

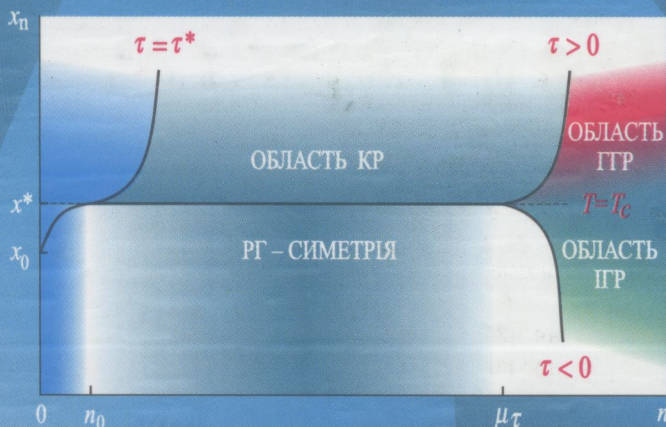
536  
1094



БІБЛІОТЕКА ДЕРЖАВНОГО ФОНДУ  
ФУНДАМЕНТАЛЬНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

І.Юхновський, М.Козловський, І.Пилюк

# МІКРОСКОПІЧНА ТЕОРІЯ ФАЗОВИХ ПЕРЕХОДІВ У ТРИВИМІРНИХ СИСТЕМАХ



Євро  
світ



БІБЛІОТЕКА ДЕРЖАВНОГО ФОНДУ  
ФУНДАМЕНТАЛЬНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ**

**Юхновський І.Р.,  
Козловський М.П., Пилюк І.В.**

**Мікроскопічна теорія  
фазових переходів  
у тривимірних системах**



**Львів  
Світовіт  
2001**

es

УДК: 536.75, 538.9, 548:537.621, 538.955-405  
PACS: 05.50.+q, 05.70.Ce, 64.60.Fr, 75.10.Hk

**Юхновський І.Р., Козловський М.П., Пилук І.В.**  
**Мікроскопічна теорія фазових переходів у тривимірних системах.** – Львів: Євровіт, 2001. – 592 с.: іл.  
ISBN 966-7343-26-X

Монографія присвячена методів прямого розрахунку основних характеристик тривимірних фізичних систем в інтервалі температур, що включає точку фазового переходу другого роду. Використовуючи явний вигляд гамільтоніану системи та якобіану переходу від вихідної системи індивідуальних координат частинок до нових (колективних) змінних, опис фазового переходу здійснюється з перших принципів.

Для тривимірної ізінгоподібної системи знайдені аналітичні вирази для критичної температури і термодинамічних функцій, встановлено їхній зв'язок з мікроскопічними параметрами системи.

Побудована теорія фазового переходу ґрунтується на використанні негаусових базисних мір і може бути застосована в широкому класі фізичних систем.

412886

**Yukhnovskii I.R., Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V.**  
**Microscopic theory of phase transitions in the three-dimensional systems.** – Lviv: Eurosvit, 2001. – 592 p.: ill.

The present monograph represents a method of direct calculations of the main thermodynamic characteristics of three-dimensional physical systems in the temperature range near by the point of the second-order phase transition. Beginning from the first principles, the description of the phase transition is carried out within the collective variables method by employing the explicit expressions for the Hamiltonian of system and the Jacobian which describes the transformation from the initial set of individual coordinates of particles to the new collective variables.

For the three-dimensional Ising-like system, the analytical expressions for the critical temperature and thermodynamic functions are derived, their relationship to the microscopic parameters of the system is established.

The proposed phase transition theory is constructed on the basis of non-Gaussian measures and may have utility in studying a range of physical systems.

Підготовка, видання і безкоштовне надання бібліотекам України здійснені за фінансової підтримки Державного фонду фундаментальних досліджень.

© М. Козловський, 2001  
© ДФФД, 2001  
© "Євровіт", 2001

ISBN 966-7343-26-X

# Зміст

Передмова	9
Вступ	13
Структура монографії	29
<b>Розділ 1. Застосування методу колективних змінних до дослідження спінових систем</b>	<b>37</b>
1.1. Постановка задачі. Термодинамічні функції . . . . .	38
1.2. Модель Ізінга. Гамільтоніан . . . . .	42
1.3. Фазовий простір колективних змінних . . . . .	52
1.4. Якобіан переходу до колективних змінних . . . . .	56
1.5. Функціонал статистичної суми. Кореляційні функції . . . . .	64
1.6. Рівняння Ейлера . . . . .	69
1.7. Про базисну міру . . . . .	75
1.8. Використання гаусової міри як базисної для розрахунку статистичної суми і парної кореляційної функції . . . . .	78
1.9. Базисна міра в околі критичної точки . . . . .	90

- 1.10. Використання негаусових мір для опису фазового переходу в тривимірних системах . . . . . 104

**Розділ 2. Метод розрахунку статистичної суми поблизу точки фазового переходу** . . . . . 107

- 2.1. Четвірний базисний розподіл. Модель  $\rho^4$  . . . . . 108
- 2.2. Інтегрування за множиною колективних змінних нульового рівня . . . . . 112
- 2.3. Функціональне представлення статистичної суми . . . . . 130
- 2.4. Рекурентні співвідношення . . . . . 139
- 2.5. Означення температури фазового переходу. Початкові параметри . . . . . 147
- 2.6. Розв'язок рекурентних співвідношень . . . . . 155
- 2.7. Рівняння для температури фазового переходу . . 162
- 2.8. Область температур, в якій реалізується критичний режим . . . . . 166
- 2.9. Граничний гаусовий режим . . . . . 173

**Розділ 3. Термодинамічні функції вище точки фазового переходу (наближення моделі  $\rho^4$ )** . . . . . 177

- 3.1. Методика обчислення вільної енергії . . . . . 178
- 3.2. Поправки до скейлінгу . . . . . 191
- 3.3. Вільна енергія, ентропія та інші термодинамічні функції моделі . . . . . 203
- 3.4. Залежність термодинамічних функцій від мікроскопічних параметрів гамільтоніану . . . . . 211
- 3.5. Температура фазового переходу як функція мікроскопічних параметрів моделі . . . . . 217

<b>Розділ 4. Термодинамічні функції нижче від точки фазового переходу (наближення моделі <math>\rho^4</math>)</b>	<b>225</b>
4.1. Обчислення статистичної суми при температурах нижчих від критичної . . . . .	226
4.2. Мікроскопічний аналог вільної енергії Ландау . .	231
4.3. Вільна енергія в області критичного режиму . . .	239
4.4. Врахування довгохвильових флуктуацій при обчисленні термодинамічних функцій . . . . .	243
4.5. Термодинамічні функції системи. Порівняння з випадком $T > T_c$ . . . . .	250
4.6. Процедура самоузгодження при розрахунку середнього спінового моменту . . . . .	258
<b>Розділ 5. Структурні характеристики системи поблизу точки фазового переходу</b>	<b>269</b>
5.1. Розрахунок статистичної суми моделі $\rho^4$ при врахуванні залежності потенціалу взаємодії від хвильового вектора . . . . .	271
5.2. Дослідження рекурентних співвідношень . . . . .	286
5.3. Вільна енергія з врахуванням залежності фур'є-образу потенціалу від хвильового вектора . . . . .	293
5.4. Кореляційна функція і сприйнятливність системи в околі точки фазового переходу . . . . .	303
5.5. Парна кореляційна функція при $T = T_c$ . . . . .	309
<b>Розділ 6. Дослідження моделей <math>\rho^{2m}</math></b>	<b>315</b>
6.1. Результати розрахунку статистичної суми для вищих моделей . . . . .	316
6.2. Рекурентні співвідношення для моделі $\rho^6$ . Критичний показник кореляційної довжини . . . . .	322

- 6.3. Розв'язок рекурентних співвідношень для моделі  $\rho^6$  329
- 6.4. Насичення критичного показника кореляційної довжини зі збільшенням порядку моделі . . . . . 337

<b>Розділ 7. Результати числового інтегрування статистичної суми</b>	<b>349</b>
7.1. Область критичної точки . . . . .	351
7.2. Дослідження інтегральних рекурентних співвідношень і порівняння з результатами аналітичних обчислень . . . . .	360
7.3. Числовий розрахунок критичного показника кореляційної довжини моделі $\rho^4$ . . . . .	368
7.4. Результати числового розрахунку для моделі $\rho^6$ .	373

<b>Розділ 8. Термодинамічні характеристики ізінгоподібної системи в наближенні моделі <math>\rho^6</math> з врахуванням конфлуентної поправки. Високотемпературна область</b>	<b>385</b>
8.1. Загальні положення . . . . .	386
8.2. Розрахунок внеску в термодинамічні функції системи від короткохвильових флуктуацій . . . . .	394
8.3. Розрахунок внеску в термодинамічні характеристики системи від довгохвильових флуктуацій . . .	407
8.4. Термодинамічні характеристики системи при $T > T_c$ . . . . .	418

<b>Розділ 9. Термодинамічні характеристики ізінгоподібної системи в наближенні моделі <math>\rho^6</math> з врахуванням конфлуентної поправки. Низькотемпературна область</b>	<b>423</b>
-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	------------

9.1. Схеми розрахунку вільної енергії системи при $T < T_c$ . . . . .	424
9.2. Внески до термодинамічних функцій системи від області критичного режиму . . . . .	426
9.3. Внески від області інверсного гаусового режиму . . . . .	428
9.4. Мікроскопічний аналог розкладу Ландау для моделі $\rho^6$ . Параметр порядку і сприйнятливність . . . . .	437
9.5. Термодинамічні характеристики 3D моделі як функції температури і мікроскопічних параметрів системи . . . . .	443
<b>Розділ 10. Розрахунок на мікроскопічному рівні рівняння стану тривимірної спінової моделі</b> . . . . .	<b>457</b>
10.1. Параметр порядку однокомпонентної системи і роль довгохвильових флуктуацій . . . . .	458
10.2. Рівняння стану системи при $T > T_c$ . . . . .	464
10.3. Рівняння стану системи при $T < T_c$ . . . . .	471
10.4. Температурна та польова залежність параметра порядку тривимірної спінової моделі . . . . .	472
<b>Додатки</b> . . . . .	<b>479</b>
А. Розклади спеціальних функцій в околі фіксованої точки . . . . .	479
Б. Рекурентні співвідношення в граничних випадках . . . . .	483
В. Внесок у вільну енергію від перехідної області . . . . .	492
Г. Розрахунок коефіцієнтів, що визначають вираз для мікроскопічного аналога вільної енергії Ландау (модель $\rho^4$ ) . . . . .	496
Д. Розрахунок внесків вищих порядків при врахуванні поправки на усереднення потенціалу . . . . .	499



Е.	Розрахунок явного вигляду функції $Z(\bar{x})$ . . . . .	502
Є.	До розрахунку парціальної вільної енергії $n$ -ї блочної структури в наближенні моделі $\rho^6$ . . . . .	510
Ж.	До обчислення довгохвильової частини статистич- ної суми системи (модель $\rho^6$ ) . . . . .	519

<b>Література</b>	<b>539</b>
-------------------	------------

<b>Предметний покажчик</b>	<b>580</b>
----------------------------	------------

## Передмова

У багатьох фізичних системах за деяких умов відбуваються фазові переходи, в результаті чого якісно змінюються їхні властивості. Методи теоретичного та експериментального дослідження статистичних систем поблизу точки фазового переходу і поза нею суттєво відрізняються. Якщо далеко від точки фазового переходу застосовні традиційні методи теоретичного опису статистичних систем із використанням теорії збурень, то поблизу неї такі методи не працюють. Це пояснюється зміною характеру ефективної взаємодії між частинками системи. Головну роль у цьому відіграють колективні ефекти у формі результуючої взаємодії між частинками системи, за якими “ведеться спостереження”. Результуюча взаємодія між довільною парою частинок складається із прямої й опосередкованої. Остання зумовлена взаємодією цієї пари з рештою частинок системи. Врахування опосередкованих взаємодій творить поняття колективних ефектів. У фізичних системах біля точки фазового переходу переважають колективні ефекти: результуюча взаємодія стає далекосяжною – частинки “відчувають” одна одну на як завгодно великих відстанях. Тому фізична система у критичній точці “тонко вибирає” новий, найвигідніший шлях еволюції у зміні зовнішніх параметрів.

У монографії запропонований теоретичний метод опису основних характеристик тривимірних статистичних систем в інтервалах температур та інших фізичних змінних, що включають точку фазового переходу другого роду. Метод дає змогу розрахувати явні вирази для термодинамічних функцій системи, використовуючи лише дані про тип кристалічної ґратки та вигляд потенціалу взаємодії між частинками. Він не передбачає штучного введення будь-яких феноменологічних параметрів. Ця книга

містить розвиток ідей, закладених у [16] і логічно доповнює ряд монографій і підручників, присвячених одній із найцікавіших і найскладніших проблем статистичної механіки – опису фазових переходів. Використання у розрахунках множини колективних змінних важливе передусім тому, що ця множина містить змінні, середні значення яких безпосередньо пов'язані з параметром порядку. Завдяки цій особливості фазовий простір колективних змінних зручний для опису явища фазового переходу.

Колективні змінні – це узагальнена назва особливого класу змінних, специфічних для кожної окремої фізичної системи. Для магнетних систем колективні змінні – це змінні, пов'язані з модами коливань спінового моменту, для сегнетоелектриків – з модами коливань дипольного моменту кластерів частинок, для систем заряджених частинок – це моди коливань узагальненого заряду, для бінарних сплавів – моди унарної функції розподілу, для критичної точки рідина–газ – моди відхилень густини від критичної тощо.

У методі колективні змінні вдається фізично обґрунтовано та математично строго сформулювати задачу про фазовий перехід, не вводячи для його опису жодних додаткових макроскопічних параметрів, зокрема, параметра порядку в вільну енергію системи, як це є в теорії Ландау, не постулюючи температурної залежності власних векторів матриці лінійного перетворення ренормалізаційної групи, як це робиться у підході Вільсона при розрахунку критичних показників і т. д.

Теоретичний опис критичної поведінки реальних систем на якомусь етапі розрахунку зводиться до опису фазового переходу деякої моделі. Створивши метод розрахунку основних термодинамічних та структурних характеристик базової моделі фазового переходу, ми відкриваємо шлях до опису складніших фізичних систем. Тому максимально повний розв'язок тривимірної ізінґоподібної моделі є ключем до опису критичної поведінки багатьох фізичних об'єктів.

У книжці проведений розрахунок явних аналітичних виразів для термодинамічних функцій в околі точки фазового переходу для однокомпонентної ізінґоподібної моделі на простій кубічній ґратці з експонентно спадним потенціалом взаємодії між

частинками: розглянуто як найпростіше четвірне, так і вищі негаусові наближення та враховано поправки до скейлінгу. Отримано також значення критичних показників і критичних амплітуд для теплоємності, сприйнятливості, середнього спінового моменту та кореляційної довжини вище і нижче від точки фазового переходу. Знайдено залежність термодинамічних функцій від температури і параметрів гамільтоніану. Для різних значень радіуса дії потенціалу отримано графіки температурних залежностей ентропії, теплоємності, середнього спінового моменту, сприйнятливості системи. Побудовано також криві залежностей вільної енергії поблизу точки фазового переходу, теплоємності, середнього спінового моменту від величини вказаного вище радіуса. Отримано мікроскопічний аналог вільної енергії Ландау, а також співвідношення, що дають змогу глибше осягнути метод ренормалізаційної групи і його місце в описі фазових переходів.

Запропонована теорія ґрунтується на оригінальному методі обчислення статистичної суми тривимірної системи взаємодіючих частинок. Таблиці і рисунки сприятимуть точнішому розумінню запропонованого в монографії методу опису фазових переходів, їх також можна використати в розрахунках термодинамічних функцій для конкретних фізичних систем.

Автори висловлюють щире подяку співробітникам Інституту фізики конденсованих систем НАН України за співпрацю в обговоренні та розв'язанні низки наукових проблем, а також п. Л. Дідух за підготовку до друку матеріалів монографії.

## Перелік скорочень

ГГР – граничний гаусовий режим

ІГР – інверсний гаусовий режим

КЗ – колективні змінні

КР – критичний режим

ПО – перехідна область

РГ – ренормалізаційна група (ренормгрупа)

РС – рекурентні співвідношення

ТФП – точка фазового переходу

ФП – фазовий перехід

## Вступ

Проблема побудови теорії фазових переходів (ФП) на мікроскопічному рівні залишається однією із центральних у статистичній фізиці. Складність дослідження процесів при ФП зумовлена особливою поведінкою великомасштабних флуктуацій, для опису яких слід враховувати взаємодію великої кількості частинок. На перший план тут виступають кооперативні ефекти, які універсалізують поведінку термодинамічних і структурних характеристик низки, здавалось би різних за своєю природою, систем. До таких систем відносять магнетики і сегнетоелектрики, бінарні і багатокомпонентні сплави, система рідина–газ у критичній точці і багато інших. Відомо, що при описі фазових переходів методами термодинаміки в кожній із названих систем перші похідні термодинамічного потенціалу залишаються неперервними, а стрибки у точці фазового переходу (ТФП) властиві похідним другого і вищих порядків. У побудові теорії фазових переходів успішно використовують методи квантової теорії поля [1–3], традиційні методи, розвинуті в теорії магнетизму [4–8] і у фізиці критичних явищ [9–20], а також методи континуального інтегрування [21–23]. Універсальність у поведінці термодинамічних і структурних функцій згаданих вище систем в околі ТФП дає змогу сподіватись, що найхарактерніші їхні властивості можна описати у рамках єдиної схеми.

Завдяки інтенсивним дослідженням ФП були сформульовані нові концепції, пов'язані з розумінням суті критичних явищ, створений потужний математичний апарат їхнього опису. Проблемі опису ФП та критичних явищ присвячена низка згаданих вище монографій. Деякі перспективи її вирішення описані в оглядових працях (див., наприклад, [24–28]), а також у [29–33], що з'явилися недавно.

Однією з перших спроб, що дала змогу зрозуміти суть феномену ФП, вважають теорію середнього (самоузгодженого) поля [9, 10]. Ґрунтуючись на простих і зрозумілих фізичних припущеннях про ефективне поле, ця теорія пояснила появу нижче деякої температури  $T_c$ , яка називається температурою фазового переходу, специфічного для кожної фізичної системи параметра порядку. Використовуючи теорію середнього, поля вдалося описати низку характерних особливостей у поведінці термодинамічних функцій поблизу  $T_c$ . Ця теорія привела до поняття універсальності, дала змогу отримати в загальному вигляді не тільки значення критичних показників, що характеризують ці особливості, а й знайти повні вирази для термодинамічних і структурних функцій, використовуючи аналітичні методи обчислень. Незважаючи на розбіжності з експериментальними даними, висновки теорії самоузгодженого поля мають фундаментальне значення для розуміння фізики фазових переходів [26, 34]. Ідеї самоузгодженого поля отримали найповніший розвиток у теорії фазових переходів Л. Ландау [35, 36]. Теорія Ландау ґрунтується на припущенні про можливість розкладу в ряд за степенями параметра порядку термодинамічного потенціалу поблизу ТФП і дає змогу описати поведінку великого класу об'єктів [17, 37, 38]. Вона справедлива в широкій області температур, за винятком самої ТФП. Поведінка середнього спінового моменту, теплоємності, сприйнятливості та інших величин, яка впливає з теорії Ландау, не завжди відповідає експериментальним фактам. Критерій для оцінки розмірів температурної області, де застосовна ця теорія, запропонував В. Гінзбург [39].

При теоретичному описі процесу ФП використовується, зазвичай, модельний підхід. Реальний об'єкт замінюється деякою ідеалізованою системою, яка називається моделлю. Математично це виражають вказанням станів  $\sigma$  і визначенням вигляду енергетичної функції  $H(\sigma)$ , що дає змогу виконати розрахунок статистичної суми такої системи

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta H(\sigma)}. \quad (1)$$

Тут  $\beta = (kT)^{-1}$ ,  $k$  – стала Больцмана,  $T$  – температура.

Стан рівноважної системи у термодинаміці повністю описується відповідним термодинамічним потенціалом. Якщо вибрати незалежними змінними температуру  $T$ , об'єм  $V$  і зовнішнє поле  $h$ , то таким потенціалом буде вільна енергія. У точці фазового переходу другого роду вільна енергія  $F(T, V, h)$  та її перші похідні: ентропія  $S = -(\partial F/\partial T)$  і середній момент  $\langle \sigma \rangle = -(\partial F/\partial h)$  є неперервними функціями температури і поля. Другі похідні: теплоємність  $C = -T \left( \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)$ , сприйнятливність  $\chi = - \left( \frac{\partial^2 F}{\partial h^2} \right)$  та інші величини такого типу мають особливості.

Крім підходу, пов'язаного з використанням термодинамічних функцій, властивості рівноважних систем можна описувати і з допомогою функцій розподілу. Для просторово однорідних систем однією із найважливіших характеристик системи є бінарна функція розподілу [40–42]. Логарифм бінарної функції – “потенціал середньої сили” – відображає ефективну взаємодію, що виникає між двома частинками у термодинамічній системі. Цей потенціал залежить від температури і густини частинок. Можна показати, що у критичній точці він стає далекосяжним потенціалом, у тривимірному випадку, наприклад, пропорційним до  $r^{-(1+\eta)}$ , де  $r$  – віддаль між двома частинками,  $\eta$  – постійна величина порядку сотих. Це свідчить про те, що у критичній точці виникають далекодіючі кореляції між частинками, і радіус кореляції стає безмежно великим. Як наслідок, розподіл флуктуацій потрібно описувати законом, відмінним від гаусового. Перелічені властивості загальні для всіх тривимірних систем, у яких відбувається фазовий перехід другого роду.

У чому ж полягає задача статистичної теорії, яка ставить за мету описати ФП другого роду? Розгляньмо її на прикладі феромагнетика. Нехай задано гамільтоніан системи і параметри ґратки. При абсолютному нулеві температури магнетні моменти атомів орієнтовані паралельно один до одного. Це основний стан, ентропія такої системи дорівнює нулеві. Середній момент на кожний атом дорівнює умовній одиниці. При підвищенні температури хаотичний рух збільшується, середній момент зменшується. Суть явища полягає у тому, що середній момент, зменшуючись неперервно із зростанням температури, стає нульовим не при безмежно великій температурі, а для всіх температур, вищих



від деякої температури  $T_c$ , яку прийнято називати температурою фазового переходу. Статистична теорія повинна запропонувати методику одержання виразу для середнього моменту (параметра порядку), який описує поведінку цієї величини при зміні  $\tau$  ( $\tau = (T - T_c)/T_c$ ), а також інших характеристик системи поблизу ТФП.

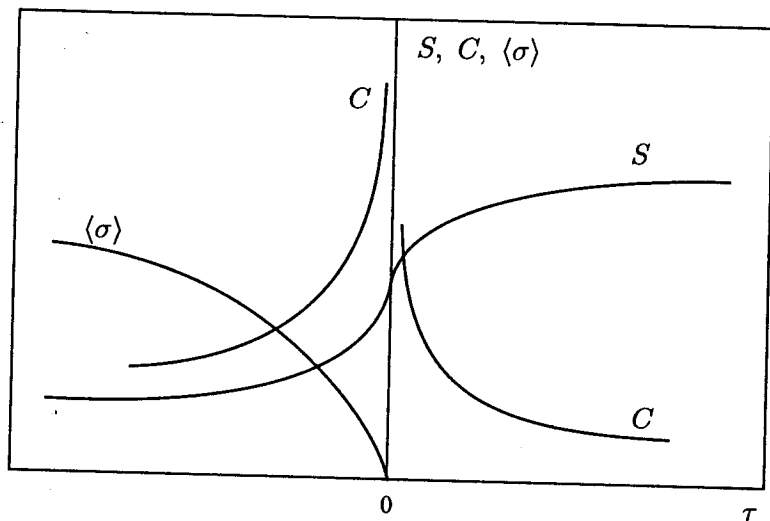


Рис. 1. Криві ентропії  $S$ , теплоємності  $C$  і середнього спінового моменту  $\langle \sigma \rangle$  системи як функції відносної температури поблизу точки фазового переходу

Крива ентропії системи  $S$  як функція температури має форму, зображену на рис. 1. Тут же зображені криві для теплоємності  $C$  і для середнього моменту  $\langle \sigma \rangle$ . Доцільно поставити запитання: якщо для  $T > T_c$  середній момент дорівнює нулеві, то чому ентропія так різко зменшується при наближенні  $T$  до  $T_c$  праворуч? Адже магнетне впорядкування, яке повинно приводити до зменшення ентропії, виникає ліворуч від  $T_c$ . Чи буде зменшення ентропії в околі  $T = T_c$  узгоджуватись із зростанням середнього моменту  $\langle \sigma \rangle$ ? Криві для ентропії і середнього моменту дають важливу інформацію про фазовий перехід. Зокрема із цих кри-

вих можна отримати інформацію про поведінку теплоємності і магнетної сприйнятливості.

Теорія має відповісти також на запитання, за яким законом змінюються теплоємність, сприйнятливість, радіус кореляції та інші величини при наближенні температури до критичної, як пов'язані між собою точки на кривих термодинамічних функцій з параметрами вихідного гамільтоніану, які розміри критичної області?

Фазові переходи другого роду виникають у різних фізичних системах. Це процеси впорядкування в магнетиках і сегнетоелектриках, переходи, пов'язані з розшаруванням у флюїдах, критична точка рідина-газ і перехід у надплинному гелії, фазовий перехід порядок-безпорядок у сплавах тощо. Кожен з названих фізичних об'єктів описується певним гамільтоніаном та характеризується своїм фазовим простором. Однак після деяких математичних перетворень при розрахунку статистичної суми різних з першого погляду фізичних об'єктів, ми приходимо до певної ключової задачі, спільної для них. Це особлива модель спінів розташованих у вузлах ґратки. Кожний спін може набувати двох різних положень, які характеризуються числами  $+1$  та  $-1$ . Це відповідає відомій моделі Ізінґа. Можна розглянути загальніший випадок, у якому маємо певний закон розподілу спіну на вузлі. Зокрема у [43] обговорюється модель із гаусоподібним розподілом спіну, яка була запропонована в [44]. До цього питання повернемося згодом. Надалі вважатимемо, що взаємодія між частинками має парний характер. Модельний гамільтоніан такої системи запишемо у вигляді [11]

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} \Phi(r_{ij}) s_i s_j, \quad (2)$$

де  $\Phi(r_{ij})$  – енергія взаємодії частинок, які розміщені у вузлах  $i$  та  $j$ ,  $s_i$  є  $n$ -мірним одиничним вектором з декартовими координатами  $s_{i1}, s_{i2}, \dots, s_{in}$ , причому  $\sum_{m=1}^n s_{im}^2 = 1$  для  $1 \leq i \leq N$ , а скалярний добуток визначається як  $\sum_{m=1}^n s_{im} s_{jm}$ . Гамільтоніан (2) застосовується у дослідженні різноманітних модельних систем. Припустивши, що  $n = 1$ , приходимо до ключової моделі ФП

другого роду – моделі Ізінга. Її широко застосовують в описі властивостей анізотропних магнетиків [4, 8], дослідженні фазових переходів у бінарних сплавах і рідких кристалах [45–47], критичної точки рідини–газ [48–51], у теорії спінового скла [52, 53]. Якщо  $n = 2$ , гамільтоніан (2) описує модель плоского ротатора, яку називають моделлю Вакса–Ларкіна [54, 55]. Її успішно використали для побудови мікроскопічної теорії  $\lambda$ -переходу рідкого гелію [56]. Для випадку тривимірних спінів вираз (2) зводиться до класичної моделі Гайзенберга. У границі  $n \rightarrow \infty$  приходимо до сферичної моделі Берліна–Каца, яка дає змогу отримати точний розв'язок для випадку тривимірної ґратки [11, 13]. Основна проблема, що виникає в описі ФП, пов'язана з відсутністю малого параметра, за степенями якого можна було б здійснювати наближений опис тривимірних систем. Однак у деяких граничних випадках вдається знайти аналог такої величини. Розвинуті методи розрахунку, які використовують як параметр розкладу величину  $1/n$  [13, 57]. Для скінченних значень параметра  $n$  системи, що описуються гамільтоніаном (2), не допускають точних розв'язків при розмірності простору  $d = 2, 3$  [26]. Унікальною у цьому плані залишається модель Ізінга ( $n = 1$ ), для якої у двовимірному випадку ( $d = 2$ ) отримано точний розв'язок [58]. Суттєві результати в описі фазового переходу у двовимірних системах отримані й у [59–62].

Важливу роль у визначенні можливості існування фазового переходу в модельних системах відіграли нерівності М. Боголюбова для фур'є-образів функцій Гріна і теорема  $1/q$  для бозе- і фермі-систем [63–65]. Ренормгрупові (РГ) дослідження були розпочаті у квантовій теорії поля з [66, 67]. Гелл-Манн і Лоу з допомогою РГ знайшли властивості функцій Гріна в області великих імпульсів і ввели представлення про нерухому точку перетворення РГ. Повне дослідження групи мультиплікативних перенормувань у квантовій теорії поля виконали М. Боголюбов і Д. Ширков. Були запропоновані функціональні, а також диференціальні форми рівнянь РГ. Було введено поняття інваріантних зарядів як інваріантів РГ. На їхній основі розглянута інфрачервона та ультрафіолетова асимптотика функцій Гріна [1, 68, 69].

Характер залежності потенціалу взаємодії від відстані суттєво впливає на поведінку системи поблизу ТФП. Вибираючи взаємодію у вигляді степеневі функції  $\Phi(r_{ij}) \sim (r_{ij})^{-(d+D)}$ , де  $d$  – вимірність простору, маємо змогу поділити потенціали на далекосяжні ( $1 < D < 2$ ) і короткосяжні ( $D \geq 2$ ). У [70] досліджена модель Ізінга з таким потенціалом і показано, що для великих значень параметра  $D$  критичні показники досягають деяких граничних значень, а для малих  $D$  прямують до величин, які передбачає теорія середнього поля [11, 36]. У дослідженні систем з далекосяжним потенціалом переважно використовують  $1/n$  розклад [71, 72] і  $\epsilon'$  розклад ( $\epsilon' = 2D - d$ ) [73–75]. Короткосяжні потенціали ( $D \geq 2$ ) розглядалися в [43, 76–78]. Комбіновані, коротко- і далекосяжні взаємодії, які приводять до фазових переходів в ізотропних  $n$ -компонентних спінових системах досліджувались у [79]. Тут для трьох областей зміни параметра  $D$ , що відповідають далекосяжним, проміжним і короткосяжним взаємодіям були отримані вирази для критичних показників кореляційної функції, сприйнятливості та інших величин. Узагальнені моделі, де поряд з відомими силами ближньої дії враховували квазідиполь-дипольні взаємодії, розглянуто у [80].

На основі методу апроксимуючого гамільтоніану доведено існування точного розв'язку тривимірної двокомпонентної моделі структурного фазового переходу з далекосяжною ангармонічною взаємодією кубічної симетрії [81]. Модель виявляє трикритичну поведінку з неklasичними критичними індексами сферичного типу [82].

Новий етап у вивченні властивостей системи поблизу ТФП пов'язаний з гіпотезою масштабної інваріантності [83–86]. Можливість використання РГ співвідношень у статистичній теорії фазових переходів пов'язана із властивостями однорідності термодинамічних функцій поблизу критичної точки, які вперше описав Б. Уайдом [83], і з поведінкою кореляційних функцій у критичній області, що досліджували Л. Каданов, а також А. Паташинський та В. Покровський [15, 86]. Л. Каданову належить гіпотеза універсальності: якщо замість вихідної ґратки розглядати блочну ґратку, кожний блок якої складається із  $s^3$  вихідних

комірок<sup>1</sup>, то у критичній точці гамільтоніан блочної ґратки можна звести до гамільтоніану вихідної ґратки за допомогою масштабних перетворень [85]. РГ методи у рамках цієї гіпотези були застосовані до дослідження фазових переходів у низці праць, зокрема в [87–96]. Прекрасною реалізацією гіпотези універсальності стали праці М. Фішера, К. Вільсона, де на мікроскопічному рівні вдалось отримати низку нових і принципово важливих результатів [91, 93]. Крім цього, К. Вільсон отримав із вихідного гамільтоніану Гінзбурґа–Ландау явну форму для гамільтоніанів блочних структур, склав рекурентні рівняння для їхніх коефіцієнтів, застосував масштабні перетворення і метод нерухомої точки для розв'язання цих рівнянь, визначив критичні показники термодинамічних функцій і виконав важливі чисельні розрахунки [89, 90].

Методика розрахунку К. Вільсона успішно застосована при вирішенні деяких фізичних задач [94–98]. Особливе місце в цьому розрахунку належить запропонованому в [91] (див. також огляди [28, 99]) методу  $\epsilon$ -розкладу. Він ґрунтується на використанні надуманого  $(4 - \epsilon)$ -мірного простору. Якщо вимірність простору близька до чотирьох, у теорії з'являється малий параметр  $\epsilon$ , відсутність якого є головною перешкодою у побудові кількісної теорії фазових переходів у тривимірному випадку. Незважаючи на виникнення асимптотичних рядів, метод  $\epsilon$ -розкладу сьогодні вважають одним із основних у розрахунку універсальних характеристик системи, передусім критичних показників. Використання К. Вільсоном техніки фейнмановських діаграм, а також введення нового параметра розкладу  $\epsilon = 4 - d$  і конструктивної ідеї про те, що критичні показники плавно змінюються із зміною вимірності простору  $d$ , відкрили шлях до розвитку в теорії критичних явищ методів теоретико-польової РГ, яку детально обговорено в книзі М. Боголюбова та Д. Ширкова [1]. Використання РГ підходу в теорії критичних явищ привело до глибшого розуміння процесів, що відбуваються в околі критичної температури, дало змогу розраховувати критичні показники, знайти рівняння стану, кореляційні функції та інші важливі характеристики різноманітних модельних систем. Сьогодні є різні формулювання

<sup>1</sup> $s$  – довільне додатне число ( $s > 1$ )

РГ розгляду критичних явищ. Суть деяких підходів викладена у [2, 13, 15, 20, 32].

Значним своїм досягненням теорія критичних явищ завдячує використанню перенормованих рядів теорії збурень [100] і застосуванню процедури пересумовування до асимптотичних рядів [101, 102]. Справді, значні успіхи в обчисленні критичних показників пов'язані з використанням 1973 року Г. Парізі теорії збурень при  $d = 3$  [100, 103–106]. Отримані асимптотичні ряди досліджували за допомогою перетворень Бореля–Паде [107]. Були запропоновані методи оцінки рядів теорії збурень для великих порядків [108]. Це дало змогу пересумувати асимптотичні ряди для критичних показників, включаючи  $\epsilon$ -розклад [102, 109–113], отримати з великою точністю значення критичних показників для  $n$ -компонентної польової моделі [101, 114]. Згадані вище методи використовують в обчисленні відношень критичних амплітуд термодинамічних функцій вище і нижче ТФП [115–120]. Комбінації деяких основних і конфлуентних критичних амплітуд розкладів Веґнера [121, 122] одержані в працях [115, 123] у рамках теоретико-польового підходу. Подібно до значень критичних показників, відношення критичних амплітуд термодинамічних характеристик також є універсальними величинами [124], залежними лише від типу симетрії вихідного гамільтоніану, вимірності простору та параметра порядку. Вони не залежать від мікроскопічних параметрів системи і змінюють свої значення у переході від одного класу універсальності до іншого. У [118] викладені результати оцінок універсальних комбінацій основних критичних амплітуд сприйнятливості, теплоємності і кривої співіснування для тривимірних ізінгівських систем, неасимптотична критична поведінка яких за допомогою теоретико-польового підходу при температурах вище і нижче від критичної вивчалась відповідно в [50, 125]. Праця [50] містить також дослідження відношень основних критичних амплітуд і амплітуд конфлуентних поправок для теплоємності та інших характеристик систем. Велику увагу приділяють порівнянню теоретичних обчислень з експериментальними даними, з'ясуванню якісної відповідності між теорією та експериментом [50, 118, 125].

У дослідженні критичних явищ успішно застосовують концепцію подібності [126, 127]. Її реалізація з використанням ієрархічних моделей дає змогу описувати широкий клас моделей з коротко- і далекосяжним потенціалом взаємодії [128, 129]. Математична строгість результатів, що отримуються, дає детальну інформацію про особливості поведінки системи поблизу  $T_c$ , однак розрахунок неуніверсальних величин, зокрема, критичних амплітуд, тут виконується з певними труднощами [130].

Важливе місце у вивченні фазових переходів належить методам числового розрахунку. Для тривимірної моделі Ізінга із взаємодією найближчих сусідів виконано детальне числове дослідження універсальних відношень амплітуд сприйнятливості, кореляційної довжини і теплоємності [131]. Поправки до скейлінгових амплітуд цих величин у випадку різних типів ґраток проаналізували у [132]. Новий числовий метод для визначення природи фазового переходу запропонований в [133], а в [134] описано новий підхід до дослідження критичних властивостей моделей Ізінга вимірністю більше двох, що ґрунтується на розрахунку матриці переносу. Техніку матриць переносу в [135] використовували у розрахунках критичних скінченно-вимірних скейлінгових амплітуд для повністю анізотропної тривимірної моделі Ізінга, а в [136] – у перевірці критерію для локалізації критичної температури деяких ізінґоподібних спінових моделей. Формалізм матриць переносу класичних ґраткових спінових моделей також застосовують в апараті теорії випадкових матриць (див., наприклад [137]).

Серед числових методів слід відзначити низько- і високотемпературні розклади [138–141]. Тут розрахунки здійснюються за допомогою розкладів функцій, що нас цікавлять, або за зростаючими степенями температури (низькотемпературний розклад), або за степенями оберненої температури (високотемпературний розклад). Ці розклади відносять до методів послідовних наближень, вони дають змогу досягати високого ступеня точності розрахунку фізичних характеристик досліджуваних систем [142–152]. Результати давніших праць [153–163], отримані застосуванням цих розкладів до тривимірної моделі Ізінга, уточнюють і доповнюють останнім часом новими дослідженнями.

У [164] при розгляді поведінки ізінгівського феромагнетика з безмежним спіном одержано низькотемпературний розклад для вільної енергії, формули для теплоємності, спонтанної намагнетиченості і магнетної сприйнятливості в нульовому полі. У цій же статті із високотемпературного розкладу вільної енергії знайдено вираз для високотемпературної магнетної сприйнятливості. Для прикладу можна згадати і працю [165], де розрахунок критичного показника теплоємності тривимірної моделі Ізінга здійснюють з використанням високотемпературного розкладу з точністю до 24-го порядку.

Вивченню класичних  $n$ -векторних моделей на простій та об'ємцентрованій кубічних ґратках за допомогою високотемпературних розкладів 21-го порядку, а також поновленню оцінки критичних параметрів для різних значень вимірності спіну  $n$  (зокрема і для  $n = 1$ , що відповідає моделі Ізінга) присвячені праці [166, 167]. У [168] високотемпературні розклади для сприйнятливості та кореляційної довжини другого моменту для моделей Ізінга на вказаних вище ґратках продовжуються до 23-го порядку. Аналіз цих розкладів дав змогу авторам поновити оцінки універсальних критичних величин. Варто виділити і [169], де досліджено високотемпературні ряди для узагальненої тривимірної моделі Ізінга з довільним потенціалом. Критичні показники, отримані в цій праці з використанням високотемпературних рядів, адаптованих до вдосконалених потенціалів, мають високу точність. Тут на основі розвинутої техніки будується також параметричне представлення критичного рівняння стану, визначаються універсальні відношення амплітуд різних характеристик. Результати, одержані методами високо- і низькотемпературних розкладів, сьогодні є найдостовірнішими, хоча немає строгого доведення збіжності рядів, які тут виникають, або оцінки залишку ряду. Аналіз цих рядів можна проводити за допомогою апроксимант Паде [11, 170, 171]. Методи розкладів у ряд дають змогу отримати числові передбачення для тривимірних ґраткових моделей, які не піддаються точному розв'язкові, оцінити придатність мікроскопічної моделі порівнянням одержаних для неї результатів з експериментом.



У дослідженні явищ поблизу ТФП активно використовуються і такі методи числового експерименту, як методи Монте-Карло [172–183]. Цим методам притаманні строга математична обґрунтованість, можливість контролю за похибкою в рамках самого методу, супровід даних “фізичною” картиною протікаючих процесів та великим обсягом детальної супутньої інформації. У [178] із даних розрахунку методом Монте-Карло внутрішньої енергії ізінгівського феромагнетика на простій кубічній ґратці визначено питому теплоємність, розглянуто універсальні відношення її основних критичних амплітуд і амплітуд перших конфлуентних поправок. Відношення основних критичних амплітуд теплоємності для тривимірної моделі Ізінґа методом Монте-Карло обчислено також у [184]. Вказаний метод успішно застосовують до перетворення РГ в обчисленні критичних показників. Дослідженню моделі Ізінґа на простій кубічній ґратці методом РГ у процедурі Монте-Карло присвячена стаття [185]. У [186] проведено результати аналізу методом Монте-Карло кореляційної довжини тривимірної моделі Ізінґа для об’ємцентрованої кубічної ґратки і ренормалізаційної взаємодії у критичній області. Метод локальних станів для розрахунку вільної енергії ґраткових моделей у використанні методу Монте-Карло представлений у [187]. Розрахунки за допомогою наведеного тут нового методу дають надійні результати навіть у критичній області і не вимагають великої обчислювальної роботи. В основі методу лежать використання верхньої та нижньої меж термодинамічної границі густини ентропії, завдяки чому отримують надійну оцінку величини вільної енергії, а також вираз для величини допустимої похибки. Дієвість методу перевіряють на дво- і тривимірних моделях Ізінґа та на тривимірній моделі Поттса з трьома станами. У статті [188] модель Ізінґа на простій кубічній ґратці вивчається за допомогою алгоритму кластерного поновлення Монте-Карло. Поліпшення результатів обчислень досягнуто в процесі дослідження критичної поведінки тривимірної моделі Ізінґа методом РГ у процедурі Монте-Карло [189] і високоточним методом Монте-Карло [190, 191]. У рамках останнього в [192] вивчаються деякі універсальні відношення амплітуд для випадку тривимірної моделі Ізінґа. Успіхи, досягнуті при вико-

ристанні комп'ютерних симуляцій для вивчення магнетних фазових переходів і критичних явищ, відображені у [193]. Сучасний стан досліджень фазових переходів та критичних явищ методами Монте–Карло розглянуто і в огляді [27]. У ньому обговорюються результати, одержані як класичними, так і квантовими методами Монте–Карло.

Окремий напрям складають праці з дослідження фазових переходів другого роду для систем з нецілою вимірністю простору. У [194, 195] розвинута загальна схема дослідження критичної поведінки за довільної вимірності простору  $d$ , отримані значення критичних показників. Опис критичної поведінки розведеної  $m$ -векторної моделі за нецілою вимірності простору за допомогою теоретико-польової РГ здійснений в [196]. Метод масивної теорії поля при фіксованій вимірності простору останнім часом успішно використовується у фізиці полімерів, зокрема у теорії полімерів складної топології. У [197, 198] отримано результати для критичних показників, що описують масштабні властивості полімерної зірки, запропонована модель для дослідження багатосортних полімерних сіток. Для випадку двох сортів полімерів досліджені критичні показники, властиві цим системам.

Велика кількість літератури з теорії фазових переходів не дає змоги детально зупинитись на всіх методах їх дослідження. Однак, потрібно відзначити працю [199], в якій проаналізовано метод ренормгрупи у теорії фазових переходів. Дослідження різних характеристик системи у критичній області у всьому діапазоні температур і при скінченному значенні кількості частинок дали змогу розвинути якісну теорію флуктуацій у критичній області, включаючи критичну точку [200]. У монографії [62] зібрано і систематизовано результати, що належать до ґраткових моделей, які допускають точний аналітичний розв'язок. Безсумнівну наукову цінність становляють праці, пов'язані з використанням розкладів за степенями  $1/d$  [201, 202],  $1/n$  [13, 203], а також методу функціонального інтегрування [23], за допомогою якого без використання теорії збурень для  $d$ -вимірної системи з виродженим  $n$ -компонентним параметром порядку побудовано й досліджено наближене диференціальне рівняння РГ [204, 205]. Успішно використовуються методи РГ у реальному

просторі [206, 207], варіаційні підходи [208, 209], метод функцій Гріна [40, 210–215]. Поряд з дослідженням критичних явищ в феро- та антиферомагнетиках [216–218] значну увагу приділено фазовим перетворенням у бінарних розчинах [219–221]. Актуально з'ясувати вплив йонів на критичну точку розшарування бінарної суміші [222]. Поглибленню знань про критичні властивості бінарних розчинів сприяють успішне дослідження в них гравітаційного ефекту на основі методу пропускання повільних нейтронів, вивчення нейтронної критичної опалесценції, що спостерігається поблизу критичної точки розшарування бінарних розчинів і є аналогом світлової критичної опалесценції [223, 224].

Використанню ідей скейлінгу та універсальності в аналізі поведінки статистичних систем у критичних точках присвячений огляд [225]. Низку методів розрахунку термодинамічних функцій для класу ґраткових моделей, який включає і модель Ізінґа, проаналізовано в [226]. У [227] на основі розкладу для вільної енергії за спіновими кластерами систематично викладається наближення рядів за цими кластерами, які подібні до наближення середнього поля. У рамках цього наближення обчислено критичну температуру і критичні показники для ізінґівських систем різної вимірності. При цьому використано метод когерентної аномалії. Застосування методу когерентної аномалії до розкладів у ряди перевіряється в [228] за допомогою пробних функцій та розрахунку критичного показника сприйнятливості для моделі Ізінґа. Огляд літератури, що стосується перевірки умов застосування наближення середнього поля в аналізі критичних явищ, поданий в статті [229]. У праці [230] зроблено огляд класифікації фазових переходів і її зв'язків з основами статистичної фізики. Дослідженню критичних явищ у просторово обмежених системах присвячені статті [231–233], а кореляційні властивості анізотропних необмежених систем розглянуто в [234]. Основи і формулювання РГ теорії у статистичній фізиці обговорено в [235]. Останнім часом значна увага приділяється вивченню в системах кросовера між класичною і некласичною критичною поведінкою (див., наприклад, [236, 237]). Питання, що стосуються класу універсальності йонної критичності та дослідження кросовера в йонних та багатьох складних рідинах, досі важлива невиріше-

на проблема [238, 239]. Цікавими є і праці [240, 241], присвячені реалізації неперервного РГ перетворення Вільсона (підходу без використання теорії збурень).

У більшості праць, присвячених питанням теорії фазових переходів, основну увагу зосереджували на визначенні класу універсальності систем, дослідженню симетричних властивостей безвідносно до затравочних параметрів вихідного гамільтоніану, типів розв'язків рекурентних співвідношень (РС) і обчисленню значень критичних показників. Одержано важливі експериментальні результати. Розраховані універсальні відношення і комбінації критичних амплітуд термодинамічних характеристик спінових систем, зокрема тривимірної моделі Ізінга. Значна частина теоретичних результатів, одержаних в останні роки, ґрунтується на використанні методів РГ. Однак, як буде зазначено далі, засоби РГ є застосовними лише в інтервалі хвильових векторів, що визначають область локальної термодинамічної нестійкості системи. Проте саме в цій області формуються правильні значення критичних індексів.

Незважаючи на успіхи, досягнуті в обчисленні основних характеристик системи в критичній області, невирішеною залишалася основна задача фазових переходів: розрахунок явних виразів для термодинамічних функцій системи в інтервалах, що включають ТФП як функцій температури, магнетного поля і мікроскопічних параметрів гамільтоніану. Проблема залежності самих критичних амплітуд від мікроскопічних параметрів системи вимагала послідовного вивчення. Суттєвий прогрес у розв'язанні цієї проблеми був досягнутий у методі колективних змінних (КЗ), який узагальнив І. Юхновський [16, 242–244] на випадок спінових систем. Цей метод теоретичного дослідження системи заряджених частинок був розроблений у працях Д. Зубарева. Зокрема в [245] запропоновано нове представлення статистичної суми односоротної системи йонів у компенсуючому полі в наближенні хаотичних фаз у вигляді функціонального інтегралу від колективних змінних. Якобіан переходу від скінченної множини декартових координат частинок до безмежної системи КЗ був представлений у вигляді добутку дельта-функцій. Розрахунок якобіану переходу для системи заряджених частинок з урахуван-

ням короткосяжних взаємодій виконаний у [246]. Повного розвитку метод КЗ набув у Львівській школі статистичної фізики. Його використовували у вивченні бозе- [247, 248] та фермі-систем [249, 250], у побудові статистичної теорії класичних рівноважних систем [251], у дослідженні рідких магнетиків [252, 253] і квазі-релятивістських систем [254, 255]. Для опису металічних систем запропонований метод динамічних КЗ [256]. Метод КЗ виявився зручним для дослідження термодинамічних характеристик  $n$ -компонентної моделі структурного фазового переходу [257]. Цей метод успішно використовують у побудові статистичної теорії такої неупорядкованої системи, як бінарні сплави заміщення [46], теорії сегнетоелектричного фазового переходу в кластерних системах [258], для дослідження критичної точки рідина-газ [259], бінарних сумішей [260, 261],  $n$ -компонентної моделі класичного магнетика [262-264]. Розвиткові РГ перетворення в рамках методу КЗ та аналізу цього перетворення за допомогою теорії збурень присвячена праця [265].

## Структура монографії

У цій монографії на основі методу КЗ запропоновано новий підхід до побудови мікроскопічної теорії фазових переходів другого роду у реальному тривимірному просторі. Для зручності та прозорості викладу вибрана одна з простих ключових моделей фазового переходу – тривимірна модель Ізінга. Побудована теорія дає змогу обчислити не тільки універсальні характеристики моделі, а й отримати явні вирази для термодинамічних і структурних функцій тривимірної однокомпонентної спінової системи поблизу ТФП та знайти їхню залежність від мікроскопічних параметрів.

Статистичний опис процесу фазового переходу слід проводити у відповідному для кожної фізичної моделі фазовому просторі колективних змінних. Серед множини незалежних змінних цього простору  $\{\dots \rho_k \dots\}$  мають бути змінні, пов'язані з параметрами порядку, відмінні від нуля середні значення яких є при температурі нижчій від критичної. Такий фазовий простір утворює множина КЗ [266]. Кожна з КЗ є модою коливань густини відповідної конкретній моделі якості: густини спінового моменту в магнетиках, фур'є-образу унарної функції розподілу у багатокомпонентних сплавах тощо. Перехід від вихідного конфігураційного простору до фазового простору КЗ не є унітарним перетворенням. Заміна вихідної множини незалежних змінних, наприклад спінових змінних у магнетиків, множиною КЗ має супроводжуватись введенням якобіану переходу. Використовуючи результати праць [246, 251, 267] у розділі 1 знайдено якобіан переходу  $J(\rho)$  до колективних змінних для моделі Ізінга.

У результаті формулу (1) можна записати у такому вигляді

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma} \exp[-\beta H(\sigma)] = \int \exp[-\beta \tilde{H}(\rho)] J(\rho) (d\rho)^N = \\ &= \int \exp[-\beta E(\rho)] (d\rho)^N, \end{aligned}$$

де  $N$  – кількість частинок. У показник експоненти для густини міри входить енергія системи  $E(\rho)$ , задана на множині КЗ.  $E(\rho)$  є безмежним рядом від добутоків зростаючої кількості КЗ. Розклад фур'є-образу потенціалу за степенями хвильового вектора  $k$  приводить  $E(\rho)$  до форми, подібної до гамільтоніана Гінзбурга–Ландау [268]. Дослідження рівнянь Ейлера для цієї форми густини міри переконує нас у тому, що серед множини КЗ є змінна, пов'язана з параметром порядку. Виникає задача нульового наближення при обчисленні статистичної суми для базисного розподілу. Показано, що у критичній області температур існує базисний розподіл флуктуацій, який, на відміну від гаусового, має в експоненті другий та четвертий степені КЗ, або другий, четвертий та шостий степені КЗ. Статистична сума подається у вигляді функціонального інтегралу, що містить як підінтегральну функцію четвірний або шестирний базисний розподіли.

Викладений у розділі 2 цієї монографії новий спосіб обчислення статистичної суми – основне досягнення запропонованого методу. Подібно до [89], інтегрування статистичної суми виконується поетапно, починаючи із КЗ  $\rho_{\mathbf{k}}$  з великими значеннями хвильового вектора  $\mathbf{k}$  і закінчуючи інтегруванням за  $\rho_{\mathbf{k}}$  із  $\mathbf{k} \rightarrow 0$ . Множину КЗ розбивають на підмножини, які містять КЗ  $\rho_{\mathbf{k}}$  з певними інтервалами значень хвильового вектора  $\mathbf{k}$ . Для кожної з підмножин КЗ потенціал взаємодії замінюють відповідним середнім значенням. Запропонований оригінальний прийом, завдяки якому фазовий простір КЗ  $\rho_{\mathbf{k}}$  із індексами  $\mathbf{k}$  на інтервалі  $B/s < k \leq B$  доповнюється до повного фазового простору<sup>2</sup>. Виникає можливість факторизувати підінтегральну функцію і виконати інтегрування. Цей прийом повторюється від однієї підмножини до іншої. У результаті таких дій знаходимо послідов-

<sup>2</sup> $B = \pi/c$  – границя півзони першої зони Бріллюена,  $c$  – стала ґратки

ність парціальних статистичних сум, кожна з яких відповідає певній блочній структурі. Поступово зменшується кількість змінних інтегрування в недоінтегрованої частині статистичної суми, яка містить під інтегралом ефективний розподіл флуктуацій, для якого кількість КЗ в  $s^3$  разів менша, ніж у попередньому. Отримано рекурентні формули, що пов'язують між собою підінтегральні функції двох суміжних блочних структур. Вони принципово відрізняються від рекурентних формул Вільсона [93]. В останніх зв'язок між двома суміжними формами забезпечується завдяки доданкові  $\exp(-ax^2y^2)$ , у методі КЗ – проміжним інтегруванням. Подані у монографії різниці рекурентні співвідношення дають змогу визначити елементи блочних гамільтоніанів за відомими початковими даними<sup>3</sup>. Доведено, що РС мають два типи розв'язків: перший – для області великих значень<sup>4</sup> хвильового вектора  $\mathbf{k}$  ( $k \geq B_{m_\tau}$ ), другий – для області малих значень  $\mathbf{k}$  ( $k < B_{m_\tau}$ ). Величина  $B_{m_\tau}$  характеризує собою особливе значення хвильового вектора і визначає величину області критичних флуктуацій. Розв'язок РС, справедливий для області великих значень  $\mathbf{k}$ , де  $k \geq B_{m_\tau}$ , названо критичним режимом. Це розв'язки РГ типу. Вони описують флуктуації, що характеризуються строго негаусовим розподілом. Другий розв'язок, справедливий для області малих значень  $\mathbf{k}$ , характеризується розподілом флуктуацій гаусового типу. При  $T \rightarrow T_c$  величина  $B_{m_\tau} \rightarrow 0$  ( $B_{m_\tau} = Bs^{-m_\tau}$ ,  $m_\tau \sim -\ln|\tau|$ ) і розв'язки РС для всіх  $\mathbf{k}$  відповідають тільки розв'язкам РГ типу.

Величину  $B_{m_\tau}$  відносять до фундаментальних характеристик фазового переходу другого роду. Вона визначає період ефективної блочної ґратки  $c_{m_\tau} = \pi/B_{m_\tau}$ , який співвимірний із кореляційною довжиною. Визначення температурної залежності величини  $c_{m_\tau}$  дає змогу розрахувати значення критичного показника кореляційної довжини  $\nu$ . Число  $m_\tau$  характеризує величину області критичного режиму, яка власне є джерелом виникнення неklasичних критичних показників.

<sup>3</sup>Завдяки такому підходові не вимагається апіорного припущення про лінійну залежність від  $T - T_c$  коефіцієнта  $c_1$  із розв'язків РГ рівнянь, яке здійснено у працях Вільсона [43, 93].

<sup>4</sup>Надалі модуль хвильового вектора  $\mathbf{k}$  позначатимемо через  $k$ .



Встановлено, що при наближеному розрахункові термодинамічних функцій поблизу ТФП вони залежать від параметра  $s$ . Показано, що обчислення, виконані за допомогою четвірного базисного розподілу, ефективні лише в проміжному інтервалі значень параметра  $s$  ( $s \approx 3 \div 5$ ). Якщо параметр  $s$  вибирають близьким до одиниці, то проведення таких розрахунків, як інтегрування статистичної суми чи розрахунок критичних показників термодинамічних функцій ускладнюється в зв'язку з потребою враховувати все більшу кількість доданків у проміжному інтегруванні. У цьому випадку теорія дає змогу обчислювати лише універсальні величини, наприклад, критичні показники, і вимагає додаткових припущень, зокрема, використання  $\epsilon$ -розкладу, або інших методів, що ґрунтуються на застосуванні теорії збурень. Використання при розрахунках базисних розподілів вищих від четвірного порядків приводить до суттєвого послаблення результатів розрахунків від параметра  $s$  та збільшення діапазону його можливих значень.

Метод прямого розрахунку вільної енергії  $3D$  спінової моделі ґрунтується на існуванні поблизу точки фазового переходу двох основних флуктуаційних процесів: **критичного режиму** (КР), який описує флуктуації короткохвильових фаз густини спінового моменту, та флуктуаційного процесу, який характеризує довгохвильові флуктуації. Останній залежить від того, вище чи нижче від температури фазового переходу  $T_c$  перебуває система. При  $T > T_c$  виникає т. зв. **граничний гаусовий режим** (ГГР). Його особливість полягає в неаналітичній залежності дисперсії від температури. При  $T < T_c$  маємо **інверсний гаусовий режим** (ІГР), що переходить у ГГР після зміщення центра флуктуацій на величину, яка пропорційна до параметра порядку. Роздільне врахування внесків у вільну енергію від ділянок КР і ГГР (або ІГР у випадку  $T < T_c$ ) дає змогу отримати явний вираз для вільної енергії системи у безпосередньому околі температури фазового переходу.

У розділах 3 і 4 запропонований метод розрахунку термодинамічних функцій тривимірної системи в інтервалі температур, що включає критичну точку і температури вищі і нижчі від температури фазового переходу. Використовуючи отримані раніше

вирази для парціальних статистичних сум, знайдений вираз для вільної енергії системи в інтервалі, що включає  $T_c$ . При  $T \geq T_c$  вільна енергія (як і внутрішня енергія, ентропія і теплоємність) складається з двох основних частин (внесків від КР та ГГР):

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

Важливі моменти виникають при розрахунку  $F_{\text{КР}}$ . Зокрема, внесок в теплоємність системи, що відповідає області КР є від'ємним. Внесок же від області ГГР є додатним і більшим від внеску КР, якою б малою область ГГР не була. Оскільки розв'язки РС (розв'язки РГ типу) справедливі лише для ділянки КР, то використання тільки РГ методів очевидно недостатнє для опису термодинаміки ФП, зокрема неуніверсальних характеристик системи поблизу точки фазового переходу. Винятково важливим стає врахування внеску у вільну енергію від довгохвильових фаз флуктуацій спінового моменту в ГГР. Тільки послідовне врахування внесків коротко- і довгохвильових флуктуацій дає змогу отримати додатні значення для теплоємності і правильний температурний хід ентропії. Одержано температуру фазового переходу як функцію мікроскопічних параметрів системи.

При  $T < T_c$  (розділ 4) вільна енергія є сумою трьох доданків:

$$F = F_{\text{КР}} + F_{\text{ГГР}} + F_{(\sigma)},$$

де  $F_{(\sigma)}$  – вільна енергія впорядкування, яка виникає після інтегрування за колективною змінною  $\rho_0$ . Ця змінна є макроскопічною величиною, а її середнє значення  $\langle \rho_0 \rangle$  визначає параметр порядку системи. Обчислення термодинамічних функцій показало, що зменшення ентропії системи при зниженні температури пов'язане з несподіваними ефектами. З'ясувалось, що РГ гілка розв'язків (область КР) приводить до зростання відповідної їй гілки ентропії при віддаленні від критичної точки в область низьких температур. Це зростання ентропійної гілки залишається і при врахуванні внеску від ГГР. Падіння повної ентропії з пониженням температури при  $T < T_c$  забезпечується завдяки виникненню впорядкування, що описується доданком  $F_{(\sigma)}$  у вільній

енергії<sup>5</sup>. Обчислені й наведені криві для ентропії і теплоємності. Отримані значення критичних показників і вирази для критичних амплітуд тривимірної спінової моделі, включаючи конфлуентні поправки. Сформульований метод самоузгодженого обчислення середнього спінового моменту системи при  $T < T_c$ . Знайдений мікроскопічний аналог розкладу вільної енергії Ландау в ряд за степенями параметра порядку. Вперше, з перших принципів, одержані загальні вирази для коефіцієнтів розкладу вільної енергії за степенями параметра порядку, встановлена їхня температурна поведінка, досліджена залежність від мікроскопічних параметрів системи.

Розділ 5 присвячений розрахункові бінарної кореляційної функції поблизу ТФП. Розрахований вплив поправки на усереднення за хвильовим вектором фур'є-образу потенціалу, що виконується у процесі поетапного обчислення виразу для статистичної суми моделі. Визначено величину критичного показника кореляційної функції. Знайдено вирази для фур'є-образу бінарної кореляційної функції і сприйнятливості системи поблизу точки фазового переходу. Отримані перенормовані критичні показники теплоємності, сприйнятливості, кореляційної довжини, що відповідають відмінному від нуля критичному показнику кореляційної функції (т. зв. малому критичному індексові).

У розділі 6 здійснено дослідження РС, що відповідають врахуванню вищих степенів змінної  $\rho_k$  у показнику експоненти базисного розподілу флуктуацій. Показано, що ускладнення форми розподілу доданками типу  $\rho^{2m}$ , починаючи з  $m = 3$ , призводить до незначної зміни значень критичних показників, які мають тенденцію до швидкого насичення при збільшенні порядку  $m$  базисного розподілу.

Знайдена нова форма лінеаризованих поблизу фіксованої точки РС між коефіцієнтами, які характеризують ефективні блочні гамільтоніани, що виникають при поетапному інтегруванні статистичної суми в наближенні моделі  $\rho^6$ . Поблизу фіксованої точки знайдений явний розв'язок РС як функції температури і номера ефективної блочної структури. Отримано рівняння для

<sup>5</sup>Цей факт пояснює успіхи теорії середнього поля при якісному описі фазових переходів.

визначення температури ФП як функції початкових параметрів гамільтоніану моделі.

У розділі 7 подано дані числових розрахунків статистичної суми у наближенні моделей  $\rho^4$  і  $\rho^6$ . Підтверджена наявність у критичній області температур двох головних флуктуаційних процесів. Перший з них – КР, що відповідає короткохвильовим модам коливань густини спінового моменту. Тут формуються значення критичних показників і відбувається перенормування дисперсії ефективного гаусового розподілу, що характеризує ГПР. Саме він характеризує другий флуктуаційний процес при  $T > T_c$  і описує довгохвильові моди коливань. Для температур нижчих за критичну із зростанням номера блочної структури  $n$  спостерігається зміна КР на ГПР. Показано, що коефіцієнти ефективних базисних розподілів в областях КР та ГПР (або ГПР) поводяться по різному як функції  $n$ . При цьому їхня еволюція в області КР досить точно описується РГ рівняннями. Результати цього розділу підтверджують необхідність поділу внесків коротко- і довгохвильових мод коливань спінової густини при розрахункові вільної енергії у критичній області.

Наступні розділи присвячені узагальненню методу розрахунку термодинамічних функцій на випадок моделі  $\rho^6$ . Розглянуто області температур  $T > T_c$  (розділ 8) і  $T < T_c$  (розділ 9). Показано, що методика розрахунку виразу для вільної енергії відрізняється від випадку використання моделі  $\rho^4$  тільки кількісно. При обчисленні термодинаміки системи в рамках моделі  $\rho^6$  враховано першу конфлуентну поправку. Обчислено основні критичні амплітуди та амплітуди конфлуентних поправок термодинамічних характеристик. Досліджена залежність отриманих результатів від мікроскопічних параметрів гамільтоніану. Проведено безпосереднє порівняння основних термодинамічних функцій, отриманих у наближенні моделі  $\rho^6$ , з аналогічними функціями для моделі  $\rho^4$ , обчисленими в розділах 3, 4. Показано суттєве зменшення залежності результатів розрахунку теплоємності та інших характеристик від параметра поділу  $s$  у моделі  $\rho^6$ .

У розділі 10 на основі моделі  $\rho^6$  запропонований спосіб, за яким можна отримати рівняння стану тривимірної ізінгоподібної системи на мікроскопічному рівні. Використовуючи одер-

жане рівняння, досліджено температурну та польову залежність параметра порядку.

Основна ідея підходу, який використовується в монографії, ґрунтується на методі поетапного обчислення виразу для статистичної суми моделі. Такий спосіб розрахунку особливо актуальний в околі точки фазового переходу, де дисперсія гаусового розподілу прямує до безмежності.

У методах рівноважної статистичної фізики принциповим є питання про усереднення коефіцієнтних функцій за хвильовим вектором. Залежно від того, усереднювати чи ні коефіцієнтні функції, виникають два можливих способи обчислення термодинамічних функцій. Якщо усереднення не виконувати, то інтегрування статистичної суми потрібно здійснювати за допомогою гаусової густини міри. У результаті приходимо до віріальних розкладів, виникають розбіжні інтеграли зумовлені фактором  $\sum_{\mathbf{k}_i \in B} M_4 \omega_{\mathbf{k}_1} \cdots \omega_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \cdots + \mathbf{k}_4}$  і проблеми з сумуванням відповідних рядів в околі точки фазового переходу. У монографії показано, що в кожному груповому інтегралі безмежного віріального ряду є головні доданки, які утворюються в результаті засереднення факторів  $\sum_{\mathbf{k}_i \in B} M_4 \omega_{\mathbf{k}_1} \cdots \omega_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \cdots + \mathbf{k}_4}$  за гаусовою густиною міри. Сума безмежної кількості цих доданків врахована при інтегруванні статистичної суми з використання четвірної базисної густини міри. Якщо ж при обчисленні статистичної суми використовувати шестирну базисну густиною міри, то це еквівалентно сумуванню безмежної кількості доданків, які, крім факторів, квазізани вище, включають також діаграмні ряди, пов'язані з  $\sum_{\mathbf{k}_i \in B} M_6 \omega_{\mathbf{k}_1} \cdots \omega_{\mathbf{k}_6} \delta_{\mathbf{k}_1 + \cdots + \mathbf{k}_6}$ . Останні мали б логарифмічні розбіжності в ТФП при усередненні за гаусовим розподілом.

Отже, якщо здійснити усереднення за  $\mathbf{k}$  коефіцієнтних функцій для деяких значень хвильового вектора, то подальші обчислення проводяться на основі негаусових розподілів. Змінні в функціональному інтегралі розділяються, а статистичну суму вдається звести до добутку парціальних статистичних сум. У цьому випадку не виникає проблеми, пов'язаної із сумуванням різних класів розбіжних (відносно гаусового розподілу) діаграм в критичній точці. Саме такому підходу до дослідження явищ при фазовому переході другого роду й присвячена ця монографія.

## Розділ 1

# Застосування методу колективних змінних до дослідження спінових систем

У цьому розділі викладені положення, які складають основу розвинутого у монографії методу прямого обчислення основних характеристик тривимірної системи поблизу точки фазового переходу другого роду. Основи цього методу закладені в працях [16, 242]. Його головною особливістю є коректне врахування непрямих взаємодій, які стають основними в околі точки фазового переходу і складають поняття колективних ефектів. Доцільність використання колективних змінних для опису фазового переходу обумовлена тією обставиною, що серед множини колективних змінних є змінні, середні значення яких безпосередньо пов'язані з параметром порядку  $i$ , таким чином, самі КЗ утворюють фазовий простір, зручний для опису критичних явищ.

У цьому розділі наведено результати обчислень групових інтегралів в бінарній кореляційній функції у критичній області. Вони свідчать про недопустимість використання гаусової міри як базисної при обчисленні вільної енергії або бінарної кореляційної функції поблизу точки фазового переходу внаслідок виникнення безмежної множини розбіжних інтегралів. Доведена теорема про необхідність використання поблизу ТФП в якості базисних негаусових розподілів флуктуацій при описі критичних властивостей тривимірних систем. При такому способі розрахунку не отримуємо жодного розбіжного інтегралу, отже можемо розраховувати фізичні характеристики тривимірних систем поблизу ТФП.

## 1.1. Постановка задачі. Термодинамічні функції

Завдання статистичної фізики фазових переходів полягає у передбаченні співвідношень між макроскопічними спостережувальними величинами, оперуючи лише даними про мікроскопічні параметри системи і сили, що діють між частинками, з яких ця система складається. Фазовий перехід є рівноважним процесом і повністю описується характеристичними функціями термодинаміки. Незалежними змінними надалі будемо вважати температуру  $T$ , об'єм  $V$  і зовнішнє поле  $h$ . У задачах, які розглядатимемо нижче об'єм системи  $V$  вважається фіксованим. Ми будемо досліджувати ґраткові системи з деякою незалежною від температури постійною ґратки  $c$ . Відповідною характеристичною функцією системи буде вільна енергія  $F(T, V, h)$ .

Обчислення основних термодинамічних функцій системи поблизу точки фазового переходу здійснюють відповідно до загальних положень термодинаміки. Ентропія системи  $S$  і середній момент  $\langle \sigma \rangle$  обчислюють із співвідношень:

$$S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_h, \quad N \langle \sigma \rangle = - \left( \frac{\partial F}{\partial h} \right)_T, \quad (1.1.1)$$

де  $F(T, V, h)$  вільна енергія системи  $N$  взаємодіючих частинок. Для сприйнятливості  $\chi$  і теплоємності  $C$  маємо вирази:

$$\chi = \left( \frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial h} \right)_T, \quad C = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_h. \quad (1.1.2)$$

Обчислення вільної енергії системи  $F(T, V, h)$  виконуватиметься на різних рівнях строгості. Перший з них, подібно до теорії Ландау, передбачає попереднє введення у вільну енергію додаткових змінних (типу параметру порядку). Він веде до феноменологічного опису.

Другий спосіб передбачає опис ФП на мікроскопічному рівні. Його суть полягає в прямому розрахунку виразу для вільної енергії, а не його конструюванню, виходячи з інтуїтивних міркувань. Саме другий спосіб розрахунку є предметом дослідження

даної монографії. Як відомо, вільна енергія виражається через статистичну суму:

$$F = -kT \ln Z, \quad Z = Sp e^{-\beta H}, \quad (1.1.3)$$

де  $Sp$  означає операцію сумування за всіма станами системи,  $k$  – стала Больцмана,  $\beta = (kT)^{-1}$ . Для успішного опису фазового переходу потрібно задовільнити деякі попередні умови.

По-перше, визначити у чому полягає явище фазового переходу. Основною рисою ФП другого роду, що відбуваються за певних умов у різних фізичних системах, є спонтанне виникнення нижче деякої температури  $T_c$  відмінного від нуля параметра порядку

$$\langle \sigma \rangle = N^{-1} \sum_i \langle \sigma_i \rangle, \quad \langle \sigma \rangle = \begin{cases} f(T), & T \leq T_c, \\ 0, & T > T_c. \end{cases} \quad (1.1.4)$$

У безпосередньому околі температури фазового переходу  $T_c$  при  $T < T_c$  та нульовому значенні зовнішнього поля, параметр порядку  $\langle \sigma \rangle$  описується рівнянням

$$\langle \sigma \rangle = B |\tau|^\beta (1 + a_\sigma |\tau|^{\Delta'} + \dots), \quad (1.1.5)$$

де  $B$ ,  $a_\sigma$  – критичні амплітуди,  $\beta$ ,  $\Delta'$  – критичні показники,

$$\tau = \frac{T - T_c}{T_c} \quad (1.1.6)$$

відносно відхилення температури від критичної. Для температур, які більші від  $T_c$  та за відсутності зовнішнього поля величина  $\langle \sigma \rangle$  приймає нульові значення. Співвідношення (1.1.5) універсальне, і як показують результати експериментальних вимірювань [47, 269], показники  $\beta$ ,  $\Delta'$  приймають однакові значення для низки різних за своєю природою фізичних систем [270]. На відміну від них величини  $B$ ,  $a_\sigma$  залежать від мікроскопічних параметрів системи.



Поблизу ТФП мають місце аномалії в поведінці деяких термодинамічних величин. Зокрема, експериментальні криві для теплоємності добре описуються співвідношеннями:

$$C = \begin{cases} \frac{A_{\pm}}{a_c^{\pm}} \tau^{-\alpha} (1 + a_c^{\pm} \tau^{\Delta} + \dots) & \text{при } T > T_c, \\ \frac{A_{\pm}}{a_c^{\pm}} |\tau|^{-\alpha'} (1 + a_c^{\pm} |\tau|^{\Delta'} + \dots) & \text{при } T < T_c. \end{cases} \quad (1.1.7)$$

Тут  $\alpha$ ,  $\alpha'$  – критичні показники, що характеризують степінь розбіжності теплоємності при наближенні температури до  $T_c$ ,  $\Delta$ ,  $\Delta'$  – критичні показники, які характеризують відхилення від законів скейлінгу. Це універсальні характеристики теплоємності. На відміну від них, критичні амплітуди  $A_{\pm}$  і  $a_c^{\pm}$  залежать від мікроскопічних параметрів системи.

З наближенням до точки фазового переходу сприйнятливність системи також має особливість:

$$\chi = \begin{cases} \Gamma_{+} \tau^{-\gamma} (1 + a_{\chi}^{+} \tau^{\Delta} + \dots) & \text{при } T > T_c, \\ \Gamma_{-} |\tau|^{-\gamma'} (1 + a_{\chi}^{-} |\tau|^{\Delta'} + \dots) & \text{при } T < T_c, \end{cases} \quad (1.1.8)$$

де  $\gamma$ ,  $\gamma'$  – критичні показники, а  $\Gamma_{\pm}$  і  $a_{\chi}^{\pm}$  – критичні амплітуди. Подібні розбіжності мають теплоємність і сприйнятливність системи при  $T = T_c$ , як функції зовнішнього поля  $h$  у випадку  $h \rightarrow 0$ . Вони характеризуються своїми критичними показниками і амплітудами [269–271].

Змінює свою поведінку поблизу ТФП і парна кореляційна функція  $G(r)$ . У працях [10, 272] зроблений загальний аналіз асимптотики  $G(r)$  поблизу ТФП для великих значень  $r$ . При цьому встановлено, що

$$G(r) = \begin{cases} \frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2}}, & \text{при } T \neq T_c, \\ r^{-(d-2+\eta)}, & \text{при } T = T_c. \end{cases} \quad (1.1.9)$$

Тут  $\xi$  – кореляційна довжина, для якої виконуються співвідношення

$$\xi = \begin{cases} f_{+} \tau^{-\nu} (1 + a_{\xi}^{+} \tau^{\Delta} + \dots) & \text{при } T > T_c, \\ f_{-} |\tau|^{-\nu'} (1 + a_{\xi}^{-} |\tau|^{\Delta'} + \dots) & \text{при } T < T_c. \end{cases} \quad (1.1.10)$$

де  $\nu, \nu'$  – критичні показники кореляційної довжини вище і нижче  $T_c$ ,  $f_{\pm}$  і  $a_{\xi}^{\pm}$  – критичні амплітуди. Критичний показник  $\eta$  характеризує зміну асимптотики функції  $G(r)$  при  $T = T_c$  і  $r \rightarrow \infty$ .

Наведені вище закономірності поведінки параметра порядку, теплоємності, сприйнятливості, парної кореляційної функції системи вперше отримані при експериментальних дослідженнях (див. [269]), де було виявлено суттєве відхилення критичних показників цих характеристик від передбачуваних теорією середнього поля [4, 9, 35, 36]. Це привело до розвитку теоретичних та числових методів дослідження [271, 273–276]. Встановлено, що поведінка систем поблизу ТФП характеризується певним класом універсальності. Властивості системи у рамках одного класу універсальності є загальними для різних об'єктів. Насамперед це стосується критичних показників, а також відношень критичних амплітуд вище і нижче ТФП [122, 270, 271, 277]. По відношенню до величини спіну критичні показники змінюються мало [122, 278–281], однак введення анізотропної взаємодії приводить до їхньої суттєвої зміни [275, 282]. Основна увага у згаданих вище працях зверталась переважно на дослідження симетричних властивостей системи безвідносно до параметрів гамільтоніану.

Важливою обставиною при побудові теорії фазових переходів з врахуванням мікроскопічних параметрів системи є вибір фазового простору змінних, зручного для опису властивостей системи поблизу точки фазового переходу. Множина  $N$  незалежних змінних цього простору  $\{\rho\}$  має містити змінну  $\rho_{\mathbf{k}^*}$ , відносно якої при переході через критичну точку відбувається зміщення максимуму функції розподілу. Індекс  $\mathbf{k}^*$  цієї змінної відповідає максимуму потенціалу взаємодії  $\Phi(\mathbf{k})$ , а сама змінна пов'язана із середнім значенням  $\langle \sigma \rangle$  [16]. Такими змінними для однокомпонентної спінової моделі, як покажемо далі, є моди коливань густини спінового моменту. Позначимо їх через  $\rho_{\mathbf{k}}$ , де хвильовий вектор  $\mathbf{k}$  пробігає  $N$  значень усередині першої зони Бріллюена.

Для багатьох різних за своїм характером фізичних задач, у яких взаємодія між частинками описується потенціалами, представленими у формі узагальнених розкладів Фур'є, для кожної задачі вдається знайти відповідну їй множину колективних змінних і вказати характерне значення величини  $\mathbf{k}^*$ .

## 1.2. Модель Ізінга. Гамільтоніан

Суттєвий прогрес у створенні методу обчислення термодинамічних функцій поблизу точки фазового переходу на мікроскопічному рівні був досягнутий у методі колективних змінних [246, 251], узагальненому в [16] на випадок спінових систем. Цей метод дає змогу підійти до вирішення цієї проблеми на мікроскопічному рівні та з'ясувати роль ренормгрупової симетрії, яка виникає в системі з наближенням до ТФП. Проведені нижче дослідження присвячені побудові мікроскопічної теорії класичних 3D спінових систем. Властивості таких систем досить добре описують тривимірною моделлю Ізінга [283–286]. Гамільтоніан цієї моделі має вигляд

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l}\mathbf{j}} \Phi(r_{\mathbf{l}\mathbf{j}}) \sigma_{\mathbf{l}} \sigma_{\mathbf{j}} - h \sum_{\mathbf{l}} \sigma_{\mathbf{l}}, \quad (1.2.1)$$

де  $\Phi(r_{\mathbf{l}\mathbf{j}})$  – потенціал взаємодії частинок, які розміщені у вузлах  $\mathbf{l}$  і  $\mathbf{j}$  кристалічної ґратки,  $r_{\mathbf{l}\mathbf{j}} = |\mathbf{l} - \mathbf{j}|$  – віддаль між вузлами,  $h = \mu_B \mathcal{H}$ ,  $\mu_B$  – магнетон Бора,  $\mathcal{H}$  – зовнішнє магнетне поле,  $\sigma_{\mathbf{l}}$  – оператор  $z$  – компоненти спіна в  $\mathbf{l}$ -тому вузлі, який має власні значення  $+1$  або  $-1$ . Вважатимемо, що розглядається проста кубічна ґратка з періодом  $s$ . Як потенціал взаємодії  $\Phi(r_{\mathbf{l}\mathbf{j}})$  використовується додатна функція віддалі, що належить до класу  $L_2$ . Цим умовам задовільняє великий клас функцій. Наприклад, експонентно спадна функція, що відповідає обмінній взаємодії

$$\Phi(r_{\mathbf{l}\mathbf{j}}) = A \exp\left(-\frac{r_{\mathbf{l}\mathbf{j}}}{b}\right), \quad (1.2.2)$$

де  $A$  – стала величина,  $b$  – радіус ефективної дії.

Як  $\Phi(r_{\mathbf{l}\mathbf{j}})$  можна використати також широко відомий потенціал взаємодії між найближчими сусідами:

$$\Phi_I(r_{\mathbf{l}\mathbf{j}}) = \begin{cases} J, & \text{для } \mathbf{l} = \mathbf{j} + \hat{\mathbf{i}}, \\ 0, & \text{для } \mathbf{l} \neq \mathbf{j} + \hat{\mathbf{i}}, \end{cases} \quad (1.2.3)$$

де  $\hat{\mathbf{i}}$  – набір одиничних векторів, спрямованих уздовж осей простої кубічної ґратки

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

або інший реалістичний потенціал взаємодії, для якого існує фур'є-образ.

Введемо об'єм періодичності  $\Lambda$  ( $V = Nc^3$ ,  $N$  – кількість частинок)

$$\Lambda = \{ \mathbf{l} = (l_x, l_y, l_z) \mid l_i = cn_i; \quad n_i = 1, 2, \dots, N_i, \quad i = x, y, z \}, \quad (1.2.4)$$

де  $c$  – стала простої кубічної ґратки,  $N_i^3 = N$ . Блок  $\Lambda$  задовільняє циклічним граничним умовам. Запишемо розклад

$$\Phi(r_{ij}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \in B} \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}(1-j)},$$

де  $\tilde{\Phi}(\mathbf{k})$  – фур'є-образ потенціалу  $\Phi(r_{ij})$ . Хвильовий вектор  $\mathbf{k}$  пробігає всі значення всередині першої зони Бріллюена:

$$B = \left\{ \mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) \mid k_i = -\frac{\pi}{c} + \frac{2\pi}{c} \frac{n_i}{N_i}; \quad n_i = 1, 2, \dots, N_i \right\}. \quad (1.2.5)$$

Для експонентно спадаючого потенціалу (1.2.2) фур'є-образ  $\tilde{\Phi}(\mathbf{k})$  має вигляд [16]

$$\tilde{\Phi}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{n}} A \left( \frac{b}{c} \right)^3 \frac{8\pi}{[1 + b^2(\mathbf{k} + 2\mathbf{n}B)^2]^2}, \quad (1.2.6)$$

де  $B = \pi/c$  – границя півзони першої зони Бріллюена;  $\mathbf{n}$  – вектор кубічної ґратки з періодом 1:  $\mathbf{n} = n_x \mathbf{i}_0 + n_y \mathbf{j}_0 + n_z \mathbf{k}_0$ . Для потенціалу, що характеризує взаємодію між найближчими сусідами (1.2.3), маємо

$$\tilde{\Phi}_I(\mathbf{k}) = 2J \sum_{l=1}^d \cos(k_l c), \quad (1.2.7)$$

де  $J$  – постійна взаємодії найближчих сусідів. Розмірність простору  $d = 3$ . Обидва потенціали (1.2.6) і (1.2.7) є періодичними функціями з періодом  $2B$  для випадку простої кубічної ґратки. У подальших викладах<sup>1</sup> ми використовуватимемо потенціал (1.2.2) або його фур'є-образ (1.2.6), схематично зображений на рис. 1.1. Для конкретних викладок обмежимося параболічною

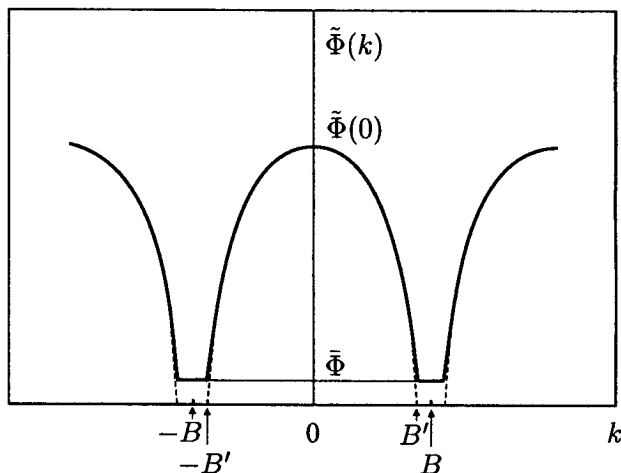


Рис. 1.1. Фур'є-образ потенціалу взаємодії як функція модуля хвильового вектора  $k$  (суцільна крива), а також його параболічна апроксимація (пунктирна крива)

апроксимацією  $\tilde{\Phi}(k)$  поблизу точки  $k = 0$ . Для цього розкладемо (1.2.6) у ряд за степенями хвильового вектора:

$$\tilde{\Phi}(k) = \tilde{\Phi}(0) - pk^2 + O(k^4). \quad (1.2.8)$$

<sup>1</sup>Надалі, для скорочення запису формул, позначатимемо векторні величини жирними літерами ( $\vec{k} = k$  – хвильовий вектор), а їхні абсолютні значення – звичайними літерами ( $k = |\vec{k}|$  – модуль вектора  $k$ ).

