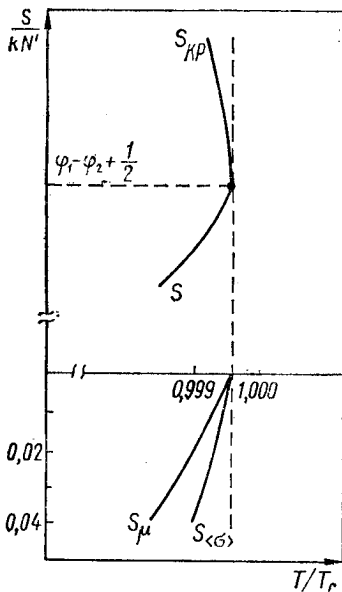
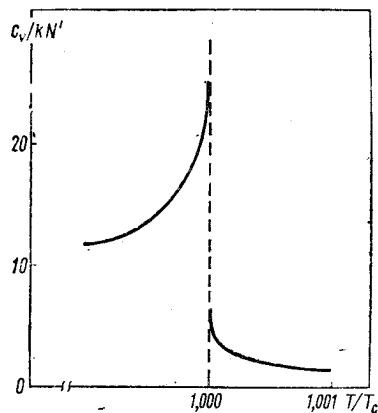


Рис. 23. Температурная зависимость полной энтропии s при $T < T_c$. Приведены кривые для S_{KP} , S_μ и $S_{\langle\sigma\rangle}$.

Рис. 24. Теплоемкость c_V вблизи критической температуры.



Выполним теперь численные оценки констант при $|\tau|^{3v-1}$ для $s = s^* = 3,5862$. Здесь $-\bar{r} + \bar{q} = 0$ и для A_c и φ_i имеем

$$\varphi_1 = 1,012; \quad \varphi_2 = 0,875; \quad \varphi_3 = 0,665; \quad \varphi_4 = 1,155; \\ A_c = 2,132; \quad \varphi_2' = 0,009. \quad (32.33)$$

На основании этих значений можно сделать следующие важные заключения: энтропия, как и следовало ожидать, положительна; вклад КР положителен и резко растет с удалением от критической точки, когда температура T уменьшается; вклад S_μ отрицателен.

Суммарный вклад $S_{KP} + S_\mu$ положителен и растет с удалением от критической точки. Это возрастание можно интерпретировать как следствие исчезновения в системе ренормгрупповой симметрии при удалении от T_c . Ниже T_c в системе возникает пространственное упорядочение. Его интенсивность иллюстрируется поведением $S_{\langle\sigma\rangle}$ и резко уменьшается с понижением температуры. Интересно заметить, что $S_{\langle\sigma\rangle}$ убывает в два раза быстрее, чем растет $S_{KP} + S_\mu$.

Суммарная энтропия, состоящая из вкладов от КР и ИГР, уменьшается для $T < T_c$ при удалении от критической точки, как и должно быть в физических системах в точке фазового перехода второго рода. На рис. 23 приведены кривые, иллюстрирующие поведение $S_{\text{КР}}$, S_{μ} , S_{σ} , и суммарной энтропии S .

Рассмотрим теперь теплоемкость системы $c_V = T (\partial S / \partial T)$. Продифференцировав (32.32) по температуре, найдем

$$c_V = kN s_0^{-3} [3\nu(3\nu - 1) \mathcal{A}_c^{3\nu} (\varphi_3 + \varphi_4 - \varphi_1 - \varphi_2 / \mathcal{A}_c) |\tau|^{3\nu-2} + \\ + 1/2 - 2(\varphi_2 + \varphi_2')]. \quad (32.34)$$

(При $s = s^* \simeq 3.58$ $\mathcal{A}_c^{3\nu} (\varphi_3 + \varphi_4 - \varphi_1 - \varphi_2 / \mathcal{A}_c) = 1,571$.) Показатель $3\nu - 2$ в (32.34) при $|\tau|$ является отрицательным, следовательно, $|\tau|^{3\nu-2} \rightarrow \infty$ при $T < T_c$. В окрестности критической точки мы получили физически правильный результат $c_V > 0$, однако заметим, что ренормгрупповой вклад в теплоемкость от $S_{\text{КР}}$ приводит к $c_V < 0$. На рис. 24 изображена кривая для теплоемкости системы вблизи T_c . $T < T_c$ соответствует кривая (32.34), а $T > T_c$ — кривая (31.9).

**ОБОБЩЕНИЕ МЕТОДА КОЛЛЕКТИВНЫХ
ПЕРЕМЕННЫХ НА РАЗЛИЧНЫЕ ЗАДАЧИ**

§ 33. *n*-КОМПОНЕНТНАЯ МОДЕЛЬ СТЕНЛИ

Модель, предложенная Стенли в 1968 г., представляет собой систему взаимодействующих *n*-компонентных векторов, размещенных в узлах *D*-мерной решетки [22, 54, 56]. Размерность фазового пространства отдельного вектора равна *n*. Фиксируется длина каждого вектора, так для *j*-го узла решетки

$$s_j^2 = m^2, \quad s_j = \{s_j^{(1)}, \dots, s_j^{(n)}\} \quad (33.1)$$

(*m* — заданное число). Гамильтониан системы

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{j,l} \Phi(|j-l|) s_j s_l. \quad (33.2)$$

Статистическая сумма

$$Z = \text{Sp } e^{-\beta H}, \quad (33.3)$$

где Sp означает интегрирование по всем значениям s_1, \dots, s_N при условии, что $|s_j| = m, m > 0$, имеет вид

$$Z = \int \prod_j ds_j \delta(|s_j| - m) e^{-\beta H}, \quad m > 0; \\ 2m\delta(|s|^2 - m^2) = \delta(|s| - m). \quad (33.4)$$

n-Компонентная модель Стенли является классической системой. При *n* = 1 благодаря условию (33.1), которое можно представить в виде

$$\delta(|s_j| - 1) = \delta(s_j - 1) + \delta(s_j + 1),$$

она совпадает с моделью Изинга, при *n* = 3 она представляет собой классический предел квантовомеханической модели Гейзенберга, при *n* = 2 эта модель может быть полезна при описании бозе-жидкости, плоского ротатора и т. д. В методе КП модель Стенли была рассмотрена в работах [10, 14, 21, 93, 94, 118, 117]. Введем по аналогии с (3.1) моды плотности момента *s*:

$$\rho_{\mathbf{k}}^c = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \cos(\mathbf{k}l) s_j; \quad \rho_{\mathbf{k}}^s = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \sin(\mathbf{k}l) s_j; \quad \rho_0 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j s_j. \quad (33.5)$$

В отличие от оператора (3.1) выражения (33.5) являются n -компонентными векторами. Множество КП $\rho_{\mathbf{k}}^c, \rho_{\mathbf{k}}^s, \rho_0$ определяется формулами (3.2). Оператор перехода от переменных s_1, \dots, s_N к КП $\rho_{\mathbf{k}}^c, \rho_{\mathbf{k}}^s, \rho_0$ имеет форму (3.3) и (3.14). Элементы фазового объема (3.4) и (3.7) содержат в качестве дифференциалов n -компонентные векторы:

$$(d\rho)^N = d\rho_0 \prod_{\mathbf{k}} d\rho_{\mathbf{k}}^c d\rho_{\mathbf{k}}^s; \quad (d\omega)^N = d\omega_0 \prod_{\mathbf{k}} d\omega_{\mathbf{k}}^c d\omega_{\mathbf{k}}^s,$$

где, например, $d\rho_{\mathbf{k}}^c = d\rho_{\mathbf{k}}^{c(1)} \dots d\rho_{\mathbf{k}}^{c(n)}$.

Статистическую сумму (33.4) выразим как

$$Z = \int e^{-\beta H(\rho)} J(\rho) (d\rho)^N, \quad (33.4a)$$

где $H(\rho)$ — гамильтониан n -компонентной модели в представлении КП:

$$H(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\Phi}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}; \quad (33.6)$$

$J(\rho)$ — якобиан перехода в фазовое пространство КП:

$$J(\rho) = \int \prod_{\mathbf{j}} \left\{ ds_{\mathbf{j}} \delta(|s_{\mathbf{j}}| - m) \times \right. \\ \left. \times \int \exp \left[-i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{N}} s_{\mathbf{j}} \exp(ik\mathbf{j}) \right] \right\} \exp \left(i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \right) (d\omega)^N; \\ \omega_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} (\omega_{\mathbf{k}}^c + i\omega_{\mathbf{k}}^s); \quad ds_{\mathbf{j}} = ds_{\mathbf{j}}^{(1)} \dots ds_{\mathbf{j}}^{(n)}.$$

В представлении узловых переменных

$$\tilde{\omega}_{\mathbf{j}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} e^{ik\mathbf{j}}, \quad \tilde{\rho}_{\mathbf{j}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} e^{-ik\mathbf{j}}$$

якобиан имеет вид

$$J(\rho) = \prod_{\mathbf{j}} \int d\tilde{\omega}_{\mathbf{j}} [ds_{\mathbf{j}} \delta(|s_{\mathbf{j}}| - m) e^{-i2\pi s_{\mathbf{j}} \tilde{\omega}_{\mathbf{j}}} e^{i2\pi \tilde{\omega}_{\mathbf{j}} \tilde{\rho}_{\mathbf{j}}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^{(N-1)n}]. \quad (33.7)$$

При интегрировании в (33.7) по $s_{\mathbf{j}}$ принимаем, что вектор $\tilde{\omega}_{\mathbf{j}}$ направлен вдоль оси z ; интегрирование выполняется по поверхности n -мерной сферы радиуса m :

$$ds_{\mathbf{j}} = s_{\mathbf{j}}^{n-1} (\sin \theta_1)^{n-2} d\theta_1 (\sin \theta_2)^{n-3} d\theta_2 \dots \sin \theta_{n-2} d\theta_{n-2} d\varphi ds_{\mathbf{j}};$$

$$\tilde{J}(\omega) = \int ds_{\mathbf{j}} \delta(|s_{\mathbf{j}}| - m) e^{-i2\pi s_{\mathbf{j}} \tilde{\omega}_{\mathbf{j}}} = \\ = \frac{2\pi^{(n-1)/2}}{\Gamma[(n-1)/2]} \int_0^\infty ds s^{n-1} \int_0^\pi d\theta (\sin \theta)^{n-2} \delta(s - m) e^{-i2\pi s \omega \cos \theta} =$$

$$= \tilde{J}(0) \Gamma(n/2) I_{n/2-1}(-i2\pi \omega m) / (i2\pi \omega m)^{n/2-1}, \quad (33.8)$$

где $I_{n/2-1}$ — модифицированная сферическая функция Бесселя первого рода, $\omega = |\tilde{\omega}_{\mathbf{j}}|$;

$$\tilde{J}(0) = [2\pi^{n/2} m^{n-1} / \Gamma(n/2)] (1/\sqrt{2})^n, \quad (33.9)$$

В кумулянтной форме, соответствующей выражению (4.9), имеем

$$\begin{aligned}
 J(\rho) &= (\tilde{J}(0))^N \prod_1 J(\tilde{\rho}_1); \\
 J(\rho) &= \int d\tilde{\omega}_1 \exp \left[i2\pi\tilde{\omega}_1\rho_1 + \sum_{p \geq 1} D_{2p}(|\tilde{\omega}_1|) \right]; \quad (33.10) \\
 d\tilde{\omega}_1 &= d\omega_1^{(1)} \dots d\omega_1^{(n)}; \\
 D_{2p}(\tilde{\omega}_1) &= \frac{(i2\pi)^{2p}}{(2p)!} \mathfrak{M}_{2p} |\tilde{\omega}_1|^{2p}; \\
 \mathfrak{M}_2 &= m^2/n; \\
 \mathfrak{M}_4 &= 3m^4 \left[\frac{1}{n(n+2)} - \frac{1}{n^2} \right] = -\frac{6m^4}{n^2(n+2)}; \\
 \mathfrak{M}_6 &= 3 \cdot 5m^6 \left[\frac{1}{n(n+2)(n+4)} - 3\frac{1}{n^2(n+2)} + \frac{2}{n^3} \right].
 \end{aligned}$$

Интегрируя в (33.10) по всем $\tilde{\omega}_1$, получаем явную форму для якобиана перехода к КП в n -компонентной модели [93, 129], аналогичную формулам (4.13) и (4.14):

$$\begin{aligned}
 J(\rho) &= C \prod_1 \exp \left[\sum_{p \geq 1} \frac{a_{2p}}{(2p)!} (|\tilde{\rho}_1|)^{2p} \right] = \\
 &= C \exp \left[\sum_{p \geq 1} \frac{a_{2p}}{(2p)!} \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_{2p}} (\rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2}) \dots (\rho_{\mathbf{k}_{2p-1}} \rho_{\mathbf{k}_{2p}}) \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2p}} \right], \quad (33.11)
 \end{aligned}$$

где

$$C = [\tilde{J}(0) C_0]^N; \quad C_0 = \int_0^\infty f(\omega) \omega^{n-1} d\omega. \quad (33.12)$$

В отличие от однокомпонентной модели в рассматриваемом случае n -компонентной модели имеем

$$a_{21} = \langle (\omega \cos \theta)^{21} \rangle^{\text{cum}}; \quad (33.13)$$

$$a_2 = \bar{C}_2; \quad a_4 = 3(\bar{C}_4 - \bar{C}_2^2); \quad (33.14)$$

$$a_6 = 3 \cdot 5(\bar{C}_6 - 3\bar{C}_4\bar{C}_2 + 2\bar{C}_2^3);$$

$$\bar{C}_{2k} = \frac{1}{n(n+2) \dots (n+2k-2)} \int_0^\infty d\omega f(\omega) \omega^{2k+n-1} / \int_0^\infty [d\omega \omega^{n-1} f(\omega)], \quad (33.15)$$

где

$$f(\omega) = \exp \left[\sum_{p \geq 1} D_{2p}(|\tilde{\omega}|) \right]; \quad \omega = |\tilde{\omega}|.$$

В нулевом приближении рассматривается только четверная базисная плотность меры:

$$\begin{aligned}
 a_2 &= \frac{1}{2} \left(\frac{n}{\pi m^2} \right)^2 U_0; \\
 a_4 &= \frac{3}{4} \left(\frac{n}{\pi m^2} \right)^4 (1 - U_0 - U_0^2), \quad (33.16)
 \end{aligned}$$

где

$$U_0 = \left(\frac{n+2}{2} \right)^{1/2} \frac{U[(n+1)/2, \sqrt{(n+2)/2}]}{U[(n-1)/2, \sqrt{(n+2)/2}]};$$

$U(a, x) = D_{-a-1/2}(x)$ — функция параболического цилиндра (в случае n -компонентной модели функциями параболического цилиндра пользоваться гораздо удобнее, чем функциями Бесселя).

Имея для якобиана явную форму, переходим к расчету статистической суммы. В нулевом приближении она представляет собой функциональный интеграл от четверной базисной плотности меры. Подставляя (33.11) в (33.4а), получаем

$$Z = c \int \exp[E_4(\rho)] (d\rho)^N, \quad (33.17)$$

где

$$E_4(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_k d_2(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{a_4}{4!N} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4} (\rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2}) (\rho_{\mathbf{k}_3} \rho_{\mathbf{k}_4}) \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4}.$$

В отличие от однокомпонентной модели здесь имеются скалярные произведения пар $(\rho_{\mathbf{k}_i} \rho_{\mathbf{k}_j})$. Интегрирование выполняется по слоям фазового пространства КП по правилам § 14. Приведем результаты этого интегрирования по этапам его выполнения. Поправка на усреднение потенциала учитываться не будет. Интегрирование по КП в слое $B_1 \leq k \leq B$ происходит сначала по $\eta_{\mathbf{k}}$, затем по $\nu_{\mathbf{k}}$. При интегрировании по $\eta_{\mathbf{k}}$ получается выражение, аналогичное (14.16), с новыми значениями для Q ($d/(2\pi)^2$; $a_4/(2\pi)^4$), S_2 и S_4 (см. (14.18), (14.20)):

$$Q \left(\frac{d}{(2\pi)^2}, \frac{a_4}{(2\pi)^4} \right) = \sqrt[4]{\frac{12}{a_4}}^n U \left(\frac{n-1}{2}, x \right) e^{x^2/4} 2\pi^{n/2};$$

$$S_2 = (2\pi)^2 \frac{1}{2} \sqrt{\frac{12}{a_4}} U(x); \quad (33.18)$$

$$S_4 = -(2\pi)^4 \frac{3}{4} \left(\frac{12}{a_4} \right) \frac{2}{n+2} \left(1 - xU - \frac{n+2}{2} U^2 \right),$$

где

$$x = \frac{\sqrt{3} d(B_1 B)}{\sqrt{a_4}}; \quad U(x) = \frac{U[(n+1)/2, x]}{U[(n-1)/2, x]}.$$

Переход на новую блочную решетку (см. (14.43)) означает замену

$$S_2 = (2\pi)^2 P_2; \quad S_4 = s^D (2\pi)^4 P_4$$

(D — размерность пространства).

Промежуточное интегрирование по ν дает новые значения величин R_2 , R_4 и Q (P_2 , P_4):

$$Q(P_2, P_4) = \left(\frac{1}{2\pi} \right)^4 \sqrt[4]{\frac{12}{P_4}}^n U \left(\frac{n-1}{2}, y \right) e^{y^2/4} 2\pi^{n/2};$$

$$R_2 = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{P_4}} U(y); \quad R_4 = -\frac{18}{n+2} \frac{1}{P_4} \left(1 - yU - \frac{n+2}{2} U^2 \right); \quad (33.19)$$

$$y = \frac{\sqrt{3} P_2}{\sqrt{P_4}} = \frac{\sqrt{s^D}}{\sqrt{a_4}} \left(1 + \frac{2x}{n+2} U^{-1} - \frac{2}{n+2} U^{-2} \right)^{-1/2}.$$

В результате получаем рекуррентные соотношения для n -компонентной модели и парциальную статистическую сумму первого слоя. Вместо формул (14.55), (15.4) и (15.7) имеем

$$\begin{aligned} \mathfrak{A}_1 &= V^{\sqrt{2(N_1-N)n}} [Q(d, a_4)]^N [Q(P_2, P_4)]^{N_1}; \\ a_2^{(1)} &= a_2 + d(B_1 B) M; \\ a_4^{(1)} &= s^D \frac{L(y)}{L(x)} a_4, \end{aligned} \quad (33.20)$$

где

$$\begin{aligned} M(x) &= \mathcal{N}(x) - 1; \quad \mathcal{N}(x) = \frac{yU(y)}{xU(x)}; \\ \mathcal{L}(x) &= \frac{n+2}{2} U^2(x) - xU(x) - 1. \end{aligned}$$

Таблица 12

n	s^*	R_{11}	$\frac{R_{12}}{\sqrt{U^*}}$	$R_{21}\sqrt{U^*}$	R_{22}	E_1	E_2	ν ($\eta=0$)	η
0	4,323	11,896	4,304	1,520	1,000	12,481	0,415	0,580	0,055 0,031
1	3,378	6,781	3,446	1,379	1,000	7,521	0,261	0,603	
2	2,966	5,023	3,184	1,296	1,000	5,874	0,149	0,614	
3	2,740	4,176	3,107	1,229	1,000	5,107	0,069	0,618	
4	2,598	3,687	3,108	1,170	1,000	4,677	0,011	0,619	

Для оценки зависимости критической температуры от n рассматриваем формулу (18.7). Так как согласно (33.16) a_2 пропорционально n^2 (ибо для $n \leq 4$ функция $U(x)$ слабо убывает с ростом n), критическая температура уменьшается с ростом n медленнее, чем $1/n^2$, но быстрее $1/n$. Термодинамические функции n -компонентной модели могут быть найдены подобно тому, как это делается для модели Изинга в гл. IV.

В табл. 12 для разных n приведены значения s^* , соответствующие случаю $x^* = 0$; значения матричных элементов матрицы R ; собственные значения E_1 и E_2 и значения критического индекса ν , найденные в приближении $\eta = 0$. (В разложениях не учтены поправки, пропорциональные $1/s^3$, поэтому, например, для $n = 1$ $s^* = 3,38$, а не 3,5862, как следует из гл. II.)

§ 34. СИСТЕМЫ, СОДЕРЖАЩИЕ КЛАСТЕРЫ И ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ РАЗНЫХ ТИПОВ

В этом параграфе рассматривается обобщение метода КП на сложные кристаллические системы, элементарная ячейка которых содержит несколько неэквивалентных частиц. В гамильтониан таких систем входят некоммутирующие между собой операторы. В общем случае он равен сумме гамильтонианов, каждый из которых описывает взаимодействия различных типов: короткодействующие взаимодействия в небольшой группе частиц (кластере), для которых можно

найти собственные значения, и дальнедействующие взаимодействия, например диполь-дипольного характера. Примером подобных систем являются многие ферромагнетики, а также сегнетоэлектрики с водородными связями типа KN_2PO_4 или RbHPO_4 . Предлагаемое обобщение метода было выполнено в работах Н. А. Кориневского [39, 40, 95, 96].

Рассмотрим гамильтониан

$$H = \Gamma \sum_{q=1}^N \sum_{f=1}^{f_0} s_f^x(\mathbf{R}_q) + V \sum_{q=1}^N \sum_{f,f'=1}^{f_0} s_f^z(\mathbf{R}_q) s_{f'}^z(\mathbf{R}_q) - \frac{1}{2} \sum_{q,q'=1}^N \sum_{f,f'=1}^{f_0} J_{ff'}(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'}) s_f^z(\mathbf{R}_q) s_{f'}^z(\mathbf{R}_{q'}), \quad (34.1)$$

описывающий систему, которая состоит из N узлов. В каждом узле \mathbf{R}_q , задающем центр элементарной ячейки, находится f_0 частиц; всего в системе Nf_0 частиц в объеме v . $J_{ff'}(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'})$ — матрица дальнедействующего взаимодействия между частицами f и f' , находящимися соответственно в узлах \mathbf{R}_q и $\mathbf{R}_{q'}$; V — константа короткодействующего попарного взаимодействия между f_0 частицами в элементарной ячейке. Каждая частица f , $1 \leq f \leq f_0$, в узле \mathbf{R}_q может, кроме того, находиться в двух состояниях, определяемых s^z -матрицей Паули. Переход из одного состояния в другое описывается оператором $s_f^x(\mathbf{R}_q)$, Γ — матричный элемент перехода. Для простоты ограничимся, например, двухчастичным кластером $f_0 = 2$.