Тут

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}(0) &= A \left(\frac{b}{c}\right)^3 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{8\pi}{[1 + b^2 n^2 (2B)^2]^2}, \\ p &= A \left(\frac{b}{c}\right)^3 8\pi 2b^2 \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \frac{1}{[1 + b^2 n^2 (2B)^2]^3} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{2b^2 n^2 (2B)^2}{[1 + b^2 n^2 (2B)^2]^4} \right\}. \end{aligned} \quad (1.2.9)$$

Причому,  $p \approx 2b^2 \Phi(0)$ . Мінімум виразу (1.2.6) досягається на границі зони Бріллюена в точках  $k_i = (2n + 1)B$ . У цих точках  $\Phi(B) = \Phi_{min}$ . Відношення максимального та мінімального значень  $\tilde{\Phi}(k)$  за порядком величини дорівнює

$$\frac{\tilde{\Phi}(B)}{\tilde{\Phi}(0)} \approx \left[ 1 + \pi^2 \left(\frac{b}{c}\right)^2 \right]^{-2}.$$

Воно суттєво зменшується зі збільшенням радіуса ефективної взаємодії  $b$  порівняно зі сталою ґратки  $c$ .

Гамільтоніан моделі (1.2.1) подамо у вигляді ( $\hbar = 0$ ):

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{j}} \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{l}-\mathbf{j})} \sigma_{\mathbf{l}} \sigma_{\mathbf{j}}, \quad (1.2.10)$$

де хвильовий вектор  $\mathbf{k}$  змінюється у межах першої зони Бріллюена. Запишемо фур'є-образ експонентно спадаючого потенціалу (1.2.2) у вигляді

$$\tilde{\Phi}(\mathbf{k}) = \frac{\tilde{\Phi}(0)}{(1 + b^2 k^2)^2}, \quad \tilde{\Phi}(0) = A 8\pi \left(\frac{b}{c}\right)^3. \quad (1.2.11)$$

Величина  $r_{\mathbf{l}\mathbf{j}} = |\mathbf{l} - \mathbf{j}|$  відповідає відстані між частинками розміщеними у вузлах  $\mathbf{l}$  і  $\mathbf{j}$  простої кубічної ґратки з періодом  $c$ . Для хвильових векторів  $\mathbf{k}$ , близьких за величиною до границі зони Бріллюена  $B = \pi/c$ , величина  $\tilde{\Phi}(\mathbf{k})$  – близька до нуля.

У зв'язку з цим скористаємось для  $\tilde{\Phi}(k)$  наступною апроксимацією. Вважатимемо, що всередині сфери радіуса  $B' = (b\sqrt{2})^{-1}$  для величини  $\tilde{\Phi}(k)$  справедлива параболічна апроксимація (див. рис. 1.1), а поза цією сферою вона дорівнює деякій постійній величині, тобто

$$\tilde{\Phi}(k) = \begin{cases} \tilde{\Phi}(0) (1 - 2b^2k^2) & \text{при } \mathbf{k} \in \mathcal{B}_0, \\ \tilde{\Phi} & \text{при } \mathbf{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0. \end{cases} \quad (1.2.12)$$

Координата точки  $B'$  визначається із умови застосовності параболічної апроксимації, а саме  $(1 - 2b^2k^2) = 0$ , і залежить від величини  $b$ . Відповідно до умови задачі,  $B' \leq B$ . Тому, отримуємо обмеження на величину  $b$ . У граничному випадку ( $B' = B$ ) для величини  $b$  знаходимо

$$b_{min} = \frac{c}{(\pi\sqrt{2})}. \quad (1.2.13)$$

Для такого значення  $b$  параболічна апроксимація для  $\tilde{\Phi}(k)$  (1.2.12) справедлива для всіх  $k \in [0, B]$ . У загальному випадку  $b \geq b_{min}$ . Зона Бріллюена  $\mathcal{B}_0$  відповідає об'єму періодичності

$$\Lambda_0 = \{ \mathbf{l} = (l_x, l_y, l_z) \mid l_i = c' n_i; \quad n_i = 1, 2, \dots, N'_i, \quad i = x, y, z \}$$

з циклічними граничними умовами, де  $c' = cs_0$ ,  $s_0 = B/B'$ , а  $N'_x N'_y N'_z = N'$ , ( $N' = N s_0^{-3}$ ). Для такої блочної ґратки маємо зону Бріллюена

$$\mathcal{B}_0 = \left\{ \mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) \mid k_i = -\frac{\pi}{c'} + \frac{2\pi}{c'} \frac{n_i}{N'_i}; \quad n_i = 1, 2, \dots, N'_i \right\}. \quad (1.2.14)$$

Нижче використовуватимемо наближення, вважаючи, що величина  $\tilde{\Phi}(k)$  не залежить від хвильового вектора в області значень  $B' < k \leq B$ . Воно не є принциповим і не приводить до зменшення загальності задачі. В цій області значень  $\mathbf{k}$  залежність фур'є-образу потенціалу взаємодії від хвильового вектора є слабкою. Це дає змогу замінити  $\tilde{\Phi}(k)$  для всіх  $\mathbf{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0$  деякою сталою величиною  $\tilde{\Phi}$ . На першому етапі розрахунків вважатимемо, що ця постійна дорівнює нулеві.

Порівняймо прийняте нами наближення для потенціалу (1.2.12) з іншими потенціалами, які широко застосовують при дослідженні фазових переходів. Одним з традиційних типів взаємодій, які використовують при описі ФП, є потенціал взаємодії найближчих сусідів (1.2.3) з фур'є-образом (1.2.7). У рамках параболічної апроксимації для (1.2.7) знаходимо

$$\tilde{\Phi}_I(k) = 2dJ \left( 1 - \frac{c^2 k^2}{2d} \right). \quad (1.2.15)$$

У випадку, коли

$$\tilde{\Phi}(0) = 2dJ, \quad b_I = \frac{c}{2\sqrt{d}} \quad (1.2.16)$$

вирази (1.2.12) і (1.2.15) співпадають при  $k \leq B'$ .

Розглянемо загальніший випадок. Нехай система, яку ми досліджуємо, описується складнішим потенціалом. При цьому частинки першої координаційної сфери взаємодіють з інтенсивністю  $J$ , постійна взаємодії частинок другої координаційної сфери дорівнює  $J'$ , третьої  $J''$  і т. д. Фур'є-образ такого потенціалу взаємодії при малих значеннях хвильового вектора можна записати у вигляді:

$$\begin{aligned} \psi(k) = 2J \left[ d - \frac{k^2 c^2}{2} \right] + 2J'(d-1)(d - k^2 c^2) + \\ + 2J''(d-1)(d-2) \left( \frac{2d}{3} - k^2 c^2 \right). \end{aligned} \quad (1.2.17)$$

Представляючи його компактніше

$$\psi(k) = \psi(0)(1 - 2m^2 k^2), \quad (1.2.18)$$

знаходимо значення постійних  $\psi(0)$  та  $m$ . Для  $\psi(0)$  маємо

$$\psi(0) = 2dJ [1 + (d-1)\sigma' + 2/3(d-1)(d-2)\sigma''], \quad (1.2.19)$$

де  $\sigma' = J'/J$ ,  $\sigma'' = J''/J$ , а для  $m^2$  знаходимо

$$m^2 = \frac{c^2}{4d} \frac{1 + 2(d-1)\sigma' + 2(d-1)(d-2)\sigma''}{1 + (d-1)\sigma' + 2/3(d-1)(d-2)\sigma''}. \quad (1.2.20)$$



Величина  $m$  має зміст радіуса дії  $b$ , який характеризує експонентно спадний потенціал. Порівнюючи (1.2.18)–(1.2.20) з виразом (1.2.12) (який використовуватиметься нами у дальших розрахунках) можна встановити таку відповідність. У випадку взаємодії тільки близьких сусідів ( $J' = J'' = 0$ ) потенціал (1.2.12) співпадає з (1.2.18) за умов (1.2.16). У випадку врахування взаємодії перших і других сусідів, з постійними взаємодіями  $J$  і  $J'$  (і відповідно  $J'' = 0$ ) вирази (1.2.12) і (1.2.18) співпадають за виконання рівностей:

$$\tilde{\Phi}(0) = 2dJ (1 + 2\sigma'), \quad b = b_{II} = \frac{c}{2\sqrt{d}} \left( \frac{1 + 4\sigma'}{1 + 2\sigma'} \right)^{1/2}. \quad (1.2.21)$$

Однак варто підкреслити, що величина  $\sigma'$  тут фіксована ( $\sigma' = 0.2935$ ,  $\sigma'' = 0$ ). Останнє пов'язане з тим, що для експонентно спадного потенціалу (розглядаємо просту кубічну ґратку з періодом  $c$ ) величини

$$J = A e^{-c/b}, \quad J' = A e^{-c\sqrt{2}/b}, \quad J'' = A e^{-c\sqrt{3}/b} \quad (1.2.22)$$

пов'язані між собою так, що

$$\sigma' = e^{-(\sqrt{2}-1)c/b_{II}}, \quad \sigma'' = e^{-(\sqrt{3}-1)c/b_{II}}.$$

Самоузгоджене обчислення величини  $b_{II}$  приводить до значень:

$$b_{II} = 0.3379, \quad \sigma' = 0.2935. \quad (1.2.23)$$

У випадку додаткового врахування взаємодії третіх сусідів отримемо:

$$b_{III} = 0.3584, \quad \sigma' = 0.3148, \quad \sigma'' = 0.1297. \quad (1.2.24)$$

Отже, використання при визначенні моделі параболічної апроксимації фур'є-образу експонентно спадного потенціалу взаємодії (1.2.2) дає змогу співставити його з потенціалом взаємодії найближчих сусідів у випадку, коли  $b = b_I$  (і виконуються рівності (1.2.16)); перших і других сусідів за умови  $b = b_{II}$  і  $J' = 0.2935J$

(див. (1.2.21) і (1.2.23)); а також перших, других і третіх сусідів, коли  $J' = 0.3584J$ ,  $J'' = 0.1297J$  при  $b = b_{III}$  із (1.2.24).

Існування фур'є-образу потенціалу взаємодії є необхідною умовою застосовності методу колективних змінних. Множина колективних змінних була введена у працях Д. Бома і Д. Пайнса (див., наприклад, [267]). Ідея про використання фазового простору КЗ при розрахунку статистичної суми системи йонів за допомогою якобіану переходу було висловлена М. Боголюбовим та реалізована Д. Зубаревим [287]. Систематичне вирішення цієї проблеми було здійснене в [246]. У цій праці, ще задовго до праць К. Вільсона [89–93], статистична сума системи  $N$ -взаємодіючих частинок була представлена у вигляді функціонального інтегралу, який часто називають сьогодні формою Гінзбурґа–Ландау–Вільсона.

У багатьох задачах фізики для вирішення проблеми теоретичного опису явища фазового переходу використовується модельний гамільтоніан ізінґівського типу. Наприклад, у задачі про фазовий перехід в бінарній системі взаємодіючих частинок сорту  $a$  і  $b$ , вихідним є гамільтоніан виду [288, 289]

$$H = K_{N_a N_b} + \frac{1}{2} \sum_{\gamma, \delta=a, b} \sum_{l, j} U_{\gamma\delta}(r_{lj}) n_\gamma(\mathbf{r}_l) n_\delta(\mathbf{r}_j) - \sum_{\gamma=a, b} \mu_\gamma \sum_l n_\gamma(\mathbf{r}_l), \quad (1.2.25)$$

де  $K_{N_a N_b}$  – кінетична енергія системи,  $U_{\gamma\delta}(r_{lj})$  – потенціал взаємодії між частинкою сорту  $\gamma$ , що перебуває у точці  $\mathbf{r}_l$  і частинкою сорту  $\delta$ , що перебуває у точці  $\mathbf{r}_j$ ,  $\mu_\gamma$  – хімічний потенціал частинки сорту  $\gamma$ . Числа  $n_\gamma(\mathbf{r}_l)$  приймають значення:  $n_\gamma(\mathbf{r}_l)$  дорівнює одиниці, якщо у точці  $\mathbf{r}_l$  перебуває частинка сорту  $\gamma$  і дорівнює нулеві, якщо у точці  $\mathbf{r}_l$  перебуває частинка сорту  $\delta$ .

Використовуючи в (1.2.25) співвідношення

$$n_\gamma(\mathbf{r}_l) = \frac{1 + \sigma(\mathbf{r}_l)}{2}, \quad n_\delta(\mathbf{r}_l) = \frac{1 - \sigma(\mathbf{r}_l)}{2},$$

переходимо до формалізму спінових змінних  $\sigma(\mathbf{r}_l)$ . Маємо:

$$H = K_{N_a N_b} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{l,j=1 \\ l \neq j}}^N \left\{ V(r_{lj}) + W(r_{lj}) \sigma(\mathbf{r}_l) \sigma(\mathbf{r}_j) + y(r_{lj}) \sigma(\mathbf{r}_l) \right\} - \frac{1}{2} (\mu_a + \mu_b) - \frac{1}{2} (\mu_a + \mu_b) \sum_{l=1}^N \sigma(\mathbf{r}_l), \quad (1.2.26)$$

де  $r_{lj} = |\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j|$ ,

$$\begin{aligned} V(r_{lj}) &= \frac{1}{4} [U_{aa}(r_{lj}) + U_{bb}(r_{lj}) + 2U_{ab}(r_{lj})], \\ W(r_{lj}) &= \frac{1}{4} [U_{aa}(r_{lj}) + U_{bb}(r_{lj}) - 2U_{ab}(r_{lj})], \\ y(r_{lj}) &= \frac{1}{2} [U_{aa}(r_{lj}) - U_{bb}(r_{lj})]. \end{aligned}$$

Потенціал взаємодії  $U_{\gamma\delta}(r_{lj})$  представляють у вигляді суми двох доданків

$$U_{\gamma\delta}(r_{lj}) = \psi_{\gamma\delta}(r_{lj}) + \Phi_{\gamma\sigma}(r_{lj}),$$

де  $\psi_{\gamma\delta}(r_{lj})$  – потенціал, що описує відштовхування на малих відстанях. Цей потенціал, зазвичай, вибирається у вигляді потенціалу взаємодії між двома пружними кульками  $\sigma_{\gamma\gamma}$  і  $\sigma_{\delta\delta}$ . Величина  $\Phi_{\gamma\delta}(r_{lj})$  описує притягання. Задачу про фазові переходи у бінарній системі, що описується гамільтоніаном (1.2.26), можна звести до ізінгоподібної задачі, якщо ввести такі наближення:

1. Пружні кульки мають однакові діаметри  $\sigma_{aa} = \sigma_{bb} = \sigma_{ab} = \sigma$ , звідки  $\psi_{aa}(r_{lj}) = \psi_{bb}(r_{lj}) = \psi_{ab}(r_{lj}) = \psi(r_{lj})$ ;
2. Потенціали притягання між частинками одного сорту однакові, але відмінні від потенціалу притягання між частинками різних сортів:

$$\Phi_{aa}(r_{lj}) = \Phi_{bb}(r_{lj}) = \Phi(r_{lj}) \neq \Phi_{ab}(r_{lj}).$$

У цьому випадку гамільтоніан (1.2.26) трансформується до вигляду

$$\begin{aligned}
 H = & K_{N_a N_b} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{l,j=1 \\ l \neq j}}^N \left[ \psi(r_{lj}) + V'(r_{lj}) - \frac{\mu_a + \mu_b}{2} \right] + \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{\substack{l,j=1 \\ l \neq j}}^N W'(r_{lj}) \sigma(\mathbf{r}_l) \sigma(\mathbf{r}_j) - h \sum_{l=1}^N \sigma(\mathbf{r}_l),
 \end{aligned} \tag{1.2.27}$$

де для  $V'(r_{lj})$ ,  $W'(r_{lj})$  і  $h$  маємо вирази:

$$\begin{aligned}
 V'(r_{lj}) &= \frac{1}{2} [\Phi(r_{lj}) + \Phi_{ab}(r_{lj})], \\
 W'(r_{lj}) &= \frac{1}{2} [\Phi(r_{lj}) - \Phi_{ab}(r_{lj})], \\
 h &= \frac{1}{2} (\mu_a - \mu_b).
 \end{aligned}$$

Гамільтоніан (1.2.27) містить “спінові взаємодії”, енергію спінів у полі  $h$ , і потенціал, що залежить тільки від координат частинок. Виходячи з цього гамільтоніану можна проводити дослідження фазових переходів типу газ–рідина і розшарування у бінарній системі. Загалом, як показано в працях [46,290], такий гамільтоніан містить, крім парних, і багаточастинкові взаємодії.

Можна навести й інші приклади фізичних моделей з фазовим переходом другого роду, гамільтоніани яких зводяться до гамільтоніану моделі Ізінга. Викладений нижче підхід до опису подій поблизу ТФП у випадку використання гамільтоніану Ізінга з експонентно спадним потенціалом взаємодії між частинками можна використати для широкого класу задач статистичної фізики.

### 1.3. Фазовий простір колективних змінних

Ефективність статистичного опису фізичних процесів пов'язана з вибором множини змінних, за допомогою яких виконуються розрахунки. Кожна така множина має давати адекватний опис системи, якщо вона задовільняє відповідним умовам. Таке відбувається, якщо мова йде про точний розв'язок задачі. Однак у випадку наближеного розрахунку, кожен фізичну величину описують з певним ступенем точності. Повнота опису системи стає залежною від вдалого вибору множини змінних. Для опису ФП однією з найефективніших є множина колективних змінних. Це зрозуміло й на інтуїтивному рівні, оскільки, фазові переходи пов'язані з колективними ефектами, а КЗ є модами коливань спінового моменту, якщо мова йде про опис магнетних систем.

Розглянемо оператори коливань спінової густини [291, 292]

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^c &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{l}} \sigma_{\mathbf{l}} \cos(\mathbf{k}\mathbf{l}), \\ \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^s &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{l}} \sigma_{\mathbf{l}} \sin(\mathbf{k}\mathbf{l}), \\ \hat{\rho}_0 &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{l}} \sigma_{\mathbf{l}}.\end{aligned}\tag{1.3.1}$$

Множину КЗ  $\rho_{\mathbf{k}}^c, \rho_{\mathbf{k}}^s, \rho_0$  визначимо за допомогою співвідношень типу аналітичного функціоналу [242, 244]

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^c &= \int \rho_{\mathbf{k}}^c \mathcal{J}(\rho - \hat{\rho})(d\rho)^N, \\ \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^s &= \int \rho_{\mathbf{k}}^s \mathcal{J}(\rho - \hat{\rho})(d\rho)^N, \\ \hat{\rho}_0 &= \int \rho_0 \mathcal{J}(\rho - \hat{\rho})(d\rho)^N,\end{aligned}\tag{1.3.2}$$

де  $\mathcal{J}(\rho - \hat{\rho})$  – оператор переходу, який забезпечує виконання рів-

ностей (1.3.2), перетворюючи їх у тотожності, оскільки

$$\mathcal{J}(\rho - \hat{\rho}) = \delta(\rho_0 - \hat{\rho}_0) \prod_{\mathbf{k}}' \delta(\rho_{\mathbf{k}}^c - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^c) \delta(\rho_{\mathbf{k}}^s - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^s). \quad (1.3.3)$$

Штрих біля знаку добутку в (1.3.3) означає, що добуток за  $\mathbf{k}$  виконується у верхньому півкубі зони Бріллюена  $\mathcal{B}$  і, що  $k \neq 0$ ;  $(d\rho)^N$  – елемент об'єму фазового простору КЗ

$$(d\rho)^N = d\rho_0 \prod_{\mathbf{k}}' d\rho_{\mathbf{k}}^c d\rho_{\mathbf{k}}^s. \quad (1.3.4)$$

Надалі вважатимемо, що для колективних змінних  $\rho_{\mathbf{k}}^c, \rho_{\mathbf{k}}^s$  відповідно до (1.3.1) виконуються такі симетричні співвідношення

$$\rho_{\mathbf{k}}^c = \rho_{-\mathbf{k}}^c, \quad \rho_{\mathbf{k}}^s = -\rho_{-\mathbf{k}}^s. \quad (1.3.5)$$

Для конкретних розрахунків запишемо оператор переходу (1.3.3) у вигляді функціонального інтегралу. Скориставшись з інтегрального представлення  $\delta$ -функції знаходимо:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\rho - \hat{\rho}) = \int (d\rho)^N \cdot \exp \left\{ 2\pi i [\omega_0(\rho_0 - \hat{\rho}_0) + \right. \\ \left. + \sum_{\mathbf{k}}' [\omega_{\mathbf{k}}^c(\rho_{\mathbf{k}}^c - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^c) + \omega_{\mathbf{k}}^s(\rho_{\mathbf{k}}^s - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^s)] \right\}, \end{aligned} \quad (1.3.6)$$

де елемент об'єму змінних  $\omega$  має вигляд

$$(d\omega)^N = d\omega_0 \prod_{\mathbf{k}}' d\omega_{\mathbf{k}}^c d\omega_{\mathbf{k}}^s. \quad (1.3.7)$$

Змінні  $\omega_{\mathbf{k}}^c, \omega_{\mathbf{k}}^s, \omega_0$  є спряженими з КЗ  $\rho_{\mathbf{k}}^c, \rho_{\mathbf{k}}^s, \rho_0$  відповідно. Використовуючи (1.3.6) легко пересвідчитися у справедливості спів-

відношень (1.3.2). Наприклад, для першого з них маємо:

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_{\mathbf{k}_1}^c &= \int \rho_{\mathbf{k}_1}^c \int d\omega_{\mathbf{k}_1} \exp[2\pi i \omega_{\mathbf{k}_1}^c (\rho_{\mathbf{k}_1}^c - \hat{\rho}_{\mathbf{k}_1}^c)] d\rho_{\mathbf{k}_1}^c = \\ &= \int \exp[-2\pi i \omega_{\mathbf{k}_1}^c \hat{\rho}_{\mathbf{k}_1}^c] \frac{1}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \omega_{\mathbf{k}_1}^c} \delta(\omega_{\mathbf{k}_1}^c) d\omega_{\mathbf{k}_1}^c = \\ &= -\frac{1}{2\pi i} \int \delta(\omega_{\mathbf{k}_1}^c) \frac{\partial}{\partial \omega_{\mathbf{k}_1}^c} \exp[-2\pi i \omega_{\mathbf{k}_1}^c \hat{\rho}_{\mathbf{k}_1}^c] d\omega_{\mathbf{k}_1}^c.\end{aligned}\quad (1.3.8)$$

Для зручності обчислень уведемо комплексні змінні

$$\rho_{\mathbf{k}} = \rho_{\mathbf{k}}^c - i\rho_{\mathbf{k}}^s, \quad (1.3.9)$$

що відповідають операторам

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}} = \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^c - i\hat{\rho}_{\mathbf{k}}^s, \quad (1.3.10)$$

а також спряжені з ними комплексні змінні

$$\omega_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}(\omega_{\mathbf{k}}^c + i\omega_{\mathbf{k}}^s). \quad (1.3.11)$$

Використаємо введені вище змінні для опису властивостей моделі з гамільтоніаном (1.2.1). Зокрема, у представленні КЗ гамільтоніан системи запишемо у вигляді:

$$\begin{aligned}H &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{l} - \mathbf{j})] \sigma_{\mathbf{j}} - h \sum_{\mathbf{l}} \sigma_{\mathbf{l}} = \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{-\mathbf{k}} - h \sum_{\mathbf{l}} \sigma_{\mathbf{l}} = \\ &= \int \left( -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - h \sum_{\mathbf{l}} \sigma_{\mathbf{l}} \right) \mathcal{J}(\rho - \hat{\rho})(d\rho)^N.\end{aligned}\quad (1.3.12)$$

Для статистичного оператора  $\exp(-\beta H)$  маємо

$$e^{-\beta H} = \int \exp \left( \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right) \mathcal{J}_h(\rho - \hat{\rho})(d\rho)^N, \quad (1.3.13)$$

де  $\mathcal{J}_h(\rho - \hat{\rho}) = \mathcal{J}(\rho - \hat{\rho})e^{\beta h \sum_1 \sigma_1}$ , а  $\mathcal{J}(\rho - \hat{\rho})$  задається формулою (1.3.6). Використовуючи змінні  $\rho_{\mathbf{k}}$  і  $\omega_{\mathbf{k}}$ , вираз для  $\mathcal{J}(\rho - \hat{\rho})$  запишемо у компактнішій формі:

$$\mathcal{J}(\rho - \hat{\rho}) = \int \exp \left[ 2\pi i \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \omega_{\mathbf{k}} (\rho_{\mathbf{k}} - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}) \right] (d\rho)^N. \quad (1.3.14)$$

Справді, відповідно до рівностей (1.3.9), (1.3.11) маємо

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}}' (\omega_{\mathbf{k}}^c + i\omega_{\mathbf{k}}^s)(\rho_{\mathbf{k}}^c - i\rho_{\mathbf{k}}^s) + \omega_0 \rho_0 = \\ &= \sum_{\mathbf{k}}' (\omega_{\mathbf{k}}^c \rho_{\mathbf{k}}^c + \omega_{\mathbf{k}}^s \rho_{\mathbf{k}}^s) + \omega_0 \rho_0, \end{aligned}$$

причому

$$\rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} = (\rho_{\mathbf{k}}^c)^2 + (\rho_{\mathbf{k}}^s)^2 + \rho_0^2.$$

Сумуючи в (1.3.13) за спіновими станами, отримуємо вираз для статистичної суми системи у функціональній формі:

$$Z = \int \exp \left( \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right) \mathcal{J}(\rho) (d\rho)^N. \quad (1.3.15)$$

Величина

$$\mathcal{J}(\rho) = Sp \left[ \mathcal{J}(\rho - \hat{\rho}) e^{\beta h \sum_1 \sigma_1} \right] \quad (1.3.16)$$

при  $h = 0$  має зміст якобіану переходу від множини спінових змінних до множини КЗ. Зауважимо, що представлення якобіану переходу у формі (1.3.16) є загальним<sup>2</sup>. Величини  $\rho_{\mathbf{k}}^c$ ,  $\rho_{\mathbf{k}}^s$ ,  $\rho_0 \in$

<sup>2</sup>Наприклад, при переході від декартової системи координат  $x, y$  до полярної  $x = \rho \cdot \cos \varphi$ ,  $y = \rho \cdot \sin \varphi$  якобіан переходу при  $h = 0$  в запропонованій методиці має такий вигляд:

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



звичайними змінними, кожна з яких приймає дійсні значення від  $-\infty$  до  $\infty$ .

КЗ  $\rho_k^c$ ,  $\rho_k^s$ ,  $\rho_0$  є дійсною і уявною частинами величини  $\rho_k$ , яка пов'язана з фур'є-образом операторів спінової густини  $\sigma_l$ . Якобіан переходу  $\mathcal{J}(\rho)$  визначає густину розподілу нових (колективних) змінних  $\rho_k$  відносно розміщення вихідних змінних  $\sigma_l$ .

## 1.4. Якобіан переходу до колективних змінних

Запишемо явний вираз для якобіану переходу від спінових до колективних змінних. Для цього використаємо співвідношення (1.3.16) і явний вираз для оператора переходу  $\mathcal{J}(\rho - \hat{\rho})$ , що заданий у (1.3.14). У результаті маємо<sup>3</sup>

$$\mathcal{J}(\rho) = Sp \int \exp \left[ 2\pi i \sum_{k \in B} \omega_k (\rho_k - \hat{\rho}_k) + \beta h \sum_{l \in \Lambda} \sigma_l \right] (d\omega)^N. \quad (1.4.1)$$

Після операції сумування за спіновими станами в (1.4.1) знаходимо

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\rho) = & \int \exp \left( 2\pi i \sum_k \omega_k \rho_k \right) \times \\ & \times \prod_l 2 \operatorname{ch} \left[ -2\pi i \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp(-ikl) \omega_k + \beta h \right] (d\omega)^N. \end{aligned} \quad (1.4.2)$$

Змінні  $\omega_k$  спряжені із змінними  $\rho_k$ , і їх розглядатимемо як величини, що описують моди коливань напруженості внутрішнього поля.

<sup>3</sup>Надалі у формулах цього розділу для скорочення запису не відзначатимемо, що хвильові вектори  $k \in B$ , а  $l \in \Lambda$ , оскільки  $k$  прийматиме значення лише з  $B$ .

Виконаємо в (1.4.2) заміну змінних, увівши вузлові змінні  $\tilde{\omega}_1$  і  $\tilde{\rho}_1$ , що зв'язані з  $\omega_{\mathbf{k}}$  і  $\rho_{\mathbf{k}}$  співвідношеннями:

$$\tilde{\omega}_1 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{l}), \tilde{\rho}_1 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{l}). \quad (1.4.3)$$

Така заміна змінних дає змогу розділити змінні інтегрування у виразі (1.4.2) й отримати для  $\mathcal{J}(\rho)$  вираз

$$\mathcal{J}(\rho) = j \prod_1 2 \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{\omega}_1 \exp(2\pi i \tilde{\omega}_1 \tilde{\rho}_1) \operatorname{ch}(-2\pi i \tilde{\omega}_1 + \beta h). \quad (1.4.4)$$

Множник  $j = \sqrt{2}^{N-1}$  є якобіаном переходу від змінних  $\omega_{\mathbf{k}}$  до вузлових змінних  $\tilde{\omega}_1$ , означених у (1.4.3), (1.3.11). При цьому:

$$d\omega_0 \prod_{\mathbf{k}} d\omega_{\mathbf{k}}^c d\omega_{\mathbf{k}}^s = j \prod_1 d\tilde{\omega}_1. \quad (1.4.5)$$

Величина (1.4.4) може бути представлена у явному вигляді, як функція змінної  $\tilde{\rho}_1$ . Виконуючи інтегрування за змінними  $\tilde{\omega}_1$  знаходимо

$$\mathcal{J}(\rho) = j \prod_1 \left[ e^{-\beta h} \delta(\tilde{\rho}_1 + 1) + e^{\beta h} \delta(\tilde{\rho}_1 - 1) \right]. \quad (1.4.6)$$

Отриманий вираз визначає при  $h = 0$  якобіан переходу від множини спінових змінних  $\sigma_1$  до колективних змінних  $\tilde{\rho}_1$  і є компактним, однак тривіальним за своєю суттю. У випадку  $h = 0$  для статистичної суми (1.3.15) з врахуванням (1.4.6) маємо звичайне представлення через  $\delta$ -функції, яке свідчить про те, що змінні  $\tilde{\rho}_1$  приймають значення  $\pm 1$ . При цьому виконується загальна умова

нормування якобіану переходу<sup>4</sup>

$$\int \mathcal{J}(\rho)(d\rho)^N = 2^N. \quad (1.4.7)$$

Якобіан переходу представитимемо у вигляді експоненти, показник якої має вигляд многочлена за степенями  $\tilde{\rho}_1$ . Тому підінтегральний вираз у (1.4.4) доцільно представити у формі експоненти, показник якої є многочленом за степенями змінної  $\tilde{\omega}_1$ . Для  $\text{ch}(\dots)$  у (1.4.4) запишемо кумулянтну форму

$$\text{ch}(-2\pi i \tilde{\omega}_1 + h') = \exp \left[ \sum_{n \geq 0} \tilde{D}_n(\tilde{\omega}_1) \right], \quad (1.4.8)$$

де  $h' = \beta h$ ,

$$\tilde{D}_n(\tilde{\omega}_1) = \frac{(-2\pi i)^n}{n!} \mathcal{M}_n(h') \tilde{\omega}_1^n. \quad (1.4.9)$$

Величини  $\tilde{D}_n(\tilde{\omega}_1)$  повністю визначаються кумулянтами  $\mathcal{M}_n(h')$ , для яких маємо співвідношення:

$$\mathcal{M}_0(h') = \ln(\text{ch } h'), \quad \mathcal{M}_n(h') = \frac{\partial^n \mathcal{M}_0(h')}{\partial (h')^n}. \quad (1.4.10)$$

Якщо ввести позначення

$$x_1 = \text{th } h', \quad y_1 = 1 - \text{th}^2 h',$$

то для  $\mathcal{M}_n(h')$  знаходимо

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_1 &= x_1, & \mathcal{M}_2 &= y_1, & \mathcal{M}_3 &= -2x_1 y_1, \\ \mathcal{M}_4 &= -2y_1^2 + 4x_1^2 y_1, & \mathcal{M}_5 &= 16x_1 y_1^2 - 8x_1^3 y_1, \\ \mathcal{M}_6 &= 16y_1^3 - 88x_1^2 y_1^2 + 16x_1^4 y_1, \end{aligned}$$

<sup>4</sup>Справді, приймаючи до уваги, що  $(d\rho)^N = (j)^{-1} \prod_1 d\tilde{\rho}_1$ , і здійснюючи інтегрування в (1.4.6) за змінними  $\tilde{\rho}_1$ , отримуємо рівність:

$$\int \mathcal{J}(\rho)(d\rho)^N = 2^N (\text{ch } \beta h)^N.$$

У границі  $h \rightarrow 0$  отримуємо відомий результат (1.4.7).

тощо. Загальні вирази<sup>5</sup> для кумулянтів  $\mathcal{M}(h')$  можна знайти у праці [293]. У випадку відсутності поля ( $h = 0$ ) отримуємо

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_0 &= 0, & \mathcal{M}_{2n+1} &= 0, \\ \mathcal{M}_2 &= 1, & \mathcal{M}_4 &= -2, & \mathcal{M}_6 &= 16, & \dots \end{aligned} \quad (1.4.11)$$

Підставляючи (1.4.8) і (1.4.11) у (1.4.4) знаходимо

$$\mathcal{J}(\rho) = j 2^N \prod_1 \mathcal{J}_1(\tilde{\rho}_1), \quad (1.4.12)$$

де

$$\mathcal{J}_1(\tilde{\rho}_1) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{\omega}_1 \exp \left[ 2\pi i \tilde{\rho}_1 \tilde{\omega}_1 + \sum_{n \geq 1} \tilde{D}_{2n}(\tilde{\omega}_1) \right]. \quad (1.4.13)$$

У термінах змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$ ,  $\omega_{\mathbf{k}}$  для якобіану переходу маємо вираз:

$$\mathcal{J}(\rho) = 2^N \int (d\omega)^N \exp \left[ 2\pi i \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} + \sum_{n \geq 1} D_{2n}(\omega) \right], \quad (1.4.14)$$

де

$$D_{2n}(\omega) = \frac{(2\pi i)^{2n}}{(2n)!} \frac{\mathcal{M}_{2n}}{N^{n-1}} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}} \omega_{\mathbf{k}_1} \dots \omega_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}}. \quad (1.4.15)$$

---

5

$$\mathcal{M}_7 = -272x_1y_1^3 + 416x_1^3y_1^2 - 32x_1^5y_1,$$

$$\mathcal{M}_8 = -272y_1^4 - 2880x_1^2y_1^3 + 1824x_1^4y_1^2 + 64x_1^5y_1,$$

$$\mathcal{M}_9 = 7936x_1y_1^4 - 24576x_1^3y_1^3 + 7680x_1^5y_1^2 - 128x_1^7y_1,$$

$$\mathcal{M}_{10} = 7936y_1^5 - 14521x_1^2y_1^4 + 185856x_1^4y_1^3 - 31776x_1^6y_1^2 + 256x_1^8y_1, \dots$$

У виразі (1.4.12) змінні інтегрування розділяються і тому виникають однократні інтеграли (1.4.13). Кожний доданок суми  $\sum_{n \geq 1} \tilde{D}_{2n}(\tilde{\omega}_1)$  відповідно до рівностей (1.4.11) має від'ємний знак:

$$\sum_{n \geq 1} \tilde{D}_{2n}(\tilde{\omega}_1) = -\frac{(2\pi)^2}{2!} \tilde{\omega}_1^2 - \frac{(2\pi)^4}{4!} 2\tilde{\omega}_1^4 - \frac{(2\pi)^6}{6!} 16\tilde{\omega}_1^6 - \dots \quad (1.4.16)$$

і, отже, інтеграл (1.4.13) завжди збіжний. Обчислення явного виразу (1.4.14) пов'язане з чисто технічними труднощами, оскільки показник експоненти підінтегральної функції містить безмежний ряд за степенями змінної  $\tilde{\omega}_1$ . Аналітичне інтегрування за  $\tilde{\omega}_1$  у (1.4.13) можна виконати тільки в деяких наближеннях для суми  $\sum_n \tilde{D}_n(\tilde{\omega}_1)$ . Оскільки інтеграл у (1.4.13) однократний, то обчислення  $J_1(\tilde{\rho}_1)$  можна зробити з досить високою точністю.

У будь-якому випадку, для якобіану переходу  $J(\rho)$  одержуємо такий загальний вираз

$$\mathcal{J}(\tilde{\rho}_1) = C_0 \exp \left[ - \sum_{n \geq 1} \frac{a_{2n}}{(2n)!} (\tilde{\rho}_1)^{2n} \right]. \quad (1.4.17)$$

Тут КЗ записані у вузловому представленні. Беручи до уваги співвідношення

$$\sum_1 \tilde{\rho}_1^{2n} = N^{(1-n)} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}}, \quad (1.4.18)$$

отримуємо вираз для якобіану переходу в  $\rho_{\mathbf{k}}$  представленні

$$\mathcal{J}(\rho) = 2^N j C_0^N \exp \left[ - \sum_{n \geq 1} \frac{a_{2n}}{(2n)!} \times \right. \\ \left. \times N^{(1-n)} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}} \right]. \quad (1.4.19)$$

Вище був приведений яacobіан переходу  $j$  від множини змінних  $\omega_{\mathbf{k}}$  до  $\tilde{\omega}_1$  (див. (1.4.5)). Відмінний від одиниці і яacobіан переходу від множини змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$  до множини  $\tilde{\rho}_1$ :

$$d\rho_0 \prod_{\mathbf{k}} d\rho_{\mathbf{k}}^c d\rho_{\mathbf{k}}^s = (j)^{-1} \prod_1 d\tilde{\rho}_1. \quad (1.4.20)$$

У справедливості (1.4.20) легко впевнитись<sup>6</sup>.

Постійну  $C_0$  знаходимо із умови:

$$C_0 = e^{a_0} = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tilde{\omega}_1) d\tilde{\omega}_1, \quad (1.4.22)$$

де

$$f(\tilde{\omega}_1) = \exp \sum_{n \geq 1} \tilde{D}_{2n}(\tilde{\omega}_1). \quad (1.4.23)$$

Коефіцієнти  $a_{2n}$  співвідношення (1.4.17) визначаємо з допомогою рівностей

$$a_{2n} = - \left( \frac{\partial^{2n} \ln J_1(\tilde{\rho}_1)}{\partial \rho_1^{2n}} \right)_{\tilde{\rho}_1=0}. \quad (1.4.24)$$

<sup>6</sup> Для цього скористаємось умовою нормування яacobіану переходу (1.4.7), яка справедлива для моделі Ізінга. Для  $\mathcal{J}(\rho)$  використаємо гаусове наближення

$$\mathcal{J}_G(\rho) = 2^N (\pi \mathcal{M}_2)^{-N/2} \frac{1}{\sqrt{2}} \exp \left( -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\mathcal{M}_2} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right) \quad (1.4.21)$$

в  $\rho_{\mathbf{k}}$  представленні, або вираз:

$$\mathcal{J}_G(\rho) = 2^N (\pi \mathcal{M}_2)^{-N/2} \frac{1}{\sqrt{2}} \exp \left( -\frac{1}{2} \sum_1 \frac{1}{\mathcal{M}_2} \tilde{\rho}_1^2 \right),$$

що відповідає вузловому представленню яacobіана переходу в гаусовому наближенні. Умова (1.4.7) справедлива лише при виконанні (1.4.20).

Введемо позначення

$$C_{2n} = (2\pi)^{2n} C_0^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\omega}_1^{2n} f(\tilde{\omega}_1) d\tilde{\omega}_1. \quad (1.4.25)$$

Для коефіцієнта  $a_2$  із рівностей (1.4.17) і (1.4.13), з врахуванням (1.4.25), знаходимо

$$a_2 = C_2, \quad a_2 = -2C_0^{-1} \frac{\partial C_0}{\partial \mathcal{M}_2}. \quad (1.4.26)$$

Подібно знаходимо вирази для обчислення коефіцієнта  $a_4$ :

$$a_4 = -C_4 + 3C_2^2, \quad a_4 = 3a_2^2 - 4C_0^{-1} \frac{\partial^2 C_0}{\partial \mathcal{M}_2^2}, \quad (1.4.27)$$

а також для  $a_6$ :

$$a_6 = C_6 - 15C_4C_2 + 30C_2^3, \quad (1.4.28)$$

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

У загальному вигляді для коефіцієнтів  $a_{2n}$  отримуємо

$$\begin{aligned} a_{2n} = & (-1)^{n+1} \left\{ C_{2n} - \left[ \frac{(2n)!}{(2n-2)!2!} C_{2n-2} C_2 + \right. \right. \\ & + \frac{(2n)!}{(2n-4)!4!} C_{2n-4} C_4 + \dots + \\ & + \left. \frac{(2n)!}{(2n-2m)!(2m)!} \left( 1 - \frac{1}{2} \delta_{n=2m} \right)_{2m \leq n} C_{2n-2m} C_{2m} \right] + \\ & + 2! \left[ \frac{(2n)!}{2!(2!)^2(2n-4)!} C_2^2 C_{2n-4} + \frac{(2n)!}{2!4!(2n-6)!} C_2 C_4 C_{2n-6} + \dots + \right. \\ & + \left. \frac{(2n)!}{2!(4!)^2(2n-8)!} C_4^2 C_{2n-8} + \frac{(2n)!}{4!6!(2n-10)!} C_4 C_6 C_{2n-10} + \dots \right] - \\ & - 3! \left[ \frac{(2n)!}{3!(2!)^3(2n-6)!} C_2^3 C_{2n-6} + \dots \right] + \dots + \\ & + (-1)^{n-1} (n-1)! \frac{(2n)!}{(2!)^n n!} C_2^n \left. \right\}. \end{aligned} \quad (1.4.29)$$

У табл. 1.1 подано коефіцієнти  $a_{2n}$  ( $n = 1 \div 15$ ), які отримані в різних наближеннях для функції  $f(\tilde{\omega}_1)$ , заданої формулами (1.4.15) і (1.4.23) [293, 294], причому гаусове наближення відповідає виразу

$$f_2(\tilde{\omega}_1) = \exp \left[ -\frac{(2\pi)^2}{2} \mathcal{M}_2 \tilde{\omega}_1^2 \right].$$

Для вищих наближень функції  $f(\tilde{\omega}_1)$  маємо таке представлення:

$$f_{2n}(\tilde{\omega}_1) = \exp \left[ -\frac{(2\pi)^2}{2!} \mathcal{M}_2 \tilde{\omega}_1^2 - \dots - \frac{(2\pi)^{2n}}{(2n)!} \mathcal{M}_{2n} \tilde{\omega}_1^{2n} \right]. \quad (1.4.30)$$

Табл. 1.1. Значення коефіцієнтів яacobіану переходу  $a_{2n}$  (1.4.24) для різних наближень функції  $f_{2n}(\tilde{\omega}_1)$  із (1.4.30)

$2n$	$a_2$	$a_4$	$a_6$	$a_8$	$a_{10}$
2	1.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
4	0.644929	0.182590	0.351372	1.576551	12.465218
6	0.558599	0.184499	0.362910	1.648496	13.179410
8	0.523425	0.181895	0.358755	1.626993	12.974113
10	0.505454	0.180031	0.355166	1.607468	12.785579
12	0.494987	0.178849	0.352793	1.594440	12.659695
14	0.488337	0.178089	0.351247	1.585932	12.577502
16	0.483844	0.177585	0.350217	1.580257	12.522718
18	0.480661	0.177238	0.349510	1.576365	12.485157
20	0.478324	0.176994	0.349012	1.573620	12.458680
22	0.476556	0.176816	0.348651	1.571635	12.439536
24	0.475187	0.176684	0.348384	1.570167	12.425378
26	0.474103	0.176584	0.348183	1.569059	12.414696
28	0.473232	0.176507	0.348028	1.568207	12.406492
30	0.472520	0.176447	0.347907	1.567543	12.400092



Гаусове наближення функції  $f(\tilde{\omega}_1)$  відповідає гаусовій формі якобіану переходу. Для четвірного наближення функції  $f(\tilde{\omega}_1)$  у виразі для  $J(\tilde{\rho}_1)$  в експоненті отримуємо безмежний ряд за степенями  $\tilde{\rho}_1$ . Такий самий ряд одержується і для вищих наближень для функції  $f(\tilde{\omega}_1)$ :  $f_6(\tilde{\omega}_1)$ ,  $f_8(\tilde{\omega}_1)$ , ... Коефіцієнти якобіану переходу  $a_{2n}$  мають певну залежність від наближення функції  $f_{2n}(\tilde{\omega}_1)$ . Причому при  $n = 3$  величини  $a_{2n}$  ( $n > 1$ ) приймають максимальні значення, а із збільшенням номера  $n$  є певне насичення значень коефіцієнтів  $a_{2n}$  (слабка залежність значень  $a_{2n}$  від наближення  $f_{2n}(\tilde{\omega}_1)$  для  $n > 3$ ).

## 1.5. Функціонал статистичної суми. Кореляційні функції

У попередньому параграфі отримані явні вирази для якобіану переходу  $J(\rho)$ , що задані формулами (1.4.14) і (1.4.19). Це дає змогу записати явний вираз для підінтегральної функції статистичної суми  $Z$  відповідно до формули (1.3.15). У випадку (1.4.19), коли якобіан представлений явною функцією змінних  $\rho_k$ , отримуємо

$$Z = C \int \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{k \in \mathcal{B}} d(k) \rho_k \rho_{-k} - \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} N^{1-n} a_{2n} \times \right. \\ \left. \times \sum_{\substack{k_1 \dots k_{2n} \\ k_i \in \mathcal{B}}} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_{2n}} \delta_{k_1 + \dots + k_{2n}} \right] (d\rho)^N. \quad (1.5.1)$$

Для коефіцієнта при квадратичному доданку за змінною  $\rho_k$  підінтегральної функції маємо

$$d_2(k) = a_2 - \beta \tilde{\Phi}(k), \quad (1.5.2)$$

Величину  $C$  задаємо виразом:

$$C = 2^N j C_0^N, \quad (1.5.3)$$

де постійна  $C_0$  приведена в (1.4.22), а величина  $j$  у (1.4.5). Інколи зручно використати інтегральну форму (1.4.14) для  $\mathcal{J}(\rho)$  і записати статистичну суму як функціональний інтеграл за змінними  $\omega_{\mathbf{k}}$ . У цьому випадку маємо<sup>7</sup>

$$Z = 2^N \int \exp \left( \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right) \times \\ \times \int \exp \left[ 2\pi i \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} + \sum_{n \geq 1} D_n(\omega) \right] (d\rho)^N (d\omega)^N. \quad (1.5.4)$$

Ми одержали дві різні функціональні форми для статистичної суми. Вони залишаються актуальними для довільних гамільтоніанів, що описують парну взаємодію. З форми (1.5.4) можна одержати інші відомі функціональні представлення для статистичної суми. Зокрема, використовуючи представлення Стратановича-Хаббарда, замінимо вираз  $\exp \left( \frac{1}{2} \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right)$  інтегралом

$$\exp \left( \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \prod_{\mathbf{k}} \left[ \pi \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \right]^{-1/2} \times \\ \times \int \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left( \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \right)^{-1} \psi_{\mathbf{k}} \psi_{-\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \right] (d\psi)^N, \quad (1.5.5)$$

де  $\psi_{\mathbf{k}} = \psi_{\mathbf{k}}^c + i\psi_{\mathbf{k}}^s$ ,  $(d\psi)^N = d\psi_0 \prod_{\mathbf{k}} d\psi_{\mathbf{k}}^c d\psi_{\mathbf{k}}^s$ , а також справедливе співвідношення:

$$\sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} = \psi_0 \rho_0 + 2 \sum_{\mathbf{k}}^l (\psi_{\mathbf{k}}^c \rho_{\mathbf{k}}^c + \psi_{\mathbf{k}}^s \rho_{\mathbf{k}}^s).$$

Підставляючи (1.5.5) в (1.5.4) і інтегруючи за змінними  $\rho_{\mathbf{k}}^c$  і

<sup>7</sup> Див. пояснення до формули (1.4.1).

$\rho_{\mathbf{k}}^s$ , отримаємо

$$Z = 2^N 2^{-1/2} \prod_{\mathbf{k}} [\pi \beta \tilde{\Phi}(k)]^{-1/2} \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \leq B} \frac{\psi_{\mathbf{k}} \psi_{-\mathbf{k}}}{\beta \tilde{\Phi}(k)} + \sum_{n \geq 1} D_n(\omega) \right\} \delta(\psi_0 - 2\pi i \omega_0) \prod_{\mathbf{k}} \delta(\psi_{\mathbf{k}}^c - 2\pi i \omega_{\mathbf{k}}^c) \times \delta(\psi_{\mathbf{k}}^s - 2\pi i \omega_{\mathbf{k}}^s) (d\psi)^N (d\omega)^N. \quad (1.5.6)$$

Дальші обчислення цього виразу можна здійснювати спочатку за змінними  $\psi_{\mathbf{k}}$ , а згодом за  $\omega_{\mathbf{k}}$ , або навпаки. Інтегруючи спочатку за  $\omega_{\mathbf{k}}$ , знаходимо

$$Z = 2^N \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\psi_{\mathbf{k}} \psi_{-\mathbf{k}}}{\beta \tilde{\Phi}(k)} + \sum_{n \geq 1} D'_n(\psi) \right\} \times \sqrt{2}^{-1} \prod_{\mathbf{k}} [\pi \beta \tilde{\Phi}(k)]^{-1/2} (d\psi)^N, \quad (1.5.7)$$

де

$$D'_n(\psi) = \frac{\mathcal{M}_n}{n! N^{(n-2)/2}} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n} \psi_{\mathbf{k}_1} \dots \psi_{\mathbf{k}_n} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n},$$

а коефіцієнти  $\mathcal{M}_n$ , як функції  $n$ , чергуються за знаком:  $\mathcal{M}_2 > 0$ ,  $\mathcal{M}_4 < 0$ ,  $\mathcal{M}_6 > 0$  і тощо.

Виконаний в статистичній сумі перехід до представлення колективних змінних для гамільтоніану (1.2.1), відповідає врахуванню парних взаємодій. У випадку використання гамільтоніанів, що містять парні, потрійні, четвірні і складніші форми взаємодій між частинками, приведені тут викладки дають змогу узагальнити задачу: якобіан залишається незмінним, а гамільтоніан виражатиметься поліномом за степенями  $\rho_{\mathbf{k}}$ .

Кореляційна функція для двох спінів, які розміщені в точках 1 і 2, визначається виразом:

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = Z^{-1} Sp \left[ \sigma_1 \sigma_2 e^{-\beta H} \right]. \quad (1.5.8)$$

Для гамільтоніану (1.2.1) цей вираз переходить у відому формулу для бінарної кореляційної функції

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = \frac{\delta F}{\delta \Phi(|\mathbf{1} - \mathbf{2}|)}, \quad (1.5.9)$$

де функціональна похідна вільної енергії  $F$  виконується за потенціалом обмінної взаємодії для частинок у вузлах  $\mathbf{1}$  і  $\mathbf{2}$  кристалічної ґратки. В методі колективних змінних кореляційні функції представляємо переважно у вигляді високогрупових розкладів, які справедливі в широкій області температур [46, 251, 256]. Дослідження збіжності виразів для кореляційних функцій, отриманих у методі КЗ, важливі при побудові теорії фазових переходів на мікроскопічному рівні.

Підставимо в (1.5.8) замість  $\exp(-\beta H)$  вирази (1.3.13), (1.3.14). У результаті отримуємо наступне представлення для парної кореляційної функції

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = Z^{-1} Sp \left\{ \sigma_1 \sigma_2 \int \exp \left[ -\beta H(\rho) + 2\pi i \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} (\rho_{\mathbf{k}} - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}) + \beta h \sum_{\mathbf{1}} \sigma_{\mathbf{1}} \right] (d\omega)^N (d\rho)^N \right\} \quad (1.5.10)$$

Сумування за спіновими станами зручно здійснювати, виділяючи у підінтегральній функції множники, що зв'язані з вузлами  $\mathbf{1}$  і  $\mathbf{2}$ . У результаті отримуємо

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = & Z^{-1} \int \exp \left[ -\beta H(\rho) + 2\pi i \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \right] \times \\ & \times Sp_1 \left\{ \sigma_1 \exp \left[ \sigma_1 \left( -\frac{2\pi i}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{1}} + \beta h \right) \right] \right\} \times \\ & \times Sp_2 \left\{ \sigma_2 \exp \left[ \sigma_2 \left( -\frac{2\pi i}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{2}} + \beta h \right) \right] \right\} \times \end{aligned}$$

$$\times Sp_{3\dots N} \left\{ \prod_{j=3}^N \exp \left[ \sigma_j \left( -\frac{2\pi i}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}j} + \beta h \right) \right] \right\} \times \\ \times (d\rho)^N (d\omega)^N. \quad (1.5.11)$$

Доповнюємо  $Sp_{3\dots N}\{\dots\}$  до  $Sp_{1\dots N}\{\dots\}$ . Шпур за спіновими станами веде до виразу

$$\text{th} \left[ -\frac{2\pi i}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}1} + \beta h \right] \text{th} \left[ -\frac{2\pi i}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}2} + \beta h \right] \times \\ \times 2^N \prod_{j=1}^N \text{ch} \left[ -\frac{2\pi i}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}j} + \beta h \right]. \quad (1.5.12)$$

Добуток  $\prod_j \text{ch}(\dots)$  записуємо з врахуванням кумулянтного розкладу

$$\text{ch}(-2\pi i \tilde{\omega}_j + h') = \exp \left( \sum_n \tilde{D}_n(\tilde{\omega}_j) \right),$$

де вираз для  $\tilde{D}_n(\tilde{\omega}_j)$  заданий в (1.4.9), а кумулянти  $\mathcal{M}_n(h')$  – в (1.4.10).

Розглядаємо випадок  $h' = 0$ . У виразах для  $\text{th}(\dots)$  замінюємо множник  $2\pi i \omega_{\mathbf{k}}$  на похідну  $\partial/\partial \rho_{\mathbf{k}}$ :

$$\text{th} \left[ \frac{2\pi i}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}1} \right] \text{th} \left[ \frac{2\pi i}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}2} \right] \times \\ \times \exp \left( 2\pi i \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \right) = \text{th} \hat{\Delta}_1 \text{th} \hat{\Delta}_2 \exp \left( 2\pi i \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \right), \quad (1.5.13)$$

де

$$\hat{\Delta}_m = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{k}}} e^{-i\mathbf{k}m}. \quad (1.5.14)$$

Завдяки такій заміні в (1.5.11) можна виконати інтегрування за змінними  $\omega_k$  і отримати якобіан переходу  $J(\rho)$ , що заданий формулами (1.4.14), (1.4.19). Вираз для кореляційної функції набуває вигляду

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = Z^{-1} \int \exp[-\beta H(\rho)] \text{th } \hat{\Delta}_1 \text{th } \hat{\Delta}_2 \mathcal{J}(\rho) (d\rho)^N, \quad (1.5.15)$$

де

$$H(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}. \quad (1.5.16)$$

Один із способів обчислення бінарної кореляційної функції (відповідно до формули (1.5.15)) розвинемо в § 1.8.

## 1.6. Рівняння Ейлера

Розглянемо в чому полягає особливість множини колективних змінних при дослідженні ФП. Покажемо, чому вибраний нами фазовий простір змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$  зручний для опису фазового переходу [294, 295].

Позначимо через  $E(\rho)$  функцію, що стоїть у показнику експоненти (1.5.1):

$$E(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} d(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \sum_{n \geq 2} \frac{a_{2n}}{(2n)!} N^{1-n} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_2 + \dots + \mathbf{k}_{2n}}. \quad (1.6.1)$$

Залежність від температури міститься тут тільки у коефіцієнті  $d(\mathbf{k})$  відповідно до формули (1.5.2). Для статистичної суми матимемо

$$Z = C \int \exp[E(\rho)] (d\rho)^N. \quad (1.6.2)$$

Кожний набір змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$  характеризує певний стан системи, який описується функціоналом  $E(\rho)$ . Основний внесок у статистичну суму системи вносять ті стани, які реалізуються з найбільшою ймовірністю.

Знайдемо значення величин  $\{\rho_{\mathbf{k}} \dots\}$ , що надають максимум функціоналу  $E(\rho)$ . Із умови  $\delta E(\rho) = 0$  отримуємо систему рівнянь Ейлера

$$-d(\mathbf{k})\rho_{-\mathbf{k}} - \frac{a_4}{3!N} \sum_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} \rho_{\mathbf{k}_2} \rho_{\mathbf{k}_3} \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k} + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} - \dots = 0. \quad (1.6.3)$$

Розв'язок цієї системи рівнянь  $\rho_{\mathbf{k}}^{(0)}$  визначає розміщення центрів, відносно яких виникають відхилення фаз густини спінового моменту. Величини  $\rho_{\mathbf{k}}^{(0)}$  будуть функціями температури і хвильового вектора. Система рівнянь (1.6.3) є однорідною і тому один із можливих її розв'язків для всіх значень хвильового вектора є тривіальним  $\rho_{\mathbf{k}}^{(0)} = 0$ .

Сконкретизуємо дещо постановку задачі. Розглядатимемо моделі, для яких фур'є-образ потенціалу максимальний при нульовому значенні хвильового вектора ( $\mathbf{k} = 0$ )

$$\max \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) = \tilde{\Phi}(0). \quad (1.6.4)$$

Ця умова справедлива для широкого класу задач статистичної фізики, зокрема, для потенціалу  $\tilde{\Phi}(\mathbf{k})$ , що заданий формулою (1.2.6) або простішою формулою (1.2.8).

Виділимо з системи (1.6.3) рівняння відносно змінної  $\rho_0$

$$d(0)\rho_0 + \frac{a_4}{3!N} \rho_0^3 + \frac{1}{2N} a_4 \rho_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + \frac{a_4}{3!N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \rho_{\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3} + \dots = 0. \quad (1.6.5)$$

Рівняння відносно решти змінних  $\rho_k$  ( $k \neq 0$ ) матимуть вигляд:

$$\begin{aligned} & \left( d(k) + \frac{a_4}{2N} \rho_0^2 \right) \rho_{-k} + \frac{a_4}{2N} \sum_{\substack{k' \\ k' \neq 0, k}} \rho_{k'} \rho_{-k'} \rho_{-k} + \\ & + \frac{a_4}{2N} \rho_k \rho_{-k} \rho_{-k} + \frac{a_4}{2N} \sum_{k_2, k_3} \rho_0 \rho_{k_2} \rho_{k_3} \delta_{k+k_2+k_3} + \\ & + \frac{a_4}{3!N} \sum_{k_1, k_2, k_3} \rho_{k_1} \rho_{k_2} \rho_{k_3} \delta_{k+k_1+k_2+k_3} + \dots = 0. \end{aligned} \quad (1.6.6)$$

Вважаємо, що останні доданки в (1.6.5) і (1.6.6) меншою, від решти доданків мірою, впливають на основні властивості рівнянь (середнє значення цих доданків за гаусовим або іншим парним розподілом дорівнюють нулеві). Виключимо ці доданки з розгляду і приведемо систему рівнянь (1.6.5) і (1.6.6) до вигляду

$$\left[ d(0) + \frac{a_4}{2N} \sum_{\substack{k \\ k \neq 0}} \rho_k \rho_{-k} \right] \rho_0 + \frac{a_4}{3!N} \rho_0^3 = 0, \quad (1.6.7)$$

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

Для температур, при яких  $d(0) > 0$  і  $d(k) \geq d(0)$ , всі коефіцієнти у рівнянні (1.6.7) позитивні величини і тому рівняння (1.6.5)–(1.6.7) мають тільки тривіальний розв'язок  $\rho_k^{(0)} = 0$  для всіх значень хвильового вектора  $k$ .

Визначимо область температур, яка містить температуру фазового переходу. Температуру  $T_1$ , для якої  $d(0, T_1) = 0$ ,

$$T_1 = \frac{\tilde{\Phi}(0)}{a_2}, \quad (1.6.8)$$

назвемо верхньою межею критичної області. Оскільки коефіці-



ент  $a_4$  не залежить від температури, а величина

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

є порядку одиниці, то завжди знайдеться така температура  $T_c$ , (причому  $T_c < T_1$ ), що для всіх  $T < T_c$  перше рівняння (1.6.7) матиме для  $\rho_0$  (крім тривіального  $\rho_0^{(0)} = 0$ ) також і нетривіальний розв'язок

$$\frac{1}{N} \left( \rho_0^{(0)} \right)^2 = \frac{3!}{a_4} \left[ -d(0, T) - \frac{a_4}{2N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right]. \quad (1.6.9)$$

У випадку  $T < T_c$  коефіцієнт  $d(0, T) \leq 0$  (при  $T \rightarrow 0 : d(0, T) \rightarrow -\infty$ ). Як впливає з (1.6.9),  $\rho_0^{(0)}$  макроскопічна величина:  $\rho_0^{(0)} \sim \sqrt{N}$ . Згодом повернемося до точнішого розв'язку рівняння для  $\rho_0$ , що враховує доданки, які ми виключили з розгляду при переході від системи рівнянь (1.6.5), (1.6.6) до наближених рівнянь (1.6.7).

Покажемо, що система рівнянь (1.6.7) для решти змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$ , для яких  $\mathbf{k} \neq 0$ , має лише тривіальні розв'язки для всіх  $\mathbf{k} \neq 0$

$$\rho_{\mathbf{k}}^{(0)} = 0, \quad \mathbf{k} \neq 0. \quad (1.6.10)$$

Припустимо протилежне. Нехай при  $T < T_c$  для деякого  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1$  поряд з розв'язком  $\rho_0^{(0)} = 0$  існує принаймі один ненульовий розв'язок  $\rho_{\mathbf{k}_1}^{(0)} \neq 0$ . Покажемо, що така ситуація не реалізується. Із системи рівнянь (1.6.7) виділимо рівняння відносно  $\rho_{\mathbf{k}_1}$ , і підставимо в нього значення  $(\rho_0^{(0)})^2$  із (1.6.9). У результаті одержимо співвідношення

$$\left\{ d(k_1) + \frac{3!}{2} \left[ -d(0) - \frac{a_4}{2N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right] + \frac{a_4}{2N} \times \right.$$

$$\times \left. \sum_{\substack{k' \\ k' \neq 0, k_1}} \rho_{k'} \rho_{-k'} \right\} \rho_{-k_1} + \frac{a_4}{2N} \rho_{-k_1} \rho_{k_1} \rho_{-k_1} + \dots = 0.$$

Згідно з припущенням  $\rho_{k_1}^{(0)} \neq 0$ . Скоротимо в останньому рівнянні множник  $\rho_{k_1}$ , і знайдемо значення величини  $\rho_{k_1} \rho_{k_1}$ :

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

Підставимо цей розв'язок у формулу (1.6.9) і приходимо до протиріччя:

$$\frac{a_4}{3!N} \left( \rho_0^{(0)} \right)^2 = \frac{1}{2} [d(0) - d(k_1)] < 0.$$

Це означає, що розв'язок  $\rho_{k_1}^{(0)} \neq 0$  при  $k_1 \neq 0$  неможливий. З іншого боку, припустивши, що усі  $\rho_k = 0$  для  $k \neq 0$ , знаходимо

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \rho_0^{(0)} = \pm \left[ -d(0) \frac{3!}{a_4} \right]^{1/2}. \quad (1.6.11)$$

Приведене тут доведення виконане у наближенні гаусових середніх (див. також [296]). За своїм змістом величина  $\rho_0^{(0)}$  пропорційна до сумарного спінового моменту системи  $\rho_0^{(0)} \sim \sum_1 \sigma_1$  (див. (1.3.1), (1.3.2)) і в цій задачі виступає у ролі параметра порядку.

Множина КЗ, використана нами для розрахунку статистичної суми, є природним фазовим простором при розгляді процесу фазового переходу. Вона містить змінну, що пов'язана з параметром порядку.

Ми свідомо не вводимо "зовні" параметра порядку. В цьому немає потреби, оскільки серед множини КЗ є змінна, зв'язана з ним. Так, у випадку, коли  $\max \tilde{\Phi}(k) = \tilde{\Phi}(0)$  такою змінною є  $\rho_0$ . Якщо будувати графіки  $E(\rho)$  як функції  $\rho_k$  і  $\rho_0$ , то зі зменшенням температури  $T$  (при  $T < T_c$ ) зміщується точка екстремуму на кривій  $y = \exp E(\rho)$  (рис. 1.2).

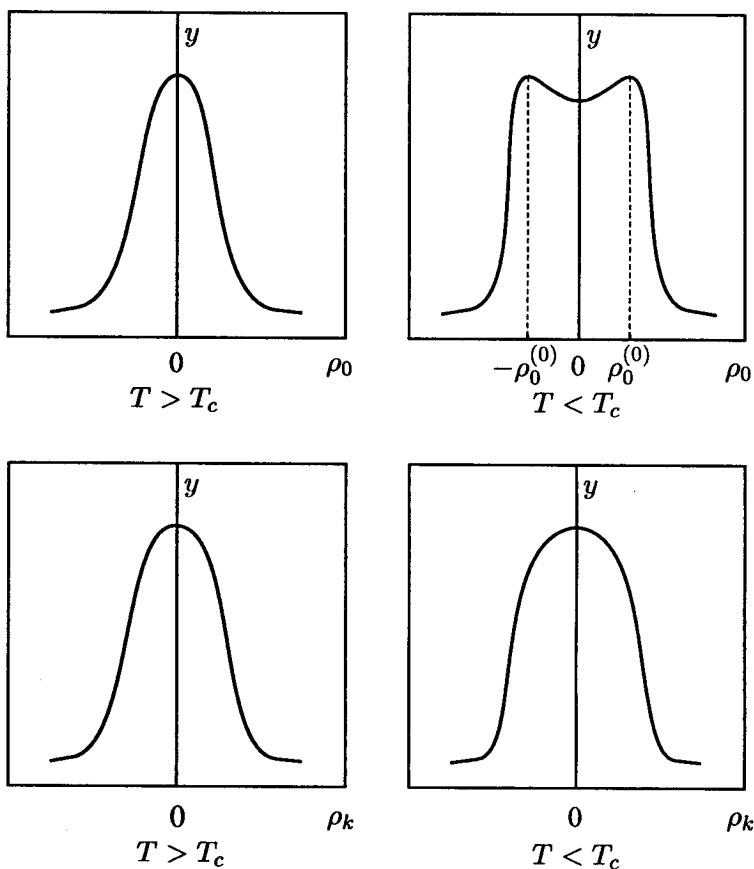


Рис. 1.2. Графіки  $y = \exp[E(\rho)]$  як функції  $\rho_0$  і  $\rho_k$

Отже, пропонується наступний алгоритм опису фазового переходу. Проводиться розрахунок статистичної суми:

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

Обчислюючи її, маємо виконати інтегрування за всіма змінними

$\rho_{\mathbf{k}}$ , крім змінної  $\rho_0$ , і отримати однократний інтеграл типу:

$$Z = Q^{N-1} \int \exp \tilde{E}(\rho_0) d\rho_0. \quad (1.6.12)$$

Йому відповідає такий вираз для вільної енергії

$$F = -kT(N-1) \ln Q + \tilde{E}(\langle \rho_0 \rangle), \quad (1.6.13)$$

де  $\langle \rho_0 \rangle$  – середнє значення змінної  $\rho_0$ . Вираз для  $\tilde{E}(\langle \rho_0 \rangle)$  дає змогу розрахувати основні термодинамічні характеристики фазового переходу. Зокрема, цей вираз представимо у вигляді:

$$\tilde{E}(\langle \rho_0 \rangle) = kT \left[ \tilde{B} \langle \rho_0 \rangle^2 + \frac{G}{N} \langle \rho_0 \rangle^4 \right], \quad (1.6.14)$$

що є мікроскопічним аналогом вільної енергії Ландау. Детальніше ці питання розглянемо в розділі 4, де отримано явні вирази для коефіцієнтів  $\tilde{B}$ ,  $G$  з (1.6.14).

## 1.7. Про базисну міру

У попередніх параграфах ми одержали вихідне функціональне представлення для статистичної суми. Оскільки змінні під знаком інтегралу не розділяються, ми не можемо виконати для неї точний розрахунок. Наприклад, якщо  $Z$  обчислювати відповідно до формули (1.5.1), то при інтегруванні у фазовому просторі  $K_3$   $\rho_{\mathbf{k}}$ , не розділяються змінні у виразі для якобіану переходу, тобто в доданках типу

$$-\sum_{n=2}^{\infty} \frac{a_{2n}}{(2n!)} N^{1-n} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}},$$

хоча вони розділяються у гамільтоніані

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

У фазовому просторі змінних  $\tilde{\rho}_1$ , навпаки, розділяються змінні у якобіані, який згідно до (1.4.12) є добутком якобіанів від окремих  $\tilde{\rho}_1$ , але не розділяються змінні у гамільтоніані

$$\beta H(\rho) = \frac{1}{2} \sum_{l_1, l_2} \beta \tilde{\Phi}(|l_1 - l_2|) \rho_{l_1} \rho_{l_2}.$$

Обчислення статистичної суми ускладнюється ще й з іншої причини. В показнику підінтегральної функції для якобіану переходу в (1.5.1) або в (1.5.4) входить безмежна сума доданків. Ці обставини приводять до потреби запису статистичної суми як суми моментів від деякої базисної густини міри

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_{n_0}(\rho\rho') &= 2^N \exp[-\beta H(\rho)] \int (d\omega)^N \times \\ &\times \exp \left[ 2\pi i \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho'_{\mathbf{k}} + \sum_{1 \leq n \leq n_0} D_n(\omega) \right]. \end{aligned} \quad (1.7.1)$$

Число  $n_0$  приймає цілі значення. Представимо суму  $\sum_{n \geq 1} D_n(\omega)$  з виразу (1.5.4) у вигляді

$$\sum_{n \geq 1} D_n(\omega) = \sum_{1 < n \leq n_0} D_n(\omega) + D_{n_0}(\omega). \quad (1.7.2)$$

Тоді для статистичної суми одержуємо

$$\begin{aligned} Z &= 2^N \int \exp \left[ \beta H(\rho) + 2\pi i \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} + \sum_{1 \leq n \leq n_0} D_n(\omega) \right] \times \\ &\times \left[ 1 + D_{n_0}(\omega) + \frac{1}{2} (D_{n_0}(\omega))^2 + \dots \right] (d\omega)^N (d\rho)^N. \end{aligned} \quad (1.7.3)$$

Після заміни величин  $D_{n_0}(\omega)$  їх операторним аналогом

$$D_{n_0}(\omega) e^{2\pi i \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}} = \hat{D}_{n_0} \left( \frac{\partial}{2\pi i \partial \rho_{\mathbf{k}}} \right) e^{2\pi i \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}} \quad (1.7.4)$$

для статистичної суми знаходимо вираз

$$Z = 2^N \int \left\{ \left[ 1 + \hat{D}_{n_0} \left( \frac{\partial}{2\pi i \partial \rho_{\mathbf{k}}} \right) + \dots \right] \mathcal{W}_{n_0}(\rho\rho') \right\}_{\rho=\rho'} (d\rho)^N. \quad (1.7.5)$$

Густину міри  $\mathcal{W}_{n_0}(\rho\rho')$  називатимемо базисною у деякій області температур, якщо у цій області довільний момент є обмеженою величиною

$$\int \left[ \left( \hat{D}_{n_0} \left( \frac{\partial}{2\pi i \partial \rho_{\mathbf{k}}} \right) \right)^n \mathcal{W}_{n_0}(\rho\rho') \right]_{\rho=\rho'} (d\rho)^N < \infty. \quad (1.7.6)$$

Зрозуміло, що тут не розглядаємо задачу про збіжність ряду моментів загалом

$$Z = Z_{n_0} \left( 1 + \langle \hat{D}_{n_0} \rangle_{n_0} + \frac{1}{2} \langle \hat{D}_{n_0}^2 \rangle_{n_0} + \dots \right), \quad (1.7.7)$$

де

$$Z_{n_0} = \int [\mathcal{W}_{n_0}(\rho\rho')]_{\rho=\rho'} (d\rho)^N, \quad (1.7.8)$$

а для  $\langle \hat{D}_{n_0}^n \rangle_{n_0}$  маємо

$$\langle \hat{D}_{n_0}^n \rangle_{n_0} = Z_{n_0}^{-1} \int \left[ \hat{D}_{n_0}^n \left( \frac{1}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{k}}} \right) \mathcal{W}_{n_0}(\rho\rho') \right]_{\rho=\rho'} (d\rho)^N. \quad (1.7.9)$$

Очевидно, що зі збільшенням  $n_0$  ряд моментів сходиться швидше. Здебільшого у фізичних задачах базисною є гаусова густина міри, яка відповідає значенню  $n_0 = 2$ . У цьому випадку вже  $Z_{n_2}$  містить велику інформацію про властивості системи. Ряд моментів від гаусової густини міри у виразі для вільної енергії має форму віріального ряду. Віріальні коефіцієнти виражаються у вигляді групових інтегралів, кожний з яких містить екранований потенціал  $g(|\mathbf{j} - \mathbf{l}|)$  [16]. Проте, з наближенням температури до  $T_c$  гаусові моменти  $\langle (\hat{D}_2)^n \rangle_2$  прямують до безмежності. При

великих значеннях величини  $n$  у кожному моменті  $\langle (\hat{D}_2)^n \rangle_2$  виникає низка доданків, які по різному прямують до безмежності при  $T \rightarrow T_c$ , і тому їх неможливо просумувати. Це свідчить про те, що гаусова густина міри не може бути базисною в околі температури  $T_c$ . Вона має бути замінена іншою мірою – негаусовою.

Щоб знайти форму негаусової базисної міри, яка описує систему в околі критичної точки, потрібно попередньо дослідити природу розбіжностей у діаграмах, що виникають у віріальних розкладах вільної енергії або бінарної функції розподілу з наближенням температури  $T$  до  $T_c$ .

## 1.8. Використання гаусової міри як базисної для розрахунку статистичної суми і парної кореляційної функції

Гаусовий розподіл використовується для дослідження багатьох задач статистичної фізики. Він описує розподіл флуктуацій у фізичних системах, що перебувають у “звичайних” станах. У зв’язку з цим детально викладемо методику обчислення статистичної суми та бінарної функції розподілу для гаусової густини міри. Використаємо методику обчислення, запропоновану в [251]. У результаті отримаємо вирази для статистичної суми і функцій розподілу в гаусовому наближенні, які будуть функціоналом від екранованого потенціалу взаємодії  $g(r)$ . До складу функції  $g(r)$  входить радіус кореляції, який у свою чергу визначається з умов самоузгодження.

Почнемо з загальної форми для статистичної суми

$$Z = 2^N \int \exp \left( \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right) \times \int \exp \left[ 2\pi i \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} + \sum_{n \geq 1} D_n(\omega) \right] (d\rho)^N (d\omega)^N. \quad (1.8.1)$$

При виділеній гаусовій густині міри  $n_0 = 2$  (формула (1.7.5))

статистична сума набуває вигляду

$$\begin{aligned} Z &= Z_G \left( 1 + \langle \hat{D}_2 \rangle_G + 1/2 \langle \hat{D}_2^2 \rangle_G + \dots \right) = \\ &= Z_G \exp \left[ \sum_{n=1}^{\infty} \langle \hat{D}_2^n \rangle_{cum} \right]. \end{aligned} \quad (1.8.2)$$

Тут  $Z_G$  – гаусове наближення статистичної суми

$$Z_G = \int \mathcal{W}_G(\rho\rho') (d\rho)^N, \quad (1.8.3)$$

а  $\mathcal{W}_G(\rho\rho')$  – гаусова густина міри

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_G(\rho\rho') &= 2^N \exp \left[ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right] \times \\ &\times \int (d\omega)^N \exp \left[ 2\pi i \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho'_{\mathbf{k}} - \frac{(2\pi)^2}{2} \mathcal{M}_2 \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \omega_{-\mathbf{k}} \right]. \end{aligned} \quad (1.8.4)$$

Для кумулянтних середніх маємо

$$\langle \hat{D}_2^n \rangle_{cum} = \langle \hat{D}_2^n \rangle_G - n \langle \hat{D}_2^{n-1} \rangle_G \langle \hat{D}_2 \rangle_G + \dots$$

Середні значення величин обчислюються відповідно до формули

$$\langle \hat{D}_2^n(\rho) \rangle_G = \frac{1}{Z_G} \int \left[ (\hat{D}_2(\rho'))^n \mathcal{W}_G(\rho\rho') \right]_{\rho=\rho'} (d\rho)^N,$$

де

$$\begin{aligned} \hat{D}_2(\rho') &= \sum_{n>2} \hat{D}_n(\rho'), \\ \hat{D}_n(\rho') &= \frac{\mathcal{M}_n}{n! N^{(n-2)/2}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n \\ \mathbf{k} \in \mathcal{B}}} \frac{\partial}{\partial \rho'_{\mathbf{k}_1}} \dots \frac{\partial}{\partial \rho'_{\mathbf{k}_n}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n}. \end{aligned} \quad (1.8.5)$$



Проведемо конкретні розрахунки для гаусової густини міри

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_G(\rho\rho') &= 2^N \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta \tilde{\Phi}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}\right) \times \\ &\times \int d\omega_0 \prod_{\mathbf{k}}' d\omega_{\mathbf{k}}^c d\omega_{\mathbf{k}}^s \exp\left\{2\pi i \sum_{\mathbf{k}}' (\omega_{\mathbf{k}}^c \rho_{\mathbf{k}}^{c'} + \omega_{\mathbf{k}}^s \rho_{\mathbf{k}}^{s'}) + \right. \\ &\left. + 2\pi i \omega_0 \rho_0' - \pi^2 \mathcal{M}_2 \sum_{\mathbf{k}}' [(\omega_{\mathbf{k}}^c)^2 + (\omega_{\mathbf{k}}^s)^2] - 2\pi^2 \mathcal{M}_2 \omega_0^2\right\}. \end{aligned}$$

Після інтегрування отримуємо явний вираз:

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_G(\rho\rho') &= 2^N (\pi \mathcal{M}_2)^{-N/2} \frac{1}{\sqrt{2}} \times \\ &\times \exp\left[\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta \tilde{\Phi}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{2} \mathcal{M}_2^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}' \rho_{-\mathbf{k}}'\right]. \end{aligned} \quad (1.8.6)$$

Базисна міра в гаусовому наближенні факторизується. Відповідно до (1.8.3) отримуємо гаусове наближення для статистичної суми

$$Z_G = 2^N \prod_{\mathbf{k}} \left[1 - \mathcal{M}_2 \beta \tilde{\Phi}(k)\right]^{-1/2}. \quad (1.8.7)$$

Цей вираз справедливий за умови, що

$$\mathcal{M}_2^{-1} - \beta \tilde{\Phi}(0) > 0, \quad (1.8.8)$$

яка виконується для температур  $T > T_c^{(G)}$ , де  $T_c^{(G)}$  визначається із рівності  $\beta_c^{(G)} \tilde{\Phi}(0) = 1$  ( $\beta_c^{(G)} = 1/kT_c^{(G)}$ ). Для температур  $T \leq T_c^{(G)}$  вираз (1.8.6) не справедливий.

Розглянемо вираз для  $n$ -го моменту:

$$\begin{aligned} \langle \hat{D}_2^n \rangle_G &= \frac{1}{Z_G} \left( \frac{2}{\sqrt{\pi M_2}} \right)^N \frac{1}{\sqrt{2}} \int \left\{ \exp \left[ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta \tilde{\Phi}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right] \times \right. \\ &\times \left. \left[ \sum_{m \geq 2} \hat{D}_m \left( \frac{1}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{k}}} \right) \right]^n \exp \left( -\frac{1}{2} M_2^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right) \right\} (d\rho)^N. \end{aligned} \quad (1.8.9)$$

У формулі для вільної енергії цей вираз буде головною складовою  $n$ -го віріального коефіцієнта. Момент  $\langle \hat{D}_2^n \rangle_G$  складається із середніх від всеможливих добутоків похідних  $\partial/\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \partial/\partial \rho_{\mathbf{k}_m}$ . При цьому очевидно, що

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{k}}} \right\rangle_G &= C \int \rho_{-\mathbf{k}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[ M_2^{-1} - \beta \tilde{\Phi}(k) \right] \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right\} \times \\ &\times M_2^{-1} (d\rho)^N = 0. \end{aligned}$$

Відмінні від нуля результати інтегрування в (1.8.9) отримаємо, розглядаючи тільки спарені похідні типу  $\partial^2/\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \partial \rho_{-\mathbf{k}_1}$ . Середнє від спареної похідної є основним елементом обчислень у (1.8.9):

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \partial \rho_{-\mathbf{k}_1}} \right\rangle_G &= \left( \frac{2}{\sqrt{\pi M_2}} \right)^N \frac{Z_G^{-1}}{\sqrt{2}} \int \exp \left[ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \beta \tilde{\Phi}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right] \times \\ &\times \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \partial \rho_{-\mathbf{k}_1}} \exp \left[ -\frac{1}{2} M_2^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right] (d\rho)^N = \\ &= \left( \frac{2}{\sqrt{\pi M_2}} \right)^N \frac{Z_G^{-1}}{\sqrt{2}} \int \left[ M_2^{-1} \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{-\mathbf{k}_1} - M_2^{-1} \right] \times \\ &\times \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[ M_2^{-1} - \beta \tilde{\Phi}(k) \right] \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right\} (d\rho)^N. \end{aligned}$$

Скориставшись формулою (1.8.7), знаходимо, що

$$\left\langle \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{k}} \partial \rho_{-\mathbf{k}}} \right\rangle_G = \left( M_2^{-2} \frac{\partial}{\partial \beta \tilde{\Phi}(k)} - M_2^{-1} \right) \ln Z_G,$$

або в явному вигляді

$$\left\langle \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{k}} \partial \rho_{-\mathbf{k}}} \right\rangle_G = \frac{\beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})}{1 - \mathcal{M}_2 \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})}.$$

Вираз

$$\tilde{g}(\mathbf{k}) = \frac{\beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})}{1 - \mathcal{M}_2 \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})} \quad (1.8.10)$$

є фур'є-образом екранованого потенціалу. Як уже зазначалося, у (1.8.9) маємо розглядати тільки добутки спарених похідних.

Щоб отримати явний вираз для (1.8.2), розглянемо послідовно середнє від операторів  $\langle \hat{\mathcal{D}}_2^2 \rangle_G, \langle \hat{\mathcal{D}}_2^n \rangle_G, \dots$ , де

$$\hat{\mathcal{D}}_2 = \sum_{n>2} \hat{D}_n \left( \frac{1}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{k}}} \right). \quad (1.8.11)$$

Вважатимемо, що в операторах  $\hat{D}_n$ , заданих виразом (1.8.5), сума за хвильовими векторами незвідна. Це означає, що в  $\delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n}$  сума  $\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n = 0$  не розпадається на нульові суми меншого порядку, ніж  $n$ . Наприклад, не може бути випадків  $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = 0$ ,  $\mathbf{k}_3 + \dots + \mathbf{k}_n = 0$  чи  $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 = 0$ ,  $\mathbf{k}_4 + \dots + \mathbf{k}_n = 0$ . У результаті приходимо до рівності<sup>8</sup>

$$\langle \hat{\mathcal{D}}_2 \rangle_G = 0, \quad (1.8.12)$$

оскільки кожне  $\langle \hat{D}_n \rangle_G = 0$ .

Для середнього  $\langle \hat{\mathcal{D}}_2^2 \rangle_G$  маємо

$$\langle \hat{\mathcal{D}}_2^2 \rangle_G = \sum_{n>2} \langle \hat{D}_n \hat{D}_n \rangle_G, \quad (1.8.13)$$

або в силу незвідності сум за  $\mathbf{k}$  в операторах  $\hat{D}_n$

$$\langle \hat{D}_n \hat{D}_m \rangle_G = 0, \quad n \neq m. \quad (1.8.14)$$

<sup>8</sup>Описана вище ситуація відповідає відсутності зовнішнього поля.