Следуя работам [39, 40], диагонализуем два первых слагаемых гамильтониана (34.1). Для этого от матриц s_1^α и s_2^α , $\alpha = x, y, z$, перейдем к матрицам четвертого ранга, равным прямым произведениям $\sigma_1^\alpha = s_1^\alpha \times I$, $\sigma_2^\alpha = I \times s_2^\alpha$, где I — единичная матрица второго ранга. Введем матрицу W унитарного преобразования:

$$W = \begin{pmatrix} -A_1 & -A_2 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ A_2 & -A_1 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ A_2 & -A_1 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -A_1 & -A_2 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix},$$

$$W^{-1} = \begin{pmatrix} -A_1 & A_2 & A_2 & -A_1 \\ -A_2 & -A_1 & -A_1 & -A_2 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix},$$

где

$$A_1 = \frac{2\Gamma - V + \sqrt{V^2 + 4\Gamma^2}}{2\sqrt{2}\sqrt{V^2 + 4\Gamma^2} + 2\Gamma\sqrt{V^2 + 4\Gamma^2}};$$

$$A_2 = \frac{2\Gamma - V - \sqrt{V^2 + 4\Gamma^2}}{2\sqrt{2}\sqrt{V^2 + 4\Gamma^2} - 2\Gamma\sqrt{V^2 + 4\Gamma^2}}.$$

С помощью этой матрицы преобразуемая часть гамильтониана запишется в виде

$$W^{-1} \left[\Gamma \sum_{j=1}^{f_0} \sigma_j^x(\mathbf{R}_q) + V \sum_{j,j'=1}^{f_0} \sigma_j^z(\mathbf{R}_q) \sigma_{j'}^z(\mathbf{R}_q) \right] W = \Lambda(\mathbf{R}_q),$$

где $\Lambda(\mathbf{R}_q)$ — диагональная матрица четвертого ранга с собственными значениями

$$\lambda = \sqrt{V^2 + 4\Gamma^2}, \quad -\lambda, \quad -V, \quad V. \quad (34.2)$$

Ее удобно выразить через диагональные операторы Хаббарда [19, 57, 105]:

$$\Lambda(\mathbf{R}_q) = \sum_{i=1}^4 \lambda_i X^{ii}(\mathbf{R}_q). \quad (34.3)$$

Преобразование $W^{-1}HW$ переводит операторы σ_j^z в операторы $\tilde{\sigma}_j^z = W^{-1}\sigma_j^z W$:

$$\tilde{\sigma}_1^z = \sqrt{2} \begin{vmatrix} 0 & 0 & A_1 & -A_2 \\ 0 & 0 & A_2 & A_1 \\ A_1 & A_2 & 0 & 0 \\ -A_2 & A_1 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad \tilde{\sigma}_2^z = \sqrt{2} \begin{vmatrix} 0 & 0 & A_1 & A_2 \\ 0 & 0 & A_2 & -A_1 \\ A_1 & A_2 & 0 & 0 \\ A_2 & -A_1 & 0 & 0 \end{vmatrix}. \quad (34.4)$$

Дальнейшая часть гамильтониана принимает вид

$$-\frac{1}{2} \sum_{q,q'=1}^N \sum_{i,j,i',j'=1}^4 V_{ij}^{i'j'}(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'}) X^{ij}(\mathbf{R}_q) X^{i'j'}(\mathbf{R}_{q'}), \quad (34.5)$$

где

$$V_{ij}^{i'j'}(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'}) = \sum_{j,j'=1}^{f_0} J_{jj'}(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'}) (\tilde{\sigma}_j^z)_{ij} (\tilde{\sigma}_{j'}^z)_{i'j'} \quad (34.6)$$

— матричный элемент оператора дальнего действия; $X^{ij}(\mathbf{R}_q)$ — операторы Хаббарда, перестановочные соотношения для которых имеют вид

$$[X^{ij}(\mathbf{R}_q), X^{i'j'}(\mathbf{R}_{q'})]_{\mp} = \{X^{ij'}(\mathbf{R}_q) \delta_{ji'} \mp X^{i'j}(\mathbf{R}_q) \delta_{ij'}\} \delta_{qq'};$$

знак «—» соответствует коммутатору в случае хотя бы одного из операторов бозе-типа, знак «+» — антикоммутатору, если оба оператора — ферми-типа.

Далее, следуя работе [40], заменим каждую пару индексов i, j ($i = 1, \dots, 4, j = 1, \dots, 4$) одним индексом m ($m = 1, \dots, 16$) по пра-

виду $m = 4(i - 1) + j$ и с помощью унитарного преобразования

$$X^m(\mathbf{R}_q) = \sum_{l=1}^{16} u_{ml} Y^l(\mathbf{R}_q) \quad (34.7)$$

приведем гамильтониан системы (34.1) к «диагональной» форме

$$H = \sum_{q=1}^N \sum_{l=1}^{16} \Lambda_l Y^l(\mathbf{R}_q) - \frac{1}{2} \sum_{q,q'=1}^N \sum_{l=1}^{16} V_l(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'}) Y^l(\mathbf{R}_q) Y^l(\mathbf{R}_{q'}), \quad (34.8)$$

где

$$\begin{aligned} \Lambda_9 &= \lambda, \quad \Lambda_{12} = -\lambda, \quad \Lambda_{15} = -V, \quad \Lambda_{16} = V; \\ V_1(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'}) &= J_{11}(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'}) + J_{12}(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'}); \\ V_5(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'}) &= J_{11}(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'}) - J_{12}(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'}). \end{aligned} \quad (34.9)$$

Все остальные Λ_l и V_l равны нулю. Матрицу u_{ml} находим из системы уравнений

$$\sum_{m,m'=1}^{16} V_m^{m'}(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'}) u_{ml} u_{m'l'} = V_l(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'}) \delta_{ll'};$$

$$u_{ml} = u_{ijiv'j'}; \quad l = 4(i - 1) + j; \quad m = 4(i' - 1) + j'.$$

Матричные элементы u_{ml} равны:

$$\begin{aligned} u_{1,9} &= u_{2,10} = u_{5,11} = u_{6,12} = u_{11,15} = u_{12,14} = u_{15,13} = u_{16,16} = 1; \\ u_{3,3} &= u_{3,4} = u_{4,7} = u_{4,8} = u_{7,3} = -u_{7,4} = -u_{8,7} = u_{8,8} = -u_{9,3} = \\ &= -u_{9,4} = -u_{10,3} = u_{10,4} = -u_{13,7} = -u_{13,8} = u_{14,7} = -u_{14,8} = \frac{1}{2}; \end{aligned} \quad (34.10)$$

$$-u_{3,2} = -u_{4,5} = u_{7,1} = u_{8,6} = -u_{9,2} = u_{10,1} = -u_{13,5} = u_{14,6} = a;$$

$$u_{3,1} = u_{4,6} = u_{7,2} = u_{8,5} = u_{9,1} = u_{10,2} = u_{13,6} = u_{14,5} = b$$

(все остальные u_{lm} равны нулю);

$$a = \frac{1}{2\sqrt{2}} (\sqrt{1 + 4A_1 A_2} + \sqrt{1 - 4A_1 A_2});$$

$$b = \frac{1}{2\sqrt{2}} (\sqrt{1 + 4A_1 A_2} - \sqrt{1 - 4A_1 A_2}).$$

Перестановочные соотношения для операторов $Y^l(\mathbf{R}_q)$ имеют вид

$$[Y^l(\mathbf{R}_q), Y^{l'}(\mathbf{R}_{q'})] = \sum_{p=1}^{16} W_{ll'}^p Y^p(\mathbf{R}_q) \delta_{qq'} (1 - \delta_{ll'}), \quad (34.11)$$

где

$$W_{ll'}^p = \sum_{i,j,i'} \{u_{ijl} u_{jiv'l'} - u_{ijv} u_{ji'l}\} u_{iv'p}.$$

Операторы $Y^l(\mathbf{R}_q)$ описывают четыре возможных состояния кластера из двух частиц. Каждая частица может находиться в двух положениях. Между этими состояниями — 12 переходов. Выражение

(34.8) представляет собой исходную форму кластерного гамильтониана для сложного кристалла, от которой легко перейти к представлению К.П. Оно было получено в работах [95, 96].

В точке фазового перехода в системе спонтанно зарождается средний момент $\langle \sigma_i^z \rangle$, при этом для сегнетоэлектрического фазового перехода $\langle \sigma_1^z \rangle = \langle \sigma_2^z \rangle$, для антисегнетоэлектрического $\langle \sigma_1^z \rangle = -\langle \sigma_2^z \rangle$. Так как σ_1^z связан только с $\tilde{\sigma}_1^z$, а σ_2^z — с $\tilde{\sigma}_2^z$, то соответственно такие же равенства будут иметь место и для средних $\langle \tilde{\sigma}_i^z \rangle$: $\langle \tilde{\sigma}_1^z \rangle = \langle \tilde{\sigma}_2^z \rangle$ для сегнетоэлектрического фазового перехода и $\langle \tilde{\sigma}_1^z \rangle = -\langle \tilde{\sigma}_2^z \rangle$ для антисегнетоэлектрического. Из преобразований (34.6), (34.7) и (34.10) следует

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_1^z + \tilde{\sigma}_2^z &= cY^1; \\ \tilde{\sigma}_1^z - \tilde{\sigma}_2^z &= cY^5, \end{aligned} \quad (34.12)$$

где $c = 4(A_1b + A_2a)$. Таким образом, при сегнетоэлектрическом фазовом переходе параметр порядка связан со средним от оператора Y^1 , а при антисегнетоэлектрическом — со средним от оператора Y^5 . Как видим, Y^1 и Y^5 коммутируют между собой.

Итак, рассмотрим фазовый переход в системе, описываемой гамильтонианом (34.8):

$$H = H_0 + H_1,$$

где

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{q=1}^N \sum_{l=1}^{16} \Lambda_l Y^l(\mathbf{R}_q); \\ H_1 &= -\frac{1}{2} \sum_{q,q'=1}^N \sum_{l=1}^{16} V_l(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'}) Y^l(\mathbf{R}_q) Y^l(\mathbf{R}_{q'}); \end{aligned} \quad (34.13)$$

$V_l(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'})$ — потенциал притяжения, для которого существует фурье-образ:

$$V_l(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{V}_l(\mathbf{k}) \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{R}_q - \mathbf{R}_{q'})]. \quad (34.14)$$

Рассчитаем статистическую сумму системы

$$Z = \text{Sp } e^{-\beta H}. \quad (34.15)$$

В качестве «системы отсчета» выделим подсистему невзаимодействующих кластеров, определяемую гамильтонианом H_0 :

$$Z = Z_0 \left\langle T \exp \left[- \int_0^\beta \tilde{H}_1(\beta') d\beta' \right] \right\rangle_0, \quad (34.16)$$

где

$$Z_0 = \text{Sp } \exp(-\beta H_0) = 2 \text{ch } \beta V + 2 \text{ch } \beta \sqrt{V^2 + 4\Gamma^2}$$

— статистическая сумма системы невзаимодействующих кластеров;

$$\langle T(\dots) \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \text{Sp} [\exp(-\beta H_0) T(\dots)].$$

Перейдем к методу КП. Разложим $\tilde{H}_1(\beta')$ в ряд Фурье:

$$\tilde{H}_1(\beta') = \sum_{\mathbf{k}} \sum_l \tilde{V}_l(k) \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^l(\beta') \hat{\rho}_{-\mathbf{k}}^l(\beta'), \quad (34.17)$$

где $\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^l(\beta')$ — операторы мод дипольного момента в представлении взаимодействия:

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^l(\beta') = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \tilde{Y}^l(\mathbf{R}_q, \beta') \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{R}_q); \quad (34.18)$$

$$\tilde{Y}^l(\mathbf{R}_q, \beta') = \exp(-\beta' H_0) Y^l(\mathbf{R}_q) \exp(\beta' H_0).$$

Вместо операторов $\tilde{\rho}_{\mathbf{k}}^l(\beta')$ можем ввести их частотные представления:

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^l(\beta') = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{\nu} \hat{\rho}_{\mathbf{k}\nu}^l \exp(i\nu\beta'), \quad (34.19)$$

где

$$\nu = \frac{2\pi}{\beta} n \text{ или } \nu = \frac{\pi}{\beta} (2n + 1), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (34.20)$$

в зависимости от того, к какому типу статистики (Бозе или Ферми) принадлежат операторы Y^l .

Выполняемые условия полноты имеют вид

$$\frac{1}{\beta} \int_0^{\beta} \exp[i(\nu + \nu')\beta'] d\beta' = \delta_{\nu+\nu'}. \quad (34.21)$$

Определим множество КП $\{\rho_{\mathbf{k}\nu}^l\}$ соотношениями:

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}\nu}^l = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_{\mathbf{k}\nu}^l J_l(\hat{\rho}\rho) d\rho, \quad (34.22)$$

где согласно (3.2)—(3.6) $J(\hat{\rho}\rho)$ — оператор перехода:

$$J_l(\hat{\rho}\rho) = \prod_{\mathbf{k}} \prod_{\nu} \{ \delta [(\rho_{\mathbf{k}\nu}^l)^c - (\hat{\rho}_{\mathbf{k}\nu}^l)^c] + \delta [(\rho_{\mathbf{k}\nu}^l)^s - (\hat{\rho}_{\mathbf{k}\nu}^l)^s] \} + \delta(\rho_{00}^l - \hat{\rho}_{00}^l); \quad (34.23)$$

здесь

$$\begin{aligned} (\hat{\rho}_{\mathbf{k}\nu}^l)^c &= \frac{1}{\sqrt{\beta}} \int_0^{\beta} [\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^l(\beta')]^c e^{-i\nu\beta'} d\beta'; \\ [\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^l(\beta')]^c &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q Y^l(\mathbf{R}_q, \beta') \cos \mathbf{k}\mathbf{R}_q. \end{aligned} \quad (34.24)$$

Для $(\rho_{\mathbf{k}\nu}^l)^s$ и $\rho_{0\nu}^l$ можно получить подобные выражения. По аналогии с (3.9) и (3.10) вводим комплексные величины

$$\rho_{\kappa}^l = (\rho_{\kappa}^l)^c + i (\rho_{\kappa}^l)^s, \quad \kappa = \{\mathbf{k}, \nu\}. \quad (34.25)$$

В результате для S -матрицы получаем

$$\begin{aligned} & \left\langle T \exp \left[- \int_0^{\beta} \tilde{H}_1(\beta') d\beta' \right] \right\rangle_0 = \\ & = \int \exp \left[\frac{\beta}{2} \sum_{l=1}^{16} \sum_{\kappa} \tilde{V}_l(\kappa) \rho_{\kappa}^l \rho_{-\kappa}^l \right] J(\rho) (d\rho), \end{aligned} \quad (34.26)$$

где $\tilde{V}_l(\kappa) = \tilde{V}_l(\mathbf{k}, 0)$ — фурье-образ потенциала, определяемый соотношением (34.17):

$$(d\rho) = \prod_l \prod_{\nu} d\rho_{0\nu}^l \prod_{\mathbf{k}} d(\rho_{\mathbf{k}\nu}^l)^c d(\rho_{\mathbf{k}\nu}^l)^s; \quad (34.27)$$

якобиан перехода

$$J(\rho) = \left\{ \text{Sp} \left[e^{-\beta H_0} T \prod_l J_l(\hat{\rho}\rho) \right] \right\} \frac{1}{Z_0}. \quad (34.28)$$

Символ T -произведения относится к операторам $\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^l(\beta')$, через которые выражаются операторы $\hat{\rho}_{\mathbf{k}\nu}^l$ согласно формулам (34.24). Подобно (3.6) и (4.1) якобиан записываем в интегральной форме

$$\begin{aligned} J(\rho) &= \frac{1}{Z_0} \int \left\{ \exp \left(i2\pi \sum_l \sum_{\kappa} w_{\kappa}^l \rho_{\kappa}^l \right) \times \right. \\ & \times \left. \text{Sp} \left[e^{-\beta H_0} T \exp \left(-i2\pi \sum_l \sum_{\kappa} w_{\kappa}^l \hat{\rho}_{\kappa}^l \right) \right] \right\} (dw). \end{aligned} \quad (34.29)$$

Он отличается от якобиана (4.1) тем, что усреднение выполняется по системе отсчета $\frac{1}{Z_0} \text{Sp} [e^{-\beta H_0} T (...)]$; кроме того, операторы $\hat{\rho}_{\kappa}^l$, которые не коммутируют между собой, должны располагаться в (34.29) в порядке T -произведения. Подобно (4.10) результат усреднения в (34.29) представляем в экспоненциальной форме. Для якобиана получаем следующую, соответствующую выражению (3.10), интегральную форму:

$$J(\rho) = \int (d\omega) \exp \left[i2\pi \sum_l \sum_{\kappa} \omega_{\kappa}^l \rho_{\kappa}^l + \sum_n D_n(\omega) \right], \quad (34.30)$$

где

$$D_n(\omega) = \frac{(-i2\pi)^n}{n!} \sum_{l_1 \kappa_1} \dots \sum_{l_n \kappa_n} \mathfrak{M}_{l_1, \dots, l_n}(\kappa_1, \dots, \kappa_n) (\omega_{\kappa_1}^{l_1} \dots \omega_{\kappa_n}^{l_n}; \quad (34.31)$$

кумулянты $\mathfrak{M}_{l_1, \dots, l_n}(\kappa_1, \dots, \kappa_n)$ выражаются суммой запаздывающих функций Грина, построенных на операторах $\hat{\rho}_{\kappa}^l$ согласно формуле

(4.21):

$$\mathfrak{M}_{l_1 \dots l_n}(\kappa_1, \dots, \kappa_n) = \frac{\partial^n}{\partial \omega_{\kappa_1}^{l_1} \dots \partial \omega_{\kappa_n}^{l_n}} \ln \left\langle T \exp \left(\sum_l \sum_{\kappa} \omega_{\kappa}^l \hat{\rho}_{\kappa}^l \right) \right\rangle_0 \Big|_{\omega=0}. \quad (34.32)$$

При этом отличными от нуля будут средние от произведений четного числа операторов $\hat{\rho}_{\kappa}^l$. Согласно (4.21) имеем

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}_{l_1, \dots, l_{2n}}(\kappa_1, \dots, \kappa_{2n}) &= G_{l_1, \dots, l_{2n}}(\kappa_1, \dots, \kappa_{2n}) - \\ &- \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{2n} \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{2n} G_{l_i l_j}(\kappa_i, \kappa_j) G_{l_1, \dots, l_{i-1} l_{i+1} l_j \dots l_{j+1} \dots l_{2n}}(\dots) + \dots \\ &\dots + (-1)^{l+1} \sum_x G_{l_1 l_2}(\kappa_1, \kappa_2) \dots G_{l_i l_j}(\kappa_i, \kappa_j), \end{aligned} \quad (34.33)$$

где $G_{l_1, \dots, l_{2n}}(\kappa_1, \dots, \kappa_{2n})$ — запаздывающая функция Грина:

$$G_{l_1, \dots, l_{2n}}(\kappa_1, \dots, \kappa_{2n}) = \langle T \hat{\rho}_{\kappa_1}^{l_1} \dots \hat{\rho}_{\kappa_{2n}}^{l_{2n}} \rangle_0. \quad (34.34)$$

Символ \sum_x обозначает сумму $\frac{(2n)!(n-1)!}{n!2^n}$ слагаемых, состоящих из различных произведений парных функций Грина. Кумулянты подобного типа рассматривались в методе КП. Для конкретного случая двухчастичного кластера значения кумулянтов были вычислены в работе [39]. Приведем их:

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}_{11}(\kappa_1, \kappa_2) &= \frac{2\lambda - V}{4\lambda} \frac{\lambda - V}{(\lambda - V)^2 + v_1^2} \frac{e^{\beta\lambda} - e^{\beta V}}{\beta Z_0} \delta(\kappa_1 + \kappa_2); \\ \mathfrak{M}_{55}(\kappa_1, \kappa_2) &= \frac{2\lambda + V}{4\lambda} \frac{\lambda - V}{(\lambda - V)^2 + v_1^2} \frac{e^{-\beta V} - e^{-\beta\lambda}}{\beta Z_0} \delta(\kappa_1 + \kappa_2); \end{aligned} \quad (34.35)$$

$\lambda = \lambda_1 = \sqrt{V^2 + 4V^2}$ (см. (34.2));

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}_{1111}(\kappa_1, \dots, \kappa_4) &= \frac{a^2 b^2}{4!} \sum_{\Phi} \{ \beta^3 (V - \lambda - i v_1) [V + \lambda + i(v_1 + v_2)] \times \\ &\times (V + \lambda - i v_3) \}^{-1} \frac{e^{-\beta\lambda} + e^{\beta V}}{Z_0} \delta(\kappa_1 + \dots + \kappa_4) - \\ &- \sum^{\circ} \mathfrak{M}_{11}(\kappa_i, \kappa_j) \mathfrak{M}_{11}(\kappa_s, \kappa_t), \quad i, j, s, t = 1, \dots, 4. \end{aligned} \quad (34.36)$$

\sum_{Φ} обозначает сумму 24 слагаемых следующего типа: если первое слагаемое условно записать в виде 1,1 + 2,3, то остальные имеют вид 1,1 + 3,2; 1,1 + 3,4; 1,1 + 4,2; ..., 4,4 + 3,2 (\sum° означает суммирование по трем слагаемым). Для \mathfrak{M}_{5555} получаем аналогичное выражение:

$$\mathfrak{M}_{5555}(\kappa_1, \dots, \kappa_4) = \frac{a^2 b^2}{4!} \sum_{\Phi} \{ \beta^3 (\lambda - V - i v_1) [\lambda + V + i(v_1 + v_2)] \times$$

$$\begin{aligned} & \times (\lambda + V - iv_3)^{-1} \frac{e^{\beta\lambda} + e^{-\beta V}}{Z_0} \delta(\kappa_1 + \dots + \kappa_4) - \\ & - \sum^{\circ} \mathfrak{M}_{55}(\kappa_i, \kappa_j) \mathfrak{M}_{55}(\kappa_s, \kappa_t); \end{aligned} \quad (34.37)$$

\mathfrak{M}_{5511} определяется как

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}_{5511}(\kappa_1, \dots, \kappa_4) &= \frac{a^2 b^2}{4!} \sum_{\Phi} \{\beta^3 (-V + \lambda - iv_1) [V + \lambda - i(v_1 + v_2)] \times \\ & \times (V + \lambda - iv_3)^{-1} \frac{e^{-\beta V} + e^{\beta\lambda}}{Z_0} \delta(\kappa_1 + \dots + \kappa_4) - \\ & - \sum^{\circ} \mathfrak{M}_{55}(\kappa_i, \kappa_j) \mathfrak{M}_{11}(\kappa_s, \kappa_t). \end{aligned} \quad (34.38)$$

Подставляем явную форму якобиана в формулу (34.26) для S -матрицы и, принимая во внимание (34.16), получаем следующее общее выражение для статистической суммы взаимодействующей системы кластеров в фазовом пространстве КП:

$$\begin{aligned} Z &= Z_0 \int \exp \left[\frac{\beta}{2} \sum_l \sum_{\kappa} \tilde{V}_l(\kappa) \rho_{\kappa}^l \rho_{-\kappa}^l \right] \times \\ & \times \left\{ \int (d\omega) \exp \left[i2\pi \sum_l \sum_{\kappa} \omega_{\kappa}^l \rho_{\kappa}^l + \sum_n D_n(\omega) \right] \right\} (d\rho). \end{aligned} \quad (34.39)$$

Таким образом, поставлена задача исследования фазовых переходов в кластерных системах методом КП. Описанный здесь метод можно применить в различных квантовых системах. В качестве конкретного примера рассмотрим сегнетоэлектрик с двухчастичным кластером. Отметим некоторые особенности этой квантовой системы. Тот факт, что гамильтониан системы (34.13) состоит из некоммутирующих между собой операторов \tilde{Y}^l , обуславливает появление добавочного функционального аргумента β или v . В результате каждая коллективная переменная ρ_{κ} имеет четыре индекса $\kappa = \{\mathbf{k}, \nu\}$. Число переменных ρ_{κ}^l становится бесконечно большим. Для \mathbf{k} имеем N значений внутри первой зоны Бриллюэна, а для ν — бесконечное число значений. Такая же ситуация возникает и при рассмотрении ферромагнетика Гейзенберга.