У формулі (1.8.13) слід виконати всеможливі спарювання похідних і, як результат інтегрування за  $\rho_{\mathbf{k}}$ , кожній спареній похідній поставити у відповідність екранований потенціал  $\tilde{g}(k)$ , заданий формулою (1.8.10). Тоді, відповідно до (1.8.5) знаходимо:

$$\begin{aligned} \langle \hat{D}_2^2 \rangle &= \sum_{n>2} \frac{\mathcal{M}_n^2}{N^n (n!)^2} \sum_{\mathbf{j}, \mathbf{l}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n \\ \mathbf{k}'_1, \dots, \mathbf{k}'_n}} \exp [i (\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n) \mathbf{j}] + \\ &+ \exp [i (\mathbf{k}'_1 + \dots + \mathbf{k}'_n) \mathbf{l}] \left\langle \frac{\partial^n}{\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \partial \rho_{-\mathbf{k}_n}} \frac{\partial^n}{\partial \rho_{\mathbf{k}'_1} \dots \partial \rho_{-\mathbf{k}'_n}} \right\rangle_G = \\ &= \sum_{n>2} \frac{\mathcal{M}_n^2}{N^n n!} \sum_{\mathbf{j}, \mathbf{l}} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n} \exp [i (\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n) (\mathbf{j} - \mathbf{l})] \times \\ &\times \tilde{g}(k_1) \dots \tilde{g}(k_n) = \sum_{n>2} \frac{\mathcal{M}_n^2}{n!} \sum_{\mathbf{j}, \mathbf{l}} g^n (|\mathbf{j} - \mathbf{l}|), \end{aligned} \quad (1.8.15)$$

де

$$g (|\mathbf{j} - \mathbf{l}|) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{g}(k) \exp [i \mathbf{k} (\mathbf{j} - \mathbf{l})] \quad (1.8.16)$$

– екранований потенціал. Співставимо кумулянти  $\mathcal{M}_n$  з похідними  $\mathcal{M}_n = \partial^n / \partial h^n (\ln \text{ch } h)$  і введемо операторний “екранований” потенціал:

$$\hat{g} (|\mathbf{j} - \mathbf{l}|) = \frac{\partial^2}{\partial h_j \partial h_l} g (|\mathbf{j} - \mathbf{l}|). \quad (1.8.17)$$

Тоді

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \langle \hat{D}_2^2 \rangle_G &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{j}, \mathbf{l}} \left[ \exp \hat{g} (|\mathbf{j} - \mathbf{l}|) - 1 - \right. \\ &\left. - \hat{g} (|\mathbf{j} - \mathbf{l}|) - \frac{1}{2} \hat{g}^2 (|\mathbf{j} - \mathbf{l}|) \right] G_j G_l |_{h=0}, \quad G_1 = \ln \text{ch } h_1, \end{aligned} \quad (1.8.18)$$

Цей вираз має добре відому форму другого віріального коефіцієнта  $B_2$  для систем заряджених частинок, що розміщені у вузлах ґратки [244, 251]

$$B_2 = \frac{1}{2} \sum_{j,l} \left[ e^{g(|j-l|)} - 1 - g(|j-l|) - \frac{1}{2}g^2(|j-l|) \right], \quad (1.8.19)$$

де

$$g(|j-l|) = e_j e_l g(|j-l|), \quad (1.8.20)$$

$e_j, e_l$  – заряди у вузлах  $j$  і  $l$ .

Отже, існує відповідність між виразами для вільної енергії системи заряджених частинок і вільної енергії у моделі Ізінґа. Суттєва відмінність між ними полягає в тому, що місце зарядів займають похідні за зовнішнім полем  $h$ , яке після обчислень прирівнюємо до нуля. Використовуючи цю аналогію, можна без додаткових розрахунків записати вищі віріальні коефіцієнти [251].

Вільна енергія, записана у вигляді віріального ряду, в загальному випадку потребує уточнення з точки зору необхідності врахування звідних сум типу

$$\mathcal{M}_4 \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}$$

тощо. Розрахунки приведуть до потреби перенормування виразу для екранованого потенціалу  $\tilde{g}(\mathbf{k})$ . У нульовому порядку для  $\tilde{g}(\mathbf{k})$  прийемо вираз

$$\tilde{g}(\mathbf{k}) = \frac{\beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})}{1 - \mathcal{M}_2 \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})} = \frac{\beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})}{1 - \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})}, \quad (1.8.21)$$

у першому порядку

$$\tilde{g}(\mathbf{k}) = \frac{\beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})}{1 - \mathcal{M}_2 \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \left[ 1 + \frac{1}{2} \frac{|\mathcal{M}_4|}{\mathcal{M}_2} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})}{1 - \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})} \right]}.$$

і т. д. Загалом, з врахуванням поправок вищих порядків структура  $\tilde{g}(\mathbf{k})$ , закладена в (1.8.21), змінюється несуттєво.

Фур'є-образ екранованого потенціалу має особливість при  $1 - \mathcal{M}_2 \beta \tilde{\Phi}(0) = 0$ . Тому у виразі для вільної енергії виникають аномально великі доданки [16]. Для дослідження їхньої природи зручно дослідити поведінку рядів для бінарної кореляційної функції. Для побудови таких рядів скористаємося формулою (1.5.15). Для цього обидва гіперболічних тангенси  $\text{th } \hat{\Delta}_1$  і  $\text{th } \hat{\Delta}_2$  розкладемо в ряди за степенями  $\hat{\Delta}_1$  і  $\hat{\Delta}_2$

$$\text{th } \hat{\Delta}_1 = c_1 \hat{\Delta}_1 + \frac{c_3}{3!} (\hat{\Delta}_1)^3 + \frac{c_5}{5!} (\hat{\Delta}_1)^5 + \dots, \quad (1.8.22)$$

де

$$c_1 = \left. \frac{\partial \text{th } h}{\partial h} \right|_{h=0} = \left. \frac{\partial^2 \ln \text{ch } h}{\partial h^2} \right|_{h=0} = \mathcal{M}_2,$$

$$c_3 = \left. \left( \frac{\partial^4 \ln \text{ch } h}{\partial h^4} \right) \right|_{h=0} = \mathcal{M}_4, \dots,$$

$$c_{2n-1} = \left. \left( \frac{\partial^{2n} \ln \text{ch } h}{\partial h^{2n}} \right) \right|_{h=0} = \mathcal{M}_{2n}.$$

У формулі (1.5.15) базисною вибираємо гаусову густину міри. В результаті, як і у виразі (1.8.2), для бінарної кореляційної функції отримуємо

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle &= \left\{ Z_G \left( 1 + \langle \hat{\mathcal{D}}_2 \rangle_G + \frac{1}{2} \langle \hat{\mathcal{D}}_2^2 \rangle_G + \dots \right) \right\}^{-1} \times \\ &\times \int \exp[-\beta H(\rho)] \text{th } \hat{\Delta}_1 \text{th } \hat{\Delta}_2 \left( 1 + \langle \hat{\mathcal{D}}_2 \rangle_G + \frac{1}{2} \langle \hat{\mathcal{D}}_2^2 \rangle_G + \dots \right) \times \\ &\times \exp \left( -\frac{1}{2} \mathcal{M}_2^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right) (d\rho)^N. \end{aligned} \quad (1.8.23)$$

У випадку  $\hat{\mathcal{D}}_2 = 0$  спарювання похідних відбувається тільки між  $\text{th } \hat{\Delta}_1$  і  $\text{th } \hat{\Delta}_2$ . Для кореляційної функції маємо вираз

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle_G |_{\mathcal{D}_2=0} &= \langle \text{th } \hat{\Delta}_1 \text{th } \hat{\Delta}_2 \rangle_G = \\ &= \frac{\partial^2}{\partial h_1 \partial h_2} \left( e^{\hat{g}(12)} - 1 \right) G_1 G_2 |_{h_1=h_2=0}. \end{aligned} \quad (1.8.24)$$

де  $G_j = \ln(\text{ch } h_j)$ . Тепер враховуємо у (1.8.23) оператори  $\hat{D}_2$ . У добутку

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

випишуємо всеможливі спарювання між собою операторів  $\hat{D}_n$ . Позначимо символом  $Cn(\dots)$  всі спарювання, виконані всередині виразу  $(\dots)$ . Тоді

$$\begin{aligned} Cn \left( \text{th } \hat{D}_1 \text{ th } \hat{D}_2 \exp \hat{D}_2 \right) &= Cn \left( \text{th } \hat{D}_1 \text{ th } \hat{D}_2 \right) Cn \left( \exp \hat{D}_2 \right) + \\ &+ Cn \left( \text{th } \hat{D}_1 \text{ th } \hat{D}_2 \hat{D}_2 \right) Cn \left( \exp \hat{D}_2 \right) + \\ &+ \frac{1}{2} Cn \left( \text{th } \hat{D}_1 \text{ th } \hat{D}_2 \hat{D}_2^2 \right) Cn \left( \exp \hat{D}_2 \right) + \dots \end{aligned} \quad (1.8.25)$$

Підставимо цей вираз у формулу (1.8.23). Виконаємо інтегрування за змінними  $\rho_k$ , і виключимо всі добутки спарень (бо вони скорочуються з множником  $1/Z$  у формулі (1.5.15)). Тоді для  $\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle$  отримаємо вираз

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle &= (e^{\hat{g}(12)} - 1) [ \mathcal{M}_1(h_1) \mathcal{M}_1(h_2) + \\ &+ \text{diagrams} + \dots ] \end{aligned} \quad (1.8.26)$$

Темні кружки  $\bullet$  позначають польову вершину і співставляються з виразом  $\sum_1 \dots \ln \text{ch } h_1|_{h=0}$ ; світлі кружки  $\circ$  відповідають фіксованій вершині  $\frac{\partial}{\partial h_1} \ln \text{ch } h_1|_{h_1=0}$ . Тонка лінія “—” позначає оператор  $\hat{g}(|j-1|)$ , а жирна лінія “—” оператор  $f(|j-1| + \hat{g}|j-1|)$ , де

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


При цьому діаграми з однією польовою вершиною і з двома фіксованими вершинами виникають при гаусовому усередненні виразу:

$$\langle Cn \left( \text{th } \hat{\Delta}_1 \text{ th } \hat{\Delta}_2 \hat{D}_2 \right) \rangle_G = e^{\hat{g}(12)} \left( \begin{array}{c} \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \circ \quad \circ \end{array} - \begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \circ \quad \circ \end{array} \right). \quad (1.8.27)$$

Записані у вигляді ряду за степенями екранованого потенціалу, ці діаграми мають вигляд<sup>9</sup>

$$e^{\hat{g}(12)} \left( \begin{array}{c} \bullet \\ \parallel \quad \parallel \\ \circ \quad \circ \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \parallel \quad \parallel \\ \circ \quad \circ \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \parallel \quad \parallel \\ \circ \quad \circ \end{array} + \dots + \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \quad \text{---} \\ \circ \quad \circ \end{array} + \dots \right). \quad (1.8.28)$$

Сукупності  $n$  ліній  $g$ , що з'єднують дві вершини, ставиться у відповідність зворотний факторіал  $1/n!$ . Наприклад, для діаграми

 маємо такий явний вираз

$$e^{\hat{g}(12)} \begin{array}{c} \bullet \\ \parallel \quad \parallel \\ \circ \quad \circ \end{array} = e^{\hat{g}(12)} \sum_1 \hat{g}^{|1-1|} \frac{1}{3!} \times \\ \times \hat{g}^3 (|1-2|) G_1 \text{ th } h_1 \text{ th } h_2 |_{h_1=h_2=h_1=0}. \quad (1.8.29)$$

Аналогічно

$$e^{\hat{g}(12)} \begin{array}{c} \bullet \\ \parallel \quad \parallel \\ \circ \quad \circ \end{array} = e^{\hat{g}(12)} \sum_1 \frac{1}{2!} \hat{g}^2 (|1-1|) \frac{1}{2!} \times \\ \times \hat{g}^2 (|1-2|) G_1 \text{ th } h_1 \text{ th } h_2 |_{h_1=h_2=h_1=0} \quad (1.8.30)$$

і в загальному вигляді

$$e^{\hat{g}(12)^m} \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \quad \text{---} \\ \circ \quad \circ \end{array}^n = e^{\hat{g}(12)} \sum_1 \frac{1}{m!} \hat{g}^m (|1-1|) \times \\ \times \frac{1}{n!} \hat{g}^n (|1-2|) G_1 \text{ th } h_1 \text{ th } h_2 |_{h_1=h_2=h_1=0}. \quad (1.8.31)$$

<sup>9</sup>З врахуванням рівності нулевій непарних похідних за  $h$  (при  $h \rightarrow 0$ ) у польових вершинах (темних кружках) та парних похідних у світлих вершинах (світлих кружках).



Перші три діаграми в (1.8.28) виникають після спарювання оператора  $\hat{D}_4$ , що входить до складу  $\hat{D}_2$  у формулі (1.8.27); діаграма (1.8.31) – одна із діаграм, що виникають після спарювання оператора  $\hat{D}_{m+n}$ , який також входить до складу  $\hat{D}_2$ .

Діаграми з двома польовими вершинами записані у вигляді ряду за степенями екранованого потенціалу виникають у (1.8.25) після спарювання в операторі  $\hat{D}_2^2$ :

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

$$\times \left[ \begin{array}{c} \text{---} \bullet \\ | \quad | \\ \circ \quad \circ \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \bullet \\ | \quad | \\ \circ \quad \circ \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ / \quad \backslash \\ \circ \quad \circ \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ \backslash \quad / \\ \circ \quad \circ \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \bullet \\ | \quad | \\ \circ \quad \circ \end{array} + \dots + \begin{array}{c} \text{---} \bullet \\ | \quad | \\ \circ \quad \circ \end{array} + \dots \right]. \quad (1.8.32)$$

Перші чотири діаграми виникають після спарювання в (1.8.28) двох операторів  $\hat{D}_4 \hat{D}_4$ , які входять до складу  $1/2 \hat{D}_2^2$ . Для діаграм з  $n$  польовими вершинами маємо

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

$$\times \left( \begin{array}{c} 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \quad \dots \quad n \\ \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \quad \dots \quad \bullet \text{---} \bullet \\ | \quad | \quad | \quad | \quad | \quad \dots \quad | \quad | \\ \circ \quad \circ \quad \circ \quad \circ \quad \circ \quad \dots \quad \circ \quad \circ \end{array} \right). \quad (1.8.33)$$

Ми розглянули ряди для бінарної кореляційної функції. При цьому у виразах для кумулянтів обмежились доданками з незвідними замкнутими сумами  $\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n = 0$ . Насправді ж ці суми звідні й спарювання виникають вже всередині кожного оператора  $\hat{D}_n$ . Врахування цього фактору веде до перенормування вершини й екранованого потенціалу. У перенормованому варіанті замість  $\mathcal{M}_2$  буде інша величина<sup>10</sup>, проте загальна структура віріальних рядів не зміниться. Відповідні результати приведені у працях [8, 292]. Для обґрунтування неефективності використання поблизу точки ФП гаусової густини міри цілком достатньо аналізу виразів (1.8.26)–(1.8.33), які були знайдені при спарюванні незвідних сум.

<sup>10</sup>Це приводить до деякого зсуву критичної температури.

Збіжність групових інтегралів залежить від поведінки екранованого потенціалу  $g(|\mathbf{1} - \mathbf{j}|)$ , який заданий формулами (1.8.16) і (1.8.21). Поведінка  $g(|\mathbf{1} - \mathbf{j}|)$  на великих відстанях  $r = |\mathbf{j} - \mathbf{1}|$  визначається формою фур'є-образу  $\tilde{g}(k)$  за малих значень  $k$ . Вважаючи відповідно до (1.2.12)  $\beta\tilde{\Phi}(k) = \beta\tilde{\Phi}(0) - qk^2$ , для  $\tilde{g}(k)$  за малих значень  $k$  маємо

$$\tilde{g}(k)|_{k \rightarrow 0} = \frac{\beta\tilde{\Phi}(0)}{1 - \mathcal{M}_2\beta\tilde{\Phi}(0) + \mathcal{M}_2qk^2} = \frac{\beta\tilde{\Phi}(0)(\mathcal{M}_2q)^{-1}}{\varkappa^2 + k^2}, \quad (1.8.34)$$

де

$$\varkappa^2 = \xi^{-2} = \left[1 - \mathcal{M}_2\beta\tilde{\Phi}(0)\right] (\mathcal{M}_2q)^{-1}, \quad (1.8.35)$$

$\xi$  – радіус “екранування”, який і буде ефективним радіусом кореляції для бінарної кореляційної функції, знайденої у гаусовому наближенні.

Справді, як впливає з (1.8.24), при  $r = |\mathbf{1} - \mathbf{2}| \rightarrow \infty$  маємо

$$\lim_{|\mathbf{1}-\mathbf{2}| \rightarrow \infty} \langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle_G \sim \tilde{g}(|\mathbf{1} - \mathbf{2}|) G_1 G_2 - \mathcal{M}_2 \frac{\beta\tilde{\Phi}(0)}{q} \frac{e^{-r/\xi}}{r}.$$

У наближенні гаусової базисної міри величина

$$T_c^{(0)} = \mathcal{M}_2\tilde{\Phi}(0) \quad (1.8.36)$$

є температурою фазового переходу. За цієї температури, як впливає з (1.8.35), величина  $\varkappa$  перетворюється в нуль, а  $\xi$  прямує до безмежності. В точці фазового переходу ( $T = T_c, h = 0$ ) змінюється поведінка екранованого потенціалу  $g(r)$  і відповідно бінарної кореляційної функції на великих відстанях. Використовуючи довгохвильове наближення фур'є-образу потенціалу (1.8.34), для  $g(r)$  відповідно до (1.2.11) знаходимо:

$$g(r) = A e^{-r/\xi} \frac{1}{r}, \quad (1.8.37)$$

де

$$A = \frac{\beta\tilde{\Phi}(0)}{8\pi} \left(\frac{c}{b}\right)^3. \quad (1.8.38)$$

Вираз (1.8.37), отриманий для випадку  $(1 - \beta\bar{\Phi}(0)M_2) > 0$  або  $T > T_c^{(0)}$ , характеризує поведінку  $g(r)$  на великих відстанях. Ми могли б виділити тут дві температурні області, для яких екранований потенціал має якісно різну поведінку.

Перший випадок відповідає температурам, при яких величина радіусу кореляції  $\xi$  не дуже велика, так що

$$\frac{r}{\xi} > 1.$$

У цій області величина  $g(r)$ , як і кореляційна функція прямує до нуля зі збільшенням відстані між частинками.

Другий випадок відповідає температурам з безпосереднього околу  $T_c^{(0)}$ . Тут  $\xi \rightarrow \infty$  і екранований потенціал, а разом з ним і бінарна кореляційна функція на великих відстанях пропорційна до  $r^{-1}$ . Така поведінка  $g(r)$  призводить до розбіжності деяких групових інтегралів у виразі (1.8.23) для бінарної кореляційної функції.

Виникнення розбіжностей при  $T \rightarrow T_c^{(0)}$  інтуїтивно повністю зрозуміле із елементарних оцінок групових інтегралів: кожна польова вершина дає внесок у кореляційну функцію, який пропорційний до  $r^3$ , а екранований потенціал при  $T \rightarrow T_c^{(0)}$  поводить як  $r^{-1}$ . Тому зрозуміло, що діаграми, у яких є багато польових вершин і мало ліній розбігатимуться при  $T \rightarrow T_c^{(0)}$ . Тому віріальний розклад (1.8.26) стає некоректними при  $T = T_c^{(0)}$ , і обчислення статистичної суми і бінарної кореляційної функції слід виконувати точніше. З'ясовується, що за базису потрібно використовувати негаусову густину міри.

## 1.9. Базисна міра в околі критичної точки

Дослідимо поведінку групових інтегралів у бінарній кореляційній функції (1.8.26). Відповідно до формул (1.8.27)–(1.8.31), діаграми з однією польовою вершиною в (1.8.26) виникають від спарювання оператора  $\hat{D}_2$ . Спарювання оператора  $\hat{D}_2^2$  приводить до діаграм з двома польовими вершинами тощо.

З'ясуємо поведінку кореляційної функції (1.8.26) у просторовій області, яка перебуває всередині сфери з радіусом, що дорівнює радіусу кореляції  $\xi$ , при граничному переході  $T \rightarrow T_c^{(0)}$ . Поряд з умовою  $\xi \rightarrow \infty$  має виконуватись умова  $r/\xi \ll 1$ . Вперше така поведінка бінарної кореляційної функції була досліджена в [297, 298]. Оцінки для вільної енергії виконані в працях [243, 299].

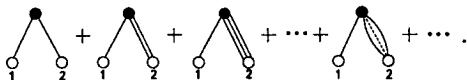
Виконаємо спочатку дослідження діаграм (1.8.27)–(1.8.31) з однією польовою і двома фіксованими вершинами. Позначимо через  $R$  відстань між фіксованими вершинами:  $R = |1 - 2|$ . Нас цікавитиме поведінка діаграм для великих значень  $R$  при  $\kappa \rightarrow 0$  і  $\kappa R < 1$ . Як екранований потенціал  $g(r)$  використаємо функцію (1.8.37), яка справедлива у наближенні великих відстаней

$$g(r) = A \frac{1}{r} \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right), \quad (1.9.1)$$

де

$$\xi = [\mathcal{M}_2 q / (1 - \mathcal{M}_2 \beta \tilde{\Phi}(0))]^{1/2}. \quad (1.9.2)$$

Відстань  $r$  вважатимемо величиною неперервною, і кожній польовій вершині в діаграмах поставимо у відповідність замість суми за вузлами  $\sum_1$  інтеграл за координатами  $\int dr$ . Приступаючи до оцінки асимптотичної поведінки ряду (1.8.28), розглянемо загальніший ряд діаграм:



$$\text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \dots + \text{Diagram n} + \dots \quad (1.9.3)$$

Перша діаграма виникла б у (1.8.27) після спарювання оператора  $\hat{D}_2$ , друга – оператора  $\hat{D}_3$ , третя –  $\hat{D}_4$  тощо<sup>11</sup> якби такі оператори входили до складу  $\hat{D}_2$ . Для скорочення запису, значення  $\text{th}(h_1) \text{th}(h_2)$  для світлих кружків у діаграмі (1.9.3) виписувати

<sup>11</sup>До складу оператора  $\hat{D}_2$  у (1.8.2) не входять ні оператори  $\hat{D}_2, \hat{D}_3$ , ні непарні оператори  $\hat{D}_{2n+1}$ . Тут тимчасово, заради з'ясування причин розбіжності, припускаємо, що замість ряду (1.8.27) можливий ряд (1.9.3).

не будемо. Для першої діаграми у біполярній системі координат маємо

$$I_{11} = \text{---} = \mathcal{M}_2 \frac{2\pi}{R} \int_C^\infty dr r g(r) \int_{|R-r|}^{R+r} ds s g(s). \quad (1.9.4)$$

В інтегралі по  $dr$  виділимо дві області інтегрування: “далеку” й “близьку”. “Далекою” вважаємо область зміни  $r$  поза сферою радіуса  $R$ , “близькою” – область усередині цієї сфери у сферичному шарі  $R/m \leq r \leq R$ , де  $m$  – скінчене число. Що відбувається на дуже малих віддальх – нас в цей момент не цікавить. Вважатимемо, що там інтеграли сходяться. Відповідно до цього

$$I_{11} = U_{11} + W_{11}, \quad (1.9.5)$$

де  $U_{11}$  – інтеграл за близькою областю:

$$\begin{aligned} U_{11} &= \mathcal{M}_2 \frac{2\pi}{R} \int_C^R dr r g(r) \int_{|R-r|}^{R+r} ds s g(s) = \\ &= A^2 \frac{2\pi}{R} \mathcal{M}_2 e^{-\kappa R} \left( \frac{e^{-2\kappa R} - e^{-2\kappa C}}{2\kappa} + R - C \right), \end{aligned} \quad (1.9.6)$$

$C = R/m$ , а  $W_{11}$  – інтеграл за далекою областю:

$$\begin{aligned} W_{11} &= \mathcal{M}_2 \frac{2\pi}{R} \int_R^\infty dr r g(r) \int_{|R-r|}^{R+r} ds s g(s) = \\ &= A^2 \frac{2\pi}{\kappa} \mathcal{M}_2 e^{-2\kappa R} \frac{\text{sh}(\kappa R)}{\kappa R}. \end{aligned} \quad (1.9.7)$$

При граничному переході <sup>12</sup>

$$\kappa \rightarrow 0, \quad R \rightarrow \infty, \quad \kappa R < 1, \quad (1.9.8)$$

маємо

$$\begin{aligned} U_{11} &\approx \kappa^{-1} f'_1(\kappa R), \\ W_{11} &\approx \kappa^{-1} f''_1(\kappa R), \end{aligned} \quad (1.9.9)$$

<sup>12</sup> Для оцінки порядку величин вважатимемо, що  $\text{sh}(\kappa R)/\kappa R \approx 1$ .

де

$$f_1'(\kappa R) = 2\pi\kappa R A^2 M_2 e^{-\kappa R}, \quad f_1''(\kappa R) = 2\pi A^2 M_2 e^{-2\kappa R}.$$

Як бачимо, обидві частини діаграми за умов (1.9.8) розходяться пропорційно до  $\kappa^{-1}$  і мають, звичайно, однакову розмірність. Пропорційність величин  $U_{11}$  до  $R$  і  $W_{11}$  до  $\xi$  у (1.9.9) можна пояснити тим, що польова вершина дає в інтегрування внесок, пропорційний  $R^{-3}$ , а  $g^2$  – пропорційний  $R^{-2}$ .

У загальному випадку для довільної із діаграм (1.9.3) маємо

$$I_{1n} = U_{1n} + W_{1n}, \quad (1.9.10)$$

де

$$U_{1n} = 2\pi M_{n+1} A^{n+1} \left[ \frac{e^{-\kappa R}}{\kappa R} \int_C^R \frac{e^{-(n-1)\kappa r} - e^{-(n+1)\kappa r}}{r^{n-1}} dr \right], \quad (1.9.11)$$

$$W_{1n} = 4\pi M_{n+1} A^{n+1} \frac{\text{sh } \kappa R}{\kappa R} \int_R^\infty \frac{e^{-(n+1)\kappa r}}{r^{n-1}} dr. \quad (1.9.12)$$

Діаграма  $I_{1n}$  виникає після спарювання оператора  $\hat{D}_{n+1}$  у польовій вершині в (1.8.27). У виразі для  $U_{1n}$  під інтегралом розкладемо експоненти в ряд і впевнимось, що  $U_{1n} \rightarrow \text{const}$  для всіх  $n$  при  $\kappa \rightarrow 0$ . Інтегруючи за  $r$ , для  $U_{1n}$  знаходимо

$$U_{1n} = 2\pi M_{n+1} A^{n+1} \frac{e^{-\kappa R}}{\kappa R} \left\{ \frac{E_{n-1}((n-1)\kappa C)}{C^{n-2}} - \frac{E_{n-1}((n-1)\kappa R)}{R^{n-2}} - \frac{E_{n-1}((n+1)\kappa C)}{C^{n-2}} + \frac{E_{n-1}((n+1)\kappa R)}{R^{n-2}} \right\}, \quad (1.9.13)$$

де

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

а  $E(\kappa x) = \int_1^\infty t^{-n} e^{-\kappa x t} dt$  – інтегральна показникова функція:

$$E_n(\kappa x) = e^{-\kappa x} \alpha_n(\kappa x) + \frac{(-\kappa x)^{n-1}}{(n-1)!} E_1(\kappa x), \quad n > 1, \quad (1.9.14)$$

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

Явні значення  $E_n$  і  $C = R/m$  підставляємо в (1.9.13). У результаті такої підстановки переконуємось, що  $U_{1n} \sim R^{2-n}$ . Дотримуючись умови  $\kappa R \lesssim 1$ , виділяємо в  $U_{1n}$  безрозмірну частину:

$$U_{1n} = \kappa^{n-2} f'_n(\kappa R), \quad (1.9.15)$$

де

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

Для далекої частини  $W_{1n}$  отримуємо

$$W_{1n} = 4\pi \mathcal{M}_{n+1} A^{n+1} \frac{\text{sh}(\kappa R)}{\kappa R} \frac{E_{n-1}[(n+1)\kappa R]}{R^{n-2}} = f''_n(\kappa R) \kappa^{n-2}. \quad (1.9.16)$$

При  $n = 2$  (спарювання оператора  $\hat{D}_3$ ) маємо спеціальний випадок:

$$U_{12} = 4\pi \mathcal{M}_3 A^3 \frac{e^{-\kappa R}}{\kappa R} [E_1(\kappa C) - E_1(\kappa R) + E_1(3\kappa R) - E_1(3\kappa C)], \quad (1.9.17)$$

де

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

$\gamma = 0.5772$  – постійна Ейлера. У граничному переході  $\varkappa \rightarrow 0$  величина  $U_{12}$  залишається скінченною. Для далекої частини  $W_{12}$  знаходимо

$$W_{12} = 4\pi M_3 A^3 \frac{\text{sh}(\varkappa R)}{\varkappa R} E_1(3\varkappa R); \quad (1.9.18)$$

при  $\varkappa \rightarrow 0$  маємо логарифмічну розбіжність:

$$W_{12} \approx 4\pi M_3 A^3 \frac{\text{sh}(\varkappa R)}{\varkappa R} \ln(3\varkappa R). \quad (1.9.19)$$

У випадку  $n \geq 3$  для функцій  $U_{1n}$  і  $W_{1n}$  не виникає розбіжностей при  $\varkappa \rightarrow 0$ . Як впливає із (1.9.13) і (1.9.16), функція  $I_{1n}(R)$  при великих значеннях  $R$  поводить як  $R^{2-n}$ . Це можна пояснити так: у результаті інтегрування  $\int \dots dr$ , яке відповідає польовій вершині в (1.8.27), вихідний показник  $g^{n+1}(r) \sim r^{-(n+1)}$  зменшується на 3, тоді  $I_{1n}(R) \sim R^{-(n-2)}$ .

Отже, виконане дослідження асимптотичної поведінки діаграм з однією польовою вершиною у випадку (1.9.8). Воно показало наявність двох типів діаграм. Діаграми, які виникають у (1.8.27) при спарюванні у польовій вершині операторів  $\hat{D}_2$  і  $\hat{D}_3$ , містять безмежно великі доданки. Спарювання ж операторів  $\hat{D}_4, \hat{D}_5, \dots, \hat{D}_n$  приводить після інтегрування до збіжних діаграм. У операторі  $\hat{D}_2$  немає операторів  $\hat{D}_2, \hat{D}_3, \hat{D}_5$ , тому всі діаграми (1.8.27)–(1.8.31) збігаються. Оператори  $\hat{D}_{2n+1}$  відсутні тому, що в задачі (1.2.1) немає зовнішнього неоднорідного поля  $h(R)$ . А оператор  $\hat{D}_2$ , що приводить до найсильнішої розбіжності (1.9.9), занесений у базисну густину міри (1.7.1) (у цьому випадку в гаусову базисну густину міри, задану виразом (1.8.4)).

Оцінки (1.9.15)–(1.9.19) дають змогу прослідкувати за асимптотичною поведінкою діаграм з двома і більше польовими вершинами у виразах (1.8.27)–(1.8.33). При цьому найсильніше будуть розбігатись діаграми з великою кількістю польових вершин і малою кількістю ліній  $g$ , що з'єднують ці вершини. У кожній діаграмі потрібно виділяти близьку  $U$  й далеку  $W$  частини.



Розглянемо діаграми з двома польовими вершинами. Почнемо з найпростішого прикладу, з діаграми

$$I_{111} = \begin{array}{c} \bullet \text{---} \bullet \\ | \qquad | \end{array} . \quad (1.9.20)$$

Вона виникла б у (1.8.33) при спарюванні замість  $1/2\hat{D}_2^2$  операторів<sup>13</sup>  $1/2\hat{D}_2^2$ . Таких операторів немає в  $\hat{D}_2$ , оскільки вони внесені у базисну густину міри в (1.8.4). У формулі (1.8.33) немає і діаграми (1.9.20). Однак розгляд цих інтегралів корисний. Це була б діаграма, яка має найсильнішу розбіжність за умов (1.9.8). Виділимо у діаграмі (1.9.20) близьку й далеку частини. Обидві матимуть розбіжності однакового порядку за  $\kappa$ , але різні залежності від  $R$ . Скористаємось виразами (1.9.5), (1.9.9) для  $I_{III}$ :

$$\begin{aligned} I_{111} &= U_{111} + W_{111} = & (1.9.21) \\ &= \frac{2\pi}{R} \mathcal{M}_2 \int_C^\infty dr r g(r) \int_{|r-R|}^{r+R} ds s [U_{11}(s) + W_{11}(s)], \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} U_{111} &= \frac{2\pi}{R} \mathcal{M}_2 \int_C^R dr r g(r) \int_{|r-R|}^{r+R} ds s [U_{11}(s) + W_{11}(s)], \\ W_{111} &= \frac{2\pi}{R} \mathcal{M}_2 \int_R^\infty dr r g(r) \int_{|r-R|}^{r+R} ds s [U_{11}(s) + W_{11}(s)]. \end{aligned} \quad (1.9.22)$$

Підставляючи замість  $U_{11} + W_{11}$  їх значення, отримуємо явні вирази для  $U_{111}$  і  $W_{111}$ . Так,

$$U_{111} = U_{111}^{(1)} + U_{111}^{(2)}, \quad (1.9.23)$$

<sup>13</sup>Оператори  $\hat{D}_2$  не входять до складу  $\hat{D}_2$ , оскільки ряд для  $\hat{D}_2$  починається з операторів  $\hat{D}_4$ .

де

$$U_{111}^{(1)} = \frac{2\pi}{R} \mathcal{M}_2^2 A^3 \int_C^R dr e^{-\kappa r} \int_{|r-R|}^{r+R} \frac{2\pi}{\kappa^2} \left[ \frac{e^{-\kappa s}}{2} (e^{-2\kappa s} - e^{-2\kappa C}) + e^{-\kappa s} \kappa(s-C) \right] ds, \quad (1.9.24)$$

$$U_{111}^{(2)} = \frac{2\pi}{R} \mathcal{M}_2^2 A^3 \int_C^R dr e^{-\kappa r} \int_{|r-R|}^{r+R} \frac{2\pi}{\kappa^2} e^{-2\kappa s} \operatorname{sh}(\kappa s) ds. \quad (1.9.25)$$

Нас цікавить поведінка  $U_{111}$  у граничному переході (1.9.8), тому скористаємось розкладами в ряд виразів під внутрішнім інтегралом:

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

У результаті знаходимо

$$U_{111}^{(1)} = \frac{8\pi^2}{R} \mathcal{M}_2^2 A^3 \int_C^R e^{-\kappa r} \left[ \frac{r^3}{3} + rR^2(1 - m^{-2}) \right] dr. \quad (1.9.26)$$

Після інтегрування і підстановки меж відповідно до (1.9.8) отримуємо

$$U_{111}^{(1)} = 8\pi^2 \mathcal{M}_2^2 A^3 \left[ \frac{1}{12}(1 - m^{-4}) + \frac{1}{2}(1 - m^{-2}) \right] \times \\ \times \frac{m^2 - 1}{m^2} R^3 e^{-\kappa R}. \quad (1.9.27)$$

Виконаємо подібні обчислення для  $U_{111}^{(2)}$ :

$$U_{111}^{(2)} = \frac{2\pi}{R} \mathcal{M}_2^2 A^3 \int_C^R dr e^{-\kappa r} \int_{|r-R|}^{r+R} \frac{2\pi}{\kappa^2} e^{-2\kappa s} \operatorname{sh}(\kappa s) ds = \\ = 4\pi^2 \mathcal{M}_2^2 A^3 \kappa^{-1} R^2 (1 - m^{-2}) \exp(-\kappa R). \quad (1.9.28)$$

Якщо взяти до уваги граничний перехід (1.9.8), і врахувати, що

$$R^3 = \varkappa^{-3} (\varkappa R)^3, \quad R^2 \varkappa^{-1} = (\varkappa R)^2 \varkappa^{-3},$$

то величина  $U_{111}$  має таку поведінку:

$$U_{111} = U_{111}^{(1)} + U_{111}^{(2)} \sim \varkappa^{-3}. \quad (1.9.29)$$

Далека частина  $W_{111}$  також складається з двох доданків:  $W_{111}^{(1)}$ , який містить  $U_{11}$ , і  $W_{111}^{(2)}$ , який містить  $W_{11}$ . Перший з них має вигляд

$$W_{111}^{(1)} = \frac{2\pi}{R} \mathcal{M}_2^2 A^3 \int_R^\infty e^{-\varkappa r} dr \int_{|r-R|}^{r+R} U_{11}(s) s ds. \quad (1.9.30)$$

У другому інтегралі підставляємо (1.9.6) для  $U_{11}$  і виконуємо ті ж розклади, що при обчисленні (1.9.23). У результаті (у граничному переході (1.9.8)) маємо

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

У граничному переході, в якому ми працюємо, цей вираз пропорційний до  $\varkappa^{-3}$ . Так само поводитьься і другий доданок:

$$\begin{aligned} W_{111}^{(2)} &= \frac{2\pi}{R} \mathcal{M}_2 A \int_R^\infty dr e^{-\varkappa r} \int_{|r-R|}^{r+R} s ds W_{11}(s) = \\ &= \frac{4\pi^2}{R} \mathcal{M}_2^2 A^3 \int_R^\infty dr e^{-\varkappa r} \int_{|r-R|}^{r+R} \frac{\text{sh}(\varkappa s)}{\varkappa^2} e^{-\varkappa r s} ds. \end{aligned}$$

У граничному переході маємо

$$W_{111}^{(2)} = 2\pi^2 \mathcal{M}_2^2 A^3 e^{-\varkappa R} \varkappa^{-3}. \quad (1.9.31)$$

Як бачимо, характер поведінки всіх чотирьох частин діаграми однаковий, всі вони пропорційні до  $\kappa^{-3}$ . Тому надалі розглядатимемо лише яку-небудь одну частину, наприклад, менш громіздку, зв'язану тільки з далекими доданками [297, 298].

При оцінці діаграми  $I_{131} = \text{---}$ , утвореної спарюванням операторів  $\hat{D}_4^2$ , скористаємось результатом (1.9.16) для випадку  $n = 3$  і розглянемо внески від далеких частин:

$$\begin{aligned} W_{131}^{(2)} &\approx \frac{\mathcal{M}_4^2 A^5}{R} \int_R^\infty dr E_2(4\kappa r) \int_{|r-R|}^{r+R} e^{-\kappa s} ds = \\ &= \mathcal{M}_4^2 A^5 \int_R^\infty E_2(4\kappa r) e^{-\kappa r} \frac{\text{sh}(\kappa R)}{\kappa R} dr \sim \\ &\sim \mathcal{M}_4^2 A^5 \frac{\text{sh}(\kappa R)}{\kappa R} \frac{1}{\kappa} e^{-5\kappa R}, \end{aligned} \quad (1.9.32)$$

де відповідно до [300] використано, що  $E_{n-1}(\kappa x) \sim e^{-\kappa x} (n-2)^{-1}$ ,  $n > 2$ .

Отже, у граничному переході  $\kappa \rightarrow 0$ ,  $R \rightarrow \infty$ ,  $\kappa R < 1$  діаграма  $W_{131}$  пропорційна до  $\kappa^{-1}$ .

Для діаграми  $I_{151}$ , що виникає при спарюванні  $\hat{D}_6^2$  маємо відповідно до (1.9.13) таку інтегральну оцінку:

$$\begin{aligned} I_{151} &\sim \mathcal{M}_6^2 A^7 \frac{1}{R} \int_R^\infty \frac{E_4(6\kappa r)}{r^2} dr \int_{|r-R|}^{r+R} e^{-\kappa s} ds \sim \\ &\sim \kappa f_6(\kappa R), \end{aligned} \quad (1.9.33)$$

де  $f_6(\kappa R) = \mathcal{M}_6^2 A^7 \frac{\text{sh}(\kappa R)}{\kappa R} \frac{e^{-7\kappa R}}{\kappa R}$  — збіжна функція  $\kappa R$ . При  $\kappa \rightarrow 0$  внесок  $I_{151}$  в асимптотичну поведінку бінарної кореляційної функції пропорційний до  $\kappa$ .

Для інших діаграм з двома польовими вершинами знаходимо:

$$I_{171} \sim \mathcal{M}_8 A^9 \frac{\text{sh}(\kappa R)}{\kappa R} \frac{e^{-9\kappa R}}{R^3} = \kappa^3 f_8(\kappa R), \quad (1.9.34)$$

$$I_{1n1} \sim \kappa^{n-4} f_{n+1}(\kappa R). \quad (1.9.35)$$

Діаграма  $I_{171}$  виникає після спарювання операторів  $(1/2)\hat{D}_8^2$  у формулі (1.8.33), а діаграма  $I_{1n1}$  – операторів  $(1/2)\hat{D}_{n+1}^2$ . Як бачимо, внесок операторів з великими  $n$  в асимптотичну поведінку бінарної кореляційної функції зникає малий при  $\kappa \rightarrow 0$ . Асимптотичні оцінки (1.9.9), (1.9.15), (1.9.16), (1.9.27)–(1.9.35) можна легко отримати з допомогою масштабних перетворень.


У діаграмах, які були розглянуті вище, кожному лінії співставимо з величиною, що пропорційна до  $\kappa$ :

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


а інтеграл за координатами, що відповідає польовій вершині, – з величиною

$$dr = \kappa^{-3} d(\kappa r),$$


У результаті отримуємо такі асимптотичні оцінки діаграм:




$$\sim \kappa^2 \kappa^{-3} = \kappa^{-1}, \quad (1.9.36)$$




$$\sim \kappa^3 \kappa^{-3} = \kappa^0, \quad (1.9.37)$$




$$\sim \kappa^4 \kappa^{-3} = \kappa^1,$$




$$\sim \kappa^{n+1} \kappa^{-3} = \kappa^{n-2},$$



$$\sim \kappa^3 \kappa^{-6} = \kappa^{-3},$$



$$\sim \kappa^5 \kappa^{-6} = \kappa^{-1},$$



$$\sim \kappa^{n+2} \kappa^{-6} = \kappa^{n-4}. \quad (1.9.38)$$

Всі наведені тут оцінки співпадають з результатами проведених вище обчислень, за винятком оцінки (1.9.37) для діаграми, яка у відповідності з (1.9.19) при виконанні (1.9.8) пропорційна до  $\ln(\kappa R)$ . За допомогою масштабної оцінки можна знайти асимптотичну поведінку довільної діаграми у бінарній кореляційній

функції, і вона буде правильною для всіх випадків. Виняток становлять ті діаграми, в яких оцінка пропорційна  $\varkappa^0$ . У цих випадках істинна оцінка буде пропорційна  $\ln(\varkappa R)$ , подібно до (1.9.19).

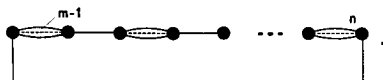
Виконаємо масштабну оцінку діаграми (1.8.33). Розглянемо середнє

$$\left\langle C_n \left[ \text{th } \hat{\Delta}_1 \text{ th } \hat{\Delta}_2 \frac{1}{n!} (\hat{D}_m)^n \right] \right\rangle_G. \quad (1.9.39)$$

Ця діаграма має  $n$  польових вершин. Із кожної вершини виходять  $m$  ліній  $g$ . Множник  $\exp(\hat{g}(\mathbf{12}))$  і фіксовані вершини діаграми не враховуються. Для конкретності замість  $\text{th } \hat{\Delta}_1 \text{ th } \hat{\Delta}_2$  підставимо  $\hat{\Delta}_1 \hat{\Delta}_2$  і розглянемо середнє

$$\left\langle C_n \left[ \hat{\Delta}_1 \hat{\Delta}_2 \frac{1}{n!} (\hat{D}_m)^n \right] \right\rangle_G. \quad (1.9.40)$$

Цьому випадкові відповідає низка діаграм, серед яких, зокрема, діаграма типу:



Всі такі діаграми, як і ця конкретна, мають  $n$  вершин і  $(1/2)nm + 1$  ліній. В границі  $\varkappa \rightarrow 0$ ,  $R \rightarrow \infty$  та  $\varkappa R < 1$  вказана діаграма пропорційна до

$$\varkappa^{-3n + \frac{1}{2}nm + 1} = \varkappa^{\frac{1}{2}n(m-6) + 1}. \quad (1.9.41)$$

Отже, у ряді (1.8.26) для бінарної кореляційної функції після усереднення операторів  $(\hat{D}_4)^n$  виникають розбіжні інтеграли при температурі  $T = T_c^{(0)}$ , що визначається співвідношенням (1.8.36). Всі вони утворюються при спарюванні операторів  $\hat{D}_m$ , де  $m < 6$ . Відібрати й просумувати ці діаграми, очевидно, неможливо. Щоб при проведенні розрахунків вільної енергії не виникали розбіжні діаграми, у показнику експоненти (1.7.1) слід залишити оператори  $\hat{D}_2$  і  $\hat{D}_4$ , а не розкладати їх у ряди. Це дещо ускладнює

математичні розрахунки, однак суттєво спрощує опис поведінки системи поблизу точки фазового переходу. Отже, приходимо до формули (1.7.3).

Сформулюємо доведену вище теорему.

**Теорема про базисну густину міри у критичній точці.**

Якщо в (1.8.2) або в (1.8.23) із оператора  $\hat{D}_2$  вилучити оператор  $\hat{D}_4$ , записавши  $\hat{D}_2 = \bar{D} + \hat{D}_4$ , то у виразах для статистичної суми:

$$Z = 2^N \int \exp[-\beta H(\rho)] \left( 1 + \bar{D} + \frac{1}{2}(\bar{D})^2 + \dots \right) \times \\ \times \exp \left( 2\pi i \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} + \sum_{n=1}^2 D_{2n}(\omega) \right) (d\rho)^N (d\omega)^N,$$

де  $D_{2n}(\omega)$  означено в (1.4.15), та парної кореляційної функції

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle = Z^{-1} \int \exp[-\beta H(\rho)] \text{th } \hat{D}_2 \text{th } \hat{D}_1 \times \\ \times \left( 1 + \bar{D} + \frac{1}{2}(\bar{D})^2 + \dots \right) \times \\ \times \exp \left( 2\pi i \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} + \sum_{n=1}^2 D_{2n}(\omega) \right) (d\rho)^N (d\omega)^N$$

не виникатиме розбіжних інтегралів ні при якій температурі<sup>14</sup>. При цьому густина міри виду

$$\mathcal{W}_4(\rho) = 2^N \int \exp[-\beta H(\rho)] \exp \left[ 2\pi i \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} + \right. \\ \left. + D_2(\omega) + D_4(\omega) \right] (d\omega)^N \quad (1.9.42)$$

<sup>14</sup>За виключенням логарифмічних розбіжностей, які виникають завдяки усередненню операторів  $(\hat{D}_6)^m$ . Такі розбіжності існують при використанні гаусових розподілів і, очевидно, будуть відсутніми при розрахунках з негаусовою густиною міри (1.9.42).

є базисною густиною міри в околі температур, що містять критичну точку.

Як впливає із формули (1.9.41), оператор  $\hat{D}_6$  граничний. Гаусові середні типу (1.9.39) відносно оператора  $\hat{D}_6$  можуть привести до логарифмічних розбіжностей:

$$\left\langle Cn \left[ \hat{\Delta}_1 \hat{\Delta}_2 \frac{1}{n!} (\hat{D}_6)^n \right] \right\rangle_G \sim \ln(\varkappa R). \quad (1.9.43)$$

У загальному випадку (наприклад, при розгляді критичної точки газ-рідина) базисною є шестирна густина міри

$$\mathcal{W}_6(\rho) = 2^N \int \exp[-\beta H(\rho)] \exp \left[ 2\pi i \sum \omega_k \rho_k + D_2 + D_4 + D_6 \right] (d\omega)^N. \quad (1.9.44)$$

У випадку  $d$ -мірного простору екранований потенціал (1.9.1) для  $d \geq 3$  поводить себе (асимптотично)

$$g(r) = A' e^{-r/\xi} r^{-d+2}.$$

Використовуючи співвідношення (1.9.41) зробимо наступний висновок.

У граничному переході (1.9.8) збіжними діаграмами будуть вирази, обчислені з допомогою базисної густини міри  $\mathcal{W}_{n_0}(\rho)$ , для якої при довільному  $n$

$$-dn + nn_0 \frac{d-2}{2} > 0.$$

Отже,

$$n_0 = 2d(d-2)^{-1}. \quad (1.9.45)$$

У випадку тривимірних систем граничним є оператор  $\hat{D}_6$ , а розподіл  $\mathcal{W}_4(\rho)$  описує основні події поблизу ТФП. Для чотиривимірних систем  $n_0 = 4$  базисним є розподіл Гауса. Для двовимірного випадку  $n_0 \rightarrow \infty$  і в якобіані переходу потрібно врахувати всі доданки в показнику експоненти, тобто задача мусить мати точний розв'язок.



## 1.10. Використання негаусових мір для опису фазового переходу в тривимірних системах

Проведені вище розрахунки дають змогу сформулювати основні принципи теоретичного опису фазових переходів на мікроскопічному рівні. По-перше, встановлено (і це узгоджується з раніше одержаними результатами [11–16, 26, 93]), що використання гаусового розподілу фаз флуктуацій параметра порядку типу (1.8.4) приводить до нефізичних розбіжностей у виразах для статистичної суми (1.8.7), вільної енергії та інших величин при наближенні до точки фазового переходу. Виникнення подібних розбіжностей пов'язане із специфікою математичного апарату, який використовують при обчисленнях, а не з фізикою задачі. Ця специфіка полягає в тому, що ми намагаємося використати для опису системи гаусовий розподіл, дисперсія якого прямує до безмежності з наближенням до точки фазового переходу. Усунення нефізичних розбіжностей у виразах для термодинамічних та структурних характеристик тривимірних систем поблизу ТФП через процедуру перенормування моментів гаусового розподілу (внески від операторів  $\hat{D}_n$  з  $n > 2$ ) є однією з центральних проблем при описі фазових переходів у тривимірних системах. Шлях до її вирішення ми описали в цій монографії. В процесі опису критичної поведінки тривимірних систем слід використовувати негаусові розподіли флуктуацій. Це виключає появу подібних нефізичних розбіжностей і дає змогу зосередити основну увагу на описові особливостей поведінки основних характеристик тривимірних систем поблизу ТФП.

Використання негаусових базисних розподілів при розрахунку статистичної суми системи вирішує проблему нефізичних розбіжностей, однак, пов'язане з труднощами обчислювального характеру. Основна з них полягає в контролі за точністю обчислень. У випадку використання гаусової густини міри таку проблему вирішують послідовним урахуванням першого, другого і т. д. порядків теорії збурень. Незважаючи на асимптотичний характер рядів, що виникають при цьому, існує принаймні формальний критерій точності обчислень. Він виявляється ефектив-

ним для обчислення критичних показників та інших універсальних величин, які визначають асимптотичну поведінку системи при наближенні до ТФП. Розрахунок повних виразів для термодинамічних та структурних характеристик системи поблизу ТФП у такому підході проблематичний.

Послідовний опис ФП може здійснюватися при використанні негаусових базисних розподілів, що покажемо в наступних розділах. Така процедура, однак позбавляє нас змоги здійснювати формальний контроль за точністю обчислень порівняно з врахуванням вищих гаусових моментів при використанні гаусового розподілу.

Критерієм точності розрахунків при використанні негаусових розподілів є послідовне збільшення їх порядку. Така процедура полягає у наступному.

Функціональне представлення статистичної суми однокомпонентної 3D спінової моделі з гамільтоніаном (1.2.1) при  $\hbar = 0$  має вигляд

$$Z = C \int \exp \left( -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} d(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \sum_{n=2}^{m_0} \frac{a_{2n}}{(2n)!} N^{1-n} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n} \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}}} \rho_{\mathbf{k}_1} \cdots \rho_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}} \right) (d\rho)^N, \quad (1.10.1)$$

де величина  $d(\mathbf{k})$  приведена в (1.5.2), постійна  $C$  означена в (1.5.3), коефіцієнти  $a_{2n}$  задані в (1.4.29). Величина  $m_0$  у (1.10.1) прямує до безмежності і очевидно, що виконати точний розрахунок виразу (1.10.1) технічно складно. Першим наближенням, яке дає змогу здійснити конкретні розрахунки при дослідженні критичної поведінки моделі є умова

$$m_0 = 2. \quad (1.10.2)$$

Вона відповідає наближенню моделі  $\rho^4$ . Таке наближення основне при використанні теоретико-польового підходу<sup>15</sup> до обчислення універсальних характеристик фазового переходу. Наступне наближення пов'язане з умовою

$$m_0 = 3 \quad (1.10.3)$$

і відповідає використанню моделі  $\rho^6$ . Очевидно, що модель  $\rho^6$  точніше апроксимує статистичну суму (1.10.1) ніж модель  $\rho^4$  і має точніше описати модель поблизу ТФП. Наступні наближення  $m_0 = 4, m_0 = 5$  і т. д. відповідають уточненню критичної поведінки. При  $m_0 \rightarrow \infty$  модель  $\rho^{m_0}$  має мати таку ж критичну поведінку як початкова (1.2.1).

Отже, використання негаусових розподілів для опису критичної поведінки моделі магнетика принципово змінює оцінку точності розрахунків. Відмовляючись від формального параметра розкладу (пов'язаного з врахуванням певних порядків теорії збурень відносно гаусового розподілу), ми використовуємо послідовність вищих негаусових розподілів ( $m_0 = 2, 3, 4, \dots$ ). Критерієм точності обчислень є різниця між значеннями шуканих фізичних величин у двох послідовних наближеннях. Як покажемо далі, фізичні величини виходять на насичення зі збільшенням величини  $m_0$ , причому, вже при  $m_0 = 3$  одержуються результати, які добре узгоджуються з експериментальними даними.

---

<sup>15</sup>Слід, однак зауважити, що в цьому підході вважають, що величина  $a_4$  (константа взаємодії) мала і теорію збурень будують шляхом розкладу в ряд і розрахунком гаусових моментів. Це не вирішує проблеми розрахунку неуніверсальних характеристик моделі з причин, описаних у § 1.9. Розрахунок критичних показників вдається отримати лише завдяки симетрійним властивостям системи поблизу ТФП.

## Розділ 2

# Метод розрахунку статистичної суми поблизу точки фазового переходу

У цьому розділі описаний метод розрахунку статистичної суми тривимірної фізичної системи. Він дає змогу врахувати вплив на поведінку системи довгохвильових флуктуацій, які відіграють важливу роль в описі критичних властивостей тривимірних систем. Оскільки в околі точки фазового переходу дисперсія гаусового розподілу аномально зростає, його використання стає неефективним. Для адекватного опису системи слід використовувати складніші розподіли, які у показнику експоненти, крім квадрату змінної, містять вищі її степені. Такій вимозі задовольняють четвертий або шестирний розподіли флуктуацій, мова про які йшла в попередньому розділі.

З фізичної точки зору така ситуація природна. Використання складніших від гаусового розподілів для розрахунку вільної енергії системи дає змогу знайти результат підсумування безмежної кількості гаусових моментів, які аномально зростають з наближенням до ТФП. Зокрема, використання як базисного четвертого розподілу є еквівалентним до підсумовування безмежної кількості доданків, які виникають завдяки засередненню факторів  $\sum_{\mathbf{k}_i \in B} \mathcal{M}_4 \omega_{\mathbf{k}_1} \cdots \omega_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4}$  за гаусовою мірою. Як було показано в попередньому розділі монографії, цілі класи таких гаусових моментів є розбіжними в ТФП. Ці розбіжності мають суто математичну природу і не відображають фізики фазового переходу. Проте, ускладнення форми розподілу створює

певні труднощі обчислювального характеру. Ось одна з них. Коли інтегрування за однією із спряжених змінних переводить гаусовий розподіл знову у гаусовий, то у випадку використання негаусового розподілу в результаті такої операції ми отримуємо експоненту, показник якої містить всі степені спряженої змінної. Це відбувається навіть тоді, коли вихідний розподіл містить обмежену кількість доданків, наприклад, другий і четвертий степінь змінної. Така особливість негаусового розподілу породжує низку запитань, оскільки, в конкретних розрахунках маємо обмежуватися скінченною кількістю доданків у показнику експоненти.

При розрахунку термодинамічних та інших характеристик системи поблизу ТФП з використанням негаусових розподілів виникають певні незручності, пов'язані з незастосовністю стандартних діаграмних методів, які розвинуті для випадку використання гаусових розподілів. Теорія збурень для негаусових розподілів потребує свого розвитку. Альтернативою до врахування вищих порядків гаусової теорії збурень є метод прямого розрахунку виразу для статистичної суми з врахуванням щоразу більшої кількості доданків у показнику експоненти негаусового розподілу флуктуацій. Це не приводить, однак до труднощів принципового характеру, оскільки інтеграли, які виникають при цьому, зводяться до однократних.

## 2.1. Четвірний базисний розподіл.

### Модель $\rho^4$

Найпростішим негаусовим розподілом флуктуацій є четвірний. Скориставшись результатами попереднього розділу, статистичну суму системи однокомпонентних спінів ґраткової системи можна подати у вигляді

$$Z = 2^N \int \exp(\beta H(\rho)) \left( 1 + D_4 + \frac{1}{2} D_4^2 + \dots \right) \times \exp \left[ 2\pi i \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} + D_2 + D_4 \right] (d\omega)^N (d\rho)^N, \quad (2.1.1)$$

де  $\mathcal{D}_4 = \sum_{l \geq 3} D_{2l}$ . Традиційні методи розрахунку, які ґрунтуються на використанні гаусових інтегралів, незастосовні при використанні (2.1.1). У подальших розрахунках статистичної суми обмежимося таким наближенням:

$$Z = 2^N \int e^{-\beta H(\rho)} \exp \left[ 2\pi i \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} + D_2 + D_4 \right] (d\omega)^N (d\rho)^N. \quad (2.1.2)$$

Вирази для величин  $D_2$  і  $D_4$  приведені в (1.4.15). Наближення для статистичної суми (2.1.2) називатимемо надалі четвірним [242, 243]. За своєю суттю таке наближення відповідає нехтуванню внеску до  $Z$  від величин  $D_6$ ,  $D_8$  і т. д. Вибір саме такого наближення пов'язаний з тим, що навіть у випадку  $\mathcal{D}_4 = 0$  (див. (2.1.1)) вдається побудувати математичну схему, яка на мікроскопічному рівні описує фазовий перехід у  $3D$  вимірних ґраткових системах. Врахування внесків від величин  $\mathcal{D}_4$  лише уточнюють фізичні величини (див. розділ 6). Оригінальний метод обчислення інтегралів типу (2.1.2) запропонований в [301–303].

Вираз (2.1.2) можна звести до традиційнішого запису, виконавши інтегрування за змінними  $\omega_{\mathbf{k}}$ . Після такого перетворення знаходимо

$$Z = C \int \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} d(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \sum_{n \geq 2} \frac{1}{(2n)!} N^{1-n} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}} a_{2n} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}} \right] (d\rho)^N. \quad (2.1.3)$$

Коефіцієнт  $d(\mathbf{k}) = a_2 - \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})$  містить фур'є-образ потенціалу взаємодії, а постійна  $C$  має вигляд:

$$C = 2^N \sqrt{2}^{N-1} [Q(\mathcal{M}_2, \mathcal{M}_4)]^N. \quad (2.1.4)$$

Для величини  $Q(\mathcal{M}_2, \mathcal{M}_4)$  справедливий вираз:

$$Q(\mathcal{M}_2, \mathcal{M}_4) = e^{a_0} = \int_{-\infty}^{\infty} f_4(\tilde{\omega}_1) d\tilde{\omega}_1, \quad (2.1.5)$$

де функція  $f_4(\tilde{\omega}_1)$  задовільняє співвідношенню:

$$f_4(\tilde{\omega}_1) = \exp(D_2 + D_4). \quad (2.1.6)$$

Коефіцієнти  $a_{2n}$  сталі величини і їх визначають із загальних формул (1.4.24), де в як функцію  $f(\tilde{\omega}_1)$  (1.4.23) використовують наближення (2.1.6). У результаті обчислень одержуємо

$$e^{a_0} = (2\pi)^{-1/2} \left( \frac{3}{\mathcal{M}'_4} \right)^{1/4} e^{y^2/4} U(0, y), \quad (2.1.7)$$

де  $\mathcal{M}'_4 = -\mathcal{M}_4$ , а  $U(a, y)$  – функція параболічного циліндра Вебера порядку  $a$  з аргументом

$$y = \sqrt{3} \mathcal{M}_2 \mathcal{M}'_4^{-1/2}. \quad (2.1.8)$$

Зауважмо, що у випадку додатніх значень аргумента  $y$  функція  $U(0, y)$  може бути виражена через функцію Макдональда  $K_{1/4}(y^2/4)$  [304].

У наближенні (2.1.6) для коефіцієнтів  $a_{2n}$  із (2.1.3) знаходимо явні вирази

$$\begin{aligned} a_2 &= \left( \frac{3}{\mathcal{M}'_4} \right)^{1/2} U(y), & a_4 &= \frac{3}{\mathcal{M}'_4} \varphi(y), \\ a_6 &= \left( \frac{3}{\mathcal{M}'_4} \right)^{3/2} \varphi_1(y), & a_8 &= \left( \frac{3}{\mathcal{M}'_4} \right)^2 \varphi_2(y), \end{aligned} \quad (2.1.9)$$

де

$$\begin{aligned} U(y) &= \frac{U(1, y)}{U(0, y)}, \\ \varphi(y) &= 3U^2(y) + 2yU(y) - 2, \\ \varphi_1(y) &= 30U^3(y) + 30yU^2(y) + 4(y^2 - 6)U(y) - 4y, \\ \varphi_2(y) &= 630U^4(y) + 840yU^3(y) + 84(3y^2 - 8)U^2(y) + \\ &+ 8y(y^2 - 45)U(y) - 8y^2 + 120. \end{aligned} \quad (2.1.10)$$

При цьому виникає така ситуація. Гаусове наближення статистичної суми в  $\omega$ -представленні переходить у гаусове наближення в  $\rho$ -представленні. Використання четвірного базисного розподілу (2.1.2) при інтегруванні за змінними  $\omega$  приводить до формули (2.1.3), де показник експоненти підінтегрального виразу містить всі парні степені змінної  $\rho_{\mathbf{k}}$ .

У виразі (2.1.3) тимчасово не прийматимемо до уваги доданки<sup>1</sup>

$$\sum_{n \geq 3} \frac{a_{2n}}{(2n)!} N^{1-n} \sum_{k_1, \dots, k_{2n}} \rho_{k_1} \cdots \rho_{k_{2n}} \delta_{k_1 + \dots + k_{2n}}.$$

Подібно до (2.1.2) обмежимося врахуванням тільки другого та четвертого степенів змінної  $\rho_{\mathbf{k}}$ . Тоді одержуємо:

$$Z_4 = C \int \exp [E_4(\rho)] (d\rho)^N, \quad (2.1.11)$$

де постійна  $C$  визначена в (2.1.4), а для  $E_4(\rho)$  маємо вираз:

$$\begin{aligned} E_4(\rho) = & -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} d(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \\ & - \frac{1}{4!} \frac{a_4}{N} \sum_{k_1, \dots, k_4} \rho_{k_1} \cdots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4}. \end{aligned} \quad (2.1.12)$$

Надалі називатимемо його вихідним ефективним гамільтоніаном моделі  $\rho^4$ . У подальшому розгляді (розділи 2–5) індекс “4”, який означає четвірне наближення при розрахунку статистичної суми в (2.1.11), опустимо і вважатимемо, що  $E_4 = E$ ,  $Z_4 = Z$ .

У загальному ж випадку в (2.1.2) і (2.1.11), крім другого і четвертого степенів змінної потрібно враховувати також і вищі її степені [305–310]. Однак як покажемо далі, вже наближення четвірного базисного розподілу повністю описує всі якісні риси фазового переходу другого роду на мікроскопічному рівні.

<sup>1</sup>Вплив доданків вищих порядків ( $\rho^6, \dots$ ) на результати обчислення статистичної суми розглянутих в розділах 6, 8–10.



## 2.2. Інтегрування за множиною колективних змінних нульового рівня

Розрахунок статистичної суми системи взаємодіючих частинок є основною задачею, яка виникає при описі рівноважних характеристик системи поблизу ТФП. Головною особливістю підходу, який використовується в цій монографії, є коректне врахування непрямих взаємодій. Вони відіграють основну роль в околі ТФП і складають поняття колективних ефектів.

Особливості поведінки системи, які виникають у критичній області температур, пов'язані з впливом довгохвильових флуктуацій спінового моменту. Вони описуються змінними  $\rho_{\mathbf{k}}$  з малими індексами  $\mathbf{k}$ . Причому, особлива роль серед них належить змінній  $\rho_0$ . Однак як бачимо із співвідношень (2.1.11), (2.1.12), всі змінні  $\rho_{\mathbf{k}}$  пов'язані між собою наявністю символу Кронекера  $\delta_{\mathbf{k}_1+\dots+\mathbf{k}_{2n}}$ . Досягти розділення змінних у (2.1.11) в загальному випадку не вдається. Існує два альтернативні шляхи розрахунку статистичної суми.

Перший з них, який широко застосовується при описі критичної поведінки тривимірних систем, полягає в використанні розкладів у ряд старших степенів змінної ефективного гамільтоніану (четвертого, шостого і т. д.) та обчисленні статистичної суми системи через моменти відносно гаусового розподілу

$$Z = C \int \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in B} (a_2 - \beta \tilde{\Phi}(k)) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right] \times \\ \times \left\{ 1 - x + \frac{1}{2} x^2 - \dots \right\} (d\rho)^N,$$

де

$$x = \sum_{n \geq 2} \frac{a_{2n}}{(2n)!} N^{1-n} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n} \\ \mathbf{k} \in B}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_1+\dots+\mathbf{k}_{2n}}.$$

При цьому припускають, що коефіцієнти  $a_4, a_6$  і т. д. малі порівняно з величиною  $d(k)$  і будують теорію збурень. Такий спосіб розрахунку дає змогу факторизувати підінтегральний вираз у

(2.1.11) і розрахувати статистичну суму як суму гаусових моментів, знайти рекурентні співвідношення тощо. Недоліком такого підходу є проблематичність розкладів у ряд старших степенів змінної ефективного гамільтоніану поблизу ТПФ. Необхідною умовою застосування цього способу розрахунку є виконання нерівності:

$$(a_2 - \beta \tilde{\Phi}(k))^n \gg a_{2n}.$$

Однак відомо, що з наближенням температури до  $T_c$  ця нерівність не виконується. Більше того, у деяких випадках температура ФП  $T_c$  визначається з умови  $a_2 = \beta_c \tilde{\Phi}(0)$ .

Другий шлях полягає у відмові від використання гаусових моментів. Факторизація підінтегрального виразу (2.1.11) досягається усередненням залежності від хвильового вектора для величини  $d(k)$ . Таке усереднення здійснюється не на всьому інтервалі значень хвильових векторів  $|\mathbf{k}| \leq B$ , а лише для певної області хвильових векторів. Саме такий спосіб розрахунку, що ґрунтується на використанні негаусових розподілів, перспективний для опису критичної поведінки тривимірних систем, оскільки він описує картину фазового переходу на мікроскопічному рівні. Крім того, такий спосіб не потребує будь-яких припущень феноменологічного характеру.

Розглянемо вихідний вираз для статистичної суми тривимірної ізінґоподібної системи в наближенні четвірного базисного розподілу

$$Z = C \int \exp[E(\rho)] (d\rho)^N. \quad (2.2.1)$$

Тут  $C$  – постійна величина з (2.1.4),  $N$  – кількість частинок,

$$E(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} d(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{4!N} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}}} a_4 \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \quad (2.2.2)$$

– ефективний гамільтоніан<sup>2</sup> моделі  $\rho^4$ , в якому

$$d(k) = a_2 - \beta \tilde{\Phi}(k),$$

а коефіцієнти  $a_2$ ,  $a_4$  постійні величини (див. (2.1.9)). Сумування за хвильовими векторами в (2.1.2) і (2.2.1) проводять у межах першої зони Бріллюена (1.2.5). Компоненти хвильового вектора приймають значення в таких межах

$$-B < k_x \leq B, \quad -B < k_y \leq B, \quad -B < k_z \leq B,$$

де  $B = \frac{\pi}{c}$ ,  $c$  – стала ґратки. Не знижуючи загальності задачі, для спрощення викладок перейдемо до сферичної зони Бріллюена, вважаючи  $|\mathbf{k}| \leq B$ . Там, де це буде важливо, введемо відповідні поправки.

Відрізок  $[0, B]$  ділимо (див. рис. 2.1) на інтервали  $(B_1, B]$ ,  $(B_2, B_1]$ ,  $\dots$ ,  $(B_{n+1}, B_n]$ , де  $B > B_1 > \dots > B_n \geq 0$ . Кожному виділеному інтервалу індексів  $\mathbf{k}$  у зоні Бріллюена відповідає множина змінних у фазовому просторі  $\rho_{\mathbf{k}}$ . Для зручності подальшого викладу називатимемо ці множини множинами  $n$ -го рівня ( $n$ -им шаром у фазовому просторі КЗ). Вважатимемо, що сукупність змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$  утворює множину нульового рівня, якщо їхні індекси належать до інтервалу  $B_1 < k \leq B$ . Пізніше йде множина першого рівня змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$ , для яких  $B_2 < k \leq B_1$  і т. д. Множина  $n$ -го рівня змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$  відповідає інтервалу індексів  $B_{n+1} < k \leq B_n$ , де  $k = |\mathbf{k}|$ .

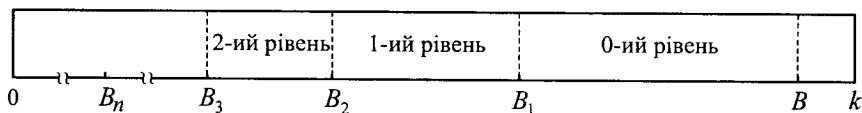


Рис. 2.1. Поділ відрізка півзони Бріллюена на інтервали і відповідні їм множини колективних змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$

<sup>2</sup>Хвильові вектори  $\mathbf{k}$  у (2.2.2) належать до першої зони Бріллюена  $B$  (див. (1.2.5)). Надалі для скорочення запису відзначатимемо лише в яких межах змінюється модуль хвильового вектора  $k = |\mathbf{k}|$ . Зокрема  $k \leq B$  у (2.2.2) і в наступних формулах.

У статистичній сумі (2.2.1) інтегрування за змінними  $\rho_{\mathbf{k}}$  вестимемо поетапно: спочатку проінтегруємо за колективними змінними  $\rho_{\mathbf{k}}$ , що належать до множини нульового рівня, пізніше за множиною змінних першого рівня і т. д. Така процедура розрахунку приводить до поступового зменшення кількості змінних у підінтегральній функції (процедура згладжування). Існує декілька причин саме такого способу обчислення виразу для статистичної суми. Перша з них – формальна: ефективний гамільтоніан (2.2.2) неможливо факторизувати на всій множині КЗ  $\rho_{\mathbf{k}}$  одночасно. Цього, проте, можна досягнути на кожному з рівнів, якщо потенціал  $\Phi(k)$  замінити його середнім значенням на певному інтервалі хвильових векторів. Друга – принципова: після інтегрування за множиною змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$  з нульового рівня ( $B_1 < k \leq B$ ) в отриманому виразі підінтегральна функція міститиме меншу кількість змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$ , а саме змінні  $\rho_{\mathbf{k}}$  з індексами  $k \leq B_1$ . Це відповідатиме новій зоні Бріллюена:

$$B_1 = \left\{ \mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) \mid k_i = -\frac{\pi}{c_1} + \frac{2\pi}{c_1} \frac{n_i}{N_{1i}}; \quad n_i = 1, 2, \dots, N_{1i} \right\}$$

$$\Lambda_1 = \{ \mathbf{l} = (l_x, l_y, l_z) \mid l_i = c_1 n_i; \quad n_i = 1, 2, \dots, N_{1i}, \quad i = x, y, z \},$$
(2.2.3)

де  $N_{1i}^3 = N_1$ ;  $N_1 = N(B_1/B)^3$ . Такій зоні відповідатиме пряма ґратка з періодом  $c_1 = \pi/B_1$ . Отже, від вихідної ґратки з періодом  $c$  переходимо до блочної ґратки з періодом  $c_1$  ( $c_1 = \pi/B_1, c_1 > c$ ). Так, поступово інтегруючи за множинами різних рівнів фазового простору КЗ, одержуємо послідовність блочних ґраток з періодом блоків, що відповідно збільшуються, та послідовністю ефективних гамільтоніанів  $E(\rho)$ ,  $E^{(1)}(\rho)$ ,  $E^{(2)}(\rho)$ , ... відповідних блочних структур. Кожен з цих "гамільтоніанів" характеризується набором коефіцієнтів:  $E(d(k), a_4)$ ,  $E_1(d_1(k), a_4^{(1)})$ ,  $E_2(d_2(k), a_4^{(2)})$  і т. д., сукупність яких у критичній точці утворює циклічну напівгрупу. Отже, у процесі обчислення виразу для статистичної суми (шляхом поетапного інтегрування), розкриваємо характерні властивості нової симетрії, що виникає в системі у критичній області.

Позначимо через  $s$  параметр поділу відрізка  $[O, B]$  на інтервали  $(B_1, B], (B_2, B_1], \dots$  (рис. 2.1) [89, 242]. Точки поділу визначатимемо із співвідношень:

$$B_1 = \frac{B}{s}, \quad B_2 = \frac{B}{s^2}, \dots, \quad B_n = B \cdot s^{-n}.$$

При цьому отримуємо послідовність блочних структур (табл. 2.1) з періодами ґратки  $c$ ,  $c_1 = sc$ ,  $c_2 = s^2c, \dots, c_n = s^n c$ . Інтегрування статистичної суми, заданої формулою (2.2.1) [243], почнемо із змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$ , що належать до множини КЗ  $\rho_{\mathbf{k}}$  нульового рівня. До останньої входять КЗ із хвильовими векторами  $\mathbf{k}$  з інтервалу  $B_1 < k \leq B$ . Вона містить  $N - N_1$  змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$ , де  $N_1 = Ns^{-3}$ . В інтервалі  $B_1 < k \leq B$  потенціал  $\tilde{\Phi}(k)$  замінимо його середнім значенням, покладаючи

$$\begin{aligned} \sum_{k \leq B} \beta \tilde{\Phi}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} &= \sum_{k \leq B_1} \beta \tilde{\Phi}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + \\ &+ \sum_{B_1 < k \leq B} \left[ \beta \tilde{\Phi}(B_1, B) + \Delta \tilde{\Phi}(k) \right] \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}, \end{aligned}$$

де  $\tilde{\Phi}(B_1 B)$  – середнє значення  $\tilde{\Phi}(k)$  на інтервалі  $(B_1, B]$ ,  $\Delta \tilde{\Phi}(k) = \beta \tilde{\Phi}(k) - \beta \tilde{\Phi}(B_1, B)$  – доповнення до точного значення. Елемент

Табл. 2.1. Параметри ефективних блочних ґраток

Номер блочної ґратки	Період прямої ґратки	Період оберненої ґратки	Кількість частинок в об'ємі $V$
Вихідна	$c$	$B = \pi/c$	$N$
1	$c_1 = sc$	$B_1 = \pi/c_1 = B/s$	$N_1 = Ns^{-3}$
2	$c_2 = s^2c$	$B_2 = \pi/c_2 = B/s^2$	$N_2 = Ns^{-6}$
$n$	$c_n = s^n c$	$B_n = \pi/c_n = B/s^n$	$N_n = Ns^{-3n}$

об'єму фазового простору запишемо у вигляді

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

Для змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$  ( $\rho_{\mathbf{k}}^c, \rho_{\mathbf{k}}^s$ ), за якими виконуватиметься інтегрування, введемо позначення:  $\rho_{\mathbf{k}} = \eta_{\mathbf{k}}$ ,  $|\mathbf{k}| > B_1$ . Статистичну суму запишемо у вигляді

$$\begin{aligned} Z = C \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[ \sum_{k \leq B_1} d(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_{B_1 < k \leq B} d(B_1, B) \eta_{\mathbf{k}} \eta_{-\mathbf{k}} - \sum_{B_1 < k \leq B} \Delta \tilde{\Phi}(k) \eta_{\mathbf{k}} \eta_{-\mathbf{k}} \right] - \right. \\ \left. - \frac{a_4}{4!} N^{-1} \sum_{k_1, \dots, k_4} [\rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \rho_{\mathbf{k}_3} \rho_{\mathbf{k}_4} + 4\rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \rho_{\mathbf{k}_3} \eta_{\mathbf{k}_4} + \right. \\ \left. + 6\rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \eta_{\mathbf{k}_3} \eta_{\mathbf{k}_4} + 4\rho_{\mathbf{k}_1} \eta_{\mathbf{k}_2} \eta_{\mathbf{k}_3} \eta_{\mathbf{k}_4} + \right. \\ \left. + \eta_{\mathbf{k}_1} \eta_{\mathbf{k}_2} \eta_{\mathbf{k}_3} \eta_{\mathbf{k}_4}] \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right\} (d\rho)^{N_1} (d\eta)^{N-N_1}, \quad (2.2.4) \end{aligned}$$

де

$$(d\eta)^{N-N_1} = \prod_{B_1 < k \leq B} d\eta_{\mathbf{k}}^c d\eta_{\mathbf{k}}^s. \quad (2.2.5)$$

Змінні  $\eta_{\mathbf{k}}$  пов'язані між собою та зі змінними  $\rho_{\mathbf{k}}$  тільки символами Кронекера. Факторизація виразу (2.2.4) досягається з використанням заміни:

$$\tilde{\eta}_{\mathbf{l}} = N^{-\frac{1}{2}} \sum_{B_1 < k \leq B} \eta_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}}. \quad (2.2.6)$$

Для цього потрібно мати  $N$  змінних  $\eta_{\mathbf{k}}$ , а їх є тільки  $N - N_1$ . Тому в (2.2.4) здійснимо такі дві операції. По-перше, збільшимо кількість змінних  $\eta_{\mathbf{k}}$  до  $N$ , а суми  $\sum_{B_1 < k \leq B} \dots \eta_{\mathbf{k}} \dots$  доповнимо

до повних сум  $\sum_{0 < k \leq B} \dots \eta_k \dots$ . По-друге, збільшимо кількість інтегралів за  $\eta_k$  від  $N - N_1$  до  $N$ , тобто  $(d\eta)^{N-N_1}$  замінимо на  $(d\eta)^N$ . Щоб вираз (2.2.4) не змінився, введемо під інтеграл додаткову умову

$$\prod_{0 \leq k \leq B_1} \delta(\eta_k). \quad (2.2.7)$$

Вона вимагає, щоб всі  $\eta_k$  для  $|k| \leq B_1$  були тотожно рівні нулеві. Вперше такий прийом був використаний у працях [301–303]. Саме він дає змогу факторизувати підінтегральний вираз (2.2.4) і обчислити вільну енергію системи з використанням негаусової густини міри. Еквівалентне, але простіше представлення інтегралу в (2.2.4) має вигляд

$$\begin{aligned} Z = C \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_1} [d(k) - d(B_1, B)] \rho_k \rho_{-k} + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \sum_{B_1 < k \leq B} \Delta \tilde{\Phi}(k) \eta_k \eta_{-k} - \frac{1}{2} \sum_{k \leq B} d(B_1, B) \eta_k \eta_{-k} - \right. \\ \left. - \frac{1}{4!N} a_4 \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \leq B}} \eta_{k_1} \dots \eta_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} \right\} \times \\ \times \prod_{0 \leq k \leq B_1} \delta(\eta_k - \rho_k) (d\eta)^N (d\rho)^{N_1}. \end{aligned} \quad (2.2.8)$$

Тут не потрібно виписувати всіх можливих комбінацій для доданку, пропорційного до четвертого степеня  $\eta_k$ , як у (2.2.4). Замість того вимагаємо, щоб для  $k \leq B_1$  змінні  $\eta_k$  співпадали із змінними  $\rho_k$ .

Інтегруємо в (2.2.8) за змінними  $\eta_k$ . Для цього представимо  $\delta$ -функцію  $\delta(\eta_k - \rho_k)$  в інтегральній формі. В результаті стати-

стичну суму (2.2.8) запишемо у вигляді:

$$\begin{aligned}
 Z = C \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_1} [d(k) - d(B_1, B)] \rho_k \rho_{-k} \right\} e^{\Delta} \times \\
 \times \exp \left[ -\frac{1}{2} d(B_1, B) \sum_{k \leq B} \eta_k \eta_{-k} - \right. \\
 \left. - \frac{1}{4!N} a_4 \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \leq B}} \eta_{k_1} \dots \eta_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} \right] \times \\
 \times \exp \left[ 2\pi i \sum_{k \leq B_1} \nu_k (\eta_k - \rho_k) \right] (d\rho)^{N_1} (d\nu)^{N_1} (d\eta)^N,
 \end{aligned} \tag{2.2.9}$$

де

$$\Delta = \frac{1}{2} \sum_{B_1 < k \leq B} \Delta \tilde{\Phi}(k) \eta_k \eta_{-k}. \tag{2.2.10}$$

Розділенню змінних при інтегруванні в (2.2.9) за  $\eta_k$  заважає множник  $\exp(\Delta)$ . Вираз для  $\Delta$  діагональний у  $\eta_k$  представленні й не-діагональний у вузловому представленні  $\tilde{\eta}_l$ . Виконаємо в (2.2.9) перетворення (2.2.6). В результаті маємо:

$$\Delta = \frac{1}{2} \sum_{l_1, l_2} \Delta \Phi(|l_1 - l_2|) \tilde{\eta}_{l_1} \tilde{\eta}_{l_2}, \tag{2.2.11}$$

де

$$\Delta \Phi(|l_1 - l_2|) = \frac{1}{N} \sum_{B_1 < k \leq B} \Delta \tilde{\Phi}(k) \exp[-ik(|l_1 - l_2|)].$$

Функція  $\exp \left[ 2\pi i \sum_{k \leq B_1} \nu_k (\eta_k - \rho_k) \right]$  виглядатиме:

$$\exp \left[ -2\pi i \sum_{k \leq B_1} \nu_k \rho_k \right] \exp \left( 2\pi i \sum_{l \in \Lambda} \tilde{\nu}_l \tilde{\eta}_l \right).$$



Ми ввели позначення

$$\tilde{\nu}_1 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k \leq B_1} \nu_k e^{-ik1}. \quad (2.2.12)$$

Підкреслимо, що  $\tilde{\nu}_1$  не є повним фур'є-представленням  $\nu_k$ , оскільки інтервал  $[0, B_1]$  не є зоною Бріллюена для прямої ґратки з періодом  $s$ . Замінімо в добутку

$$e^{\Delta} \exp \left( 2\pi i \sum_{l \in \Lambda} \tilde{\nu}_1 \tilde{\eta}_l \right)$$

величину  $\Delta$  оператором

$$\hat{\Delta} = \frac{1}{2} \sum_{l_1, l_2} \frac{1}{(2\pi i)^2} \Delta \Phi(|l_1 - l_2|) \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\nu}_1 \partial \tilde{\nu}_2} \quad (2.2.13)$$

і у виразі (2.2.9) операторний множник  $\exp(\hat{\Delta})$  винесемо із інтегралів по  $\tilde{\eta}_l$ . У результаті для статистичної суми отримуємо:

$$\begin{aligned} Z = C \cdot j^{-1} \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_1} [d(k) - d(B_1, B)] \rho_k \rho_{-k} - \right. \\ \left. - 2\pi i \sum_{k \leq B_1} \nu_k \rho_k \right\} \exp(\hat{\Delta}) (d\rho)^{N_1} \prod_{l \in \Lambda} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \exp \right. \\ \left. \left[ -\frac{1}{2} d(B_1, B) \tilde{\eta}_l^2 - \frac{1}{4!} a_4 \tilde{\eta}_l^4 + 2\pi i \tilde{\eta}_l \tilde{\nu}_1 \right] d\tilde{\eta}_l \right\} (d\nu)^{N_1}. \end{aligned} \quad (2.2.14)$$

Тепер проінтегруємо за змінними  $\tilde{\eta}_l$ . Перехід від змінних  $\eta_k$  до  $\tilde{\eta}_l$  супроводжується якобіаном переходу  $j$  (див. (1.4.20))

$$(d\eta)^N = d\eta_0 \prod_k^l d\eta_k^c d\eta_k^s = j^{-1} \prod_{l \in \Lambda} d\tilde{\eta}_l. \quad (2.2.15)$$

Інтегрування за  $\tilde{\eta}_1$  приводить до результату:

$$\begin{aligned} \prod_1 \int \exp \left[ -\frac{1}{2}d(B_1, B)\tilde{\eta}_1^2 - \frac{1}{4!}a_4\tilde{\eta}_1^4 + 2\pi i\tilde{\eta}_1\tilde{\nu}_1 \right] d\tilde{\eta}_1 = \\ = [Q(d)]^N I(\tilde{\nu}_1), \end{aligned} \quad (2.2.16)$$

де  $d = d(B_1, B)$ , а для  $I(\tilde{\nu}_1)$  одержуємо:

$$I(\tilde{\nu}_1) = \prod_1 \exp \left( -\sum_{n \geq 1} \frac{1}{(2n)!} S_{2n} \tilde{\nu}_1^{2n} \right). \quad (2.2.17)$$

Величину  $Q(d)$  задають виразом:

$$Q(d) = (2\pi)^{1/2} (3/a_4)^{1/4} \exp(x^2/4) U(0, x), \quad (2.2.18)$$

де  $x$  – аргумент функції параболічного циліндра:

$$x = d(B_1, B) \left( \frac{3}{a_4} \right)^{1/2}. \quad (2.2.19)$$

Коефіцієнти  $S_2, S_4, S_6$  знаходимо за формулами

$$\begin{aligned} S_2 &= (2\pi)^2 \left( \frac{3}{a_4} \right)^{1/2} U(x), \\ S_4 &= (2\pi)^4 \frac{3}{a_4} \varphi(x), \\ S_{2l} &= (2\pi)^{2l} \left( \frac{3}{a_4} \right)^{l/2} \varphi_{l-2}(x); \quad l \geq 3, \end{aligned} \quad (2.2.20)$$

де функції  $U(x)$ ,  $\varphi(x)$  і  $\varphi_1(x)$  задані в (2.1.10).