Для расчета термодинамических функций необходима базисная плотность меры. В рассматриваемой задаче для сегнетоэлектрика имеется два набора КП (см. (34.12) и (34.9)): $\rho_{\mathbf{k}\nu}^1$ связаны с сегнетоэлектрическим фазовым переходом, а $\rho_{\mathbf{k}\nu}^5$ — с антисегнетоэлектрическим. Какой из них реализуется раньше при более высокой температуре, а какой при более низкой — зависит от конкретных значений потенциалов V_1 и V_5 , приведенных в (34.9), и соответствующих им фурье-образов $\tilde{V}_1(\mathbf{k})$ и $\tilde{V}_5(\mathbf{k})$.

Предположим, что

$$\max \tilde{V}_1(\mathbf{k}) = \tilde{V}_1(0) > \max \tilde{V}_5(\mathbf{k}) \quad (34.40)$$

и

$$\mathfrak{M}_{11}(0) \tilde{V}_1(0) > \mathfrak{M}_{55}(0) \tilde{V}_5(0),$$

где

$$\mathfrak{M}_{11}(0) = \mathfrak{M}_{11}|_{v=0}, \quad \mathfrak{M}_{55}(0) = \mathfrak{M}_{55}|_{v=0}.$$

Тогда $T_{св}$ — критическая температура сегнетоэлектрического фазового перехода — будет выше, чем $T_{асв}$ — температура антисегнетоэлектрического фазового перехода. При $T = T_{св}$

$$\beta \mathfrak{M}_{11}(0) \tilde{V}_1(0) \approx 1; \quad \beta \tilde{V}_5(0) < 1/\mathfrak{M}_{55}(0). \quad (34.41)$$

Следовательно, в области температур, близких к $T_{св}$, для переменной ρ_{κ}^5 в качестве базисного следует выбирать гауссово распределение.

Теперь о базисном распределении для переменных ρ_{κ}^1 . Как следует из (34.35), $\mathfrak{M}_{11}(\kappa_1, \kappa_2) = \mathfrak{M}_{11}(v_1) \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)$, $\mathfrak{M}_{11}(v_1)$ имеет максимум при $v_1 = 0$, и поэтому $T_{св}$ определяется оценкой

$$\mathfrak{M}_{11}(0) \tilde{V}_1(0) \approx T_{св}. \quad (34.42)$$

Если все операторы Y^l (или первоначальные операторы s^z и s^x) коммутируют между собой, нет необходимости использовать представление взаимодействия, и для гамильтониана $\tilde{H}_1(\beta')$ вместо выражения (34.17) имеем следующее:

$$\tilde{H}_1 = \sum_{\mathbf{k}l} \tilde{V}_l(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}0}^l \rho_{-\mathbf{k}0}^l.$$

В статистической сумме (34.39) сократились бы интегралы по всем $\rho_{\mathbf{k}v}$ и $\omega_{\mathbf{k}v}$ с $v \neq 0$. Если же в исходном гамильтониане имеются некоммутирующие операторы, то в статистической сумме, представленной в форме функционального интеграла (34.39), будут, естественно, присутствовать интегралы и по переменным $\rho_{\mathbf{k}v}$ и $\omega_{\mathbf{k}v}$ с $v \neq 0$. С этой точки зрения переменные $\rho_{\mathbf{k}0}$ и $\omega_{\mathbf{k}0}$ назовем классическими, а $\rho_{\mathbf{k}v}$ и $\omega_{\mathbf{k}v}$ — квантовыми.

Отметим существенное различие между спектрами значений индексов \mathbf{k} и v . Спектр индексов \mathbf{k} почти непрерывный:

$$\Delta k = 2\pi/Nc \text{ при } N \rightarrow \infty, \quad \Delta k \rightarrow 0.$$

Спектр же v строго дискретный, интервал $\Delta v = 2\pi/\beta$ зависит от величины β и в области критических температур сегнетоэлектриков Δv является сравнительно большой величиной, которая к тому же не связана с термодинамическим предельным переходом. Поэтому будем считать, что базисной плотностью меры для квантовых переменных $\rho_{\mathbf{k}v}$ ($v \neq 0$) является гауссово распределение.

Обозначим классические переменные $\rho_{\mathbf{k}0}^1$ через $\rho_{\mathbf{k}}^1$, $\omega_{\mathbf{k}0}^1$ — через $\omega_{\mathbf{k}}^1$. Статистическую сумму (34.39) представим в следующей форме:

$$Z = Z_0 \int \exp \left[\frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{V}_1(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}}^1 \rho_{-\mathbf{k}}^1 + i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}}^1 \rho_{\mathbf{k}}^1 - \right. \\ \left. - \frac{(2\pi)^2}{2} \mathfrak{M}_{11}(0) \sum \omega_{\mathbf{k}}^1 \omega_{-\mathbf{k}}^1 - \frac{(2\pi)^4}{4!} \mathfrak{M}_{1111}(0) \sum \omega_{\mathbf{k}_1}^1 \dots \omega_{\mathbf{k}_4}^1 \delta(\omega_1 + \dots \right.$$

$$\begin{aligned}
& \dots + \omega_4) + \dots \left] (d\rho)^N (d\omega)^N \int \exp \left[\frac{\beta}{2} \sum_{\kappa} V_1(\mathbf{k}) \rho_{\kappa}^1 \rho_{-\kappa}^1 + \right. \\
& - i2\pi \sum_{\kappa} \omega_{\kappa}^1 \rho_{\kappa}^1 - \frac{(2\pi)^2}{2} \sum_{\kappa} \mathfrak{M}_{11}(\kappa) \omega_{\kappa}^1 \omega_{-\kappa}^1 \left. \right] \exp \left[\frac{\beta}{2} \sum_{\kappa} V_5(\mathbf{k}) \rho_{\kappa}^5 \rho_{-\kappa}^5 + \right. \\
& \left. + i2\pi \sum_{\kappa} \omega_{\kappa}^5 \rho_{\kappa}^5 - \frac{(2\pi)^2}{2} \sum_{\kappa} \mathfrak{M}_{55}(\kappa) \omega_{\kappa}^5 \omega_{-\kappa}^5 \right] \times \\
& \times \left[1 + \sum_{n \geq 2} D_{2n}^1(\omega) + \dots \right] \prod_{\kappa} d\omega_{\kappa} \prod_{\kappa} d\rho_{\kappa}. \quad (34.43)
\end{aligned}$$

Символ Σ' обозначает, что из состава суммы исключены слагаемые с $\nu = 0$, а в выражениях $D_{2n}^1(0)$ отсутствуют члены, состоящие из одних только классических переменных $\omega_{\mathbf{k}_1}$: например, в D_{2n}^1 отсутствуют выражения $\mathfrak{M}_{1111}(0) \Sigma \omega_{\mathbf{k}_1} \dots \omega_{\mathbf{k}_1}$. В $\prod_{\kappa} d\omega_{\kappa} \prod_{\kappa} d\rho_{\kappa}^1$ исключены все дифференциалы $d\omega_{\mathbf{k}}^1$ и $d\rho_{\mathbf{k}}^1$. Однако в состав $D_{2n}(\omega)$ входят смешанные произведения классических и квантовых переменных, например,

$$\omega_{\mathbf{k}_1}^1 \omega_{\mathbf{k}_2}^1 \omega_{\mathbf{k}_3}^1 \omega_{\mathbf{k}_4}^1, \quad \nu_3, \nu_4 \neq 0; \quad \omega_{\mathbf{k}_1}^1 \omega_{\mathbf{k}_2}^1 \omega_{\mathbf{k}_3}^5 \omega_{\mathbf{k}_4}^5, \quad \nu_3 \neq 0.$$

В целом статистическая сумма состоит из произведения Z_0 на Z_5 (парциальную статистическую сумму фазового пространства переменных ρ_{κ}^5 , которая вычисляется с помощью гауссовой плотности меры), Z_1^G (парциальную статистическую сумму от квантовой компоненты ρ_{κ}^1 , с $\nu \neq 0$, которая также вычисляется при помощи гауссовой плотности меры) и $Z_1^{(4)}$ (парциальную статистическую сумму от множества классических переменных $\rho_{\mathbf{k}}^1$, которые и описывают сегнетоэлектрический фазовый переход). Базисной плотностью меры для переменных $\rho_{\mathbf{k}}^1$ является четверная плотность меры вида (12.26) с перенормированными коэффициентами. С точностью до базисного распределения статистическая сумма имеет вид

$$Z = Z_0 Z_5^G Z_1^G Z_1^{(4)}, \quad (34.44)$$

где

$$Z_5^G = \prod_{\kappa} \frac{1}{V \sqrt{1 - \beta \tilde{V}_5(\mathbf{k}) \mathfrak{M}_{55}(\kappa)}}; \quad (34.45)$$

$$\begin{aligned}
Z_1^G = \prod_{\kappa(\nu > 0)} \frac{1}{V \sqrt{1 - \beta \tilde{V}_1(\mathbf{k}) \mathfrak{M}_{11}(\kappa)}} \exp \left[-\frac{1}{8} \mathfrak{M}_{1111}(\kappa_1, -\kappa_1, \kappa_2, -\kappa_2) \times \right. \\
\left. \times g_1(\kappa_1) g_1(\kappa_2) \right], \quad (34.46)
\end{aligned}$$

а

$$g_1(\kappa_1) = \frac{\beta V_1(\kappa_1)}{1 - \beta V_1(\kappa_1) \mathfrak{M}_{11}(\kappa_1)};$$

и наконец

$$Z_1^{(4)} = \int (d\rho_{\mathbf{k}})^N \exp \left[\frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{k}} V_1(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}}^i \rho_{-\mathbf{k}}^i \right] \times \\ \times \int (d\omega_{\mathbf{k}})^N \exp \left[i2\pi \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} - \frac{(2\pi)^2}{2} \sum_{\mathbf{k}} \mu_2(\mathbf{k}) \omega_{\mathbf{k}} \omega_{-\mathbf{k}} - \right. \\ \left. - \frac{(2\pi)^4}{4!} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4} \mu_4(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4) \omega_{\mathbf{k}_1} \dots \omega_{\mathbf{k}_4} \delta(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4) \right]. \quad (34.47)$$

Здесь

$$\mu_2(\mathbf{k}) = \mathfrak{M}_{111}(\mathbf{k}) + b_2(\mathbf{k}); \quad (34.48)$$

$$b_2(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2} \sum_{\kappa} \mathfrak{M}_{5511}(\kappa, -\kappa, \mathbf{k}, -\mathbf{k}) g_5(\kappa) + \dots;$$

$$\mu_4(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4) = \mathfrak{M}_{1111}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4) + b_4(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4);$$

$$b_4(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4) = -\frac{3}{2} \sum_{\kappa_1, \kappa_2} \mathfrak{M}_{1111}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \kappa_1, \kappa_2) \times \quad (34.49) \\ \times \mathfrak{M}_{1111}(-\kappa_1, -\kappa_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) g(\kappa_1) g(\kappa_2) + \dots$$

Сегнетоэлектрический фазовый переход связан с расчетом статистической суммы $Z_1^{(4)}$. В отличие от модели Изинга коэффициенты $\mu_2(\mathbf{k})$ и $\mu_4(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4)$ являются функциями параметра \mathbf{k} , которые, однако, очень слабо от него зависят. С учетом этого факта интегрирование выполняется по расписанному уже способу для модели Изинга.

§ 35. БИНАРНЫЕ СПЛАВЫ

Рассмотрим бинарный сплав замещения, содержащий в объеме V N_a ионов сорта a и N_b ионов сорта b ; $N_a + N_b = N$, N — число атомов в сплаве. Ионы находятся в узлах кристаллической решетки, колебаниями ионов пренебрегаем. При высоких температурах ионы распределены хаотически. Начиная с некоторого значения $T = T_c$ происходит упорядочивание в расположении ионов сортов a и b по узлам решетки [41]. Задача о бинарном сплаве может быть успешно решена методом КП (см., например, работы З. А. Гурского, И. П. Зеленчука [89, 90]).

В этом параграфе рассматривается постановка задачи и ее решение приводится к трехмерной модели Изинга. При этом возникает ряд существенных моментов, которые обсуждаются ниже.

Рассмотрим гамильтониан системы. Положение ионов сорта a или b в узлах \mathbf{R} можно описать с помощью операторов Паули $\sigma_{\mathbf{R}}^z$:

$$\frac{1 + \sigma_{\mathbf{R}}^z}{2} = \begin{cases} 1, & \text{если узел } \mathbf{R} \text{ занят ионом сорта } a; \\ 0, & \text{если узел } \mathbf{R} \text{ не занят ионом сорта } a; \end{cases} \\ \frac{1 - \sigma_{\mathbf{R}}^z}{2} = \begin{cases} 1, & \text{если узел } \mathbf{R} \text{ занят ионом сорта } b, \\ 0, & \text{если узел } \mathbf{R} \text{ не занят ионом сорта } b. \end{cases} \quad (35.1)$$

Полное число ионов сортов a и b описывается соответственно операторами

$$N_a = \sum_{\mathbf{R}} \frac{1 + \sigma_{\mathbf{R}}^z}{2} \quad \text{и} \quad N_b = \sum_{\mathbf{R}} \frac{1 - \sigma_{\mathbf{R}}^z}{2}. \quad (35.2)$$

Гамильтониан системы состоит из суммы гамильтониана подсистемы электронов проводимости H_e , гамильтониана полного остова H_{lat} и гамильтониана взаимодействия между электронами проводимости и всеми частицами ионных остовов H_{ei} (ионный остов состоит из ядер и электронов внутренних оболочек):

$$H = H_e + H_{ei} + H_{lat}; \quad (35.3)$$

$$H_e = -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{m} \sum_{j=1}^{N_z} \Delta_j + \frac{1}{2} \sum_{j \neq l} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l|};$$

$$H_{lat} = \sum_{\mathbf{R}} \left[H_a^0(\mathbf{R}) \frac{1 + \sigma_{\mathbf{R}}}{2} + H_b(\mathbf{R}) \frac{1 - \sigma_{\mathbf{R}}}{2} \right] + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} V(\mathbf{R}, \mathbf{R}');$$

$$H_a(\mathbf{R}) = \sum_{l=1}^{A_a - z_a} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_l - \frac{e^2 A_a}{|\mathbf{r}_l - \mathbf{R}|} \right) + \sum_{t,u} \frac{1}{2} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_t - \mathbf{r}_u|};$$

$$V(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = V_{aa}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') \frac{1 + \sigma_{\mathbf{R}}}{2} \frac{1 + \sigma_{\mathbf{R}'}}{2} + V_{bb}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') \frac{1 - \sigma_{\mathbf{R}}}{2} \times \\ \times \frac{1 - \sigma_{\mathbf{R}'}}{2} + 2V_{ab} \frac{1 + \sigma_{\mathbf{R}}}{2} \frac{1 - \sigma_{\mathbf{R}'}}{2};$$

$$V_{xy}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = Q_{\mathbf{R}}^{(x)} Q_{\mathbf{R}'}^{(y)} \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|},$$

где $Q_{\mathbf{R}}^{(x)}$ — оператор обобщенного заряда [66]:

$$Q_{\mathbf{R}}^{(x)} = \left\{ A_x - \sum_{l=1}^{A_x - z_x} \exp[(\mathbf{r}_l - \mathbf{R}) \nabla_{\mathbf{R}}] \right\} e;$$

A_x — порядковый номер; z_x — валентность атома сорта x ; \mathbf{r}_l — координата электрона ионного остова. Гамильтониан

$$H_{ei} = \sum_{\mathbf{R}} \sum_{j=1}^{N_z} \left[\frac{1 + \sigma_{\mathbf{R}}}{2} Q_{\mathbf{R}}^{(a)} + \frac{1 - \sigma_{\mathbf{R}}}{2} Q_{\mathbf{R}}^{(b)} \right] \frac{e}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{R}|}.$$

Чтобы найти исходный гамильтониан модели двухкомпонентного сплава, следует прологарифмировать след статистического оператора, взятого по всем электронным состояниям системы:

$$H(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) = -T \ln \text{Sp}_{эл} \exp[-\beta (H_e + H_{ei} + H_{lat})].$$

В работе [24] приведена явная форма гамильтониана, полученная при следующих приближениях для электронных состояний: взаимодействие между электронами проводимости и электронами остова рассматривается в приближении Хартри — Фока; предполагается, что состояния электронов остова в металле и в изолированном

иногда одни и те же и волновые функции связанных состояний и соседних остовов не перекрываются. В качестве базиса для волновых функций электронов проводимости рассматривается базис полностью ортогонализированных плоских волн. В результате интегрирования по координатам всех электронов получается гамильтониан системы¹⁶

$$H = V_0 + \sum_{n=1}^N \frac{1}{n!} V_n(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_n) \sigma_{\mathbf{R}_1} \dots \sigma_{\mathbf{R}_n}. \quad (35.4)$$

Потенциалы V_n зависят только от координат ионов и описывают n -частичное взаимодействие между ними. Координаты ионов фиксированы. Различные собственные значения H обусловлены взаимным расположением ионов по узлам решетки. Оно определяется набором собственных значений операторов $\sigma_{\mathbf{R}_1}, \dots, \sigma_{\mathbf{R}_n}$ и формулами (35.1) при условиях (35.2).

Фазовый переход состоит в следующем: при высоких температурах ионы сортов a и b размещаются в узлах решетки хаотически; начиная с некоторой температуры T_c в системе возникает порядок в расположении атомов сортов a и b . Будем рассматривать в гамильтониане (35.4) только парные взаимодействия. Чтобы не ограничиваться фиксированными числами состояний N_a и N_b , введем химические потенциалы μ_a и μ_b и слагаемые $N_a \mu_a$ и $N_b \mu_b$. Исходное выражение для статистической суммы представим в виде

$$Z = \exp[-\beta V_0(\mu)] \text{Sp}_{\{\sigma_{\mathbf{R}}\}} \exp \left\{ -\beta \left[\sum_{\mathbf{R}} V_1(\mathbf{R}, \mu) \sigma_{\mathbf{R}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} V_2(\mathbf{R}, \mathbf{R}') \sigma_{\mathbf{R}} \sigma_{\mathbf{R}'} \right] \right\}; \quad (35.5)$$

$$V_0(\mu) = V_0 + \frac{N}{2} (\mu_a + \mu_b); \quad (35.6)$$

$$V_1(\mu) = V_1(\mathbf{R}) + \frac{\mu_a - \mu_b}{2}. \quad (35.7)$$

При этом

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta \mu_a} = -N_a; \quad \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta \mu_b} = -N_b. \quad (35.8)$$

Потенциал упорядочения $V_2(\mathbf{R})$ в (35.5) характеризует различие во взаимодействиях пар одноименных ионов и ионов разных сортов:

$$V_2(\mathbf{R}) = V_{aa}(\mathbf{R}) + V_{bb}(\mathbf{R}) - 2V_{ab}(\mathbf{R}), \quad (35.9)$$

где $V_{ij}(\mathbf{R})$, $i = a, b$, — потенциал эффективного взаимодействия ионов i - и j -го сортов, находящихся на расстоянии \mathbf{R} .

Рассмотрим бинарные системы кубической симметрии. В этом случае $V_1(\mathbf{R}, \mu) = \text{const}$ [58]. В результате в (35.5) получаем гамиль-

¹⁶ Явные выражения для потенциалов V_n здесь не выписываются; их величина существенно зависит от степени учета многочастичных корреляций электронов проводимости и точности расчета псевдопотенциала сплава. Эти вопросы освещены в работе [15].

тонии взаимодействующих спинов в постоянном внешнем поле. Для расчета статистической суммы переходим к фазовому пространству КП, которые определяются с помощью формул (3.10). Функциональный интеграл для статистической суммы имеет вид

$$Z = C \exp[-\beta V_0(\mu)] \int \exp[E_4(\rho)] (d\rho)^N, \quad (35.10)$$

где

$$E_4(\rho) = -\beta \sqrt{N} v_1 \rho_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} d_2(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{4!} \frac{a_4}{N} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4); \quad (35.11)$$

$$v_1 = V_1 + \frac{\mu_a - \mu_b}{2}; \quad (35.12)$$

$$d_2(\mathbf{k}) = a_2 + \beta \tilde{V}_2(\mathbf{k}); \quad (35.13)$$

$\tilde{V}_2(\mathbf{k})$ — фурье-образ потенциала $V_2(\mathbf{R})$; C , a_2 и a_4 определяются формулами (12.4), (12.19), (12.20); V_0 , V_1 , V_2 рассчитаны в работах [24, 89]. Статистическую сумму (35.10) интегрируем по слоям фазового пространства КП. Для бинарного сплава возникают специфические особенности. Они обусловлены наличием внешнего поля $V_1(\mu)$ и поведением потенциала $\tilde{V}_2(\mathbf{k})$, которое тесно связано со структурой кристалла. С учетом условий (35.8) находим

$$\frac{N}{2} + \frac{\sqrt{N} \langle \rho_0 \rangle}{2} = N_a; \quad \frac{N}{2} - \frac{\sqrt{N} \langle \rho_0 \rangle}{2} = N_b,$$

где

$$\langle \rho_0 \rangle = \frac{\int \rho_0 \exp[E_4(\rho)] (d\rho)^N}{Z},$$

$$Z = \int \exp[E_4(\rho)] (d\rho)^N.$$

Следовательно,

$$\langle \rho_0 \rangle = (N_a - N_b) / \sqrt{N}. \quad (35.14)$$

Независимо от формы потенциала значения ρ_0 должны колебаться вблизи точки $\langle \rho_0 \rangle$. Формы потенциала $V_2(\mathbf{k})$ различны для разных бинарных систем. На рис. 25 приведены кривые $d_2(\mathbf{k})$, полученные в работах [24, 89] для системы К — Rb. Минимум $d(\mathbf{k})$ приходится на границу зону Бриллюэна. Ход кривой $d(\mathbf{k})$, например по направлению (100), противоположен ходу кривой $d(\mathbf{k})$, которая рассматривалась выше в модели Изинга. Для бинарного сплава в точке $\mathbf{k} = 0$ имеется обычно максимум потенциала $\tilde{V}_2(\mathbf{k})$, а не минимум. Минимум потенциала для бинарных сплавов приходится, как правило, на границу зоны Бриллюэна. Действительно, например, в случае $N_a = N_b$ упорядочение бинарного сплава соответствует антиферромаг-

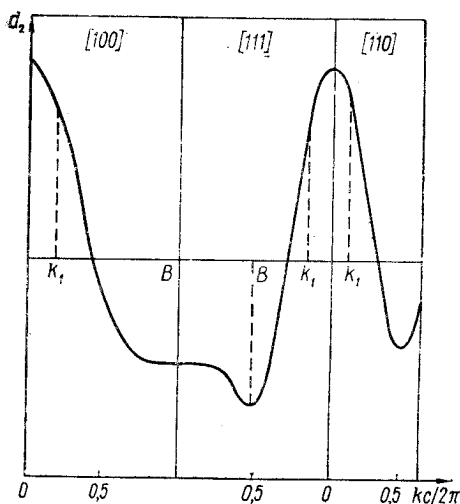


Рис. 25. Кривые для функций $d_2(k)$ по разным направлениям k .

нитному упорядочению, а для антиферромагнетика график потенциала представляет собой «перевернутую» кривую потенциала ферромагнетика.

Предположим, что потенциал взаимодействия $V_2(k)$ имеет минимум на границе зоны Бриллюэна. Обозначим через k_i^* точки абсолютного минимума, которые образуют звезду вектора k^* $\{k^*\}$ ¹⁷:

$$\begin{aligned} \min V_2(k) &= V_2(k_1^*) = \\ &= V_2(k_2^*) = \dots \end{aligned} \quad (35.15)$$

Переходим к интегрированию статистической суммы (35.10). Принимая во внимание специфику бинарного сплава, учитываем условие (35.14). Производя замену переменной

$$\rho_0 = \langle \rho_0 \rangle + \rho_0', \quad (35.16)$$

для статистической суммы получаем

$$Z = Z_0 \int \exp E_4'(\rho) (d\rho)^N, \quad (35.17)$$

¹⁷ В сплавах кубической симметрии имеются такие звезды, где функция $d(k)$ может достигать абсолютного минимума. Для ОЦК структуры

$$\{k_1^*\} - \frac{2\pi}{c} (100); \quad (1)$$

$$\{k_2^*\} - \frac{2\pi}{c} \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right), \quad \frac{2\pi}{c} \left(-\frac{1}{2} -\frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right); \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \{k_3^*\} - \frac{2\pi}{c} \left(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right), \quad \frac{2\pi}{c} \left(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2} \right), \quad \frac{2\pi}{c} \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0 \right); \\ \frac{2\pi}{c} \left(0 \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right), \quad \frac{2\pi}{c} \left(-\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2} \right), \quad \frac{2\pi}{c} \left(\frac{1}{2} -\frac{1}{2} 0 \right) \end{aligned} \quad (3)$$

(c — ребро куба элементарной ОЦК решетки). Для ГЦК структуры существуют такие три звезды:

$$\{k_1^*\} - \frac{2\pi}{c} (100), \quad \frac{2\pi}{c} (010), \quad \frac{2\pi}{c} (001); \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \{k_2^*\} - \frac{2\pi}{c} \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right), \quad \frac{2\pi}{c} \left(-\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right), \quad \frac{2\pi}{c} \left(\frac{1}{2} -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right), \\ \frac{2\pi}{c} \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right); \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \{k_3^*\} - \frac{2\pi}{c} \left(\frac{1}{2} 0 1 \right), \quad \frac{2\pi}{c} \left(1 \frac{1}{2} 0 \right), \quad \frac{2\pi}{c} \left(0 1 \frac{1}{2} \right), \\ \frac{2\pi}{c} \left(-\frac{1}{2} 0 -1 \right), \quad \frac{2\pi}{c} \left(-1 -\frac{1}{2} 0 \right), \quad \frac{2\pi}{c} \left(0 -1 -\frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (6)$$

где

$$Z_0 = c \exp [- \beta V_0 (\mu) + E_4 (\langle \rho_0 \rangle)]; \quad (35.18)$$

$$E_4 (\langle \rho_0 \rangle) = N \left[\beta V_1 c_{ab} - \frac{1}{2} d(0) c_{ab}^2 - \frac{1}{4!} a_4 c_{ab}^4 \right];$$

$$c_{ab} = c_a - c_b; \quad c_a = N_a/N; \quad c_b = N_b/N.$$

Новый четверной гамильтониан E'_4 , зависящий от $\rho'_0 \dots \rho_{\mathbf{k}}$, будет содержать теперь и нечетные степени $\rho_{\mathbf{k}}$:

$$E'_4 (\rho) = -h\rho'_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{d}_2 (\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{3!} \frac{a_3}{V/N} \sum_{\mathbf{k}_i} \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \rho_{\mathbf{k}_3} \delta (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 +$$

$$+ \mathbf{k}_3) - \frac{1}{4!} \frac{a_4}{N} \sum_{\mathbf{k}_i} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta (\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4), \quad (35.19)$$

где

$$h = V\bar{N} \left(\beta V_1 + d(0) c_{ab} + \frac{1}{3!} a_4 c_{ab}^3 \right); \quad (35.20)$$

$$\tilde{d} (\mathbf{k}) = d (\mathbf{k}) + \frac{1}{2} c_{ab}^2 a_4;$$

$$a_3 = a_4 c_{ab}, \quad c_{ab} = c_a - c_b \geq 0. \quad (35.21)$$

Различие в гамильтонианах сплава и модели Изинга обусловлено наличием коэффициента c_{ab} . Равенство $c_a = c_b$ в точности соответствует случаю модели Изинга для антиферромагнетика ($\min d (\mathbf{k}) = d (\mathbf{k}_i^*)$).

Проинтегрируем выражение (35.17) по слоям фазового пространства. «Несущественными» являются переменные с малыми значениями индекса \mathbf{k} . Рассмотрим область значений волнового вектора \mathbf{k}_i^* (рис. 26). Отрезок $0\mathbf{k}_i^*$ делим на части. Точки деления B_1, B_2, \dots лежат на гранях «малых копий» B_1, B_2, \dots исходной зоны Бриллюэна. Совокупность всех векторов \mathbf{k} , попадающих внутрь первой зоны Бриллюэна, равна N . Полагаем, что внутри копии B_1 находится $N - N_1$ векторов \mathbf{k} , внутри копии $B_2 - N - N_2$ векторов. Тогда первый фазовый слой коллективных переменных $\rho_{\mathbf{k}}$, по которым выполняется интегрирование, соответствует копии B_1 зоны Бриллюэна, второй фазовый слой — векторам k , расположенным вне B_1 , но внутри B_2 , и т. д. В результате интегрирования получаем последовательность блочных гамильтонианов $E' (\rho)$, $E^{(1)}$, $E^{(2)}$, содержащих наборы \tilde{d} , a_3 , a_4 ; $\tilde{d}^{(1)}$, $a_3^{(1)}$, $a_4^{(1)}$; ...; $\tilde{d}^{(n)}$, $a_3^{(n)}$, $a_4^{(n)}$, связанные между собой рекуррентными уравнениями.

Для решения этих уравнений можно применить метод неподвижной точки, если известна соответствующая подстановка для функций $\tilde{d}^{(n)}$, $a_3^{(n)}$, $a_4^{(n)}$. В § 17 такая подстановка, (17.10), приводилась. Она была получена с помощью параболической аппроксимации (17.1) для потенциала. Выполним здесь квадратичную аппроксимацию,

полагая

$$\tilde{V}_2(\mathbf{k}) = V_2(\mathbf{k}^*) + \frac{1}{2} \tilde{V}_2''(\mathbf{k}^*) (\mathbf{k} - \mathbf{k}^*)^2. \quad (35.22)$$

Существует такой интервал $(0B')$ малых значений \mathbf{k} , в котором эта аппроксимация не является справедливой (рис. 27). Интегрируем

Рис. 26. Деление отрезка полузоны Бриллюэна на интервалы для бинарных сплавов.

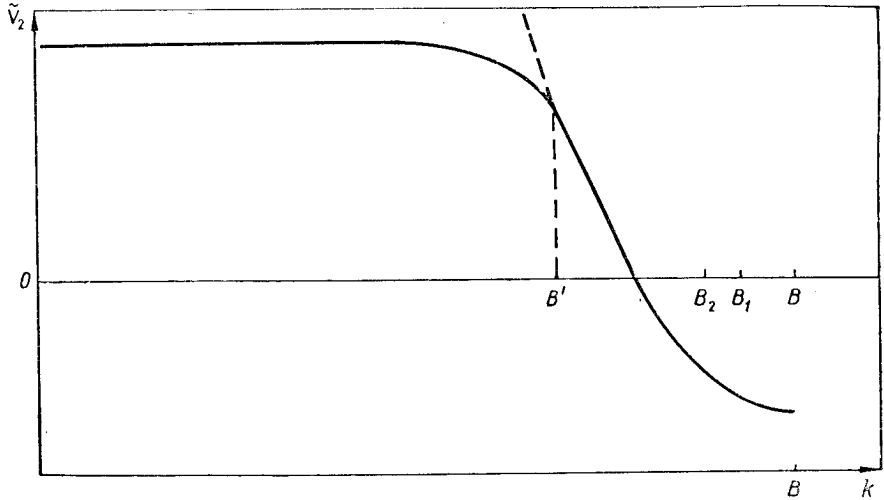
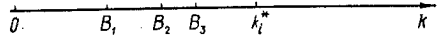


Рис. 27. Ход кривой \tilde{V}_2 в направлении вектора \mathbf{k}_i^* . Штриховая кривая описывает параболическую аппроксимацию.

в этом интервале статистическую сумму с помощью гауссовой плотности меры или каким-либо другим способом, как это было сделано в § 14 в интервале $(B'B)$. Обычно подобную операцию опускают как несущественную. Тем не менее остановимся на ней, так как это поможет уяснить принципиальный критерий существования фазового перехода второго рода для бинарных сплавов. Предположим, что до точки B' можно проинтегрировать по всем $\rho_{\mathbf{k}}$, $\mathbf{k} < B'$, с гауссовой плотностью меры. Запишем статистическую сумму (35.17) в виде

$$\begin{aligned} Z = Z_0 \int \exp [E_{h>B'}(\rho)] & \left\{ \int \exp \left(-h\rho_0' - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} < B'} \tilde{d}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right) \times \right. \\ & \times \left[1 - \frac{1}{3!} \frac{1}{N} a_3 \left(\rho_0^3 + 3\rho_0 \sum_{\mathbf{k} < B'} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + 3\rho_0 \sum_{\mathbf{k} > B'} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right) - \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{4!N} a_4 \left(\rho_0^4 + 6\rho_0^2 \sum_{\mathbf{k} < B'} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + 6\rho_0^2 \sum_{\mathbf{k} > B'} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + \right. \right. \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 3 \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \\ h, h' < B'}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}'} \rho_{-\mathbf{k}'} + 6 \sum_{\substack{h < B' \\ h' > B}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}'} \rho_{-\mathbf{k}'} + \\
& + 4 \rho_0 \sum_{h > B'} \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \rho_{\mathbf{k}_3} + \dots \left. \right\} (d\rho)_{h < B'} \left. \right\} (d\rho)_{\mathbf{k} \geq B'}, \quad (35.23)
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
E'_{h > B'}(\rho) = & \frac{1}{2} \sum_{h > B'} \tilde{d}_2(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{a_3}{3! \sqrt{N}} \sum_{h_i > B'} \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \rho_{\mathbf{k}_3} \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) - \\
& - \frac{a_4}{4! N} \sum_{h_i > B'} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4). \quad (35.24)
\end{aligned}$$

Интегрируем по ρ'_0 и $\rho_{\mathbf{k}}$, $h < B'$. Интеграл по гауссовой плотности меры

$$\begin{aligned}
& \int \exp \left[h \rho'_0 - \frac{1}{2} \sum_{h < B'} \tilde{d}_2(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right] (d\rho)_{h < B'} = \\
& = \sqrt{\frac{\pi}{\tilde{d}(0)}} \prod'_{h < B'} \frac{\pi}{\tilde{d}(\mathbf{k})} \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{h^2}{\tilde{d}(0)} \right]. \quad (35.25)
\end{aligned}$$

Чтобы найти остальные интегралы в (35.23), заменим ρ_0 производной $\partial/\partial h$, а $\rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}$ — производной $\partial/\partial d(\mathbf{k})$. В результате получаем

$$Z = Z_1 \int \exp [E_1(\rho)] (d\rho)^{N'}, \quad (35.26)$$

где

$$\begin{aligned}
E_1(\rho) = & E'_{h > B'}(\rho) - \frac{h}{d(0)} \frac{a_3}{2 \sqrt{N}} \sum_{h > B'} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \\
& - \frac{1}{4} \frac{a_4}{N} \left[\frac{h^2}{(\tilde{d}(0))^2} - \frac{1}{\tilde{d}(0)} \right] \sum_{h > B'} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{a_4}{4N} \sum_{h < B'} \frac{1}{\tilde{d}(\mathbf{k})} \sum_{h > B'} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \\
& - \frac{a_4}{3! N} \frac{h}{d(0)} \sum_{h > B'} \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \rho_{\mathbf{k}_3} \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) + \dots; \quad (35.27)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z_1 = & Z_0 \exp \left\{ \frac{a_3}{3! \sqrt{N}} \left(\langle \rho_0^3 \rangle + \frac{3h}{\tilde{d}(0)} \sum_{h < B'} \frac{1}{\tilde{d}(\mathbf{k})} \right) - \right. \\
& \left. - \frac{a_4}{4! N} \left[\langle \rho_0^4 \rangle + 6 \langle \rho_0^2 \rangle \sum_{\mathbf{k}}' (\tilde{d}(\mathbf{k}))^{-1} + 3 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} (\tilde{d}(\mathbf{k}))^{-1} (\tilde{d}(\mathbf{k}'))^{-1} \right] \right\}; \quad (35.28)
\end{aligned}$$

$$\langle \rho_0^n \rangle = \frac{\partial^n}{\partial h^n} \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{h^2}{\tilde{d}(0)} \right] (-1)^n.$$

Раскрываем $E'_{h > B'}(\rho)$ и группируем слагаемые с одинаковыми степенями $\rho_{\mathbf{k}}$. До сих пор химический потенциал $\mu_a - \mu_b$ был неопределенным, так как разность $\mu_a - \mu_b$ входит в выражение для h через v_1 (см. (35.20)). Выберем теперь $\mu_a - \mu_b$ таким образом, чтобы слагае-

мые, содержащие произведение $\rho_{k_1} \rho_{k_2} \rho_{k_3}$ в выражении (35.27), равнялись нулю. В результате получим исходное выражение для гамильтониана E_1 , с которого начнем исследование проблемы фазового перехода в бинарных сплавах:

$$E_1 = \sum_{k \in B'} d_1(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{\tilde{a}_4}{4!N'} \sum_{\mathbf{k}_i} \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \rho_{\mathbf{k}_3} \rho_{\mathbf{k}_4} \delta(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4); \quad (35.29)$$

здесь

$$d_1(\mathbf{k}) = \tilde{d}(\mathbf{k}) + \frac{\hbar}{d(0)} \frac{a_2}{1!N'} + \frac{1}{2} \frac{a_4}{N'} \left[\frac{\hbar^2}{(\tilde{d}(0))^2} - \frac{1}{\tilde{d}(0)} \right] + \\ + \frac{a_4}{4!N'} \sum_{\mathbf{k} < B'} \frac{1}{\tilde{d}(\mathbf{k})}; \quad (35.30) \\ \tilde{a}_4 = \frac{N'}{N} a_4;$$

символ Кронекера $\delta(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4)$ задается на блочной решетке с N' узлами в объеме периодичности $V = N'(c')^3$.

Итак, задача интегрирования статистической суммы бинарного сплава приведена к гамильтониану модели Изинга, с тем лишь отличием, что минимум $d_1(\mathbf{k})$ находится на границе зоны Бриллюэна. Предварительная часть интегрирования по $\rho_{\mathbf{k}}$ выполнена. Начнем рассмотрение с точки B' , такой, что для всех $B' \leq \mathbf{k} < B$ справедлива форма (35.26) с гамильтонианом E_1 , определяемым (35.29). В этом большом фазовом слое имеется N' переменных $\rho_{\mathbf{k}}$, период соответствующей блочной решетки c' . Интервал $B'B$ разбиваем на отрезки. Каждому отрезку значений \mathbf{k} соответствует фазовый слой во множестве коллективных переменных. В каждом слое слагаемое $\frac{1}{2} V_2''(\mathbf{k}^*) (\mathbf{k} - \mathbf{k}^*)^2$ будем заменять его соответствующим средним значением. Желательно, чтобы между этими средними выполнялись соотношения, характерные для циклической группы. Для этого необходим постоянный параметр s деления вектора \mathbf{k}_i^* на отрезки. Выбираем точки B_1, B_2, \dots, B_n равными:

$$B_1 = B - \frac{B}{s}; \quad B_2 = B - \frac{B}{s^2}; \quad \dots; \quad B_n = B - \frac{B}{s^n}; \quad (35.31)$$

при $n \rightarrow \infty$ B_n стремится к $B = \mathbf{k}_i^*/2$. Для среднего значения потенциала $V_2(\mathbf{k})$ на каждом из отрезков имеем (берется среднее арифметическое)

$$\langle V_2(\mathbf{k}) \rangle_{B_n B_{n+1}} = \frac{1}{2} [V_2(B_n) + V_2(B_{n+1})] = V_2(B) + \frac{q}{s^{2n}}; \\ q = \frac{1}{2} V_2''(B) \frac{1}{2} B^2 (1 + s^{-2}). \quad (35.32)$$

Параметр s не может быть произвольным, его следует определить. Приступаем к интегрированию статистической суммы по первому

фазовому слою $B' \leq n \leq B_1$ (см. формулы (14.4), (14.8), (14.45)', (14.56)). Интегрируем по $\eta_{\mathbf{k}}$ и $\nu_{\mathbf{k}}$. Чтобы разделить интегралы по $\nu_{\mathbf{k}}$, переходим на новую блочную решетку с периодом c_1 : $c_1 = sc'$, mc_1 — координата узла новой блочной решетки. В соответствующей обратной решетке вектор \mathbf{k} изменяется в области $B_1 \leq \mathbf{k} < B$. Переход на блочную решетку осуществляется при условии (рассматривается простейший случай одномерной суммы)

$$\frac{1}{N_1} \left[\sum_{-B \leq h < -B_1} \exp [ik(m - m')c_1] + \sum_{B_1 \leq h < B} \exp [ik(m - m')c_1] \right] = \delta_{mm'},$$

где

$$k = 2\pi n/Nc; \quad B = \pi/c$$

(N_1 — общее число слагаемых; $N_1 = N/s$). Суммируя, находим

$$\frac{1}{N_1} \left\{ \frac{\exp[-iB(m - m')c_1] - \exp[-iB_1(m - m')c_1]}{1 - \exp\left[i\frac{2\pi}{Nc}(n - m')c_1\right]} + \frac{\exp[iB_1(m - m')c_1] - \exp[iB(m - m')c_1]}{1 - \exp\left[i\frac{2\pi}{Nc}(m - m')c_1\right]} \right\} = \delta_{mm'}.$$

Это равенство будет выполняться, если

$$\begin{aligned} 2B(m - m')c_1 &= 2\pi m_1 = \frac{2\pi}{c}(m - m')c_1; \\ 2B_1(m - m')c_1 &= 2\pi m_2 = 2\pi \left(\frac{1}{c} - \frac{1}{c_1} \right) (m - m')c_1. \end{aligned} \quad (35.33)$$

Так как $c_1 = sc'$, то, следовательно, s должно быть целым числом. Выполнив это условие, специфическое для бинарных сплавов, интегрируем по слоям фазового пространства. В результате получаем рекуррентные уравнения, полностью идентичные соотношениям (17.5) и (17.6) с теми же функциями \mathcal{N} и \mathcal{L} и теми же критическими индексами. При наличии линейного члена выполняется сдвиг, в результате которого линейный член исчезает. Критическую температуру находим по формуле (18.7).