Ми фактично проінтегрували за множиною КЗ  $\rho_k$  нульового рівня ( $B_1 < k \leq B$ ). Щоб отримати кінцевий результат інтегрування за змінними  $\eta_k$ , підставляємо замість  $\tilde{\nu}_1$  їх значення за

формулою (2.2.12). Маємо повні суми за 1

$$\begin{aligned}\sum_1 \tilde{\nu}_1^2 &= \sum_{k \leq B_1} \nu_k \nu_{-k}, \\ \sum_1 \tilde{\nu}_1^4 &= \frac{1}{N} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k \leq B_1}} \nu_{k_1} \dots \nu_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4}.\end{aligned}\quad (2.2.21)$$

Після підстановки (2.2.16)–(2.2.21) у (2.2.14) отримуємо представлення<sup>3</sup> для статистичної суми:

$$\begin{aligned}Z &= 2^N Q_0 \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_1} [d(k) - d(B_1, B)] \rho_k \rho_{-k} \right\} \times \\ &\times (1 + \Delta_1 + \Delta_2 + \dots) \exp \left( -2\pi i \sum_{k \leq B_1} \nu_k \rho_k \right) \times\end{aligned}$$

<sup>3</sup>Ми скористалися з представлення до оператора  $e^{\hat{\Delta}} \exp(\hat{\Delta}) I(\bar{\nu}_1) = (1 + \Delta_1 + \Delta_2 + \dots) I(\bar{\nu}_1)$ , де  $I(\bar{\nu}_1)$  приведено в (2.2.17). За означенням оператора  $\hat{\Delta}$  в (2.2.13), для  $\Delta_1$  маємо

$$\begin{aligned}\Delta_1 &= \frac{1}{2} \sum_{l_1 l_2} \Delta \Phi(|l_1 - l_2|) (2\pi i)^{-2} (S_2^2 \bar{\nu}_1 l_1 \bar{\nu}_2 - S_2 \delta_{l_1 l_2} + \\ &+ \frac{S_4^2}{(3!)^2} \bar{\nu}_1^3 \bar{\nu}_2^3 - \frac{1}{2} S_4 \bar{\nu}_1^2 \delta_{l_1 l_2} + \frac{1}{3!} S_4 S_2 \bar{\nu}_1^3 \bar{\nu}_2 + \dots).\end{aligned}$$

До складу оператора  $\Delta_2$  входить доданок  $\frac{1}{2} \Delta_1^2$ , а також внески від похідних

$$\frac{1}{2} (2\pi i)^{-4} \sum_{l_1 l_2 l_3} \Delta \Phi(|l_1 - l_3|) \Delta \Phi(l_3 - l_2) \frac{\partial^4}{\partial \bar{\nu}_1 \partial \bar{\nu}_2 \partial \bar{\nu}_3^2}.$$

Крім того, оператор  $\Delta_2$  містить внески від замкнених похідних

$$\frac{1}{4!} (2\pi i)^{-4} \sum_{l_1 l_2} [\Delta \Phi(|l_1 - l_2|)]^2 \frac{\partial^4}{\partial \bar{\nu}_1^2 \partial \bar{\nu}_2^2}.$$

$$\begin{aligned} & \times \exp \left( - \sum_{n \geq 1} \frac{N^{1-n}}{(2n)!} S_{2n} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n} \\ k_i \leq B_1}} \nu_{\mathbf{k}_1} \dots \nu_{\mathbf{k}_{2n}} \times \right. \\ & \left. \times \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}} \right) (d\rho)^{N_1} (d\nu)^{N_1}. \end{aligned} \quad (2.2.22)$$

Вираз

$$Q_0 = [Q(\mathcal{M}_2, \mathcal{M}_4)Q(d)]^N \quad (2.2.23)$$

має зміст парціальної статистичної суми множини КЗ нульового рівня. Змінні  $\nu_{\mathbf{k}}$  можна розглядати як змінні, пов'язані із внутрішнім полем. Інтеграл за  $\nu_{\mathbf{k}}$  матимуть вигляд

$$\begin{aligned} & \int \exp \left( -2\pi i \sum_{\mathbf{k} \leq B_1} \nu_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \right) \exp \left( -\frac{S_2}{2} \sum_{\mathbf{k} \leq B_1} \nu_{\mathbf{k}} \nu_{-\mathbf{k}} - \right. \\ & \left. - \sum_{n \geq 2} \frac{N^{1-n}}{(2n)!} S_{2n} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n} \\ k_i \leq B_1}} \nu_{\mathbf{k}_1} \dots \nu_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}} \right) (d\nu)^{N_1}. \end{aligned} \quad (2.2.24)$$

За своєю формою такий інтеграл аналогічний до якобіану переходу, що відповідає  $N_1$  КЗ  $\rho_{\mathbf{k}}$ .

Вираз (2.2.22), взагалі кажучи, не кінцевий результат інтегрування за множиною КЗ нульового рівня. Щоб виконати інтегрування за  $\nu_{\mathbf{k}}$ , змінні під інтегралом у (2.2.24) слід розділити. Коефіцієнти  $S_2, S_4, \dots$  – сталі величини, а залежність від  $\mathbf{k}$  міститься тільки в символах Кронекера. Тому факторизувати підінтегральний вираз за  $\nu$  можна в змінних  $\tilde{\nu}_{\mathbf{m}}$ , які зв'язані з  $\nu_{\mathbf{k}}$  фур'є-перетворенням. Оскільки кількість змінних  $\nu_{\mathbf{k}}$  дорівнює  $N_1$  і  $0 \leq |\mathbf{k}| \leq B_1$ , то і кількість змінних  $\tilde{\nu}_{\mathbf{m}}$  має дорівнювати  $N_1$ . Щоб виконати інтегрування в (2.2.22) або в (2.2.24) за  $\nu_{\mathbf{k}}$

вводимо вузлові змінні:

$$\begin{aligned}\tilde{\nu}_{\mathbf{m}} &= \frac{1}{\sqrt{N_1}} \sum_{\mathbf{k} \in B_1} \nu_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{m}), \\ \nu_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{\sqrt{N_1}} \sum_{\mathbf{m} \in \Lambda_1} \tilde{\nu}_{\mathbf{m}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{m}).\end{aligned}\quad (2.2.25)$$

Тут вектори  $\mathbf{m}$  нумерують вузли ефективної кубічної ґратки з періодом  $c_1 = sc$ , що відповідає новій зоні Бріллюена (2.2.3);  $B_1 = B/s = \pi/c_1$ ;  $\mathbf{m} = (m_x \mathbf{l}_0 + m_y \mathbf{j}_0 + m_z \mathbf{k}_0)c_1$ ;  $m_x, m_y, m_z$  – цілі числа. Об'єм періодичності кристалу залишається незмінним:

$$V = Nc^3 = N_1 \cdot c_1^3,$$

причому

$$N_i = N_x = N_y = N_z; \quad N_i^3 = N;$$

$$N_{1i} = N_{1x} = N_{1y} = N_{1z}; \quad N_{1i}^3 = N_1; \quad N_1 = Ns^{-3}.$$

У змінних  $\tilde{\nu}_{\mathbf{m}}$  для квадратичного доданку маємо

$$\sum_{\mathbf{k} \leq B_1} \nu_{\mathbf{k}} \nu_{-\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{m}} \tilde{\nu}_{\mathbf{m}}^2. \quad (2.2.26)$$

Для четвірного доданку знаходимо

$$\begin{aligned}\frac{1}{N} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ k_i \leq B_1}} \nu_{\mathbf{k}_1} \dots \nu_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} = \\ = \frac{1}{N^2} \sum_{l=1}^N \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ k_i \leq B_1}} \nu_{\mathbf{k}_1} \dots \nu_{\mathbf{k}_4} \exp[i\mathbf{l}(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4)].\end{aligned}\quad (2.2.27)$$

Виконаємо перетворення

$$\begin{aligned}\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{l}} \exp[i\mathbf{l}(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4)] = \\ = \frac{1}{N_1} \sum_{\mathbf{m}} \exp[i\mathbf{m}(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4)] + \Omega(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4),\end{aligned}\quad (2.2.28)$$

де

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

Сумування за  $\Delta \mathbf{l}$  здійснюється за всіма  $s^3$  вузлами  $\Delta \mathbf{l}$  вихідної ґратки, які перебувають всередині одного блоку ґратки  $\mathbf{m}$ . Вважаємо, що  $\sum_{\Delta \mathbf{l}}$  не залежить від  $\mathbf{m}$ . Функція  $\Omega(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4)$  дорівнює нулеві, коли  $\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4 = 0$  та  $\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4 \neq 0$  і відмінна від нуля, коли  $\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4 = 2B_1 \mathbf{n}$ , де  $2\mathbf{n}B_1$  – вектор нової оберненої ґратки [16]. У цьому випадку, у виразі

$$\Omega(2B_1 \mathbf{n}) = s^{-3} \sum_{\Delta \mathbf{l}} \exp(2i\mathbf{n}B_1 \Delta \mathbf{l}) - 1 \quad (2.2.29)$$

у показнику експоненти є величина

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

Значення  $\Omega(2B_1 \mathbf{n})$  завжди менше від одиниці, у чому легко переконатися для кожного конкретного  $s$ .

Для четвірного доданку в (2.2.24) після перетворень (2.2.25) і (2.2.28) отримаємо вираз:

$$\frac{1}{N} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ k_i \leq B_1}} \nu_{\mathbf{k}_1} \dots \nu_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} = \\ = \frac{1}{N_1 s^3} \frac{1}{N_1} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ k_i \leq B_1}} \sum_{m=1}^{N_1} \nu_{\mathbf{k}_1} \dots \nu_{\mathbf{k}_4} e^{i\mathbf{m}(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4)} + \Delta_4 = \quad (2.2.30) \\ = s^{-3} \sum_{\mathbf{m}} \tilde{\nu}_{\mathbf{m}}^4 + \Delta_4,$$

де

$$\Delta_4 = \frac{1}{N} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ k_i \leq B_1}} \nu_{\mathbf{k}_1} \dots \nu_{\mathbf{k}_4} \Omega(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4). \quad (2.2.31)$$

Завершальний етап інтегрування статистичної суми полягає в інтегруванні за змінними  $\nu_{\mathbf{k}}$ , які належать до множини нульового рівня. Статистична сума має вигляд:

$$\begin{aligned} Z = 2^N Q_0 \int \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{k \leq B_1} [\beta \tilde{\Phi}(k) - \beta \Phi(B_1 B)] \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right\} \times \\ \times (1 + \hat{\Delta}_1 + \hat{\Delta}_2 + \dots)(1 + \hat{\Delta}_4 + \dots) e^{-2\pi i \sum_{k \leq B_1} \nu_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}} \times \\ \times \exp \left[ -\frac{(2\pi)^2}{2} \sum_{k \leq B_1} P_2 \nu_{\mathbf{k}} \nu_{-\mathbf{k}} - \sum_{n \geq 2} \frac{(2\pi)^{2n}}{(2n)!} P_{2n} N_1^{1-n} \times \right. \\ \left. \times \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n} \\ k_i \leq B_1}} \nu_{\mathbf{k}_1} \dots \nu_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}}^{(B_1)} \right] (d\nu)^{N_1} (d\rho)^{N_1}, \quad (2.2.32) \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} P_2 = (2\pi)^{-2} S_2, \quad P_4 = (2\pi)^{-4} s^{-3} S_4, \quad \dots; \\ \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}}^{(B_1)} = \frac{1}{N_1} \sum_{\mathbf{m} \in \Lambda_1} \exp[i\mathbf{m}(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n})]; \quad (2.2.33) \end{aligned}$$

$$\hat{\Delta}_4 = -\frac{P_4}{4! N_1} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ k_i \leq B_1}} \frac{\partial^4}{\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \partial \rho_{\mathbf{k}_4}} \Omega(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4); \quad (2.2.34)$$

$$\beta \tilde{\Phi}(k) - \beta \Phi(B_1, B) = -[d(k) - d(B_1, B)].$$

Вираз для статистичної суми (2.2.32) подібний до вихідної формули (2.1.2), однак відповідає системі, що складається не

з  $N$  окремих спінів, а з  $N_1$  спінових блоків. Під інтегралом у (2.2.32) маємо  $N_1 = Ns^{-3}$  змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$  і  $\nu_{\mathbf{k}}$ . Роль кумулянтів  $\mathcal{M}_2$  і  $\mathcal{M}'_4$ , які входили у (2.1.2), тепер відіграють величини  $P_2$  і  $P_4$ . Однак змінився вираз для потенціалу взаємодії і з'явилися поправки, пов'язані з оператором  $\hat{\Delta}_4$ . Виконаємо в (2.2.32) інтегрування за всіма змінних  $\nu_{\mathbf{k}}$ , що відповідає переходу від формули (2.1.2) до формули (2.1.3). Перейдемо від змінних  $\nu_{\mathbf{k}}$  до змінних  $\tilde{\nu}_{\mathbf{m}}$  згідно перетворення (2.2.25) (якобіан переходу дорівнює  $j_1 = 2^{(N_1-1)/2}$ ). Скористаємося формулами (2.2.26), (2.2.30) і (2.2.34) та факторизуємо підінтегральний вираз для статистичної суми (2.2.32). Маємо:

$$\begin{aligned}
 Z = 2^N Q_0 j_1 \int \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \leq B_1} [\beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) - \beta \Phi(B_1, B)] \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right\} \times \\
 \times (1 + \hat{\Delta}_1 + \hat{\Delta}_2 + \dots)(1 + \hat{\Delta}_4 + \dots) \prod_{\mathbf{m}} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-2\pi i \tilde{\nu}_{\mathbf{m}} \tilde{\rho}_{\mathbf{m}}) \times \right. \\
 \left. \times \exp \left[ -\frac{(2\pi)^2}{2} P_2 \tilde{\nu}_{\mathbf{m}}^2 - \frac{(2\pi)^4}{4!} P_4 \tilde{\nu}_{\mathbf{m}}^4 \right] d\nu_{\mathbf{m}} \right\} (d\rho)^{N_1}. \quad (2.2.35)
 \end{aligned}$$

Вираз для підінтегральної функції від змінних  $\tilde{\nu}_{\mathbf{m}}$  повністю співпадає за формою з виразом (1.4.17) (проінтегрувавши за  $\tilde{\nu}_{\mathbf{m}}$ , отримаємо якобіан переходу в системі блочних КЗ):

$$\begin{aligned}
 Z = 2^N Q_0 [Q(P)]^{N_1} j_1 \times \\
 \times \int \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \leq B_1} [\beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) - \beta \Phi(B_1, B)] \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right\} \times \quad (2.2.36) \\
 \times (1 + \hat{\Delta}_1 + \hat{\Delta}_2 + \dots)(1 + \hat{\Delta}_4 + \dots) \exp \left( -\frac{1}{2} R_2 \sum_{\mathbf{k} \leq B_1} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \right. \\
 \left. - \frac{1}{4!} \frac{1}{N_1} R_4 \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_i \leq B_1}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4}^{(B_1)} \right) (d\rho)^{N_1}.
 \end{aligned}$$



По аналогії з (2.1.7) маємо:

$$Q(P) = (2\pi)^{-1/2} s^{3/4} \left( \frac{a_4}{\varphi(x)} \right)^{1/4} e^{y^2/4} U(0, y), \quad (2.2.37)$$

де для аргумента  $y$  знаходимо:

$$y = \sqrt{3} \frac{P_2}{\sqrt{P_4}} = s^{3/2} U(x) \left( \frac{3}{\varphi(x)} \right)^{1/2}. \quad (2.2.38)$$

Величини  $R_2$  і  $R_4$  визначаються подібно до (2.1.9):

$$R_2 = \left( \frac{3}{P_4} \right)^{1/2} U(y), \quad (2.2.39)$$

$$R_4 = \left( \frac{3}{P_4} \right) \varphi(y). \quad (2.2.40)$$

Отже, виконане інтегрування статистичної суми (2.2.1) за колективними змінними  $\rho_{\mathbf{k}}$ , які належать до множини нульового рівня з  $|\mathbf{k}| \in (B_1, B]$ . Від формули (2.2.1) здійснений перехід до формули (2.2.36). При цьому кількість змінних під інтегралом зменшена на  $N - N_1$ .

Подальші розрахунки виконаємо в двох наближеннях: у нульовому – знехтуємо поправками, які вносяться операторами  $\hat{\Delta}, \hat{\Delta}_4$ ; згодом ці поправки будуть враховані (зокрема, в розділі 5 врахована поправка, пов'язана з врахуванням оператора  $\Delta_1$ ).

Введемо такі позначення:

$$a_2^{(1)} = \beta \Phi(B_1, B) + R_2, \quad (2.2.41)$$

$$a_4^{(1)} = R_4, \quad (2.2.42)$$

$$d_1(k) = a_2^{(1)} - \beta \tilde{\Phi}(k), \quad (2.2.43)$$

$$2^N Q_0 [Q(P)]^{N_1} \sqrt{2}^{N_1-1} = C U_0, \quad (2.2.44)$$

де значення коефіцієнта  $C$  задане в (2.1.4), а

$$U_0 = [Q(d)^N [Q(P)]^{N_1} \sqrt{2}^{N_1-N}]. \quad (2.2.45)$$

Тоді в нульовому наближенні для статистичної суми, аналогічно до (2.2.1), можемо записати вираз:

$$Z = C U_0 \int \mathcal{W}_1(\rho) (d\rho)^{N_1}, \quad (2.2.46)$$

де

$$\mathcal{W}_1(\rho) = \exp[E_1(\rho)]. \quad (2.2.47)$$

Величина

$$\begin{aligned} E_1(\rho) = & -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_1} d_1(k) \rho_k \rho_{-k} - \\ & - \frac{1}{4! N_1} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \leq B_1}} a_4^{(1)} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} \end{aligned} \quad (2.2.48)$$

є ефективним блочним гамільтоніаном першої блочної структури.

Отримане представлення для статистичної суми, задане на фазовому просторі змінних  $\rho_k$  (кількість яких дорівнює  $N_1$ ). Підінтегральна функція є “згладженим” розподілом  $\mathcal{W}_1(\rho)$  і ефективним гамільтоніаном  $E_1(\rho)$  з новими коефіцієнтами  $d_1(k)$  і  $a_4^{(1)}$ . Як і формула (2.2.1), вираз (2.2.46) одержаний у наближенні четвірного базисного розподілу.

Результат інтегрування виразу для статистичної суми (2.1.11) за множиною змінних  $\rho_k$  нульового фазового рівня представлений формулами (2.2.46)–(2.2.48). При перетвореннях були зроблені такі наближення. По-перше, ми знехтували поправками на усереднення потенціалу  $\tilde{\Phi}(k)$  для  $k \in (B_1, B]$ , вважаючи  $\hat{\Delta} = 0$ .

По-друге, не приймалися до уваги поправки, що зв'язані з переходом на нову ґратку ( $\hat{\Delta}_4 = 0$ ). Проблема переходу на нову (ефективну) ґратку обговорювалася в [16, 128]. У цих працях відмічено, що поправки, пов'язані з таким переходом несуттєві при  $s \geq 2$ . Крім цього, при обчисленнях ми обмежувалися наближенням четвірного базисного розподілу. У розділах 5, 7–10 розглянуто вплив цих наближень. У розділах 3–4 ми обмежимося детальним викладом запропонованого нами підходу до обчислення термодинамічних функцій тривимірної однокомпонентної спінової системи з експонентно спадним потенціалом взаємодії для четвірного базисного розподілу у випадку  $\hat{\Delta} = 0$ ,  $\hat{\Delta}_4 = 0$ .

### 2.3. Функціональне представлення статистичної суми

Запропонований у попередньому параграфі спосіб розрахунку статистичної суми за вибраними множинами КЗ різного рівня дає змогу записати рекурентні співвідношення (РС) між коефіцієнтами двох суміжних ефективних гамільтоніанів. Приведемо основні формули, що використовують для розрахунку статистичної суми (без врахування поправки на усереднення потенціалу:  $\hat{\Delta} = 0$  та поправки, пов'язаної з переходом на нову ґратку:  $\hat{\Delta}_4 = 0$ ).

Початковий вираз для статистичної суми має вигляд:

$$Z = C \int \exp[E(\rho)](d\rho)^{N_1} (d\rho)^{N-N_1},$$

де  $N$  – вихідна кількість змінних,  $N_1 = Ns^{-3}$  ( $s \geq 1$ ).

$$E(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B} d(k) \rho_k \rho_{-k} - \frac{1}{4!N} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ k_i \leq B}} a_4 \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4}. \quad (2.3.1)$$

Інтегрування відбувається за  $(N - N_1)$  змінними  $\rho_{\mathbf{k}}$ , для яких  $B_1 < k \leq B$  ( $B_1 = B/s$ ). Виконання такого інтегрування пов'язане з факторизацією виразу:

$$\int \exp[E(\rho)](d\rho)^{N-N_1}.$$

Це досягається введенням добутку  $\delta$ -функцій

$$\prod_{k=0}^{B_1} \delta(\eta_{\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}}) = \int \exp \left[ 2\pi i \sum_{k \leq B_1} (\eta_{\mathbf{k}} - \rho_{\mathbf{k}}) \nu_{\mathbf{k}} \right] (d\nu)^{N_1}.$$

Інтегрування статистичної суми відбувається за  $N$  змінними  $\eta_{\mathbf{k}}$  з хвильовими векторами в усьому просторі першої зони Бріллюена  $0 \leq k \leq B$ . Однак насправді, ми мали інтегрувати лише за  $\rho_{\mathbf{k}}$  для  $B_1 < k \leq B$ . Для цього і вводимо проміжні змінні  $\nu_{\mathbf{k}}$ . Метою проміжного інтегрування є розрахунок коефіцієнтів  $a_2^{(1)}$  та  $a_4^{(1)}$  виразу (2.2.48).

У результаті інтегрування за множиною КЗ нульового рівня для статистичної суми маємо вираз:

$$\begin{aligned} Z = 2^N Q_0 \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_1} [d(k) - d(B_1, B)] \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right\} \times \\ \times \exp \left( -2\pi i \sum_{k \leq B_1} \nu_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \right) \exp \left[ -\sum_{n \geq 1} \frac{1}{N_1^{n-1}} \frac{(2\pi)^{2n}}{(2n)!} P_{2n} \times \right. \\ \left. \times \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n} \\ k_i \leq B_1}} \nu_{\mathbf{k}_1} \dots \nu_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}} \right] (d\rho)^{N_1} (d\nu)^{N_1}. \end{aligned}$$

Тут  $Q_0$  – парціальна статистична сума нульового рівня, означена в (2.2.23), а коефіцієнти  $P_{2n}$  визначаються співвідношеннями (2.2.20), (2.2.33). У розрахунках, які виконуємо в цьому розділі,

обмежимося врахуванням лише коефіцієнтів

$$P_2 = \left(\frac{3}{a_4}\right)^{1/2} U(x), \quad P_4 = s^{-3} \left(\frac{3}{a_4}\right) \varphi(x), \quad (2.3.2)$$

де  $x$  – т. зв. основний аргумент

$$x = d(B_1, B) \left(\frac{3}{a_4}\right)^{1/2}. \quad (2.3.3)$$

Завершальний етап розрахунку статистичної суми (нульового рівня) полягає в інтегруванні за  $N_1$  змінними  $\nu_k$ . У результаті одержимо

$$Z = 2^N Q_0 [Q(P)]^{N_1} j_1 \int \exp[E_1(\rho)] (d\rho)^{N_1}. \quad (2.3.4)$$

Вираз для  $Q(P)$  приведений в (2.2.37). Ефективний блочний гамільтоніан першої блочної структури  $E_1(\rho)$  має вигляд

$$E_1(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_1} d_1(k) \rho_k \rho_{-k} - \frac{1}{4! N_1} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \leq B_1}} a_4^{(1)} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4}, \quad (2.3.5)$$

де

$$d_1(k) = a_2^{(1)} - \beta \Phi(k). \quad (2.3.6)$$

Величини  $a_2^{(1)}$  та  $a_4^{(1)}$  виражають через коефіцієнти  $P_2$  та  $P_4$ :

$$a_2^{(1)} = \beta \Phi(B_1, B) + \left(\frac{3}{P_4}\right)^{1/2} U(y), \quad a_4^{(1)} = \frac{3}{P_4} \varphi(y). \quad (2.3.7)$$

Аргумент спеціальних функцій  $U(y)$  та  $\varphi(y)$ , який надалі називатимемо проміжним аргументом, визначається із співвідношення

$$y = s^{3/2} U(x) \left(\frac{3}{\varphi(x)}\right)^{1/2}. \quad (2.3.8)$$

Спеціальні функції  $U(x)$  та  $\varphi(x)$  виражають через функції параболічного циліндра Вебера

$$U(x) = \frac{U(1, x)}{U(0, x)}, \quad \varphi(x) = 3U^2(x) + 2x U(x) - 2.$$

Властивості функцій параболічного циліндра Вебера можна знайти в [300]. Зокрема, для них справедливе таке інтегральне представлення:

$$U(a, x) = \frac{2}{\Gamma(a + \frac{1}{2})} e^{-\frac{x^2}{4}} \int_0^\infty t^{2a} \exp\left(-xt^2 - \frac{1}{2}t^4\right) dt.$$

Отже, ми одержали дворівневі рекурентні співвідношення (2.3.2), (2.3.7), які пов'язують між собою коефіцієнти  $d_1(k)$ ,  $a_4^{(1)}$  ефективного гамільтоніану першої блочної структури (2.3.5) з коефіцієнтами  $d(k)$ ,  $a_4$  початкового блочного гамільтоніану (2.3.1).

Запишемо в явному вигляді рекурентні співвідношення. Підставляючи (2.3.2), (2.3.3) у (2.3.7) знаходимо

$$a_2^{(1)} = \beta \tilde{\Phi}(B_1, B) + d(B_1, B)N(x), \quad a_4^{(1)} = s^{-3}a_4 E(x), \quad (2.3.9)$$

де введені наступні позначення:

$$N(x) = \frac{yU(y)}{xU(x)}, \quad E(x) = s^{2d} \frac{\varphi(y)}{\varphi(x)}. \quad (2.3.10)$$

Процедура інтегрування статистичної суми за множиною КЗ нульового рівня переноситься послідовно на множини змінних  $\rho_k$  інших рівнів: на множину змінних  $\rho_k$  першого рівня, де  $B_2 < k \leq B_1$ , на множину  $\rho_k$  другого рівня, де  $B_3 < k \leq B_2$  тощо. До множини  $n$ -го рівня належать змінні  $\rho_k$ , для яких  $B_{n+1} < k \leq B_n$ . У кожному інтервалі значень  $k$  потенціал  $\tilde{\Phi}(k)$  замінюємо відповідним середнім значенням. Маємо такий "ефективний гамільтоніан"

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

де

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

У розділах 2-4 нехтуватимемо поправкою  $\Delta \tilde{\Phi}_n(k)$ , вважаючи її малою. Виконуючи поетапне обчислення виразу для статистичної суми (2.3.4), представимо її у вигляді

$$Z = 2^N \prod_{n \geq 0} Q_n, \quad (2.3.11)$$

де  $Q_n$  - парціальна статистична сума множини  $n$ -го рівня:

$$Q_n = [Q(P_{n-1})Q(d_n)]^{N_n}. \quad (2.3.12)$$

Тут  $N_n = Ns^{-3n}$ ,

$$Q(d_n) = (2\pi)^{1/2} \left( \frac{3}{a_4^{(n)}} \right)^{1/4} \exp \left( \frac{x_n^2}{4} \right) U(0, x_n), \quad (2.3.13)$$

$$Q(P_n) = (2\pi)^{-1/2} s^{3/4} \left( \frac{a_4^{(n)}}{\varphi(x_n)} \right)^{1/4} \exp \left( \frac{y_n^2}{4} \right) U(0, y_n).$$

Для аргументів  $x_n$  і  $y_n$  маємо

$$\begin{aligned} x_n &= d_n(B_{n+1}, B_n) \left( \frac{3}{a_4^{(n)}} \right)^{1/2}, \\ y_n &= s^{3/2} U(x_n) \left( \frac{3}{\varphi(x_n)} \right)^{1/2}, \end{aligned} \quad (2.3.14)$$

де

$$d_n(B_{n+1}, B_n) = a_2^{(n)} - \beta \tilde{\Phi}(B_{n+1}, B_n).$$

У випадку  $n = 0$  величина  $Q(P_{n-1}) = Q(\mathcal{M}_2, \mathcal{M}_4)$  і задається формулою (2.1.5).

Нам відомі значення параметрів вихідного ефективного гамільтоніану (2.3.1). Послідовно інтегруючи за множинами КЗ

різного рівня у фазовому просторі  $\rho_{\mathbf{k}}$ , одержуємо вираз для статистичної суми (2.3.11), а разом з тим і вільної енергії<sup>4</sup>. Щоб знайти явні вирази для парціальних статистичних сум (2.3.12), які входять до складу добутків (2.3.11), потрібно мати явні вирази для коефіцієнтів  $d_n$  і  $a_4^{(n)}$ .

Після інтегрування функціоналу статистичної суми (2.2.1) за  $n$  множинами КЗ  $\rho_{\mathbf{k}}$  (починаючи з нульового і завершуючи  $n$ -им рівнем) отримуємо вираз:

$$Z = 2^N 2^{(N_{n+1}-1)/2} Q_0 Q_1 \dots Q_n [Q(P_n)]^{N_{n+1}} Z_{n+1}. \quad (2.3.15)$$

Величини  $Q_n, Q(P_n)$  визначені в (2.3.12), (2.3.13),

$$Z_{n+1} = \int \mathcal{W}_{n+1}(\rho) (d\rho)^{N_{n+1}}, \quad (2.3.16)$$

$$\mathcal{W}_{n+1}(\rho) = \exp(E_{n+1}),$$

а для  $E_{(n+1)}(\rho)$  маємо

$$E_{n+1}(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \leq B_{n+1}} d_{n+1}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} -$$

$$-\frac{1}{4!} \frac{1}{N_{n+1}} a_4^{(n+1)} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_i \leq B_{n+1}}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4}, \quad (2.3.17)$$

Тут  $d_{n+1}(\mathbf{k}) = a_2^{(n+1)} - \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k})$ . Функція  $\mathcal{W}_{n+1}(\rho)$  описує розподіл фаз флуктуацій в  $(n+1)$ -ій блочній структурі системи, розмір блока якої дорівнює  $c_{n+1} = cs^{n+1}$ , а півзону Бріллюена визначають величиною  $B_{n+1} = Bs^{-(n+1)}$ . Кількість вузлів в об'ємі періодичності  $V$  дорівнює  $N_{n+1} = Ns^{-3(n+1)}$ .

<sup>4</sup>Як показано нижче, при цьому з'ясується фундаментальні властивості симетрії множин  $\{d_n\}$  і  $\{a_4^{(n)}\}$ . Кожна пара  $d_n$  і  $a_4^{(n)}$  визначає форму ефективного гамільтоніану кристалічної структури, складеної з блоків з величиною ребра  $c_n = s^n c$ . Порівняно з періодом вихідної ґратки  $c$  ґратка з періодом  $c_n$  описує блочну структуру.



Величина  $E_{n+1}(\rho)$  характеризує  $(n+1)$ -ий "блочний гамільтоніан", що залежить від  $N_{n+1}$  змінних  $\rho_k$ , пов'язаних з коливаннями густини спінового моменту в блоках величиною  $c_{n+1} = cs^{n+1}$ . Найменша довжина хвилі цих коливань (відповідає змінній  $\rho_k$  із  $k = B_{n+1}$ ), яка дорівнює  $c_{n+1} = \pi/B_{n+1}$  - періоду блочної гратки (див. табл. 2.1), вже дуже велика порівняно з найменшою початковою довжиною хвилі, яка дорівнює  $s$ .

Щоб відшукати параметри "блочного гамільтоніану", узагальнимо вирази (2.3.9) на випадок інтегрування за множиною  $n$ -го рівня. Випишемо рекурентні співвідношення, що виникають після інтегрування за  $n$  множинами послідовно розташованих рівнів [311]:

$$\begin{aligned} a_2^{(n+1)} &= a_2^{(n)} + d_n(B_{n+1}, B_n)M(x_n), \\ a_4^{(n+1)} &= a_4^{(n)} \frac{N_{n+1}}{N_n} E(x_n), \end{aligned} \quad (2.3.18)$$

де  $N_{n+1} = N_n s^{-3}$ ,

$$M(x_n) = N(x_n) - 1, \quad N(x_n) = \frac{y_n U(y_n)}{x_n U(x_n)}, \quad (2.3.19)$$

$$E(x_n) = s^{2d} \frac{\varphi(y_n)}{\varphi(x_n)}. \quad (2.3.20)$$

При цьому  $N_n c_n^3 = N c^3$ , а аргументи  $x_n$  і  $y_n$  визначені в (2.3.14),

$$\begin{aligned} U(x_n) &= \frac{U(1, x_n)}{U(0, x_n)}, \\ \varphi(x_n) &= 3U^2(x_n) + 2x_n U(x_n) - 2. \end{aligned} \quad (2.3.21)$$

Рекурентні співвідношення (2.3.18) надзвичайно важливі для опису критичної поведінки системи. Ми повертатимось до них при розрахунку різних характеристик тривимірних систем.

Тепер можемо стверджувати, що маємо формули для обчислення статистичної суми. Рекурентні співвідношення (2.3.18) на

Табл. 2.2. Значення функції параболічного циліндра та її комбінацій для деяких значень аргумента  $x$ 

$x$	$U(0, x)$	$U(x)$	$\varphi(x)$	$U(x) \times \left(\frac{3}{\varphi(x)}\right)^{1/2}$
0	1.2163	0.9560	0.7417	1.9226
0.001	1.2157	0.9554	0.7405	1.9231
0.01	1.2105	0.9506	0.7298	1.9273
0.10	1.1581	0.9038	0.6313	1.9702
0.20	1.1000	0.8556	0.5385	2.0195
0.30	1.0421	0.8111	0.4604	2.0705
0.40	0.9843	0.7700	0.3946	2.1231
0.50	0.9270	0.7319	0.3390	2.1773
0.60	0.8702	0.6967	0.2920	2.2330
0.70	0.8142	0.6640	0.2521	2.2903
0.80	0.7592	0.6336	0.2183	2.3491
0.90	0.7054	0.6054	0.1894	2.4093
1.00	0.6531	0.5792	0.1648	2.4709
1.50	0.4193	0.4722	$0.8543 \times 10^{-1}$	2.7982
2.00	0.2430	0.3948	$0.4702 \times 10^{-1}$	3.1537
2.50	0.1264	0.3372	$0.2734 \times 10^{-1}$	3.5326
3.00	$0.5876 \times 10^{-1}$	0.2931	$0.1669 \times 10^{-1}$	3.9307
4.00	$0.8967 \times 10^{-2}$	0.2309	$0.7026 \times 10^{-2}$	4.7709
5.00	$0.8514 \times 10^{-3}$	0.1896	$0.3373 \times 10^{-2}$	5.6533
10.00	$0.4376 \times 10^{-11}$	$0.9856 \times 10^{-1}$	$0.2715 \times 10^{-3}$	10.3600
20.00	$0.8311 \times 10^{-44}$	$0.4981 \times 10^{-1}$	$0.1827 \times 10^{-4}$	20.1855

основі вихідних даних (для потенціалу взаємодії (1.2.12) та виразів (1.4.26) і (1.4.27) для коефіцієнтів  $a_2$  та  $a_4$ ) дають змогу записати явні вирази для кожної з парціальних статичних сум  $Q_n$  і ефективних гамільтоніанів  $E_n(\rho)$ .

Табл. 2.3. Значення  $y$  та спеціальних функцій  $N(x)$  і  $E(x)$  для  $s = s^* = 3.5862$ 

$x$	$y$	$N(x)$	$xN(x)$	$E(x)$
0.00001	13.057289	$1.037061 \times 10^5$	1.037061	0.278845
0.001	13.060429	$1.037648 \times 10^3$	1.037648	0.279032
0.01	13.089031	$1.042999 \times 10^2$	1.042999	0.280736
0.10	13.380300	10.97375	1.097376	0.297913
0.20	13.714991	5.798063	1.159613	0.317225
0.30	14.061093	4.078973	1.223692	0.336690
0.40	14.418353	3.223844	1.289538	0.356223
0.50	14.786501	2.714146	1.357073	0.375741
0.60	15.165262	2.377035	1.426221	0.395169
0.70	15.554349	2.138436	1.496905	0.414438
0.80	15.953468	1.961314	1.569051	0.433483
0.90	16.362323	1.825095	1.642585	0.452248
1.00	16.780615	1.717436	1.717436	0.470684
1.50	19.003174	1.406077	2.109116	0.556653
2.00	21.417747	1.262247	2.524494	0.630520
2.50	23.991100	1.183056	2.957639	0.691982
3.00	26.694559	1.134707	3.404120	0.742226
4.00	32.400570	1.081238	4.324950	0.815974
5.00	38.393476	1.054017	5.270086	0.864617
10.00	70.357890	1.014339	10.143385	0.957165
20.00	137.085409	1.003647	20.072936	0.988484

Зазначимо, що замість функцій параболічного циліндра  $U(a, x_n)$  можна використовувати функції Макдональда  $K_\nu(x_n^2/4)$  (див., наприклад, [242, 295, 305]). У майбутніх розрахунках використовуватимемо функції параболічного циліндра та їхні комбінації (2.3.21). Спеціальні функції  $U(x)$  та  $\varphi(x)$ , а також величина

$y_0(x) = y(x)/s^{-3/2}$ , є монотонними функціями аргумента  $x$ . Їхні значення для деяких  $x$  подано в табл. 2.2. На основі цих даних можна обчислити значення  $y$  та спеціальних функцій  $N(x)$ ,  $E(x)$ , що входять до рекурентних співвідношень (2.3.18). Вони подані в табл. 2.3.

## 2.4. Рекурентні співвідношення

Перейдемо до аналізу РС. Виконаємо в них наступні перетворення. Віднімемо від правої і лівої частини першого рівняння (2.3.18) величину  $\beta\tilde{\Phi}(0)$ . Отримуємо

$$d_{n+1}(0) = d_n(0) + d_n(B_{n+1}, B_n)M(x_n), \quad (2.4.1)$$

де

$$d_n(B_{n+1}, B_n) = d_n(0) + qs^{-2n}, \quad (2.4.2)$$

а  $q = \bar{q}\beta\tilde{\Phi}(0)$ ,  $\bar{q} = 2b^2B^2\bar{q}_0$  ( $\bar{q}_0$  – середнє значення  $k^2$  на інтервалі  $(s^{-1}, 1]$ ). Введемо величини  $r_n$  і  $u_n$  за допомогою співвідношень

$$r_n = s^{2n}d_n(0), \quad u_n = s^{4n}a_4^{(n)}. \quad (2.4.3)$$

Ця заміна відображає зміну масштабу флуктуаційних спінових мод при переході від однієї блочної структури до іншої, яку використовували в своїх працях Л. Каданов, А. Паташинський, В. Покровський та інші. Як позначення, так і зміст  $r_n$  і  $u_n$  відповідає позначенням і величинам, які ввів К. Вільсон у [93]. Тому РС (2.3.18) запишемо у вигляді:

$$\begin{aligned} r_{n+1} &= s^2[-q + (r_n + q)N(x_n)] \\ u_{n+1} &= s^{4-d}u_nE(x_n). \end{aligned} \quad (2.4.4)$$

Ми одержали складні нелінійні рівняння. Значення функцій  $N(x)$ ,  $E(x)$  приведені в табл. 2.3. Частковим розв'язком системи (2.4.4) є фіксована точка

$$r_{n+1} = r_n = r^*, \quad u_{n+1} = u_n = u^*. \quad (2.4.5)$$

При цьому величина

$$x^* = \sqrt{3} \frac{r^* + q}{\sqrt{u^*}} \quad (2.4.6)$$

знаходиться із співвідношення:

$$sE(x^*) = 1. \quad (2.4.7)$$

Його одержують з другого рівняння (2.4.4). Важливим є те, що в рівняння (2.4.7) не входять ані температура, ані які-небудь мікроскопічні параметри системи. Тому  $x^*$  універсальна величина, залежна лише від параметра  $s$ . Розв'язок рівняння (2.4.7) зображений на рис.2.2. Точніші значення величини  $x^*$  для ряду значень параметра  $s$  приведені в табл. 2.4. Із рівняння (2.4.7) випливає, що кожному значенню параметра  $s$  відповідає єдине

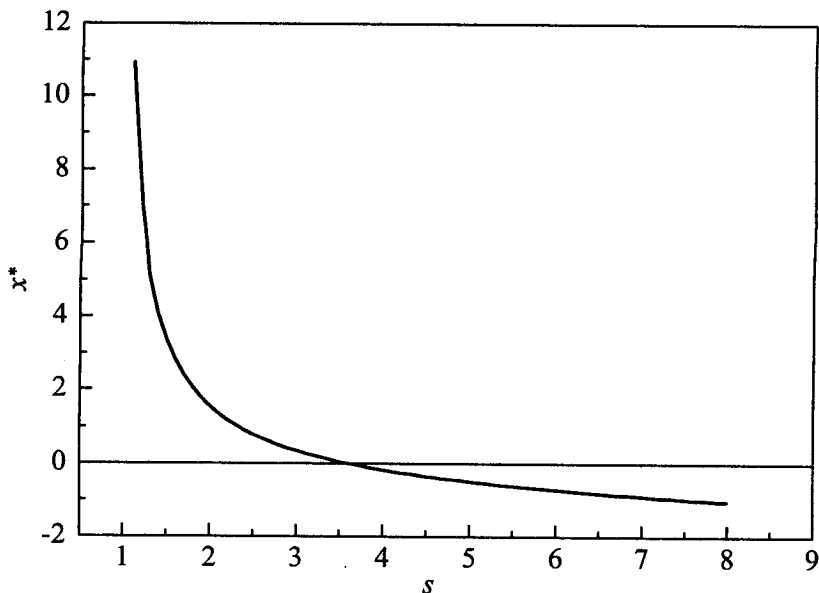


Рис. 2.2. Залежність величини  $x^*$  від параметра РГ  $s$

Табл. 2.4. Значення координат фіксованої точки  $f_0 = \frac{-r^*}{\beta\Phi(0)}$ ,  $\varphi_0 = \frac{u^*}{(\beta\Phi(0))^2}$  РС моделі  $\rho^4$ , основного  $x^*$  та проміжного  $y^*$  аргументів та універсальних величин  $\bar{f}_0, \bar{\varphi}_0$  для деяких значень параметра поділу  $s$ . Тут і далі  $s^* = 3.5862$

$s$	$f_0$	$\varphi_0$	$x^*$	$y^*$	$\bar{f}_0$	$\bar{\varphi}_0$
1.10	0.0181	0.0201	10.9487	13.0132	0.0198	0.0240
1.25	0.0468	0.0505	5.9569	9.1186	0.0571	0.0752
1.50	0.0973	0.1035	3.3645	7.7727	0.1347	0.1984
1.75	0.1495	0.1602	2.2231	7.6864	0.2255	0.3641
2.00	0.2026	0.2211	1.5562	8.0237	0.3241	0.5659
2.25	0.2559	0.2860	1.1105	8.5743	0.4273	0.7977
2.50	0.3092	0.3547	0.7875	9.2564	0.5331	1.0545
3.00	0.4154	0.5021	0.3425	10.8737	0.7478	1.6267
3.50	0.5208	0.6606	0.0427	12.7208	0.9630	2.2587
$s^*$	0.5389	0.6889	0.0000	13.0573	1.0000	2.3725
4.00	0.6253	0.8285	-0.1789	14.7354	1.1770	2.9355
5.00	0.8317	1.1867	-0.4956	19.1541	1.5995	4.3885
6.00	1.0352	1.5685	-0.7209	23.9986	2.0144	5.9394
8.00	1.4340	2.3836	-1.0390	34.7447	2.8238	9.2432
10.00	1.8232	3.2472	-1.2670	46.7073	3.6103	12.7328
12.00	2.2041	4.1445	-1.4469	59.7446	4.3778	16.3501
16.00	2.9457	6.0068	-1.7270	88.6877	5.8684	23.8406
20.00	3.6664	7.9275	-1.9471	121.0546	7.3145	31.5520

значення  $x^*$ . Наявність фіксованої точки (2.4.5) РС (2.4.4) дає змогу значно спростити процедуру знаходження їх аналітичного розв'язку.

Підставляючи в перше рівняння (2.4.4) значення  $x_n = x^*$ , знаходимо вираз для фіксованої точки  $r^*$

$$r^* = -f_0\beta\tilde{\Phi}(0), \quad f_0 = \bar{q} \frac{N(x^*) - 1}{N(x^*) - s^{-2}}. \quad (2.4.8)$$

З рівняння (2.4.6) отримуємо:

$$u^* = \varphi_0(\beta\tilde{\Phi}(0))^2, \quad \varphi_0 = \frac{3(\bar{q})^2}{(x^*)^2} \left[ \frac{1 - s^{-2}}{N(x^*) - s^{-2}} \right]^2. \quad (2.4.9)$$

Слід підкреслити, що величини  $\bar{f}_0 = f_0\bar{q}^{-1}$  і  $\bar{\varphi}_0 = \varphi_0\bar{q}^{-2}$ , як і  $x^*$ , є універсальними функціями і однозначно визначаються величиною параметра  $s$ . Числові значення цих величин подано в табл. 2.4 для випадку, коли для потенціалу використовується середньоарифметичне усереднення у кожному інтервалі значень хвильового вектора. В цій же таблиці подаються і значення  $f_0$  та  $\varphi_0$ . Як бачимо, серед можливих значень параметра поділу фазового простору на множини різних рівнів виділяється два особливих. Це значення  $s \rightarrow 1$ , при якому  $x^*$  і  $y^*$  великі. Тут допустимі розклади за степенями  $\ln s$ ,  $1/x^*$ ,  $1/y^*$ . Друге особливе значення  $s = s^*$ . У цьому випадку  $x^* = 0$ , а  $y^* \gg 1$ .

Рекурентні співвідношення (2.4.4), відповідно до розкладів, приведених у додатку А, записують у вигляді

$$r_{n+1} = s^2 \left[ -q + \sqrt{u_n} \sum_{l \geq 0} \mu_l(x^*)(x_n - x^*)^l \right], \quad (2.4.10)$$

$$u_{n+1} = s^{4-d} \left[ u_n \sum_{l \geq 0} \omega_l(x^*)(x_n - x^*)^l \right],$$

де введені позначення

$$\begin{aligned} \mu_0(x^*) &= s^{d/2} U(y^*) [\varphi(x^*)]^{-1/2}, \\ \mu_1(x^*) &= \mu_0 \left[ a_1 - \frac{1}{2} q_1 \right], \\ \mu_2(x^*) &= \mu_0 \left[ a_2 - \frac{1}{2} a_1 q_1 - \frac{1}{4} q_2 + \frac{3}{8} q_1^2 \right], \dots \end{aligned} \quad (2.4.11)$$

а також

$$\begin{aligned}\omega_0(x^*) &= s^{2d} \frac{\varphi(y^*)}{\varphi(x^*)}, \\ \omega_1(x^*) &= \omega_0[b_1 - q_1], \\ \omega_2(x^*) &= \omega_0 \left[ b_2 - b_1 q_1 + q_1^2 - \frac{1}{2} q_2 \right], \dots\end{aligned}\tag{2.4.12}$$

Коефіцієнти  $\mu_l(x^*)$  і  $\omega_l(x^*)$  для деяких значень параметра  $s$  подано в табл. 2.5. Явний вигляд різницевих РС, які пов'язують

Табл. 2.5. Значення коефіцієнтів  $\mu_l, \omega_l$  РС (2.4.10) моделі  $\rho^4$  для проміжних значень параметра  $\rho \Gamma s$

$s$	2.5	3.0	3.5	$s^*$	4.0	5.0
$\mu_0$	0.8908	0.7189	0.6131	0.5998	0.5407	0.4468
$\mu_1$	0.4198	0.3793	0.3474	0.3426	0.3216	0.2819
$\omega_0$	0.4000	0.3333	0.2857	0.2788	0.2500	0.2000
$\omega_1$	0.1899	0.1941	0.1903	0.1892	0.1831	0.1660

між собою величини  $r_{n+1}$  і  $u_{n+1}$  з  $r_n, u_n$ , знаходимо, підставляючи в РС (2.4.10) замість  $x_n$  його значення із (2.3.14). Представлення РС у вигляді ряду за степенями  $(x_n - x^*)$  зручне, оскільки у випадку  $T \rightarrow T_c$  величина  $x_n$  прямує до свого значення у фіксованій точці  $x^*$  і у рядах (2.4.10) можна обмежитись декількома першими доданками.

Покладемо в другому рівнянні (2.4.10)  $u_{n+1} = u_n = u^*$ . У результаті приходимо до рівності

$$\omega_0(x^*) = s^{-1},\tag{2.4.13}$$

яка еквівалентна до (2.4.7) і дає змогу знайти величину  $x^*$  для кожного фіксованого значення параметра  $s$ .

У випадку, коли  $s > s^*$ , величина  $x^*$  стає від'ємною. При цьому від функцій Вебера  $U(a, x)$  зручно перейти до споріднених



ім функцій  $V(a, x)$ , вронскіан яких дорівнює [300]

$$w\{U, V\} = \pi^{-1/2}\sqrt{2}. \quad (2.4.14)$$

Для цілих значень параметра  $a$  функції  $V(a, x)$  і  $U(a, x)$  пов'язані співвідношенням

$$V(a, -x) = \pi^{-1}\Gamma\left(a + \frac{1}{2}\right)U(a, x). \quad (2.4.15)$$

Введемо позначення

$$h_n = -x_n = -(r_n + q) \left(\frac{3}{u_n}\right)^{1/2}. \quad (2.4.16)$$

Тоді, відповідно до (2.3.21), запишемо:

$$V(h_n) = \frac{V(1, h_n)}{V(0, h_n)}. \quad (2.4.17)$$

У результаті, загальні РС (2.4.4) у випадку від'ємних значень аргумента  $x_n$  набувають вигляду

$$\begin{aligned} r_{n+1} &= s^2 \left[ -q + s^{d/2}U(y_n) \left(\frac{u_n}{W(h_n)}\right)^{1/2} \right], \\ u_{n+1} &= s^{4+d}u_n \frac{\varphi(y_n)}{W(h_n)}, \end{aligned} \quad (2.4.18)$$

де функції  $U(y_n)$  і  $\varphi(y_n)$  визначені в (2.3.21),

$$y_n = s^{d/2}y_n^{(0)}, \quad y_n^{(0)} = V(h_n) \left(\frac{12}{W(h_n)}\right)^{1/2}, \quad (2.4.19)$$

а для функції  $W(h_n)$  маємо вираз:

$$W(h_n) = 12V^2(h_n) - 4h_nV(h_n) - 2. \quad (2.4.20)$$

Можна показати, що заміна знаку основного аргумента  $x_n$  у фіксованій точці при  $s > s^*$  не впливає на знак проміжного аргумента  $y_n$ . Справді, розглядаючи область значень аргумента  $h_n$  в інтервалі  $(0, \infty)$  знаходимо, що

$$(1, 5)^{1/2} \leq y_n^{(0)} \leq 1.9226. \quad (2.4.21)$$

Права границя відповідає значенню  $h_n = 0$ , а ліва – великим значенням  $h_n$ . При  $h_n \rightarrow \infty$  отримуємо:

$$y_n^{(0)} = \left(\frac{3}{2}\right)^{1/2} \left(1 + \frac{1}{4h_n} + \dots\right).$$

Приймаючи до уваги (2.3.14) і (2.4.19), знаходимо залежність проміжного аргумента  $y_n$  як для додатніх, так і від'ємних значень  $x_n$  (див. рис. 2.3). Як бачимо, проміжний аргумент  $y_n$  приймає додатні значення при довільних  $x_n$ . Тому функції проміжного аргумента в РС (2.4.18) виражатимемо далі через функції параболічного циліндра.

Явний вигляд РС (2.4.18) для випадку  $x^* < 0$  знаходимо аналогічно випадкові  $x^* > 0$ . Величині  $h_n$  у фіксованій точці відповідає певне значення  $h^*$ , яке одержуємо із рівняння

$$\varphi\left(s^{d/2}y_n^{(0)}(h^*)\right) = s^7w(h^*). \quad (2.4.22)$$

Йому відповідає певне значення проміжного аргумента

$$y^* = s^{d/2}v(h^*) \left(\frac{12}{w(h^*)}\right)^{1/2}. \quad (2.4.23)$$

Функції основного аргумента  $h_n$  представляються у вигляді рядів за степенями  $h_n - h^*$ . Отримані в додатку А розклади дають змогу представити РС (2.4.18) у вигляді

$$r_{n+1} = s^2 \left[ -q + \sum_{l \geq 1} \mu_l \sqrt{u_n} (h_n - h^*)^l \right], \quad (2.4.24)$$

$$u_{n+1} = s^{4-d} u_n \sum_{l \geq 1} \omega_l \sqrt{u_n} (h_n - h^*)^l.$$

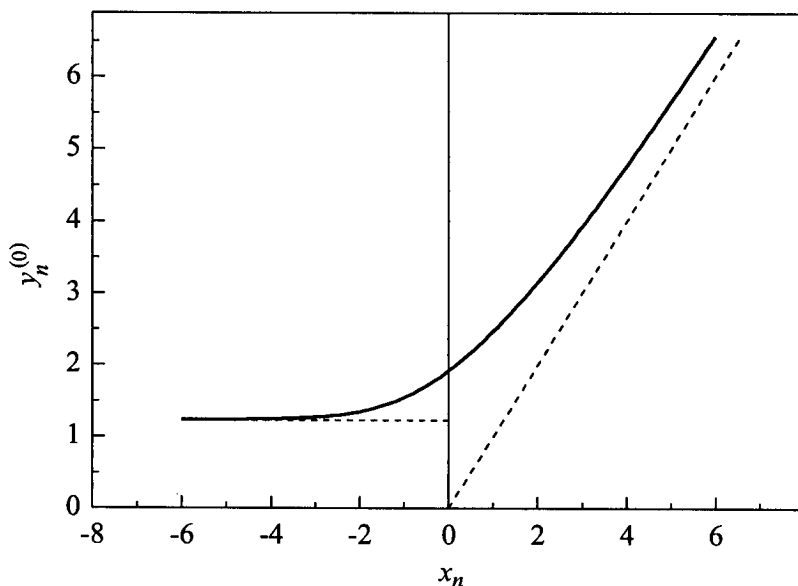


Рис. 2.3. Залежність величини  $y_n^{(0)}$  від значень основного аргумента  $x_n$

Коефіцієнти  $\mu_l$  і  $\omega_l$  визначають з рівностей:

$$\begin{aligned} \mu_0(h^*) &= s^{d/2} U(y^*) (W(h^*))^{-1/2}, \\ \mu_1(h^*) &= \mu_0(h^*) \left( \alpha_1 - \frac{1}{2} W_1 \right), \\ \mu_2(h^*) &= \mu_0(h^*) \left( \alpha_2 - \frac{1}{2} \alpha_1 W_1 + \frac{3}{8} W_1^2 - \frac{1}{4} W_2 \right), \\ \omega_0(h^*) &= s^{2d} \varphi(y^*) (W(h^*))^{-1}, \\ \omega_1(h^*) &= \omega_0(h^*) [\beta_1 - W_1], \\ \omega_2(h^*) &= \omega_0(h^*) \left[ \beta_2 - \beta_1 W_1 + W_1^2 - \frac{1}{2} W_2 \right], \dots \end{aligned} \quad (2.4.25)$$

Ці вирази для коефіцієнтів  $\mu_l$  і  $\omega_l$ , на відміну від (2.4.11), (2.4.12), справедливі для  $s > s^* = 3.5862$ . Відповідні значення коефіцієнтів

ентів  $\mu_l(h^*)$  і  $\omega_l(h^*)$  подано в табл. 2.5. Вони доповнюють значення коефіцієнтів  $\mu_l(x^*)$  і  $\omega_l(x^*)$  із області значень параметра  $s \in (1, s^*)$ .

Отримані вище РС (2.4.10) і (2.4.24) відповідають моделі  $\rho^4$ . За своєю структурою вони якісно відрізняються як від РС Вільсона [92, 93], так і від РС, отриманих за припущення малості константи взаємодії при четвірному доданку форми Ландау–Гінзбурґа–Вільсона [109]. Ефективність використання РС (2.4.10) або (2.4.24) певною мірою залежить від величини  $s$ . Як видно з рис. 2.2, при  $s \rightarrow 1$  величина  $x^*$  різко зростає, а в області  $s \rightarrow s^*$  маємо  $x^* \rightarrow 0$ . У цих граничних випадках загальні рекурентні співвідношення (2.3.18) набувають специфічної форми [312–314]. Явний вигляд РС у випадках  $x_n \gg 1$  і  $x_n \rightarrow 0$  подано в додатку Б.

Основною метою наших досліджень є отримання аналітичних розв'язків РС (2.3.18) або (2.4.4). Нами одержані явні вирази (2.4.10), (2.4.24), знайдені коефіцієнти  $\mu_l$ ,  $\omega_l$ . Це дає змогу отримати співвідношення, які пов'язують величини  $a_2^{(n)}$ ,  $a_4^{(n)}$  (або ж  $r_n$  і  $u_n$ ), як функції рівня блочної структури  $n$ , із вихідними коефіцієнтами  $a_2$ ,  $a_4$ , сталою ґратки  $c$  та іншими початковими параметрами задачі. Подібна залежність дасть змогу отримати згодом явні вирази для вільної енергії та інших термодинамічних характеристик як функцій температури й мікроскопічних параметрів моделі.

## 2.5. Означення температури фазового переходу. Початкові параметри

Для визначення координат критичної точки припустимо, що вираз (2.3.15) проінтегровано за всіма КЗ  $\rho_k$  з  $k \neq 0$ . Щоб мати кінцевий результат потрібно виконати інтегрування за змінною  $\rho_0$ . Температура фазового переходу  $T_c$  відповідає точці біфуркації відповідного рівняння Ейлера, записаного відносно змінної  $\rho_0$ , як це впливає з результатів §1.6. Відповідно до (1.6.11), ве-

личину параметра порядку  $\rho_0^{(0)}$  визначають з рівності

$$\rho_0^{(0)} = \pm \lim_{n \rightarrow \infty} \left( -\frac{d_n(0)N_n}{a_4^{(n)} 3!} \right)^{1/2}.$$

За означенням температури ФП, незалежно від способу її обчислення, в околі ТФП справедливі нерівності:

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} d_n(0) < 0 & \quad T < T_c, \\ \lim_{n \rightarrow \infty} d_n(0) > 0 & \quad T > T_c, \\ \lim_{n \rightarrow \infty} d_n(0) = 0 & \quad T = T_c, \end{aligned} \quad (2.5.1)$$

які і визначають температуру фазового переходу  $T_c$ . Приймаючи до уваги співвідношення (2.5.1), подамо визначення  $T_c$ .

*Температурою фазового переходу називається така температура  $T_c$ , при якій*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} d_n(B_{n+1}, B_n) = 0, \quad (2.5.2)$$

*і виконуються нерівності:*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} d_n(B_n) \geq 0, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} d_n(B_{n+1}) \leq 0, \quad (2.5.3)$$

де  $B_n = Bs^{-n}$ ,  $d_n(B_{n+1}B_n) = a_2^{(n)} - \beta \tilde{\Phi}(B_{n+1}B_n)$ ,  $\tilde{\Phi}(B_{n+1}B_n)$  - середнє значення  $\tilde{\Phi}(k)$  на інтервалі  $B_{n+1} < k \leq B_n$ .

Скористаємось для фур'є-образу потенціалу взаємодії параболічною апроксимацією<sup>5</sup>

$$\tilde{\Phi}(k) = \begin{cases} \tilde{\Phi}(0)(1 - 2b^2k^2) & \mathbf{k} \in B_0, \\ 0 & \mathbf{k} \in B \setminus B_0. \end{cases} \quad (2.5.4)$$

<sup>5</sup> $B$  та  $B_0$  визначені в (1.2.5) та (1.2.14). На відміну від (1.2.12) тимчасово вважатимемо, що  $\tilde{\Phi} = 0$ . При подальших розрахунках розглядатиметься і випадок  $\tilde{\Phi} \neq 0$ .

Проінтегруємо вираз для статистичної суми (2.1.11) за всіма змінними  $\rho_{\mathbf{k}}$  з індексами  $B' < |\mathbf{k}| \leq B$ . Найприродніше це можна зробити у вихідній формі (2.1.2). Тут гамільтоніан

$$H(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_0} \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \quad (2.5.5)$$

відповідно до (2.5.4) має відмінні від нуля значення лише для  $k \leq B'$ . Інтегрування за змінними  $\rho_{\mathbf{k}}$ , які відповідають значенням хвильових векторів  $\mathbf{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0$  відноситься тільки до якобіану переходу, або конкретніше до множника

$$\int \exp \left[ 2\pi i \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \right] (d\rho)^{N-N'} = \prod_{\mathbf{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0} \delta(\omega_{\mathbf{k}}). \quad (2.5.6)$$

Це дає змогу виконати в (2.1.2) інтегрування за відповідними змінними  $\omega_{\mathbf{k}}$ . Як наслідок, у величинах  $D_{2l}(\omega)$  всі  $\omega_{\mathbf{k}}$  з  $\mathbf{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0$  стають рівними нулеві і статистична сума набуває вигляду

$$\begin{aligned} Z = 2^N \int \exp \left[ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_0} \beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + 2\pi i \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_0} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} - \right. \\ \left. - \sum_l \frac{(2\pi)^{2l}}{(2l)!} \mathcal{M}'_{2l}(N')^{1-l} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2l} \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}_0}} \omega_{\mathbf{k}_1} \dots \omega_{\mathbf{k}_{2l}} \times \right. \\ \left. \times \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2l}} \right] (d\rho)^{N'} (d\omega)^{N'}, \end{aligned} \quad (2.5.7)$$

де

$$\mathcal{M}'_{2l} = (i)^{2(l+1)} \mathcal{M}_{2l} \left( \frac{N'}{N} \right)^{l-1}.$$

Введемо позначення:

$$s_0 = \pi \sqrt{2} \frac{b}{c}. \quad (2.5.8)$$

Приймаючи до уваги, що  $N' = N s_0^{-3}$ , одержуємо

$$\mathcal{M}'_{2l} = (-1)^{l+1} \mathcal{M}_{2l} s_0^{3(1-l)}. \quad (2.5.9)$$

Тут  $\mathcal{M}'_2 = 1$ . Величини  $\mathcal{M}'_{2l}$  ( $l \geq 2$ ) визначаються відношенням радіуса дії потенціалу  $b$  до сталої ґратки  $c$ . У випадку використання потенціалу  $\tilde{\Phi}(k)$ , що враховує взаємодію найближчих сусідів ( $b = b_I = c/(2\sqrt{3})$ ), перших і других сусідів ( $b_{II} = 0.3379$ ) і для більш далекосяжних взаємодій значення  $\mathcal{M}'_{2l}$  ( $l \geq 2$ ) подано в табл. 2.6. Тут же подані величини  $s_0$ , які визначають область  $(B', B]$ , де  $\tilde{\Phi}(k)$  приймаються рівними нулеві.

Табл. 2.6. Початкові значення кумулянтів якобіану переходу при використанні параболічної апроксимації фур'є-образу потенціалу (2.5.4)

$b$	$b_{min}$	$b_I$	$b_{II}$	$b_{III}$	$c$	$10c$
$s_0$	1	1.2825	1.5011	1.5922	4.4429	44.4288
$\mathcal{M}'_4$	2	0.9480	0.5913	0.4955	0.0228	0.0000
$\mathcal{M}'_6$	16	3.5948	1.3984	0.9821	0.0021	0.0000
$\mathcal{M}'_8$	272	28.9668	7.0283	4.1366	0.0004	0.0000

Повернемося знову до представлення статистичної суми у вигляді функціонального інтегралу за змінними  $\rho_{\mathbf{k}}$ . Виконаємо в (2.5.7) інтегрування за  $\omega_{\mathbf{k}}$ . Для цього переходимо до вузлових змінних  $\tilde{\omega}_1$

$$\tilde{\omega}_1 = \frac{1}{\sqrt{N'}} \sum_{\mathbf{k} \in B_0} \omega_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}l},$$

і факторизуємо підінтегральний вираз у (2.5.7). Після інтегрування за  $N'$  змінними  $\tilde{\omega}_1$  для статистичної суми (у наближенні

четвірного базисного розподілу) отримуємо [315]

$$Z = C' e^{a'_0 N'} \int \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_0} d'(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{4! N'} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k} \in \mathcal{B}_0}} a'_4 \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right] (d\rho)^{N'}. \quad (2.5.10)$$

Тут

$$C' = 2^N 2^{\frac{N'-1}{2}}, \quad d'(k) = a'_2 - \beta \tilde{\Phi}(k). \quad (2.5.11)$$

Для коефіцієнтів  $a'_{2l}$  знаходимо

$$a'_0 = \ln \left[ (2\pi)^{-1/2} \left( \frac{3}{\mathcal{M}'_4} \right)^{1/4} e^{(y')^{2/4}} U(0, y') \right], \quad (2.5.12)$$

$$a'_2 = \left( \frac{3}{\mathcal{M}'_4} \right)^{1/2} U(y'), \quad a'_4 = \frac{3}{\mathcal{M}'_4} \varphi(y'),$$

де  $U(a, y')$  – функція параболічного циліндра Вебера [300] порядку  $a$  з аргументом

$$y' = 2\sqrt{3}(\pi)^{3/2} \left( \frac{b}{c} \right)^{3/2} \approx 11,46946 \left( \frac{b}{c} \right)^{3/2}. \quad (2.5.13)$$

Коефіцієнти  $a'_{2l}$  у (2.5.10) залежать від відношення радіуса дії потенціалу  $b$  до постійної ґратки  $c$  і подані в табл. 2.7.

При  $b/c \gg 1$ , величина  $y'$  набуває великих значень. Тоді для коефіцієнтів  $a_{2l}$  із (2.5.12) отримаємо наближені вирази:

$$a'_0 = -\frac{1}{2} \ln 2\pi - \frac{1}{4} (\pi\sqrt{2})^{-3} \left( \frac{c}{b} \right)^3 + 0 \left( \frac{c}{b} \right)^6,$$

$$a'_2 = 1 - (\pi\sqrt{2})^{-3} \left( \frac{c}{b} \right)^3 + 0 \left( \frac{c}{b} \right)^6, \quad (2.5.14)$$

$$a'_4 = 2(\pi\sqrt{2})^{-3} \left( \frac{c}{b} \right)^3 \left[ 1 - \frac{7}{(\pi\sqrt{2})^3} \left( \frac{c}{b} \right)^3 + 0 \left( \frac{c}{b} \right)^6 \right].$$



Табл. 2.7. Вихідні значення коефіцієнтів, які визначають функціональне представлення статистичної суми моделі (1.2.1) при  $h = 0$

$b$	$b_{min}$	$b_I$	$b_{II}$	$b_{III}$	$c$	$10c$
$a'_0$	-1.0557	-1.0002	-0.9754	-0.9678	-0.9217	-0.9189
$a'_2$	0.6449	0.7580	0.8193	0.8396	0.9889	1.0000
$a'_4$	0.1826	0.1924	0.1803	0.1724	0.0211	0.0000

При поетапному інтегруванні виразу для статистичної суми (2.5.10) одержуємо такі ж формули, як і в попередньому параграфі, тільки  $N$  треба замінити на  $N'$ , а початкові коефіцієнти  $a_{2l}$  – значеннями  $a'_{2l}$ , що задані формулами (2.5.12).

Визначимо тепер область температур  $T_H < T < T_B$ , яка містить температуру фазового переходу  $T_c$ . Зауважимо, що

$$\begin{aligned} d'(k) &= d'(0) + q'k^2, \\ d'(0) &= a'_2 - \beta\tilde{\Phi}(0), \quad q' = 2b^2\beta\tilde{\Phi}(0). \end{aligned} \quad (2.5.15)$$

У випадку, коли  $|\mathbf{k}| = B'$  маємо

$$\Phi(B') = 0, \quad d(B') = a'_2. \quad (2.5.16)$$

Як легко переконатись на основі (2.3.18), із зростанням  $n$  величина  $a_2^{(n)}$  збільшується [16]:

$$a_2^{(n+1)} \geq a_2^{(n)}. \quad (2.5.17)$$

Отже, з ростом  $n$  (при поетапному інтегруванні за рівнями фазового простору КЗ) функція  $d_n(k)$  зростає. Тому верхню межу температурного інтервалу  $T_B$  визначимо з умови  $d^{(B)}(0) = 0$ , яка відповідно до (2.5.15) приводить до значення

$$T_B = \frac{\tilde{\Phi}(0)}{a'_2}. \quad (2.5.18)$$

Нижньою межею температурної області виберемо температуру  $T_{\text{н}}$  при якій середнє (наприклад, середнє геометричне) від  $d'(k)$  на всьому інтервалі  $[0, B']$  дорівнюватиме нулеві:

$$a'_2 - \beta_{\text{н}} \tilde{\Phi}(0, B') = 0,$$

звідки з врахуванням (2.4.15) отримуємо

$$T_{\text{н}} = \frac{2}{5} \frac{\tilde{\Phi}(0)}{a'_2}. \quad (2.5.19)$$

При  $T = T_{\text{н}}$  маємо  $d_{\text{н}}(0) = -3a'_2/2$ . Отже, область температур, для якої вестиметься розгляд, задається співвідношенням

$$\frac{2}{5} \frac{\tilde{\Phi}(0)}{a'_2} < T < \frac{\tilde{\Phi}(0)}{a'_2}. \quad (2.5.20)$$

Множина кривих  $d'(k)$  (див. рис. 2.4), як функцій величини хвильового вектора  $k$ , залежно від вибраної нами температури  $T$ , обмежена зверху кривою 1, що відповідає  $T = T_{\text{в}}$  (див. (2.5.18))

$$d_{\text{в}}(k) = 2b^2 a'_2 k^2, \quad (2.5.21)$$

де  $d_{\text{в}}(0) = 0$ ,  $d_{\text{в}}(B') = a'_2$ , а знизу кривою 2 (відповідає  $T = T_{\text{н}}$ )

$$d_{\text{н}}(k) = -\frac{3}{2} a'_2 + \frac{5}{2} 2b^2 a'_2 k^2, \quad (2.5.22)$$

де  $d_{\text{н}}(0) = -\frac{3}{2} a'_2$ ,  $d_{\text{н}}(B') = a'_2$ . При подальших розрахунках припускаємо, що для температур близьких до  $T_{\text{с}}$  крива  $d'(k)$  знаходиться між кривими 1 і 2.

Вище був розглянутий випадок такої апроксимації потенціалу  $\tilde{\Phi}(k)$ , коли на інтервалі хвильових векторів  $(B', B]$  фур'є-образ  $\tilde{\Phi}(k)$  вважається рівним нулеві. У загальному випадку, як це зображено на рис. 1.1, середнє значення  $\tilde{\Phi}(k)$  на інтервалі  $(B', B]$  дорівнює певній сталій величині  $\tilde{\Phi}$ . Це приводить до ускладнення виразу (2.5.7), оскільки замість (2.5.6) виникають інтеграли:

$$\int \exp \left[ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0} \beta \tilde{\Phi} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + 2\pi i \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_0} \rho_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \right] (d\rho)^{N-N'} =$$

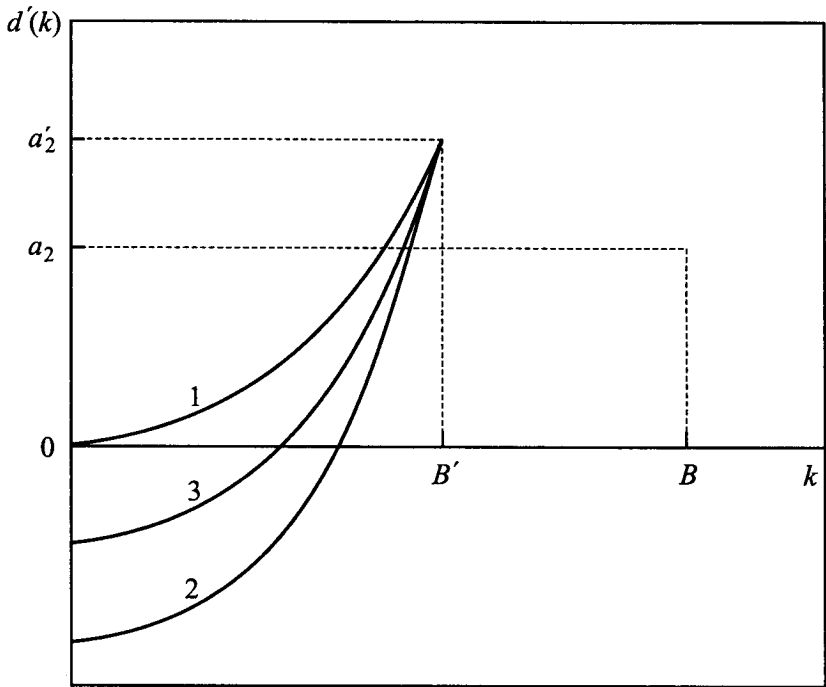


Рис. 2.4. Криві залежності коефіцієнта  $d'(k)$  від модуля хвильового вектора для двох граничних температур:

1 –  $T = T_b = \bar{\Phi}(0)/a'_2$ ,      2 –  $T = T_n = 0.4\bar{\Phi}(0)/a'_2$ ,

3 – форма для кривої  $d'(k)$ , що відповідає області температур (2.5.20)

$$= \left[ 1 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in B \setminus B_0} \beta \bar{\Phi} \frac{1}{(2\pi i)^2} \frac{\partial^2}{\partial \omega_{\mathbf{k}} \partial \omega_{-\mathbf{k}}} + \dots \right] \prod_{\mathbf{k} \in B \setminus B_0} \delta(\omega_{\mathbf{k}}).$$

В інтервалі температур  $T_n < T < T_b$  середнє значення потенціалу  $\bar{\Phi}$  є мала величина, значно менша від одиниці. Внесок операторного множника в останній рівності призводить до поправок, які з потрібною точністю можуть враховуватись для розв'язання конкретної задачі.

## 2.6. Розв'язок рекурентних співвідношень

Повернемось до дослідження РС (2.3.18), приймаючи вихідними коефіцієнти  $a'_{2l}$  із (2.5.12) і табл. 2.7. Подальші розрахунки проведитимемо в наближенні сферичної зони Бріллюена з радіусом  $B'$ . Середнє значення потенціалу для  $n$ -тої блочної структури:

$$\begin{aligned} \beta\tilde{\Phi}(B_{n+1}, B_n) &= \beta\tilde{\Phi}(0) - qs^{-2n}, \\ qs^{-2n} &= 2\beta\tilde{\Phi}(0)b^2 < k^2 >_{B_{n+1}, B_n} = \bar{q}s^{-2n}\beta\tilde{\Phi}(0). \end{aligned} \quad (2.6.1)$$

У випадку геометричного усереднення  $\tilde{\Phi}(k)$  маємо

$$\bar{q} = \frac{3}{5} \frac{1 - s^{-5}}{1 - s^{-2}}. \quad (2.6.2)$$

При середньоарифметичному усередненні

$$\bar{q} = \frac{1}{2}(1 + s^{-2}). \quad (2.6.3)$$

Для величини  $d_n(B_{n+1}, B_n)$  використовуватимемо співвідношення

$$d_{n+1}(B_{n+1}, B_n) = a_2^{(n)} - \beta\tilde{\Phi}(0) + qs^{-2n}. \quad (2.6.4)$$

Приймаючи до уваги РС (2.3.18) і співвідношення (2.6.4), запишемо РС через величини  $d_n(B_{n+1}, B_n)$ ,  $a_4^{(n)}$ :

$$\begin{aligned} d_{n+1}(B_{n+2}, B_{n+1}) &= d_n(B_{n+1}, B_n)N(x_n) - \Delta_n, \\ a_4^{(n+1)} &= a_4^{(n)}s^{-d}E(x_n). \end{aligned} \quad (2.6.5)$$

Тут  $\Delta_n = q(1 - s^{-2})s^{-2n}$ , а функції  $N(x_n)$  і  $E(x_n)$  визначені в (2.3.19), (2.3.20).

Функція  $N(x_n)$  завжди більша від одиниці, а  $\Delta_n \geq 0$ . Тому у правій частині першої рівності (2.6.5) маємо дві конкуруючі тенденції. Перший доданок приводить до збільшення величини  $d_{n+1}(B_{n+2}, B_{n+1})$  зі зростанням  $n$ , а другий, навпаки, зменшує її. Ця обставина дає змогу нам сформулювати дві теореми про

характер зміни коефіцієнтів  $d_n(B_{n+1}, B_n)$  і  $a_4^{(n)}$  зі зростанням  $n$  у критичній області.

**ТЕОРЕМА 1.** *Рекурентні співвідношення (2.6.5) для температур вищих від критичної ( $T > T_c$ ) мають гаусову граничну точку:*

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} d_n(B_{n+1}, B_n) &= \text{const}, \\ \lim_{n \rightarrow \infty} a_4^{(n)} &= a_4^{(m_\tau)} \lim_{n \rightarrow \infty} s^{-3(n-m_\tau)} = 0, \\ \lim_{n \rightarrow \infty} x_n &\rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (2.6.6)$$

**Д о в е д е н н я.** З визначення температури фазового переходу (2.5.2) і (2.5.3) при  $T > T_c$  маємо:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} d_n(B_{n+1}, B_n) > 0. \quad (2.6.7)$$

Далі, відповідно до (Б.1), (Б.3) і даних табл. 2.3 при  $x_n \rightarrow \infty$  отримуємо:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} N(x_n) = 1, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \Delta_n = 0.$$

Звідси випливає, що

$$\lim_{n \rightarrow \infty} d_n(B_{n+1}, B_n) = \text{const} > 0. \quad (2.6.8)$$

Що ж до характеру зміни коефіцієнта  $a_4^{(n)}$ , то приймаючи до уваги співвідношення

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E(x_n) = 1,$$

згідно з (2.6.5) отримуємо

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_4^{(n+1)}}{a_4^{(n)}} = s^{-d}. \quad (2.6.9)$$

Як бачимо, при вищих, порівняно з  $T_c$ , температурах розподіл флуктуацій у ефективних ґратках, побудованих із дуже великих блоків, стає гаусовим. Характер зміни співвідношень (2.6.8)

і (2.6.9) зі зростанням  $n$ , який має місце при  $\tau > 0$  та в границі  $n \rightarrow \infty$ , назвемо ГРАНИЧНИМ ГАУСОВИМ РЕЖИМОМ (ГГР).

Розглянемо тепер той особливий випадок, коли поведінка першого і другого доданків у правій частині (2.6.5) буде однаковою. Реалізація саме цього випадку приводить до розв'язків РС ренормгрупового типу.

**ТЕОРЕМА 2.** *Існує лише одна температура  $T = T_c$ , при якій величини  $d_n(B_{n+1}, B_n)$  та  $a_4^{(n)}$  із збільшенням номера  $n$  (при всіх його значеннях, більших за деяке скінченне  $n_0$ ) поводяться як певний степінь величини  $s$ , а саме:*

$$d_n(B_{n+1}, B_n) = s^{-2n}(r_n + q), \quad a_4^{(n)} = s^{-4n}u_n, \quad (2.6.10)$$

Таку поведінку послідовностей  $\{d(B_{n+1}, B_n)\}$  та  $\{a_4^{(n)}\}$  назвемо КРИТИЧНИМ РЕЖИМОМ (КР). Тут величини  $r_n$  та  $u_n$  для дуже великих  $n$  дають координати фіксованої точки  $r^*$ ,  $u^*$ :

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} r_n &= r^* = \text{const}, \\ \lim_{n \rightarrow \infty} u_n &= u^* = \text{const}, \\ \lim_{n \rightarrow \infty} x_n &= x^* = \text{const}. \end{aligned} \quad (2.6.11)$$

Величини  $r_n$  і  $u_n$ , згідно до означення

$$\frac{d_n(B_{n+1}, B_n)}{r_n + q} = s^{-2n}, \quad \frac{a_4^{(n)}}{u_n} = s^{-4n} \quad (2.6.12)$$

є перенормованими значеннями коефіцієнтів  $d_n(B_{n+1}, B_n)$ ,  $a_4^{(n)}$ , відповідно.

Для доведення теореми 2 дослідимо рівняння (2.4.4). Крім залежності від  $n$ , вони містять два параметри: зовнішній параметр поділу фазового простору на множини  $s$  і температуру  $T_c$ .

Для визначення  $T_c$  залишемо рівняння, що відповідало б означенню (2.5.1)–(2.5.3). Як впливає з вигляду функцій  $N(x_n)$  і  $E(x_n)$ , коефіцієнти  $d_n$  і  $a_4^{(n)}$ , а також  $r_n$  і  $u_n$  мають неперевну

залежність від температури. Тому розв'язки типу (2.6.10) при виконанні (2.6.11) мають бути справедливими і в деякій області  $n$  навіть для  $\tau \neq 0$ . Знайдемо розв'язок системи рівнянь (2.4.4) у деякій області температур, близьких до критичної. Після цього запишемо рівняння для  $T_c$  і визначимо область температур  $\tau < \tau^*$ , усередині якої існують розв'язки типу (2.6.10) та існує границя (2.6.11) при  $\tau \rightarrow 0$ . Область значень  $n$  і величину інтервалу температур  $|\tau| < \tau^*$ , для яких існують розв'язки типу (2.6.10) при умові (2.6.11), назовемо областю критичного режиму.

Як зазначено в § 2.4, одним із часткових розв'язків системи (2.4.4) є фіксована точка (2.4.5), а відповідні величини  $r^*$  і  $u^*$  наведені в (2.4.8), (2.4.9). Щоб отримати явний розв'язок РС, скористаємось методом фіксованої точки, який використав Вільсон у [93]. У рівняннях (2.4.10) обмежимося лінійним наближенням. У методі КЗ межі застосування лінійного наближення, яке використовується у цих розрахунках, можна контролювати порівнянням результатів аналітичних та числових обчислень з розв'язками загальних РС (2.3.18) [16, 316]. У лінійному наближенні РС, які відповідають рівнянням (2.4.4) мають вигляд:

$$\begin{aligned} r_{n+1} &= r^* + R_{11}(r_n - r^*) + R_{12}(u_n - u^*), \\ u_{n+1} &= u^* + R_{21}(r_n - r^*) + R_{22}(u_n - u^*), \end{aligned} \quad (2.6.13)$$

де

$$\begin{aligned} R_{11} &= \left( \frac{\partial r_{n+1}}{\partial r_n} \right)^*, & R_{12} &= \left( \frac{\partial r_{n+1}}{\partial u_n} \right)^* = R_{12}^{(0)}(u^*)^{-1/2}, \\ R_{21} &= \left( \frac{\partial u_{n+1}}{\partial r_n} \right)^* = R_{21}^{(0)}(u^*)^{1/2}, & R_{22} &= \left( \frac{\partial u_{n+1}}{\partial u_n} \right)^*. \end{aligned} \quad (2.6.14)$$

Символ  $(\dots)^*$  означає, що замість  $x_n$  треба підставити його значення у фіксованій точці  $x^*$ , задане в (2.4.6). Скориставшись явним виглядом РС (2.4.10), для елементів  $R_{ij}$  отримуємо вирази

$$\begin{aligned} R_{11} &= s^2 \mu_1 \sqrt{3}, & R_{12}^{(0)} &= \frac{1}{2} s^2 (\mu_0 - \mu_1 x^*), \\ R_{21}^{(0)} &= s \omega_1 \sqrt{3}, & R_{22} &= s \left( \omega_0 - \frac{1}{2} \omega_1 x^* \right). \end{aligned} \quad (2.6.15)$$

Очевидно, що внесок у матричні елементи<sup>6</sup> дають тільки коефіцієнти  $\mu_0, \mu_1$  і  $\omega_0, \omega_1$  із (2.4.11), (2.4.12). Важливим фактом, який впливає із явного вигляду матричних елементів (2.6.15), є універсальність величин  $R_{11}, R_{12}^{(0)}, R_{21}^{(0)}$  і  $R_{22}$ . Вони залежать тільки від  $x^*$  і  $s$ , які також є універсальними величинами. Їхні значення подані в табл. 2.8.

Табл. 2.8. Елементи і власні значення матриці перетворення  $\mathcal{R}$  (2.6.16) для моделі  $\rho^4$

$s$	2.5	3.0	3.5	$s^*$	4.0	5.0
$R_{11}$	4.5440	5.9122	7.3713	7.6314	8.9130	12.2081
$R_{12}^{(0)}$	1.7506	2.6505	3.6643	3.8502	4.7861	7.3319
$R_{21}^{(0)}$	0.8222	1.0086	1.1535	1.1752	1.2686	1.4379
$R_{22}$	0.8131	0.9003	0.9858	1.0000	1.0655	1.2057
$-R^{(0)}$	0.4287	0.4821	0.5242	0.5307	0.5593	0.6167
$R_1^{(0)}$	0.2014	0.1834	0.1650	0.1620	0.1483	0.1209
$E_1$	4.8965	6.3985	7.9760	8.2551	9.6225	13.0949
$E_2$	0.4606	0.4140	0.3811	0.3763	0.3560	0.3190

Знайдемо власні значення і власні вектори матриці

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{pmatrix}. \quad (2.6.16)$$

Власні значення  $E_1, E_2$  одержуємо із формули

$$E_{12} = \frac{1}{2} \left\{ (R_{11} + R_{12}) \pm [(R_{11} - R_{22})^2 + 4R_{12}R_{21}]^{1/2} \right\}. \quad (2.6.17)$$

<sup>6</sup>Доданки в РС (2.4.10), що відповідають вищим степеням  $(x_n - x^*)^l$  (де  $l \geq 2$ ), дають внески в  $R_{ij}$  лише при нелінійному наближенні.



Оскільки  $R_{12}R_{21} = R_{12}^{(0)}R_{21}^{(0)}$ , то  $E_1$  і  $E_2$  універсальні величини. Як бачимо з результатів обчислень, при всіх значеннях параметра  $s$  реалізується фіксована точка типу сідла ( $E_1 > 1$ ,  $E_2 < 1$ ).

Матричні елементи  $R_{ij}$  можуть бути записані в такому вигляді:

$$R_{ij} = \sum_l E_l W_{il} V_{lj},$$

де  $W_{il}$  та  $V_{lj}$  – власні вектори, що відповідають власним значенням  $E_l$  матриць  $R$  та  $R^T$ , відповідно. Використовуючи рівності

$$\sum_j R_{ij} W_{jk} = E_k W_{ik}, \quad \sum_i V_{ki} R_{ij} = E_k V_{kj}$$

з умовою нормування

$$\sum_j V_{kj} W_{jl} = \delta_{kl}$$

знаходимо власні вектори:

$$W_1 = W_{11} \begin{pmatrix} 1 \\ R_1 \end{pmatrix}, \quad W_2 = W_{22} \begin{pmatrix} R \\ 1 \end{pmatrix},$$

де

$$R = \frac{R_{12}}{E_2 - R_{11}}, \quad R_1 = \frac{E_1 - R_{11}}{R_{11}}. \quad (2.6.18)$$

Спряжені вектори  $V_1$  і  $V_2$  мають вигляд

$$\begin{aligned} V_1 &= V_{11} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E_1 - R_{11}}{R_{21}} \end{pmatrix}, \\ V_2 &= V_{22} \begin{pmatrix} \frac{R_{21}}{E_2 - R_{11}} \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.6.19)$$

Тут справедливі рівності

$$R_{12}R_{21} = (R_{11} - E_2)(R_{22} - E_2),$$

$$R_{12}R_{21} = (R_{11} - E_1)(R_{22} - E_1).$$

Умови нормування при цьому такі:

$$W_{11}V_{11} = \left[ 1 + \frac{R_{11} - E_1}{R_{22} - E_1} \right]^{-1},$$

$$W_{22}V_{22} = \left[ 1 + \frac{R_{22} - E_2}{R_{11} - E_2} \right]^{-1}.$$

Наведені вище співвідношення дають змогу записати розв'язки РС (2.6.13) у вигляді [317]

$$\begin{pmatrix} r_n - r^* \\ u_n - u^* \end{pmatrix} = c_1 W_1 E_1^n + c_2 W_2 E_2^n.$$

Приймаючи до уваги (2.6.18), знаходимо:

$$\begin{aligned} r_n &= r^* + c_1 E_1^n + c_2 R E_2^n, \\ u_n &= u^* + c_1 R_1 E_1^n + c_2 E_2^n, \end{aligned} \quad (2.6.20)$$

де  $c_1 = W_{11}c'_1$ ,  $c_2 = W_{22}c'_2$ , причому  $c'_1$ ,  $c'_2$  – довільні постійні. При різних значеннях  $c_1$  і  $c_2$  отримуємо сукупність розв'язків системи лінеаризованих рівнянь (2.6.13). Коефіцієнти  $c_1$  і  $c_2$  знаходимо із початкових умов при  $n = 0$ :

$$r_0 = a'_2 - \beta \tilde{\Phi}(0), \quad u_0 = a'_4. \quad (2.6.21)$$

У результаті маємо

$$\begin{aligned} c_1 &= [r_0 - r^* + (u^* - a'_4)R]D^{-1}, \\ c_2 &= [a'_4 - u^* + (r^* - r_0)R_1]D^{-1}, \end{aligned} \quad (2.6.22)$$

де (див. табл. 2.8)

$$R = R^{(0)}(u^*)^{-1/2}, \quad R^{(0)} = R_{12}^{(0)}(E_2 - R_{11})^{-1},$$

$$R_1 = R_1^{(0)}(u^*)^{1/2}, \quad R_1^{(0)} = \frac{(E_1 - R_{11})}{R_{12}^{(0)}},$$

$$D = (E_1 - E_2)(R_{11} - E_2)^{-1}.$$

Отримані вище розв'язки (2.6.20) мають, звичайно, загальну форму РГ розв'язків, які отримав Вільсон. Головною відмінною рисою отриманих нами розв'язків від його результатів є наявність явних виразів для  $c_1$  і  $c_2$ , власних значень  $E_1$ ,  $E_2$  матриці (2.6.16), а також величин  $R$  і  $R_1$ . Ця відмінність дуже важлива. Вона дає нам змогу не тільки описати симетрійні властивості системи і знайти критичні показники, а також знайти явні вирази для термодинамічних функцій.

Підставляючи вирази (2.6.20) у формули (2.6.10), отримуємо загальний розв'язок рекурентних рівнянь у критичному режимі:

$$\begin{aligned} d_n(B_{n+1}, B_n) &= s^{-2n} [r^* + c_1 E_1^n + c_2 R E_2^n + q], \\ a_4^{(n)} &= s^{-4n} [u^* + c_1 R_1 E_1^n + c_2 E_2^n]. \end{aligned} \quad (2.6.23)$$

Тепер знайдемо область температур  $|\tau| < \tau^*$  і множину значень  $n$ , при яких справедливі ці розв'язки. Нагадаємо, що при  $T > T_c$  і для великих  $n$  згідно теореми 1 розв'язки РС описуються ГРР (2.6.8), (2.6.9).

## 2.7. Рівняння для температури фазового переходу

Знайдемо рівняння для  $T_c$ , використовуючи методику запропоновану в [244, 295, 317]. Відповідно до означення (2.5.2) при  $T = T_c$  середнє значення коефіцієнта  $d_n(k)$  на інтервалі  $k \in (B_{n+1}, B_n]$  має прямувати до нуля при  $n \rightarrow \infty$ . Крім цього, при  $n \rightarrow \infty$  згідно до (2.5.3) виконуються співвідношення:

$$d_n(B_n) \geq 0, \quad d_n(0) \leq 0; \quad \lim_{n \rightarrow \infty} B_n = 0. \quad (2.7.1)$$

Підставимо замість  $d_n(B_n)$  і  $d_n(0)$  їх значення з (2.6.23). У результаті отримуємо

$$\begin{aligned} r^* + \bar{q}\beta_c \tilde{\Phi}(0) + c_1(T_c)E_1^n + c_2(T_c)R(T_c)E_2^n &\geq 0, \\ r^* + c_1(T_c)E_1^n + c_2(T_c)R(T_c)E_2^n &\leq 0. \end{aligned} \quad (2.7.2)$$

Виконання умов (2.7.2) при  $n \rightarrow \infty$  можливе лише у випадку, коли<sup>7</sup>

$$c_1(T_c) = 0. \quad (2.7.3)$$

Нерівності (2.7.1) є загальними умовами для визначення  $T_c$ . Вони дають змогу отримати рівняння для критичної температури. Підставивши в (2.7.3) вираз для  $c_1$  (2.6.22), отримуємо рівняння для температури фазового переходу

$$a'_2 - \beta_c \tilde{\Phi}(0) - r^*(T_c) - [a'_4 - u^*(T_c)]R^{(0)}(u^*(T_c))^{-1/2} = 0. \quad (2.7.4)$$

Рівняння (2.7.4) доповнює систему РС (2.6.5).

У рівнянні (2.7.4) виконаємо таку підстановку:

$$r^*(T_c) = -f_0\beta_c\tilde{\Phi}(0), \quad u^* = \varphi_0[\beta_c\tilde{\Phi}(0)]^2. \quad (2.7.5)$$

У результаті запишемо для величини  $\beta_c\tilde{\Phi}(0)$  рівняння

$$[\beta_c\tilde{\Phi}(0)]^2(1 - f_0 - \sqrt{\varphi_0}R^{(0)}) - a'_2\beta_c\tilde{\Phi}(0) + a'_4R^{(0)}(\varphi_0)^{-1/2} = 0, \quad (2.7.6)$$

розв'язки якого і визначають температуру фазового переходу.

У цьому рівнянні величини  $f_0(\bar{q})^{-1}$  і  $\varphi_0(\bar{q})^{-2}$ ,  $R^{(0)}$  приймають універсальні значення, а коефіцієнти  $a'_2$ ,  $a'_4$ , а отже, й обернена температура фазового переходу  $\beta_c\tilde{\Phi}(0)$ , залежать від вихідних параметрів задачі:  $b$  – радіуса дії потенціалу ( $\Phi(r) = Ae^{-r/b}$ ) і постійної ґратки  $s$ .

Тепер можна повністю довести теорему 2 (див. §2.6). При температурі фазового переходу  $T_c$  ГГР відсутній, оскільки, за умовою (2.5.2) співвідношення

$$d_{n+1}(B_{n+2}, B_{n+1}) = N_n d_n(B_{n+1}, B_n),$$

на основі якого отримано розв'язок (2.6.8) для ГГР, стає незначеним. При  $T = T_c$  із (2.6.23) і (2.7.3) отримуємо рівності:

$$\begin{aligned} d_n(B_{n+1}, B_n) &= s^{-2n} [r^* + q + c_2(T_c)R(T_c)E_2^n], \\ a_4^{(n)} &= s^{-4n} [u^* + c_2(T_c)E_2^n]. \end{aligned} \quad (2.7.7)$$

<sup>7</sup>Пам'ятаємо, що  $E_1 > 1$ ,  $E_2 < 1$ , а  $c_1$ ,  $c_2$  і  $R$  – обмежені функції температури.

У випадку  $n \rightarrow \infty$  для цих величин знаходимо вирази ( $E_2 < 1$ )

$$\begin{aligned} d_n(B_{n+1}, B_n) &= s^{-2n}(r^* + q), \\ a_4^{(n)} &= s^{-4n}u^*. \end{aligned} \quad (2.7.8)$$

– єдині нетривіальні розв'язки РС (2.6.5) при  $T = T_c$ .

При  $\tau \rightarrow 0$  розв'язки (2.6.23) переходять у (2.7.7). Для доведення цього твердження розглянемо температурну залежність коефіцієнтів  $c_1(T)$  і  $c_2(T)$ . Скористаємося із встановленого вище твердження, що  $c_1(T_c) = 0$ . Відніmemo від правої частини співвідношення (2.6.22) вираз  $c_1(T_c)$ , який має вигляд:

$$\begin{aligned} c_1(T_c) &= \left\{ a'_2 - \beta_c \tilde{\Phi}(0) + f_0 \beta_c \tilde{\Phi}(0) + \left[ \varphi_0 (\beta_c \tilde{\Phi}(0))^2 - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - a'_4 \right] R^{(0)} \varphi_0^{-1/2} (\beta_c \tilde{\Phi}(0))^2 \right\} D^{-1}. \end{aligned}$$

У результаті отримаємо вирази

$$\begin{aligned} c_1 &= c_{1\tau} \beta \tilde{\Phi}(0) \tau, \\ c_2 &= c_{2\tau} (\beta \tilde{\Phi}(0))^2, \end{aligned} \quad (2.7.9)$$

де  $\tau = (T - T_c)/T_c$ . Для величин  $c_{1\tau}$ ,  $c_{2\tau}$  знаходимо:

$$\begin{aligned} c_{1\tau} &= c_{1k} + \tau c_{1k1} + O(\tau^2), \\ c_{2\tau} &= c_{2k} + \tau c_{2k1} + \tau^2 c_{2k2} + O(\tau^3). \end{aligned} \quad (2.7.10)$$

Величини  $c_{lkm}$  не залежать від температури і мають вигляд

$$\begin{aligned} c_{1k} &= \left[ c_{11} + \frac{c_{12}}{(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^2} \right] D^{-1}, \quad c_{1k1} = \frac{c_{1k} D^{-1}}{[\beta_c \tilde{\Phi}(0)]^2}; \\ c_{2k} &= \left[ c_{23} + \frac{c_{22}}{\beta_c \tilde{\Phi}(0)} + \frac{c_{21}}{(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^2} \right] D^{-1}, \\ c_{2k1} &= \left[ \frac{c_{22}}{\beta_c \tilde{\Phi}(0)} + \frac{2c_{21}}{(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^2} \right] D^{-1}, \\ c_{2k2} &= \frac{c_{21}}{(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^2} D^{-1}, \end{aligned} \quad (2.7.11)$$

де

$$\begin{aligned} c_{11} &= 1 - f_0 - R^{(0)}\varphi_0^{1/2}, & c_{12} &= -a'_4 R^{(0)}\varphi_0^{-1/2}, \\ c_{21} &= a'_4, & c_{22} &= -a'_2 R_1^{(0)}\varphi_0^{1/2}, \\ c_{23} &= R_1^{(0)}\varphi_0^{1/2}(1 - f_0) - \varphi_0. \end{aligned} \quad (2.7.12)$$

Отже, при  $\tau \rightarrow 0$  загальний розв'язок (2.6.23) переходить у розв'язок (2.7.7). Значення коефіцієнтів  $c_{lkm}$  (при  $s = 4$ ) подано в табл. 2.9.

Табл. 2.9. Значення постійних  $c_{lkm}$ , які згідно (2.7.9) та (2.7.10) визначають коефіцієнти  $c_1, c_2$  РГ розв'язків РС моделі  $\rho^4$

$b$	$b_{min}$	$b_I$	$b_{II}$	$b_{III}$	$c$	$10c$
$c_{1k}$	0.9515	0.9270	0.9095	0.9028	0.8255	0.8162
$c_{1k1}$	0.1354	0.1108	0.0934	0.0866	0.0094	0.0000
$c_{2k}$	-0.5899	-0.6331	-0.6640	-0.6758	-0.8120	-0.8285
$c_{2k1}$	0.3488	0.2656	0.2063	0.1835	-0.0784	-0.1101
$c_{2k2}$	0.2203	0.1804	0.1519	0.1410	0.0152	0.0000

Доведений фундаментальний факт, що приймався як постулат в існуючих теоріях, зокрема, в теорії Ландау, підході Вільсона [43, 93]. Він полягає у тому, що коефіцієнт  $c_1(T)$ , який стоїть біля максимального власного значення в розв'язках рівняння РГ, пропорційний до відносної температури  $\tau = (T - T_c)/T_c$ . Причому, при  $T = T_c$  маємо

$$c_1(T_c) = 0, \quad c_2(T_c) = a'_4 - u^* \quad (2.7.13)$$

і розв'язки РС (2.6.13) представляються у вигляді

$$\begin{aligned} r_n &= r^* + (a'_4 - u^*)RE_2^n, \\ u_n &= u^* + (a'_4 - u^*)E_2^n. \end{aligned} \quad (2.7.14)$$

Вони показують, що при  $T = T_c$  із збільшенням номера блочної структури  $n$  величини  $r_n$  і  $u_n$  прямують до  $r^*$  і  $u^*$  відповідно, оскільки  $E_2 < 1$ . При цьому виконуються рівності

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_n(T_c) = x^*, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} y_n(T_c) = y^*. \quad (2.7.15)$$

Отримана в цьому параграфі температурна залежність коефіцієнтів  $c_1$  і  $c_2(T)$  розв'язків рівнянь РГ, а також формули, що зв'язують  $c_1$  і  $c_2$  з мікроскопічними параметрами задачі, згодом будуть використані нами при отриманні явних виразів для термодинамічних функцій поблизу точки фазового переходу.

## 2.8. Область температур, в якій реалізується критичний режим

Визначимо область температур, для якої справедливі розв'язки (2.6.23) [318]. Розглянемо спочатку випадок  $T > T_c$ . За теоремою 1 (§2.6) РС (2.6.5) при  $n \rightarrow \infty$  мають граничну точку (2.6.8), (2.6.9). РГ розв'язки (2.6.23) описують еволюцію коефіцієнтів  $r_n$  і  $u_n$  для початкових значень  $n$  [314,317]. Проте, коли  $n \rightarrow \infty$  (при  $\tau > 0$ ), вони не приводять до граничної точки (2.6.8), (2.6.9). Тому ми стверджуємо, що при  $\tau > 0$ , РГ розв'язки не застосовні до опису системи з малими хвильовими векторами (для великих  $n$ ). Справді, для коефіцієнта  $d_n(B_{n+1}, B_n)$  із (2.6.23) (з врахуванням (2.6.10)), одержуємо співвідношення

$$\lim_{n \rightarrow \infty} d_n(B_{n+1}, B_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} [s^{-2n} (r^* + q + c_1 E_1^n + c_2 R E_2^n)] = c_1 \lim_{n \rightarrow \infty} (E_1^n s^{-2n}). \quad (2.8.1)$$

Запишемо величину  $E_1$  у вигляді  $E_1 = s^{1/\nu}$ , де

$$\nu = \frac{\ln s}{\ln E_1}. \quad (2.8.2)$$

Тоді для (2.8.1) знаходимо

$$\lim_{n \rightarrow \infty} d_n(B_{n+1}, B_n) = c_1 \lim_{n \rightarrow \infty} s^{n(1/\nu-2)} = 0, \quad (2.8.3)$$

оскільки  $\nu > 1/2$ . А це суперечить теоремі 1 і формулі (2.6.8).

Далі, використовуючи (2.6.23), знаходимо асимптотику величини  $a_4^{(n)}$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_4^{(n)} = c_1 R_1 \lim_{n \rightarrow \infty} s^{n(1/\nu-4)} = 0. \quad (2.8.4)$$

Із останнього виразу випливає, що  $a_4^{(n)}$  також перетворюється в нуль при  $n \rightarrow \infty$ :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_4^{(n)} > \lim_{n \rightarrow \infty} s^{-3n}. \quad (2.8.5)$$

Проте, легко бачити, що асимптотика прямування до нуля величини  $a_4^{(n)}$  у (2.8.4) суперечить формулі (2.6.9) і теоремі 1, оскільки  $1/2 < \nu < 1$ . Отже, для  $\tau > 0$  КР справедливий тільки для  $n$ , які менші від деякого  $n_\tau$ .

Для вибору правильного наближення для РС слід приймати до уваги два критерії. Перший з них полягає у визначенні області температур  $0 < \tau < \tau^*$ , для якої справедливий КР. Другий має визначати його величину, тобто вказати кількість ефективних блочних структур  $n(0 \leq n \leq n_\tau)$ , для яких при  $\tau < \tau^*$  справедливі розв'язки (2.6.23).

**ОЗНАЧЕННЯ.** Критичною називатимемо область температур  $\tau < \tau^*$ , для якої існує таке ненульове значення  $n_\tau$ , що для всіх  $n < n_\tau$  розв'язки рекурентних рівнянь (2.4.4) описуються розв'язками РГ типу (2.6.23).

Розв'язки РГ типу (2.6.23) відповідають області КР. У цих розв'язках доданки, які пропорційні до  $E_2^n$ , описують "вихід" у КР (тобто наближення величин  $r_n$  і  $u_n$  до  $r^*$  і  $u^*$ , відповідно), а доданки, які пропорційні до  $E_1^n$  відповідають за "вихід" із КР (тобто відхід  $r_n$  і  $u_n$  від їх фіксованих значень  $r^*$ ,  $u^*$ ). Умова існування КР полягає в тому, що вихід з КР при  $n \rightarrow 1$  не повинен перевищувати входу до нього. Оскільки для  $r_n$  і



$u_n$  маємо два рівняння, то величина  $\tau^*$  дорівнює меншому із розв'язків  $\tau_1^*$ ,  $\tau_2^*$  таких рівнянь:

$$\begin{aligned} c_2(\tau_1^*)R(\tau_1^*)E_2 &= c_1(\tau_1^*)E_1, \\ c_2(\tau_2^*)E_2 &= c_1(\tau_2^*)R_1(\tau_2^*)E_1. \end{aligned} \quad (2.8.6)$$

Розв'язуючи ці рівняння з точністю до  $\tau^*$ , для першого з них (з врахуванням (2.6.22), (2.7.9), (2.7.10)) знаходимо:

$$\tau_1^* = \frac{c_{2k}E_2}{c_{1k}\varphi_0^{1/2}(R^{(0)})^{-1}E_1 - c_{2k1}E_2}. \quad (2.8.7)$$

Розв'язком другого рівняння (2.8.6) є величина

$$\tau_2^* = \frac{c_{2k}E_2}{c_{1k}\varphi_0^{1/2}R_1^{(0)}E_1 - c_{2k1}E_2}. \quad (2.8.8)$$

Слід підкреслити, що  $\tau_1^*$  і  $\tau_2^*$  визначаються як універсальними постійними  $E_1$ ,  $E_2$ ,  $R^{(0)}$ ,  $R_1^{(0)}$  і  $\varphi_0$ , так і коефіцієнтами  $c_{1k}$ ,  $c_{2k}$  і  $c_{2k1}$ , які відповідно до (2.7.11), (2.7.12) (див. табл. 2.9), є функціями відношення  $b/c$ . Підставляючи відповідні величини у праву частину рівностей (2.8.7) і (2.8.8), для  $\tau_1^*$  і  $\tau_2^*$  при  $s = s^*$  отримаємо дані, які подані в табл. 2.10. Надалі як  $\tau^*$  вибиратимемо  $\tau_1^*$ .

Вважаючи, що вхід до КР переважає над виходом із нього для всіх  $n \leq m$  (де  $m$  – деяке фіксоване значення), знаходимо, що величини  $\tau_1^*$  і  $|\tau_2^*|$  зменшуються пропорційно до множника порядку  $E_1^{-(1+\Delta)(m-1)}$ , де  $\Delta = -\ln E_2 / \ln E_1$ .

Припустимо, що температура системи  $\tau < \min(\tau_1^*, |\tau_2^*|)$ . Тоді, залежно від порядку близькості  $\tau$  до нуля, КР включає меншу чи більшу кількість ефективних блочних структур. Визначимо точку закінчення КР, яка водночас буде початковою точкою ГТР. Величина  $n_\tau$ , що визначає точку виходу системи з КР, відповідно до (2.6.8), (2.6.9), має бути настільки велика, щоб виконувалися співвідношення:

$$x_{n_\tau} > 1, \quad y_{n_\tau} \gg 1. \quad (2.8.9)$$

Табл. 2.10. Розв'язки рівнянь (2.8.6), які визначають величину критичної області

$b$	$b_{min}$	$b_I$	$b_{II}$	$b_{III}$	$c$
$\tau_1^*$	0.0132	0.0149	0.0162	0.0167	0.0234
$\tau_2^*$	-0.1769	-0.1936	-0.2055	-0.2101	-0.2627

Достатньою умовою виконання цих нерівностей є перша з них. Для кількісних оцінок скористаємося виразом для величини  $x_n$  у КР:

$$x_n = \sqrt{3} \frac{r^* + q + c_1 E_1^n + c_2 R E_2^n}{(u^* + c_1 R_1 E_1^n + c_2 E_2^n)^{1/2}}. \quad (2.8.10)$$

Для виконання (2.8.9) достатньо вибрати показник  $n_\tau$  із умови

$$c_1 R_1 E_1^{n_\tau} = u^*. \quad (2.8.11)$$

Скориставшись для величини  $c_1$  формулами (2.7.9), (2.7.10), знаходимо

$$n_\tau = -\frac{\ln \tau}{\ln E_1} + n_0, \quad n_0 = \frac{\ln \left( \frac{\sqrt{\varphi_0}}{c_{1k} R_1^{(0)}} \right)}{\ln E_1}, \quad (2.8.12)$$

де значення  $n_0$  подані в табл. 2.11.

При  $\tau < \tau^*$  справді приходимо до великих значень величини  $x_{n_\tau}$ . У цьому легко пересвідчитись. Приймаючи до уваги, що  $E_2^{n_\tau} \ll E_1^{n_\tau}$ , а  $c_1 E_1^{n_\tau} \gg r^* + q$ , на підставі (2.8.10) знаходимо:

$$x_{n_\tau} = \sqrt{3} \frac{c_1 E_1^{n_\tau}}{(u^* + c_1 E_1^{n_\tau} R_1)^{1/2}} = \sqrt{\frac{3}{2}} u^* R_1^{-1}. \quad (2.8.13)$$

Використовуючи дані табл. 2.4 та 2.8, при  $s = s^*$  отримуємо

$$x_{n_\tau} = 7.56, \quad (2.8.14)$$

Табл. 2.11. Величини, які характеризують точку виходу системи із критичного режиму при  $s = 4$ 

$b$	$b_{min}$	$b_I$	$b_{II}$	$b_{III}$	$c$	$10c$
$n_0$	0.8235	0.8350	0.8434	0.8467	0.8862	0.8913
$m_c$	-0.1855	-0.1739	-0.1655	-0.1622	-0.1227	-0.1177
$m_1$	0.0628	0.0528	0.0453	0.0424	0.0050	0.0000
$m_2$	-0.7021	-0.7447	-0.7742	-0.7853	-0.9058	-0.9194
$m_\Delta$	-0.3101	-0.3289	-0.3419	-0.3469	-0.4001	-0.4061

яке достатньо велике. Значення  $n_\tau$  визначає максимально можливу, для заданого  $\tau$ , величину критичної області.

Величина  $n_\tau$  зростає при зменшенні  $\tau$ . Мінімальне значення вона має при  $\tau = \tau^*$ . У випадку взаємодії найближчих сусідів  $b = b_I$  маємо, що при  $\tau = 0.02$

$$n_{\tau^*} = 2.65. \quad (2.8.15)$$

Зауважимо, що відповідно до (2.6.23) температура  $\tau^*$  визначалась при  $n = 1$ .

Знайдемо знак величини  $d_{n_\tau}(0)$ . Використаємо перше рівняння (2.6.23). При  $n = n_\tau$  маємо

$$d_{n_\tau}(0) = s^{-2n_\tau} [r^* + c_1 E_1^{n_\tau} + c_2 R E_2^{n_\tau}]. \quad (2.8.16)$$

З умови (2.8.11) і нерівності  $E_1^{n_\tau} \gg E_2^{n_\tau}$  знаходимо, що величина

$$d_{n_\tau}(0) = s^{-2n_\tau} \left( r^* + \frac{\sqrt{u^*}}{R_1^{(0)}} \right) \quad (2.8.17)$$

завжди додатна. Так, при  $s = s^*$

$$d_{n_\tau}(0) = s^{-2n_\tau} \beta \tilde{\Phi}(0) (-0.5389 + 5.1241) > 0.$$

При інших значеннях  $s$  у додатності (2.8.16) можна перекоонатись із даних табл. 2.4 та 2.8, або із загальних РС (2.4.4).

Точку виходу системи із КР  $m_\tau$  при  $\tau > 0$  визначатимемо із фізичної умови (рис. 2.5)

$$d_{m_\tau+1}(0) = 0. \quad (2.8.18)$$

З неї випливає, що при всіх  $n \geq m_\tau+1$  криві  $d_n(k)$  знаходяться над віссю абсцис. Скориставшись виразами (2.6.23), (2.7.9), знаходимо рівняння для  $m_\tau$ :

$$c_{1\tau} \tau E_1^{m_\tau+1} = f_0 \left[ 1 - c_{2\tau} R^{(0)} f_0^{-1} \varphi_0^{-1/2} E_2^{m_\tau+1} \right]. \quad (2.8.19)$$

Для його розв'язання використаємо відому умову  $E_2^{m_\tau+1} \ll E_1^{m_\tau+1}$ . У результаті отримуємо

$$c_{1\tau} \tau E_1^{m_\tau+1} = f_0 [1 + m_2 \tau^\Delta], \quad (2.8.20)$$

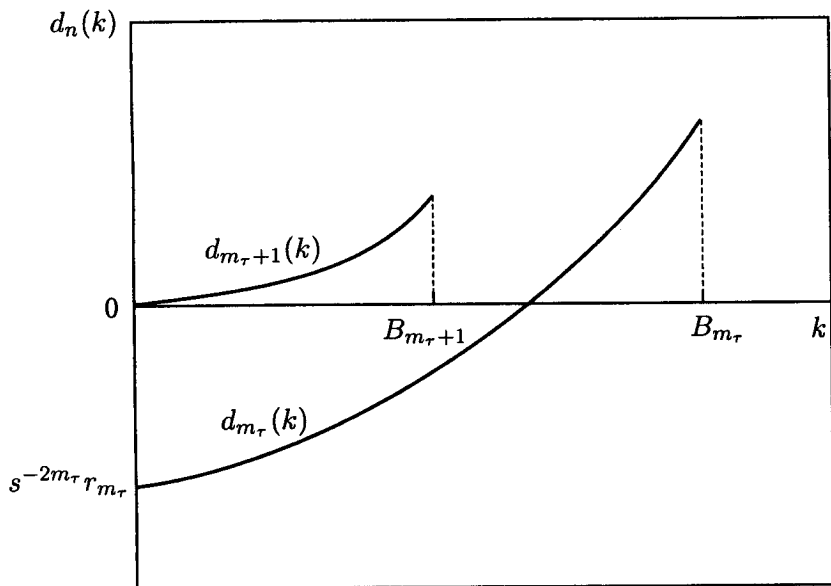


Рис. 2.5. Схема визначення координати точки виходу системи із критичного режиму.

де

$$m_2 = -c_{2k} \left( \frac{c_{1k}}{f_0} \right)^\Delta \Phi_0, \quad \Phi_0 = \frac{R^{(0)}}{f_0 \sqrt{\varphi_0}}. \quad (2.8.21)$$

Для величини  $m_\tau$  знаходимо

$$m_\tau = -\frac{\ln \tau}{\ln E_1} + m_0 - 1 + m_\Delta \tau^\Delta. \quad (2.8.22)$$

Тут (див. табл. 2.11)

$$m_0 = m_c - m_1 \tau, \quad m_\Delta = \frac{m_2}{\ln E_1}, \quad (2.8.23)$$

причому

$$m_c = \frac{\ln \left( \frac{f_0}{c_{1k}} \right)}{\ln E_1}, \quad m_1 = \frac{c_{1k1}}{\ln E_1}.$$

Знайдемо величину  $x_{m_\tau}$ , що відповідає значенню аргумента  $x_n$  у точці виходу із КР, яка визначається умовою (2.8.18). Розглянемо нульове наближення, тобто у виразах (2.6.23) нехтуватимемо доданками, пропорційними до  $E_2^n$  ( $E_2 < 1$ ). Маємо

$$c_1 E_1^{m_\tau+1} = -r^*. \quad (2.8.24)$$

Скористаємось співвідношенням (2.3.14). При  $n = m_\tau$  для  $x_n$  отримуємо

$$x_{m_\tau} = \sqrt{3} \frac{\bar{q} - f_0(1 + E_1^{-1})}{(\varphi_0 + f_0 \sqrt{\varphi_0} R_1^{(0)} E_1^{-1})^{1/2}}. \quad (2.8.25)$$

Величина  $x_{m_\tau}$  менша від одиниці. Так, при  $s = s^*$  вона дорівнює

$$x_{m_\tau} = 0.1354. \quad (2.8.26)$$

Наголосимо на деяких характерних особливостях умови виходу системи з КР, яка визначається із рівняння (2.8.18). По-перше, порівнюючи (2.8.14) і (2.8.26), знаходимо, що

$$m_\tau < n_\tau. \quad (2.8.27)$$

Криві  $d_n(k)$  повністю перебувають над віссю абсцис як при  $n = m_\tau + 1$ , так і при  $n \geq n_\tau$  (див. рис. 2.5). По-друге, із (2.8.13) і (2.8.25) маємо

$$x_{m_\tau} < 1, \quad x_{n_\tau} > 1, \quad (2.8.28)$$

хоча точка  $n_\tau$  віддалена від точки  $m_\tau$  на величину  $\Delta$ , яка дорівнює декільком блочним структурам ( $\Delta \approx 1 \div 2$ ). Починаючи з точки  $m_\tau$ , спостерігається різкий підйом кривих  $d_n(k)$  вгору над віссю абсцис.

Отже, доведено, що розв'язки РС типу КР (або РГ) справедливі при  $T = T_c$  для всіх значень  $n$  і, відповідно, для всіх  $\mathbf{k} \in \mathcal{B}_0$ . При  $T > T_c$  ці розв'язки справедливі тільки для  $n < n_\tau$ , тобто для області хвильових векторів  $k > B's^{-n_\tau}$ . В області  $k \leq B's^{-n_\tau}$  РГ розв'язки мають переходити в розв'язки нового типу, такі, що відповідають області ГГР. Цьому питанню присвячений наступний параграф.

## 2.9. Граничний гаусовий режим

Знайдемо розв'язки РС для температур  $0 < \tau < \tau^*$ , що відповідають блочним структурам з номерами  $n > n_\tau$  [319, 320]. У цій області, відповідно до (2.8.13), (2.8.14), справедливі нерівності [318, 321]:

$$x_n \gg 1, \quad y_n \gg 1. \quad (2.9.1)$$

Для функцій  $N(x_n)$ ,  $E(x_n)$  справедливі розклади за зворотніми степенями аргумента [311, 322, 323]

$$\begin{aligned} N(x_n) &= 1 + \frac{3}{2}(x_n)^{-2}(1 - s^{-d}) + O(x_n^{-4}), \\ E(x_n) &= 1 - \frac{9}{2}(x_n)^{-2}(1 - s^{-d}) + O(x_n^{-4}). \end{aligned} \quad (2.9.2)$$

Величина  $d_n(0)$  додатна при  $n \geq n_\tau$  і для блочного гамільтоніану  $n$ -ої структури

$$E_n(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_n} d_n(k) \rho_k \rho_{-k} - \frac{1}{4! N_n} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \leq B_n}} a_4^{(n)} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4}$$

маємо негативно визначену форму при  $\tau \rightarrow 0$ ,  $n_\tau \rightarrow \infty$  та  $B_{n_\tau} \rightarrow 0$ . Тому у ГГР використовуватимемо гаусовий базисний розподіл.

Вплив доданка, який пропорційний до четвертого степеня змінної враховується за теорією збурень [291, 292]. Це відповідає розкладам спеціальних функцій за степенями  $x_n^{-2}$ . При використанні гаусового розподілу відбувається факторизація підінтегрального виразу і при інтегруванні за змінними  $\rho_k$  з  $k \leq B_n$  можна не виділяти інтегрування за  $\rho_0$ , якщо не цікавитись сприйнятливістю при  $T > T_c$ .

Покажемо, що в області ГГР як базисний розподіл виступає гаусовий. Для оцінки характеру розв'язків РС при  $T > T_c$  в області значень  $n > n_\tau$  для функцій  $N(x_n)$  і  $E(x_n)$  скористаємось такими наближеннями:

$$N_n = 1 + \frac{3}{2} (x_n)^{-2} (1 - s^{-d}), \quad E_n = 1. \quad (2.9.3)$$

Таке наближення відповідає деякому завищеному значенню коефіцієнта  $a_4^{(n)}$  порівняно з випадком використання загальних РС (2.3.18). Рекурентні співвідношення, при цьому, запишемо у вигляді

$$d_{n+1} = d_n \left[ 1 + \frac{3}{2} x_n^{-2} (1 - s^{-d}) + \dots \right] - q_1 s^{-2n}, \quad (2.9.4)$$

$$a_4^{(n+1)} = a_4^{(n)} s^{-3},$$

де  $q_1 = q(1 - s^{-2})$ . За початкові значення  $d_n$  та  $a_4^{(n)}$  вибираються

ті, що відповідають точці виходу системи з КР:

$$\begin{aligned} d_{n_\tau} &= s^{-2n_\tau}(r_{n_\tau} + q), \\ a_4^{(n_\tau)} &= s^{-4n_\tau}u_{n_\tau}, \end{aligned} \quad (2.9.5)$$

Величина  $n_\tau$  задана в (2.8.12), а вирази для  $r_{n_\tau}$  і  $u_{n_\tau}$  отримані на основі (2.6.20). Використовуючи РС (2.9.4), знаходимо:

$$\begin{aligned} d_{n_\tau+1} &= d_{n_\tau} + \frac{1}{2}a_4^{(n_\tau)}(d_{n_\tau})^{-1}(1 - s^{-3}) - q_1s^{-2n_\tau}, \\ a_4^{(n_\tau+1)} &= a_4^{(n_\tau)}s^{-3}. \end{aligned} \quad (2.9.6)$$

Слід підкреслити, що другий доданок у правій частині першого рівняння (2.9.6) малий, оскільки він пропорційний до  $a_4^{(n)}$  і зі збільшенням номера блочної структури  $n$  зменшуватиметься пропорційно до  $s^{-3n}$ . Для  $n = n_\tau + 2$  маємо:

$$\begin{aligned} d_{n_\tau+2} &= d_{n_\tau+1} - q_1s^{-2(n_\tau+1)}, \\ a_4^{(n_\tau+2)} &= a_4^{(n_\tau+1)}s^{-3}. \end{aligned} \quad (2.9.7)$$

У загальному випадку

$$\begin{aligned} d_{n_\tau+m} &= d_{n_\tau+1} - qs^{-2(n_\tau+1)}(1 - s^{-2(m-1)}), \\ a_4^{(n_\tau+m)} &= a_4^{(n_\tau)}s^{-3m}. \end{aligned} \quad (2.9.8)$$

При  $m \rightarrow \infty$  отримуємо:

$$\begin{aligned} \lim_{m \rightarrow \infty} d_{n_\tau+m} &= d_{n_\tau+1} - qs^{-2(n_\tau+1)}, \\ \lim_{m \rightarrow \infty} a_4^{(n_\tau+m)} &= 0. \end{aligned} \quad (2.9.9)$$

На цьому закінчимо процес дослідження розв'язків рекурентних рівнянь і підведемо підсумки. Об'єднаємо одержані нами



вище результати та приведемо кінцевий вигляд повного розв'язку РС:

$$d_n(B_{n+1}, B_n) = \quad (2.9.10)$$

$$= \begin{cases} s^{-2n}[r^* + q + c_1 E_1^n + c_2 R E_2^n], & n \leq n_\tau, \\ d_{n_\tau} \left(1 + \frac{3}{2}(x_{n_\tau})^{-2}(1 - s^{-d})\right) - q_1 s^{-2n_\tau}, & n = n_\tau + 1, \\ d_{n_\tau+1} - q s^{-2(n_\tau+1)}(1 - s^{-2(m-1)}), & \begin{cases} n = n_\tau + m, \\ m \geq 2, \end{cases} \end{cases}$$

$$a_4^{(n)} = \begin{cases} s^{-4n}[u^* + c_1 R_1 E_1^n + c_2 E_2^n], & n \leq n_\tau, \\ a_4^{n_\tau} s^{-3m}, & \begin{cases} n = n_\tau + m, \\ m \geq 1, \end{cases} \end{cases} \quad (2.9.11)$$

де для  $d_{n_\tau}$  маємо:

$$d_{n_\tau}(B_{n_\tau+1}, B_{n_\tau}) = s^{-2n_\tau}[r^* + q + c_1 E_1^{n_\tau} + c_2 R E_2^{n_\tau}]. \quad (2.9.12)$$

Отримані вище розв'язки ми використаємо при розрахунках вільної енергії та інших термодинамічних функцій для області температур  $|\tau| < \tau^*$ .

## Розділ 3

# Термодинамічні функції вище точки фазового переходу (наближення моделі $\rho^4$ )

Запропонований вище метод розрахунку статистичної суми дає змогу обчислити основні термодинамічні функції тривимірної спінової моделі поблизу точки фазового переходу і дослідити їхню залежність від температури і мікроскопічних параметрів гамільтоніану. Цей метод обчислення може бути використаний при описі фазового переходу типу порядок–безпорядок, критичної точки рідина–газ та в інших тривимірних системах, в яких відбувається фазовий перехід другого роду.

Запропоновано спосіб обчислення вільної енергії тривимірної системи, який відображає наявність поблизу точки фазового переходу двох основних флуктуаційних процесів, описаних нами у розділі 2. Перший із них відповідає короткохвильовим фазам флуктуацій густини спінового моменту і характеризується ділянкою критичного режиму. Тут справедливі співвідношення ренормалізаційної групи. Другий тип довгохвильових флуктуацій відповідає граничному гаусовому режиму. Цей тип флуктуацій описується гаусовим розподілом, дисперсія якого є неаналітичною функцією температури.

У процесі розрахунку вільної енергії системи важливе місце відводиться явним розв'язкам рівнянь ренормгрупи, як функціям номера блочної структури і мікроскопічних параметрів га-

мільтоніану. Показано, що вільна енергія, крім аналітичних доданків містить неаналітичні внески, що призводять до розбіжностей у виразі для теплоємності в точці фазового переходу, а також доданки, які описують поправки до скейлінгу.

Встановлено, що частина вільної енергії, яка відповідає ділянці критичного режиму, призводить до від'ємних значень критичної амплітуди теплоємності. Її позитивність забезпечується внеском довгохвильових флуктуацій. Встановлено механізм формування “некласичних” значень критичних показників термодинамічних функцій поблизу ТФП. Показано, що відповідальними за це є негаусові флуктуації параметра порядку. Граничні гаусові флуктуації не впливають на критичні показники. Останні формуються тільки в області критичного режиму.

### 3.1. Методика обчислення вільної енергії

У рівноважній статистичній фізиці, що ґрунтується на канонічному розподілі Гіббса, обчислення виразу для вільної енергії вважається, зазвичай, кінцевою метою досліджень. Маючи явний вираз для вільної енергії як функцію температури, мікроскопічних параметрів гамільтоніану, густини і зовнішнього поля, можна знайти інші термодинамічні величини системи.

Особливість розрахунку виразів для термодинамічних величин тривимірної системи поблизу точки фазового переходу полягає в розділенні внесків від коротко- та довгохвильових флуктуацій. Відповідно до одержаного в (2.3.11) виразу для статистичної суми запишемо вільну енергію у вигляді [324–327]

$$F = F_0 + F_{\text{КР}} + F_{\text{ТГР}}. \quad (3.1.1)$$

Тут  $F_0$  – вільна енергія невзаємодіючих спінів:

$$F_0 = -kTN \ln 2. \quad (3.1.2)$$

Величина  $F_{\text{КР}}$  відповідає внескові у вільну енергію від негаусових (область КР), а  $F_{\text{ТГР}}$  від граничних гаусових флуктуацій

(область ГГР):

$$F_{\text{КР}} = -kT \sum_{n=0}^{m_\tau} \ln Q_n, \quad F_{\text{ГГР}} = -kT \sum_{n=m_\tau+1}^{\infty} \ln Q_n. \quad (3.1.3)$$

Величина  $Q_n$  є парціальною статистичною сумою  $n$ -ої блочної структури (див. (2.3.12), (2.3.13)):

$$Q_n^{1/N_n} = \left( \frac{3}{\varphi(y_{n-1})} \right)^{1/4} e^{x_n^2/4} e^{y_{n-1}^2/4} U(0, y_{n-1}) U(0, x_n). \quad (3.1.4)$$

Номер  $m_\tau$  визначає хвильовий вектор  $B_{m_\tau} = B's^{-m_\tau}$ , який розділяє область хвильових векторів  $[0, B']$  на дві частини. Першій із них відповідають негаусові флуктуації  $k \in [B_{m_\tau}, B']$ , які описують область КР. Друга частина відповідає малим значенням хвильових векторів  $k \in [0, B_{m_\tau})$ , і характеризується гаусовою густиною міри. Використання останньої стає можливим при умові, коли величина  $d_n(k)$  додатна і не прямує до нуля зі збільшенням  $n$ . Як показано у [242], при поетапному інтегруванні статистичної суми виконується співвідношення  $d_{n+1}(k) \geq d_n(k)$ , тобто з ростом  $n$  крива  $d_n(k)$  піднімається вгору. Якщо величина  $d_n(0)$  стає додатною з деякого номера  $n$ , то при поетапному інтегруванні статистичної суми  $d_{n+m}(0)$  збільшується з ростом  $m$  і тому при подальших обчисленнях як базисний, загалом, можна використовувати гаусовий розподіл. При цьому ні для яких значень хвильового вектора (включно з  $k = 0$ ) використання цього розподілу не призводить до розбіжних діаграм. Тому точку виходу системи із КР при  $T > T_c$  шукатимемо із умови

$$d_{m_\tau+1}(0) = 0, \quad (3.1.5)$$

яка свідчить про те, що крива  $d_{m_\tau+1}(k)$  повністю перебуває над віссю абсцис (див. рис. 2.5). Використовуючи розв'язки рівнянь РГ із (2.6.20), отримуємо рівняння для величини  $m_\tau$ :

$$r^* + c_1 E_1^{m_\tau+1} + c_2 R E_2^{m_\tau+1} = 0. \quad (3.1.6)$$

Температурна залежність коефіцієнтів  $c_1$ ,  $c_2$  приведена в (2.7.9), (2.7.10). Рівняння (3.1.6) можна переписати у вигляді

$$\tau c_{1\tau} E_1^{m_\tau+1} = f_0(1 - c_{2\tau} \Phi_0 E_2^{m_\tau+1}). \quad (3.1.7)$$

Тут  $\Phi_0 = R^{(0)} f_0^{-1} \varphi_0^{-1/2}$ . Отримати точний розв'язок рівняння (3.1.7) при довільних  $\tau$  не можна. Однак з'ясовується, що у температурній області  $\tau \ll 1$  зручно скористатись методом послідовних наближень. Справді, в цій області температур  $m_\tau$  набуває великих значень. Відповідно до цього доданок пропорційний до  $E_2^{m_\tau+1}$  ( $E_2 < 1$ ) буде малим порівняно з одиницею. Рівняння (3.1.7) у нульовому наближенні запишемо у вигляді

$$c_{1\tau} \tau E_1^{m_\tau+1} = f_0.$$

Для  $m_\tau$  отримуємо рівність

$$m_\tau = -\frac{\ln \tau}{\ln E_1} + m_0 - 1, \quad (3.1.8)$$

де коефіцієнти виразу

$$m_0 = m_c - m_{1\tau} \quad (3.1.9)$$

розраховані нами раніше (див. (2.8.23)). Значення  $m_c$  і  $m_{1\tau}$  подані у табл. 2.11. Наявність у правій частині (3.1.8) множника  $\ln \tau$  свідчить про зростання  $m_\tau$  з наближенням температури до  $T_c$  і підтверджує припущення про малість доданка  $E_2^{m_\tau+1}$  у рівнянні (3.1.7). Величини  $r_n$  і  $u_n$  у точці виходу системи із КР ( $n = m_\tau$ ) набувають певних конкретних значень. Відповідно до означення (3.1.5) знаходимо

$$r_{m_\tau} = r^*(1 - E_1^{-1}), \quad u_{m_\tau} = u^*(1 + f_0 \varphi_0^{-1/2} R_1^{(0)} E_1^{-1}). \quad (3.1.10)$$

Одержані співвідношення дають змогу записати вираз для основної змінної  $x_n$  у точці виходу системи із КР ( $n = m_\tau$ )

$$x_{m_\tau} = (x^* + \sqrt{3} f_0 \varphi_0^{-1/2} E_1^{-1})(1 + f_0 \varphi_0^{-1/2} R_1^{(0)} E_1^{-1})^{-1/2}, \quad (3.1.11)$$

а також для проміжної змінної

$$y_{m_\tau} = s^{3/2} U(x_{m_\tau}) \left( \frac{3}{\varphi(x_{m_\tau})} \right)^{1/2}. \quad (3.1.12)$$

Внесок у вільну енергію системи від негаусових флуктуацій представляється у вигляді

$$F_{\text{КР}} = -kT \sum_{n=0}^{m_\tau} N_n f_n, \quad (3.1.13)$$

де для  $f_n$  відомий явний вираз

$$f_n = \frac{1}{4} \ln \left( \frac{3}{\varphi(y_{n-1})} \right) + \frac{x_n^2}{4} + \frac{y_{n-1}^2}{4} + \ln U(0, x_n) + \ln U(0, y_{n-1}). \quad (3.1.14)$$

Проміжний аргумент  $y_{n-1}$  завжди набагато більший від одиниці. Тому залежні від нього спеціальні функції можна представити рядами за його зворотніми степенями. Надалі використовувати мемо розклади [300, 315]:

$$\begin{aligned} U(0, t) &= t^{-1/2} e^{-t^2/4} \left( 1 - \frac{3}{8} t^{-2} + \frac{105}{108} t^{-4} - \dots \right), \\ U(t) &= t^{-1} \left( 1 - \frac{3}{2} t^{-2} + 6t^{-4} - \dots \right), \\ \varphi(t) &= 3t^{-4} \left( 1 - \frac{21}{2} t^{-2} + \frac{447}{4} t^{-4} - \dots \right). \end{aligned} \quad (3.1.15)$$

З використанням формул (3.1.15) для  $f_n$  (3.1.14) отримуємо наближений вираз:

$$f_n = \frac{1}{2} \ln y_{n-1} + \frac{9}{4} y_{n-1}^{-2} + \frac{x_n^2}{4} + \ln U(0, x_n) + O(y_{n-1}^{-4}). \quad (3.1.16)$$

Розрахунок величини  $F_{\text{КР}}$  пов'язаний з сумуванням за  $m_\tau$  блочними структурами відповідно до формули

$$F_{\text{КР}} = F_{\text{КР}}^{(0)} - kTN' \sum_{n=1}^{m_\tau} s^{-3n} f_n. \quad (3.1.17)$$

Доданок  $F_{\text{КР}}^{(0)}$  враховує внесок від ділянки входу системи у КР і відповідає  $n = 0$ . Для нього справджується співвідношення

$$F_{\text{КР}}^{(0)} = -kTN'[a'_0 + \ln Q(d)], \quad (3.1.18)$$

де  $Q(d)$  визначено в (2.2.18) з врахуванням формул (2.5.11)–(2.5.13).

Виділимо у виразі для  $f_n$  явну залежність від  $n$ . Використаємо для цього розв'язки рівнянь РГ. Приймаючи до уваги (2.6.20), маємо

$$x_n = \sqrt{3} \frac{\bar{q} - f_0 + \tau c_{1\tau} E_1^n + c_{2\tau} R^{(0)} \varphi_0^{-1/2} E_2^n}{(\varphi_0 + c_{1\tau} \tau R_1^{(0)} \varphi_0^{1/2} E_1^n + c_{2\tau} E_2^n)^{1/2}}. \quad (3.1.19)$$

Знаменник у (3.1.19) можна розкласти в ряд, приймаючи до уваги, що  $\tau \ll 1$ , а  $E_2^n \ll 1$ . Зберігаючи у розкладі доданки другого порядку малості за  $\tau$  та  $E_2^n$ , знаходимо

$$\begin{aligned} x_n = & x^* + c_{2\tau} B_1 E_2^n + c_{2\tau}^2 B_2 E_2^{2n} + \\ & + \tau [B_3 + c_{2\tau} B_4 E_2^n + c_{2\tau}^2 B_5 E_2^{2n}] c_{1\tau} E_1^n + \\ & + \tau^2 [B_6 + c_{2\tau} B_7 E_2^n + c_{2\tau}^2 B_8 E_2^{2n}] c_{1\tau}^2 E_1^{2n}. \end{aligned} \quad (3.1.20)$$

Тут

$$B_1 = \varphi_0^{-1} \left( R^{(0)} \sqrt{3} - \frac{1}{2} x^* \right), \quad B_2 = \varphi_0^{-2} \left( \frac{3}{8} x^* - \frac{\sqrt{3}}{2} R^{(0)} \right),$$

$$B_3 = \varphi_0^{-1/2} \left( \sqrt{3} - \frac{1}{2} x^* R_1^{(0)} \right),$$

$$B_4 = \varphi_0^{-3/2} \left[ \frac{3}{4} x^* R_1^{(0)} - \frac{1}{2} (1 + R^{(0)} R_1^{(0)}) \sqrt{3} \right],$$

$$\begin{aligned}
B_5 &= \varphi_0^{-5/2} \frac{3}{4} \sqrt{3} \left[ \frac{1}{2} + R^{(0)} R_1^{(0)} - 5x^* R_1^{(0)} (4\sqrt{3})^{-1} \right], \\
B_6 &= \varphi_0^{-1} R_1^{(0)} \left( \frac{3x^* R_1^{(0)}}{8} - \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \\
B_7 &= \varphi_0^{-2} \frac{3}{4} \sqrt{3} R_1^{(0)} \left[ 1 + \frac{1}{2} R^{(0)} R_1^{(0)} - 5x^* R_1^{(0)} (4\sqrt{3})^{-1} \right], \\
B_8 &= \varphi_0^{-3} \frac{15}{16} \sqrt{3} R_1^{(0)} \left[ 7x^* R_1^{(0)} (4\sqrt{3})^{-1} - 1 - R^{(0)} R_1^{(0)} \right]. \quad (3.1.21)
\end{aligned}$$

Проміжний аргумент  $y_n$  є функцією  $x_n$  і наближено може бути представлений у вигляді

$$y_n = y^* [1 + r_1(x_n - x^*) + r_2(x_n - x^*)^2], \quad (3.1.22)$$

де коефіцієнти  $r_1, r_2$  визначені в додатку А. Підставляючи вираз (3.1.22) у (3.1.16), для парціальної вільної енергії отримуємо

$$\begin{aligned}
F_n &= -kTN_n [f_{\text{КР}}^{(0)} + A_1(x_{n-1} - x^*) + A_2(x_{n-1} - x^*)^2 + \\
&+ A_3(x_n - x^*) + A_4(x_n - x^*)^2]. \quad (3.1.23)
\end{aligned}$$

Тут

$$f_{\text{КР}}^{(0)} = \frac{1}{2} \ln y^* + \frac{9}{4} (y^*)^{-2} + \ln U(0, x^*) + \frac{(x^*)^2}{4}. \quad (3.1.24)$$

Для  $A_l$  маємо:

$$\begin{aligned}
A_1 &= \frac{1}{2} r_1 - \frac{9}{2} \frac{r_1}{(y^*)^2}, \quad A_2 = \frac{r_2}{2} - \frac{r_1^2}{4} + \frac{9}{4} (3r_1^2 - 2r_2) (y^*)^{-2}, \\
A_3 &= -\frac{1}{2} U(x^*), \quad A_4 = \frac{1}{4} \left[ 1 - x^* U(x^*) - \frac{1}{2} U^2(x^*) \right]. \quad (3.1.25)
\end{aligned}$$

Вираз для вільної енергії  $n$ -тої блочної структури знаходимо з врахуванням (3.1.20):

$$\begin{aligned}
F_n &= -kTN_n \left\{ f_{\text{КР}}^{(0)} + c_{2\tau} d_2 E_2^n + c_{2\tau}^2 d_4 E_2^{2n} + \right. \\
&+ \tau c_{1\tau} E_1^n [d_1 + c_{2\tau} d_5 E_2^n + c_{2\tau}^2 d_7 E_2^{2n}] + \\
&+ \tau^2 c_{1\tau}^2 E_1^{2n} [d_3 + c_{2\tau} d_6 E_2^n + c_{2\tau}^2 d_8 E_2^{2n}] \left. \right\}, \quad (3.1.26)
\end{aligned}$$



де

$$\begin{aligned}
 d_1 &= B_3 \left( A_3 + \frac{A_1}{E_1} \right), & d_3 &= B_6 \left( A_3 + \frac{A_1}{E_1^2} \right) + B_3^2 \left( A_4 + \frac{A_2}{E_1^2} \right), \\
 d_2 &= B_1 \left( A_3 + \frac{A_1}{E_2} \right), & d_4 &= B_2 \left( A_3 + \frac{A_1}{E_2^2} \right) + B_1^2 \left( A_4 + \frac{A_2}{E_2^2} \right), \\
 d_5 &= B_4 \left( A_3 + \frac{A_1}{E_1 E_2} \right) + 2B_1 B_3 \left( A_4 + \frac{A_2}{E_2 E_2} \right), \\
 d_6 &= B_7 \left( A_3 + \frac{A_1}{E_1^2 E_2} \right) + 2(B_1 B_6 + B_3 B_4) \left( A_4 + \frac{A_2}{E_1^2 E_2} \right), \\
 d_7 &= B_5 \left( A_3 + \frac{A_1}{E_1 E_2^2} \right) + 2(B_1 B_4 + B_2 B_3) \left( A_4 + \frac{A_2}{E_1 E_2^2} \right), \\
 d_8 &= B_8 \left( A_3 + \frac{A_1}{E_1^2 E_2^2} \right) + 2(B_1 B_7 + B_2 B_6 + B_3 B_5 + \frac{1}{2} B_4^2) \times \\
 &\quad \times \left( A_4 + \frac{A_2}{(E_1 E_2)^2} \right). \tag{3.1.27}
 \end{aligned}$$

У виразі (3.1.26) ми обмежились врахуванням доданків, які пропорційні до  $\tau^2 c_{1T}^2 E_1^{2n}$  і  $c_{2T}^2 E_2^{2n}$  включно. Члени вищого порядку (типу  $\tau^3$  і  $E_2^{3n}$ ) в такому розрахунку до уваги не приймаються.

На основі (3.1.17) у результаті сумування за  $m_\tau$  блочними структурами отримуємо внесок у вільну енергію від ділянки КР:

$$F_{\text{КР}} = F_{\text{КР}}^{(0)} - kTN'[\gamma_{01} + \gamma_{02}\tau + \gamma_{03}\tau^3 - \gamma^+ s^{-3(m_\tau+1)}]. \tag{3.1.28}$$

Величина  $F_{\text{КР}}^{(0)}$  визначена в (3.1.18), а для коефіцієнтів  $\gamma_{0i}$  справедливі вирази

$$\begin{aligned}
 \gamma_{01} &= s^{-3} \left[ \frac{f_{\text{КР}}^{(0)}}{1-s^{-3}} + \frac{c_{2k} d_2 E_2}{1-E_2 s^{-3}} + \frac{b_0 d_4 E_2^2}{1-E_2^2 s^{-3}} \right], \\
 \gamma_{02} &= s^{-3} \left[ \frac{c_{2k1} d_2 E_2}{1-E_2 s^{-3}} + \frac{b_1 d_4 E_2^2}{1-E_2^2 s^{-3}} + \frac{c_{1k} d_1 E_1}{1-E_1 s^{-3}} \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{c_{1k}c_{2k}d_5E_1E_2}{1-E_1E_2s^{-3}} + \frac{c_{1k}b_0d_7E_1E_2^2}{1-E_1E_2^2s^{-3}} \Big], \\
\gamma_{03} = s^{-3} & \left[ \frac{c_{2k}d_2E_2}{1-E_2s^{-3}} + \frac{d_5(c_{1k}c_{2k1} + c_{2k}c_{1k1})E_1E_2}{1-E_1E_2s^{-3}} + \right. \\
& + \frac{b_2d_4E_2^2}{1-E_2^2s^{-3}} + \frac{c_{1k1}d_1E_1}{1-E_1s^{-3}} + \frac{d_7(c_{1k}b_1 + c_{1k1}b_0)E_1E_2^2}{1-E_1E_2^2s^{-3}} + \\
& \left. + \frac{c_{1k}^2d_3E_1^2}{1-E_1^2s^{-3}} + \frac{c_{1k}^2c_{2k}d_6E_1^2E_2}{1-E_1^2E_2s^{-3}} + \frac{c_{1k}^2b_0d_8E_1^2E_2^2}{1-E_1^2E_1^2s^{-3}} \right], \\
\gamma^+ = & \frac{f_{\text{KP}}^{(0)}}{1-s^{-3}} + \frac{d_1f_0}{1-E_1s^{-3}} + \frac{d_3f_0^2}{1-E_1^2s^{-3}}, \tag{3.1.29}
\end{aligned}$$

причому для величин  $b_l$  маємо:

$$b_0 = c_{2k}^2, \quad b_1 = 2c_{2k}c_{2k1}, \quad b_2 = c_{2k1}^2 + 2c_{2k}c_{2k2}.$$

Виділимо в (3.1.28) температурну залежність. Приймаючи до уваги (3.1.8), отримуємо

$$F_{\text{KP}} = -kTN'[\gamma'_{01} + \gamma_1\tau + \gamma_2\tau^2 - \gamma_{10}^{(0)}\tau^{3\nu}], \tag{3.1.30}$$

де  $\nu$  – критичний показник кореляційної довжини [328, 329]. Коefіцієнти виразу (3.1.30) задаються співвідношеннями

$$\begin{aligned}
\gamma'_{01} &= \bar{a}_0 + \gamma_{01}, & \gamma_1 &= \bar{a}_1 + \gamma_{02}, \\
\gamma_2 &= \bar{a}_2 + \gamma_{03}, & \gamma_{10}^{(0)} &= s^{-3m_0}\gamma^+.
\end{aligned} \tag{3.1.31}$$

Для  $\bar{a}_l$  справедливі такі формули:

$$\begin{aligned}
\bar{a}_0 &= a'_0 + \frac{1}{2} \ln 2\pi + \frac{1}{4} \ln \frac{3}{a'_4} + \frac{x_{oc}^2}{4} + \ln U(0, x_{oc}), \\
\bar{a}_1 &= -\frac{1}{2} T_c U(x_{oc}) \cdot x'_{oc}, \\
\bar{a}_2 &= -\frac{1}{4} T_c^2 \left[ x''_{oc} U(x_{oc}) + \left( \frac{1}{2} U^2(x_{oc}) + x_{oc} U(x_{oc}) - 1 \right) (x'_{oc})^2 \right].
\end{aligned}$$

Величину  $x_{0c}$  визначають рівністю

$$x_{0c} = \sqrt{3} d_{2c}(a_{4c})^{-1/2},$$

де

$$d_{2c} = \bar{q} - f_0 + c_{2k} R^{(0)} \varphi_0^{-1/2}, \quad a_{4c} = \varphi_0 + c_{2k}.$$

Похідні за температурою величини  $x_{0c}$  представимо у вигляді

$$\begin{aligned} x'_{0c} &= \frac{\sqrt{3}}{T_c} \left[ t_1 (a_{4c})^{-1/2} - t_2 d_{2c} (2 \cdot a_{4c}^{3/2})^{-1} \right], \\ x''_{0c} &= \frac{\sqrt{3}}{T_c^2} \left[ t_3 (a_{4c})^{-1/2} + 0.75 d_{2c} t_2^2 (a_{4c})^{-5/2} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} d_{2c} t_4 (a_{4c})^{-3/2} - t_1 t_2 (a_{4c})^{-3/2} \right], \end{aligned}$$

причому

$$\begin{aligned} t_1 &= c_{1k} + c_{1k1} R^{(0)} \varphi_0^{-1/2}, & t_2 &= c_{2k1} + c_{1k} R_1^{(0)} \varphi_0^{1/2}, \\ t_3 &= 2(c_{1k1} + c_{2k2} R^{(0)} \varphi_0^{-1/2}), & t_4 &= 2(c_{2k2} + c_{1k1} R_1^{(0)} \varphi_0^{1/2}). \end{aligned}$$

Коефіцієнти  $\gamma'_{01}, \gamma_1, \gamma_2$  і  $\gamma^+$  не залежать від температури (див. табл. 3.1). Надалі використовуватимемо для РГ параметра  $s$  проміжні значення  $3 \leq s \leq 5$ . Саме вони оптимальні для розрахунків у наближенні моделі  $\rho^4$ .

Табл. 3.1. Коефіцієнти вільних енергій КР та ГГР при  $b = c$  для деяких проміжних значень параметра  $s$

$s$	$\gamma'_{01}$	$\gamma_1$	$\gamma_2$	$\gamma^+$	$\gamma_{10}^{(0)}$	$f_{\text{ГГР}}^{(0)}$	$\gamma_4^+$
3	0.3745	-0.6753	-0.0261	0.5727	2.0942	3.6320	1.3083
$s^*$	0.3892	-0.6793	-0.0939	0.4724	1.0582	2.5263	1.1999
4	0.4011	-0.6899	-0.0916	0.3582	0.5966	2.0181	1.4033
5	0.4346	-0.7382	0.0153	-0.0797	-0.0723	1.2557	1.9769

Зазначимо, що вільна енергія КР (3.1.30) містить як аналітичну частину, зв'язану з коефіцієнтами  $\gamma'_{01}$ ,  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$ , так і неаналітичний доданок, пропорційний до  $\gamma_{10}^{(0)}$ . Останній містить головну інформацію про температурну залежність теплоємності в околі точки фазового переходу. Коефіцієнти  $\gamma_{10}^{(0)}$  подані в табл. 3.1.

Для отримання повного виразу для вільної енергії, потрібно додатково обчислити ту її частину, що відповідає ділянці ГГР. Запишемо явний вигляд частини статистичної суми, що відповідає внескам  $F_{\text{ГГР}}$ . Маємо:

$$Z_{\text{ГГР}} = 2^{(N_{m_\tau+1}-1)/2} [Q(P_{m_\tau})]^{N_{m_\tau+1}} \times \int (d\rho)^{N_{m_\tau+1}} \exp[E_{m_\tau+1}(\rho)], \quad (3.1.32)$$

де

$$E_{m_\tau+1}(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{m_\tau+1}} d_{m_\tau+1}(k) \rho_k \rho_{-k} - \frac{1}{4! N_{m_\tau+1}} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \leq B_{m_\tau+1}}} a_4^{(m_\tau+1)} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4}.$$

Характерною особливістю ГГР є зростання основної  $x_n$  і проміжної  $y_n$  змінних як функцій  $n$  при  $n > m_\tau$ . Тому вільна енергія ГГР може бути обчислена у наближенні гаусового розподілу, оскільки доданок, пропорційний до четвертого степеня змінної у показнику експоненти, набагато менший від квадратичного. Однак зростання  $x_n$  відбувається поступово. Існує перехідна область (ПО), де все ж потрібно враховувати у функції розподілу четвертий степінь змінної. Величина ПО не залежить від температури [315, 316, 321] і містить скінченну кількість  $m''$  блочних структур (див. додаток В).

Оскільки величина  $d_{m_\tau+1}(k)$  додатна, але не достатньо велика, ми не використовуємо гаусовий розподіл для проміжної області. Подамо (3.1.32) у вигляді

$$Z_{\text{ГГР}} = Z_{\text{ПО}} \cdot Z'. \quad (3.1.33)$$

Внесок у вільну енергію від перехідної області

$$F_{\text{ПО}} = -kT \sum_{n=1}^{m''} \ln Q_{m_{\tau}+n} \quad (3.1.34)$$

записується у вигляді

$$F_{\text{ПО}} = -kTN' f_{\text{ПО}}^{(0)} \tau^{3\nu}, \quad (3.1.35)$$

де постійна  $f_{\text{ПО}}^{(0)}$  подана в додатку В.

Виділення області КР, що характеризується парціально термодинамічною нестійкістю, має принципове значення у процесі розрахунку вільної енергії системи. У КР формуються значення критичних показників та дисперсія ГГР, який дає основний внесок у термодинамічні функції. З цієї точки зору введення величини  $m_{\tau}$  при обчисленні вільної енергії системи принципово важливе. Вона характеризує величину КР, яка містить флуктуаційні моди, що мають строго негаусовий характер флуктуацій. Крім того,  $m_{\tau}$  визначає критичні індекси системи.

Область хвильових векторів  $k \leq B' s^{-(p_{\tau}+1)}$  описується гаусовим розподілом. Відповідна частина статистичної суми має вигляд

$$\begin{aligned} Z' = \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{p_{\tau}+1}} [d_{p_{\tau}}(k) - d_{p_{\tau}}(B_{p_{\tau}+1}, B_{p_{\tau}})] \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \right. \\ \left. -2\pi i \sum_{k \leq B_{p_{\tau}+1}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} - \frac{(2\pi)^2}{2!} \sum_{k \leq B_{p_{\tau}+1}} P_2^{(p_{\tau})} \omega_{\mathbf{k}} \omega_{-\mathbf{k}} \right\} \times \\ \times (d\rho)^{N_{p_{\tau}+1}} (d\omega)^{N_{p_{\tau}+1}}, \end{aligned} \quad (3.1.36)$$

де для скорочення запису введено позначення  $p_{\tau} = m_{\tau} + 1 + m''$ ,

$$P_2^{(p_{\tau})} = \left( \frac{3}{a_4^{(p_{\tau})}} \right)^{1/2} U(x_{p_{\tau}}). \quad (3.1.37)$$

Виконуючи інтегрування в (3.1.36) за змінними  $\omega_k$  і  $\rho_k$  за винятком  $\rho_0$ , отримуємо

$$Z' = [P_2^{(p_\tau)}]^{-N_{p_\tau+1/2}} (2\pi)^{-1/2} \prod_{k \neq 0}^{B_{p_\tau+1}} [\tilde{d}_{p_\tau+1}(k)]^{-1/2} \times \int d\rho_0 \exp\left[-\frac{1}{2}\tilde{d}_{p_\tau+1}(0)\rho_0^2 + \beta\sqrt{N}h\rho_0\right], \quad (3.1.38)$$

де  $h = \mu_B \mathcal{H}$ ,  $\mu$  – магнетон Бора,  $\mathcal{H}$  – магнетне поле,

$$\tilde{d}_{p_\tau+1}(k) = (P_2^{(p_\tau)})^{-1} + \beta[\Phi(B_{p_\tau+1}, B_{p_\tau}) - \tilde{\Phi}(k)]. \quad (3.1.39)$$

Вираз для вільної енергії, що відповідає області довгохвильових флуктуацій, має вигляд

$$F' = \frac{1}{2}kT \left\{ N_{p_\tau+1} \ln P_2^{(p_\tau)} + \sum_{k=0}^{B_{p_\tau+1}} \ln \tilde{d}_{p_\tau+1}(k) - N\beta^2 \mu_B^2 \mathcal{H}^2 [\tilde{d}_{p_\tau+1}(0)]^{-1} \right\}.$$

Використовуючи рівності (3.1.37), (3.1.39), знаходимо

$$F' = -kTN_{p_\tau+1}f^{(0)} - kTN\gamma_4^+ \beta^2 \mu_B^2 \mathcal{H}^2 \tau^{-2\nu}, \quad (3.1.40)$$

де

$$f^{(0)} = -\frac{1}{2} \ln \frac{s^{-2} + g_0}{\bar{g} + g_0} + \frac{1}{3} - q'_0 \left( 1 - \sqrt{g'_0} \operatorname{arctg} \frac{1}{\sqrt{g'_0}} \right). \quad (3.1.41)$$

Тут введені позначення

$$g_0 = \bar{r}_{p_\tau}^{(0)} p_0 + \bar{q}(p_0 - 1), \quad g'_0 = g_0 s^2, \\ \gamma_4^+ = \left( \frac{f_0}{c_{1k}} \right)^{2\nu} s^{2m''} [2g_0 \beta \tilde{\Phi}(0)]^{-1}, \quad (3.1.42)$$

де

$$\begin{aligned} \bar{r}_{p\tau}^{(0)} &= f_0(E_1^{m''} - 1), \\ p_0 &= 1 + \frac{3}{2}(x_{p\tau}^{(0)})^{-2} - \frac{15}{4}(x_{p\tau}^{(0)})^{-4} + \dots \end{aligned} \quad (3.1.43)$$

Виділимо в (3.1.40) температурну залежність. Маємо:

$$F' = -kTN' f^{(0)'} \tau^{3\nu} - \beta N \gamma_4^+ \mu_B^2 \mathcal{H}^2 \tau^{-2\nu}. \quad (3.1.44)$$

Для коефіцієнта  $f'(0)$  отримано вираз:

$$f^{(0)'} = \left( \frac{c_{1k}}{f_0} \right)^{3\nu} \bar{f}^{(0)'}, \quad \bar{f}^{(0)'} = s^{-3(m''+1)} f^{(0)}. \quad (3.1.45)$$

Внесок ділянки ГГР у вільну енергію системи складається із виразів (3.1.35), (3.1.44) і визначається співвідношенням

$$F_{\text{ГГР}} = -kTN' f_{\text{ГГР}}^{(0)} \tau^{3\nu} - \beta N \gamma_4^+ \mu_B^2 \mathcal{H}^2 \tau^{-2\nu}, \quad (3.1.46)$$

де значення  $f_{\text{ГГР}}^{(0)} = f_{\text{ПО}}^{(0)} + f^{(0)'}$  і  $\gamma_4^+$  подані в табл. 3.1.

Повний вираз для вільної енергії тривимірної моделі Ізінга у наближенні четвірної базисної густини міри без поправок до скейлінгу має вигляд

$$\begin{aligned} F(T) &= -kTN' [\gamma_0 + \gamma_1 \tau + \gamma_2 \tau^2 + \gamma_{30}^{(+)} \tau^{3\nu}] - \\ &\quad - \beta N \gamma_4^+ \mu_B^2 \mathcal{H}^2 \tau^{-2\nu}. \end{aligned} \quad (3.1.47)$$

Тут

$$\gamma_0 = s_0^3 \ln 2 + \gamma'_{01}, \quad \gamma_{30}^{(+)} = f_{\text{ГГР}}^{(0)} - \gamma_{10}^{(0)}. \quad (3.1.48)$$

Значення коефіцієнтів  $\gamma_0, \bar{\gamma}_{30}^+, g_0$  подані в табл. 3.2. Отриманий в (3.1.47) вираз для вільної енергії відповідає найпростішому нетривіальному наближенню, що використовує негаусовий розподіл флуктуацій, який містить у показнику експоненти другий і четвертий степінь колективної змінної  $\rho_{\mathbf{k}}$ . У наступних розділах будуть отримані вирази для термодинамічних функцій системи у вищих наближеннях. При цьому функціональна форма вільної енергії не змінюється. Іншими стають коефіцієнти виразу для вільної енергії системи.

Табл. 3.2. Коефіцієнти вільної енергії моделі  $\rho^4$  при температурах вищих від критичної ( $b = c$ )

$s$	$\gamma_0$	$\bar{\gamma}_{30}^+$	$g_0$
3	61.1628	0.4205	108.474
$s^*$	61.1775	0.6554	36.2596
4	61.1894	0.8533	57.3442
5	61.2229	1.4639	141.858

### 3.2. Поправки до скейлінгу

Запропонована у попередньому параграфі методика обчислення вільної енергії поблизу точки фазового переходу дає змогу отримати не тільки основні неаналітичні доданки вільної енергії, типу  $\tau^{3\nu}$ , але й обчислити поправки до скейлінгу, пропорційні до  $\tau^{3\nu+l\Delta}$ , де  $l$  – ціле число ( $l \geq 1$ ),  $\Delta$  – критичний показник. Ці поправки виникають завдяки впливу меншого власного значення  $E_2$  у розв'язках РС.

Розв'яжемо рівняння для  $m_\tau$  (3.1.7), використовуючи метод послідовних наближень. У вищих наближеннях воно має вигляд:

$$\tau c_{1\tau} E_1^{m_\tau^{(l)}+1} = f_0 [1 - c_{2\tau} \Phi_0 E_2^{m_\tau^{(l-1)}+1}]. \quad (3.2.1)$$

Тут за розв'язок  $m_\tau^{(0)}$  у нульовому наближенні беремо вираз (3.1.8). Для першого наближення ( $l = 1$ ) знаходимо

$$m_\tau^{(1)} = -\frac{\ln \tau}{\ln E_1} + m_0 - 1 + m_\Delta \tau^\Delta, \quad (3.2.2)$$

де величина  $\Delta$  задається співвідношенням

$$\Delta = -\frac{\ln E_2}{\ln E_1}. \quad (3.2.3)$$



Для  $m_{\Delta}$  маємо (див. табл. 2.11)

$$m_{\Delta} = \frac{m_2}{\ln E_1}, \quad m_2 = -c_{\Delta} \Phi_0, \quad (3.2.4)$$

$$c_{\Delta} = c_{2k} \left( \frac{c_{1k}}{f_0} \right)^{\Delta}, \quad \Phi_0 = R^{(0)} f_0^{-1} \varphi_0^{-1/2}.$$

У другому наближенні ( $l = 2$ ) рівняння (3.2.1) для  $m_{\tau}^{(2)}$  набуває вигляду

$$\tau c_{1\tau} E_1^{m_{\tau}^{(2)}+1} = f_0 (1 - c_{2\tau} \Phi_0 E_2^{m_{\tau}^{(1)}+1}).$$

Його розв'язком є вираз

$$m_{\tau}^{(2)} = -\frac{\ln \tau}{\ln E_1} + m_0 - 1 + m_{\Delta} \tau^{\Delta} + m_{2\Delta} \tau^{2\Delta}, \quad (3.2.5)$$

де

$$m_{2\Delta} = -\frac{m_2^2}{\ln E_1} \left( \Delta + \frac{1}{2} \right). \quad (3.2.6)$$

Значення  $m_{2\Delta}$  подано в табл. 3.3. Вищі наближення рівняння (3.1.7) приведуть до виникнення в (3.2.5) доданків, які пропорційні до  $\tau^{l\Delta}$  ( $l \geq 3$ ), однак через малість  $\tau$  вони не будуть прийматися до уваги в подальших обчисленнях.

Табл. 3.3. Значення  $m_{2\Delta}$  та коефіцієнтів виразу для  $s^{-3(m_{\tau}+1)}$  при  $s = 4$

$b$	$b_{min}$	$b_I$	$b_{II}$	$b_{III}$	$c$	$10c$
$m_{2\Delta}$	-0.2082	-0.2342	-0.2531	-0.2605	-0.3466	-0.3570
$\kappa_1^+$	1.2897	1.3679	1.4221	1.4426	1.6639	1.6889
$\kappa_2^+$	1.6976	1.9097	2.0639	2.1238	2.8256	2.9110
$\kappa_3^+$	0.2614	0.2196	0.1885	0.1763	0.0208	0.0000

Розрахунок виразу для вільної енергії проводитимемо за методикою, описаною у попередньому параграфі. При цьому множник  $s^{-3(m_\tau+1)}$ , що виникає при сумуванні за блочними структурами у виразах для парціальних вільних енергій у КР, представимо у вигляді

$$s^{-3(m_\tau+1)} = \left(\frac{c_{1k}}{f_0}\right)^{3\nu} \tau^{3\nu} (1 + \kappa_1^+ \tau^\Delta + \kappa_2^+ \tau^{2\Delta} + \kappa_3^+ \tau), \quad (3.2.7)$$

де  $\nu$  – критичний показник кореляційної довжини (2.8.2), а для коефіцієнтів  $\kappa_i^+$  справедливі вирази

$$\kappa_1^+ = -3\nu m_2, \quad \kappa_2^+ = 3\nu m_2^2 \left(\Delta + \frac{3\nu + 1}{2}\right), \quad \kappa_3^+ = 3\nu \frac{c_{1k1}}{c_{1k}}. \quad (3.2.8)$$

Їх значення для різних  $b$  подано в табл. 3.3.

Внесок у вільну енергію від ділянки КР має вигляд

$$F_{\text{КР}} = F'_{\text{КР}} + kTN'\tau^{3\nu} \left[ \sum_{l=1}^2 \gamma_+^{(l)} \tau^{l\Delta} + \gamma_+^{(3)} \tau \right]. \quad (3.2.9)$$

Тут роль  $F'_{\text{КР}}$  відіграє вираз (3.1.30), а для коефіцієнтів  $\gamma_+^{(l)}$  знаходимо

$$\begin{aligned} \gamma_+^{(1)} &= c_\nu^3 c_\Delta \bar{\gamma}_+^{(1)}, & c_\nu &= \left(\frac{c_{1k}}{f_0}\right)^\nu, \\ \gamma_+^{(2)} &= c_\nu^3 c_\Delta^2 \bar{\gamma}_+^{(2)}, & \gamma_+^{(3)} &= c_\nu^3 \frac{c_{1k1}}{c_{1k}} \bar{\gamma}_+^{(3)}. \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

Величини  $\bar{\gamma}_+^{(l)}$  не залежать від параметрів гамільтоніану. У випадку  $l = 1$  маємо:

$$\bar{\gamma}_+^{(1)} = \gamma_\Delta^+ - \Phi_0(\gamma_{11}^+ - 3\nu\gamma^+).$$

Вираз для  $\gamma^+$  приведений в (3.1.29), а для інших коефіцієнтів маємо:

$$\begin{aligned}\gamma_{\Delta}^+ &= \frac{d_2}{1 - E_1 s^{-3}} + \frac{d_5 f_0}{1 - E_1 E_2 s^{-3}} + \frac{d_6 f_0^2}{1 - E_1^2 E_2 s^{-3}}, \\ \gamma_{11}^+ &= \frac{d_1 f_0}{1 - E_1 s^{-3}} + \frac{2d_3 f_0^2}{1 - E_1^2 s^{-3}}.\end{aligned}\quad (3.2.11)$$

Для  $\bar{\gamma}_+^{(2)}$  та  $\bar{\gamma}_+^{(3)}$  отримуємо

$$\begin{aligned}\bar{\gamma}_+^{(2)} &= \gamma_{2\Delta}^+ + \Phi_0 (3\nu\gamma_{\Delta}^+ - \gamma_{21}^+) + \Phi_0^2 [\gamma_{22}^+ - \\ &\quad - (3\nu + \Delta)\gamma_{11}^+ + 3\nu \left( \Delta + \frac{3\nu + 1}{2} \right) \gamma^+], \\ \bar{\gamma}_+^{(3)} &= 3\nu\gamma^+, \end{aligned}\quad (3.2.12)$$

де

$$\begin{aligned}\gamma_{2\Delta}^+ &= \frac{d_4}{1 - E_2^2 s^{-3}} + \frac{d_7 f_0}{1 - E_1 E_2^2 s^{-3}} + \frac{d_8 f_0^2}{1 - E_1^2 E_1^2 s^{-3}}, \\ \gamma_{21}^+ &= -\frac{d_2 \Delta}{1 - E_2 s^{-3}} + \frac{d_5 f_0 (1 - \Delta)}{1 - E_1 E_2 s^{-3}} + \frac{2d_6 f_0^2 (1 - \frac{1}{2}\Delta)}{1 - E_1^2 E_2 s^{-3}}, \\ \gamma_{22}^+ &= \frac{d_3 f_0^2}{1 - E_1^2 s^{-3}}.\end{aligned}\quad (3.2.13)$$

Підкреслимо, що коефіцієнт  $\gamma^+$  не залежить ані від мікроскопічних параметрів гамільтоніану, ані від способу усереднення фур'є-образу потенціалу взаємодії. Значення  $\bar{\gamma}_+^{(1)}$  пропорційне до  $(\bar{q})^{-2}$  [326], а  $\bar{\gamma}_+^{(2)} \sim (\bar{q})^{-4}$  [327], де  $\bar{q}$  було означене нами в (2.6.1)–(2.6.3). Вказані вище величини залежать від параметра РГ  $s$ . Така залежність є наслідком обмеження при обчисленнях наближенням моделі  $\rho^4$ . При розгляді загальніших моделей типу  $\rho^6$ ,  $\rho^8$  вказана залежність значно зменшується (див. розділи 6, 8, 9). Тому, досліджуючи конкретну модель використовуватимемо ті значення параметра  $s$ , для яких обчислення здійснюються “найточніше”. Для моделі  $\rho^4$  це  $s \approx 4$ . При середньо арифметичному

Табл. 3.4. Коефіцієнти, що визначають внесок конфлуентних поправок у вільну енергію в області критичного режиму ( $b = c$ )

$s$	$\bar{\gamma}_+^{(1)}$	$\bar{\gamma}_+^{(2)}$	$\bar{\gamma}_+^{(3)}$
3	-3.7307	12.1346	1.0170
$s^*$	-3.2243	7.5458	0.8574
4	-2.9495	5.6976	0.6579
5	-2.4589	3.2737	-0.1495

усередненні  $\tilde{\Phi}(k)$  на кожному з інтервалів  $k \in (B_{n+1}, B_n]$  для коефіцієнтів  $\bar{\gamma}_+^{(i)}$  отримуємо значення, подані в табл. 3.4.