Наиболее важным является исследование упорядочения в области $T < T_c$. Для этого необходимо выполнить программу, изложенную в гл. III. В результате приходим к следующему выражению для свободной энергии упорядочения:

$$E_0(\rho_{\mathbf{k}}^*) = B_0 |\tau|^{2\nu} + \frac{1}{N} G_0 |\tau|^\nu \sum_{\mathbf{k}_i} \rho_{\mathbf{k}_1}^* \dots \rho_{\mathbf{k}_4}^* \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4}^*, \quad (35.34)$$

где коэффициенты B_0 , G_0 заданы формулами (25.4)', (25.5) и соотношениями (35.27) — (35.30).

Суммирование выполняется по векторам звезды \mathbf{k}_i^* , для которых $\tilde{\Phi}(\mathbf{k}_i^*)$ имеет абсолютный минимум.

Чтобы получить уравнение для параметра порядка, следуя ра-

боте [58], введем величину

$$\rho_{\mathbf{k}_i^*} = \gamma_{\mathbf{k}^*} \sqrt{N} \exp(i\Psi_{\mathbf{k}_i^*}), \quad (35.35)$$

где $\gamma_{\mathbf{k}_i^*}$ — параметр «дальнего порядка» (он имеет одинаковые значения для всех \mathbf{k}_i^*); $\Psi_{\mathbf{k}_i^*}$ — фазы, удовлетворяющие соотношениям

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbf{k}_1^*} &= -\Psi_{\mathbf{k}_2^*}; \\ \Psi_{\mathbf{k}_1^*} + \Psi_{\mathbf{k}_2^*} + \Psi_{\mathbf{k}_3^*} + \Psi_{\mathbf{k}_4^*} &= 0, \end{aligned} \quad (35.36)$$

если $\mathbf{k}_1^* + \mathbf{k}_2^* + \mathbf{k}_3^* + \mathbf{k}_4^*$ равно нулю или $2B$. Эти соотношения вытекают из условия действительности свободной энергии. После подстановки (35.35) в (35.34) получаем

$$E_0(\gamma_{\mathbf{k}^*}) = G_0 |\tau|^{\nu} B_i^{(4)}(\mathbf{k}^*) \gamma_{\mathbf{k}^*}^4 + B_0 |\tau|^{2\nu} B_i^{(2)}(\mathbf{k}^*) \gamma_{\mathbf{k}^*}^2. \quad (35.37)$$

Уравнение Эйлера

$$\partial E_0(\gamma_{\mathbf{k}^*}) / \partial \gamma_{\mathbf{k}^*} = 0 \quad (35.38)$$

приводит к равновесному значению $\gamma_{\mathbf{k}^*}$ (здесь $B_i^{(2)}$ — число векторов звезды; $B_i^{(4)}$ — число возможных замкнутых сумм, состоящих из четырех векторов звезды):

$$\gamma_{\mathbf{k}^*} = \pm \sqrt{-\frac{|\tau|^{\nu} B_0 B_i^{(2)}}{G_0 B_i^{(4)}}}. \quad (35.39)$$

Рассмотрим одночастичную функцию распределения (35.1):

$$\langle \sigma_R \rangle = \sqrt{N}^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}R} = \sqrt{N}^{-1} \left(\langle \rho_0 \rangle + \sum_{\mathbf{k}_i^*} \rho_{\mathbf{k}_i^*} e^{i\mathbf{k}_i^* R} \right), \quad (35.40)$$

где согласно (35.14) $\sqrt{N}^{-1} \langle \rho_0 \rangle = c_a - c_b$, а $\rho_{\mathbf{k}_i^*}$ определяется формулами (35.35) и (35.39). Следовательно,

$$\langle \sigma_R \rangle = c_a - c_b + \gamma_{\mathbf{k}^*} \sum_{\mathbf{k}_i^*} \exp(i\mathbf{k}_i^* R + i\Psi_{\mathbf{k}_i^*}).$$

Таким образом, найдены параметры упорядочения, возникающего при $T < T_c$. Унарная функция распределения становится функцией координаты R , фазы $\Psi_{\mathbf{k}_i^*}$ определяют «сверхструктуру» системы.

Может показаться искусственным прием с выбором химических потенциалов $\mu_a - \mu_b$, в результате которого при переходе от (35.27) к (35.29) кубический член сократился. Заметим, что условие (35.8), накладываемое на химические потенциалы, было использовано при подстановке (35.16) с учетом (35.14). Сохранение кубического слагаемого в выражениях (35.29) и (35.34) не внесло бы существенных из-

менений в решения для параметра порядка. Для γ_{k^*} по-прежнему выполнялась бы зависимость [97]

$$\gamma_{k^*} \sim |\tau|^{1/2}.$$

Отличие состояло бы лишь в том, что γ_{k^*} определялось бы не сокращенным квадратным уравнением (35.38), а полным, содержащим $\mu_a - \mu_b$. При исключении этих величин вновь получится решение (35.39). Это говорит о том, что кубический член в (35.27) не может привести к изменению рода фазового перехода: если в исходном гамильтониане ограничиться взаимодействиями бинарного типа, а процесс фазового перехода должен состоять только во взаимном замещении мест в расположении частиц сортов a и b по узлам решетки, то соответствующий фазовый переход будет, по-видимому, только фазовым переходом второго рода.

§ 36. СПЕЦИФИЧЕСКАЯ БЛОЧНАЯ РЕШЕТКА, УНИВЕРСАЛЬНОСТЬ РЕНОРМАЛИЗАЦИОННОЙ ГРУППЫ

Может показаться, что возникновение ренормгрупповых соотношений существенно связано со специальным способом деления фазового пространства на слои, предложенным К. Вильсоном [126], и с квадратичной аппроксимацией потенциала, в силу которых $B_n = B/s^n$ и $\beta\tilde{\Phi}(k) = \beta\tilde{\Phi}(0)(1 - 2b^2k^2)$; s — постоянная величина. И если бы их не было, то не было бы соотношений РГ. Рассмотрим эту проблему. Что касается аппроксимации (параболической) потенциала, то она имеет место, если только имеются области минимума фурье-образа $\tilde{\Phi}(k)$. Области, где выполняется параболическая аппроксимация, могут быть уже или шире в зависимости от типа задачи, но они обычно существуют всегда. А вот о способе деления фазового пространства на слои можно сказать следующее: при любом имеющем физический смысл способе деления в рекуррентных уравнениях возникает область значений k , для которой справедливы решения РГ типа.

Рассмотрим имеющий вполне определенный физический смысл способ деления решетки на блоки, который мы назовем специфическим [74, 75, 83]. Выкладки будем проводить в области температур $T_2 < T < T_1$, где

$$T_1 = \frac{\tilde{\Phi}(0)}{a_2}, \quad T_2 = \frac{\tilde{\Phi}(0)}{2a_2}, \quad a_2 = 0,645.$$

(Для таких значений T нами выполнены машинные расчеты.) Предположим, что $T < T_c$, и кривая $d(kT)$ имеет вид, приведенный на рис. 28. Разобьем интервал $[0B]$ на отрезки $[B_1B]$, $[B_2B_1]$, ... Точку B_1 находим из уравнения

$$d(B_1) = 0.$$

Значение $d(k)$ на отрезке $[0B_1)$ строго отрицательно, а на отрезке (B_1B) строго положительно. Отрезок $[B_1B)$ назовем нулевым интер-

валом индексов \mathbf{k} переменных $\rho_{\mathbf{k}}$, по которым выполняется интегрирование в статистической сумме (12.25) или в (14.4). В результате интегрирования для статистической суммы получаем выражение (14.56), в котором согласно (15.4) кривая $d^{(1)}(\mathbf{k}) = a_2^{(1)} - \beta\tilde{\Phi}(\mathbf{k})$, заданная на отрезке $[0B_1]$, расположится выше кривой $d(\mathbf{k}) = a_2 - \beta\tilde{\Phi}(\mathbf{k})$. Таким образом, в результате учета влияния переменных $\rho_{\mathbf{k}}$, где $B_1 \leq k < B$, на распределение $\rho_{\mathbf{k}}$, у которых $0 \leq k \leq B_1$,

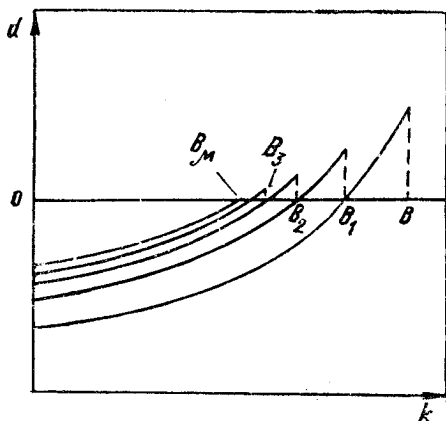


Рис. 28. Специфический способ разбиения фазового пространства на слои (B_μ — предельная точка, определяемая условием $d^{(\mu-1)}(B_\mu) = d^{(\mu)}(B_\mu) = 0$).

оказалось, что $d^{(1)}(B_1) > 0$. Кривая $d^{(1)}(\mathbf{k})$ имеет на отрезке $0 \leq k < B$ области положительных и отрицательных значений, в отличие от кривой $d(k)$, которая на этом отрезке значений целиком расположена под осью абсцисс. Точка B_2 , в которой $d^{(1)}(B_2) = 0$, будет началом первого интервала индексов $B_2 \leq k < B_1$ с $N_1 - N_2$ переменными $\rho_{\mathbf{k}}$, по которым будет интегрироваться выражение (14.56). В результате получим новое выражение для Z , в котором снова согласно (15.16) $d^{(2)}(k) > d^{(1)}(k)$ и $d^{(2)}(B_2) \geq 0$, так как $d^{(1)}(B_2B_1) > 0$. На интервале $[0B_2]$ для $d^2(k)$ вновь будем иметь области

положительных и отрицательных значений. Выбираем точку B_3 , в которой $d^2(B_3) = 0$. Интегрируем по $\rho_{\mathbf{k}}$, где $\mathbf{k} \in [B_3B_2]$, и т. д. После каждого интегрирования выделяем интервал $[0B_{i+1}]$, на котором для всех \mathbf{k} $d^{(i)}(k) < 0$. Получаем последовательность точек $B, B_1, B_2, \dots, B_i, \dots$. Такое разбиение интервала назовем специфическим. Приведенный вариант специфического разбиения не является единственно возможным. Можно, например, выделить интервалы $[B_iB_{i+1}]$, на которых средние арифметические $d^{(i)}(k)$ или их средние геометрические равны нулю. Заметим, что разбиения подобного типа необходимы для отыскания величины B_μ . Ей соответствует прямая блочная решетка с периодом π/B_μ . Внутри каждого блока размером π/B_μ существует при заданной температуре $\tau < 0$ отличный от нуля средний спиновый момент. При этом для заданной температуры τ величина $(\pi/B_\mu)^3$ является наименьшей ячейкой, в которой имеется отличный от нуля средний момент.

Выпишем теперь рекуррентные соотношения для случая специфического разбиения интервала индексов $[0B]$. В качестве среднего значения $d^{(i)}(k)$ в слое $[B_{i+1}B_i]$ выберем значение $d^{(i)}(k)$ в точке B_i :

$$\langle d^{(i)}(k) \rangle_{B_{i+1}B_i} = d^{(i)}(B_i); \quad (36.1)$$

в точке B_{i+1} $d^{(i)}(B_{i+1}) = 0$. Из этого условия определяем координаты точек деления интервала $[0B)$ на отрезки:

$$B_1 = b^{-1}\alpha^{1/2}, \quad B_2 = b^{-1}\alpha_1^{1/2}, \quad \dots, \quad B_i = b^{-1}\alpha_{i-1}^{1/2}, \quad (36.2)$$

где

$$\alpha_i = [1 - a_2^{(i)}/\beta\tilde{\Phi}(0)] 2^{-i}.$$

Данный вариант разбиения соответствует случаю деления фазового пространства на слои с переменным параметром

$$s = \frac{B}{B_1}; \quad s_1 = \frac{B_1}{B_2} = \sqrt{\frac{\alpha}{\alpha_1}}; \quad s_2 = \frac{B_2}{B_3} = \sqrt{\frac{\alpha_1}{\alpha_2}}; \quad \dots; \\ s_n = \frac{B_n}{B_{n+1}} = \sqrt{\frac{\alpha_{n-1}}{\alpha_n}}. \quad (36.3)$$

Параметр s_n является функцией номера слоя и температуры.

Преобразуем теперь рекуррентное соотношение (15.16). Вместо $d^{(n)}(B_{n+1}B_n)$ подставляем значение (36.1):

$$a_2^{(n+1)} = a_2^{(n)} + \mathcal{M}^{(n)} [d^{(n)}(0) + 2\beta\tilde{\Phi}(0)\alpha_{n-1}].$$

Вычитаем из обеих частей $\beta\tilde{\Phi}(0)$, принимая во внимание равенства

$$d^{(n)}(B_{n+1}) = d^{(n)}(0) + 2\beta\tilde{\Phi}(0)\alpha_n = 0; \quad (36.4)$$

$$d^{(n)}(B_n) = 2\beta\tilde{\Phi}(0)(\alpha_{n-1} - \alpha_n),$$

и сокращаем обе части на $2\beta\tilde{\Phi}(0)$; тогда

$$\alpha_{n+1} = \alpha_n - \mathcal{M}^{(n)}(\alpha_{n-1} - \alpha_n). \quad (36.5)$$

Мы получили разностное нелинейное уравнение второго порядка для α_n . К такому же виду приводим и уравнение (15.17) для $a_4^{(n)}$:

$$a_4^{(n+1)} = s_n^{-3} a_4^{(n)} \mathcal{E}(z_n).$$

Переходим от $a_4^{(n)}$ к z_n :

$$a_4^{(n)} = \frac{3}{4} \frac{[d^{(n)}(B_{n+1}B_n)]^2}{z^{(n)}} = \frac{3}{4} \frac{[2\beta\tilde{\Phi}(0)(\alpha_{n-1} - \alpha_n)]^2}{z^{(n)}}.$$

В результате уравнение (15.17) принимает вид

$$(\alpha_n - \alpha_{n+1})^2 / z^{(n+1)} = \frac{(\alpha_{n-1} - \alpha_n)^2}{z^{(n)}} \frac{1}{s^3} \mathcal{E}(z^{(n)}). \quad (36.6)$$

Разделим правую и левую части уравнений (36.5) и (36.6) на α_n и введем согласно (36.3) $\alpha_n/\alpha_{n+1} = s_n^2$. Получаем новые рекуррентные

уравнения уже относительно s_n и $z^{(n)}$:

$$\frac{(s_{n+1}^2 - 1)}{(s_n^2 - 1)} s_{n+1}^{-2} = \mathcal{M}(z^{(n)});$$

$$\left(\frac{s_{n+1}^2 - 1}{s_n^2 - 1} \right)^2 \frac{s_n^3}{s_{n+1}^4} = \frac{z^{(n+1)}}{z^{(n)}} \mathcal{G}(z^{(n)}). \quad (36.7)$$

Это замкнутая система двух уравнений. Легко заметить, что в качестве частного решения уравнения имеют неподвижную точку $s_{n+1} =$

$s_n = s^*$, $z_n = z_{n+1} = z^*$. Действительно, правые части уравнений зависят в основном только от z_n , а от s_n зависят слабо, левые же части зависят только от s_n . В качестве проверки справедливости этих уравнений рассмотрим второе из них и положим в правой части $z^{(n)} = 0$, тогда для s^n находим

$$s_n = s^* \approx 3,5862,$$

как это уже было в (17.23). Однако первое уравнение (36.7) не имеет решения $z^* = 0$. Из (15.18) и (15.24) следует, что $\mathcal{M}(0) = \infty$. Ниже приводятся результаты машинных расчетов системы уравне-

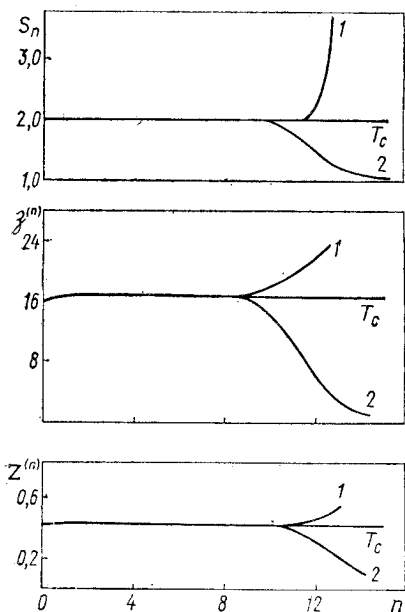


Рис. 29. Решение рекуррентных уравнений (36.7):

$$1 - \beta_1 \tilde{\Phi}(0) = 0,840272936; (\beta_c \tilde{\Phi}(0) = 0,840272955);$$

$$2 - \beta_2 \tilde{\Phi}(0) = 0,840272559.$$

ний (36.7), а также соответствующих им уравнений (15.16) и (15.17), любезно предоставленные В. А. Коломойцем.

На рис. 29 изображены кривые для s_n , $z^{(n)}$ и $\xi^{(n)}$ как функций n при трех разных температурах: $T = T_c$, $T_1 > T_c$ и $T_2 < T_c$. При критической температуре $\beta_c \tilde{\Phi}(0) = 0,840272955$, а значения T_1 и T_2 соответствуют $\beta_1 \tilde{\Phi}(0) = 0,840272936$ и $\beta_2 \tilde{\Phi}(0) = 0,840272559$. Как видим, эти значения близки друг к другу и можно с полной уверенностью отметить наличие критического режима.

Приближение к точке μ_τ определяется поведением числа s в интервале с 10-го до 14-го шага, после которого s практически равно единице. Точка μ_τ (см. (23.29)) определяется уравнением

$$s_\mu = 1. \quad (36.8)$$

В действительности интервал волновых векторов \mathbf{k} между 10-м и 14-м шагом очень мал, так как s быстро стремится к единице. Примечательно поведение s_n при $T > T_c$. Кривая $d^{(n)}(\mathbf{k})$ начинает стреми-

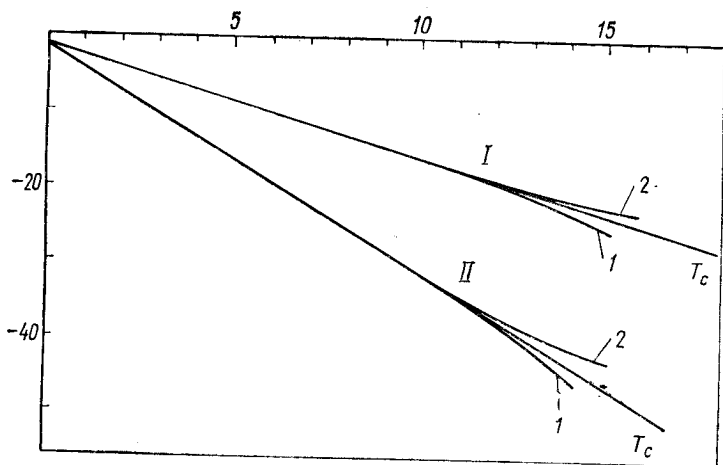


Рис. 30. Решение рекуррентных уравнений (36.5) и (36.6) (температуры те же, что и на рис. 28):

I — $\ln a^{(n)} (B_{n+1} B_n)$; II — $\ln a_4^{(n)}$.

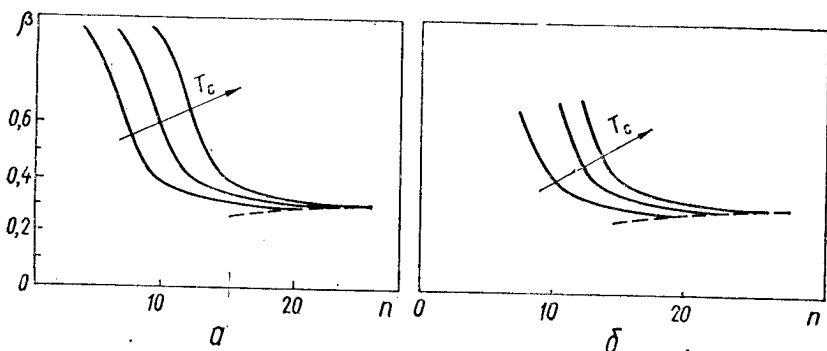


Рис. 31. Эволюция критического показателя β для распределения ρ^4 в приближении P_2, P_4 (а) и P_2, P_4, P_6 (б).

тельно выходить за ось абсцисс, s_n стремится к бесконечности. При $T = T_c$ специфическое разбиение интервала совпадает с делением при $s = 2,042$, при этом $z^* \approx 0,45$.

На рис. 30 приведены кривые для $\ln a^{(n)}$ и $\ln a_4^{(n)}$ как функций n . Вновь подчеркнем, что s_n — переменный параметр, и деление необходимо для отыскания блоков с отличным от нуля средним моментом.

При аналитических решениях уравнений (36.7) получаются такие же результаты.

Приведенный пример весьма поучителен. Он утверждает, что симметрия ренормализационной группы, характеризующаяся соотношениями (17.10) — (17.17), является объективно существующим свойством систем вблизи T_c . Она не связана со специально предло-

женным К. Вильсоном способом деления фазового пространства на слои с постоянным параметром (см. § 13). Однако этот способ наиболее близок к описанию симметрических свойств элементов $d^{(n)}$ и $a_4^{(n)}$ блочных гамильтонианов.

С помощью специфического способа деления фазового пространства на слои в работе [83] получены интересные кривые для критического показателя среднего момента при $T \rightarrow T_c$ (рис. 31). Критический показатель β возникает только в области k , меньшей B_μ . Чем ниже температура T , $T < T_c$, тем больше B_μ и тем в меньших блоках возникает отличный от нуля средний момент $\langle \sigma \rangle$. Рис. 31 является прекрасной дополнительной информацией к материалу § 33.

§ 37. ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНАЯ ФОРМА РЕКУРРЕНТНЫХ УРАВНЕНИЙ

До сих пор рассматривались разностные формы рекуррентных уравнений. Это было вызвано необходимостью найти способ разделения переменных при интегрировании по слоям фазового пространства и проинтегрировать статистическую сумму. Такой способ был найден. Он существенно связан с заменой гладкой формы потенциала $\tilde{\Phi}(k)$ на кусочно-гладкую: на каждом отрезке $B_{i+1} \leq k < B_i$ потенциал заменяется на соответствующее среднее значение.

Теперь обсудим две формы дифференциальных рекуррентных уравнений: в одной аргументом является T [65], в другой — $t = \ln s$.