Перейдемо до розрахунку складових вільної енергії ГГР

$$F_{\text{ГГР}} = F_{\text{ПО}} + F' \quad (3.2.14)$$

з врахуванням поправок до скейлінгу. Спершу розглянемо доданок  $F_{\text{ПО}}$  – внесок у вільну енергію від ПО, тобто від  $m''$  блочних структур, які йдуть за блочною структурою з номером  $m_\tau$  (див. рис. 3.1). Відповідно до (В.6), при врахуванні поправок до скейлінгу у виразі для  $F_{\text{ПО}}$  потрібно прийняти до уваги співвідношення (3.2.5), а також виділити доданки, що враховують

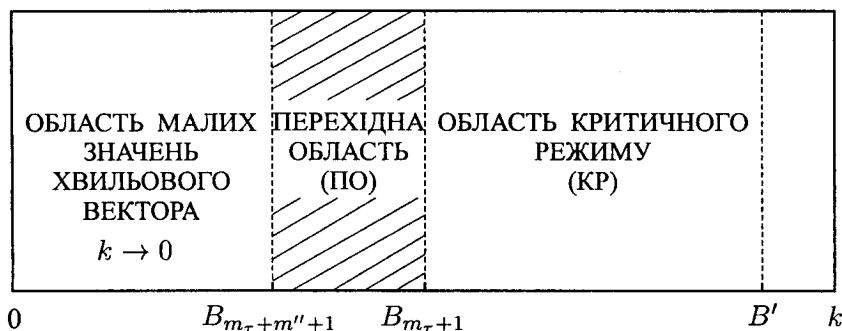


Рис. 3.1. Перехідна область

поправки до скейлінгу в аргументах  $x_{m_\tau+m}$ ,  $y_{m_\tau+m}$ . Маємо

$$x_{m_\tau+m} = x_{m_\tau+m}^{(0)} (1 + B_m^{(1)} \tau^\Delta + B_m^{(2)} \tau^{2\Delta}), \quad (3.2.15)$$

де  $x_{m_\tau+m}^{(0)}$  задане в (B.1),

$$B_m^{(1)} = c_\Delta \bar{B}_m^{(1)}, \quad B_m^{(2)} = c_\Delta^2 \bar{B}_m^{(2)}, \quad (3.2.16)$$

а для постійних  $\bar{B}_m^{(l)}$  знаходимо

$$\begin{aligned} \bar{B}_m^{(1)} &= E_2^{m-1} \varphi_0^{-1/2} \left[ \frac{R^{(0)} e_{1m}}{\bar{r}_{m_\tau+m}^{(0)} + \bar{q}} - \frac{1}{2} \frac{\varphi_0^{1/2} e_{2m}}{\bar{u}_{m_\tau+m}^{(0)}} \right], \\ \bar{B}_m^{(2)} &= E_2^{2(m-1)} \varphi_0^{-1/2} \frac{e_{2m}}{2\bar{u}_{m_\tau+m}^{(0)}} \left[ \frac{3}{4} \frac{\varphi_0^{1/2} e_{2m}}{\bar{u}_{m_\tau+m}^{(0)}} - \frac{R^{(0)} \Delta}{f_0 E_2^{m-1}} \right. \\ &\quad \left. - \frac{R^{(0)} e_{1m}}{\bar{r}_{m_\tau+m}^{(0)} + \bar{q}} + 2 \frac{e_{1m}}{e_{2m}} \frac{\bar{u}_{m_\tau+m}^{(0)} (R^{(0)})^2 \Delta}{(\bar{r}_{m_\tau+m}^{(0)} + \bar{q}) f_0 \varphi_0^{1/2} E_2^{m-1}} \right]. \end{aligned} \quad (3.2.17)$$

Тут введені такі позначення:

$$e_{1m} = 1 - (E_1/E_2)^{m-1}, \quad e_{2m} = 1 - R^{(0)} R_1^{(0)} (E_1/E_2)^{m-1}.$$

Аналогічні співвідношення знаходимо для проміжного аргумента в перехідній області

$$y_{m_\tau+m} = y_{m_\tau+m}^{(0)} (1 + r_\Delta^{(m)} \tau^\Delta + r_{2\Delta}^{(m)} \tau^{2\Delta}), \quad (3.2.18)$$

де  $y_{m_\tau+m}^{(0)}$  те ж, що і в (B.2), а для  $r_\Delta^{(m)}$  маємо

$$r_\Delta^{(m)} = x_{m_\tau+m}^{(0)} B_m^{(1)} r_1^{(m)}, \quad r_1^{(m)} = \partial_1^{(m)} - \frac{1}{2} q_1^{(m)}.$$

Доданки із  $r_1^{(m)}$  обчислюємо відповідно до співвідношень:

$$\begin{aligned} \partial_l^{(m)} &= [U(x_{m_\tau+m}^{(0)})]^{-1} \frac{\partial^l U(x)}{\partial x^l} \Big|_{x=x_{m_\tau+m}^{(0)}}, \\ q_l^{(m)} &= [\varphi(x_{m_\tau+m}^{(0)})]^{-1} \frac{\partial^l \varphi(x)}{\partial x^l} \Big|_{x=x_{m_\tau+m}^{(0)}}. \end{aligned} \quad (3.2.19)$$

Для  $r_{2\Delta}^{(m)}$  записуємо

$$\begin{aligned} r_{2\Delta}^{(m)} &= x_{m_\tau+m}^{(0)} B_m^{(2)} r_1^{(m)} + (x_{m_\tau+m}^{(0)} B_m^{(1)})^2 r_2^{(m)}, \\ r_2^{(m)} &= \frac{1}{2} \left[ \partial_2^{(m)} - \partial_1^{(m)} q_1^{(m)} + \frac{3}{4} (q_1^{(m)})^2 - \frac{1}{2} q_2^{(m)} \right]. \end{aligned} \quad (3.2.20)$$

Використовуючи отримані вище формули (3.2.15) та (3.2.18), для величини  $f_{m_\tau+m+1}$  із (В.6) знаходимо вираз

$$f_{m_\tau+m+1} = f_{m_\tau+m+1}^{(0)} + D_m^{(1)} \tau^\Delta + D_m^{(2)} \tau^{2\Delta}. \quad (3.2.21)$$

Тут  $f_{m_\tau+m+1}^{(0)}$  задано в (В.3),

$$\begin{aligned} D_m^{(1)} &= A_{m+1}^{(1)} B_m^{(1)} x_{m_\tau+m}^{(0)} + A_{m+1}^{(3)} B_{m+1}^{(1)} x_{m_\tau+m+1}^{(0)}, \\ D_m^{(2)} &= A_m^{(1)} B_m^{(2)} x_{m_\tau+m}^{(0)} + A_{m+1}^{(3)} B_{m+1}^{(2)} x_{m_\tau+m+1}^{(0)} + \\ &+ A_m^{(2)} (B_m^{(1)} x_{m_\tau+m}^{(0)})^2 + A_{m+1}^{(4)} (B_{m+1}^{(1)} x_{m_\tau+m+1}^{(0)})^2, \end{aligned} \quad (3.2.22)$$

де коефіцієнти  $B_m^{(l)}$  обчислюються згідно з (3.2.16). Величини  $A_m^{(k)}$  визначаються за допомогою співвідношень (3.1.25) при заміні в них  $r_l$  на  $r_l^{(m)}$ ,  $y^*$  на  $y_{m_\tau+m}^{(0)}$  (для  $A_m^{(1)}, A_m^{(2)}$ ), а також  $x^*$  на  $x_{m_\tau+m+1}^{(0)}$  (для  $A_{m+1}^{(3)}, A_{m+1}^{(4)}$ ).

Значення  $B_m^{(l)}, r_l^{(m)}$ , а також  $D_m^{(l)}$  подані в табл. 3.5 для декількох номерів блочних структур, які виникають після точки виходу системи із КР (при  $s = 4$  і випадку взаємодії найближчих сусідів  $b = b_I$ ). Зазначимо, що якщо величини  $x_{m_\tau+m}^{(0)}$  і  $y_{m_\tau+m}^{(0)}$  із (3.2.15), (3.2.18) не залежать від мікроскопічних параметрів задачі, то коефіцієнти  $B_m^{(1)}, r_\Delta^{(m)}$  та  $D_m^{(1)}$  пропорційні до неуніверсального множника

$$c_{2k} \left( \frac{c_{1k}}{f_0} \right)^\Delta (\bar{q})^{-2}. \quad (3.2.23)$$

Аналогічну залежність від квадрата множника (3.2.23) можна виділити у виразах для  $B_m^{(2)}, r_{2\Delta}^{(m)}, D_m^{(2)}$ .

Табл. 3.5. Зміни коефіцієнтів  $B_m^{(l)}, r_l^{(m)}$  та  $D_m^{(l)}$  з ростом  $m$  при  $b = b_I$  ( $s = 4$ )

$m$	$B_m^{(1)}$	$B_m^{(2)}$	$r_1^{(m)}$	$r_2^{(m)}$	$D_m^{(1)}$	$D_m^{(2)}$
0	-42.1087	-67.1878	0.2411	0.0465	0.1406	0.3616
1	0.4495	0.4557	0.2523	0.0278	0.2793	0.2234
2	-0.4620	-0.2446	0.1126	0.0006	-0.0068	-0.0007
3	-0.4027	-0.2161	0.0318	0.0447	-0.0297	4.1711
4	-0.3763	0.1986	0.0091	0.0042	-0.0032	3.6630

Внесок у вільну енергію від ПО, розрахований відповідно до (В.6), має вигляд

$$F_{\text{ПО}} = -kTN' \left( f_{\text{ПО}}^{(0)} \tau^{3\nu} + f_{\text{ПО}}^{(1)} \tau^{3\nu+\Delta} + f_{\text{ПО}}^{(2)} \tau^{3\nu+2\Delta} + f_{\text{ПО}}^{(3)} \tau^{3\nu+1} \right), \quad (3.2.24)$$

де вираз для  $f_{\text{ПО}}^{(0)}$  наведений в (В.8),

$$f_{\text{ПО}}^{(1)} = c_\nu^3 c_\Delta \bar{f}_{\text{ПО}}^{(1)}, \quad f_{\text{ПО}}^{(2)} = c_\nu^3 c_\Delta^2 \bar{f}_{\text{ПО}}^{(2)}, \quad f_{\text{ПО}}^{(3)} = c_\nu^3 \frac{c_{1k1}}{c_{1k}} \bar{f}_{\text{ПО}}^{(3)}. \quad (3.2.25)$$

Величини  $\bar{f}_{\text{ПО}}^{(l)}$  (див. табл. 3.6) незалежні від мікроскопічних параметрів і визначаються такими формулами:

$$\begin{aligned} \bar{f}_{\text{ПО}}^{(1)} &= \bar{f}_{\text{ПО}1} + 3\nu\Phi_0 \bar{f}_{\text{ПО}}^{(0)}, \\ \bar{f}_{\text{ПО}}^{(2)} &= \bar{f}_{\text{ПО}2} + 3\nu\Phi_0 \bar{f}_{\text{ПО}1} + \bar{f}_{\text{ПО}}^{(0)} 3\nu\Phi_0^2 \left( \Delta + \frac{3\nu+1}{2} \right), \\ \bar{f}_{\text{ПО}}^{(3)} &= 3\nu \bar{f}_{\text{ПО}}^{(0)}, \end{aligned} \quad (3.2.26)$$

Табл. 3.6. Коефіцієнти, що визначають внесок у вільну енергію системи від перехідної області

$s$	$\bar{f}_{\text{ПО}}^{(0)}$	$\bar{f}_{\text{ПО}}^{(1)}$	$\bar{f}_{\text{ПО}}^{(2)}$	$\bar{f}_{\text{ПО}}^{(3)}$
3	0.9933	-3.1621	11.0842	1.7638
$s^*$	1.1278	-2.6485	6.7348	2.0470
4	1.2115	-2.3784	5.0107	2.2253
5	1.3843	-1.9121	2.7908	2.5984

де для скорочення запису введені позначення

$$\bar{f}_{\text{ПО}1} = \sum_{m=0}^{m''} s^{-3m} D_m^{(1)} c_{\Delta}^{-1},$$

$$\bar{f}_{\text{ПО}2} = \sum_{m=0}^{m''} s^{-3m} D_m^{(2)} c_{\Delta}^{-2}.$$

Обчислимо тепер внесок до вільної енергії  $F'$  із (3.2.14) від доданків, які визначають поправки до скейлінгу. Вони виникають завдяки врахуванню довгохвильових флуктуацій відповідно до формул (3.1.37)–(3.1.40). Використовуючи методику розрахунку поправочних доданків у області КР і в ПО, отримуємо

$$F' = -kTN_{m'}(f_0 + f^{(1)}\tau^{\Delta} + f^{(2)}\tau^{2\Delta}) - \beta N\gamma_4^+ \mu_B^2 \mathcal{H}^2 \tau^{-2\nu} (1 + a_{\chi 1}^+ \tau^{\Delta} + a_{\chi 2}^+ \tau^{2\Delta} + a_{\chi 3}^+ \tau). \quad (3.2.27)$$

Тут величина  $f^{(0)}$  визначена в (3.1.41) а  $\gamma_4^+$  – в (3.1.42). Для решти коефіцієнтів  $f^{(l)}$  знаходимо

$$f^{(1)} = \frac{g_1}{2} \left( \frac{g_0}{g_0 + \bar{q}} - \frac{1 + g_0'}{1 + (g_0')^{-1}} \right) - g_0' g_1 \left[ 1 - \frac{3\sqrt{g_0'}}{2} \operatorname{arctg}(g_0')^{-\frac{1}{2}} \right],$$



$$f^{(2)} = \frac{1}{2} \left[ \frac{g_0 g_2}{g_0 + \bar{q}} - \frac{1}{2} \left( \frac{g_0 g_1}{g_0 + \bar{q}} \right)^2 - \frac{g_2 (1 + g'_0)}{1 + (g'_0)^{-1}} - \frac{3}{4} \frac{g'_0 g_1^2}{1 + (g'_0)^{-1}} \right] -$$

$$- g'_0 \left[ g_2 - \frac{3\sqrt{g'_0}}{2} (g_2 + \frac{1}{4} g_1^2) \operatorname{arctg}(g'_0)^{-\frac{1}{2}} \right], \quad (3.2.28)$$

де  $g'_0 = g_0 s^2$ ,

$$g_1 = \frac{p_0}{g_0} \left[ p_1 (\bar{r}_{p_r}^{(0)} + \bar{q}) + \bar{r}_{p_r}^{(1)} \right],$$

$$g_2 = \frac{p_0}{g_0} \left[ p_2 (\bar{r}_{p_r}^{(0)} + \bar{q}) + \bar{r}_{p_r}^{(1)} p_1 + \bar{r}_{p_r}^{(2)} \right]. \quad (3.2.29)$$

Тут  $p_0$  і  $\bar{r}_{p_r}^{(0)}$  визначені в (3.1.43),

$$p_1 = -\frac{3B_{m''+1}^{(1)}}{p_0 (x_{p_r}^{(0)})^2} \left( 1 - \frac{5}{(x_{p_r}^{(0)})^2} + \dots \right),$$

$$p_2 = \frac{9}{2p_0} \left( \frac{B_{m''+1}^{(1)}}{x_{p_r}^{(0)}} \right)^2 \left( 1 - \frac{25}{3(x_{p_r}^{(0)})^2} + \dots \right) -$$

$$- \frac{3}{p_0} \frac{B_{m''+1}^{(2)}}{(x_{p_r}^{(0)})^2} \left( 1 - \frac{5}{(x_{p_r}^{(0)})^2} + \dots \right),$$

$$\bar{r}_{p_r}^{(1)} = c_{\Delta} \bar{r}_{p_r}^{(1)}, \quad \bar{r}_{p_r}^{(1)} = E_2^{m''} \varphi_0^{-1/2} R^{(0)} \times$$

$$\times \left( 1 - \left( \frac{E_1}{E_2} \right)^{m''} \right), \quad \bar{r}_{p_r}^{(2)} = c_{\Delta}^2 \bar{r}_{p_r}^{(2)},$$

$$\bar{r}_{p_r}^{(2)} = E_2^{m''} (R^{(0)})^2 \frac{\Delta}{f_0 \varphi_0} \left[ 1 - \left( \frac{E_1}{E_2} \right)^{m''} \right]. \quad (3.2.30)$$

Для коефіцієнтів  $a_{\chi l}^+$  маємо:

$$a_{\chi 1}^+ = -g_1 + \kappa_4^+,$$

$$a_{\chi 2}^+ = -g_2 + g_1^2 - \kappa_4^+ g_1 + \kappa_5^+, \quad (3.2.31)$$

$$a_{\chi 3}^+ = -2\nu \frac{c_{1k_1}}{c_{1k}},$$

де

$$\kappa_4^+ = 2\nu m_2, \quad \kappa_5^+ = \nu m_2^2(2(\nu - \Delta) - 1). \quad (3.2.32)$$

Приймаючи до уваги (3.2.7), із (3.2.27), отримуємо

$$F' = -kTN'\tau^{3\nu} \left[ f^{(0)'} + f^{(1)'}\tau^\Delta + f^{(2)'}\tau^{2\Delta} + f^{(3)'}\tau \right] - \beta N\gamma_4^+ \mu_B^2 \mathcal{H}^2 \tau^{-2\nu} \left[ 1 + a_{\chi_1}^+ \tau^\Delta + a_{\chi_2}^+ \tau^{2\Delta} + a_{\chi_3}^+ \tau \right]. \quad (3.2.33)$$

Тут  $f^{(0)'}$  визначене в (3.1.45),

$$f^{(1)'} = c_\nu^3 c_\Delta \bar{f}^{(1)'}, \quad f^{(2)'} = c_\nu^3 c_\Delta^2 \bar{f}^{(2)'}, \quad f^{(3)'} = c_\nu^3 \frac{c_{1k1}}{c_{1k}} \bar{f}^{(3)'}. \quad (3.2.34)$$

Величини  $f^{(l)'}$  не залежать від мікроскопічних параметрів системи і мають вигляд:

$$\begin{aligned} \bar{f}^{(1)'} &= s^{-3(m''+1)} \left( \bar{f}^{(1)} + 3\nu\Phi_0 f^{(0)} \right), \\ \bar{f}^{(2)'} &= s^{-3(m''+1)} \left( \bar{f}^{(2)} + 3\nu\Phi_0 \bar{f}^{(1)} + 3\nu\Phi_0^2 f^{(0)} \left( \Delta + \frac{3\nu+1}{2} \right) \right), \\ \bar{f}^{(3)'} &= 3\nu \bar{f}^{(0)'}, \end{aligned} \quad (3.2.35)$$

де  $\bar{f}^{(1)}$  і  $\bar{f}^{(2)}$  визначаються із співвідношень:

$$f^{(1)} = c_\Delta \bar{f}^{(1)}, \quad f^{(2)} = c_\Delta^2 \bar{f}^{(2)}. \quad (3.2.36)$$

Сумарний внесок у вільну енергію від ПО (3.2.24) і області довгохвильових флуктуацій (3.2.33) є, згідно із (3.2.14), вільною енергією ГГР. У випадку  $\mathcal{H} = 0$  отримуємо

$$F_{\text{ГГР}} = -kTN'\tau^{3\nu} \left[ f_{\text{ГГР}}^{(0)} + f_{\text{ГГР}}^{(1)}\tau^\Delta + f_{\text{ГГР}}^{(2)}\tau^{2\Delta} + f_{\text{ГГР}}^{(3)}\tau \right]. \quad (3.2.37)$$

Вираз для  $f_{\Gamma\Gamma P}^{(0)}$  приведений в § 3.1. Для величин  $f_{\Gamma\Gamma P}^{(l)}$  з  $l \geq 1$  маємо:

$$f_{\Gamma\Gamma P}^{(l)} = f_{\text{ПО}}^{(l)} + f^{(l)'}$$

Величини  $f_{\Gamma\Gamma P}^{(l)}$  неуніверсальні. Однак запропонований вище метод розрахунку  $F_{\Gamma\Gamma P}$  дає змогу виділити неуніверсальні множники у  $f_{\Gamma\Gamma P}^{(l)}$  згідно співвідношень:

$$\begin{aligned} f_{\Gamma\Gamma P}^{(0)} &= c_{\nu}^3 \bar{f}_{\Gamma\Gamma P}^{(0)}, & f_{\Gamma\Gamma P}^{(1)} &= c_{\nu}^3 c_{\Delta} \bar{f}_{\Gamma\Gamma P}^{(1)}, \\ f_{\Gamma\Gamma P}^{(2)} &= c_{\nu}^3 c_{\Delta}^2 \bar{f}_{\Gamma\Gamma P}^{(2)}, & f_{\Gamma\Gamma P}^{(3)} &= c_{\nu}^3 \frac{c_{1k1}}{c_{1k}} \bar{f}_{\Gamma\Gamma P}^{(3)}. \end{aligned} \quad (3.2.38)$$

Коефіцієнти

$$\bar{f}_{\Gamma\Gamma P}^{(l)} = \bar{f}_{\text{ПО}}^{(l)} + \bar{f}^{(l)'}, \quad l = 0, 1, 2, 3 \quad (3.2.39)$$

універсальні і, внаслідок малості величини  $\bar{f}^{(l)'}$ , їхні значення співпадають з даними табл. 3.6.

Повний вираз для вільної енергії тривимірної спінової моделі у наближенні четвірного базисного розподілу при  $T > T_c$  запишемо у вигляді

$$\begin{aligned} F &= -kTN' [\gamma_0 + \gamma_1\tau + \gamma_2\tau^2 + \gamma_{30}^+\tau^{3\nu} + \\ &+ \gamma_{31}^+\tau^{3\nu+\Delta} + \gamma_{32}^+\tau^{3\nu+2\Delta} + \gamma_{33}^+\tau^{3\nu+1}] - \\ &- \beta N \gamma_4^+ \mu_B^2 \mathcal{H}^2 \tau^{-2\nu} (1 + a_{\chi_1}^+ \tau^{\Delta} + a_{\chi_2}^+ \tau^{2\Delta} + a_{\chi_3}^+ \tau). \end{aligned} \quad (3.2.40)$$

Тут  $N' = Ns_0^{-3}$  ( $s_0 = \pi\sqrt{2}b/c$ ), коефіцієнт  $\gamma_0$  визначений в (3.1.48), а  $\gamma_1, \gamma_2$  у (3.1.31). Неаналітична частина вільної енергії характеризується коефіцієнтами  $\gamma_{3l}^+$  ( $l = 0, 1, 2, 3$ ). Вираз для  $\gamma_{30}^{(+)}$  приведений в (3.1.48), а для решти коефіцієнтів маємо

$$\gamma_{3l}^+ = f_{\Gamma\Gamma P}^{(l)} - \gamma_+^{(l)}, \quad (3.2.41)$$

де  $\gamma_+^{(l)}$  і  $f_{\Gamma\Gamma P}^{(l)}$  задані в (3.2.10), (3.2.38). Значення коефіцієнтів  $a_{\chi}^+$  подані у табл. 3.7.

Табл. 3.7. Коефіцієнти, що визначають частину вільної енергії системи, пов'язану із полем, а також основна критична амплітуда  $\Gamma^+$  сприйнятливості системи ( $b = c$ )

$s$	$a_{\chi_1}^+$	$a_{\chi_2}^+$	$a_{\chi_3}^+$	$\Gamma^+$
3	-0.2029	-0.1994	-0.0155	2.8315
$s^*$	-0.1954	-0.1603	-0.0145	2.6645
4	-0.1961	-0.1473	-0.0139	3.1768
5	-0.1922	-0.1215	-0.0125	4.7017

Доданки, пропорційні до цілих степенів  $\tau$  в (3.2.40), виникають лише за рахунок врахування негаусових флуктуацій. Члени, пропорційні до  $\tau^{3\nu}$ , а також  $\tau^{3\nu+l\Delta}$  ( $l = 1, 2, \dots$ ) з'являються від врахування як негаусових, так і граничних гаусових флуктуацій. Поправки до скейлінгу виникають завдяки врахуванню у розв'язках РГ меншого власного значення  $E_2$ .

Зазначимо, що обчислення вільної енергії поблизу  $T_c$  з врахуванням поправок до скейлінгу при використанні вищих моделей типу  $\rho^6, \rho^8$  тощо не приводить до яких-небудь якісних змін. Незважаючи на виникнення додаткових поправок до скейлінгу

$$\Delta_1 = -\frac{\ln E_3}{\ln E_1}, \quad \Delta_2 = -\frac{\ln E_4}{\ln E_1}, \quad (3.2.42)$$

і т.д. за рахунок врахування менших власних значень  $E_l$  ( $l = 3, 4, \dots$ ) матриці перетворення РГ, вони стають несуттєвими (див. розділ 6).

### 3.3. Вільна енергія, ентропія та інші термодинамічні функції моделі

Головне завдання статистичної теорії фазових переходів полягає в одержанні явних виразів для вільної енергії та інших термодинамічних функцій системи поблизу ТФП. У попередніх параграфах запропонована методика розрахунку вільної енергії моделі в наближенні четвірного базисного розподілу з врахуванням

поправок до скейлінгу. Вільна енергія моделі Ізінга обчислена в наближенні параболічної апроксимації фур'є-образу експонентно спадного потенціалу взаємодії між частинками, має вигляд (3.2.40).

Редукована кількість частинок  $N'$  пропорційна до повної кількості частинок  $N$  і виникає внаслідок прийнятої нами апроксимації фур'є-образу потенціалу взаємодії  $\tilde{\Phi}(k)$ . Для певних значень параметрів потенціалу, а саме у випадку  $b = b_{min}$ , де  $b_{min} = \frac{c}{\pi\sqrt{2}}$ , маємо  $N' = N$ . Для випадку  $b = b_I$ , що відповідає взаємодії найближчих сусідів, маємо  $N' = N(\sqrt{6}/\pi)^3$ .

У точці фазового переходу ( $\mathcal{H} = 0$ ,  $\tau = 0$ ) вільна енергія (3.2.40) задається виразом

$$F(T_c) = -kT_c N \left( \pi\sqrt{2}\frac{b}{c} \right)^{-3} \gamma_0.$$

Сингулярна частина вільної енергії при вищих від  $T_c$  температурах та при  $\mathcal{H} = 0$  має вигляд

$$F_c = -kTN \left( \pi\frac{\sqrt{2}b}{c} \right)^{-3} \tau^{3\nu} (\gamma_{30}^+ + \gamma_{31}^+ \tau^\Delta + \gamma_{32}^+ \tau^{2\Delta} + \gamma_{33}^+ \tau). \quad (3.3.1)$$

Пропорційні до  $\tau^{3\nu}$  доданки пов'язані з врахуванням більшого власного значення матриці РГ перетворення (2.6.16). Dodанки пропорційні до  $\tau^{3\nu+\Delta}$  виникають лише за врахування внесків до вільної енергії від меншого власного значення  $E_2$ . Ці доданки дають малий внесок у вільну енергію системи. Проте, вони суттєві у виразі для теплоємності та деяких інших характеристик системи поблизу  $T_c$ .

Знайдемо ентропію системи прямим диференціюванням вільної енергії (3.2.40) за температурою. Відповідно до співвідношення  $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$ , знаходимо

$$S = kN' [S_0 + S_1\tau + S_{30}\tau^{1-\alpha} + S_{31}\tau^{2-\alpha} + S_{40}\tau^{1-\alpha+\Delta} + S_{41}\tau^{1-\alpha+2\Delta}], \quad (3.3.2)$$

де

$$\begin{aligned}
 S_0 &= \gamma_0 + \gamma_1, & S_1 &= 2(\gamma_1 + \gamma_2), \\
 S_{30} &= 3\nu\gamma_{30}^+, & S_{31} &= \left(1 + 3\nu \frac{c_{1k1}}{c_{1k}}\right) (3\nu + 1)\gamma_{30}^+, \\
 S_{40} &= (3\nu + \Delta)\gamma_{31}^+, & S_{41} &= (3\nu + 2\Delta)\gamma_{32}^+.
 \end{aligned} \tag{3.3.3}$$

Приведені вище коефіцієнти ентропії суттєво залежать від мікроскопічних параметрів системи. Ця залежність буде детальніше розглянута в наступному параграфі. Тут нас цікавитиме температурна залежність ентропії. Припустимо для визначеності  $b = c$ . У цьому випадку коефіцієнти ентропії приймають значення, наведені в табл. 3.8. На рис. 3.2 зображена температурна залежність ентропії, що відповідає виразу (3.3.2). При цьому враховано, що  $N' = N(\pi\sqrt{2b/c})^{-3}$ . Для порівняння на цьому ж рисунку приведені внески, що відповідають ділянкам КР (крива 2) та ГГР (крива 3). Зауважимо, що внесок у загальний вираз для ентропії від ділянки КР призводить до її збільшення із зниженням температури. Цей незрозумілий на перший погляд факт пояснюється виникненням у системі поблизу точки фазового переходу додаткового типу симетрії – симетрії ренормалізаційної групи.

Внесок від ділянки ГГР в ентропію визначальний і має характер температурно спадної функції (крива 3). Особливістю кривої 3 порівняно з кривою 2 є велика крутизна, яка забезпечує

Табл. 3.8. Коефіцієнти ентропії для деяких проміжних значень параметра  $\Gamma$

$S$	$S_0$	$S_1$	$S_{30}$	$S_{31}$	$S_{40}$	$S_{41}$
3	60.4875	-1.4029	2.7306	4.3675	-3.2044	-4.9092
$s^*$	60.4982	-1.5464	2.6647	4.2228	-2.4247	-3.3912
4	60.4995	-1.5630	2.6111	4.1165	-2.0108	-2.6726
5	60.4846	-1.4458	2.4927	3.8921	-1.3182	-1.5883

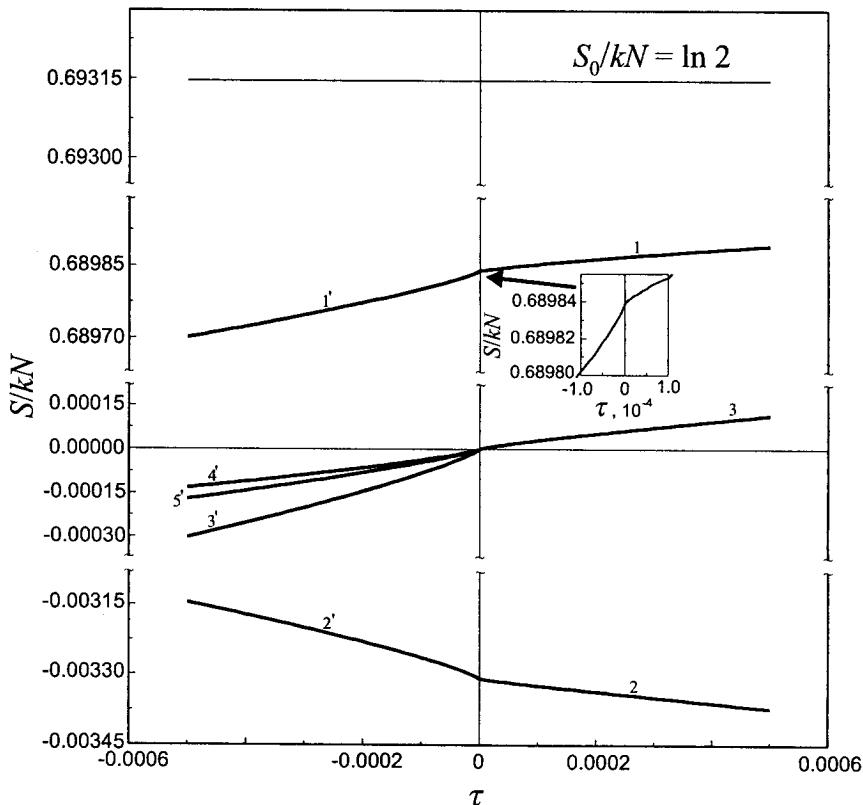


Рис. 3.2. Температурна залежність ентропії системи в рамках моделі  $\rho^4$  при  $s = s^*$ . Випадок  $T > T_c$ : крива 1 відповідає повному виразу для ентропії, 2 – внескові від ділянки критичного режиму, 3 – внескові від ділянки граничного гаусового режиму. Випадок  $T < T_c$ : крива 1' – повна ентропія системи, 2' – внесок від ділянки критичного режиму, 3' – ділянки інверсного гаусового режиму, 4' – довгохвильових фаз флуктуацій (після виходу із критичного режиму), 5' – від впорядкування системи.

спадання повної ентропії (крива 1), із зменшенням температури. Отже, істинний хід температурної залежності ентропії забезпечується внеском довгохвильових флуктуацій, а її позитивність – доданком  $F_0 = -kTN \ln 2$ . У зв'язку з цим справедливе наступне твердження: **Розрахунок ентропії системи поблизу точки фазового переходу не можна виконувати лише методом РГ**. Нефізичні результати, які будуть наслідком такого розрахунку, свідчать лише про те, що необхідно додатково врахувати довгохвильові фази флуктуацій густини спінового моменту (ділянка ГТР). Як буде видно з подальших розрахунків, це твердження загальне і справедливе не лише для розрахунку ентропії, але й інших термодинамічних величин.

Внутрішню енергію  $U = F + TS$  поблизу  $T_c$  можна записати у вигляді:

$$U = kTN' [U_0 + U_1\tau + U_{30}\tau^{1-\alpha} + U_{31}\tau^{2-\alpha} + U_{40}\tau^{1-\alpha+\Delta} + U_{41}\tau^{1-\alpha+2\Delta}]. \quad (3.3.4)$$

Тут введені позначення:

$$\begin{aligned} U_0 &= \gamma_1, & U_1 &= \gamma_1 + 2\gamma_2, \\ U_{30} &= S_{30}, & U_{40} &= S_{40}, \\ U_{31} &= \left(1 + (3\nu + 1) \frac{c_{1k1}}{c_{1k}}\right) 3\nu\gamma_{30}^+, & U_{41} &= S_{41}. \end{aligned} \quad (3.3.5)$$

У табл. 3.9 подані коефіцієнти із (3.3.5), які не ввійшли до табл. 3.8.

Відома структура виразів для коефіцієнтів внутрішньої енергії, а також їхня залежність від мікроскопічних параметрів системи.

Теплоємність моделі  $C = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2}$  поблизу точки фазового переходу запишемо у вигляді:

$$C = kN' [C_0 + C_{30}\tau^{-\alpha} + C_{31}\tau^{1-\alpha} + C_{40}\tau^{\Delta-\alpha} + C_{41}\tau^{2\Delta-\alpha}]. \quad (3.3.6)$$



Табл. 3.9. Коефіцієнти внутрішньої енергії системи (див. також табл. 3.8)

$s$	$U_0$	$U_1$	$U_{31}$
3	-0.6753	-0.7276	2.8298
$s^*$	-0.6793	-0.8671	2.7547
4	-0.6899	-0.8731	2.6950
5	-0.7382	-0.7076	2.5642

Для коефіцієнтів цієї термодинамічної функції маємо вирази:

$$\begin{aligned}
 C_0 &= S_1, & C_{30} &= c_\nu^3 3\nu(3\nu - 1) \bar{\gamma}_{30}^+, \\
 C_{31} &= 9c_\nu^3 \nu^2 \left[ 2 + (3\nu + 1) \frac{c_{1k1}}{c_{1k}} \right] \bar{\gamma}_{30}^+, & & (3.3.7) \\
 C_{40} &= c_\nu^3 c_\Delta (3\nu + \Delta - 1)(3\nu + \Delta) \bar{\gamma}_{31}^+, \\
 C_{41} &= c_\nu^3 c_\Delta^2 (3\nu + 2\Delta - 1)(3\nu + 2\Delta) \bar{\gamma}_{32}^+.
 \end{aligned}$$

У загальному випадку вони залежать як від мікроскопічних параметрів системи, так і від універсальних характеристик моделі. У випадку  $b = c$  їхні значення подані в табл. 3.10. Поведінка

Табл. 3.10. Коефіцієнти теплоємності виразу (3.3.6) (див. також табл. 3.8)

$s$	$C_{30}$	$C_{31}$	$C_{40}$	$C_{41}$
3	2.1182	9.8737	-4.0080	-8.4729
$s^*$	2.1719	9.8365	-3.0989	-5.9042
4	2.1852	9.7467	-2.6002	-4.6752
5	2.1863	9.4922	-1.7418	-2.8042

теплоємності поблизу  $T_c$  визначається її сингулярною частиною, а саме

$$C_s = kN' C_{30} \tau^{-\alpha}, \quad (3.3.8)$$

де  $\alpha$  – критичний показник теплоємності

$$\alpha = 2 - 3\nu. \quad (3.3.9)$$

Відповідно до (3.3.7), критична амплітуда теплоємності  $C_{30}$  не універсальна величина, оскільки до її складу входять такі величини як:  $c$  – постійна простої кубічної ґратки та  $b$  – радіус дії потенціалу. Проте, легко бачити, що до складу критичної амплітуди множителем входить універсальна величина  $\bar{\gamma}_{30}^+$ . Вона складається з двох доданків (див. (3.1.48)). Один з них відповідає ділянці КР і є результатом врахування внеску негаусових флуктуацій (довжина хвилі яких не перевищує кореляційної довжини). Другий доданок відповідає ділянці ГР і зумовлена внеском граничних гаусових флуктуацій. При цьому додатний знак коефіцієнта  $C_{30}$  забезпечується саме граничними гаусовими флуктуаціями. Цей висновок підтверджується також температурною залежністю теплоємності, яка зображена на рис. 3.3 при  $s = s^*$  та  $b = c$ . Як бачимо, внесок до теплоємності системи від ділянки КР (крива 2), який відповідає застосуванню РГ співвідношень, строго від'ємний. Додатність теплоємності (крива 1) забезпечується внеском від довгохвильових фаз флуктуацій густини спінового моменту (крива 3).

Використовуючи вираз для вільної енергії системи (3.2.40), можемо обчислити й інші характеристики системи. Зокрема, сприйнятливість системи на одну частинку  $\chi = -\frac{1}{N} \frac{\partial^2 F}{\partial \mathcal{H}^2}$  поблизу точки фазового переходу при  $T > T_c$  має вигляд:

$$\chi = \frac{\mu_B^2}{\Phi(0)} \Gamma^+ \tau^{-\gamma} (1 + a_{\chi_1}^+ \tau^\Delta + a_{\chi_2}^+ \tau^{2\Delta} + a_{\chi_3}^+ \tau). \quad (3.3.10)$$

Тут  $\gamma$  – критичний показник, який у цьому наближенні знаходимо із рівності

$$\gamma = 2\nu. \quad (3.3.11)$$

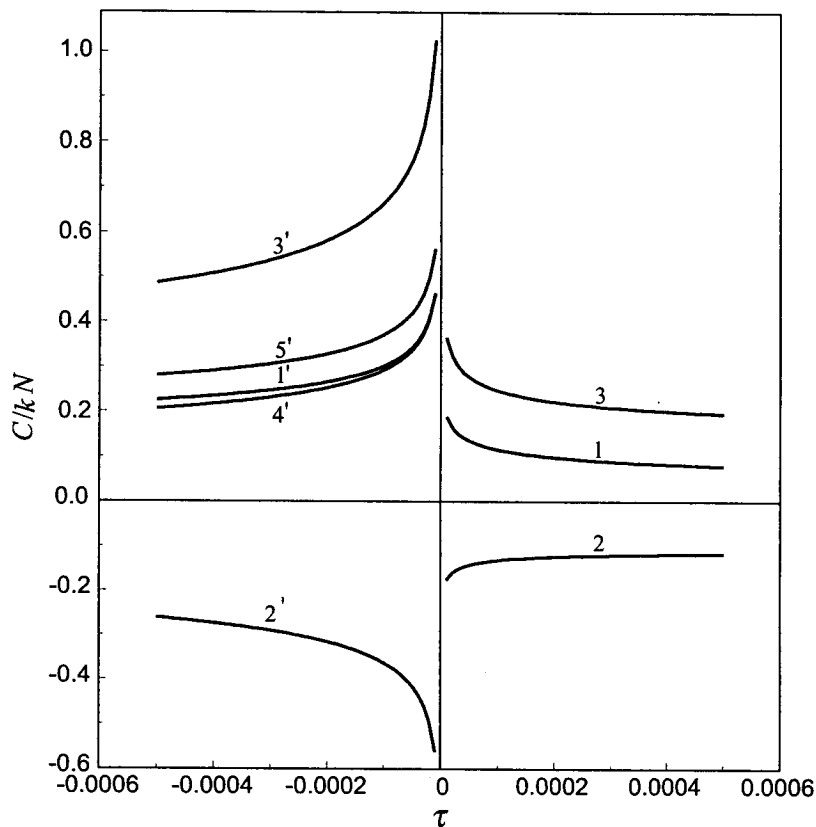


Рис. 3.3. Повна теплоємність системи поблизу  $T_c$  і різні внески до неї. Позначення такі ж, як і на рис. 3.2.

Величина (див. табл. 3.7)

$$\Gamma^+ = 2\beta\tilde{\Phi}(0)\gamma_4^+ \quad (3.3.12)$$

є критичною амплітудою, а вирази для  $\gamma_4^+$  та  $a_{\chi_l}^+$  наведені в (3.1.42) та (3.2.31).

Отже, запропоновано метод розрахунку термодинамічних функцій тривимірної системи поблизу точки фазового переходу.

За його допомогою одержані явні вирази для вільної і внутрішньої енергій, ентропії та теплоємності моделі при  $T > T_c$ . Знайдені критичні показники  $\nu, \alpha, \gamma$ , які характеризують кореляційну довжину, теплоємність та сприйнятливість поблизу точки фазового переходу. Розраховано критичний показник  $\Delta$ , який характеризує поправку до скейлінгу. Вперше став можливим розрахунок явних виразів для коефіцієнтів термодинамічних функцій та дослідження характеру їх залежності від мікроскопічних параметрів тривимірних систем в околі фазового переходу.

### 3.4. Залежність термодинамічних функцій від мікроскопічних параметрів гамільтоніану

Вирази для вільної енергії та інших термодинамічних функцій, крім явної температурної залежності, містять також залежність від параметрів потенціалу та постійної ґратки  $c$ . Для дослідження характеру залежності термодинамічних функцій від мікроскопічних параметрів системи скористаємося виразом для вільної енергії (3.2.40). Її аналітична частина формується лише внеском негаусових фаз флуктуацій спінового моменту і визначається коефіцієнтами  $\gamma_l$  ( $l = 0, 1, 2$ ). Відповідно до (3.1.31), (3.1.48) вони залежать від відношення радіуса дії потенціалу  $b$  до постійної ґратки  $c$ . У табл. 3.1 їх подано для випадку  $b = c$ . Для інших величин  $b$ , зокрема тих, які відповідають взаємодії найближчих сусідів  $b = b_I$ , перших і других сусідів  $b = b_{II}$ , перших, других і третіх сусідів  $b = b_{III}$ , коефіцієнти  $\gamma_l$  при  $s = 4$  подані в табл. 3.11.

Коефіцієнти  $\gamma_l$  – складні функції  $b/c$  і в них важко виділити яку-небудь універсальну частину. На відміну від них, у виразах для коефіцієнтів  $\gamma_{3l}^+$  вдається виділити універсальний множник. Відповідно до (3.1.31), (3.1.48), для коефіцієнта при  $\tau^{3\nu}$  маємо співвідношення:

$$\gamma_{30}^+ = c_\nu^3 \bar{\gamma}_{30}^+, \quad \bar{\gamma}_{30}^+ = \bar{f}_{\Gamma\Gamma P}^{(0)} - \gamma^+. \quad (3.4.1)$$

Величина  $c_\nu$  (див. (3.2.10)) залежить від мікроскопічних параметрів системи. Для певних характерних значень радіуса дії по-

Табл. 3.11. Коефіцієнти аналітичної частини вільної енергії (3.2.40) для різних значень радіуса дії потенціалу  $b$ 

$b$	$b_{min}$	$b_I$	$b_{II}$	$b_{III}$	$c$	$10c$
$\gamma_0$	1.1198	1.8736	2.7488	3.2000	61.1894	60788.7
$\gamma_1$	-0.6530	-0.6542	-0.6561	-0.6570	-0.6899	-0.6997
$\gamma_2$	-0.8114	-0.6778	-0.5832	-0.5469	-0.0916	-0.0193

тенціалу  $b$  вона подана в табл. 3.12. Універсальна частина коефіцієнта  $\bar{f}_{\Gamma\Gamma\rho}^+$  складається з двох доданків. Перший з них

$$\bar{f}_{\Gamma\Gamma\rho}^{(0)} = \bar{f}_{\text{ПО}}^{(0)} + \bar{f}^{(0)'} \quad (3.4.2)$$

відповідає внескові довгохвильових фаз флуктуацій (див. (В.8), 3.1.45)), другий –  $\gamma^+$  із (3.1.29) – від короткохвильових фаз флуктуацій.

Табл. 3.12. Значення неуніверсальних множників і їхніх комбінацій, що входять у коефіцієнти неаналітичної частини вільної енергії (3.2.40) ( $s = 4$ )

$b$	$b_{min}$	$b_I$	$b_{II}$	$b_{III}$	$c$	$10c$
$c_\nu$	1.2932	1.2726	1.2579	1.2522	1.1854	1.1772
$c_\Delta$	-0.7144	-0.7577	-0.7877	-0.7991	-0.9217	-0.9355
$\frac{c_{1k1}}{c_{1k}^3}$	0.1423	0.1196	0.1026	0.0960	0.0113	0.0000
$c_\nu^3$	2.1626	2.0612	1.9904	1.9635	1.6658	1.6314
$c_\Delta c_\nu^3$	-1.5451	-1.5619	-1.5679	-1.5690	-1.5354	-1.5262
$c_\Delta^2 c_\nu^3$	1.1038	1.1835	1.2351	1.2538	1.4152	1.4278
$\frac{c_{1k1}}{c_{1k}^3} c_\nu^3$	0.3077	0.2465	0.2043	0.1884	0.0189	0.0000

Для  $\gamma_{31}^+$  та  $\gamma_{32}^+$  знаходимо

$$\gamma_{3l}^+ = c_\nu^3 c_\Delta^l \bar{\gamma}_{3l}^+, \quad (3.4.3)$$

де

$$\bar{\gamma}_{3l}^+ = \bar{f}_{\Gamma\Gamma\Gamma}^{(l)} - \bar{\gamma}_+^{(l)}, \quad l = 1, 2. \quad (3.4.4)$$

Величини  $\bar{f}_{\Gamma\Gamma\Gamma}^{(l)}$  приведені в (3.2.39), а  $\bar{\gamma}_+^{(l)}$  – в (3.2.10)–(3.2.13).

Для  $\gamma_{33}^+$  маємо

$$\gamma_{33}^+ = c_\nu^3 \frac{c_{1k1}}{c_{1k}} \bar{\gamma}_{33}^+, \quad (3.4.5)$$

де, як і в (3.4.4),

$$\bar{\gamma}_{33} = \bar{f}_{\Gamma\Gamma\Gamma}^{(3)} - \bar{\gamma}_+^{(3)}. \quad (3.4.6)$$

Тут  $\bar{f}_{\Gamma\Gamma\Gamma}^{(3)}$  знаходиться відповідно до (3.2.39), а  $\bar{\gamma}_+^{(3)}$  задано в (3.2.12). При цьому виконується рівність

$$\bar{\gamma}_{33}^+ = 3\nu \bar{\gamma}_{30}^+. \quad (3.4.7)$$

Отже, залежність вільної енергії моделі від мікроскопічних параметрів гамільтоніану визначається коефіцієнтами  $\gamma_l$  та  $\gamma_{3l}^+$ . Коефіцієнти  $\gamma_{30}^+$ ,  $\gamma_{31}^+$ ,  $\gamma_{32}^+$ ,  $\gamma_{33}^+$  містять неуніверсальні множники

$$c_\nu = \left( \frac{c_{1k}}{f_0} \right)^\nu, \quad c_\Delta = c_{2k} \left( \frac{c_{1k}}{f_0} \right)^\Delta, \quad \frac{c_{1k1}}{c_{1k}}, \quad (3.4.8)$$

які і визначають залежність від  $b/c$ . У табл. 3.12 подані значення цих множників та їхніх комбінацій для різних значень радіуса дії потенціалу  $b$ .

Вирази для ентропії (3.3.2) та внутрішньої енергії також залежать від мікроскопічних параметрів системи. Коефіцієнти цих виразів при  $s = 4$  подані в табл.3.13.

Табл. 3.13. Залежність коефіцієнтів внутрішньої енергії від мікроскопічних параметрів

$b$	$b_{min}$	$b_I$	$b_{II}$	$b_{III}$	$c$	$10c$
$S_0$	0.4668	1.2194	2.0928	2.5429	60.4995	60788.0
$S_1$	-2.9287	-2.6640	-2.4786	-2.4078	-1.5630	-1.4382
$S_{30}$	3.3897	3.2309	3.1198	3.0776	2.6111	2.5571
$S_{31}$	6.6033	6.0856	5.7267	5.5909	4.1165	3.9492
$S_{40}$	-2.0234	-2.0455	-2.0534	-2.0548	-2.0108	-1.9988
$S_{41}$	-2.0846	-2.2350	-2.3325	-2.3677	-2.6726	-2.6964
$U_0$	-0.6530	-0.6542	-0.6561	-0.6570	-0.6899	-0.6997
$U_1$	-2.2758	-2.0098	-1.8226	-1.7508	-0.8731	-0.7384
$U_{31}$	4.7580	4.3268	4.0283	3.9154	2.6950	2.5572

Важливе місце серед термодинамічних характеристик фазового переходу другого роду займає теплоємність. Запишемо одержану нами формулу (3.3.6) у звичнішому вигляді

$$\frac{C}{kN'} = B^+ + \frac{A^+}{\alpha} \tau^{-\alpha} [1 + \alpha a_{c1}^+ \tau^\Delta + \alpha a_{c2}^+ \tau^{2\Delta} + \alpha a_{c3}^+ \tau]. \quad (3.4.9)$$

Тут

$$\begin{aligned} B^+ &= C_0, & A^+ &= \alpha C_{30}, & a_{c1}^+ &= \frac{C_{40}}{\alpha C_{30}}, \\ a_{c2}^+ &= \frac{C_{41}}{\alpha C_{30}}, & a_{c3}^+ &= \frac{C_{31}}{\alpha C_{30}}. \end{aligned} \quad (3.4.10)$$

Кожен з цих коефіцієнтів має універсальну частину, однак загалом залежить від відношення  $b/c$ . У табл.3.14 подані величини  $B^+$ ,  $A^+$  та  $a_{cl}^+$  для деяких радіусів дії потенціалу взаємодії  $b$  при  $s = 4$ .

Зауважимо, що поправки до скейлінгу дають суттєвий внесок до термодинамічних функцій у критичній області. Виконаємо порівняння внесків поправок до скейлінгу теплоємності

Табл. 3.14. Залежність коефіцієнтів теплоємності із (3.4.9) від радіуса дії експонентно спадного потенціалу

$b$	$b_{min}$	$b_I$	$b_{II}$	$b_{III}$	$c$	$10c$
$B^+$	-2.9287	-2.6640	-2.4786	-2.4078	-1.5630	-1.4382
$A^+$	0.4627	0.4411	0.4259	0.4201	0.3564	0.3491
$a_{c1}^+$	-5.6543	-5.9970	-6.2344	-6.3242	-7.2947	-7.4041
$a_{c2}^+$	-7.8803	-8.8645	-9.5803	-9.8583	-13.1161	-13.5124
$a_{c3}^+$	32.3425	31.4755	30.8295	30.5744	27.3439	26.9118

(3.3.6) з основним внеском [327]. У температурному діапазоні від  $|\tau| = 0.5 \times 10^{-4}$  до  $|\tau| = 5 \times 10^{-3}$  у табл. 3.15 подано внески окремих доданків теплоємності (3.3.6) при  $s = 3$  та  $b = c$ .

Як бачимо з результатів розрахунку, зі зростанням відхилення температури від  $T_c$ , тобто з ростом  $|\tau|$ , внесок від основного доданка, пропорційного  $|\tau|^{-\alpha}$ , зменшується, а поправочні доданки теплоємності, пропорційні до  $|\tau|^{\Delta}$  і  $|\tau|^{2\Delta}$ , збільшуються за модулем. При  $\tau = 5 \times 10^{-3}$  внесок у теплоємність системи при  $T > T_c$  від доданка, що визначає першу конфлуентну поправку, складає 15% від основного доданка, а від доданка, що визначає другу поправку – 3%. Внесок від доданка, пропорційного  $\tau^{1-\alpha}$ , за порядком величини такий самий, як і від доданка, пропорційного  $\tau^{2\Delta-\alpha}$ .

На закінчення цього параграфу розглянемо вираз для сприйнятливості системи (3.3.10) з точки зору залежності від мікроскопічних параметрів. Виділяючи її, одержуємо такі співвідношення для коефіцієнтів цього виразу (див. (3.2.31), (3.3.12)):

$$\begin{aligned}
 \Gamma^+ &= 2c_\nu^{-2} \bar{\gamma}_4^+, & \bar{\gamma}_4^+ &= s^{2m''} (2g_0)^{-1}, \\
 a_{\chi 1}^+ &= c_\Delta \bar{a}_{\chi 1}^+, & \bar{a}_{\chi 1}^+ &= -\bar{g}_1 - 2\nu \Phi_0, & a_{\chi 2}^+ &= c_\Delta^2 \bar{a}_{\chi 2}^+, \\
 \bar{a}_{\chi 2}^+ &= -\bar{g}_2 + (\bar{g}_1)^2 + 2\nu \Phi_0 \bar{g}_1 + \nu \Phi_0^2 (2\nu - 1 - 2\Delta), & & & & (3.4.11) \\
 a_{\chi 3}^+ &= \frac{c_{1k1}}{c_{1k}} \bar{a}_{\chi 3}^+, & \bar{a}_{\chi 3}^+ &= -2\nu.
 \end{aligned}$$



Табл. 3.15. Внески у теплоємність системи від окремих доданків. Лінією відокремлено вкладки  $T > T_c$  та  $T < T_c$ .

$ \tau $	$0.5 \times 10^{-4}$	$0.1 \times 10^{-3}$	$0.5 \times 10^{-3}$	$1 \times 10^{-3}$	$4 \times 10^{-3}$	$5 \times 10^{-3}$
$C_{30}\tau^{-\alpha}$	19.5257	16.7144	11.6500	9.9727	7.3077	6.9510
$C_{31}\tau^{1-\alpha}$	0.0046	0.0078	0.0272	0.0465	0.1363	0.1620
$C_{40}\tau^{\Delta-\alpha}$	-0.3343	-0.3978	-0.5957	-0.7088	-1.0035	-1.0612
$C_{41}\tau^{2\Delta-\alpha}$	-0.0064	-0.0106	-0.0340	-0.0563	-0.1539	-0.1810
$C'_{30} \tau ^{-\alpha}$	51.1375	43.9784	30.6531	26.2397	19.2278	18.2892
$-C'_{31} \tau ^{1-\alpha}$	-0.0120	-0.0205	-0.0714	-0.1223	-0.3585	-0.4263
$C'_{40} \tau ^{\Delta-\alpha}$	1.1628	1.3835	2.0716	2.4649	3.4898	3.6907
$C'_{41} \tau ^{2\Delta-\alpha}$	0.0094	0.0156	0.0501	0.0829	0.2268	0.2667

Основна критична амплітуда  $\Gamma^+$  містить неуніверсальну частину, пропорційну до  $c_\nu^{-2}$ . Поправки до скейлінгу, що визначаються коефіцієнтами  $a_{\chi l}^+$ , також містять неуніверсальні множники. Вони мають такий же ступінь неуніверсальності, як і відповідні доданки в (3.4.9). Коефіцієнти при  $\tau^\Delta$  пропорційні  $c_\Delta$ , а при  $\tau^{2\Delta} - c_\Delta^2$ .

### 3.5. Температура фазового переходу як функція мікроскопічних параметрів моделі

На сьогодні існує декілька підходів до обчислення температури фазового переходу. Найточніші результати дають підходи, що ґрунтуються на числових методах (типу Монте-Карло). Ці результати стосуються моделей із наперед заданими типами взаємодії (наприклад, взаємодії найближчих сусідів). Зміна параметрів взаємодії потребує нового розрахунку. Серед аналітичних методів є мало праць, які давали б змогу розраховувати температуру фазового переходу на мікроскопічному рівні. Незважаючи на меншу точність одержання температури фазового переходу, вони дають змогу дослідити її залежність від параметрів потенціалу взаємодії. Запропонований тут підхід до опису фазового переходу дає визначення  $T_c$  з точки зору поведінки системи безпосередньо в критичній області.

Означення температури ФП  $T_c$  було приведено в параграфі 2.5 цієї книжки. Нами знайдений температурний інтервал (2.5.20), який містить  $T_c$ . При цьому для спрощення припускається, що  $\bar{\Phi} = 0$ , тобто використано вираз (2.5.4) для фур'є-образу потенціалу взаємодії. Насправді ж величина  $\bar{\Phi}$ , зазвичай, відмінна від нуля. У зв'язку з цим використовуватимемо надалі вираз (1.2.12) для фур'є-образу потенціалу взаємодії. Це приведе до зміни величин  $a'_2$  та  $a'_4$  із (2.5.12), оскільки вони стануть функціями  $\bar{\Phi}$ . Однак отримані вище функціональні співвідношення залишаться справедливими.

При розрахунку температури фазового переходу  $\beta_c$  ( $\beta_c = 1/kT_c$ ) скористаємося рівнянням (2.7.6), у якому величини  $a'_2$ ,  $a'_4$ , розраховані для (2.5.4), замінимо відповідно на  $\tilde{a}_2$ ,  $\tilde{a}_4$ , об-

численими для (1.2.12). Такого типу розрахунки були проведені в [330]. У результаті маємо

$$\begin{aligned} \tilde{a}_0 &= \ln \left[ (2\pi)^{-1/2} \left( \frac{3}{\tilde{\mathcal{M}}_4} \right)^{1/4} \exp \left( \frac{\tilde{y}^2}{4} \right) U(0, \tilde{y}) \right], \\ \tilde{a}_2 &= \left( \frac{3}{\tilde{\mathcal{M}}_4} \right)^{1/2} U(\tilde{y}), \quad \tilde{a}_4 = \left( \frac{3}{\tilde{\mathcal{M}}_4} \right) \varphi(\tilde{y}), \end{aligned} \quad (3.5.1)$$

де

$$\tilde{y} = \sqrt{3} \tilde{\mathcal{M}}_2 (\tilde{\mathcal{M}}_4)^{-1/2}. \quad (3.5.2)$$

Для величин  $\tilde{\mathcal{M}}_{2n}$  отримуємо вирази

$$\tilde{\mathcal{M}}_0 = \frac{1}{2} \alpha; \quad \tilde{\mathcal{M}}_2 = 1 - \alpha; \quad \tilde{\mathcal{M}}_4 = 2s_0^{-3}(1 - 4\alpha). \quad (3.5.3)$$

Тут введено позначення:

$$\alpha = \beta \bar{\Phi}(0) \bar{\Phi}(1 - s_0^{-3}).$$

Спеціальні функції  $U(0, \tilde{y})$  та  $U(\tilde{y}), \varphi(\tilde{y})$  виражаються через функції параболічного циліндра Вебера  $U(a, \tilde{y})$ .

У випадку  $\bar{\Phi} = 0$  розрахунки суттєво спрощуються. Для величин  $\tilde{\mathcal{M}}_{2l}$  маємо:

$$\tilde{\mathcal{M}} = 0, \quad \tilde{\mathcal{M}}_2 = 1, \quad \tilde{\mathcal{M}}_4 = 2s_0^{-3} \quad (3.5.4)$$

і коефіцієнти  $\tilde{a}_{2l}$  стають функціями лише відношення  $b/c$  і незалежними від температури. В табл. 3.16 подані коефіцієнти  $\tilde{a}_{2l}$  при  $\bar{\Phi} = 0$  для різних величин параметра  $b/c$ .

Величина  $\bar{\Phi}$  у праці [331] визначається виразом<sup>1</sup>

$$\bar{\Phi} = \langle \Phi \rangle + \Phi_\infty, \quad (3.5.5)$$

<sup>1</sup> Децю іншу умову для визначення  $\bar{\Phi}$ , а саме  $\tilde{a}_2(\bar{\Phi})=1$ , використано в праці [332], де на основі розвинутого там підходу для випадку взаємодії найближчих сусідів отримано температуру фазового переходу  $\beta_c J = 0.211$ .

Табл. 3.16. Значення коефіцієнтів  $\tilde{a}_{2l}$  при  $\bar{\Phi} = 0$ . Величина  $b_{min} = \frac{c}{\alpha' \pi \sqrt{2}}$  відповідає випадку  $s_0 = 1$  ( $B' = B$ )

$b$	$\tilde{a}_0$	$\tilde{a}_2$	$\tilde{a}_4$	$\tilde{y}$	$\langle \Phi \rangle$
$b_{min}$	-1.05569	0.64493	0.18259	1.22475	0.4444
$b_I=0.2887$	-1.00021	0.75804	0.19239	1.77897	0.3717
0.3000	-0.99346	0.77391	0.19071	1.88462	0.3576
$b_{II}=0.3379$	-0.97536	0.81934	0.18025	2.25281	0.3132
0.3500	-0.97076	0.83164	0.17576	2.37490	0.3001
$b_{III}=0.3584$	-0.96783	0.83962	0.17242	2.46091	0.2912
0.4000	-0.95605	0.87329	0.15427	2.90157	0.2510
0.4500	-0.94623	0.90337	0.13163	3.46228	0.2102
0.5000	-0.93949	0.92527	0.11062	4.05507	0.1765
0.6000	-0.93132	0.95337	0.07697	5.33052	0.1263
0.8000	-0.92431	0.97905	0.03870	8.20688	0.0691
1.0000	-0.92174	0.98894	0.02113	11.4695	0.0411
2.0000	-0.91929	0.99858	0.00282	32.4405	0.0068
3.0000	-0.91904	0.99958	0.00084	59.5971	0.0022
5.0000	-0.91896	0.99991	0.00018	128.232	0.0005
10.0000	-0.91894	0.99999	0.00002	362.696	0.0001
.					
.					
.					
$\infty$	-0.91894	1	0	$\infty$	0

де  $\langle \Phi \rangle$  відповідає усередненому значенню фур'є-образу потенціалу  $\tilde{\Phi}(k)$  із (1.2.11) на інтервалі  $k \in (B', B]$  і обчислюється за формулою:

$$\langle \Phi \rangle = \int_{B'}^B \tilde{\Phi}(k) dk / \int_{B'}^B \tilde{\Phi}(0) dk. \quad (3.5.6)$$

Приймаючи до уваги (1.2.11), знаходимо

$$\langle \Phi \rangle = \Phi_1 / \Phi_0, \quad (3.5.7)$$

де

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= b^{-3} \left[ -\frac{\pi b}{2c} \left( 1 + \pi^2 \left( \frac{b}{c} \right)^2 \right)^{-1} + \frac{\alpha'}{\sqrt{2}(1 + 2\alpha'^2)} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \left( \pi \frac{b}{c} \right) - \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \left( \frac{1}{\alpha' \sqrt{2}} \right) \right], \\ \Phi_0 &= \frac{b^{-3}}{3} \left[ \pi^3 \left( \frac{b}{c} \right)^3 - \frac{1}{2\alpha'^3 \sqrt{2}} \right]. \end{aligned}$$

Величина  $\alpha'$  – постійний коефіцієнт ( $\alpha' \geq 1$ ). У випадку  $\alpha' = 1$  отримуємо  $\tilde{\Phi}(0)(1 - 2b^2k^2) = 0$  для  $k = B'$ . При  $\alpha' > 1$  маємо  $\tilde{\Phi}(0)(1 - 2b^2k^2) > 0$  для всіх  $k \in [0, B']$ . Множник  $\alpha'$  введений лише з технічних причин. У попередніх працях авторів [333–335] покладалось  $\alpha' = 1$ . Врахування значень  $\alpha' > 1$  приводить до зменшення області застосування параболічної апроксимації для  $\tilde{\Phi}(k)$  та деякого збільшення фур'є-образу  $\tilde{\Phi}$ . Результати розрахунків для різних значень  $\alpha'$  та оптимальний вибір  $\alpha' = 1.0417$  містяться у праці [330]. Зі зростанням відношення  $b/c$  величина  $\langle \Phi \rangle \rightarrow 0$ . Числові значення  $\langle \Phi \rangle$  для різних  $b$  приведені в [330]. Величина  $\Phi_\infty = -0.10134/(1 - s_0^{-3})$  є поправкою, яка забезпечує правильну асимптотичну поведінку системи при  $b/c \rightarrow \infty$ . Параметр  $s_0 = B/B' = \alpha' \pi \sqrt{2} b/c$ . При  $\tilde{\Phi}(0) = 2dJ$ ,  $b = b_I = c/(2\sqrt{d})$  в області малих хвильових векторів  $\mathbf{k}$  параболічна апроксимація фур'є-образу експонентно спадного потенціалу взаємодії відповідає аналогічній апроксимації фур'є-образу потенціалу взаємодії найближчих сусідів (див. § 1.2). Для цього випадку отримуємо:  $s_0 = \pi \alpha' / \sqrt{6} \approx 1.28255 \alpha'$ .

Дослідження критичної поведінки тривимірної ізінгівської системи виконано у випадку  $\tilde{\Phi} \neq 0$ . Записано явний вигляд рекурентних співвідношень, що виникають після послідовного інтегрування статистичної суми за шарами фазового простору КЗ

і зв'язують між собою коефіцієнти густин мір  $(n + 1)$ -ої і  $n$ -ої блочних структур. Одержані для цих співвідношень розклади містять степені малого параметра  $s^{-d}$ . Оптимальний параметр поділу фазового простору КЗ  $s = \bar{s} = 3.4252$  використовується у подальших розрахунках.

Характерною особливістю отриманих розв'язків рекурентних співвідношень є специфічна залежність одного із коефіцієнтів  $c_1$  від температури. Як і в § 2.7, одержано рівняння для величини  $\beta_c \tilde{\Phi}(0)$ , що визначає температуру фазового переходу  $T_c$ :

$$A'_c(\beta_c \tilde{\Phi}_c(0))^2 + B'_c \beta_c \tilde{\Phi}_c(0) + D'_c = 0. \quad (3.5.8)$$

Вирази для коефіцієнтів  $A'_c$ ,  $B'_c$ ,  $D'_c$  приведені в [330, 336]. З вигляду це рівняння аналогічне до (2.7.6). Однак його коефіцієнти  $B'_c$  та  $D'_c$ , які визначаються через  $\tilde{a}_2(T_c)$  та  $\tilde{a}_4(T_c)$ , залежать не тільки від радіуса дії потенціалу  $b$ , але й від величини  $\tilde{\Phi}$ . Вони також є функціями температури  $\beta_c \tilde{\Phi}(0)$ . Загальний розв'язок рівняння (3.5.8) знаходиться після самоузгодженої процедури з врахуванням у його коефіцієнтах залежності від  $\beta_c \tilde{\Phi}(0)$  (див. [330, 331, 336]). Результати розрахунків зображені на рис. 3.4. Зауважимо, що отриманий нами характер зміни оберненої температури фазового переходу з ростом радіуса дії потенціалу також узгоджується з даними для тривимірної моделі із далекодіючим потенціалом взаємодії [337].

У випадку взаємодії найближчих сусідів ( $b = b_I$ ,  $\tilde{\Phi}(0) = 2dJ$ ) маємо  $\beta_c \tilde{\Phi}(0) = 1.221$  (або  $\beta_c J = 0.203$ ). Цей результат узгоджується із значенням  $(\beta_c J)^{-1} = 4.5103$  (або  $\beta_c J = 0.2217$ ) [138, 338], обчисленим за допомогою високотемпературних розкладів. Подібні значення отримують і методом ренормалізаційної групи в реальному просторі, який ґрунтується на кумулянтному розкладі ( $\beta_c J = 0.22401$  [339]), та методом Монте-Карло ( $\beta_c J = 0.221654 \pm 0.000006$  [174],  $\beta_c J = 0.2216595 \pm 0.0000026$  [190, 191, 340]). Залежність оберненої температури фазового переходу  $\beta_c A = \beta_c \tilde{\Phi}(0)/[8\pi(b/c)^3]$  в одиницях виміру константи  $A$  ( $A$  – постійна, що входить у потенціал взаємодії (1.2.2)) від відношення мікроскопічних параметрів  $b$  і  $c$  зображена на рис. 3.5.

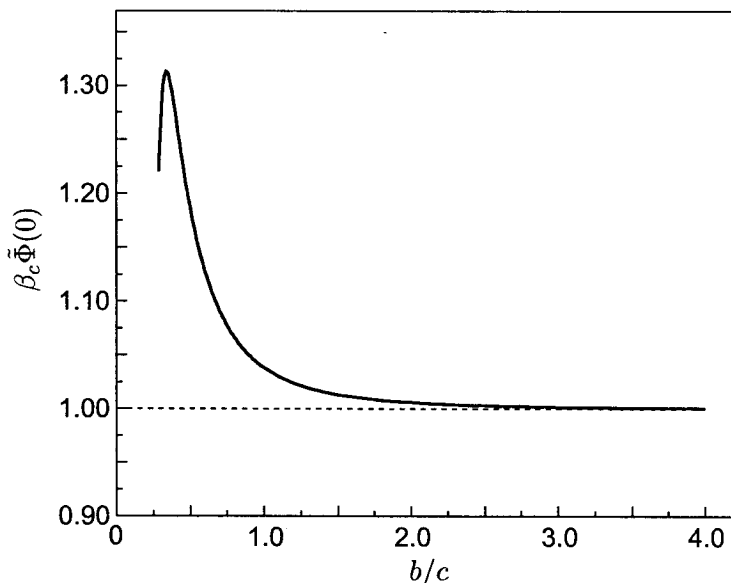


Рис. 3.4. Крива залежності величини  $\beta_c \tilde{\Phi}(0)$  від відношення радіуса дії потенціалу  $b$  до постійної ґратки  $c$ .

Зазначимо, що ця схема розрахунку температури фазового переходу не спрямована на отримання точного значення  $T_c$ . Це видно із порівняння отриманої нами температури  $T_c$  із результатами інших авторів. Відмінність пояснюється двома обставинами. Перша з них, і основна, полягає в тому, що нами використовується інший тип для потенціалу взаємодії між частинками. Він має вигляд експонентно спадної функції віддалі між частинками ( $\Phi(r_{ij}) = A \exp(-r_{ij}/b)$ ). Його можна лише наближено (навіть для певних значень параметра  $b$ ) вважати тотожним з потенціалом типу найближчих сусідів. Друга обставина пов'язана з апроксимацією загальної задачі наближенням моделі  $\rho^4$ . Вищі наближення (моделі  $\rho^6$ ,  $\rho^8$  і т. д.), очевидно, приведуть до уточнення  $T_c$ . Однак запропонована нами схема дає змогу крім критичної температури, дослідити термодинамічні характеристики системи як функції мікроскопічних параметрів (сталого ґратки,

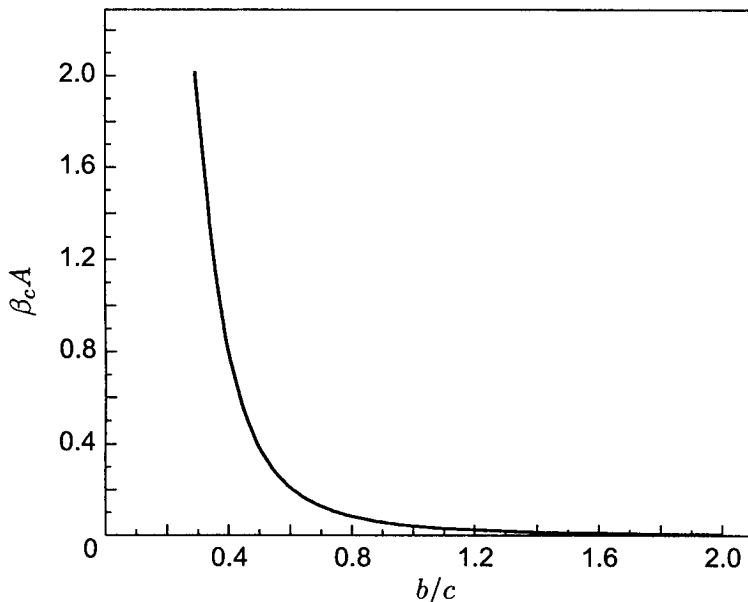


Рис. 3.5. Критична температура  $\beta_c A$  як функція мікроскопічних параметрів системи

параметрів потенціалу взаємодії). Саме можливість дослідження за єдиною схемою залежності різних фізичних величин поблизу ТФП, включаючи саму температуру ФП, від мікроскопічних параметрів вихідної системи [330,335,341–344] створює передумови для застосування цього методу розрахунку до фазових переходів широкого класу тривимірних систем.





## Розділ 4

# Термодинамічні функції нижче від точки фазового переходу (наближення моделі $\rho^4$ )

У цьому розділі запропонована методика розрахунку основних термодинамічних характеристик системи при температурах, які нижчі від критичної. Показано, що нижче від точки фазового переходу також можна виділити дві області хвильових векторів, які дають різні внески у вираз для вільної енергії системи. Перша з них – область критичного режиму, де термодинамічні функції розраховуються подібно до того, як і при вищих від  $T_c$  температурах. Врахування внеску у вільну енергію системи тільки від області КР веде до від'ємних значень теплоємності, а, відповідно, до локальної нестабільності системи. Друга – область інверсного гаусового режиму (ІГР), яка відповідає довгохвильовим флуктуаціям, дає основний внесок у неаналітичну частину вільної енергії при  $T < T_c$  і в результаті веде до додатних значень теплоємності.

Враховано додаткові внески до вільної і внутрішньої енергії, ентропії, теплоємності, які визначають поправки до скейлінгу. Обчислені відповідні критичні показники і критичні амплітуди. Одержані явні вирази для теплоємності, сприйнятливості та інших характеристик системи поблизу  $T_c$ . Виділені ті їхні частини, які відповідають т. зв. критичним амплітудам. Показано, що відношення критичних амплітуд при  $T < T_c$  і  $T > T_c$  – універсаль-

ні величини, оскільки неуніверсальні множники скорочуються і зникає залежність від мікроскопічних параметрів системи. Це стосується як амплітуд основних асимптотик, так і доданків, які визначають поправки до скейлінгу.

Важливе місце при розрахунку термодинамічних функцій при  $T < T_c$  займає виділення внеску до вільної енергії від параметра порядку. Вираз для нього отриманий прямим обчисленням, виходячи із загальних принципів статистичної механіки. Запропонована процедура самоузгодження при розрахунку параметра порядку, який не вводиться ззовні, а отримується шляхом аналітичних розрахунків, як функція температури і мікроскопічних параметрів гамільтоніану.

Не менш важливим результатом цього розділу є отримання мікроскопічного аналогу вільної енергії Ландау. Розраховані вирази для коефіцієнтів “розкладу” вільної енергії за степенями параметра порядку, знайдені їх температурні залежності.

#### 4.1. Обчислення статистичної суми при температурах нижчих від критичної

Скористаємось викладеним у розділі 2 методом розрахунку статистичної суми поблизу точки фазового переходу. Явний вираз для неї може бути отриманий поетапним інтегруванням виразу (2.1.2). Процес інтегрування починається із змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$ , хвильові вектори яких приймають великі значення (близькі до границі зони Бріллюена) і закінчується змінними  $\rho_{\mathbf{k}}$  з  $\mathbf{k} \rightarrow 0$ . Такий метод обчислення відповідає переходу від моделі спінів, розташованих у вузлах ґратки, до ефективних блочних структур зі все зростаючим розміром блоку. Отримуємо таке представлення для статистичної суми

$$Z = 2^N 2^{(N_{\mu_r+1}-1)/2} \left( \prod_{n=0}^{\mu_r} Q_n \right) [Q(P_{\mu_r})]^{N_{\mu_r+1}} \times \int \exp [E_{\mu_r+1}(\rho)] (d\rho)^{N_{\mu_r+1}}. \quad (4.1.1)$$

Вирази для парціальних статистичних сум  $Q_n$  та для  $Q(P_n)$  наведені відповідно в (2.3.12) та (2.3.13), а величина  $E_{\mu_\tau+1}(\rho)$  визначена в (2.3.17), де покладено  $n = \mu_\tau$ . Для коефіцієнтів  $d_n(B_{n+1}, B_n)$ ,  $a_4^{(n)}$ , які входять до складу  $Q_n$ , справедливі загальні рекурентні рівняння (2.6.5). Їх розв'язки (2.6.23) застосовні як для області температур  $0 < \tau \leq \tau^*$ , так і для  $-\tau^* < \tau \leq 0$ . Вони справедливі для значень  $n$ , які не перевищують деякої температурно залежної величини  $\mu_\tau$  ( $n < \mu_\tau$ ). Точка  $\mu_\tau$  характеризує розмір області КР при  $T < T_c$ .

Перш ніж приступити до розрахунку вільної енергії системи при  $T < T_c$  знайдемо величину  $\mu_\tau$ . Вона визначає граничний хвильовий вектор  $B_{\mu_\tau} = B' s^{-\mu_\tau}$  і відповідний період ефективної ґратки  $s_{\mu_\tau} = (\pi/B') s^{\mu_\tau}$ . Величина  $\mu_\tau$  – це номер блочної структури, який розділяє два типи довгохвильових флуктуацій (див. рис. 4.1). Ділянка КР, де виконуються співвідношення РГ (див. [345]), відповідає номерам  $n \leq \mu_\tau$ .

Для визначення точки виходу системи з КР при  $T < T_c$  і опису її наступної поведінки при зростанні номера блочної структури  $n$ , дослідимо еволюцію коефіцієнта  $d_n(B_{n+1}, B_n)$ , використо-

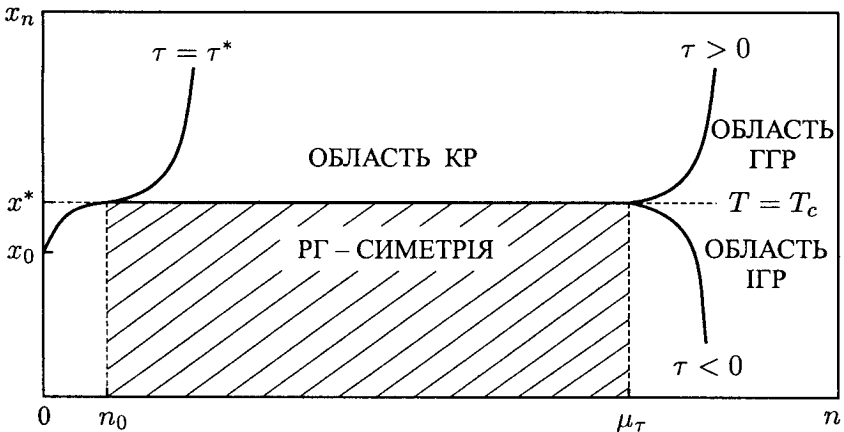


Рис. 4.1. Еволюція основної змінної  $x_n$  з ростом номера блочної структури  $n$  при температурах близьких до критичної

вуючи співвідношення (2.4.2). В області  $1 < n < \mu_\tau$  коефіцієнт  $d_n(B_{n+1}, B_n)$  монотонно спадає із збільшенням  $n$

$$d_n(B_{n+1}, B_n) = s^{-2n}(r_n + q), \quad (4.1.2)$$

де величина  $r_n$  близька до  $r^*$  (див. (2.6.20)). Із збільшенням  $n$  коефіцієнт  $d_n(B_{n+1}, B_n)$  зменшується, перетворюється в нуль при  $n = n_\alpha$  і далі з ростом  $n > \mu_\tau$  приймає від'ємні значення. В точці  $n_\beta$  крива  $d_n(B_{n+1}, B_n)$  досягає мінімуму, а в точці  $n_\gamma$  має перегин (рис. 4.2). Коефіцієнт  $a_4^{(n)}$  з ростом  $n$  продовжує зменшуватись, прямуючи до нуля. Можемо знайти точку  $n_\delta$ , у якій вираз для  $a_4^{(n)}$  (2.6.23) перетворюється в нуль. Значення  $a_4^{(n_\delta)} = 0$  не може реалізуватися, оскільки величина  $a_4^{(n)}$  завжди додатна і не перетворюється в нуль при скінченних  $n$ . Для всіх  $n \geq n_\delta$  розв'язки РС типу (2.6.20) несправедливі. Детальне дослідження поведінки коефіцієнтів  $d_n(B_{n+1}, B_n)$ ,  $a_4^{(n)}$  подано в [16].

Приведемо вирази для вищезгаданих особливих точок, в яких характер поведінки  $d_n(B_{n+1}, B_n)$  змінюється (див. [346]). Точка  $n_\alpha$  задається виразом:

$$n_\alpha = -\frac{\ln|\tau|}{\ln E_1} + n_\alpha^{(0)}, \quad n_\alpha^{(0)} = \frac{\ln(\bar{q} - f_0) - \ln c_{1k}}{\ln E_1}, \quad (4.1.3)$$

де  $E_1$  – більше власне значення матриці лінеаризованого перетворення РГ (2.6.13),  $\bar{q}$  визначено в (2.6.2),  $f_0$  – в (2.4.8), а величина  $c_{1k}$  наведена в (2.7.11). Для точки  $n_\beta$  отримуємо

$$n_\beta = -\frac{\ln|\tau|}{\ln E_1} + n_\beta^{(0)}, \quad n_\beta^{(0)} = n_\alpha^{(0)} - \frac{\ln\left(1 - \frac{1}{2\nu}\right)}{\ln E_1}. \quad (4.1.4)$$

Тут  $\nu$  – критичний показник кореляційної довжини. Точка  $n_\gamma$  знаходиться із формул:

$$n_\gamma = -\frac{\ln|\tau|}{\ln E_1} + n_\gamma^{(0)}, \quad n_\gamma^{(0)} = n_\alpha^{(0)} - 2\frac{\ln\left(1 - \frac{1}{2\nu}\right)}{\ln E_1}. \quad (4.1.5)$$

Порівнюючи між собою (4.1.3)–(4.1.5), бачимо, що

$$n_\gamma > n_\beta > n_\alpha. \quad (4.1.6)$$

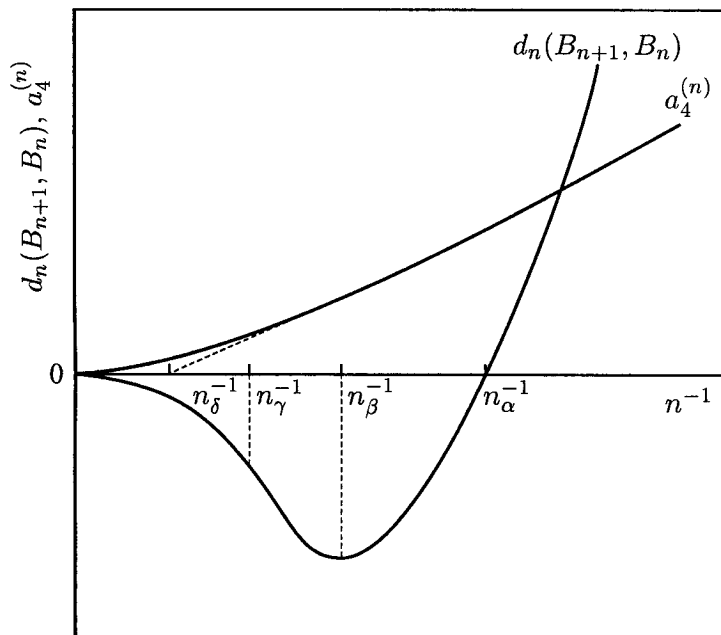


Рис. 4.2. Поведінка коефіцієнтів  $d_n(B_{n+1}, B_n)$  і  $a_4^{(n)}$  як функцій  $n^{-1}$  при  $T < T_c$  після виходу системи із ділянки КР

Кожна з величин  $n_{\gamma}, n_{\beta}, n_{\alpha}$  може вибиратись як гранична точка переходу від КР до низькотемпературного аналогу ГГР. Всі вони мають спільну частину

$$n_{\alpha, \beta, \gamma} \approx -\frac{\ln |\tau|}{\ln E_1}, \quad (4.1.7)$$

яка є головною (у границі  $\tau \rightarrow 0$ ), і деяку несуттєву сталу. Точки  $n_{\gamma}, n_{\beta}, n_{\alpha}$  не мають аналога при  $T > T_c$ . Це може призвести до деяких незручностей порівняння результатів розрахунків для термодинамічних функцій при  $T > T_c$  і  $T < T_c$ .

Однією з фізичних умов для визначення точки виходу системи з ділянки КР при  $T < T_c$  є співвідношення [346]:

$$d_{\mu'_\tau}(B_{\mu'_\tau}) = 0. \quad (4.1.8)$$

Воно дає змогу визначити таке значення  $\mu'_\tau$ , що для всіх  $n > \mu'_\tau$  крива  $d_n(k)$  повністю знаходиться під віссю абсцис. Це якоюсь мірою переключається з умовою виходу системи із КР при  $T > T_c$  (див. (3.1.5)). Останнє приводить до додатних значень  $d_n(k)$  при всіх  $n > m_\tau$ . Співвідношенню (4.1.8) відповідає рівність

$$\mu'_\tau = -\frac{\ln|\tau|}{\ln E_1} + \mu'_0, \quad (4.1.9)$$

де

$$\mu'_0 = \ln \frac{1 - f_0}{c_{1k} + c_{1k1}\tau} / \ln E_1. \quad (4.1.10)$$

Однак виявляється, що для всіх  $s > s^*$ , де  $f_0 > 1$ , рівняння (4.1.8) призводить до комплексних значень  $\mu'_0$ . Це створює певну незручність при обчисленні вільної енергії.

У подальших обчисленнях для визначення  $\mu_\tau$  використовуватимемо рівність [347]

$$\frac{r_{\mu_\tau+1} - r^*}{r^*} = \delta, \quad (4.1.11)$$

де  $\delta$  – постійна величина ( $|\delta| \leq 1$ ). Визначення (4.1.11) є загальним. Воно застосовне для температур вищих і нижчих від критичної. Припускаючи, що  $\delta = -1$ , отримуємо рівняння  $r_{\mu_\tau+1} = 0$ , яке співпадає з визначенням точки  $m_\tau$  при  $T > T_c$  (див. (3.1.5)). При  $\delta = 1$  із (4.1.11) одержуємо рівняння для визначення  $\mu_\tau$  у випадку  $T < T_c$ :

$$c_{1\tau}|\tau|E_1^{\mu_\tau+1} = f_0 \left[ 1 + c_{2\tau}\Phi_0 E_2^{\mu_\tau+1} \right]. \quad (4.1.12)$$

Тут

$$r^* = -f_0\beta\tilde{\Phi}(0), \quad u^* = \varphi_0(\beta\tilde{\Phi}(0))^2, \quad \Phi_0 = R^{(0)}f_0^{-1}\varphi_0^{-1/2}.$$

Розв'язуючи (4.1.12) відносно  $\mu_\tau$  і приймаючи до уваги, що в критичній області  $E_1^{\mu_\tau+1} \gg E_2^{\mu_\tau+1}$ , у другому порядку малості за величиною  $E_2^{\mu_\tau+1}$  знаходимо

$$\mu_\tau = -\frac{\ln|\tau|}{\ln E_1} + m_0 - 1 - m_\Delta |\tau|^\Delta + m_{2\Delta} |\tau|^{2\Delta}. \quad (4.1.13)$$

Коефіцієнти  $m_0$ ,  $m_\Delta$ ,  $m_{2\Delta}$  отриманого вище виразу повністю співпадають з відповідними коефіцієнтами для  $m_\tau$  у (3.2.5). Для різних мікроскопічних параметрів системи вони подані у табл. 2.11, 3.3.