Рассмотрим первоначальный функционал (3.15) для статистической суммы, в котором в качестве якобиана $J(\rho)$ берется интегральная форма (4.10). Разделим интервал индексов $(0B)$ на отрезки точками $B_1, B_2, B_3, \dots, B, \dots$. Проинтегрируем статистическую сумму по переменным ρ_k , индексы которых попадают в первый интервал $B_1 \leq k < B$. Выясним, что происходит при этом с подынтегральной функцией. В исходном интеграле (3.15) имеем плотность меры

$$W_N(\rho) = 2^N \int \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{k < B} \beta \tilde{\Phi}(k) \rho_k \rho_{-k} + i2\pi \sum_k \omega_k \rho_k + \sum_n D_{2n}(\omega) \right] (d\omega)^N, \quad (37.1)$$

которую, интегрируя по ρ_k в слое $B_1 \leq k < B$, преобразовываем в виду

$$W_{N_1}(\rho) = \int W_N(\rho) (d\rho)^{N-N_1},$$

или

$$\begin{aligned} W_{N_1}(\rho) = & 2^{N_1} \int \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{B_1 \leq k < B} \beta \tilde{\Phi}(k) \rho_k \rho_{-k} + 2i\pi \sum_{k < B_1} \omega_k \rho_k \right] \times \\ & \times \prod_{B_1 \leq k < B} \delta(\omega_k) \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{B_1 \leq k < B} \beta \Psi(k) \frac{\partial^2}{\partial \omega_k \partial \omega_{-k}} \right] \times \\ & \times \exp \left[\sum_{n \geq 1} D_{2n}(\omega) \right] (d\omega)^{N-N_1} (d\omega)^{N_1}, \end{aligned} \quad (37.2)$$

$$\Psi(k) = (2\pi i)^{-2} \tilde{\Phi}(k).$$

Выражением для якобиана новой, блочной, модели системы является следующее:

$$J^{(1)}(\rho) = \int \exp \left[i2\pi \sum_{k \in B_1} \omega_k \rho_k + \sum_{n \geq 0} D_{2n}^{(1)}(\omega) \right] (d\omega)^{N_1}; \quad (37.3)$$

$$\begin{aligned} \exp \left[\sum_{n \geq 0} D_{2n}^{(1)}(\omega) \right] &= \int \left\{ \exp \left[\frac{1}{2} \sum_k \beta \Psi(k) \frac{\partial^2}{\partial \omega_k \partial \omega_{-k}} \right] \exp \left[\sum_{n \geq 1} D_{2n}(\omega) \right] \right\} \times \\ &\times \prod_{B_1 \leq k < B} \delta(\omega_k) (d\omega)^{N-N_1}. \end{aligned} \quad (37.4)$$

Чтобы решить задачу о фазовом переходе, следует найти эту функцию. Для $D_{2n}^{(1)}(\omega)$ по аналогии с величинами D_{2n} , заданными формулами (4.11), имеем

$$\begin{aligned} D_{2n}^{(1)} &= \frac{(i2\pi)^{2n}}{(2n)!} \frac{1}{V^{N^{2n-2}}} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}} \mathfrak{M}_{2n}^{(1)}(\beta, \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}) \times \\ &\times \omega_{\mathbf{k}_1} \dots \omega_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}}. \end{aligned} \quad (37.5)$$

Обозначим функцию внутри фигурных скобок в правой части выражения (37.4) через $\exp [T(\omega)]$:

$$\exp [T(\omega)] = \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{B' \leq k < B} \beta \Psi(k) \frac{\partial^2}{\partial \omega_k \partial \omega_{-k}} \right] \exp \left[\sum_{n \geq 1} D_{2n}(\omega) \right]. \quad (37.6)$$

Дифференцируя обе части (37.6) по β , получаем уравнение

$$\frac{\partial T}{\partial \beta} = \frac{1}{2} \sum_{k \in \Delta} \Psi(k) \left(\frac{\partial^2 T}{\partial \omega_k \partial \omega_{-k}} + \frac{\partial T}{\partial \omega_k} \frac{\partial T}{\partial \omega_{-k}} \right) \quad (37.7)$$

с граничными условиями

$$T(\omega) = \sum_{n \geq 1} D_{2n}(\omega) \quad \text{при } \beta = 0 \quad (37.8)$$

(через Δ обозначен интервал индексов $k \in [B_1 B)$).

Пусть $T(\omega)$ имеет форму ряда по степеням ω_k :

$$\begin{aligned} T(\omega) &= t_0(\beta) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} t_2(\mathbf{k}; \beta) \omega_{\mathbf{k}} \omega_{-\mathbf{k}} + \\ &+ \frac{1}{4!} N^{-1} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4} t_4(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4; \beta) \omega_{\mathbf{k}_1} \dots \omega_{\mathbf{k}_4} + \dots \\ &\dots + \frac{1}{(2n)!} N^{1-n} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}} t_{2n}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}; \beta) \omega_{\mathbf{k}_1} \dots \omega_{\mathbf{k}_{2n}} + \dots \end{aligned} \quad (37.9)$$

Подставляя это выражение в (37.7) и группируя коэффициенты при одинаковых степенях ω_k , получаем систему уравнений

$$\frac{\partial t_0(\beta)}{\partial \beta} = \sum_{k' \in \Delta} \Psi(k') t_2(k'; \beta), \quad t_0(0) = 0; \quad (37.10)$$

$$\frac{\partial t_2(\mathbf{k}; \beta)}{\partial \beta} = N^{-1} \sum_{k' \in \Delta} \Psi(k') t_4(\mathbf{k}, -\mathbf{k}, \mathbf{k}', -\mathbf{k}'; \beta) +$$

$$+ [\Psi(k) + \Psi(-k)] t_2(\mathbf{k}; \beta) t_2(-\mathbf{k}; \beta) \delta_{\mathbf{k} \in \Delta} \quad (37.11)$$

при условии $t_2(\mathbf{k}; 0) = -\mathfrak{M}_2(2\pi)^2$;

$$\frac{\partial t_4(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4; \beta)}{\partial \beta} = N^{-1} \sum_{k' \in \Delta} \Psi(k') t_6(\mathbf{k}', -\mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4; \beta) +$$

$$+ 2[\Psi(k_1) t_2(\mathbf{k}_1; \beta) \delta_{\mathbf{k}_1 \in \Delta} + \dots + \Psi(k_4) t_2(\mathbf{k}_4; \beta) \delta_{\mathbf{k}_4 \in \Delta}] \times$$

$$\times t_4(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4; \beta) \quad (37.12)$$

при условии $t_4(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4; 0) = -|\mathfrak{M}_4|(2\pi)^4$;

$$\frac{\partial t_6(k_1, \dots, \mathbf{k}_6; \beta)}{\partial \beta} = N^{-1} \sum_{k' \in \Delta} \Psi(k') t_8(\mathbf{k}', -\mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_6; \beta) +$$

$$+ 2[\Psi(k_1) t_2(\mathbf{k}_1; \beta) \delta_{\mathbf{k}_1 \in \Delta} + \dots + \Psi(k_6) t_2(\mathbf{k}_6; \beta) \delta_{\mathbf{k}_6 \in \Delta}] t_6(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_6; \beta) +$$

$$+ 20 \sum_{k' \in \Delta} \Psi(k') t_4(\mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3; \beta) t_4(-\mathbf{k}', \mathbf{k}_4, \mathbf{k}_5, \mathbf{k}_6; \beta) \quad (37.13)$$

при условии $t_6(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_6; 0) = -(2\pi)^6 \mathfrak{M}_6$.

В общем случае уравнение для $t_{2n}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}; \beta)$ при четном n можно представить в виде

$$\frac{\partial t_{2n}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}; \beta)}{\partial \beta} = 2[\Psi(k_1) t_2(\mathbf{k}_1; \beta) \delta_{\mathbf{k}_1 \in \Delta} + \dots$$

$$\dots + \Psi(k_{2n}) t_2(\mathbf{k}_{2n}; \beta) \delta_{\mathbf{k}_{2n} \in \Delta}] t_{2n}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}; \beta) +$$

$$+ 2 \sum_{l=1}^{(n/2-1)} c_{2n}^{2l+1} \sum_{k' \in \Delta} \Psi(k') t_{2(l+1)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2l+1}; \beta) \times$$

$$\times t_{2(n-l)}(-\mathbf{k}', \mathbf{k}_{2(l+1)}, \dots, \mathbf{k}_{2n}; \beta) +$$

$$+ N^{-1} \sum_{k' \in \Delta} \Psi(k') t_{2n+2}(\mathbf{k}', -\mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}; \beta); \quad (37.14)$$

$$c_{2n}^{2l+1} = \frac{(2n)!}{(2(n-l)-1)!(2l+1)!}.$$

Если же индекс n принимает нечетные значения (чему соответствуют коэффициенты t_6, t_{10}, \dots), то уравнение имеет следующий вид:

$$\frac{\partial t_{2n}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}; \beta)}{\partial \beta} = 2[\Psi(k_1) t_2(\mathbf{k}_1; \beta) \delta_{\mathbf{k}_1 \in \Delta} + \dots$$

$$\dots + \Psi(k_{2n}) t_2(\mathbf{k}_{2n}; \beta) \delta_{\mathbf{k}_{2n} \in \Delta}] t_{2n}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}; \beta) +$$

$$+ 2 \sum_{l=1}^{(n-3/2)} c_{2n}^{2l+1} \sum_{k' \in \Delta} \Psi(k') t_{2(l+1)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2l+1}; \beta) \times$$

$$\times t_{2(n-l)}(-\mathbf{k}', \mathbf{k}_{2(l+1)}, \dots, \mathbf{k}_{2n}; \beta) +$$

$$+ N^{-1} \sum_{k' \in \Delta} \Psi(k') t_{2n+2}(\mathbf{k}', -\mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}; \beta) +$$

$$+ \sum_{k' \in \Delta} \Psi(k') c_{2n}^{2l+1}(\mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n; \beta) \times$$

$$\times t_{2n+1}(-\mathbf{k}', \mathbf{k}_{n+1}, \dots, \mathbf{k}_{2n}; \beta), \quad n = 2m + 1, \quad m = 1, 2, 3, \dots; \quad (37.15)$$

$$c_{2n}^{2l} = \frac{(2n)!}{n! n!}.$$

Коэффициенты c_{2n}^{2l+1} в (37.14) и (37.15) представляют собой число комбинаций, при помощи которых множество $2n$ -различных импульсов $\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}$ можно разбить на два множества с $2(n-l)$ и $2(n-l)-1$ импульсами.

Граничные условия таковы:

$$t_{2n}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}; 0) = -(2\pi)^{2n} |\mathfrak{M}_{2n}|. \quad (37.16)$$

Для четверной меры

$$t_{2n}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}; 0) = 0, \quad n \geq 3. \quad (37.17)$$

Подставляем (37.9) в (37.4), берем интеграл $\int (d\omega)^{N-N_1}$ и в результате получаем выражение $\exp \sum_{n \geq 1} D_{2n}^{(1)}(\omega)$, которое является характеристической функцией блочного якобиана (37.3). В выражении (37.4) в экспоненте имеется бесконечный ряд по степеням ω_k , $k < B_1$. При этом даже если исходные формы (37.1) и (37.2) были четверными, ряд для $D_{2n}^{(1)}(\omega)$ в (37.4) имел бы все степени ω . Сравнивая экспоненты в (37.3) и (37.4) и принимая во внимание решения уравнений (37.10) — (37.15), находим

$$D_0^{(1)} = t_0(\beta) = \int_0^\beta \sum_{k \in \Delta} \Psi(k) t_2(\mathbf{k}; \beta') d\beta'; \quad (37.18)$$

$$(2\pi)^2 \mathfrak{M}_2^{(1)}(\mathbf{k}; \beta) = -t_2(\mathbf{k}; \beta) \quad \text{для } \mathbf{k} < B_1; \quad (37.19)$$

$$\begin{aligned} & (2\pi)^4 \mathfrak{M}_4^{(1)}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4; \beta) = \\ & = -\frac{N_1}{N} t_4(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4; \beta), \quad k_1, \dots, k_4 < B_1; \end{aligned} \quad (37.20)$$

$$\begin{aligned} & (2\pi)^6 \mathfrak{M}_6^{(1)}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_6; \beta) = \\ & = -\left(\frac{N_1}{N}\right)^2 t_6(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_6; \beta), \quad k_1, \dots, k_6 < B_1; \end{aligned} \quad (37.21)$$

.....

Как видим, чтобы определить $t_0(\beta)$, необходимо найти $t_2(\mathbf{k}; \beta)$ для $\mathbf{k} \in \Delta_1$, а из уравнения (37.11) следует, что для нахождения $t_2(\mathbf{k}; \beta)$ с $\mathbf{k} < B_1$ необходимо иметь $t_4(\mathbf{k}, -\mathbf{k}, \mathbf{k}', -\mathbf{k}'; \beta)$ для $\mathbf{k} < B_1$ и $\mathbf{k}' > B_1$ и т. д. Таким образом, нужно сначала определить t_{2n} для $0 \leq \mathbf{k} < B$, а затем получить выражения (37.18) — (37.21) для коэффициентов блочного якобиана $J'(\rho)$, заданного формулой (37.3).

В результате решения уравнений находим

$$(2\pi)^2 \mathfrak{M}_2^{(1)}(\mathbf{k}, \beta) = \mathfrak{M}_2 + N^{-1} \sum_{k' \in \Delta} \Psi(k') \int_0^\beta t_4(\mathbf{k}, -\mathbf{k}, \mathbf{k}', -\mathbf{k}'; \beta) d\beta', \quad (37.22)$$

где

$$t_2(\mathbf{k}; \beta) = -\mathfrak{M}_2 + 2 \int_0^\beta \Psi(\mathbf{k}) t_2(\mathbf{k}; \beta') \delta_{\mathbf{k} \in \Delta} d\beta' + \\ + N^{-1} \sum_{\mathbf{k}' \in \Delta} \int_0^\beta \Psi(\mathbf{k}) t_4(\mathbf{k}, -\mathbf{k}, \mathbf{k}', -\mathbf{k}'; \beta') d\beta'; \quad (37.23)$$

$$t_2(\mathbf{k}; \beta) = t_2(-\mathbf{k}; \beta); \quad \Psi(\mathbf{k}) = \Psi(-\mathbf{k});$$

$$t_4(\mathbf{k}, -\mathbf{k}, \mathbf{k}', -\mathbf{k}'; \beta') = -|\mathfrak{M}_4| + 4 \int_0^{\beta'} \Psi(\mathbf{k}') t_2(\mathbf{k}'; \beta) \times \\ \times t_4(\mathbf{k}, -\mathbf{k}, \mathbf{k}', -\mathbf{k}'; \beta) d\beta' + \\ + N^{-1} \sum_{\mathbf{k}'' \in \Delta} \Psi(\mathbf{k}'') \int_0^{\beta'} t_6(\mathbf{k}'', -\mathbf{k}'', \dots, \mathbf{k}, -\mathbf{k}; \beta) d\beta; \quad (37.24)$$

$$t_6(\mathbf{k}'', -\mathbf{k}'', \mathbf{k}', -\mathbf{k}', \mathbf{k}, -\mathbf{k}; \beta) = 4 \int_0^\beta [\Psi(\mathbf{k}'') t_2(\mathbf{k}'', \beta') + \dots$$

$$\dots + \Psi(\mathbf{k}) t_2(\mathbf{k}; \beta')] t_6(\mathbf{k}'', -\mathbf{k}'', \dots, \mathbf{k}, -\mathbf{k}; \beta') d\beta' +$$

$$+ 12 \sum_{\mathbf{k}''' \in \Delta} \int_0^\beta \Psi(\mathbf{k}''') t_4(\mathbf{k}''', -\mathbf{k}''', \mathbf{k}'', -\mathbf{k}''; \beta') \times$$

$$\times t_4(-\mathbf{k}''', \mathbf{k}''', \mathbf{k}, -\mathbf{k}; \beta') d\beta' +$$

$$+ 8 \sum_{\mathbf{k}'''' \in \Delta} \Psi(\mathbf{k}''') \int_0^\beta t_4(\mathbf{k}''', \mathbf{k}'', \mathbf{k}', \mathbf{k}; \beta') t_4(-\mathbf{k}''', -\mathbf{k}'', -\mathbf{k}', -\mathbf{k}; \beta') d\beta' +$$

$$+ N^{-1} \sum_{\mathbf{k}'''' \in \Delta} \Psi(\mathbf{k}''') \int_0^\beta t_8(\mathbf{k}''', -\mathbf{k}''', \dots, \mathbf{k}, -\mathbf{k}; \beta') d\beta'. \quad (37.25)$$

Для $\mathfrak{M}_4^{(1)}$ имеем

$$\mathfrak{M}_4^{(1)}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4; \beta) =$$

$$= \frac{N_1}{N} |\mathfrak{M}_4| - \frac{N_1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}' \in \Delta} \Psi(\mathbf{k}') \int_0^\beta t_6(\mathbf{k}', -\mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4; \beta') d\beta';$$

$$t_6(\mathbf{k}', -\mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4; \beta) = 4 \int_0^\beta \Psi(\mathbf{k}') t_2(\mathbf{k}'; \beta) \delta_{\mathbf{k}' \in \Delta} \times \quad (37.26)$$

$$\times t_6(\mathbf{k}', -\mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4; \beta') + 20 \sum_{\mathbf{k}'' \in \Delta} \Psi(\mathbf{k}'') \times$$

$$\begin{aligned} & \times \int_0^\beta t_4(\mathbf{k}'', \mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \beta') t_4(-\mathbf{k}'', -\mathbf{k}', \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4; \beta') d\beta' + \\ & + N^{-1} \sum_{\mathbf{k}'' \in \Delta} \int_0^\beta \Psi(\mathbf{k}'') t_8(\mathbf{k}'', -\mathbf{k}'', \mathbf{k}', -\mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4; \beta') d\beta'; \\ & \dots \dots \dots \end{aligned}$$

Предложенная здесь система рекуррентных уравнений является точной. Как видим, чтобы перейти от $\mathfrak{M}_2, \mathfrak{M}_4, \dots$ к $\mathfrak{M}_2^{(1)}, \mathfrak{M}_4^{(1)}, \dots$, следует определить функции t_2, t_4, t_6, \dots . Эти функции и представляют собой результат «промежуточного» интегрирования, аналогичного интегралам по ν в § 14¹⁸. Предложенные выкладки являются точными.

В этом параграфе интегрирование производится таким образом, что форма гамильтониана $\sum_{k < B_1} \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}$ не изменяется, а изменяется якобиан задачи. По смыслу якобиан равен плотности коллективных переменных в фазовом пространстве спинов согласно (4.1):

$$\begin{aligned} J(\rho) = & \text{Sp} \prod_{\mathbf{k}} \delta \left(\rho_{\mathbf{k}}^c - V \bar{N}^{-1} \sum_{\mathbf{l}} \hat{\sigma}_1 \cos \mathbf{k} \mathbf{l} \right) \times \\ & \times \delta \left(\rho_{\mathbf{k}}^s - V \bar{N}^{-1} \sum_{\mathbf{l}} \hat{\sigma}_1 \sin \mathbf{k} \mathbf{l} \right) \delta \left(\rho_0 - \sum_{\mathbf{l}} \sigma_1 V \bar{N}^{-1} \right), \end{aligned}$$

или же:

$$J(\rho) \simeq \text{Sp} \prod_{\mathbf{l}} \delta(\tilde{\rho}_1 - \tilde{\sigma}_1).$$

Если бы можно было составить подобные соотношения для якобиана $J_{(\rho)}^{(1)}$, который содержит N_1 переменных $\rho_{\mathbf{k}}$ в объеме периодичности $V, k < B_1$, то должны были бы выполняться равенства

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}_2^{(1)} &= \langle \sigma_m^2 \rangle; \\ \mathfrak{M}_4^{(1)} &= 4 \langle \sigma_m^2 \rangle - 6 \langle \sigma_m^2 \rangle^2. \end{aligned}$$

Здесь можно точно проследить, в какой мере справедливо результат интегрирования по фазовому слою интерпретировать как переход к блочной структуре с эффективными спинами в узлах решетки. Тогда можно было бы определить и значения спинов в узлах этой решетки.

Рассмотрим второй вариант для дифференциальной формы рекуррентных уравнений, связанный с дифференцированием по $t = \ln s$. Здесь процесс интегрирования статистической суммы основывается на бесконечно малых преобразованиях. Получаемая в результате форма дифференциальных уравнений имеет свой аналог в квантовой

¹⁸ В § 14 интегрирование выполнялось для функции $W(\rho)$ и рекуррентные соотношения выписывались для коэффициентов $a_{2n}^{(1)}$. Здесь рассматриваются преобразования в якобиане, рекуррентные соотношения записываются для коэффициентов $\mathfrak{M}_{2n}^{(1)}$.

теории поля. В частности, найдем явные выражения для функции Гелл-Манна — Лоу и нули этой функции. (Уравнения получены и исследованы в работах И. А. Вакарчука, Ю. К. Рудавского и Ю. В. Головача и рассмотрены также Ю. В. Козицким [11—14, 31, 32].)

Ради целостности изложения начнем вывод дифференциальных соотношений из общих уравнений (21.13), полагая в них $\ln s = t$ малой величиной, по которой будет выполняться дифференцирование. Рассматривая r_n и u_n как $r(t)$ и $u(t)$, будем вместо $E^{(n)}(\rho)$ (см. (15.15)) искать сглаженный гамильтониан, коэффициенты $r(t)$ и $u(t)$ которого образуют при $T = T_c$ непрерывную группу преобразований¹⁹.

Подробные выкладки выполним только для первого из уравнений (21.13) и приведем его к дифференциальной форме, совпадающей с соответствующим уравнением из работ [11—14]. Для второго уравнения приведем готовый результат из указанных работ. Так как соотношения (21.13) справедливы для произвольного n , положим $r_{n+1} = r_1(t)$, $u_{n+1} = u_1(t)$. Прежде всего выделим в уравнениях явную зависимость от $t = \ln s$. Для этого интеграл

$$Q^{-1}(\varphi) \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 \varphi(\omega) d\omega$$

представим в виде

$$Q^{-1}(\varphi) \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 \varphi(\omega) d\omega = (2\pi)^2 s^D \frac{\int (I|x|/I|0|)^{s^D} x^2 dx}{\int (I|x|/I|0|)^{s^D} dx}. \quad (37.27)$$

Здесь произведена замена $\omega/s^{D/2} = x$, где D — размерность пространства, $D = 3$. Из p_{2n} выделим множитель $s^{-D(n-1)}$, тогда, например,

$$\exp\left(\frac{(2\pi)^4}{4!} p_4 \omega^4\right) = \exp\left(\frac{1}{4!} \sigma_4 \frac{1}{s^D} \omega^4\right) = \left(\exp \frac{1}{4!} \sigma_4 x^4\right)^{s^D},$$

где σ_4 — аналог S_4 ; σ_{2n} — аналог S_{2n} (см. формулы (14.17)–(14.20)); $S_{2n} = \sigma_{2n} s^{2n}$, а

$$\begin{aligned} \varphi(\omega) &= \exp\left[-\sum_{n \geq 1} \frac{(2\pi)^{2n}}{(2n)!} p_{2n} \omega^{2n}\right] = \\ &= \left[\exp\left(-\sum_{n \geq 1} \frac{1}{(2n)!} \sigma_{2n} x^{2n}\right)\right]^{s^D} = \left[\frac{I(x)}{I(0)}\right]^{s^D}. \end{aligned} \quad (37.28)$$

Функцию $[I(x)/I(0)]^{s^D}$ можно найти из исходного интеграла (14.16), если в нем v_l заменить на x (для первого слоя $d(B_1 B) = r + q$, $a_4 = u$, $a_{2n} = u_{2n}$, $n \geq 3$):

$$I(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{2}(r+q)\eta^2 - \sum_{n \geq 2} \frac{u_{2n}}{(2n)!} \eta^{2n} + i2\pi\eta x\right] d\eta. \quad (37.29)$$

¹⁹ Однако на основании § 21 можно заметить, что получаемые здесь результаты справедливы в области $t < 1$.

Такая замена означает приближение

$$\frac{1}{N_1} \sum_{h \leq B} \exp [ik(l - m)] \simeq \delta_{l-m}, \quad (37.30)$$

где $N_1 = N/s^3$; l, m — векторы соответственно исходной и блочной решеток.

После указанных замен рекуррентные уравнения (20.13) принимают вид

$$r_1 = s^2 \left[-q + (2\pi)^2 s^D \frac{\int [I(x)/I(0)]^{s^D} x^2 dx}{\int [I(x)/I(0)]^{s^D} dx} \right]; \quad (37.31)$$

$$u_1 = s^4 (2\pi)^4 \left\{ -s^{2D} \frac{\int [I(x)/I(0)]^{s^D} x^4 dx}{\int [I(x)/I(0)]^{s^D} dx} + 3s^{4D} \left[\frac{\int [I(x)/I(0)]^{s^D} x^2 dx}{\int [I(x)/I(0)]^{s^D} dx} \right]^2 \right\}. \quad (37.32)$$

Зависимость от s остается еще в выражении $I(x)$. В формуле (37.29) она имеется и в коэффициенте $r + q$, а именно:

$$q = \beta \tilde{\Phi}(0) \frac{3}{s} (1 - s^{-5}) / (1 - s^{-3}).$$

Для $I(x)$ имеем два выражения, (37.28) и (37.29), в которых нас будет интересовать зависимость $I(x)$ от s . Далее будем использовать формулу (37.29).

Перейдем к дифференциальным соотношениям. Подставляем $s = \exp(t)$:

$$[I(x)/I(0)]^{s^D} = \exp \{ e^{Dt} \ln [I(x)/I(0)] \}.$$

Учитываем, что согласно (37.29)

$$\int dx I(x) = 1. \quad (37.33)$$

Для производных имеем

$$\begin{aligned} \frac{\partial I(x)}{\partial t} &= -\frac{1}{2} \dot{q} \int \exp \left[-\frac{1}{2} (r + q) \eta^2 - \sum_{n \geq 2} u_{2n} \eta^{2n} / (2n)! + i2\pi x \eta \right] \times \\ &\times \eta^2 d\eta = -\frac{1}{2} \dot{q} \frac{1}{(2\pi i)^2} \frac{\partial^2 I}{\partial x^2}, \end{aligned}$$

поэтому

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\int [I(x)/I(0)] x^2 dx}{\int [I(x)/I(0)] dx} = \frac{\dot{q}}{(2\pi)^2}; \quad (37.34)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{I(x)}{I(0)} \right]^{s^D} \Big|_{t=0} = \frac{\partial}{\partial t} \exp \left[e^{tD} \ln \frac{I(x)}{I(0)} \right] = D \frac{I(x)}{I(0)} \ln \frac{I(x)}{I(0)}. \quad (37.35)$$

Отсюда для уравнения (37.31) получаем

$$r_1(0) + \frac{\partial r_1(0)}{\partial t} t = -q(0) + (2\pi)^2 \langle x^2 \rangle + \left\{ -2q(0) + (2\pi)^2 (2 + D) \langle x^2 \rangle + \right.$$

$$+ \mathbf{D} \left[\frac{\int [I(x)/I(0)] [\ln [I(x)/I(0)]] x^2 dx}{\int [I(x)/I(0)] dx} - \frac{\int [I(x)/I(0)] [\ln [I(x)/I(0)]] \langle x^2 \rangle dx}{\int [I(x)/I(0)] dx} \right] t + 0(t^2), \quad (37.36)$$

где

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\int x^2 I(x)/I(0) dx}{\int [I(x)/I(0)] dx} = \frac{1}{(2\pi)^2} (r + q), \quad q(0) = \beta \tilde{\Phi}(0).$$

Справедливы также равенства $r_1(0) = r$ и $\frac{\partial r_1(0)}{\partial t} = \frac{\partial r}{\partial t}$. В результате имеем такую дифференциальную форму рекуррентных уравнений для $r(t)$:

$$\frac{\partial r}{\partial t} = -2r + (r + q) \mathbf{D} - \mathbf{D} \int [\ln (I(x)/I(0))] I(x) [(r + q) - (2\pi)^2 x^2] dx. \quad (37.37)$$

Аналогичным образом находим уравнение для $u(t)$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = 4! \mathbf{D} \frac{(r + q)^2}{4} f_4 \left(\frac{1}{z} \right), \quad (37.38)$$

где

$$f_4 \left(\frac{1}{z} \right) = \frac{1}{4z} \frac{\mathbf{D} + 2}{\mathbf{D}} - \frac{1}{2} \int dx \left[\left(\frac{1}{4} \frac{1}{z} + 1 \right) - (2\pi x)^2 + \frac{(2\pi x)^4}{12} \right] \times \\ \times I(x) \ln (I(x)/I(0)); \quad z = \frac{3}{4} \frac{(r + q)^2}{u}.$$

Приведенные уравнения решаются методом неподвижной точки. Приравняем к нулю производные по t :

$$\frac{\partial r}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial t} = 0.$$

Находим неподвижную точку в решения линейного приближения. Результаты совпадают с данными, приведенными в § 21 — формулы (21.31)–(21.34).

Подробным исследованиям дифференциальных уравнений (37.38), (37.37) и уравнений для $u_n(t)$, $n \geq 3$, посвящены работы [11–14, 21].

Функция $f_4(1/z)$ является функцией Гелл-Манна — Лоу. Теперь она задана в явном виде, выражение для нее содержит однократные интегралы, которые можно рассчитать со сколь угодно большой степенью точности. Кроме того, эта функция рассматривалась в работах [13, 119] в различных приближениях для интегралов

$$\int dx I(x) \ln (I(x)/I(0)), \quad \int dx x^2 I(x) \ln (I(x)/I(0)). \quad (37.39)$$

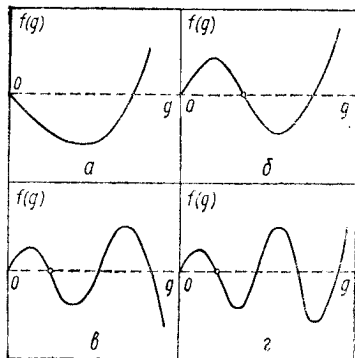


Рис. 32. Схематическая зависимость функции Гелл-Манна — Лоу $f_4(g)$ от номера n в различных \mathcal{P} -приближениях: \mathcal{P}_2 (а); \mathcal{P}_4 и \mathcal{P}_6 (б); \mathcal{P}_8 , \mathcal{P}_{10} , \mathcal{P}_{12} , \mathcal{P}_{14} , \mathcal{P}_{16} , \mathcal{P}_{18} (в); \mathcal{P}_{20} (г); кружком отмечена неподвижная точка (первый нетривиальный нуль функции $f_4(g)$), связанная с КР.

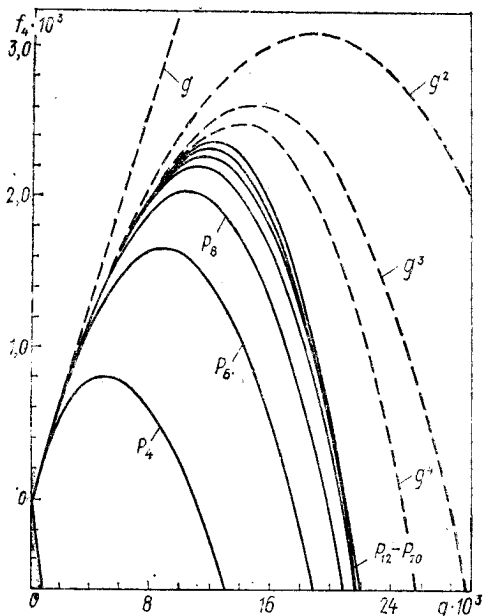


Рис. 33. Функция Гелл-Манна — Лоу $f_4(g)$ в окрестности первой нетривиальной неподвижной точки в различных \mathcal{P} -приближениях для трехмерной модели Изинга ($D = 3$, $n = 1$); штриховые линии описывают функцию $f_4(g)$ в различных g -приближениях.

Как следует из (37.2),

$$\ln(I(x)/I(0)) = - \sum_{n \geq 1} \frac{1}{(2n)!} \sigma_{2n} x^{2n}. \quad (37.40)$$

Для $I(x)$ берется интегральная форма (37.29) с точностью до четвертого слагаемого:

$$I(x) = \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} (r + g) \eta^2 - \frac{1}{4!} u \eta^4 + i 2\pi x \eta \right\} d\eta. \quad (37.41)$$

Значения интегралов (37.39) зависят от выбора выражения для функции $I(x)$. Рассмотрим два подхода. В первом интеграл (37.41) рассчитывается с гауссовой мерой:

$$I(x) = \int \exp \left[-\frac{1}{2} (r + g) \eta^2 + i 2\pi x \eta \right] \left(1 - \frac{1}{4!} u \eta^4 + \dots \right) d\eta. \quad (37.42)$$

С такой же мерой рассчитываются и коэффициенты σ_{2n} в (37.40). В результате для $f_4(1/z)$ получаем разложение по степеням $1/z$ — так называемое g -разложение ($g = 1/(8z)$). Во втором подходе рассматривается интеграл $I(x)$ от четверной плотности меры в форме (37.41). Соответственно и коэффициенты в (37.40) представляются в виде суммы моментов от четверной плотности меры. Функция $f_4(1/z)$ зависит от числа слагаемых в выражении (37.40). Получаем так назы-

ваемое \mathcal{P} -разложение

$$\left[\mathcal{P}_{2n} = \sigma_{2n} \left(\frac{r+q}{2} \right)^n \frac{1}{(2\pi i)^{2n}} \right].$$

На рис. 32 представлены результаты машинного расчета функции $f_4(g)$ в методе \mathcal{P} -разложения для различных приближений по \mathcal{P}_{2n} . Функция имеет много нулей, с критическим режимом связан первый нетривиальный нуль, отмеченный кружком. На рис. 33 приведена схема движения этого нуля в зависимости от точности промежуточного интегрирования, т. е. от числа учтенных коэффициентов $\sigma_2, \sigma_4, \sigma_6, \dots$ (или, что то же, P_2, P_4, P_6, \dots) в интегралах (37.39) (или (21.6)—(21.9)). На этом же рисунке приведены результаты расчета g -разложения, которое выполняется с гауссовой плотностью меры (37.42), и \mathcal{P} -разложения, выполняемого с четверной плотностью меры (37.41). Приведенные результаты соответствуют случаю неасимптотического схождения с двух сторон к предельному значению $g^* = 1/8z^* = 0,021$.

Заканчивая рассмотрение дифференциальной формы рекуррентных уравнений, хотелось бы подчеркнуть, что она вытекает из разностных уравнений, явно содержащих параметр s . В дифференциальных уравнениях сделаны те же приближения, что и в разностных. Имеется различие в способах достижения цели — определении термодинамических функций. В разностных уравнениях (при заданном s) выполняется интегрирование по слоям фазового пространства и определяется статистическая сумма. С помощью дифференциальных уравнений находят $r(t)$ и $u(t)$ как функции t . В пределе $t \rightarrow \infty$ можно было бы утверждать, что статистическая сумма проинтегрирована. Однако приведенная выше форма дифференциальных уравнений возникает при $s \approx 1$. Если для их решения применить метод неподвижной точки, то получаемые в результате выражения будут справедливы для небольших значений t . Для $t \geq 1$ линейное приближение становится неточным, так как собственные значения E_1 и E_2 и неподвижные точки r^*, u^*, z^* являются функциями s , а следовательно, и t . Кроме того, при $T \neq T_c$ необходимо определить область значений $t < t^*$, в которой были бы справедливы решения реформ-группового типа.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изложен метод коллективных переменных, с помощью которого описано явление фазового перехода второго рода. Не все вычисления доведены до конца. Это относится к выражениям и для свободной энергии, и для бинарной корреляционной функции, которые в гл. I рассчитывались с гауссовой плотностью меры. Такие расчеты нетрудно выполнить, основываясь на работе [66]. Бинарной корреляционной функции уделено в работе мало внимания. Не вполне последовательно проведено интегрирование при $T \geq T_c$. В этом случае, как и при $T \leq T_c$, следовало бы выделить интеграл по переменной ρ_0 и ввести внешнее поле. Тогда можно было бы найти восприимчивость при $T \geq T_c$. Такие расчеты предлагается выполнить читателю. Возможно, наиболее интересно было бы учесть поправку на усреднение потенциала, приведенную в формулах (27.15) и (27.16).

В § 28—37 расчеты проведены для случая $\eta = 0$. При $\eta = 0$, строго говоря, следовало бы изменить координаты неподвижных точек и собственные значения линейного оператора ренормализационной группы. Отметим главные изменения, которые вносятся при учете индекса η и касаются значений критических индексов. Из формул (27.15) и (27.16) получаются измененные значения координат m_τ и μ_τ — точек «сшивания» двух решений, КР и ПГР при $T \geq T_c$ и КР и ИГР при $T \leq T_c$. Вместо формул (19.20) и (23.29) теперь получаем

$$m'_\tau = \frac{\ln \tau}{\ln E'_1} + \dots;$$

$$\mu_\tau = \frac{\ln \tau}{\ln E'_1} + \dots,$$

где E'_1 задано в (27.15). Тогда в выражениях для свободной энергии везде вместо

$$s^{m'_\tau} = \tau^{-v} \Xi, \quad s^{\mu_\tau} = \tau^{-v} \mathcal{A}$$

будет

$$s^{m'_\tau} = \tau^{-v'} \Xi', \quad s^{\mu_\tau} = \tau^{-v'} \mathcal{A}',$$

где

$$v' = \frac{\ln s}{\ln E_1'} = \frac{\ln s}{\ln E_1 - \eta \ln s},$$

или

$$v' = v(1 + \eta v)$$

для $s = 3 \div 3,5862$; $v' = 0,605 + 0,015 = 0,620$.

Соответственно для теплоемкости находим

$$\alpha = -3v' + 2 = -3v(1 + \eta v) + 2; \quad \alpha \approx 0,140.$$

Расчет среднего момента начинается с формулы (25.1). Величины B и G претерпевают значительные изменения. Вместо формулы (25.2) получаем

$$B = \xi^{-2\mu\tau} \frac{1}{2} |r_\mu| [\dots],$$

или

$$B = |\tau|^{2v' - \eta v'} B_0',$$

а для G в (25.5) находим

$$G \sim s^{3\mu\tau\xi^{-4\mu\tau}},$$

или

$$G = \tau^{v'(1-2\eta)} G_0',$$

где B_0' и G_0' — величины, аналогичные B_0 и G_0 . Для формул (25.13) и (25.14) имеем

$$v = -\tau^{v'(1+\eta)} \tilde{v}';$$

$$w = -\tau^{-v'(1-2\eta)} h \tilde{w}',$$

где $\tilde{w}' = \tilde{w}/h$. В результате средний момент и восприимчивость определяются следующими формулами:

$$\langle \sigma \rangle = \tau^{v'(1+\eta)/2} \sqrt{-\tilde{v}'} \left[1 + \frac{\tilde{w}_1 h}{2 \sqrt{-\tilde{v}_1^3}} \tau^{-(1/2)v' + v'(\eta/2)} \right];$$

при $\tau \rightarrow 0$

$$\langle \sigma \rangle \approx \tau^{v'(1+\eta)/2} \sqrt{-\tilde{v}'} = \tau^\beta \sqrt{-\tilde{v}'}; \quad (\Lambda)$$

$$\beta = \frac{1}{2} v' (1 + \eta), \quad \beta \approx 0,322;$$

$$\chi = \frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial h} = \frac{1}{2} \frac{\tilde{w}'}{\tilde{v}'} \tau^{-2v' + v'\eta};$$

$$\gamma = 2v' - v'\eta, \quad \gamma = 1,215.$$

Наконец рассмотрим индекс δ . Исходим из формулы (25.23):

$$\langle \sigma \rangle \simeq \sqrt[3]{\frac{w}{2} + \dots} = \sqrt[3]{\frac{1}{2} \tau^{-v'(1-2\eta)} h \tilde{w}' + \dots}.$$

Из формулы (A) выражаем τ через $\langle \sigma \rangle$. В результате

$$\langle \sigma \rangle = \langle \sigma \rangle^{-\frac{2}{3} \frac{1-2\eta}{1+\eta}} h^{\frac{1}{3}} \tilde{w}' (\tilde{v}')^{\frac{1}{1+\eta}},$$

или

$$\langle \sigma \rangle^{1+\frac{2}{3} \frac{1-2\eta}{1+\eta}} \sim h^{\frac{1}{3}},$$

или

$$\langle \sigma \rangle \sim h^{1/\delta}; \quad \delta = 3 + 2 \frac{1-2\eta}{1+\eta}; \quad \delta = 4,769.$$

Теперь убедимся, что условия термодинамической устойчивости выполняются. Имеем $c_V > 0$, $\chi > 0$. Рассмотрим условия на критические индексы. Как отмечалось выше, связанные с нулевым значением η изменения координат неподвижных точек не были учтены. Поэтому отношения « \geq » должны стать равенствами. Начнем с условия Рашбрука [56]

$$\alpha' + 2\beta + \gamma \geq 2.$$

После подстановки $2 - 3v' + v'(1 + \eta) + 2v' - v'\eta \geq 0$ и сокращения получаем

$$v'\eta - v'\eta = 0.$$

Условие Гриффитса [56] $\alpha' + \beta(\delta + 1) \geq 2$ принимает вид

$$2 - 3v' + \frac{1}{2} v'(1 + \eta) \left[4 + 2 \frac{(1-2\eta)}{1+\eta} \right] \geq 0$$

и сводится к форме

$$2v'\eta - 2v'\eta = 0.$$

Условие Букингхэма, Гунтона и Фишера

$$\frac{3\gamma'}{2 - \alpha'} \geq \frac{3\gamma'}{2\beta + \gamma'} \geq 2 - \eta$$

после подстановки сводится к равенству $1 = 1 = 1$.

Заметим, что каждая из термодинамических величин: теплоемкость c_V , средний момент $\langle \sigma \rangle$, восприимчивости χ_T и χ_h были найдены совершенно независимо. И для них всех выполняются условия термодинамической устойчивости.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ *

1. Ахизер А. И., Барьяхтар В. Г., Пелетминский С. В. Спиновые волны.— М. : Наука, 1967.— 368 с.
2. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика.— М. : Мир, 1978. Т. 1.— 406 с.
3. Боголюбов Н. И., Ширков Д. В. О ренормализационной группе в квантовой электродинамике.— ДАН СССР, 1955, 103, № 2, с. 203—206.
4. Боголюбов Н. И. Проблемы динамической теории в статистической физике.— М. ; Л. : Гостехиздат, 1946.— 119 с.: см. также: Боголюбов Н. И. Избранные труды.— Киев : Наук. думка, 1970.— Т. 2.
5. Боголюбов Н. И., Ширков Д. В. Группа мультипликативной ренормировки в квантовой теории поля.— ЖЭТФ, 1956, 30, вып. 1, с. 77—86.
6. Боголюбов Н. И., Ширков Д. В. Введение в теорию квантовых полей.— М. : Наука, 1976.— 479 с.
7. Боголюбов Н. И. Квазисредние в задачах статистической механики: Избр. тр. : в 3-х т.— Киев : Наук. думка, 1970.— Т. 3.
8. Боголюбов Н. И., мл. Метод исследования модельных гамильтонианов.— М. : Наука, 1974.— 176 с.
9. Браут Р. Фазовые переходы.— М. : Мир, 1967.— 288 с.
10. Вакарчук И. А. К микроскопической теории λ -перехода в жидком He.— ТМФ, 1978, 36, № 1, с. 122—135.
11. Вакарчук И. А., Рудавский Ю. К., Юхновский И. Р. Приближенное преобразование ренормализационной группы в теории фазовых переходов. I. Дифференциальное уравнение ренормализационной группы.— Там же, 1982, 50, № 2, с. 313—320.
12. Вакарчук И. А., Рудавский Ю. К. Приближенное преобразование ренормализационной группы в теории фазовых переходов. II. Уравнение для неподвижных точек и линейный оператор ренормализационной группы.— Там же, 51, № 1, с. 102—110.
13. Вакарчук И. А., Рудавский Ю. К., Головач Ю. В. Исследование фазового перехода в трехмерной модели « ϕ^4 ».— УФЖ, 1982, 27, № 11, с. 1711—1717.
14. Вакарчук И. А., Рудавский Ю. К., Головач Ю. В. Исследование критических свойств n -компонентной модели на основе приближенного преобразования ренормализационной группы.— Физика многочастич. систем, 1983, вып. 4, с. 44—54.
15. Васрух М. В., Крохмальский Т. Е. Эффективные многочастичные взаимодействия ионов в металлах.— ТМФ, 1982, 51, № 1, с. 130—141.
16. Вакс В. Г., Ларкин А. И. О фазовых переходах 2-го рода.— ЖЭТФ, 1965, 49, вып. 3, с. 975—989.