У подальших обчисленнях як точку виходу із КР використовуватимемо вираз (4.1.13). Номер  $\mu_\tau$  визначає область негаусових фаз флуктуацій спінового моменту ( $k \geq B_{\mu_\tau}$ ) і граничних гаусових флуктуацій ( $k < B_{\mu_\tau}$ ). У першій з них справедливий РГ розв'язки РС (2.6.20). Друга, довгохвильова область, характеризує блочні структури, в яких існує відмінний від нуля середній спіновий момент.

## 4.2. Мікроскопічний аналог вільної енергії Ландау

Розглянемо внески до статистичної суми  $Z_{\mu_\tau+1}$ , які відповідають довгохвильовим флуктуаціям:

$$Z_{\mu_\tau+1} = \int \exp[E_{\mu_\tau+1}(\rho)] (d\rho)^{N_{\mu_\tau+1}}, \quad (4.2.1)$$

де маємо  $N_{\mu_\tau+1} = N' s^{-3(\mu_\tau+1)}$ ,

$$E_{\mu_\tau+1}(\rho) = -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{\mu_\tau+1}} d_{\mu_\tau+1}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{4!} \frac{a_{\mu_\tau+1}}{N_{\mu_\tau+1}} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \leq B_{\mu_\tau+1}}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4}. \quad (4.2.2)$$



Коефіцієнти  $d_{\mu_\tau+1}(k)$  і  $a_{\mu_\tau+1}$  задаються виразами:

$$\begin{aligned} d_{\mu_\tau+1}(k) &= s^{-2(\mu_\tau+1)} r_{\mu_\tau+1} + \tilde{q} k^2, \\ a_{\mu_\tau+1} &= s^{-4(\mu_\tau+1)} u_{\mu_\tau+1}, \quad \tilde{q} = 2\beta\tilde{\Phi}(0)b^2. \end{aligned} \quad (4.2.3)$$

Для  $r_{\mu_\tau+1}$  і  $u_{\mu_\tau+1}$  знаходимо

$$\begin{aligned} r_{\mu_\tau+1} &= -\beta\tilde{\Phi}(0) \left[ \bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} - \bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(1)} |\tau|^\Delta + \bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(2)} |\tau|^{2\Delta} \right], \\ u_{\mu_\tau+1} &= \left[ \beta\tilde{\Phi}(0) \right]^2 \left[ \bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)} + \bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(1)} |\tau|^\Delta - \bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(2)} |\tau|^{2\Delta} \right], \end{aligned} \quad (4.2.4)$$

де коефіцієнти  $\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)}$  і  $\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}$  є постійні величини. У випадку вибору точки виходу системи із КР  $\mu_\tau$  відповідно до (4.1.13) маємо співвідношення:

$$\begin{aligned} \bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} &= 2f_0, \quad \bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(1)} = 0, \quad \bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(2)} = 0, \\ \bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)} &= \varphi_0 - f_0 \varphi_0^{1/2} R_1^{(0)}, \quad \bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(1)} = c_\Delta D, \\ \bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(2)} &= c_\Delta^2 \Delta \Phi_0 D. \end{aligned} \quad (4.2.5)$$

Здійснимо в (4.2.1) заміну змінних

$$\rho_k = \rho'_k + \sqrt{N} \langle \bar{\sigma} \rangle \delta_k. \quad (4.2.6)$$

Величина  $\langle \bar{\sigma} \rangle$  визначається із умови екстремуму виразу  $E_{\mu_\tau+1}(\langle \bar{\sigma} \rangle)$ . Для неї одержуємо

$$\langle \bar{\sigma} \rangle^2 = -\frac{N_{\mu_\tau+1}}{N} \frac{6d_{\mu_\tau+1}(0)}{a_{\mu_\tau+1}}. \quad (4.2.7)$$

У результаті заміни (4.2.6) із (4.2.1) знаходимо

$$Z_{\mu_\tau+1} = \exp(-\beta F_\sigma) \int \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{\mu_\tau+1}} \bar{d}_{\mu_\tau+1}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{b_{\mu_\tau+1}}{3!(N_{\mu_\tau+1})^{1/2}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_3 \\ k_i \leq B_{\mu_\tau+1}}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_3} - \frac{a_{\mu_\tau+1}}{4! N_{\mu_\tau+1}} \times \right. \\ \left. \times \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ k_i \leq B_{\mu_\tau+1}}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right] (d\rho)^{N_{\mu_\tau+1}}, \quad (4.2.8)$$

де

$$-\beta F_\sigma = \frac{3}{2} N_{\mu_\tau+1} (d_{\mu_\tau+1}(0))^2 / a_{\mu_\tau+1},$$

а для коефіцієнтів маємо

$$b_{\mu_\tau+1} = [3|d_{\mu_\tau+1}(0)|a_{\mu_\tau+1}]^{1/2}, \quad (4.2.9) \\ \bar{d}_{\mu_\tau+1}(k) = d_{\mu_\tau+1}(k) + 3|d_{\mu_\tau+1}(0)|.$$

Виділення вільної енергії впорядкування  $F_\sigma$  приводить до двох наслідків. Коефіцієнт при квадратичному доданку в (4.2.8) стає додатним. Крім того, виконується рівність  $\bar{d}_{\mu_\tau+1}(0) = 2|d_{\mu_\tau+1}(0)|$ . Приймаючи до уваги (4.2.3), приходимо до виразу

$$\bar{d}_{\mu_\tau+1}(k) = 4\beta\Phi(0)f_0s^{-2(\mu_\tau+1)} + 2\beta\tilde{\Phi}(0)b^2k^2. \quad (4.2.10)$$

Розподіл флуктуацій відносно величини  $\langle \bar{\sigma} \rangle$ , заданої в (4.2.7), стає гаусовим. Виділяючи в (4.2.8) із сум за  $k$  доданки з  $k = 0$  і беручи до розгляду безмежно мале зовнішнє поле  $h = \mu_B \mathcal{H}$ ,

отримуємо

$$\begin{aligned}
 Z_{\mu_{\tau}+1} = & \exp(-\beta F_{\sigma} + \beta F_h) \int d\rho_0 \exp \left[ \beta h \sqrt{N} \rho_0 - \right. \\
 & - \frac{1}{2} \bar{d}_{\mu_{\tau}+1}(0) \rho_0^2 - \frac{1}{3!} b_{\mu_{\tau}+1} (N_{\mu_{\tau}+1})^{-1/2} \rho_0^3 - \frac{1}{4!} a_{\mu_{\tau}+1} (N_{\mu_{\tau}+1})^{-1} \rho_0^4 \left. \right] \times \\
 & \times \int \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum'_{k \leq B_{\mu_{\tau}+1}} \bar{d}_{\mu_{\tau}+1}(k) \rho_k \rho_{-k} \right] \exp(p_0 + \\
 & + p_1 \rho_0 + p_2 \rho_0^2) (d\rho)^{N_{\mu_{\tau}+1}-1}.
 \end{aligned} \tag{4.2.11}$$

Тут штрих біля суми за  $k$  означає, що  $k \neq 0$ ,

$$F_h = h(N N_{\mu_{\tau}+1})^{1/2} \frac{b_{\mu_{\tau}+1}}{a_{\mu_{\tau}+1}}, \tag{4.2.12}$$

а для величин  $p_l$  маємо:

$$\begin{aligned}
 p_0 = & -\frac{1}{3!} b_{\mu_{\tau}+1} (N_{\mu_{\tau}+1})^{-1/2} \sum'_{\substack{k_1, \dots, k_3 \\ k_i \leq B_{\mu_{\tau}+1}}} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_3} \delta_{k_1 + \dots + k_3} - \\
 & - \frac{1}{4!} a_{\mu_{\tau}+1} \frac{1}{N_{\mu_{\tau}+1}} \sum'_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \leq B_{\mu_{\tau}+1}}} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4}, \\
 p_1 = & -\frac{1}{2} b_{\mu_{\tau}+1} \frac{1}{\sqrt{N_{\mu_{\tau}+1}}} \sum'_{k \leq B_{\mu_{\tau}+1}} \rho_k \rho_{-k} - \\
 & - \frac{1}{3!} a_{\mu_{\tau}+1} \frac{1}{N_{\mu_{\tau}+1}} \sum'_{\substack{k_1, \dots, k_3 \\ k_i \leq B_{\mu_{\tau}+1}}} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_3} \delta_{k_1 + \dots + k_3}, \\
 p_2 = & -\frac{1}{4} a_{\mu_{\tau}+1} \frac{1}{N_{\mu_{\tau}+1}} \sum'_{k \leq B_{\mu_{\tau}+1}} \rho_k \rho_{-k}.
 \end{aligned} \tag{4.2.13}$$

Виконуючи інтегрування у виразі (4.2.11) за змінними  $\rho_{\mathbf{k}}$  з  $k \neq 0$  з використанням гаусової міри і представляючи результат у вигляді ряду за степенями  $\rho_0$  у показнику експоненти, отримуємо вираз

$$Z_{\mu_{\tau}+1} = \exp(\beta F_{\sigma} + \beta F_h - \beta F_m) \prod_{k \neq 0}^{B_{\mu_{\tau}+1}} \left( \frac{\pi}{\bar{d}_{\mu_{\tau}+1}(k)} \right)^{1/2} \times \quad (4.2.14)$$

$$\times \int \exp \left( \sum_{l=1}^4 \tilde{A}_l \rho_0^l \right) d\rho_0,$$

у якому

$$-\beta F_m = \frac{1}{4!} N_{\mu_{\tau}+1} \left[ -3a_{\mu_{\tau}+1} \mathcal{I}_1^2 + 2b_{\mu_{\tau}+1}^2 \mathcal{I}_3 + \right. \quad (4.2.15)$$

$$\left. + \frac{1}{2} a_{\mu_{\tau}+1}^2 (\mathcal{I}_4 + 3\mathcal{I}_1^2 \mathcal{I}_2) \right].$$

Причому

$$\mathcal{I}_1 = \frac{1}{N_{\mu_{\tau}+1}} \sum_{k \neq 0}^{B_{\mu_{\tau}+1}} (\bar{d}_{\mu_{\tau}+1}(k))^{-1} = \frac{1}{2} \mathcal{L} |d_{\mu_{\tau}+1}(0)|^{-1}, \quad (4.2.16)$$

де

$$\mathcal{L} = 3(x_r - \operatorname{arctg} x_r) x_r^{-3}, \quad x_r = (2\bar{r}_{\mu_{\tau}+1}^{(0)})^{-1/2}, \quad (4.2.17)$$

а для  $\mathcal{I}_l$  при  $l > 1$  знаходимо

$$\mathcal{I}_l = \sum_{\mathbf{r}} g^l(\mathbf{r}). \quad (4.2.18)$$

Сумування здійснюється за вузлами простої кубічної ґратки [348], а

$$g(\mathbf{r}) = \frac{1}{N_{\mu_{\tau}+1}} \sum_{k \neq 0}^{B_{\mu_{\tau}+1}} (\bar{d}_{\mu_{\tau}+1}(k))^{-1} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (4.2.19)$$

Для коефіцієнтів  $\tilde{A}_l$  виразу (4.2.14) маємо:

$$\begin{aligned}\tilde{A}_1 &= \beta h \sqrt{N} + \frac{1}{2} \sqrt{N_{\mu_\tau+1}} \left[ -b_{\mu_\tau+1} \mathcal{I}_1 + \frac{1}{3} (\mathcal{I}_3 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{3}{2} \mathcal{I}_1 \mathcal{I}_2) b_{\mu_\tau+1} a_{\mu_\tau+1} \right], \\ \tilde{A}_2 &= -|d_{\mu_\tau+1}(0)| - \frac{1}{4} a_{\mu_\tau+1} \mathcal{I}_1 + \frac{1}{8} a_{\mu_\tau+1}^2 \mathcal{I}_1 \mathcal{I}_2 + \\ &\quad + \frac{1}{4} \left( b_{\mu_\tau+1}^2 \mathcal{I}_2 + \frac{1}{3} a_{\mu_\tau+1}^2 \mathcal{I}_3 \right), \\ \tilde{A}_3 &= -\frac{1}{6} b_{\mu_\tau+1} (N_{\mu_\tau+1})^{-1/2} \left( 1 - \frac{3}{2} a_{\mu_\tau+1} \mathcal{I}_2 \right), \\ \tilde{A}_4 &= -\frac{1}{4!} b_{\mu_\tau+1} (N_{\mu_\tau+1})^{-1} \left( 1 - \frac{3}{2} a_{\mu_\tau+1} \mathcal{I}_2 \right).\end{aligned}\tag{4.2.20}$$

Виконаємо в (4.2.14) заміну змінних

$$\rho_0 = \rho'_0 - (N_{\mu_\tau+1})^{1/2} \frac{b_{\mu_\tau+1}}{a_{\mu_\tau+1}}.$$

У результаті знаходимо

$$\begin{aligned}Z_{\mu_\tau+1} &= \exp(-\beta F'_{\mu_\tau+1}) \int \exp \left( \beta h \sqrt{N} \rho_0 + \right. \\ &\quad \left. + \tilde{B} \rho_0^2 - \frac{1}{N} G \rho_0^4 \right) d\rho_0.\end{aligned}\tag{4.2.21}$$

Вираз

$$\begin{aligned}-\beta F'_{\mu_\tau+1} &= N_{\mu_\tau+1} \left[ \frac{3}{2} |d_{\mu_\tau+1}(0)| \mathcal{I}_1 + \frac{9}{4} |d_{\mu_\tau+1}(0)|^2 \mathcal{I}_2 - \right. \\ &\quad - \frac{1}{8} a_{\mu_\tau+1} \mathcal{I}_1^2 + \frac{1}{48} a_{\mu_\tau+1}^2 (\mathcal{I}_4 + 3 \mathcal{I}_1^2 \mathcal{I}_2) - \frac{1}{8} b_{\mu_\tau+1} \mathcal{I}_1 \mathcal{I}_2 - \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \frac{1}{N_{\mu_\tau+1}} \sum'_{k \leq B_{\mu_\tau+1}} (\ln \bar{d}_{\mu_\tau+1}(k) - \ln \pi) \right]\end{aligned}\tag{4.2.22}$$

відповідає внеску довгохвильових флуктуацій у вільну енергію системи. Показник експоненти підінтегральної функції (4.2.21) фактично визначає розклад вільної енергії в ряд за степенями змінної  $\rho_0$ . Вираз

$$E(\rho_0) = -\beta h \sqrt{N} \rho_0 - \tilde{B} \rho_0^2 + \frac{1}{N} G \rho_0^4 \quad (4.2.23)$$

відповідає частині вільної енергії, яка пов'язана з параметром порядку. Він дає змогу знайти мікроскопічний аналог вільної енергії Ландау. Коефіцієнти  $\tilde{B}$  і  $G$  виражаються через  $\mathcal{I}_l, \tilde{A}_l$  і представляються у вигляді:

$$\begin{aligned} \tilde{B} &= \tilde{B}^{(0)} |\tau|^{2\nu} \beta \tilde{\Phi}(0) (1 + \tilde{B}^{(1)} |\tau|^\Delta + \tilde{B}^{(2)} |\tau|^{2\Delta} + \tilde{B}^{(3)} \tau), \\ G &= G^{(0)} |\tau|^\nu (\beta \tilde{\Phi}(0))^2 (1 + G^{(1)} |\tau|^\Delta + G^{(2)} |\tau|^{2\Delta} + G^{(3)} \tau). \end{aligned} \quad (4.2.24)$$

Вирази для незалежних від температури коефіцієнтів  $\tilde{B}^{(l)}$  і  $G^{(l)}$  подані в додатку Г, а їх числові значення при  $b = c$  у табл. 4.1. Приймаючи до уваги заміну змінних  $\rho_0 = \sqrt{N} \rho$ , застосуємо при обчисленні інтегралу в (4.2.21) метод перевалу. У результаті

Табл. 4.1. Величини  $\tilde{B}^{(l)}$  і  $G^{(l)}$ , які входять до виразу (4.2.23)

$s$	3	$s^*$	4	5
$\tilde{B}^{(0)}$	0.6676	0.6537	0.6377	0.5901
$\tilde{B}^{(1)}$	-0.5659	-0.6081	-0.6191	-0.6192
$\tilde{B}^{(2)}$	0.9689	0.9051	0.8520	0.7346
$\tilde{B}^{(3)}$	0.0155	0.0145	0.0139	0.0125
$\tilde{G}^{(0)}$	1.9801	2.3671	2.6218	3.1738
$\tilde{G}^{(1)}$	-1.8715	-1.6897	-1.5884	-1.4010
$\tilde{G}^{(2)}$	1.6333	1.3634	1.2220	0.9778
$\tilde{G}^{(3)}$	0.0077	0.0073	0.0069	0.0062

отримуємо

$$Z_{\mu_{\tau+1}} = \left( \frac{2\pi}{E_0''(\bar{\rho})} \right)^{1/2} \exp \left[ -\beta F'_{\mu_{\tau+1}} - N E_0(\bar{\rho}) \right]. \quad (4.2.25)$$

Тут  $\bar{\rho}$  точка екстремуму виразу

$$E_0(\rho) = G\rho^4 - \tilde{B}\rho^2 - \beta h\rho. \quad (4.2.26)$$

При  $h = 0$  для  $\bar{\rho}$  знаходимо

$$\bar{\rho}^2 = \frac{\tilde{B}}{2G}. \quad (4.2.27)$$

Підставляючи в останнє рівняння співвідношення (4.2.24), отримуємо

$$\bar{\rho} = \bar{\rho}_0 |\tau|^\beta (1 + \bar{\rho}_1 |\tau|^\Delta + \bar{\rho}_2 |\tau|^{2\Delta} + \bar{\rho}_3 \tau), \quad (4.2.28)$$

де  $\beta = \frac{1}{2}\nu$ ,

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_0 &= \left( \frac{\tilde{B}^{(0)}}{2G^{(0)}\beta_c\tilde{\Phi}(0)} \right)^{1/2}, \quad \bar{\rho}_1 = \frac{1}{2}(\tilde{B}^{(1)} - G^{(1)}), \\ \bar{\rho}_2 &= \frac{1}{2} \left[ \tilde{B}^{(2)} - G^{(2)} - \frac{1}{2}\tilde{B}^{(1)}G^{(1)} - \frac{1}{4}(\tilde{B}^{(1)})^2 + \frac{3}{4}(G^{(1)})^2 \right], \\ \bar{\rho}_3 &= \frac{1}{2} \left( \tilde{B}^{(3)} - G^{(3)} + 1 \right). \end{aligned} \quad (4.2.29)$$

Отже, одержано значення  $\bar{\rho}$ , при якому досягається екстремум підінтегральної функції у виразі (4.2.21) і знайдена його температурна залежність в області  $T < T_c$ . Величина  $\bar{\rho}$  (4.2.28) відповідає рівноважному значенню параметра порядку, роль якого для досліджуваної моделі відіграє середній спіновий момент [349]. Коефіцієнти, що входять у (4.2.28), подані в табл. 4.2. Наведені вище дослідження відкривають шлях до обчислення вільної енергії (використовуючи (4.2.25)) та інших термодинамічних функцій системи в низькотемпературній області.

Табл. 4.2. Коефіцієнти виразу для величини  $\bar{\rho}$  (4.2.28) при  $b = c$ 

$s$	3	$s^*$	4	5
$\bar{\rho}_0$	0.3947	0.3526	0.3278	0.2796
$\bar{\rho}_1$	0.6528	0.5408	0.4846	0.3909
$\bar{\rho}_2$	0.6764	0.5384	0.4674	0.3497
$\bar{\rho}_3$	0.5039	0.5036	0.5035	0.5031

### 4.3. Вільна енергія в області критичного режиму

Розрахунок вільної енергії в низькотемпературній області проведимо за схемою, яка запропонована в попередньому розділі. По аналогії з випадком  $T > T_c$ , виділимо в системі два різних за своєю природою флуктуаційних процеси: критичний режим – для значень  $n \leq \mu_\tau$  та інверсний гаусовий режим – при  $n > \mu_\tau$ . Вільну енергію при  $T < T_c$  представимо у вигляді

$$F = F_0 + F_{\text{КР}} + F_{\text{ІР}}. \quad (4.3.1)$$

Тут  $F_0$  – вільна енергія невзаємодіючих спінів (3.1.2),  $F_{\text{КР}}$  є внеском у вільну енергію від короткохвильових флуктуацій і має вигляд

$$F_{\text{КР}} = -kTN' \left[ a'_0 + \ln Q(d) + \sum_{n=1}^{\mu_\tau} s^{-3n} f_n \right], \quad (4.3.2)$$

Величина  $Q(d)$  задана в (2.2.18),  $a'_0$  у (2.5.12), а вираз для  $f_n$  наведений в (3.1.14). Доданок  $F_{\text{ІР}}$  відповідає внескові у вільну енергію від довгохвильових флуктуацій і дорівнює

$$F_{\text{ІР}} = -kTN' s^{-3(\mu_\tau+1)} \ln \left[ \sqrt{2} Q(P_{\mu_\tau}) \right] - kT \ln Z_{\mu_\tau+1}. \quad (4.3.3)$$

Функціональна залежність  $Q(P_{\mu_\tau})$  задана в (2.3.13), а для  $Z_{\mu_\tau+1}$  маємо (4.2.1), (4.2.2), де як  $\mu_\tau$  використовується вираз (4.1.13).



Зазначимо, що

$$B_{\mu_\tau+1} = B' s^{-(\mu_\tau+1)}, \quad N_{\mu_\tau+1} = N' s^{-3(\mu_\tau+1)}, \quad (4.3.4)$$

де

$$B' = B/s_0, \quad N' = N \cdot s_0^{-3}. \quad (4.3.5)$$

Зупинимось на обчисленні внеску негаусових флуктуацій у вільну енергію. Оскільки спосіб цього обчислення аналогічний до випадку  $T > T_c$ , подамо тільки головні його моменти і звернемо увагу на відмінності в обчисленнях для температур  $T < T_c$  від розрахунків, виконаних у § 3.1 та § 3.2 (для випадку  $T > T_c$ ).

Виконаємо в (4.3.2) сумування за першими номерами блочних структур  $\mu_\tau$ . Для цього виділимо в  $f_n$  явну залежність від номера шару  $n$ . Використовуючи методику, описану в розділі 3, знаходимо

$$F_{\text{КР}} = -kTN' [\gamma'_{01} + \gamma_1\tau + \gamma_2\tau^2] + kTN' s^{-3(\mu_\tau+1)} [\gamma' + \gamma^{(1)}|\tau|^\Delta + \gamma^{(2)}|\tau|^{2\Delta}]. \quad (4.3.6)$$

Вирази для  $\gamma'_{01}$ ,  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  наведені в (3.1.31). Вони однакові для температур вищих і нижчих від критичної. Для решти коефіцієнтів виразу (4.3.6) знаходимо:

$$\begin{aligned} \gamma' &= \frac{f_{\text{КР}}^{(0)}}{1-s^{-3}} - \frac{d_1 f_0}{1-E_1 s^{-3}} + \frac{d_3 f_0^2}{1-E_1^2 s^{-3}}, \\ \gamma^{(1)} &= c_\Delta (\gamma'_\Delta - \Phi_0 \gamma'_{11}), \\ \gamma^{(2)} &= c_\Delta^2 [\gamma'_{2\Delta} - \Phi_0 \gamma'_{21} + \Phi_0^2 (\gamma'_{22} + \Delta \gamma'_{11})]. \end{aligned} \quad (4.3.7)$$

Вираз для  $f_{\text{КР}}^{(0)}$  наведений в (3.1.24), а для коефіцієнтів  $d_l$  маємо

співвідношення (3.1.27),

$$\begin{aligned}
 \gamma'_{\Delta} &= \frac{d_2}{1 - E_2 s^{-3}} - \frac{d_5 f_0}{1 - E_1 E_2 s^{-3}} + \frac{d_6 f_0^2}{1 - E_1^2 E_2 s^{-3}}, \\
 \gamma'_{11} &= \frac{d_1 f_0}{1 - E_1 s^{-3}} - \frac{2d_3 f_0^2}{1 - E_1^2 s^{-3}}, \\
 \gamma'_{2\Delta} &= \frac{d_4}{1 - E_2^2 s^{-3}} - \frac{d_7 f_0}{1 - E_1 E_2^2 s^{-3}} + \frac{d_8 f_0^2}{1 - E_1^2 E_2^2 s^{-2}}, \\
 \gamma'_{21} &= \frac{d_2 \Delta}{1 - E_2 s^{-3}} + \frac{d_5 f_0 (1 - \Delta)}{1 - E_1 E_2 s^{-3}} - 2 \left(1 - \frac{\Delta}{2}\right) \frac{d_6 f_0^2}{1 - E_1^2 E_2 s^{-3}}, \\
 \gamma'_{22} &= \frac{d_3 f_0}{1 - E_1^2 s^{-3}} = \gamma_{22}^+.
 \end{aligned} \tag{4.3.8}$$

Коефіцієнт  $\gamma'$  із (4.3.7) та величини (4.3.8) не залежать від мікроскопічних параметрів системи і є сталими (див. табл. 4.3).

Виділимо температурну залежність у множнику  $s^{-3(\mu_{\tau}+1)}$ . Використовуючи (4.1.13), знаходимо

$$s^{-3(\mu_{\tau}+1)} = c_{\nu}^3 |\tau|^{3\nu} (1 + \kappa_1^- |\tau|^{\Delta} + \kappa_2^- |\tau|^{2\Delta} + \kappa_3^- \tau), \tag{4.3.9}$$

Табл. 4.3. Коефіцієнти, що визначають сингулярну частину вільної енергії КР при  $T < T_c$

$s$	3	$s^*$	4	5
$\gamma'$	1.5619	1.7435	1.8214	1.8296
$\gamma'_{\Delta}$	-0.2115	-0.2720	-0.2966	-0.3245
$\gamma'_{11}$	-0.0148	0.2020	0.4236	1.2337
$\gamma'_{2\Delta}$	1.0936	0.7860	0.6536	0.4579
$\gamma'_{21}$	0.9269	0.9752	0.9866	0.9784
$\gamma'_{22}$	-0.2399	-0.4188	-0.5776	-1.0942

де  $c_\nu = (c_{1k}/f_0)^\nu$ , а коефіцієнти

$$\begin{aligned}\kappa_1^- &= -c_\Delta 3\nu \Phi_0 = -\kappa_1^+, \\ \kappa_2^- &= c_\Delta^2 3\nu \left( \frac{1}{2}(3\nu + 1) + \Delta \right) \Phi_0^2 = \kappa_2^+, \\ \kappa_3^- &= 3\nu \frac{c_{1k1}}{c_{1k}} = \kappa_3^+\end{aligned}\quad (4.3.10)$$

такі ж, що й при температурах вищих від критичної (див. (3.2.8)). Вони є функціями відношення радіуса дії потенціалу  $b$  до постійної ґратки  $c$ .

Для вільної енергії КР при  $T < T_c$  отримуємо вираз:

$$\begin{aligned}F_{\text{КР}} &= -kTN' \left[ \gamma'_{01} + \gamma_1 \tau + \gamma_2 \tau^2 - \gamma_{10}^{(0)'} |\tau|^{3\nu} \right] + \\ &+ kTN' |\tau|^{3\nu} \left[ \sum_{l=0}^2 \gamma_{10}^{(l)'} |\tau|^{l\Delta} + \gamma'_{10} \tau \right].\end{aligned}\quad (4.3.11)$$

Тут

$$\begin{aligned}\gamma_{10}^{(0)'} &= c_\nu^3 \gamma', \quad \gamma_{10}^{(1)'} = c_\nu^3 c_\Delta \bar{\gamma}_{10}^{(1)'}, \\ \gamma_{10}^{(2)'} &= c_\nu^3 c_\Delta^2 \bar{\gamma}_{10}^{(2)'}, \quad \gamma'_{10} = c_\nu^3 \frac{c_{1k1}}{c_{1k}} \bar{\gamma}'_{10},\end{aligned}\quad (4.3.12)$$

де коефіцієнти

$$\begin{aligned}\bar{\gamma}_{10}^{(1)'} &= \gamma'_\Delta - \Phi_0(\gamma'_{11} + 3\nu\gamma'), \\ \bar{\gamma}_{10}^{(2)'} &= \gamma'_{2\Delta} - \Phi_0(\gamma'_{21} + 3\nu\gamma'_\Delta) + \\ &+ \Phi_0^2 \left[ \gamma'_{22} + (3\nu + \Delta)\gamma'_{11} + 3\nu\gamma' \left( \frac{(3\nu + 1)}{2} + \Delta \right) \right], \\ \bar{\gamma}'_{10} &= 3\nu\gamma'\end{aligned}\quad (4.3.13)$$

не залежать від мікроскопічних параметрів системи.

Вираз (4.3.11) містить як аналітичні доданки за температурою, так і пропорційні до  $|\tau|^{3\nu}$  і до  $|\tau|^{3\nu+l\Delta}$ . Перші з цих неаналітичних доданків приводять до основної розбіжності теплоємності при наближенні до критичної температури, другі – описують поправки до скейлінгу.

#### 4.4. Врахування довгохвильових флуктуацій при обчисленні термодинамічних функцій

Обчислимо внесок у вільну енергію системи від довгохвильових мод густини спінового моменту. Для цього дослідимо вираз (4.3.3) для  $F_{\text{ІГР}}$  із (4.3.1). Розглянемо спочатку вираз для  $Q(P_{\mu\tau})$ , який відповідно до (2.3.13) має вигляд

$$Q(P_{\mu\tau}) = \left( \frac{s^3 u_{\mu\tau} s^{-4\mu\tau}}{4\pi^2 \varphi(x_{\mu\tau})} \right)^{1/4} \exp\left(\frac{y_{\mu\tau}^2}{4}\right) U(0, y_{\mu\tau}). \quad (4.4.1)$$

Приймаючи до уваги розв'язки РС із (2.6.20) і визначаючи точку виходу системи із КР відповідно до (4.1.13), одержуємо:

$$\begin{aligned} r_{\mu\tau} &= -\beta \tilde{\Phi}(0) \left[ \bar{r}_{\mu\tau}^{(0)} - \bar{r}_{\mu\tau}^{(1)} |\tau|^\Delta + \bar{r}_{\mu\tau}^{(2)} |\tau|^{2\Delta} \right], \\ u_{\mu\tau} &= (\beta \tilde{\Phi}(0))^2 \left[ \bar{u}_{\mu\tau}^{(0)} + \bar{u}_{\mu\tau}^{(1)} |\tau|^\Delta - \bar{u}_{\mu\tau}^{(2)} |\tau|^{2\Delta} \right], \end{aligned} \quad (4.4.2)$$

де

$$\begin{aligned} \bar{r}_{\mu\tau}^{(0)} &= f_0(1 + E_1^{-1}), \quad \bar{r}_{\mu\tau}^{(1)} = \mu_2 f_0 \frac{E_1 - E_2}{E_1 E_2}, \\ \bar{r}_{\mu\tau}^{(2)} &= \mu_2 \bar{r}_{\mu\tau}^{(1)} \Delta, \quad \mu_2 = c_\Delta \Phi_0, \end{aligned} \quad (4.4.3)$$

а також

$$\begin{aligned} \bar{u}_{\mu\tau}^{(0)} &= \varphi_0 - f_0 \varphi_0^{1/2} R_1^{(0)} E_1^{-1}, \quad \bar{u}_{\mu\tau}^{(1)} = c_\Delta D R_{11} (E_1 E_2)^{-1}, \\ \bar{u}_{\mu\tau}^{(2)} &= c_\Delta^2 D \Delta \Phi_0 R_{11} (E_1 E_2)^{-1}. \end{aligned} \quad (4.4.4)$$

Величина  $D$  входить у коефіцієнти  $c_1$  та  $c_2$  (2.6.22) розв'язків РС і наведена в § 2.6. Для  $x_{\mu\tau}$  (див. (2.3.14)) знаходимо:

$$x_{\mu\tau} = x_{\mu\tau}^{(0)} \left( 1 + x_{\mu\tau}^{(1)} |\tau|^\Delta + x_{\mu\tau}^{(2)} |\tau|^{2\Delta} \right). \quad (4.4.5)$$

Тут

$$\begin{aligned}
 x_{\mu\tau}^{(0)} &= \sqrt{3} \frac{\bar{q} - \bar{r}_{\mu\tau}^{(0)}}{(\bar{u}_{\mu\tau}^{(0)})^{1/2}}, & x_{\mu\tau}^{(1)} &= \frac{\bar{r}_{\mu\tau}^{(1)}}{\bar{q} - \bar{r}_{\mu\tau}^{(0)}} - \frac{1}{2} \frac{\bar{u}_{\mu\tau}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu\tau}^{(0)}}, \\
 x_{\mu\tau}^{(2)} &= \frac{1}{2} \left( \frac{\bar{u}_{\mu\tau}^{(2)}}{\bar{u}_{\mu\tau}^{(0)}} - \frac{\bar{u}_{\mu\tau}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu\tau}^{(0)}} \frac{\bar{r}_{\mu\tau}^{(1)}}{\bar{q} - \bar{r}_{\mu\tau}^{(0)}} \right) + \frac{3}{8} \left( \frac{\bar{u}_{\mu\tau}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu\tau}^{(0)}} \right)^2 - \frac{\bar{r}_{\mu\tau}^{(2)}}{\bar{q} - \bar{r}_{\mu\tau}^{(0)}}.
 \end{aligned} \tag{4.4.6}$$

Аналогічний вираз отримуємо і для  $y_{\mu\tau}$ :

$$y_{\mu\tau} = y_{\mu\tau}^{(0)} \left( 1 + y_{\mu\tau}^{(1)} |\tau|^\Delta + y_{\mu\tau}^{(2)} |\tau|^{2\Delta} \right). \tag{4.4.7}$$

Тут

$$\begin{aligned}
 y_{\mu\tau}^{(0)} &= s^{3/2} U(x_{\mu\tau}^{(0)}) \left( \frac{3}{\varphi(x_{\mu\tau}^{(0)})} \right)^{1/2}, & y_{\mu\tau}^{(1)} &= r_1 x_{\mu\tau}^{(0)} x_{\mu\tau}^{(1)}, \\
 y_{\mu\tau}^{(2)} &= r_1 x_{\mu\tau}^{(0)} x_{\mu\tau}^{(2)} + r_2 (x_{\mu\tau}^{(0)} x_{\mu\tau}^{(1)})^2.
 \end{aligned} \tag{4.4.8}$$

Коефіцієнти  $r_1, r_2$ , наведені в додатку А, причому величини  $\partial_l$  та  $q_l$ , що входять у них, обчислюються в точці  $x = x_{\mu\tau}^{(0)}$ . Перший доданок правої частини рівності (4.3.3), з врахуванням наведених вище співвідношень, представляють у вигляді:

$$\begin{aligned}
 &kTN' s^{-3(\mu\tau+1)} \ln \left[ \sqrt{2} Q(P_{\mu\tau}) \right] = \\
 &= kTN' \left[ \gamma_g |\tau|^{3\nu} + s^{-3(\mu\tau+1)} \ln \left( s^{-(\mu\tau+1)} \sqrt{\beta \bar{\Phi}(0)} \right) \right].
 \end{aligned} \tag{4.4.9}$$

Величина  $\gamma_g$  має таку температурну залежність:

$$\gamma_g = \gamma_g^{(0)} + \gamma_g^{(1)} |\tau|^\Delta + \gamma_g^{(2)} |\tau|^{2\Delta} + \gamma_g^{(3)} \tau, \tag{4.4.10}$$

де для  $\gamma_g^{(0)}$  маємо

$$\begin{aligned}
 \gamma_g^{(0)} &= c_\nu^3 \tilde{\gamma}_g^{(0)}, \\
 \tilde{\gamma}_g^{(0)} &= \ln \left[ \left( \frac{s^7 \bar{u}_{\mu\tau}^{(0)}}{\pi^2 \varphi(x_{\mu\tau}^{(0)})} \right)^{1/4} \exp \left[ \frac{(y_{\mu\tau}^{(0)})^2}{4} \right] U(0, y_{\mu\tau}^{(0)}) \right].
 \end{aligned} \tag{4.4.11}$$

Для  $\gamma_g^{(1)}$  знаходимо

$$\begin{aligned}\gamma_g^{(1)} &= c_\nu^3 c_\Delta \bar{\gamma}_g^{(1)}, \quad \bar{\gamma}_g^{(1)} = \bar{\gamma}_{g1} - 3\nu\Phi_0\bar{\gamma}_g^{(0)}, \\ \bar{\gamma}_{g1} &= \frac{1}{4} \left[ \frac{\bar{u}_{\mu\tau}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu\tau}^{(0)}} - \bar{x}_{\mu\tau}^{(1)} x_{\mu\tau}^{(0)} \varphi_1(x_{\mu\tau}^{(0)}) \right],\end{aligned}\quad (4.4.12)$$

де

$$\bar{u}_{\mu\tau}^{(l)} = \bar{u}_{\mu\tau}^{(l)}(c_\Delta)^{-l}, \quad \bar{x}_{\mu\tau}^{(l)} = x_{\mu\tau}^{(l)}(c_\Delta)^{-l}.$$

Коефіцієнт  $\gamma_g^{(2)}$  має вигляд

$$\begin{aligned}\gamma_g^{(2)} &= c_\nu^3 c_\Delta^2 \bar{\gamma}_g^{(2)}, \\ \bar{\gamma}_g^{(2)} &= \bar{\gamma}_{g2} - 3\nu\Phi_0\bar{\gamma}_{g1} + 3\nu\Phi_0^2 \left( \frac{3\nu + 1}{2} + \Delta \right) \bar{\gamma}_g^{(0)}, \\ \bar{\gamma}_{g2} &= -\frac{1}{4} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\bar{u}_{\mu\tau}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu\tau}^{(0)}} \right)^2 + \frac{\bar{u}_{\mu\tau}^{(2)}}{\bar{u}_{\mu\tau}^{(0)}} + \bar{x}_{\mu\tau}^{(2)} x_{\mu\tau}^{(0)} \varphi_1(x_{\mu\tau}^{(0)}) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \left( \bar{x}_{\mu\tau}^{(1)} x_{\mu\tau}^{(0)} \right)^2 \varphi_2(x_{\mu\tau}^{(0)}) \right],\end{aligned}\quad (4.4.13)$$

а для  $\gamma_g^{(3)}$  маємо

$$\gamma_g^{(3)} = c_\nu^3 \frac{c_{1k1}}{c_{1k}} \bar{\gamma}_g^{(3)}, \quad \bar{\gamma}_g^{(3)} = 3\nu\bar{\gamma}_g^{(0)}. \quad (4.4.14)$$

Тут використано позначення:

$$\begin{aligned}\varphi_1(x_{\mu\tau}^{(0)}) &= \frac{\varphi'(x_{\mu\tau}^{(0)})}{\varphi(x_{\mu\tau}^{(0)})} + 2r_1 U(y_{\mu\tau}^{(0)}) y_{\mu\tau}^{(0)}, \\ \varphi_2(x_{\mu\tau}^{(0)}) &= \left( \frac{\varphi'(x_{\mu\tau}^{(0)})}{\varphi(x_{\mu\tau}^{(0)})} \right)^2 - \frac{\varphi''(x_{\mu\tau}^{(0)})}{\varphi(x_{\mu\tau}^{(0)})} - \\ &\quad - 4r_2 U(y_{\mu\tau}^{(0)}) y_{\mu\tau}^{(0)} - 2r_1^2 U'(y_{\mu\tau}^{(0)}) (y_{\mu\tau}^{(0)})^2.\end{aligned}$$

Функціональний вигляд похідних функцій  $U^{(n)}$ ,  $\varphi^{(n)}$  наведений в (А.2), (А.5), а  $r_l$  – коефіцієнти розкладу (А.7) для  $y_{\mu_\tau}$ .

Другий доданок у правій частині рівності (4.4.9) також є функцією температури. Однак як буде показано далі (див. §4.6), такий самий доданок, але з протилежним знаком, виникає при розрахунку  $kT \ln Z_{\mu_\tau+1}$ . У результаті вони компенсують один одного. Зазначимо проте, що доданки які скорочуються, привели б до появи у вільній енергії доданків типу  $|\tau|^{3\nu} \ln |\tau|$ , які порушили б однорідність вільної енергії. Така ситуація виникає, коли при обчисленні вільної енергії використовувати метод РГ (не приймаючи до уваги внесків від ІГР).

Процедура обчислення  $Z_{\mu_\tau+1}$  запропонована в §4.2. У результаті, для  $Z_{\mu_\tau+1}$  отримано вираз (4.2.25), у якому внесок до вільної енергії системи має два доданки:  $\beta F'_{\mu_\tau+1}$  і  $E_0(\bar{\rho})$ . Перший відповідає внескові від змінних  $\rho_k$  при  $k \rightarrow 0$ , однак  $k \neq 0$ , і приведений в (4.2.22). Другий доданок

$$E_0(\bar{\rho}) = -\beta h \bar{\rho} - \bar{B} \bar{\rho}^2 + G \bar{\rho}^4 \quad (4.4.15)$$

пов'язаний з внеском від параметра порядку. Це вільна енергія впорядкування. Оскільки, екстремальне значення  $\bar{\rho}$  задається виразом (4.2.27), а для  $\bar{B}$  і  $G$  справедливі співвідношення (4.2.24), то у випадку  $h = 0$  знаходимо

$$E_0(\bar{\rho}) = -E_0^{(0)} s^{-3(\mu_\tau+1)} \left( 1 + E_0^{(1)} |\tau|^\Delta + E_0^{(2)} |\tau|^{2\Delta} \right), \quad (4.4.16)$$

де

$$E_0^{(0)} = \frac{3 (\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2 (B_1^{(0)})^2}{2 \bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)} s_0^3 e_3}, \quad E_0^{(1)} = 2B_1^{(1)} - e_4, \quad (4.4.17)$$

$$E_0^{(2)} = \frac{3}{2} e_5 + e_4^2 - 2B_1^{(1)} e_4 + (B_1^{(1)})^2 + 2B_1^{(2)},$$

а для коефіцієнтів  $e_4$ ,  $e_5$  маємо:

$$e_4 = \frac{c_{\Delta} D \left( \frac{1}{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} - 3\alpha_2 \right)}{e_3},$$

$$e_5 = \frac{c_{\Delta}^2 D}{e_3} \left[ \frac{\alpha_2 D}{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} - 2\alpha_2 \Delta \Phi_0 + \frac{2\Delta \Phi_0}{3\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} \right].$$

Вирази для  $e_3$ ,  $\alpha_2$  подано в додатку Г. Коефіцієнти  $E_0^{(l)}$  подані в табл. 4.4 для різних значень мікроскопічного параметра  $b$  при  $s = 4$ .

Вільну енергію ІГР (4.3.3) запишемо у вигляді

$$F_{\text{ІГР}} = -kTN'|\tau|^{3\nu} \left[ \gamma_{\text{ІГР}}^{(0)} + \gamma_{\text{ІГР}}^{(1)}|\tau|^{\Delta} + \gamma_{\text{ІГР}}^{(2)}|\tau|^{2\Delta} + \gamma_{\text{ІГР}}^{(3)}\tau \right]. \quad (4.4.18)$$

Коефіцієнти  $\gamma_{\text{ІГР}}^{(l)}$  складаються з двох доданків

$$\gamma_{\text{ІГР}}^{(l)} = \gamma_{\mu_{\tau}}^{(l)} + \gamma_{(\sigma)}^{(l)}. \quad (4.4.19)$$

Перший з них  $\gamma_{\mu_{\tau}}^{(l)}$  зумовлений внеском до вільної енергії довгохвильових флуктуацій після виходу з КР (від змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$  з

Табл. 4.4. Коефіцієнти  $E_0^{(l)}$  виразу (4.4.16) для різних значень  $b$

$b$	$b_{min}$	$b_I$	$b_{II}$	$b_{III}$	$c$	$10c$
$E_0^{(0)}$	2.0414	0.9676	0.6035	0.5058	0.0233	0.0000
$E_0^{(1)}$	1.5612	1.6558	1.7214	1.7462	2.0142	2.0444
$E_0^{(2)}$	1.1700	1.3162	1.4224	1.4637	1.9474	2.0062



$k \leq B_{\mu_\tau+1}$ ), другий  $\gamma_{\langle\sigma\rangle}^{(l)}$  відповідає вільній енергії впорядкування. Коефіцієнти  $\gamma_{\mu_\tau}^{(l)}$  записуються у вигляді

$$\gamma_{\mu_\tau}^{(l)} = \gamma_g^{(l)} + \gamma_\rho^{(l)}, \quad (4.4.20)$$

де  $\gamma_g^{(l)}$  задані в (4.4.11)–(4.4.14), а  $\gamma_\rho^{(m)} = c_\nu^3 c_\Delta^m \bar{\gamma}_\rho^{(m)}$  ( $m = 0, 1, 2$ ),  $\bar{\gamma}_\rho^{(3)} = c_\nu^3 c_{1k1} \bar{\gamma}_\rho^{(3)} / c_{1k}$ . Універсальні величини  $\bar{\gamma}_\rho^{(l)}$  приведені нижче.

Розглянемо структуру коефіцієнтів виразу (4.4.18) при різних степенях  $\tau$ . Для  $\gamma_{\text{ІГР}}^{(0)}$  маємо

$$\gamma_{\text{ІГР}}^{(0)} = c_\nu^3 \bar{\gamma}_{\text{ІГР}}^{(0)}, \quad \bar{\gamma}_{\text{ІГР}}^{(0)} = \bar{\gamma}_g^{(0)} + \bar{\gamma}_\rho^{(0)} + \bar{\gamma}_{\langle\sigma\rangle}^{(0)}. \quad (4.4.21)$$

Тут  $c_\nu = (c_{1k}/f_0)^\nu$  – неуніверсальний множник,  $\bar{\gamma}_g^{(0)}$  – постійна із (4.4.11),

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}_\rho^{(0)} &= \frac{5}{12} \mathcal{L} + \frac{1}{3} - \frac{1}{2} \ln \left( \frac{1 + 2\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}{\pi} \right) - \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}{8} \times \\ &\times (\alpha_1^2 + 3\alpha_2 \mathcal{L}) + \frac{1}{48} (\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2 (\alpha_4 + 3\alpha_1^2 \alpha_2) + \frac{9}{4} (\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2 \alpha_2, \\ \bar{\gamma}_{\langle\sigma\rangle}^{(0)} &= s_0^3 E_0^{(0)}. \end{aligned} \quad (4.4.22)$$

Вирази для  $\alpha_i$  містяться в додатку Г. Коефіцієнт  $\gamma_{\text{ІГР}}^{(1)}$  пропорційний до  $c_\nu^3$  і має вигляд

$$\gamma_{\text{ІГР}}^{(1)} = c_\nu^3 c_\Delta \bar{\gamma}_{\text{ІГР}}^{(1)}, \quad \bar{\gamma}_{\text{ІГР}}^{(1)} = \bar{\gamma}_g^{(1)} + \bar{\gamma}_\rho^{(1)} + \bar{\gamma}_{\langle\sigma\rangle}^{(1)}. \quad (4.4.23)$$

Вираз для  $\bar{\gamma}_g^{(1)}$  наведено в (4.4.12),

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}_\rho^{(1)} &= \bar{\gamma}_{\rho 1}^{(1)} - 3\nu \Phi_0 \bar{\gamma}_\rho^{(0)}, \quad \bar{\gamma}_{\rho 1}^{(1)} = -\frac{1}{8} \bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(1)} \times \\ &\times (\alpha_1^2 + 3\alpha_2 \mathcal{L}) + \frac{1}{4!} \bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)} (\alpha_4 + 3\alpha_1^2 \alpha_2), \\ \bar{\gamma}_{\langle\sigma\rangle}^{(1)} &= E_0^{(0)} s_0^3 (\bar{E}_0^{(1)} - 3\nu \Phi_0). \end{aligned} \quad (4.4.24)$$

Для коефіцієнта  $\gamma_{\Gamma\Gamma}^{(2)}$  маємо

$$\gamma_{\Gamma\Gamma}^{(2)} = c_\nu^3 c_\Delta^2 \bar{\gamma}_{\Gamma\Gamma}^{(2)}, \quad \bar{\gamma}_{\Gamma\Gamma}^{(2)} = \bar{\gamma}_g^{(2)} + \bar{\gamma}_\rho^{(2)} + \bar{\gamma}_{\langle\sigma\rangle}^{(2)}. \quad (4.4.25)$$

Тут  $\bar{\gamma}_g^{(2)}$  визначено в (4.4.13),

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}_\rho^{(2)} &= \bar{\gamma}_{\rho 2}^{(1)} - 3\nu\Phi_0\bar{\gamma}_{\rho 1}^{(2)} + 3\nu\Phi_0^2\left(\frac{3\nu+1}{2} + \Delta\right)\bar{\gamma}_\rho^{(0)}, \\ \bar{\gamma}_{\rho 2}^{(2)} &= \frac{1}{8}\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(2)}(\alpha_1^2 + 3\alpha_2\mathcal{L}) + \frac{1}{48}(\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2 \times \\ &\times \left[ \left(\frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}\right)^2 - 2\frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(2)}}{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \right] (\alpha_4 + 3\alpha_1^2\alpha_2), \\ \bar{\gamma}_{\langle\sigma\rangle}^{(2)} &= E_0^{(0)}s_0^3\left[\bar{E}_0^{(2)} - 3\nu\Phi_0\bar{E}_0^{(1)} + 3\nu\Phi_0^2\left(\frac{3\nu+1}{2} + \Delta\right)\right]. \end{aligned} \quad (4.4.26)$$

Величини  $\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(l)}$ ,  $\bar{E}_0^{(l)}$  отримують виключенням множників  $c_\Delta^l$  із  $\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(l)}$ ,  $E_0^{(l)}$  (див. (4.4.4), (4.4.17)). Коефіцієнт  $\gamma_{\Gamma\Gamma}^{(3)}$  із (4.4.18) має таку структуру

$$\gamma_{\Gamma\Gamma}^{(3)} = c_\nu^3 \frac{c_{1k1}}{c_{1k}} \bar{\gamma}_{\Gamma\Gamma}^{(3)}, \quad \bar{\gamma}_{\Gamma\Gamma}^{(3)} = \bar{\gamma}_g^{(3)} + \bar{\gamma}_\rho^{(3)} + \bar{\gamma}_{\langle\sigma\rangle}^{(3)}, \quad (4.4.27)$$

де

$$\bar{\gamma}_\rho^{(3)} = 3\nu\bar{\gamma}_\rho^{(0)}, \quad \bar{\gamma}_{\langle\sigma\rangle}^{(3)} = 3\nu\bar{\gamma}_{\langle\sigma\rangle}^{(0)}. \quad (4.4.28)$$

Отже, після виділення із коефіцієнтів  $\gamma_{\Gamma\Gamma}^{(l)}$  неуніверсальних факторів  $c_\nu^3 c_\Delta^l$ ,  $c_\nu^3 c_{1k1}/c_{1k}$  отримуємо величини  $\bar{\gamma}_{\Gamma\Gamma}^{(l)}$ , які не залежать від мікроскопічних параметрів гамільтоніану. Коефіцієнти  $\gamma_{\Gamma\Gamma}^{(l)}$  для ряду значень параметра  $\Gamma$  з подані в табл. 4.5.

Табл. 4.5. Коефіцієнти довгохвильової частини вільної енергії при  $T < T_c$  і  $b = c$ 

$s$	3	$s^*$	4	5
$\gamma_{\text{ГР}}^{(0)}$	9.7576	7.2791	6.0323	4.0119
$\gamma_{\text{ГР}}^{(1)}$	-5.8318	-3.9803	-3.1618	-1.9531
$\gamma_{\text{ГР}}^{(2)}$	28.5794	16.3232	11.5975	5.7200
$\gamma_{\text{ГР}}^{(0)}$	0.2266	0.1586	0.1256	0.0750

#### 4.5. Термодинамічні функції системи. Порівняння з випадком $T > T_c$

Знайдемо вираз для повної вільної енергії системи при  $T < T_c$ . Тут, як і в розділі 3, використовують наближення четвірного базисного розподілу. Відповідно до (4.3.1), вільна енергія системи в області температур нижчих від  $T_c$  зображається у вигляді трьох доданків. Перший з них описує вільну енергію невзаємодіючих спінів  $F_0$  і наведений у (3.1.2). Наступний доданок відповідає внескові до вільної енергії від короткохвильових флуктуацій  $F_{\text{КР}}$  і розраховується сумуванням парціальних вільних енергій окремих блочних структур (див. (4.3.2)). Він має вигляд (4.3.11). Вираз для  $F_{\text{ГР}}$ , тобто довгохвильова частина вільної енергії та внесок від впорядкування розрахований у (4.4.18). Особливістю вільної енергії системи при  $T < T_c$  є наявність внеску від впорядкування спінів. Саме ця обставина приводить до якісної відмінності виразу для вільної енергії при  $T < T_c$  від виразу при  $T > T_c$ . Отже, вільна енергія системи для нижчих від  $T_c$  температур за відсутності зовнішнього поля записується у вигляді:

$$F = -kTN' [\gamma_0 + \gamma_1\tau + \gamma_2\tau^2 + |\tau|^{3\nu} \times \\ \times (\gamma_{30}^- + \gamma_{31}^-|\tau|^\Delta + \gamma_{32}^-|\tau|^{2\Delta} + \gamma_{33}^-\tau)], \quad (4.5.1)$$

де коефіцієнти  $\gamma_l$  ( $l = 0, 1, 2$ ) приймають ті ж значення, що і при  $T > T_c$  (див. (3.1.31), (3.1.48)), а для  $\gamma_{3l}^-$  маємо

$$\gamma_{3l}^- = \gamma_{\text{ГР}}^{(l)} - \gamma_{10}^{(l)'}, \quad (4.5.2)$$

де  $\gamma_{10}^{(3)'} = \gamma_{10}'$  із (4.3.12). Використовуючи співвідношення (4.3.12), (4.3.13) та (4.4.19)–(4.4.28), виділимо в коефіцієнтах  $\gamma_{3l}^-$  універсальну частину. Для  $\gamma_{30}^-$  згідно до (4.3.12), (4.4.21) маємо

$$\gamma_{30}^- = c_\nu^3 \bar{\gamma}_{30}^-, \quad \bar{\gamma}_{30}^- = \bar{\gamma}_{\text{ГР}}^{(0)} - \gamma'. \quad (4.5.3)$$

Для  $\gamma_{3l}^-$  при  $l = 1, 2$  з врахуванням (4.3.12) та (4.4.23), (4.4.25) знаходимо

$$\gamma_{3l}^- = c_\nu^3 c_\Delta^l \bar{\gamma}_{3l}^-, \quad \bar{\gamma}_{3l}^- = \bar{\gamma}_{\text{ГР}}^{(l)} - \bar{\gamma}_{10}^{(l)'}. \quad (4.5.4)$$

Аналогічно для  $\bar{\gamma}_{33}^-$  маємо

$$\bar{\gamma}_{33}^- = c_\nu^3 \frac{c_{1k1}}{c_{1k}} \bar{\gamma}_{33}^-, \quad \bar{\gamma}_{33}^- = 3\nu \bar{\gamma}_{30}^-. \quad (4.5.5)$$

Значення неуніверсальних факторів  $c_\nu$ ,  $c_\Delta$  та їхніх комбінацій подано в табл. 3.12. Універсальні частини коефіцієнтів (4.5.2) – в табл. 4.6.

Табл. 4.6. Універсальні частини коефіцієнтів вільної енергії (4.5.1) при  $T < T_c$

$s$	3	$s^*$	4	5
$\bar{\gamma}_{30}^-$	1.1065	1.5061	1.7998	2.5932
$\bar{\gamma}_{31}^-$	-1.9774	-1.5692	-1.3486	-0.9724
$\bar{\gamma}_{32}^-$	1.5475	0.9512	0.6688	0.2851
$\bar{\gamma}_{33}^-$	1.9649	2.7336	3.3060	4.8676

Одержаний вираз для вільної енергії при нижчих від  $T_c$  температурах за своєю структурою нагадує аналогічний вираз при  $T > T_c$ . Різниця між (4.5.1) та (3.2.40) у тому, що коефіцієнти  $\gamma_{3l}^{\pm}$  набувають різних значень при  $T > T_c$  та при  $T < T_c$ , однак вирази для термодинамічних функцій для нижчих від  $T_c$  температур матимуть таку ж структуру, як і за  $T > T_c$ .

Ентропія системи нижче від точки фазового переходу має вигляд

$$S = kN' [S_0 + S_1\tau + \tau (S'_{30}|\tau|^{-\alpha} + S'_{40}|\tau|^{\Delta-\alpha} + S'_{41}|\tau|^{2\Delta-\alpha}) + S'_{31}|\tau|^{2-\alpha}], \quad (4.5.6)$$

де коефіцієнти  $S_0$  та  $S_1$  визначені в (3.3.3),

$$\begin{aligned} S'_{30} &= 3\nu\gamma_{30}^-, & S'_{31} &= \left(1 + 3\nu\frac{c_{1k1}}{c_{1k}}\right) (3\nu + 1)\gamma_{30}^-, \\ S'_{40} &= (3\nu + \Delta)\gamma_{31}^-, & S'_{41} &= (3\nu + 2\Delta)\gamma_{32}^-. \end{aligned} \quad (4.5.7)$$

Як бачимо, коефіцієнти  $S'_{kl}$  залежать від мікроскопічних параметрів системи і задаються співвідношеннями, аналогічними до випадку  $T > T_c$  (3.3.3). Для  $s = 4$  їхні значення подані в табл. 4.7. На рис. 3.2 кривою 1' зображена температурна залежність

Табл. 4.7. Залежність коефіцієнтів ентропії та внутрішньої енергії системи від відношення радіуса дії потенціалу  $b$  до постійної ґратки  $c$

$b$	$b_{min}$	$b_I$	$b_{II}$	$b_{III}$	$c$	$10c$
$S'_{30}$	7.1495	6.8144	6.5802	6.4911	5.5072	5.3932
$S'_{31}$	13.9275	12.8356	12.0786	11.7920	8.6824	8.3295
$S'_{40}$	4.7780	4.8301	4.8488	4.8520	4.7483	4.7198
$S'_{41}$	2.0296	2.1760	2.2709	2.3052	2.6020	2.6252
$U'_{31}$	10.0353	9.1259	8.4963	8.2582	5.6842	5.3934

ентропії  $S/kN$  при  $s = s^*$  та  $b = c$  для від'ємних значень  $\tau$ . Як видно, додатність теплоємності забезпечується здебільшого внеском від незваємодіючої системи. Характер температурної залежності ентропії повністю формується сумарним внеском від довгохвильових фаз флуктуацій (крива 4') та від впорядкування в системі (крива 5'), тобто внеском від ПР (крива 3'). Зауважимо, що внесок в ентропію від упорядкування більший за модулем від внеску всіх змінних  $\rho_k$  з області  $0 < k \leq B_{\mu\tau+1}$  (крива 4'). Внесок від КР (РГ симетрія) на рис. 3.2 представлений кривою 2'. Він наглядно демонструє твердження §3.3 про недостатність використання лише методу РГ при розрахунку термодинамічних характеристик в околі точки фазового переходу.

Внутрішня енергія системи при температурах  $T < T_c$  має вигляд:

$$U = kTN' [U_0 + U_1\tau + \tau (U_{30}|\tau|^{-\alpha} + U'_{40}|\tau|^{\Delta-\alpha} + U'_{41}|\tau|^{2\Delta-\alpha}) + U'_{31}|\tau|^{2-\alpha}], \quad (4.5.8)$$

де  $U_0$  та  $U_1$  визначені в (3.3.5),

$$U'_{30} = S'_{30}, \quad U'_{40} = S'_{40}, \quad U'_{41} = S'_{41}, \quad (4.5.9)$$

а для  $U'_{31}$  маємо (див. табл. 4.7)

$$U'_{31} = \left(1 + (3\nu + 1) \frac{c_{1k1}}{c_{1k}}\right) 3\nu\gamma_{30}^-. \quad (4.5.10)$$

Теплоємність системи одна з найнаглядніших характеристик фазового переходу другого роду. Вище від температури фазового переходу такі розрахунки були виконані в §3.3. Для температур нижчих від критичної, теплоємність системи записуємо:

$$C = kN' [C_0 + C'_{30}|\tau|^{-\alpha} + C'_{31}\tau|\tau|^{-\alpha} + C'_{40}|\tau|^{\Delta-\alpha} + C'_{41}|\tau|^{2\Delta-\alpha}]. \quad (4.5.11)$$

Тут величина  $C_0$  така ж, як і в (3.3.7). Вона від'ємна для всіх

відношень  $b/c$ . Для решти коефіцієнтів (4.5.11) маємо

$$\begin{aligned} C'_{30} &= c_\nu^3 3\nu(3\nu - 1)\bar{\gamma}_{30}^-, \\ C'_{31} &= c_\nu^3 9\nu^2 \left[ 2 + (3\nu + 1) \frac{c_{1k1}}{c_{1k}} \right] \bar{\gamma}_{30}^-, \\ C'_{40} &= c_\nu^3 c_\Delta (3\nu + \Delta - 1)(3\nu + \Delta)\bar{\gamma}_{31}^-, \\ C'_{41} &= c_\nu^3 c_\Delta^2 (3\nu + 2\Delta - 1)(3\nu + 2\Delta)\bar{\gamma}_{32}^-. \end{aligned} \quad (4.5.12)$$

Ці коефіцієнти залежать як від параметра РГ  $s$ , так і від мікроскопічних параметрів гамільтоніану. Залежність від  $s$  (див. табл. 4.8) є наслідком наближень, що виконувалися при розрахунку статистичної суми системи. Як покажемо нижче (розділ 6), кожній моделі  $\rho^{2m}$  відповідає свій оптимальний параметр  $s$ . Поведінка теплоємності системи  $C/kN$  у низькотемпературній області із зміною  $\tau$  зображена на рис. 3.3. Кількісну оцінку внесків у теплоємність системи (4.5.11) від окремих доданків при  $s = 3$  і  $b = c$  подано в табл. 3.15.

Табл. 4.8. Коефіцієнти виразу для теплоємності (4.5.11) при  $b = c$

$s$	3	$s^*$	4	5
$C'_{30}$	5.5734	4.9908	4.6089	3.8728
$C'_{31}$	25.9794	22.6035	20.5574	16.8142
$C'_{40}$	13.9393	8.4456	6.1400	3.0978
$C'_{41}$	12.4820	6.9249	4.5518	1.6553

Запишемо теплоємність у такому вигляді:

$$\begin{aligned} \frac{C}{kN'} &= B^\pm + \frac{A^\pm}{\alpha} |\tau|^{-\alpha} \left[ 1 + \alpha a_{c1}^\pm |\tau|^\Delta + \right. \\ &\quad \left. + \alpha a_{c2}^\pm |\tau|^{2\Delta} + \alpha a_{c3}^\pm \tau \right]. \end{aligned} \quad (4.5.13)$$

Верхній знак (знак "+") відповідає виразу (3.4.9), тобто високотемпературній області, а нижній знак (знак "-") відповідає ви-

падку  $T < T_c$ . Тут введені позначення

$$\begin{aligned} B^- &= C_0, & B^- &= B^+ = B, \\ A^- &= \alpha C'_{30}, & a_{c1}^- &= \frac{C'_{40}}{\alpha C'_{30}}, \\ a_{c2}^- &= \frac{C'_{41}}{\alpha C'_{30}}, & a_{c3}^- &= \frac{C'_{31}}{\alpha C'_{30}} = a_{c3}^+. \end{aligned} \quad (4.5.14)$$

У табл. 4.9 приведено коефіцієнти теплоємності в залежності від мікроскопічних параметрів гамільтоніану при  $s = 4$ . Легко бачити, що як для температур вищих від критичної, так і при  $T < T_c$  структура коефіцієнтів (4.5.13) однакова.

Табл. 4.9. Залежність коефіцієнтів теплоємності (4.5.13) при  $T < T_c$  від радіуса дії експонентно спадного потенціалу (для  $B^-$ ,  $a_{c3}^-$  див. табл. 3.14).

$b$	$b_{min}$	$b_I$	$b_{II}$	$b_{III}$	$c$	$10c$
$A^-$	0.9760	0.9303	0.8983	0.8861	0.7518	0.7363
$a_{c1}^-$	6.3304	6.7140	6.9798	7.0804	8.1669	8.2894
$a_{c2}^-$	3.6376	4.0919	4.4223	4.5506	6.0544	6.2374

Врахування співвідношення  $N' = N(\pi\sqrt{2\frac{b}{c}})^{-3}$  у (4.5.13) приводить до нормованого виразу для  $C/kN$ . Розглянемо структуру коефіцієнтів цього виразу в плані універсальності. Для вільного члена маємо вираз:

$$B = \frac{\gamma_1 + \gamma_2}{\pi^3\sqrt{2}} \left(\frac{c}{b}\right)^3. \quad (4.5.15)$$

Основна залежність від мікроскопічних параметрів тут виділена, хоча  $\gamma_1$  та  $\gamma_2$  також мають (порівняно слабку) залежність від  $b/c$ . Для випадку, що відповідає взаємодії найближчих сусідів



( $b = b_I = \frac{c}{2\sqrt{3}}$ ), маємо

$$B = \frac{24\sqrt{3}}{\pi^3\sqrt{2}}(\gamma_1 + \gamma_2). \quad (4.5.16)$$

Беручи до уваги дані табл. 3.11 при  $s = 4$ , знаходимо число

$$B = -1.26, \quad (4.5.17)$$

яке узгоджується із  $B = -1.23$ , наведеним у праці [116]. Що до критичної амплітуди основного доданку  $A^\pm$ , то згідно з (3.4.10), (4.5.14) маємо:

$$A^\pm = a_\nu A_0^\pm, \quad (4.5.18)$$

де  $a_\nu$  – неуніверсальний, а  $A_0^\pm$  – універсальний множник:

$$a_\nu = c_\nu^3 \left(\frac{c}{b}\right)^3, \quad A_0^\pm = 3\nu\alpha(3\nu - 1)(\pi\sqrt{2})^{-3}\bar{\gamma}_{30}^\pm.$$

Неуніверсальний множник  $a_\nu$  однаковий для температур вищих та нижчих від критичної. Тому відношення  $A^+/A^-$  буде універсальною величиною, яка не залежить від мікроскопіки системи. Те саме можна сказати про відношення коефіцієнтів біля конфлуентних поправок. Справді,

$$a_{c1}^\pm = \frac{c_\Delta}{\alpha} \frac{(3\nu + \Delta)(3\nu + \Delta - 1)}{3\nu(3\nu - 1)} \frac{\bar{\gamma}_{31}^\pm}{\bar{\gamma}_{30}^\pm}. \quad (4.5.19)$$

Відношення  $a_{c1}^+/a_{c1}^-$  – універсальна величина, яка дорівнює:

$$\frac{a_{c1}^+}{a_{c1}^-} = \frac{\bar{\gamma}_{31}^+\bar{\gamma}_{30}^-}{\bar{\gamma}_{31}^-\bar{\gamma}_{30}^+}. \quad (4.5.20)$$

Подібна ситуація виникає при розрахунку коефіцієнта біля множника  $|\tau|^{2\Delta}$  у виразі (4.5.13) :

$$a_{c2}^\pm = \frac{c_\Delta^2}{\alpha} \frac{(3\nu + 2\Delta)(3\nu + 2\Delta - 1)}{3\nu(3\nu - 1)} \frac{\bar{\gamma}_{32}^\pm}{\bar{\gamma}_{30}^\pm}. \quad (4.5.21)$$

Тут маємо універсальну величину:

$$\frac{a_{c2}^+}{a_{c2}^-} = \frac{\bar{\gamma}_{32}^+ \bar{\gamma}_{30}^-}{\bar{\gamma}_{32}^- \bar{\gamma}_{30}^+}. \quad (4.5.22)$$

Можна також побудувати інші комбінації коефіцієнтів  $a_{cl}^\pm$ , які не залежать від мікроскопіки системи. Зокрема відношення

$$\frac{(a_{c1}^\pm)^2}{a_{c2}^\pm} \quad (4.5.23)$$

також буде універсальною величиною. Коефіцієнт при  $\tau$  у виразі для вільної енергії (4.5.13) однаковий для  $T > T_c$  і  $T < T_c$ . Він має вигляд:

$$a_{c3}^\pm = \frac{1}{\alpha} \frac{3\nu}{3\nu - 1} \left[ 2 + (3\nu + 1) \frac{c_{1k1}}{c_{1k}} \right].$$

Сприйнятливості системи на одну частинку при  $T < T_c$  задається виразом [349]:

$$\chi = \frac{\mu_B^2}{\bar{\Phi}(0)} \Gamma^- |\tau|^{-\gamma} (1 + a_{\chi 1}^- |\tau|^\Delta + a_{\chi 2}^- |\tau|^{2\Delta} + a_{\chi 3}^- |\tau|), \quad (4.5.24)$$

коефіцієнти якого подані в табл. 4.10. Зазначимо, що  $a_{\chi 3}^- = -a_{\chi 3}^+$  (див. табл. 3.7).

Табл. 4.10. Значення основної критичної амплітуди  $\Gamma^-$  та амплітуд конфлуентних поправок  $a_{\chi 1}^-$ ,  $a_{\chi 2}^-$  сприйнятливості  $\chi$  (4.5.24) при  $b = c$

$s$	3	$s^*$	4	5
$\Gamma^-$	0.3745	0.3824	0.3920	0.4237
$a_{\chi 1}^-$	0.5659	0.6081	0.6191	0.6192
$a_{\chi 2}^-$	-0.6487	-0.5353	-0.4688	-0.3512

Важливою характеристикою системи нижче від точки фазового переходу є параметр порядку. В цьому випадку мова йде про середній спіновий момент  $\langle \sigma \rangle$ . Наступний параграф присвячений побудові процедури самоузгодження при його обчисленні.

#### 4.6. Процедура самоузгодження при розрахунку середнього спінового моменту

У другому параграфі цього розділу був знайдений вираз для змінної  $\rho_0$ , при якому досягається екстремум підінтегральної функції у виразі (4.2.21). Це шлях прямого розрахунку параметра порядку системи. Можна, однак, запропонувати інший спосіб обчислення середнього спінового моменту системи, який пов'язаний з мінімізацією вільної енергії. Виходитимемо з виразу для статистичної суми (4.2.1), який відповідає внескові довгохвильових флуктуацій при  $T < T_c$ . Залежність його коефіцієнтів  $d_{\mu_\tau+1}(k)$  та  $a_{\mu_\tau+1}$  від температури є неаналітичною (див. (4.2.3)–(4.2.5)). Вони стають нульовими, коли температура прямує до  $T_c$ . Проте величина

$$x_{\mu_\tau+1} = d_{\mu_\tau+1}(B_{\mu_\tau+2}, B_{\mu_\tau+1}) \left( \frac{3}{a_{\mu_\tau+1}} \right)^{1/2}$$

відмінна від нуля навіть у випадку  $\tau \rightarrow 0$ , що й зумовлює необхідність врахування внеску доданку  $Z_{\mu_\tau+1}$  у вираз (4.3.3). Величина  $s_{\mu_\tau+1} = \pi B_{\mu_\tau+1}^{-1}$  характеризує мінімальний (при заданому  $\tau$ ) розмір періоду блочної ґратки, в кожній комірці якої існує відмінний від нуля середній спіновий момент.

Розглянемо детальніше вираз (4.2.1). За допомогою заміни змінних (4.2.6) можна виділити вільну енергію впорядкування  $F_\sigma$ , яка залежить від зміщення  $\langle \bar{\sigma} \rangle$ . Існує декілька шляхів для обчислення  $\langle \bar{\sigma} \rangle$ . Один з них описаний в §4.2. Він полягає в мінімізації за  $\langle \bar{\sigma} \rangle$  виразу

$$-\beta F_\sigma = -\frac{1}{2} N \langle \bar{\sigma} \rangle^2 d_{\mu_\tau+1}(0) - \frac{1}{4!} \frac{N^2}{N_{\mu_\tau+1}} \langle \bar{\sigma} \rangle^4 a_{\mu_\tau+1}. \quad (4.6.1)$$

При цьому вважається, що підінтегральний вираз (4.2.8) не залежить від  $\langle \bar{\sigma} \rangle$ . Вище наближення, пов'язане із знаходженням  $\langle \bar{\sigma} \rangle$ , полягає у тому, щоб відшукати екстремум із врахуванням такої залежності. Для цього слід прийняти до уваги внески від змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$  для  $k \leq B_{\mu_{\tau+1}}$ .

Надалі зміщення в (4.2.6) позначатимемо через  $\langle \sigma \rangle$ , щоб відрізнити його від  $\langle \bar{\sigma} \rangle$  із (4.2.7). Загальна умова для визначення  $\langle \sigma \rangle$  має вигляд

$$\frac{\partial F(\langle \sigma \rangle)}{\partial \langle \sigma \rangle} = 0, \quad (4.6.2)$$

де  $F(\langle \sigma \rangle)$  залежна від  $\langle \sigma \rangle$  частина вільної енергії системи. З (4.3.1) і (4.3.3) легко бачити, що від  $\langle \sigma \rangle$  залежить тільки довгохвильова частина вільної енергії. В результаті умова (4.6.2) може бути переписана у вигляді

$$\frac{\partial \ln Z_{\mu_{\tau+1}}}{\partial \langle \sigma \rangle} = 0. \quad (4.6.3)$$

Це рівняння є умовою самоузгодження. Воно буде основним при розрахунку середнього спінового моменту системи.

Виконаємо в (4.2.1) заміну змінних (4.2.6). Виділяючи вільну енергію впорядкування  $F_{\mu}$ , одержуємо

$$\begin{aligned} Z_{\mu_{\tau+1}} = e^{-\beta F_{\mu}} \int \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{\mu_{\tau+1}}} \bar{d}_{\mu_{\tau+1}}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \right. \\ \left. - \frac{a_{\mu_{\tau+1}} \langle \sigma \rangle \sqrt{N}}{3! N_{\mu_{\tau+1}}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_3 \\ k_i \leq B_{\mu_{\tau+1}}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_3} - \right. \\ \left. - \frac{a_{\mu_{\tau+1}}}{4! N_{\mu_{\tau+1}}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ k_i \leq B_{\mu_{\tau+1}}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} + \mathcal{D}_{\mu} \rho_0 \right] (d\rho)^{N_{\mu_{\tau+1}}}. \end{aligned} \quad (4.6.4)$$

Тут

$$\begin{aligned}\beta F_\mu &= \frac{1}{2} N \langle \sigma \rangle^2 \left[ d_{\mu\tau+1}(0) + \frac{1}{12} a_{\mu\tau+1} \frac{N}{N_{\mu\tau+1}} \langle \sigma \rangle^2 \right], \\ \tilde{d}_{\mu\tau+1}(k) &= d_{\mu\tau+1}(k) + \frac{1}{2} a_{\mu\tau+1} \frac{N}{N_{\mu\tau+1}} \langle \sigma \rangle^2, \\ \mathcal{D}_\mu &= -\sqrt{N} \langle \sigma \rangle \left[ d_{\mu\tau+1}(0) + \frac{1}{6} a_{\mu\tau+1} \frac{N}{N_{\mu\tau+1}} \langle \sigma \rangle^2 \right].\end{aligned}\quad (4.6.5)$$

Завдяки наявності доданку пропорційного до  $\langle \sigma \rangle^2$  величина  $\tilde{d}_{\mu\tau+1}(0)$  збільшується порівняно з  $d_{\mu\tau+1}(0)$ . Її порядок можна оцінити, визначивши  $\langle \sigma \rangle$  з умови екстремуму  $F_\mu$ . У результаті знаходимо значення  $\langle \sigma \rangle$  в нульовому наближенні

$$\langle \sigma \rangle_0^2 = -6 \frac{N_{\mu\tau+1}}{N} \frac{d_{\mu\tau+1}(0)}{a_{\mu\tau+1}} \quad (4.6.6)$$

і для  $\tilde{d}_{\mu\tau+1}(0)$  у цьому наближенні маємо:

$$\tilde{d}_{\mu\tau+1}(0) = -d_{\mu\tau+1}(0)(p^{(0)} - 1), \quad (4.6.7)$$

де величина  $p^{(0)}$  постійна ( $p^{(0)} = 3$ ). Як покажемо згодом, у вищому наближенні,  $p^{(0)} \approx 3$ .

Отже, застосування умови самоузгодження (4.6.3) тільки до множника  $\exp(-\beta F_\mu)$ , коли підінтегральний вираз (4.6.4) вважається незалежним від  $\langle \sigma \rangle$ , веде до додатності  $\tilde{d}_{\mu\tau+1}(k)$ . Розв'язок (4.6.6) для  $\langle \sigma \rangle$  є нульовим наближенням. Врахування залежності від  $\langle \sigma \rangle$  у підінтегральному виразі (4.6.4) приводить при використанні процедури самоузгодження до малих поправок у розрахунку  $\langle \sigma \rangle$  порівняно з (4.6.6). Ця обставина дає змогу інтегрувати в (4.6.4) за змінними  $\rho_k$  з  $k \neq 0$ , використовуючи гаусову густину міри як базисну. Доданки пропорційні до  $a_{\mu\tau+1}$  враховуються методом функціонального диференціювання. Введемо величину

$$\mathcal{D}(\mathbf{k}) = \mathcal{D}_\mu \delta_{\mathbf{k},0}. \quad (4.6.8)$$

Тоді доданок  $\mathcal{D}_{\mu}\rho_0$  у (4.6.4) переходить у

$$\sum_{k \leq B_{\mu\tau+1}} \mathcal{D}(\mathbf{k})\rho_{\mathbf{k}}$$

і вираз для  $Z_{\mu\tau+1}$  набуває вигляду:

$$\begin{aligned} Z_{\mu\tau+1} = & e^{-\beta F_{\mu}} \prod_{k=0}^{B_{\mu\tau+1}} \left( \frac{\pi}{\tilde{d}_{\mu\tau+1}(k)} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{a_{\mu\tau+1}}{4!} \times \right. \\ & \times \frac{1}{N_{\mu\tau+1}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ k_i \leq B_{\mu\tau+1}}} \frac{\partial^4}{\partial \mathcal{D}(\mathbf{k}_1) \dots \partial \mathcal{D}(\mathbf{k}_4)} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} - \frac{a_{\mu\tau+1}}{3!} \langle \sigma \rangle \times \\ & \times \sqrt{N} \frac{1}{N_{\mu\tau+1}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_3 \\ k_i \leq B_{\mu\tau+1}}} \frac{\partial^3}{\partial \mathcal{D}(\mathbf{k}_1) \dots \partial \mathcal{D}(\mathbf{k}_3)} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_3} \left. \right\} \times \\ & \times \exp \left[ \frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{\mu\tau+1}} \frac{\mathcal{D}(\mathbf{k})\mathcal{D}(-\mathbf{k})}{\tilde{d}_{\mu\tau+1}(k)} \right]. \end{aligned} \quad (4.6.9)$$

Виконуючи в (4.6.9) диференціювання і покладаючи в кінцевих виразах  $\mathcal{D}(\mathbf{k}) = 0$  для  $k \neq 0$ , для залежної від  $\langle \sigma \rangle$  частини вільної енергії отримуємо:

$$\begin{aligned} F_{\mu\tau+1} = & F_{\mu} - kT \left\{ \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{B_{\mu\tau+1}} \ln \left[ \frac{\pi}{\tilde{d}_{\mu\tau+1}(k)} \right] + \right. \\ & + \frac{1}{2} \frac{\mathcal{D}_{\mu}^2}{\tilde{d}_{\mu\tau+1}(0)} - \frac{1}{4!} \frac{a_{\mu\tau+1}}{N_{\mu\tau+1}} \left[ \left( \frac{\mathcal{D}_{\mu}}{\tilde{d}_{\mu\tau+1}(0)} \right)^4 + 6gN_{\mu\tau+1} \times \right. \\ & \times \left. \left( \frac{\mathcal{D}_{\mu}}{\tilde{d}_{\mu\tau+1}(0)} \right)^2 + 6g^2 N_{\mu\tau+1}^2 \right] - \\ & \left. - \frac{1}{3!} \langle \sigma \rangle \sqrt{N} \frac{a_{\mu\tau+1}}{N_{\mu\tau+1}} \left[ \left( \frac{\mathcal{D}_{\mu}}{\tilde{d}_{\mu\tau+1}(0)} \right)^3 + 3gN_{\mu\tau+1} \frac{\mathcal{D}_{\mu}}{\tilde{d}_{\mu\tau+1}} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.6.10)$$

Доданки, що входять у (4.6.10), залежать від  $\langle \sigma \rangle$  і пропорційні до  $N$ . Введемо позначення:

$$p = -\frac{N}{N_{\mu_\tau+1}} \frac{\langle \sigma \rangle^2}{2} \frac{a_{\mu_\tau+1}}{d_{\mu_\tau+1}(0)}. \quad (4.6.11)$$

Тоді коефіцієнти (4.6.5) набувають вигляду

$$\begin{aligned} \tilde{d}_{\mu_\tau+1}(0) &= -d_{\mu_\tau+1}(0)(p-1), \\ \mathcal{D}_\mu &= -d_{\mu_\tau+1}(0)\sqrt{N}\langle \sigma \rangle \left(1 - \frac{1}{3}p\right), \\ F_\mu &= -kTN_{\mu_\tau+1}p(-p+6) \frac{(r_{\mu_\tau+1})^2}{6u_{\mu_\tau+1}}. \end{aligned} \quad (4.6.12)$$

Для величини  $g$  із (4.6.10) знаходимо

$$\begin{aligned} g &= 3G_0 s^{2(\mu_\tau+1)} (\beta\tilde{\Phi}(0))^{-1}, \\ G_0 &= 1 - \sqrt{t} \operatorname{arctg}(t)^{-1/2}, \end{aligned} \quad (4.6.13)$$

де

$$t = \bar{r}_{\mu_\tau+1}(p-1), \quad \bar{r}_{\mu_\tau+1} = \frac{r_{\mu_\tau+1}}{\beta\tilde{\Phi}(0)}.$$

У результаті вільна енергія (4.6.10) запишеться у формі:

$$\begin{aligned} F_{\mu_\tau+1} &= -kTN_{\mu_\tau+1} \left\{ \frac{(\bar{r}_{\mu_\tau+1})^2}{6\bar{u}_{\mu_\tau+1}} p(6-p) + \frac{1}{2} \ln \pi + \right. \\ &+ (\mu_\tau+1) \ln s - \frac{1}{2} \ln \beta\tilde{\Phi}(0) - \frac{1}{2} \ln(1+t) + \frac{1}{3} + \\ &+ \frac{(\bar{r}_{\mu_\tau+1})^2}{\bar{u}_{\mu_\tau+1}} \left[ \frac{p(3-p)}{9(p-1)} - \frac{p^2(3-p)^4}{6 \cdot 81(p-1)^4} - \frac{2p^2(3-p)^3}{81(p-1)^3} \right] - \\ &\left. - |\bar{r}_{\mu_\tau+1}| G_0 \left[ p-1 + \frac{p(3-p)}{p-1} + \frac{p(3-p)^2}{6(p-1)^2} + \frac{9}{4} G_0 \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}}{|\bar{r}_{\mu_\tau+1}|} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.6.14)$$

де

$$\bar{u}_{\mu_\tau+1} = u_{\mu_\tau+1} (\beta\tilde{\Phi}(0))^{-2}.$$

Умова самоузгодження (4.6.3) набуде вигляду

$$\frac{\partial F_{\mu\tau+1}}{\partial p} = 0$$

і приведе до рівняння для  $p$

$$\sum_{l=1}^4 F_l(p) = 0, \quad (4.6.15)$$

де для функцій  $F_l(p)$  знаходимо

$$\begin{aligned} F_1(p) &= \frac{2p^2 x^3 \bar{r}_{\mu\tau+1}}{27y^4 \bar{u}_{\mu\tau+1}} \left(1 - \frac{x}{9y}\right), \\ F_2(p) &= [2(1+t)]^{-1}, \quad F_3(p) = -G_0 \left(1 - \frac{4xp^2}{3y^3}\right), \\ F_4(p) &= G_{00} \left[\frac{1+p}{y} + \frac{px^2}{6y^2} + \frac{9}{2} G_0 \frac{\bar{u}_{\mu\tau+1}}{\bar{r}_{\mu\tau+1}}\right]. \end{aligned} \quad (4.6.16)$$

Тут  $x = p - 3$ ,  $y = p - 1$ ,

$$G_{00} = \frac{1}{2} \bar{r}_{\mu\tau+1} \left[ \frac{1}{1+t} - \frac{1}{\sqrt{t}} \operatorname{arctg} \frac{1}{\sqrt{t}} \right].$$

Розв'язок рівняння (4.6.15) зручно записати як суму двох доданків

$$p = p_0 + p_1 |\tau|^\Delta. \quad (4.6.17)$$

Таке представлення величини  $p$  відповідає характеру залежності від температури величин

$$\begin{aligned} \bar{r}_{\mu\tau+1} &= \bar{r}_{\mu\tau+1}^{(0)} + \bar{r}_{\mu\tau+1}^{(1)} |\tau|^\Delta, \\ \bar{u}_{\mu\tau+1} &= \bar{u}_{\mu\tau+1}^{(0)} + \bar{u}_{\mu\tau+1}^{(1)} |\tau|^\Delta, \end{aligned} \quad (4.6.18)$$



які, крім незалежних від температури доданків  $\bar{r}_{\mu\tau+1}^{(0)} = 2f_0$  і  $\bar{u}_{\mu\tau+1}^{(0)} = \varphi = \varphi_0 - f_0\sqrt{\varphi_0} R_1^{(0)}$  (див. (4.2.5)), містять поправки до скейлінгу, пропорційні до  $|\tau|^\Delta$ :

$$\bar{u}_{\mu\tau+1}^{(1)} = c_{2k} \left( \frac{c_{1k}}{f_0} \right)^\Delta D, \quad \bar{r}_{\mu\tau+1}^{(1)} = 0. \quad (4.6.19)$$

Для коефіцієнта  $p_0$  із (4.6.17) отримуємо рівняння:

$$\frac{1}{2(1+t_0)} + \frac{4f_0p_0^2x_0^3}{27\varphi y_0^4} \left( 1 - \frac{x_0}{9y_0^3} \right) = g_0 \left( 1 - \frac{4p_0^2x_0}{3y_0^3} \right) - g_2 \left( \frac{1+p_0}{y_0} + \frac{p_0x_0^3}{6y_0^2} + g_0 \frac{9\varphi}{4f_0} \right), \quad (4.6.20)$$

де

$$\begin{aligned} x_0 &= p_0 - 3, & y_0 &= p_0 - 1, & t_0 &= 2y_0f_0, \\ g_0 &= 1 - \sqrt{t_0} \operatorname{arctg} \frac{1}{\sqrt{t_0}}, \\ g_2 &= f_0 \left[ \frac{1}{1+t_0} - \frac{1}{\sqrt{t_0}} \operatorname{arctg} \frac{1}{\sqrt{t_0}} \right]. \end{aligned} \quad (4.6.21)$$

Розв'язки (4.6.20) для низки значень РГ параметра  $s$  подані в табл. 4.11. Для коефіцієнта  $p_1$  маємо

$$p_1 = \bar{p}_1 \frac{\bar{u}_{\mu\tau+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu\tau+1}^{(0)}}, \quad (4.6.22)$$

де  $\bar{p}_1$  визначається із рівняння (див. табл. 4.11)

$$\bar{p} = T \left( \sum_{l=0}^3 S_l \right)^{-1}. \quad (4.6.23)$$

Тут

$$\begin{aligned}
 T &= \frac{9\varphi}{4f_0} g_0 g_2 - \frac{4f_0 p_0^2 x_0^3}{27\varphi y_0^4} \left(1 - \frac{x_0}{9y_0}\right), \\
 S_0 &= -\frac{g_0}{y_0} \left[1 + \frac{1+x_0}{y_0} - \frac{x_0}{3y_0^2} (8p_0 + x_0) + \frac{p_0 x_0^3}{y_0^3}\right], \\
 S_1 &= g_1 \left(\frac{1}{2} - \frac{2p_0^2 x_0}{3y_0^3} - \frac{9\varphi}{4f_0} g_2\right), \\
 S_2 &= g_2 \left[2 - \frac{p_0}{y_0} - \frac{x_0}{6y_0^2} (8p_0 + x_0) + \frac{p_0 x_0^2}{3y_0^3}\right], \\
 S_3 &= g_3 \left(1 - p_0 + \frac{p_0 x_0}{y_0} - \frac{p_0 x_0^2}{6y_0^2} - \frac{9\varphi}{4f_0} g_0\right).
 \end{aligned} \tag{4.6.24}$$

Величини  $g_0$  і  $g_2$  визначені в (4.6.21), а для  $g_1$  і  $g_3$  знаходимо

$$\begin{aligned}
 g_1 &= \sqrt{t_0} (2y_0)^{-1} \operatorname{arctg} \frac{1}{\sqrt{t_0}}, \\
 g_3 &= -\frac{f_0}{y_0} \left[ (1+t_0)^{-1} - \frac{1}{2\sqrt{t_0}} \operatorname{arctg} \frac{1}{\sqrt{t_0}} \right].
 \end{aligned} \tag{4.6.25}$$

Коефіцієнти  $p_0$  і  $p_1$ , що визначають  $p$  із (4.6.17), є сталими величинами, причому  $p_0$  близьке до свого нульового наближення  $p^{(0)} = 3$ . До складу  $p_1$  входить неуніверсальний фактор  $c_{2k}(c_{1k}/f_0)^\Delta$ .