* В списке литературы использованы следующие сокращения: ДАН — Доклады Академии наук; ЖЭТФ — Журнал экспериментальной и теоретической физики; ТМФ — Теоретическая и математическая физика; ФММ — Физика металлов и металловедение; УФЖ — Украинский физический журнал.

17. *Вакс В. Г.* Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков.— М. : Наука, 1972.— 327 с.
18. *Вильсон К., Козут Дж.* Ренормализационная группа и ε -разложение.— М. : Мир, 1975.— 256 с.
19. *Глауберман А. Ю.* Квантовая механика.— Львів : Вид-во Львів. ун-ту, 1962.— 506 с.
20. *Гинзбург В. Л., Ландау Л. Д.* К теории сверхпроводимости.— ЖЭТФ, 1960, 20, № 12, с. 1064—1082.
21. *Головач Ю. В.* Исследование фазового перехода в системе с n -компонентным вырожденным параметром порядка : Автореф. дис... канд. физ.-мат. наук.— Киев, 1983.— 21 с.
22. *Городецкий Е. Е., Запрудский В. М.* Особенности термодинамических величин вблизи критических точек.— ЖЭТФ, 1977, 72, вып. 6, с. 2299—2308.
23. *Градштейн И. С., Рыжик И. И.* Таблицы интегралов сумм, рядов и произведений.— М. : Наука, 1971.— 1108 с.
24. *Гурский Э. А., Вараницкий В. И.* Свободная энергия бинарных сплавов : Расчет в области высоких температур.— ФММ, 1984, 57, № 5, с. 883—891.
25. *Дайсон Ф., Монролла Э., Кац Ц., Фишер М.* Устойчивость и фазовые переходы.— М. : Мир, 1973.— 369 с.
26. *Зубарев Д. П.* Вычисление конфигурационных интегралов для систем частиц с кулоновским взаимодействием.— ДАН СССР, 1964, 95, № 4, с. 757—760.
27. *Изюмов Ю. А., Кассан-Оглы Ф. А., Скрябин Ю. И.* Полевые методы в теории ферромагнетизма.— М. : Наука, 1974.— 224 с.
28. *Казаков Д. И., Тарасов О. В., Ширков Д. В.* Аналитическое продолжение результатов теории возмущений модели $q\varphi^4$ в область $q \geq 1$.— ТМФ, 1979, 38, № 1, с. 15—25.
29. *Кадашов Л. П.* Критические явления, гипотеза универсальности, скейлинг и капельная модель.— В кн.: Квантовая теория поля и физика фазовых переходов. М. : Мир, 1975, с. 7—32.
30. *Калмоитосич Ю. Л.* Статистическая физика.— М. : Наука, 1983.— 450 с.
31. *Козицкий Ю. В.* Применение метода коллективных переменных к исследованию скалярных моделей фазовых переходов : Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук.— Киев, 1981.— 17 с.
32. *Козицкий Ю. В., Юхновский И. Р.* Обобщенная модель скалярного ферромагнетика в методе коллективных переменных.— ТМФ, 1982, 51, № 2, с. 268—277.
33. *Козловский М. П.* Корреляционная длина в трехмерной модели Изинга.— УФЖ, 1978, 23, № 7, с. 1057—1064.
34. *Козловский М. П.* Приближенные рекуррентные соотношения трехмерной модели Изинга в методе коллективных переменных.— Киев, 1981.— 39 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики ; ИТФ-81-82Р).
35. *Козловский М. П.* Критические свойства модели Изинга. Модель ρ^6 : Приближенный расчет.— Киев, 1982.— 38 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики ; ИТФ-82-80Р).
36. *Козловский М. П.* Критические свойства модели Изинга. Модель ρ^6 : Общие рекуррентные соотношения.— Киев, 1982.— 31 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики ; ИТФ-82-104Р).
37. *Козловский М. П.* Поведение термодинамических функций вблизи точки фазового перехода в модели Изинга : Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук.— Киев, 1977.— 15 с.
38. *Козловский М. П.* Критическое поведение трехмерной модели Изинга. Модель ρ^6 .— Физика многочастич. систем, 1983, вып. 4, с. 37—43.
39. *Кориневский Н. А.* Функционал свободной энергии системы двухчастичных кластеров.— ТМФ, 1983, 55, № 2, с. 291—304.
40. *Кориневский Н. А.* Обобщение метода кластеров в теории сегнетоэлектрических фазовых переходов.— Физика многочастич. систем, 1983, вып. 4, с. 84—93.
41. *Кривоглаз М. А., Смирнов А. А.* Теория упорядочивающихся сплавов.— М. : Физматгиз, 1958.— 388 с.
42. *Кудрявцев И. К., Шумовский А. С.* О термодинамике спиновой подсистемы в модели ферромагнитного кристалла.— ТМФ, 1979, 41, № 1, с. 103—109.

43. Коломиец В. А. Численные расчеты трехмерной модели Изинга в методе коллективных переменных : Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук.— Львов, 1982.— 19 с.
44. Ландау Л. Д. К теории фазовых переходов : Собр. тр. В 2-х т. М. : Наука, 1969.— Т. 1 — 2. Ландау Л. Д. К теории фазовых переходов.— ЖЭТФ, 1937, 7, вып. 1, с. 19—32; вып. 5, с. 627—655.
45. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика.— М. : Наука, 1976.— Ч. 1. 584 с.
46. Ларкин А. И., Хмельницкий Д. Е. Фазовый переход в одноосных сегнетоэлектриках.— ЖЭТФ, 1969, 56, вып. 6, с. 2087—2098.
47. Ма Ш. Современная теория критических явлений.— М. : Мир, 1980.— 295 с.
48. Мидал А. А. Фазовые переходы в калибровочных и спиновых решеточных системах.— ЖЭТФ, 1975, 69, вып. 4, с. 1457—1465.
49. Паташинский А. В., Покровский В. Д. О поведении упорядочивающихся систем вблизи точки фазового перехода.— Там же, 1966, 50, вып. 2, с. 439—447.
50. Паташинский Л. З., Покровский В. Л. Флуктуационная теория фазовых переходов.— М. : Наука, 1975.— 380 с.
51. Попов В. Н. Континуальные интегралы в квантовой теории поля и статистической физике.— М. : Атомиздат, 1976.— 256 с.
52. Рудаевский Ю. К. Исследование модели Изинга методом коллективных переменных : Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук.— Киев, 1976.— 19 с.
53. Синай Я. Г. Фазовые переходы : Строгие результаты.— М. : Наука, 1980.— 207 с.
54. Соколов А. Н. Уравнения ренормализационной группы и термодинамические аномалии вблизи трикритической точки.— ЖЭТФ, 1979, 77, вып. 4, с. 1598—1614.
55. Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица, И. Стигана.— М. : Наука, 1979.— 832 с.
56. Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления.— М. : Мир, 1974.— 489 с.
57. Стасюк І. В. Метод приближеного вторинного квантування в багатоелектронній теорії неметалічних кристалів.— Вісн. Львів. ун-ту. Сер. фіз., 1962, вип. 1, с. 32—44.
58. Хачатурян А. Г. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов.— М. : Наука, 1974.— 384 с.
59. Хмельницкий Д. Е. Фазовый переход второго рода в неоднородных телах.— ЖЭТФ, 1975, 68, вып. 5, с. 1960—1968.
60. Юхновский И. Р., Рудаевский Ю. К. Применение метода коллективных переменных к исследованию модели Изинга. 1. Статистическая сумма.— Киев, 1974.— 37 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-74-171Р).
61. Юхновский И. Р., Рудаевский Ю. К. Применение метода коллективных переменных к исследованию модели Изинга. 2. Парная корреляционная функция. Киев, 1975.— 18 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-75-13Р).
62. Юхновский И. Р., Рудаевский Ю. К. Представление коллективных переменных для модели Изинга — УФЖ, 1977, 22, № 1, с. 50—59.
63. Юхновский И. Р., Рудаевский Ю. К. Поведение моментов гауссового базисного распределения флуктуаций плотности спинового момента в парной корреляционной функции модели Изинга в окрестности критической точки.— Там же, № 2, с. 186—205.
64. Юхновский И. Р., Рудаевский Ю. К. Обоснование формы базисного распределения вблизи фазового перехода.— ДАН СССР, 1977, 233, № 4, с. 579—582.
65. Юхновский И. Р., Рудаевский Ю. К., Козловский М. П. Точные интегральные уравнения для рекуррентных соотношений трехмерной модели Изинга.— Киев, 1979.— 20 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-79-23-Р).
66. Юхновский И. Р., Головкин М. Ф. Статистическая теория классических равновесных систем.— Киев : Наук. думка, 1980.— 372 с.

67. Юхновский И. Р. Применение коллективных переменных и учет короткодействующих сил в теории систем заряженных частиц.— ЖЭТФ, 1958, 34, № 2, с. 379—389.
68. Юхновский И. Р. К общей теории фазовых переходов второго рода.— Физика многочастич. систем, 1983, вып. 4, с. 3—25.
69. Юхновский И. Р. Описание фазового перехода второго рода в методе переменных. 1. Распределение флуктуаций плотности вблизи T_c .— Киев, 1976.— 48 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики ; ИТФ-76-15Р).
70. Юхновский И. Р. Интегрирование статистической суммы трехмерной модели Изинга в методе коллективных переменных.— Киев, 1976.— 29 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики ; ИТФ-76-24Р).
71. Юхновский И. Р. Распределение флуктуаций спиновых волн в модели Изинга в области, содержащей в себе критическую точку.— УФЖ, 1977, 22, с. 315—324.
72. Юхновский И. Р. Интегрирование статистической суммы трехмерной модели Изинга в методе коллективных переменных. Ч. 1—2.— УФЖ, 1977, 22, с. 325—335, с. 484—493.
73. Юхновский И. Р. Статистическая сумма трехмерной модели Изинга.— ДАН СССР, 1977, 232, № 4, с. 312—315.
74. Юхновский И. Р. Трехмерная модель Изинга.— Киев, 1978.— 30 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики ; ИТФ-78-81Р).
75. Юхновский И. Р. Статистическая сумма трехмерной модели Изинга.— ТМФ, 1978, 36, № 3, с. 373—399.
76. Юхновский И. Р., Козловский М. П. Рекуррентные соотношения в трехмерной модели Изинга.— УФЖ, 1977, 22, № 7, с. 1125—1134.
77. Юхновский И. Р., Козловский М. П. Ренормализационная группа в трехмерной модели Изинга.— Киев, 1978.— 36 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики ; ИТФ-78-128Р).
78. Юхновский И. Р., Козловский М. П., Коломиец В. А. Численное интегрирование статистической суммы трехмерной модели Изинга.— Киев, 1980.— 55 с.— Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики ; ИТФ-80-3Р).
79. Юхновский И. Р., Козловский М. П., Коломиец В. А. Исследование критических свойств трехмерной модели Изинга с помощью масштабных преобразований.— Киев, 1980.— 52 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики ; ИТФ-80-28Р).
80. Юхновский И. Р., Козловский М. П., Коломиец В. А. О выборе оптимального способа деления фазового пространства коллективных переменных в трехмерной модели Изинга.— Киев, 1980.— 36 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики ; ИТФ-80-121Р).
81. Юхновский И. Р., Коломиец В. А. Исследование критических свойств трехмерной модели Изинга в методе коллективных переменных.— Физика многочастич. систем, 1983, вып. 4, с. 25—36.
82. Юхновский И. Р., Козловский М. П., Коломиец В. А. Расчет критических показателей трехмерной модели Изинга.— Киев, 1981.— 32 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики ; ИТФ-81-47Р).
83. Юхновский И. Р., Козловский М. П., Коломиец В. А. Специфическая блочная решетка трехмерной модели Изинга с отличным от нуля средним спиновым моментом блока.— Киев, 1981.— 37 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики ; ИТФ-81-48Р).
84. Юхновский И. Р., Козловский М. П., Коломиец В. А. Численное интегрирование статистической суммы трехмерной модели Изинга методом коллективных переменных.— УФЖ, 1982, 27, № 6, с. 925—930.
85. Юхновский И. Р., Козловский М. П., Коломиец В. А. Исследование трехмерной модели Изинга с помощью масштабных преобразований.— Там же, с. 930—935.
86. Юхновский И. Р., Козловский М. П., Коломиец В. А. Аналитическое решение уравнений ренормгруппы.— Там же, с. 1399—1403.
87. Юхновский И. Р., Ткачук В. М. Малый критический индекс : Учет поправки, связанной с усреднением потенциала.— Киев, 1981.— 27 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики ; ИТФ-81-70Р).
88. Юхновский И. Р., Ткачук В. М. Малый критический индекс : Учет поправ-

- ки, связанной с переходом на блочную структуру.— Киев, 1981.— 28 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики ; ИТФ-81-91Р).
89. Южновский И. Р., Гурский Э. А. Статистическая сумма бинарных сплавов непереходных металлов.— Киев, 1978.— 28 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики ; ИТФ-78-134).
 90. Южновский И. Р., Гурский Э. А., Зеленчук И. М. Расчет статистической суммы бинарных сплавов методом коллективных переменных.— Киев, 1980.— 33 с.— (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-80-22Р).
 91. Южновский И. Р., Козловский М. П. Критический индекс для корреляционной длины в трехмерной модели Изинга.— ДАН СССР, 1977, 236, № 4, с. 846—849.
 92. Южновский И. Р., Козловский М. П., Коломиец В. А., Ткачук В. М. Свободная энергия трехмерной модели Изинга.— Киев, 1982.— 28 с.— (Препринт /АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-82-5Р).
 93. Южновский И. Р., Рудавский Ю. К., Головач Ю. В. Представление коллективных переменных для n -компонентной модели Стенли.— Киев, 1982.— 24 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики ; ИТФ-82-129Р).
 94. Южновский И. Р., Рудавский Ю. К., Головач Ю. В. Исследование разностных уравнений приближенного преобразования ренормализационной группы для n -компонентной модели.— Киев, 1982.— 24 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-82-130Р).
 95. Южновский И. Р., Коринецкий Н. А. Статистическая сумма системы двухчастичных кластеров в методе коллективных переменных : Базисное распределение.— Киев, 1983.— 28 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики ; ИТФ-83-27Р).
 96. Южновский И. Р., Коринецкий Н. А. Интегрирование статистической суммы системы двухчастичных кластеров в методе коллективных переменных : Рекуррентные соотношения.— Киев, 1984.— 29 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики ; ИТФ-84-59Р).
 97. Южновский И. Р., Гурский Э. А. Анализ фазовых переходов первого и второго рода в бинарных сплавах в методе коллективных переменных.— ФММ, 1983, 56, вып. 4, с. 672—681.
 98. Южновский И. Р., Идаик И. М. Групповые разложения для свободной энергии с выделенной системой отсчета.— Киев, 1981.— 23 с.— (Препринт /АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-81-426Р).
 99. Южновский И. Р., Идаик И. М. Обоснование формы базисного распределения вблизи точки фазового перехода первого рода.— Киев, 1983.— 27 с.— (Препринт / АН УССР. Ин-т теорет. физики ; ИТФ-83-88Р).
 100. Anderson P. W. A poor man's derivation on scaling laws for the Kondo problem.— J. Phys. C, 1970, 3, N 12, p. 2436—2441.
 101. Dicastro C., Jona Lazinio G. On the macroscopic foundation of scaling laws.— Phys. Lett. A, 1969, 29, N 6, p. 322—323.
 102. Gell-Mann M., Low F. E. Quantum electrodynamics of small distances.— Phys. Rev., 1954, 95, N 5, p. 1300—1312.
 103. Hillhorst H. J., Leeuwen J. M. J. van. Exact differential realspace renormalization : Ising, Gaussian and Ashkin-Teller models.— Physica A, 1981, 106, N 1/2, p. 301—310.
 104. Hohenberg P. Existence of long-range order in one and two dimensions.— Phys. Rev., 1967, 158, N 2, p. 383—386.
 105. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands.— Proc. Roy. Soc. A, 1964, 281, N 1386, p. 401—419.
 106. Jasnow D., Wortis M. High-temperature critical indices for the classical anisotropic Heisenberg model.— Phys. Rev., 1968, 176, N 2, p. 739—750.
 107. Kadanoff L. P. Scaling laws for Ising models near T_c .— Physics, 1966, 2, N 6, p. 263—273.
 108. Kadanoff L. P. Variational principles and approximate renormalization group calculations.— Phys. Rev. Lett., 1975, 34, N 16, p. 1005—1008.
 109. Kadanoff L. P., Houghton A. Numerical evaluations of the critical properties of the two-dimensional Ising model.— Phys. Rev. B, 1975, 11, N 1, p. 377—386,

110. *Leewen J. M. J. van.* Singularities in the critical surface and universality for Ising-like spin systems.— *Phys. Rev. Lett.*, 1975, 34, N 16, p. 1056—1058.
111. *Mermin N., Wagner H.* Absence of ferromagnetism of antiferromagnetism in one or two dimension as Heisenberg models.— *Phys. Rev. Lett.*, 1966, 17, N 22, p. 1133—1135.
112. *Niemeyer Th., Leewen J. M. J. van.* Wilson theory for two-dimensional Ising spin systems.— *Physica*, 1974, 71, N 1, p. 17—40.
113. *Onsager L.* Crystal statistics. 1. A two-dimensional model with an order-disorder transition.— *Phys. Rev.*, 1944, 65, N 1, p. 117—149.
114. *Sneddon L., Barber M. N.* Decimation transformation for two-dimensional Ising spin-system.— *J. Phys. C. : Solid State Phys.*, 1977, 10, N 14, p. 2653—2664.
115. *Stueckelberg E. C. G., Petermann A.* La normalisation des constantes dans la theorie des quanta.— *Helv. phys. acta*, 1953, 25, N 5, p. 499—520.
116. *Swendsen R. H.* Monte-Carlo renormalization group and Ising model with $n=2$.— *Phys. Rev. Lett.*, 1979, 43, N 3, p. 177—180.
117. *Vakarchuk I. A., Rudavsky Yu. K.* N -component model: The case of « φ^4 » model.— *Kiev*, 1979.— 18 p.— (Preprint ITP-79-91E).
118. *Vakarchuk I. A., Rudavsky Yu. K.* N -component model: The renormalization group equations and their linearization in the fixed point region.— *Kiev*, 1979.— 23 p.— (Preprint ITP-79-47E).
119. *Vakarchuk I. A., Rudavsky Yu. K., Kolomiets V. A., Golovatch Yu. V.* N -component model: Investigation of « φ^4 » model on the basis of P-expansion.— *Kiev*, 1980.— 46 p.— (Preprint ITP-80-34E).
120. *Van der Waals J. D.* *Thesis.* Univ. Leiden, 1873.
121. *Weiss F.*— *J. Phys. Rad.*, 1907, 6, p. 667.
122. *Wegner F. J., Houghton A.* Renormalization group equation for critical phenomena.— *Phys. Rev. A*, 1973, 8, N 1, p. 401—412.
123. *Widom B.* Equation of state in the neighbourhood of the critical point.— *J. Chem. Phys.*, 1965, 43, N 11, p. 3898.
124. *Widom B.* Critical points in less than two dimensions.— *Mol. Phys.*, 1973, 25, N 3, p. 657—671.
125. *Wilson K. G.* Renormalization group and critical phenomena. 1. Renormalization group and Kadanoff scaling picture.— *Phys. Rev.*, B, 1971, 4, N 9, p. 3174—3183.
126. *Wilson K. G.* Renormalization group and critical phenomena. 2. Phase-space cell analysis of critical behaviour.— *Ibid.*, p. 3184—3205.
127. *Wilson K. G., Fisher M. E.* Critical exponents in 3.99 dimensions.— *Phys. Rev. Lett.*, 1972, 28, N 4, p. 240—243.
128. *Wilson K. G.* Quantum field-theory models in less than 4 dimensions.— *Phys. Rev. D*, 1973, 7, N 10, p. 2911—1926.
129. *Yukhnovsky I. R., Vakarchuk I. A., Rudavsky Yu. K.* N -component model: Functional representation and differential form of equations of the renormalization group.— *Kiev*, 1979.— 36 p.— (Preprint ITP-79-20E).
130. *Yukhnovsky I. R., Kozlovsky M. P., Shpot N. A.* Free energy, entropy and heat capacity in the critical region at $T < T_c$.— *Kiev*, 1984.— 39 p.— (Preprint ITP-84-144E).
131. *Yukhnovsky I. R.* On general theory of second-order phase transitions.— *Kiev*, 1983.— 65 p.— (Preprint ITP-83-6E).
132. *Yukhnovsky I. R.* Solution of the three-dimensional Ising model in the temperature region below critical point.— *Kiev*, 1983.— 37 p.— (Preprint ITP-83-85E).

Игорь Рафаилович Юхновский

**ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ВТОРОГО РОДА.
МЕТОД КОЛЛЕКТИВНЫХ ПЕРЕМЕННЫХ**

*Утверждено к печати ученым советом
Института теоретической физики АН УССР*

Редактор *С. Д. Кошис*

Оформление художника *Г. М. Балюна*

Художественный редактор *И. П. Антоноук*

Технический редактор *И. А. Ратисер*

Корректоры *Э. Я. Белокопитова, Р. С. Коган*

Информ. бланк № 7218

Сдано в набор 03.01.85. Подп. в печ. 17.06.85. БФ 01624. Формат 60×90/16. Бум. тип. № 1. Обычн. нов. гарн. Выс. печ. Усл. печ. л. 14,0. Усл. кр.-отг. 14,56. Уч.-изд. л. 14,89. Тираж 1150 экз. Заказ 5-389. Цена 2 р. 60 к.

Издательство «Наукова думка». 252601 Киев 4, ул. Репина, 3.

Отпечатано с матриц Головного предприятия республиканского производственного объединения «Полиграфкинига». 252057, Киев, ул. Довженко, 3 в Нестеровской городской типографии. 292310, Нестеров, Львовской обл., ул. Горького, 8. Зак. 3161.