Приймаючи до уваги (4.6.11), для  $\langle \sigma \rangle$  отримуємо

$$\langle \sigma \rangle^2 = \frac{\sigma_0^2}{\beta \tilde{\Phi}(0)} s_0^{-3} \left(\frac{c_{1k}}{f_0}\right)^\nu |\tau|^\nu \left[1 + c_{2k} \left(\frac{c_{1k}}{f_0}\right)^\Delta \bar{\sigma}_1 |\tau|^\Delta\right], \tag{4.6.26}$$

де величини

$$\sigma_0^2 = \frac{4f_0 p_0}{\varphi}, \quad \bar{\sigma}_1 = \frac{D}{\varphi p_0} (\bar{p}_1 - p_0) - \nu \Phi_0 \tag{4.6.27}$$

подані в таб. 4.11. Тут же наведені числові значення коефіцієнта

$$a_\sigma = c_{2k} \left(\frac{c_{1k}}{f_0}\right)^\Delta \frac{1}{2} \bar{\sigma}_1 \tag{4.6.28}$$

Табл. 4.11. Величини, що визначають параметр порядку моделі

$s$	3	$s^*$	4	5
$p_0$	3.1039	3.0925	3.0865	3.0758
$\bar{p}_1$	-0.1029	-0.0711	-0.0576	-0.0386
$\sigma_0$	11.4961	10.8125	10.3742	9.5004
$\bar{\sigma}_1$	-1.5403	-1.0842	-0.8808	-0.5843
$a_\sigma$	0.5274	0.4474	0.4059	0.3345

при  $b = c$ . Вираз для  $\langle \sigma \rangle$  виглядатиме:

$$\langle \sigma \rangle = B|\tau|^\beta (1 + a_\sigma |\tau|^\Delta). \quad (4.6.29)$$

Тут  $\beta = \nu/2$  - критичний показник, величина

$$B = \left( \frac{c_{1k}}{f_0} \right)^\beta \left( \frac{4f_0 p_0}{\beta \bar{\Phi}(0) \varphi s_0^3} \right)^{1/2} \quad (4.6.30)$$

визначає основну критичну амплітуду, а  $a_\sigma$  - амплітуду поправки до скейлінгу.

Підкреслимо, що вигляд виразу для  $\langle \sigma \rangle$  не залежить від способу обчислення. Подібний вираз можна отримати, знаходячи екстремальні точки підінтегрального виразу (4.2.21). За відсутності магнетного поля таким розв'язком буде величина  $\bar{\rho}$  (див. § 4.2) і для середнього спінового моменту  $\langle \sigma \rangle_0$  отримуємо

$$\langle \sigma \rangle_0 = B_0 |\tau|^\beta (1 + a_\sigma^{(0)} |\tau|^\Delta), \quad (4.6.31)$$

де

$$B_0 = \left( \frac{c_{1k}}{f_0} \right)^\beta \left( \frac{4f_0 \cdot 3B_1^{(0)}}{\beta_c \bar{\Phi}(0) \bar{\varphi} s_0^3} \right)^{1/2}, \quad \bar{\varphi} = \varphi \left( 1 - \frac{3}{2} \varphi \alpha_2 \right), \quad (4.6.32)$$

$$a_\sigma^{(0)} = \bar{\rho}_1.$$

Порівнюючи (4.6.29) з (4.6.31), знаходимо, що коефіцієнти  $B$  і  $B_0$  є одного порядку, оскільки  $3B_1^{(0)}\varphi \approx p_0\tilde{\varphi}$ . Величина  $a_\sigma$ , яка визначає поправку до скейлінгу, також близька до свого нульового наближення  $a_\sigma^{(0)}$  (див. табл. 4.2 і табл. 4.11). Застосування процедури самоузгодження приводить до незначного зростання амплітуди  $B$  (порівняно з її значенням у нульовому наближенні  $B_0$ ) і зменшення  $a_\sigma$  порівняно з  $a_\sigma^{(0)}$ .

Отриманий вище вираз для середнього спінового моменту (4.6.29) із його критичною амплітудою (4.6.30) дає змогу розрахувати  $R_c^+$  (див., наприклад, [118])

$$R_c^+ = \frac{A^+\Gamma^+}{s_0^3 B^2},$$

де  $A^+$  і  $\Gamma^+$  – критичні амплітуди теплоємності та сприйнятливості при  $T > T_c$ .

Використовуючи вирази для  $A^+$  із (3.4.10),  $\Gamma^+$  із (3.4.11) та для  $B$  (4.6.30), отримуємо

$$R_c^+ = \beta_c \tilde{\Phi}(0) \frac{\alpha C_{30} \bar{\gamma}_4^+ \bar{u}_{\mu\tau+1}^{(0)}}{2c_\nu^3 f_0 p_0}. \quad (4.6.33)$$

Неуніверсальний фактор  $c_\nu^3$  компенсується аналогічним множником у  $C_{30}$ , тому отримуємо універсальну величину. При  $s = s^*$  вона дорівнює

$$R_c^+ = 0.084. \quad (4.6.34)$$

Якщо ж замість  $B$  беремо величину  $B_0$  із (4.6.32) (або  $\bar{\rho}_0$  із табл. 4.2), то отримуємо близьке до (4.6.34) значення

$$R_c^+ = 0.098. \quad (4.6.35)$$

Розраховані значення  $R_c^+$  узгоджуються з даними праці [118].

Запропонований в розділах 3, 4 метод прямого розрахунку термодинамічних функцій поблизу точки фазового переходу другого роду застосовний до тривимірних модельних систем.

Роздільне врахування внесків у вільну енергію системи від двох типів флуктуацій відображає наявність поблизу точки фазового переходу двох головних флуктуаційних процесів, які описані в другому розділі монографії.

Потрібно особливо підкреслити, що істинні характеристики моделі поблизу  $T_c$  можна отримати тільки врахуванням довгохвильових мод флуктуацій густини спінового моменту. Особливо яскраво це відображається на виразах для ентропії і теплоємності поблизу  $T_c$ , оскільки врахування внеску в ці величини тільки від ділянки КР, що відповідає короткохвильовим флуктуаціям, призводить до нефізичних результатів (зростання ентропії при зменшенні температури, від'ємна теплоємність).

Знайдені повні вирази для основних термодинамічних характеристик моделі поблизу  $T_c$ . Крім критичних показників, отримані вирази для критичних амплітуд, в тому числі поправки до скейлінгу. Метод наближений. З'ясувалось, що для отримання стабільних значень критичних показників потрібно, крім моделі  $\rho^4$ , використати при розрахунках складніші моделі  $\rho^6$ ,  $\rho^8$ . Однак вже в рамках моделі  $\rho^4$  вдається отримати всі якісні результати, а в певному інтервалі значень параметра  $PT$   $s$  і кількісні характеристики фазового переходу.

## Розділ 5

# Структурні характеристики системи поблизу точки фазового переходу

Запропонований у цій монографії підхід до опису критичної поведінки тривимірних ґраткових систем передбачає два основні наближення. Перше<sup>1</sup> з них пов'язане з усередненням фур'є-образу потенціалу взаємодії  $\tilde{\Phi}(k)$  як функції хвильового вектора. Причому, в кожному інтервалі хвильових векторів  $k \in (B_{n+1}, B_n]$  (де  $B_{n+1} = B_n/s$ ) функція  $\tilde{\Phi}(k)$  замінюється деякою сталою величиною  $\tilde{\Phi}(B_{n+1}, B_n)$ . За такої апроксимації функції  $\tilde{\Phi}(k)$  при розрахунку вільної енергії системи втрачається певна інформація, зокрема, критичний показник кореляційної функції в такому підході дорівнює нулеві ( $\eta = 0$ ).

Відомі теоретичні підходи до опису явища фазового переходу [8–15, 91–93] ґрунтуються переважно на використанні як базисної гаусової густини міри. За такого підходу розрахунок вільної енергії та інших термодинамічних функцій здійснюється з врахуванням залежності від хвильового вектора фур'є-образу потенціалу  $\tilde{\Phi}(k)$ . Проте, використання гаусової густини міри як базисної передбачає застосування теорії збурень. Використання в критичній області методів традиційної теорії збурень з гаусо-

---

<sup>1</sup> Друге наближення стосується обмеження при розрахунку вільної енергії моделлю  $\rho^4$ . Використанню вищих наближень – моделей  $\rho^{2m}$ , де  $m \geq 3$ , присвячений розділ 6, а також розділи 8–10.

вим розподілом приводить до виникнення безмежної множини розбіжних при  $T \rightarrow T_c$  діаграм для вільної енергії.

Внаслідок цього, при розрахунку статистичної суми виникає альтернатива: або користуватися теорією збурень і враховувати залежність фур'є-образу потенціалу взаємодії від хвильового вектора  $\mathbf{k}$ , або, усереднюючи (у певних інтервалах  $k$ ) фур'є-образ потенціалу взаємодії, використовувати негаусовий розподіл флукутацій (загалом довільної складності) як базисний.

Останнє дає змогу вирішити проблему виникнення нефізичних розбіжностей при розрахунку вільної енергії поблизу  $T_c$  і отримати не лише правильні якісні, а й кількісні результати. Методика розрахунку термодинамічних функцій системи на базі четвірного базисного розподілу описана в розділах 2–4.

У цьому розділі описаний метод розрахунку вільної енергії системи та деяких її структурних характеристик у випадку використання негаусового розподілу, коли враховують залежність фур'є-образу потенціалу взаємодії від хвильового вектора. Встановлено, що врахування поправки на усереднення потенціалу  $\tilde{\Phi}(k)$  у кожному з інтервалів хвильових векторів  $k \in (B_{n+1}, B_n]$  не приводить до якісних змін у виразах для основних термодинамічних функцій системи. Відбувається перенормування критичних показників кореляційної довжини, сприйнятливості, теплоємності та інших характеристик. Змінюються також критичні амплітуди.

Врахування залежності  $\tilde{\Phi}(k)$  від хвильового вектора суттєво впливає на поведінку парної кореляційної функції  $G$ . Відомо, що при  $T = T_c$  ця функція на великих відстанях  $r$  характеризується критичним показником  $\eta$ ,  $G = G_0 r^{-(d-2+\eta)}$ , де  $G_0$  – деяка стала величина, а  $d$  – вимірність простору. Замінюючи в кожному із інтервалів  $k \in (B_{n+1}, B_n]$  величину  $\tilde{\Phi}(k)$  її середнім значенням, отримуємо  $\eta = 0$ . Врахування поправки на залежність фур'є-образу потенціалу від хвильового вектора приводить до відмінного від нуля значення  $\eta$ . Змінюються також вирази для сприйнятливості та парної кореляційної функції як при  $T = T_c$ , так і при температурах відмінних від  $T_c$ .

## 5.1. Розрахунок статистичної суми моделі $\rho^4$ при врахуванні залежності потенціалу взаємодії від хвильового вектора

Розглянемо вираз для статистичної суми (2.2.14), який відповідає врахуванню поправки на усереднення потенціалу взаємодії на інтервалі хвильових векторів  $k \in (B_1, B]$ . Після інтегрування в (2.2.14) за змінними  $\eta_l$  знаходимо

$$Z = C \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_1} [d(k) - d(B_1, B)] \rho_k \rho_{-k} - 2\pi i \sum_{k \leq B_1} \nu_k \rho_k \right\} \times \\ \times \sqrt{2}^{1-N} [Q(d)]^N \exp(\hat{\Delta}) I(\tilde{\nu}_1) (d\rho)^{N_1} (d\nu)^{N_1}. \quad (5.1.1)$$

Для величини  $I(\tilde{\nu}_1)$  маємо вираз

$$I(\tilde{\nu}_1) = \prod_1 \exp \left( -\sum_{n \geq 1} \frac{1}{(2n)!} S_{2n} \tilde{\nu}_1^{2n} \right),$$

де коефіцієнти  $S_{2n}$  приведені в (2.2.20). Відповідно до означення (2.2.10), величина  $\Delta$  має вигляд

$$\Delta = \frac{1}{2} \sum_{B_1 < k \leq B} \Delta \tilde{\Phi}(k) \eta_k \eta_{-k},$$

де

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

На цьому етапі ми не робимо ніяких припущень відносно величини  $\Delta \tilde{\Phi}(k)$ , хоча надалі вважатимемо її малою порівняно з  $\beta \tilde{\Phi}(B_1, B)$ . Відповідно до (2.2.13) величина  $\Delta$  переходить в оператор  $\hat{\Delta}$ :

$$\hat{\Delta} = \frac{1}{2(2\pi i)^2} \sum_{l_1, l_2} \Delta \Phi(|l_1 - l_2|) \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\nu}_{l_1} \partial \tilde{\nu}_{l_2}}, \quad (5.1.2)$$



в якому

$$\Delta\Phi(|l_1 - l_2|) = \frac{1}{N} \sum_{B_1 < k \leq B} \Delta\tilde{\Phi}(k) e^{-ik(l_1 - l_2)}. \quad (5.1.3)$$

Скористаємось з результатів § 2.2 та розкриємо дію оператора  $\exp(\hat{\Delta})$  на функцію  $I(\tilde{\nu}_l)$  у виразі (5.1.1):

$$\begin{aligned} & \exp \left\{ \frac{1}{2(2\pi i)^2} \sum_{l_1, l_2} \Delta\Phi(|l_1 - l_2|) \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\nu}_{l_1} \partial \tilde{\nu}_{l_2}} \right\} \times \\ & \times \prod_l \exp \left( - \sum_{n \geq 1} \frac{1}{(2n)!} S_{2n} \tilde{\nu}_l^{2n} \right) = (1 + \Delta_1 + \Delta_2 + \dots) I(\tilde{\nu}_l), \end{aligned} \quad (5.1.4)$$

де в  $\Delta_1$  зібраний результат дії оператора  $\hat{\Delta}$  на  $I(\tilde{\nu}_l)$ , що є сумою доданків лінійних за  $\Delta\tilde{\Phi}(k)$ . У  $\Delta_2$  зібрані доданки пропорційні до  $(\Delta\tilde{\Phi}(k))^2$  і т. д. Приведемо вираз для  $\Delta_1$ :

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= \frac{1}{2N} \sum_{B_1 < k \leq B} \Delta\tilde{\Phi}(k) \sum_{l_1, l_2} \exp[-ik(l_1 - l_2)] \frac{1}{(2\pi i)^2} \times \\ (1) \quad & \times \left\{ S_2^2 \frac{1}{N} \sum_{\substack{k_1, k_2 \\ k_i \leq B_1}} \nu_{k_1} \nu_{k_2} \exp[-i(k_1 l_1 + k_2 l_2)] - \right. \\ (2) \quad & - S_2 \delta_{l_1, l_2} + \\ (3) \quad & + S_4^2 \left( \frac{1}{3!} \right)^2 \frac{1}{N^3} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_6 \\ k_i \leq B_1}} \nu_{k_1} \nu_{k_2} \nu_{k_3} \exp[-il_1(k_1 + k_2 + k_3)] \times \\ & \times \nu_{k_4} \nu_{k_5} \nu_{k_6} \exp[-il_2(k_4 + k_5 + k_6)] - \\ (4) \quad & - \frac{1}{2} S_4 \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k \leq B_1} \nu_k \exp(-ikl_1) \right)^2 \delta_{l_1, l_2} + \\ (5) \quad & + S_2 S_4 \left( \frac{1}{3!} \right) \frac{1}{N^2} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \leq B_1}} \nu_{k_1} \nu_{k_2} \nu_{k_3} \nu_{k_4} \times \end{aligned}$$

$$\times \exp[-i l_1(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)] \exp(-i l_2 \mathbf{k}_4) \left. \vphantom{\exp} \right\}. \quad (5.1.5)$$

Для величини  $\Delta_2$ , крім доданку  $1/2\Delta_1^2$ , маємо ще внески від похідних типу

$$\frac{1}{2}(2\pi i)^{-4} \sum_{l_1, l_2, l_3} \Delta\Phi(|l_1 - l_3|) \Delta\Phi(|l_3 - l_2|) \frac{\partial^4}{\partial \tilde{\nu}_{l_1} \partial \tilde{\nu}_{l_2} \partial \tilde{\nu}_{l_3}^2},$$

а також внески від замкнених похідних

$$\frac{1}{4!}(2\pi i)^{-4} \sum_{l_1, l_2} [\Delta\Phi(|l_1 - l_2|)]^2 \frac{\partial^4}{\partial \tilde{\nu}_{l_1}^2 \partial \tilde{\nu}_{l_2}^2}.$$

Проаналізуємо одержаний нами вираз (5.1.5). При сумуванні за  $l_1$  і  $l_2$  перший і п'ятий його доданки зникають через несумісність символів Кронекера. Так для першого доданку  $\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1} = 0$  і  $\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_2} = 0$ , бо  $B_1 < k \leq B$ , а  $0 \leq k_1 \leq B_1, 0 \leq k_2 \leq B_1$ . Аналогічно для п'ятого доданку  $\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_4} = 0$ , бо  $k_4 \leq B_1, k > B_1$ .

Для спрощення розрахунків виберемо як середнє значення потенціалу в інтервалі  $B_1 < k \leq B$  його середнє геометричне

$$\tilde{\Phi}(B_1, B) = (N - N_1)^{-1} \sum_{B_1 < k \leq B} \tilde{\Phi}(k). \quad (5.1.6)$$

Тоді справедлива рівність

$$\sum_{B_1 < k \leq B} \Delta \tilde{\Phi}(k) = 0. \quad (5.1.7)$$

З цієї причини в (5.1.5) зникають другий та четвертий доданки. У результаті для  $\Delta_1$  отримуємо вираз:

$$\Delta_1 = \frac{1}{2(2\pi i)^2} \sum_{B_1 < k \leq B} \Delta \tilde{\Phi}(k) \left(\frac{S_4}{3!}\right)^2 \frac{1}{N^4} \sum_{l_1, l_2} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_6 \\ k_i \leq B_1}} \nu_{k_1} \dots \nu_{k_6} \times \\ \times \exp \{ [-i l_1(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k})] + \\ + [-i l_2(\mathbf{k}_4 + \mathbf{k}_5 + \mathbf{k}_6 - \mathbf{k})] \}. \quad (5.1.8)$$

Кожну з величин  $\nu_{\mathbf{k}}$  замінімо похідною  $\frac{1}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{k}}}$ , що відноситься у виразі (5.1.1) до функції  $\exp\left(-2\pi i \sum_{\mathbf{k} \leq B_1} \nu_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}\right)$ . Після такої заміни  $\Delta_1$  стає оператором  $\hat{\Delta}_1$ , що діє на  $\exp\left(-2\pi i \sum_{\mathbf{k} \leq B_1} \nu_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}\right)$ . У результаті для  $\hat{\Delta}_1$  маємо таке представлення:

$$\hat{\Delta}_1 = \left(\frac{S_4}{3!}\right)^2 (2\pi)^{-8} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_6 \\ \mathbf{k}_i \leq B_1}} \frac{\partial^6}{\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \partial \rho_{\mathbf{k}_6}} \frac{1}{2N^4} \sum_{B_1 < \mathbf{k} \leq B} \Delta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) \times \\ \times \sum_{l_1, l_2} \exp[-i l_1(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}) - i l_2(\mathbf{k}_4 + \mathbf{k}_5 + \mathbf{k}_6 - \mathbf{k})], \quad (5.1.9)$$

яке не залежить від змінних  $\nu_{\mathbf{k}}$ . Подібні перетворення можна виконати в (5.1.4) і для доданків  $\Delta_2 \dots$ , які в свою чергу перейдуть у деякі оператори  $\hat{\Delta}_2 \dots$ , що діють на  $\exp\left(-2\pi i \sum_{\mathbf{k} \leq B_1} \nu_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}\right)$ . Відповідно до цього величини  $\Delta_1$  і  $\Delta_2$  переходять у оператори  $\hat{\Delta}_1$  та  $\hat{\Delta}_2$  відповідно і при інтегруванні за змінними  $\nu_{\mathbf{k}}$  маємо таку ситуацію:

$$\int (1 + \Delta_1 + \Delta_2 + \dots)(\dots) e^{-2\pi i \sum_{\mathbf{k} \leq B_1} \nu_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}} (d\nu) = \\ = (1 + \hat{\Delta}_1 + \hat{\Delta}_2 + \dots) \int (\dots) e^{-2\pi i \sum_{\mathbf{k} \leq B_1} \nu_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}} (d\nu),$$

Інтегрування за змінними  $\nu_{\mathbf{k}}$  виконується незалежно від дії операторів  $\hat{\Delta}_1$  та  $\hat{\Delta}_2$ . Методика такого інтегрування детально викладена в розділі 2 (формули (2.2.35), (2.2.36)). Відповідно до (2.2.36), можемо здійснити інтегрування за змінними  $\rho_{\mathbf{k}}$ . Проте, перш ніж привести кінцевий результат обчислень, виконаємо ще певні додаткові операції. Всі розрахунки надалі проводитимемо в лінійному порядку за  $\Delta$ . Відповідно до результатів досліджень, приведених в [16],  $\Delta_2$ ,  $\Delta_3$  не братимемо до уваги, вважаючи їх малими величинами порівняно з  $\Delta_1$ . У результаті дії оператора

$\hat{\Delta}_1$ , записаного у формі (5.1.9), на  $I(\tilde{\nu}_1)$  знаходимо

$$e^{\hat{\Delta}_1} I(\tilde{\nu}_1) = (1 + \hat{\Delta}_1 + \dots) I(\tilde{\nu}_1) = \left\{ 1 + \frac{1}{2(2\pi i)^2} \left( \frac{S_4}{3!} \right)^2 \times \right. \\ \times \sum_{B_1 < k \leq B} \Delta \tilde{\Phi}(k) \frac{1}{N^4} \sum_{l_1, l_2} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_6 \\ k_1 \leq B_1}} \exp[-i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \\ + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k})l_1] \nu_{\mathbf{k}_1} \dots \nu_{\mathbf{k}_6} \times \\ \left. \times \exp[-i(\mathbf{k}_4 + \mathbf{k}_5 + \mathbf{k}_6 - \mathbf{k})l_2] + \dots \right\} I(\tilde{\nu}_1). \quad (5.1.10)$$

Далі замінимо ядро  $\Delta \tilde{\Phi}(k)$  у (5.1.10) деяким загальнішим виразом  $\Delta g(k)$ , що є сумою стандартних поляризаційних діаграм. Подібно до [16, 350], для цього розглянемо в (5.1.4) розклад у ряд оператора  $\exp(\hat{\Delta}_1)$ :

$$e^{\hat{\Delta}_1} I(\tilde{\nu}_1) = \left[ 1 + \frac{1}{2(2\pi i)^2} \sum_{l_1, l_2} \Delta \Phi(|l_1 - l_2|) \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\nu}_1 \partial \tilde{\nu}_2} + \right. \\ + \frac{1}{2} \frac{1}{2^2} \frac{4}{(2\pi i)^4} \sum_{l_1, l_2, l_3} \Delta \Phi(|l_1 - l_3|) \Delta \Phi(|l_3 - l_2|) \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\nu}_1 \partial \tilde{\nu}_3} \times \\ \times \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\nu}_3 \partial \tilde{\nu}_2} + \dots + \frac{1}{2^n} \frac{1}{n!} \frac{2^n n!}{2} \frac{1}{(2\pi i)^{2n}} \sum_{l_1, \dots, l_n} \Delta \Phi(|l_1 - l_3|) \times \\ \times \Delta \Phi(|l_3 - l_4|) \dots \Delta \Phi(|l_n - l_2|) \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\nu}_1 \partial \tilde{\nu}_3} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\nu}_3 \partial \tilde{\nu}_4} \dots \\ \left. \dots \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\nu}_n \partial \tilde{\nu}_2} + \dots \right] \exp \left( -\frac{1}{2} S_2 \sum_1 \tilde{\nu}_1^2 - \frac{1}{4!} S_4 \sum_1 \tilde{\nu}_1^4 \right). \quad (5.1.11)$$

Похідні  $\partial/\partial \tilde{\nu}_1$  та  $\partial/\partial \tilde{\nu}_2$  називатимемо зовнішніми, а  $\partial/\partial \tilde{\nu}_3$ ,  $\partial/\partial \tilde{\nu}_4$ ,  $\dots$ , - внутрішніми. Після сумування за внутрішніми змінними  $l_3, l_4, \dots, l_n$  і врахування доданків пропорційних до  $S_2$

одержуємо перетворення згортки, а для (5.1.11) – ряд

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(2\pi i)^2} \frac{1}{2} \left( \frac{S_4}{3!} \right)^2 \sum_{B_1 \leq k \leq B} \frac{\Delta \tilde{\Phi}(k)}{N} \left[ 1 + \frac{S_2}{(2\pi)^2} \Delta \tilde{\Phi}(k) + \right. \\ & \left. + \left( \frac{S_2}{(2\pi)^2} \Delta \tilde{\Phi}(k) \right)^2 + \dots \right] \times \\ & \times \frac{1}{N^3} \sum_{l_1 l_2} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_6 \\ k_i \leq B_1}} \exp[-i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k})l_1] \times \\ & \times \exp[-i(\mathbf{k}_4 + \mathbf{k}_5 + \mathbf{k}_6 - \mathbf{k})l_2] \nu_{k_1} \dots \nu_{k_6} I(\tilde{\nu}_1). \end{aligned} \quad (5.1.12)$$

Результатом такого обчислення є формальна заміна фур'є-образу потенціалу  $\Delta \tilde{\Phi}(k)$  виразом  $\Delta g(k)$ , для якого маємо:

$$\Delta g(k) = \frac{\Delta \tilde{\Phi}(k)}{1 - S_2(2\pi)^{-2} \Delta \tilde{\Phi}(k)}. \quad (5.1.13)$$

Вважаємо, що розрахунок статистичної суми в інтервалі значень хвильових векторів  $(B', B)$ , де  $\Phi(k) = 0$ , виконано (див. §2.5). Тому в подальшому розгляді роль початкових величин  $M_{2l}$ ,  $N$ ,  $a_{2l}$  відіграють відповідно  $M'_{2l}$ ,  $N'$ ,  $a'_{2l}$ . Сума за  $l_1, l_2$  розраховується тут за вузлами ґратки з періодом  $c' = \pi b \sqrt{2}$ , модуль хвильового вектора  $\mathbf{k}$  змінюється в інтервалі  $[0, B']$ .

Отже, оператор  $\hat{\Delta}_1$  із (5.1.9) переходить у новий оператор  $\hat{\Delta}_g$  шляхом заміни  $\Delta \tilde{\Phi}(k)$  на  $\Delta g(k)$ . Як покажемо нижче, знаменник у (5.1.13) завжди додатний і менший від одиниці. Тому  $\Delta g(k) > \Delta \tilde{\Phi}(k)$ . Вираз (5.1.9) набуває вигляду (Д.1), приведеного в додатку Д<sup>2</sup>.

<sup>2</sup>Конкретними розрахунками можна показати, що врахування доданків пропорційних до  $S_4, S_4 S_6, S_4 S_8, S_8$  тощо. дає зникаюче малу поправку до основного результату. Результати розрахунку подібних внесків наведені в додатку Д.

Тепер наведемо<sup>3</sup> аналог формули (2.2.36), в якій маємо виконати інтегрування за змінною  $\rho_{\mathbf{k}}$ , але вже з врахуванням поправки на усереднення потенціалу:

$$Z = CU_1 \int \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \leq B_1} [\beta \tilde{\Phi}(\mathbf{k}) - \beta \Phi(B_1, B')] \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right\} \times \quad (5.1.14)$$

$$\times (1 + \hat{\Delta}_g) I(R_2, R_4) (d\rho)^{N_1},$$

де

$$I(R_2, R_4) = \exp \left( -\frac{1}{2} R_2 \sum_{\mathbf{k} \leq B_1} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \frac{1}{4! N_1} R_4 \times \right. \quad (5.1.15)$$

$$\left. \times \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_i \leq B_1}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right).$$

Коефіцієнти  $R_2$  та  $R_4$  у (5.1.15) суттєво відрізняються один від одного за величиною. Як випливає з (2.2.39) та (2.2.40), для відношення  $R_2^2/R_4$  одержуємо співвідношення:

$$\frac{R_2^2}{R_4} = [U(y)]^2 / \varphi(y). \quad (5.1.16)$$

Приймаючи до уваги, що (див. також (2.4.19))

$$y_n = s^{3/2} y_n^{(0)}, \quad y_n^{(0)} = U(x_n) \left( \frac{3}{\varphi(x_n)} \right)^{1/2}$$

<sup>3</sup>Ми не ставимо тут за мету розрахувати точну поправку від оператора  $\hat{\Delta}_g$ . Далі обмежуватимемось лише першим доданком у (Д.1) і позначатимемо його  $\hat{\Delta}_g^{(1)}$ . Більше того, ми не розглядатимемо тут внесків від поправок другого та третього порядків:  $\hat{\Delta}_g^{(2)}$ ,  $\hat{\Delta}_g^{(3)}$ , ... Як показано в [16], основний внесок у величину  $\alpha$ , яка формує поправку до критичного показника кореляційної функції  $\eta$ , дає перший порядок теорії збурень за  $\hat{\Delta}_g^{(1)}$ . Внески до  $\alpha$  від діаграм у другому і третьому порядку за  $\hat{\Delta}_g^{(1)}$  малі. Відповідні розрахунки елементарні, але громіздкі.

та дані рис. 2.3 знаходимо, що  $R_4 \ll R_2^2$  навіть для блочних структур з малими номерами  $n$  [350]. Зі збільшенням  $n$  величина  $\frac{(R_2^{(n)})^2}{R_4^{(n)}}$  зростає. Враховуючи сказане вище, розглядатимемо дію оператора  $\hat{\Delta}_g^{(1)}$  лише на  $\exp\left(-\frac{1}{2}R_2 \sum_{k \leq B_1} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}\right)$ . У результаті знаходимо:

$$\begin{aligned} \hat{\Delta}_g^{(1)} = & \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_6 \\ k_i \leq B_1}} \left( \frac{\varphi(x)}{2a'_4} \right)^2 \frac{\partial^6}{\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \partial \rho_{\mathbf{k}_6}} \frac{1}{(N')^4} \sum_{B_1 < \mathbf{k} \leq B'} \Delta g(\mathbf{k}) \times \\ & \times \sum_{\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_2} \exp[-i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k})\mathbf{l}_1 - i(\mathbf{k}_4 + \mathbf{k}_5 + \mathbf{k}_6 - \mathbf{k})\mathbf{l}_2]. \end{aligned} \quad (5.1.17)$$

У подальших розрахунках в операторі  $\hat{\Delta}_g^{(1)}$  виділятимемо три спарених похідних типу:

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \partial \rho_{-\mathbf{k}_1}}, \quad \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{k}_2} \partial \rho_{-\mathbf{k}_2}}, \quad \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{k}_3} \partial \rho_{-\mathbf{k}_3}}. \quad (5.1.18)$$

Символи Кронекера  $\delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}}$  та  $\delta_{\mathbf{k}_4 + \mathbf{k}_5 + \mathbf{k}_6 - \mathbf{k}}$  не дають змоги спарювати похідні з індексами  $\mathbf{k}_i$  та  $\mathbf{k}_j$ , які належать до одного й того ж символу. Наприклад, якщо припустити  $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = 0$ , то виходить  $\mathbf{k}_3 + \mathbf{k} = 0$ , що неможливо, оскільки всі  $k_i \leq B_1$ , а  $k > B_1$ . Спарюються похідні  $\partial/\partial \rho_{\mathbf{k}}$  з індексами  $\mathbf{k}$  різних експонент, наприклад,  $\mathbf{k}_1$  і  $\mathbf{k}_4$ ,  $\mathbf{k}_2$  і  $\mathbf{k}_5$ ,  $\mathbf{k}_3$  і  $\mathbf{k}_6$ . У результаті знаходимо:

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_6 \\ k_i \leq B_1}} \frac{\partial^6}{\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \partial \rho_{\mathbf{k}_6}} \exp[-i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k})\mathbf{l}_1 - \\ & \quad - i(\mathbf{k}_4 + \mathbf{k}_5 + \mathbf{k}_6 - \mathbf{k})\mathbf{l}_2] = \\ & = 6 \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 \\ k_i \leq B_1}} \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \partial \rho_{-\mathbf{k}_1}} \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{k}_2} \partial \rho_{-\mathbf{k}_2}} \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{k}_3} \partial \rho_{-\mathbf{k}_3}} \times \\ & \quad \times \exp[-i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k})(\mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2)]. \end{aligned} \quad (5.1.19)$$

Оператор  $\hat{\Delta}_g$  у (5.1.14) діє лише на доданки, що містять  $R_2$ . Тому в (5.1.14) кожна спарена похідна типу (5.1.18), діючи на експоненту (5.1.15), дає

$$-R_2 + R_2^2 \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}.$$

Загалом, розкриваючи результат дії оператора  $\hat{\Delta}_g^{(1)}$

$$\hat{\Delta}_g^{(1)} I(R_2, R_4) = \Delta_g^{(1)} I(R_2, R_4), \quad (5.1.20)$$

одержуємо таку поправку:

$$\begin{aligned} \Delta_g^{(1)} = & -\frac{3}{4} \left( \frac{\varphi(x)}{a'_4} \right)^2 R_2^3 \sum_1 \mathcal{I}_1(\bar{x}) \mathcal{I}_2(\bar{x}) \times \\ & \times \left[ N' \mathcal{I}_1^2(\bar{x}) - 3R_2 \mathcal{I}_1(\bar{x}) \sum_{\mathbf{k} \leq B_1} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{l}} + \right. \\ & \left. + 3R_2^2 s^{-d} \frac{1}{2N_1} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_i \leq B_1}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} e^{-i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3)\mathbf{l}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right]. \end{aligned} \quad (5.1.21)$$

Тут  $\mathbf{l} = \mathbf{l}_1 - \mathbf{l}_2$ . Величина  $\bar{x} = |\mathbf{l}|/c'$  характеризує віддаль до найближчих сусідів у простій кубічній ґратці (див. додаток Е, табл. Е.1).

Для величин<sup>4</sup>  $\mathcal{I}_1(\bar{x})$  та  $\mathcal{I}_2(\bar{x})$  маємо:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_1(\bar{x}) &= \frac{1}{N'} \sum_{\mathbf{k} \leq B_1} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{l}}, \\ \mathcal{I}_2(\bar{x}) &= \frac{1}{N'} \sum_{B_1 < \mathbf{k} \leq B'} \Delta g(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{l}}. \end{aligned} \quad (5.1.22)$$

<sup>4</sup>Зауважимо, що позначення  $\mathcal{I}_1$ ,  $\mathcal{I}_2$  не мають жодного відношення до аналогічних позначень розділу 4 (наприклад, формула (4.2.18)).



Перша з них  $\mathcal{I}_1(\bar{x})$  з точністю до деякого доданку  $Y(\bar{x})$  є символом Кронекера

$$\mathcal{I}_1(\bar{x}) = \delta_1 - Y(\bar{x}). \quad (5.1.23)$$

У виразі для  $\mathcal{I}_1(\bar{x})$  треба виділяти символ Кронекера  $\delta_1$ . Це пов'язано з тим, що величини  $\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_2$  є векторами ґратки з періодом  $c'$  ( $(c')^3 = V/N'$ ,  $c' = \pi b\sqrt{2}$ ). Величини  $k_i$  ( $k_i \leq B_1$ ), за якими виконується сумування  $\mathcal{I}_1(\bar{x})$ , відповідають компонентам векторів такої ж оберненої ґратки, причому  $k_i = 2\pi n_i/N'_i c'$ , де  $i = x, y, z$ ;  $-N'_i/2 < n_i \leq N'_i/2$ . Виділяємо із області хвильових векторів  $k \in [0, B']$  ту її частину  $k \in (B_1, B']$ , де саме й враховується поправка на усереднення потенціалу. При цьому

$$Y(\bar{x}) = \frac{1}{N'} \sum_{B_1 < k \leq B'} e^{-ikl}. \quad (5.1.24)$$

Розрахунку величин  $\mathcal{I}_1(\bar{x})$  та  $\mathcal{I}_2(\bar{x})$  присвячений додаток Е.

Вираз (5.1.21) дає змогу знайти поправку на усереднення потенціалу в першому порядку теорії збурень за  $\Delta\tilde{\Phi}(k)$  (або за  $\Delta g(k)$ ). У проведених нами обчисленнях поправка є пропорційна до множника  $[S_4/(2\pi)^4]^2$ . Такий самий множник входите у поправки в другому, третьому і вищих порядках теорії збурень за  $\Delta\tilde{\Phi}(k)$ . Як показано в [16] (див. §26), внесок другого і вищих порядків теорії збурень набагато менший порівняно з лінійним і ним можна знехтувати на першому етапі розрахунку. Повертаючись до формули (5.1.21), знаходимо вираз

$$\begin{aligned} \Delta_g^{(1)} = & -\frac{3}{4}q \cdot tR_2^3 \frac{\varphi^2(x)}{(a'_4)^2} \left\{ N'F_0 - 6R_2A_0 \frac{1}{2} \sum_{k \leq B_1} \rho_k \rho_{-k} + \right. \\ & + 3R_2B_0 \frac{1}{2} \sum_{k \leq B_1} c'^2 k^2 \rho_k \rho_{-k} + \\ & \left. + 3 \cdot s^{-3} R_2^2 C_0 \frac{1}{2} \frac{1}{N_1} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \leq B_1}} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} \right\}, \end{aligned} \quad (5.1.25)$$

в якому маємо

$$\begin{aligned}
 F_0 &= - \sum_{\bar{x} \neq 0} Y^3(\bar{x})(Y(\bar{x}) - Z(\bar{x}))\rho(\bar{x}), \\
 A_0 &= \sum_{\bar{x} \neq 0} Y^2(\bar{x})(Y(\bar{x}) - Z(\bar{x}))\rho(\bar{x}), \\
 B_0 &= \sum_{\bar{x} \neq 0} \bar{x}^2 Y^2(\bar{x})(Y(\bar{x}) - Z(\bar{x}))\rho_1(\bar{x}), \\
 C_0 &= - \sum_{\bar{x} \neq 0} Y(\bar{x})(Y(\bar{x}) - Z(\bar{x}))\rho(\bar{x}).
 \end{aligned} \tag{5.1.26}$$

Постійні  $F_0$ ,  $A_0$ ,  $B_0$  та  $C_0$  подано в додатку Е у табл. Е.2. Там приводяться й вирази для величини  $t$  та функції  $Z(\bar{x})$ .

Ми прийшли до першого суттєвого результату: одержали зміни до коефіцієнтів блочного гамільтоніану (2.2.48), які вносяться при врахуванні поправки на усереднення потенціалу.

Результат інтегрування статистичної суми за множиною КЗ нульового рівня з врахуванням поправки на усереднення потенціалу в лінійному за  $\Delta\Phi(k)$  наближенні запишемо у вигляді:

$$\begin{aligned}
 Z &= 2^{N+(N_1-1)/2} Q_0 [Q(P)]^{N_1} e^{N' f_0} \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_1} \tilde{d}_1(k) \rho_k \rho_{-k} - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{4! N_1} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \leq B_1}} \tilde{a}_4^{(1)} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} \right\} (d\rho)^{N_1}.
 \end{aligned} \tag{5.1.27}$$

Порівняно з одержаними раніше результатами (формули (2.2.46)–(2.2.48)) у (5.1.27) виникають нові величини. Зокрема,

$$f_0 = -\frac{3\sqrt{3}}{4} q \cdot ts^6 U(x) U^3(y) F_0 \left( y \cdot \sqrt{a'_4} \right)^{-1} \tag{5.1.28}$$

визначає поправку до парціальної статистичної суми  $Q_0$ . Коефіцієнт  $\tilde{d}_1(k)$  дорівнює

$$\tilde{d}_1(k) = \tilde{d}_1(0) + 2\beta\tilde{\Phi}(0)b^2 k^2(1 + \alpha_0). \tag{5.1.29}$$

Тут

$$\begin{aligned} \tilde{d}_1(0) &= -q + d(B_1, B')N(x)(1 - G(x)A_0), \\ G(x) &= \frac{27}{2\sqrt{3}}s^6 \frac{U^3(y)}{y} U(x) \frac{q \cdot t}{\sqrt{a'_4}}, \end{aligned} \quad (5.1.30)$$

а величина  $\alpha_0$  задана виразом

$$\alpha_0 = \frac{9\pi^2}{4} s^6 U^4(y) \bar{q} t B_0. \quad (5.1.31)$$

Коефіцієнт  $\tilde{a}_4^{(1)}$  визначається із співвідношення:

$$\tilde{a}_4^{(1)} = a'_4 s^{-3} E(x)(1 + \mathcal{K}(x)C_0), \quad (5.1.32)$$

де

$$\mathcal{K}(x) = 27s^3 \frac{U^5(y)}{y\varphi(y)} U(x) \sqrt{\frac{3}{a'_4} q t}.$$

Повторимо описану вище процедуру інтегрування за множинами КЗ першого, другого й дальших рівнів. У результаті для статистичної суми одержимо вираз:

$$Z = 2^N 2^{(N_{n+1}-1)/2} \tilde{Q}_0 \tilde{Q}_1 \dots \tilde{Q}_n [\tilde{Q}(P_n)]^{N_{n+1}} Z_{n+1}, \quad (5.1.33)$$

де  $\tilde{Q}_n$  парціальна статистична сума  $n$ -ої блочної структури

$$\begin{aligned} [\tilde{Q}_n]^{1/N_n} &= \left( \frac{3}{\varphi(y_{n-1})} \right)^{1/4} \exp \left( \frac{x_n^2}{4} + \frac{y_{n-1}^2}{4} \right) \times \\ &\times U(0, x_n) U(0, y_{n-1}) \exp(f(x_n)). \end{aligned} \quad (5.1.34)$$

Аргументами  $x_n$  та  $y_{n-1}$  тут виступають величини:

$$x_n = \sqrt{3} \frac{\tilde{d}_n(B_{n+1}, B_n)}{\sqrt{\tilde{a}_4^{(n)}}}, \quad y_{n-1} = s^{d/2} U(x_{n-1}) \left( \frac{3}{\varphi(x_{n-1})} \right)^{1/2}. \quad (5.1.35)$$

Для функції  $f(x_n)$  маємо

$$f(x_n) = -\frac{3\sqrt{3}}{4} s^6 U(x_n) \frac{U^3(y_n)}{y_n} \frac{q_n t_n}{\sqrt{\tilde{a}_4^{(n)}}} F_0, \quad (5.1.36)$$

де

$$q_n = q \frac{1 + \alpha_0}{s^2} \cdot \frac{1 + \alpha_1}{s^2} \cdots \frac{1 + \alpha_{n-1}}{s^2}, \quad (5.1.37)$$

а для  $t_n$  отримуємо

$$t_n = \left( \frac{\tilde{a}_4^{(n)}}{3} \right)^{1/2} \frac{s^2}{1 + \alpha_0} \frac{s^2}{1 + \alpha_1} \cdots \frac{s^2}{1 + \alpha_{n-1}} \frac{t_0^{(n)}}{\beta \tilde{\Phi}(0) U(x_n)},$$

$$t_0^{(n)} = \frac{3}{1 + s^{-1} + s^{-2}} + \frac{3a_n}{1 - s^{-3}} I_0^{(n)}. \quad (5.1.38)$$

Для  $I_0^{(n)}$  справедливий вираз (Е.6), у який замість  $a$  слід підставити  $a_n$ :

$$a_n = \bar{q} - \left( \frac{\tilde{a}_4^{(n)}}{3} \right)^{1/2} \frac{s^2}{1 + \alpha_0} \frac{s^2}{1 + \alpha_1} \cdots \frac{s^2}{1 + \alpha_{n-1}} \frac{1}{\beta \tilde{\Phi}(0) U(x_n)}. \quad (5.1.39)$$

Величина  $Z_{n+1}$  із (5.1.33) набуває вигляду:

$$Z_{n+1} = \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{n+1}} \tilde{d}_{n+1}(k) \rho_k \rho_{-k} - \frac{1}{4! N_{n+1}} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \leq B_{n+1}}} \tilde{a}_4^{(n+1)} \rho_{k_1} \cdots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} \right\} (d\rho)^{N_{n+1}}. \quad (5.1.40)$$

Для величин  $\tilde{d}_{n+1}$  та  $\tilde{a}_4^{(n+1)}$  справедливі рекурентні співвідношення:

$$\begin{aligned} \tilde{d}_{n+1}(B_{n+2}, B_{n+1}) &= \tilde{d}_n(B_{n+1}, B_n) \tilde{N}(x_n) - q \left( 1 - \frac{1 + \alpha_n}{s^2} \right) \times \\ &\quad \times \frac{1 + \alpha_0}{s^2} \frac{1 + \alpha_1}{s^2} \dots \frac{1 + \alpha_{n-1}}{s^2}, \\ \tilde{a}_4^{(n+1)} &= \tilde{a}_4^{(n)} s^{-3} \tilde{E}(x_n). \end{aligned} \quad (5.1.41)$$

Функції  $\tilde{N}(x_n)$  та  $\tilde{E}(x_n)$  визначаються із співвідношень:

$$\begin{aligned} \tilde{N}(x_n) &= N(x_n)(1 - G(x_n)A_0), \\ \tilde{E}(x_n) &= E(x_n)(1 + \mathcal{K}(x_n)C_0), \end{aligned} \quad (5.1.42)$$

де  $N(x_n)$  та  $E(x_n)$  наведені в (2.3.19), (2.3.20). Поправки від врахування внеску на усереднення потенціалу задані доданками  $G(x_n)A_0$  та  $\mathcal{K}(x_n)C_0$ , де

$$\begin{aligned} G(x_n) &= \frac{27}{2\sqrt{3}} s^6 \frac{U^3(y_n)}{y_n} U(x_n) \frac{q \cdot t_n}{\sqrt{\tilde{u}_n}}, \\ \mathcal{K}(x_n) &= 27\sqrt{3} s^3 \frac{U^5(y_n)}{y_n \varphi(y_n)} U(x_n) \frac{q \cdot t_n}{\sqrt{\tilde{u}_n}}. \end{aligned} \quad (5.1.43)$$

Тут

$$\begin{aligned} t_n &= \sqrt{\frac{\tilde{u}_n}{3}} \frac{t_0^{(n)}}{\beta \tilde{\Phi}(0)} \frac{1}{U(x_n)}, \\ t_0^{(n)} &= \frac{3}{1 + s^{-1} + s^{-2}} + \frac{3a_n}{1 - s^{-3}} \int_{1/s}^1 \frac{dk}{k^2 - a_n}, \end{aligned} \quad (5.1.44)$$

де

$$a_n = \bar{q} - \sqrt{\frac{\tilde{u}_n}{3}} \frac{1}{\beta \tilde{\Phi}(0)} \frac{1}{U(x_n)}. \quad (5.1.45)$$

Для величини  $\alpha_n$ , яка визначає поправку на усереднення потенціалу на  $n$ -му рівні інтегрування, маємо:

$$\alpha_n = \frac{9\pi^2}{4} s^6 \bar{q} t_n U^4(y_n) B_0. \quad (5.1.46)$$

Аналогічно до масштабних перетворень (2.4.3) замість  $r_n$  і  $u_n$  введемо величини

$$\begin{aligned} \tilde{r}_n &= \frac{s^2}{1 + \alpha_0} \cdot \frac{s^2}{1 + \alpha_1} \cdots \frac{s^2}{1 + \alpha_{n-1}} \tilde{d}_n(0), \\ \tilde{u}_n &= \frac{s^4}{(1 + \alpha_0)^2} \frac{s^4}{(1 + \alpha_1)^2} \cdots \frac{s^4}{(1 + \alpha_{n-1})^2} \tilde{a}_4^{(n)}. \end{aligned} \quad (5.1.47)$$

які задовольняють таким рекурентним співвідношенням:

$$\begin{aligned} \tilde{r}_{n+1} &= \frac{s^2}{1 + \alpha_n} \left[ (\tilde{r}_n + q) \tilde{N}(x_n) - q \right], \\ \tilde{u}_{n+1} &= \frac{s^{4-d}}{(1 + \alpha_n)^2} \tilde{u}_n \tilde{E}(x_n). \end{aligned} \quad (5.1.48)$$

Одержані рекурентні співвідношення (5.1.48) містять дві суттєві відмінності від РС (2.4.4). Перша полягає в специфічній заміні змінних (5.1.47), що містить множники  $(1 + \alpha_0)(1 + \alpha_1) \dots (1 + \alpha_{n-1})$ . Друга стосується виду спеціальних функцій  $\tilde{N}$  та  $\tilde{E}$ , які відрізняються від (2.3.19), (2.3.20). Ця відмінність, як буде видно далі, призводить до зсуву координат фіксованої точки і пов'язана з поправками до критичних показників термодинамічних функцій.

Потрібно було б врахувати ще поправки, пов'язані з переходом на блочну ґратку, які породжуються визначеною виразами (2.2.28), (2.2.29), (2.2.31) та (2.2.34) функцією  $\Omega(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4)$ . Легко переконатись, що поправки першого порядку за  $\Delta_4$  у (2.2.32) дорівнюють нулеві. Крім того, нульовими стають ті поправки другого порядку, які зв'язані з множителем  $S_4^2 R_2^5$ . Внаслідок цього поправку, пов'язану з переходом на блочну ґратку, вважати мемо несуттєвою.

## 5.2. Дослідження рекурентних співвідношень

Знайдемо фіксовану точку РС (5.1.48). Використаємо методику досліджень, описану в розділі 2. Зокрема, в § 2.7 отримано рівняння для  $T_c$ , яке справедливе при  $\Delta\tilde{\Phi}(k) = 0$ . У випадку  $T = T_c$  для величин  $r_n$  та  $u_n$  із (2.4.4) виконуються рівності:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} r_n = r^*, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} u_n = u^*. \quad (5.2.1)$$

Подібна ситуація реалізується і при  $\Delta\tilde{\Phi}(k) \neq 0$ . У цьому випадку  $\alpha \neq 0$  і РС мають форму (5.1.48). Як частковий розв'язок ці РС мають нову фіксовану точку, відмінну від випадку  $\Delta\tilde{\Phi}(k) = 0$ . Справді, припускаючи, що

$$\tilde{r}_{n+1} = \tilde{r}_n = \tilde{r}, \quad \tilde{u}_{n+1} = \tilde{u}_n = \tilde{u}, \quad (5.2.2)$$

із другого рівняння (5.1.48) одержуємо рівність

$$s\tilde{E}(\tilde{x}) = (1 + \alpha^*)^2, \quad (5.2.3)$$

з якої знаходимо величину

$$\tilde{x} = \sqrt{3}(\tilde{r} + q)(\tilde{u})^{-1/2}, \quad (5.2.4)$$

що є функцією параметра  $s$ . Точність розрахунку величини  $\tilde{x}$  має відповідати наближенню, в якому одержані РС (5.1.48). Тому в лінійному наближенні за  $\Delta\tilde{\Phi}(k)$  із (5.2.3) знаходимо:

$$\tilde{x} = x^* - \frac{\mathcal{K}(x^*)C_0 - 2\alpha^*}{\psi(x^*)}, \quad \psi(x^*) = \frac{E'(x^*)}{E(x^*)}. \quad (5.2.5)$$

Тут величина  $x^*$  визначається з рівняння

$$E(x^*) = s^{-1}$$

і є, по суті, значенням аргумента  $x_n$  у фіксованій точці, отриманій без врахування залежності фур'є-образу потенціалу від

хвильового вектора. Для  $\alpha^*$  та  $\mathcal{K}(x^*)$  маємо

$$\mathcal{K}(x^*) = 27\sqrt{3}s^3 \frac{U^5(y^*)}{y^*\varphi(y^*)} U(x^*) \frac{q \cdot t^*}{\sqrt{u^*}}, \quad (5.2.6)$$

$$\alpha^* = \frac{9\pi^2}{4} s^6 U^4(y^*) \bar{q} t^* B_0,$$

де  $t^* = t_n(u^*, x^*)$ . Причому, для величини  $y^*$  справедливі співвідношення (А.6). Представимо координати фіксованої точки РС (5.2.2) у вигляді

$$\tilde{r} = -\tilde{f}\beta\tilde{\Phi}(0), \quad \tilde{u} = \tilde{\varphi}(\beta\tilde{\Phi}(0))^2, \quad (5.2.7)$$

де

$$\tilde{f} = \bar{q} \frac{\tilde{N}(\tilde{x}) - 1}{\tilde{N}(\tilde{x}) - (1 + \alpha^*)/s^2}, \quad (5.2.8)$$

$$\tilde{\varphi} = 3\bar{q}^2 \left[ \frac{s^2 - \alpha^* - 1}{s^2 \tilde{n}(\tilde{x}) - \tilde{x}(1 + \alpha^*)} \right]^2.$$

Тут введені такі позначення:

$$\tilde{n}(\tilde{x}) = n(\tilde{x})(1 - G(\tilde{x})A_0), \quad n(\tilde{x}) = \frac{\tilde{y}U(\tilde{y})}{U(\tilde{x})}, \quad (5.2.9)$$

$$G(\tilde{x}) = \frac{9\sqrt{3}}{2} s^6 U^3(\tilde{y})(\tilde{y})^{-1} U(\tilde{x}) \tilde{q} \tilde{t} / \sqrt{\tilde{\varphi}},$$

а також  $\tilde{t} = t_n(\tilde{\varphi}, \tilde{x})$ . У лінійному за  $\Delta\tilde{\Phi}(k)$  наближенні знаходимо

$$\tilde{f} = f_0 \left[ 1 + (1 - s^{-2}) \frac{[x^* n'(x^*) - n(x^*)] \Delta x - n(x^*) G(x^*) x^* A_0}{(n(x^*) - x^*)(n(x^*) - x^* s^{-2})} + \frac{\alpha^* x^* s^{-2}}{n(x^*) - x^* s^{-2}} \right],$$

$$\tilde{\varphi} = \varphi_0 \left[ 1 + 2 \frac{(-n'(x^*) + s^{-2}) \Delta x + n(x^*) G(x^*) A_0 + \alpha^* x^* s^{-2}}{n(x^*) - x^* s^{-2}} - \frac{2\alpha^* s^{-2}}{1 - s^{-2}} \right]. \quad (5.2.10)$$



Величини  $f_0, \varphi_0$  характеризують координати фіксованої точки без врахування залежності  $\Phi(k)$  від хвильового вектора,  $\Delta x = \tilde{x} - x^*$ , а для  $n'(x^*)$  маємо

$$n'(x^*) = n(x) \left[ \frac{y'}{y} + y' \frac{U'(y)}{U(y)} - \frac{U'(x)}{U(x)} \right] \Big|_{\substack{x=x^* \\ y=y^*}}. \quad (5.2.11)$$

У табл. 5.1 подані значення величин  $\tilde{f}$  та  $\tilde{\varphi}$ ,  $\Delta x$  та  $\alpha^*$  для деяких проміжних значень параметра РГ.

Табл. 5.1. Координати фіксованої точки  $\tilde{r}, \tilde{u}$ , зміщення основного аргумента  $x_n$  у фіксованій точці  $\Delta x = \tilde{x} - x^*$  та величина  $\alpha^*$  із (5.2.6)

$s$	3	$s^*$	4	5
$\tilde{f}$	0.3635	0.4308	0.4709	0.5143
$\tilde{\varphi}$	0.4975	0.6353	0.7261	0.8630
$\Delta x$	0.2551	0.3332	0.3782	0.5047
$\alpha^*$	0.0113	0.0235	0.0330	0.0595

Виконаємо лінеаризацію РС (5.1.48) в околі фіксованої точки (5.2.7). Маємо

$$\begin{pmatrix} \tilde{r}_{n+1} - \tilde{r} \\ \tilde{u}_{n+1} - \tilde{u} \end{pmatrix} = \tilde{\mathcal{R}} \begin{pmatrix} \tilde{r}_n - \tilde{r} \\ \tilde{u}_n - \tilde{u} \end{pmatrix}. \quad (5.2.12)$$

Загальні вирази для елементів  $\tilde{R}_{ij}$  матриці перетворення  $\tilde{\mathcal{R}}$  (5.2.12) мають вигляд

$$\tilde{R}_{11} = \frac{s^2}{1 + \tilde{\alpha}} n(\tilde{x}) [T(\tilde{x}) - G(\tilde{x})A_0(\Pi(\tilde{x}) + T(\tilde{x}))], \quad (5.2.13)$$

$$\tilde{R}_{12} = \frac{s^2}{1 + \tilde{\alpha}} \frac{n(\tilde{x})(\tilde{u})^{-1/2}}{2\sqrt{3}} [1 - \tilde{x}T(\tilde{x}) + G(\tilde{x})\tilde{x}A_0(\Pi(\tilde{x}) + T(\tilde{x}))],$$

$$\begin{aligned}\tilde{R}_{21} &= \frac{sE(\tilde{x})}{(1+\tilde{\alpha})^2} (3\tilde{u})^{1/2} [\psi(\tilde{x}) + \mathcal{K}(\tilde{x})C_0(\psi(\tilde{x}) + \Pi_1(\tilde{x}))], \\ \tilde{R}_{22} &= \frac{sE(\tilde{x})}{(1+\tilde{\alpha})^2} \left\{ 1 - \frac{1}{2}\tilde{x}\psi(\tilde{x}) + \frac{1}{2}\mathcal{K}(\tilde{x})C_0[1 - \tilde{x}(\psi(\tilde{x}) + \Pi_1(\tilde{x}))] \right\},\end{aligned}$$

де  $\tilde{\alpha} = \alpha_n(\tilde{\varphi}, \tilde{x})$ , і введені наступні позначення:

$$\begin{aligned}T(\tilde{x}) &= \frac{\tilde{y}'}{\tilde{y}} + \tilde{y}' \frac{U'(\tilde{y})}{U(\tilde{y})} - \frac{U'(\tilde{x})}{U(\tilde{x})} = \frac{1}{n(\tilde{x})} \frac{\partial n(\tilde{x})}{\partial \tilde{x}}, \\ \Pi(\tilde{x}) &= -\frac{\tilde{y}'}{\tilde{y}} + 3\tilde{y}' \frac{U'(\tilde{y})}{U(\tilde{y})} + \frac{U'(\tilde{x})}{U(\tilde{x})} = \frac{1}{G(\tilde{x})} \frac{\partial G(\tilde{x})}{\partial \tilde{x}}, \\ \psi(\tilde{x}) &= \tilde{y}' \frac{\varphi'(\tilde{y})}{\varphi(\tilde{y})} - \frac{\varphi'(\tilde{x})}{\varphi(\tilde{x})} = \frac{1}{E(\tilde{x})} \frac{\partial E(\tilde{x})}{\partial \tilde{x}}, \\ \Pi_1(\tilde{x}) &= -\frac{\tilde{y}'}{\tilde{y}} + \tilde{y}' \left[ 5 \frac{U'(\tilde{y})}{U(\tilde{y})} - \frac{\varphi'(\tilde{y})}{\varphi(\tilde{y})} \right] + \frac{U'(\tilde{x})}{U(\tilde{x})} = \frac{1}{\mathcal{K}(\tilde{x})} \frac{\partial \mathcal{K}(\tilde{x})}{\partial \tilde{x}}, \\ \mathcal{K}(\tilde{x}) &= 27s^3 U^5(\tilde{y}) [\tilde{y}\varphi(\tilde{y})]^{-1} U(\tilde{x}) \tilde{q}\tilde{t} \left( \frac{3}{\tilde{\varphi}} \right)^{1/2}.\end{aligned}\quad (5.2.14)$$

Надалі всі обчислення виконуватимемо в наближенні лінійного внеску від поправки  $\Delta\tilde{\Phi}(k)$ . Для матричного елемента  $\tilde{R}_{11}$  із (5.2.13) знаходимо

$$\tilde{R}_{11} = R_{11}(1 - \alpha^*) + R_{11}^{(1)}\Delta x + R_{11}^{(2)}A_0, \quad (5.2.15)$$

де

$$\begin{aligned}R_{11} &= s^2 n(x^*)T(x^*), \\ R_{11}^{(1)} &= s^2 [n(x^*)T'(x^*) + n'(x^*)T(x^*)], \\ R_{11}^{(2)} &= -s^2 n(x^*)G(x^*)[\Pi(x^*) + T(x^*)].\end{aligned}\quad (5.2.16)$$

Тут похідна  $T'(x)$  обчислюється з виразу

$$\begin{aligned}T'(x) &= y'' \left( \frac{1}{y} + \frac{U'(y)}{U(y)} \right) + (y')^2 \left[ \frac{U''(y)}{U(y)} - \left( \frac{U'(y)}{U(y)} \right)^2 - \frac{1}{y^2} \right] - \\ &\quad - \frac{U''(x)}{U(x)} + \left( \frac{U'(x)}{U(x)} \right)^2,\end{aligned}\quad (5.2.17)$$

де

$$y'' = y' \left[ \frac{U'(x)}{U(x)} - \frac{1}{2} \frac{\varphi'(x)}{\varphi(x)} \right] + y \left[ \frac{U''(x)}{U(x)} - \left( \frac{U'(x)}{U(x)} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{\varphi''(x)}{\varphi(x)} + \left( \frac{1}{2} \frac{\varphi'(x)}{\varphi(x)} \right)^2 \right].$$

Для матричних елементів  $\tilde{R}_{12}$ ,  $\tilde{R}_{21}$  введемо позначення:

$$\tilde{R}_{12} = \tilde{R}_{12}^{(0)}(\tilde{u})^{-1/2}, \quad \tilde{R}_{21} = \tilde{R}_{21}^{(0)}(\tilde{u})^{1/2}. \quad (5.2.18)$$

Тоді для  $\tilde{R}_{12}^{(0)}$  отримуємо

$$\tilde{R}_{12}^{(0)} = R_{12}^{(0)}(1 - \alpha^*) + R_{12}^{(1)}\Delta x + R_{12}^{(2)}A_0, \quad (5.2.19)$$

де

$$\begin{aligned} R_{12}^{(0)} &= s^2 \frac{n(x^*)}{2\sqrt{3}} [1 - x^*T(x^*)], \\ R_{12}^{(1)} &= \frac{s^2}{2\sqrt{3}} \{n'(x^*)[1 - x^*T(x^*)] - n(x^*)[T(x^*) + x^*T'(x^*)]\}, \\ R_{12}^{(2)} &= s^2 \frac{n(x^*)}{2\sqrt{3}} G(x^*)x^*[\Pi(x^*) + T(x^*)], \end{aligned} \quad (5.2.20)$$

а також

$$\tilde{R}_{21}^{(0)} = R_{21}^{(0)}(1 - 2\alpha^*) + R_{21}^{(1)}\Delta x + R_{21}^{(2)}C_0, \quad (5.2.21)$$

де

$$\begin{aligned} R_{21}^{(0)} &= s\sqrt{3}E(x^*)\psi(x^*), \\ R_{21}^{(1)} &= s\sqrt{3}E(x^*)[\psi'(x^*) + \psi^2(x^*)], \\ R_{21}^{(2)} &= s\sqrt{3}E(x^*)\mathcal{K}(x^*)[\psi(x^*) + \Pi_1(x^*)]. \end{aligned} \quad (5.2.22)$$

Тут для  $\psi'(x)$  маємо

$$\psi'(x) = y'' \frac{\varphi'(y)}{\varphi(y)} + (y')^2 \left[ \frac{\varphi''(y)}{\varphi(y)} - \left( \frac{\varphi'(y)}{\varphi(y)} \right)^2 \right] + \left( \frac{\varphi'(y)}{\varphi(y)} \right)^2 - \frac{\varphi''(x)}{\varphi(x)}.$$

Для матричного елемента  $\tilde{R}_{22}$  знаходимо:

$$\tilde{R}_{22} = R_{22}(1 - 2\alpha^*) + R_{22}^{(1)} \Delta x + R_{22}^{(2)} C_0, \quad (5.2.23)$$

де

$$\begin{aligned} R_{22} &= sE(x^*) \left[ 1 - \frac{1}{2} x^* \psi(x^*) \right], \\ R_{22}^{(1)} &= sE(x^*) \left\{ \psi(x^*) \left[ 1 - \frac{x^*}{2} \psi(x^*) \right] - \frac{1}{2} [\psi(x^*) + x\psi'(x^*)] \right\}, \\ R_{22}^{(2)} &= sE(x^*) \frac{1}{2} \mathcal{K}(x^*) \{ 1 - x^* [\psi(x^*) + \Pi_1(x^*)] \}. \end{aligned} \quad (5.2.24)$$

Зауважимо, що величини  $R_{11}$ ,  $R_{12}^{(0)}$ ,  $R_{21}^{(0)}$ ,  $R_{22}$  у (5.2.15)–(5.2.24) співпадають з виразами для матричних елементів одержаних у (2.6.15) без врахування поправки на усереднення потенціалу. Внески у матричні елементи  $\tilde{R}_{ij}$  пропорційні до  $R_{ij}^{(1)} \Delta x$  відповідають зсуву фіксованої точки від урахування залежності фур'є-образу потенціалу взаємодії від хвильового вектора. Доданки типу  $R_{ij}^{(2)} A_0$  та  $R_{ij}^{(2)} C_0$  приводять до прямого внеску у  $\tilde{R}_{ij}$  від поправки на усереднення (див. табл. 5.2). Фіксована точка продовжує залишатись сідловою ( $\tilde{E}_1 > 1$ ,  $\tilde{E}_2 < 1$ ).

Знайдемо явні розв'язки РС (5.1.48) поблизу фіксованої точки. Для цього розрахуємо власні вектори і власні значення матриці переходу  $\tilde{R}$  із (5.2.12). У результаті знаходимо:

$$\begin{aligned} \tilde{r}_n &= \tilde{r} + \tilde{c}_1 \tilde{E}_1^n + \tilde{c}_2 \tilde{R} \tilde{E}_2^n, \\ \tilde{u}_n &= \tilde{u} + \tilde{c}_1 \tilde{R}_1 \tilde{E}_1^n + \tilde{c}_2 \tilde{E}_2^n, \end{aligned} \quad (5.2.25)$$

Табл. 5.2. Елементи та власні значення матриці  $\tilde{\mathcal{R}}$  із (5.2.12)

$s$	3	$s^*$	4	5
$\tilde{R}_{11}$	6.3900	8.6204	10.3647	15.3360
$\tilde{R}_{12}^{(0)}$	2.5667	3.7596	4.7182	7.4473
$\tilde{R}_{21}^{(0)}$	1.0939	1.3072	1.4328	1.7043
$\tilde{R}_{22}$	0.8805	0.9765	1.0410	1.1844
$\tilde{E}_1$	6.8596	9.2168	11.0407	16.1822
$\tilde{E}_2$	0.4109	0.3801	0.3649	0.3381

де  $\tilde{r}$  і  $\tilde{u}$  визначені в (5.2.7), (5.2.10), а для  $\tilde{c}_1$  маємо

$$\begin{aligned}\tilde{c}_1 &= [r' - \tilde{r} - (a'_4 - \tilde{u})\tilde{R}]\tilde{D}^{-1}, \\ \tilde{c}_2 &= [a'_4 - \tilde{u} - (r' - \tilde{r})\tilde{R}_1]\tilde{D}^{-1}.\end{aligned}\quad (5.2.26)$$

Тут  $r' = a'_2 - \beta\tilde{\Phi}(0)$  та  $a'_4$  - вихідні коефіцієнти (див. (2.5.12)),  $\tilde{E}_l$  - власні значення матриці  $\tilde{\mathcal{R}}$ ,

$$\tilde{R} = \frac{\tilde{R}_{12}}{\tilde{E}_2 - \tilde{R}_{11}}, \quad \tilde{R}_1 = \frac{\tilde{E}_1 - \tilde{R}_{11}}{\tilde{R}_{12}}, \quad \tilde{D} = \frac{\tilde{E}_1 - \tilde{E}_2}{\tilde{R}_{11} - \tilde{E}_2}.\quad (5.2.27)$$

Приймаючи до уваги позначення (5.1.47), знаходимо

$$\begin{aligned}\tilde{d}_n(B_{n+1}, B_n) &= s^{-2n} \left[ \prod_{m=0}^{n-1} (1 + \alpha_m) \right] \left[ \tilde{r} + q + \tilde{c}_1 \tilde{E}_1^n + \tilde{c}_2 \tilde{R} \tilde{E}_2^n \right], \\ \tilde{a}_4^{(n)} &= s^{-4n} \left[ \prod_{m=0}^{n-1} (1 + \alpha_m)^2 \right] \left[ \tilde{u} + \tilde{c}_1 \tilde{R}_1 \tilde{E}_1^n + \tilde{c}_2 \tilde{E}_2^n \right].\end{aligned}\quad (5.2.28)$$

Основною відмінністю розв'язків (5.2.28) від (2.6.23) є наявність множників типу  $(1 + \alpha_m)$ . У загальному випадку вони залежать від температури та номера блочної структури  $m$ . Однак

з'ясувалося [350], що у випадку  $T = T_c$  поведінка коефіцієнтів  $\tilde{d}_n$  та  $\tilde{a}_4^{(n)}$  із (5.2.28) є особливою. Приймаючи до уваги, що при  $T = T_c$

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \alpha_m(T_c) = \alpha^*, \quad (5.2.29)$$

одержуємо таку асимптотику цих величин за  $n$

$$\begin{aligned} \tilde{d}_n(B_{n+1}, B_n) &= (\tilde{r} + q)s^{-n(2-\eta)}, \\ \tilde{a}_4^{(n)} &= \tilde{u}s^{-2n(2-\eta)}, \end{aligned} \quad (5.2.30)$$

де показник  $\eta$  задається формулою

$$\eta = \frac{\alpha^*}{\ln s}. \quad (5.2.31)$$

Для  $s = 4$  маємо  $\eta = 0.024$ .

Отже, врахування поправки, пов'язаної з усередненням потенціалу  $\tilde{\Phi}(k)$ , для окремих блочних структур приводить до зміни асимптотики коефіцієнтів  $\tilde{d}_n$  та  $\tilde{a}_4^{(n)}$  при  $T = T_c$  (див. формули (2.6.10) та (2.6.12)).

### 5.3. Вільна енергія з врахуванням залежності фур'є-образу потенціалу від хвильового вектора

Загальна схема розрахунку вільної енергії, запропонована у попередніх розділах, застосовна до випадку врахування поправки на усереднення потенціалу. Незважаючи на зміни в розв'язках РС (5.2.28), легко показати, що й надалі

$$\tilde{c}_1 = \tilde{c}_{10}\tau, \quad (5.3.1)$$

де  $\tilde{c}_{10}$  – постійна відмінна від нуля при  $T = T_c$ , величина. Це дає змогу визначити  $m_\tau$  – точку виходу із критичного режиму. Аналогічно до результатів § 2.8, використовуємо умову

$$\tilde{d}_{m_\tau+1}(0) = 0 \quad (5.3.2)$$

для знаходження точки виходу з критичного режиму флуктуацій при  $T > T_c$ . Маємо

$$m_\tau = -\frac{\ln \tau}{\ln \tilde{E}_1} + \tilde{m}_0 - 1, \quad (5.3.3)$$

де  $\tilde{E}_1$  – більше власне значення матриці перетворення (5.2.12),

$$\tilde{m}_0 = \frac{\ln |\tilde{r}/\tilde{c}_{10}|}{\ln \tilde{E}_1}. \quad (5.3.4)$$

Розглянемо випадок, коли температура є більшою від  $T_c$ . Вираз для вільної енергії запишемо у вигляді:

$$F = F_0 + F_{\text{КР}} + F_{\text{ГГР}}, \quad (5.3.5)$$

де  $F_{\text{КР}}$  відповідає внеску коротко-, а  $F_{\text{ГГР}}$  – довгохвильових флуктуацій. Для  $F_{\text{КР}}$  маємо:

$$F_{\text{КР}} = -kT \sum_{n=0}^{m_\tau} \ln \tilde{Q}_n. \quad (5.3.6)$$

Величину  $\ln \tilde{Q}_n$  представимо у вигляді

$$\ln \tilde{Q}_n = \ln Q_n + N_n f(x_n), \quad (5.3.7)$$

де  $Q_n$  – вираз для парціальної статистичної суми  $n$ -ої блочної структури без врахування залежності від хвильового вектора потенціалу  $\tilde{\Phi}(k)$  (див. (3.1.4)), а  $f(x_n)$  описує додатковий внесок, який виникає при врахуванні  $\Delta\tilde{\Phi}(k)$ . Його зручно записати у вигляді

$$f(x_n) = -\frac{3\sqrt{3}}{4} s^6 F_0 q \alpha'_n t_n, \quad (5.3.8)$$

де для величини  $\alpha'_n$  маємо вираз

$$\alpha'_n = (\tilde{u}_n)^{-1/2} U(x_n) U^3(y_{n-1}) y_{n-1}^{-1}.$$

Для вільної енергії  $n$ -ої блочної структури (див. розділ 3) знаходимо

$$F_n = -kTN_n \left[ f_{\text{KP}}^{(0)} + \omega_0 + \tilde{A}_1(x_{n-1} - x^*) + \tilde{A}_2(x_{n-1} - x^*)^2 + \right. \\ \left. + \tilde{A}_3(x_n - x^*) + \tilde{A}_4(x_n - x^*)^2 \right],$$

де  $\tilde{A}_l = A_l - A_l''$ . Тут введені позначення

$$A_l'' = \omega_0 A_l',$$

$$\omega_0 = -\frac{3\sqrt{3}}{4} s^6 F_0 t^* \bar{q} \bar{\varphi}^{-1/2} U(x^*) (y^*)^{-4} \left( 1 - \frac{9}{2} (y^*)^{-2} + \dots \right),$$

$$A_1' = -4r_1 + 18r_1 [2(y^*)^2 - 9]^{-1},$$

$$A_2' = 10r_1^2 - 4r_2 + 9(2r_2 - 11r_1^2) [2(y^*)^2 - 9]^{-1},$$

$$A_3' = U'(x^*)/U(x^*), \quad A_4' = \frac{1}{2} U''(x^*)/U(x^*).$$

Загальні вирази для  $r_1$  і  $r_2$  подані в додатку А. Для вільної енергії критичного режиму отримуємо

$$F_{\text{KP}} = -kTN' \left[ a_0' + \ln Q(d) + \tilde{\gamma}_{01} + \tilde{\gamma}_{02}\tau + \tilde{\gamma}_{03}\tau^2 + \tilde{\gamma}'s^{-3(m_\tau+1)} \right]. \quad (5.3.9)$$

Тут  $Q(d)$  і  $a_0'$  обчислені в (2.2.18) та (2.5.12). Для коефіцієнтів із (5.3.9) маємо:

$$\tilde{\gamma}_{01} = s^{-3} \left[ \frac{f_{\text{KP}}^{(0)} + \omega_0}{1 - s^{-3}} + \frac{d_2 \tilde{c}_{2k} \tilde{E}_2}{1 - \tilde{E}_2 s^{-3}} + \frac{\tilde{d}_4 \tilde{b}_0 \tilde{E}_2^2}{1 - \tilde{E}_2^2 s^{-3}} \right], \\ \tilde{\gamma}_{02} = s^{-3} \left[ \frac{d_2 \tilde{c}_{2k1} \tilde{E}_2}{1 - \tilde{E}_2 s^{-3}} + \frac{\tilde{d}_4 \tilde{b}_1 \tilde{E}_2^2}{1 - \tilde{E}_2^2 s^{-3}} + \frac{d_1 \tilde{c}_{1k} \tilde{E}_1}{1 - \tilde{E}_1 s^{-3}} + \right. \\ \left. + \frac{\tilde{d}_5 \tilde{c}_{1k} \tilde{c}_{2k} \tilde{E}_1 \tilde{E}_2}{1 - \tilde{E}_1 \tilde{E}_2 s^{-3}} + \frac{\tilde{d}_7 \tilde{b}_0 \tilde{c}_{1k} \tilde{E}_1 \tilde{E}_2^2}{1 - \tilde{E}_1 \tilde{E}_2^2 s^{-3}} \right],$$



$$\begin{aligned}
\tilde{\gamma}_{03} = s^{-3} & \left[ \frac{d_2 \tilde{c}_{2k2} \tilde{E}_2}{1 - \tilde{E}_2 s^{-3}} + \frac{\tilde{d}_5 (\tilde{c}_{1k1} \tilde{c}_{2k} + \tilde{c}_{1k} \tilde{c}_{2k1}) \tilde{E}_1 \tilde{E}_2}{1 - \tilde{E}_1 \tilde{E}_2 s^{-3}} + \right. \\
& + \frac{\tilde{d}_4 \tilde{b}_2 \tilde{E}_2^2}{1 - \tilde{E}_2^2 s^{-3}} + \frac{d_1 \tilde{c}_{1k1} \tilde{E}_1}{1 - \tilde{E}_1 s^{-3}} + \frac{\tilde{d}_3 \tilde{c}_{1k}^2 \tilde{E}_1^2}{1 - \tilde{E}_1^2 s^{-3}} + \\
& + \frac{\tilde{d}_6 \tilde{c}_{2k} \tilde{c}_{1k}^2 \tilde{E}_1^2 \tilde{E}_2}{1 - \tilde{E}_1^2 \tilde{E}_2 s^{-3}} + \frac{\tilde{d}_7 (\tilde{b}_0 \tilde{c}_{1k1} + \tilde{b}_1 \tilde{c}_{1k}) \tilde{E}_1 \tilde{E}_2^2}{1 - \tilde{E}_1 \tilde{E}_2^2 s^{-3}} + \\
& \left. + \frac{\tilde{d}_8 \tilde{b}_0 \tilde{c}_{1k} \tilde{E}_1^2 \tilde{E}_2^2}{1 - \tilde{E}_1^2 \tilde{E}_2^2 s^{-3}} \right], \\
\tilde{\gamma}' = \frac{f_{\text{KP}}^{(0)} + \omega_0}{1 - s^{-3}} & + \frac{d_1 \tilde{f}^2}{1 - \tilde{E}_1 s^{-3}} + \frac{\tilde{d}_3 \tilde{f}^2}{1 - \tilde{E}_1^2 s^{-3}}. \tag{5.3.10}
\end{aligned}$$

Формули (5.3.10) відрізняються від аналогічних виразів, отриманих без врахування залежності від хвильового вектора потенціалу взаємодії, перенормованими власними значеннями  $\tilde{E}_1$  і  $\tilde{E}_2$  і коефіцієнтами  $\tilde{d}_l$  (із  $l \geq 3$ ), які у випадку врахування вищезгаданої залежності мають вигляд:

$$\begin{aligned}
\tilde{d}_3 &= d_3 + B_3^2 A_5'' \tilde{E}_1^{-1}, \quad \tilde{d}_4 = d_4 + B_1^2 A_5'' \tilde{E}_2^{-1}, \\
\tilde{d}_5 &= d_5 + B_1 B_3 A_5'' (\tilde{E}_1^{-1} + \tilde{E}_2^{-1}), \\
\tilde{d}_6 &= d_6 + B_3 B_4 A_5'' (\tilde{E}_1^{-1} \tilde{E}_2^{-1} + \tilde{E}_2^{-1}) + B_1 B_6 A_5'' (\tilde{E}_2^{-1} + \tilde{E}_1^{-2}), \\
\tilde{d}_7 &= d_7 + B_1 B_4 A_5'' (\tilde{E}_1^{-1} \tilde{E}_2^{-1} + \tilde{E}_2^{-1}) + B_2 B_3 A_5'' (\tilde{E}_2^{-2} + \tilde{E}_1^{-1}), \\
\tilde{d}_8 &= d_8 + B_2 B_6 A_5'' (\tilde{E}_1^{-2} + \tilde{E}_2^{-2}) + B_3 B_5 A_5'' (\tilde{E}_1^{-1} + \tilde{E}_1^{-1} \tilde{E}_2^{-2}) + \\
& + B_4^2 A_5'' (\tilde{E}_1 \tilde{E}_2)^{-1} + B_1 B_7 A_5'' (\tilde{E}_2^{-1} + \tilde{E}_1^{-2} \tilde{E}_2^{-1}),
\end{aligned}$$

де  $A_5'' = \omega_0 (U'(x^*)/U(x^*)) [-4r_1 + 18r_1(2(y^*)^2 - 9)^{-1}]$ . Зауважимо, що вирази для  $A_l$  і  $B_l$  аналогічні наведеним у (3.1.21), (3.1.25). Тут замість координат фіксованої точки  $f_0$ ,  $\varphi_0$  слід підставити  $\tilde{f}$  і  $\tilde{\varphi}$ , а замість  $E_l$  і  $R_{lj}$  – перенормовані власні значення  $\tilde{E}_l$  і матричні елементи  $\tilde{R}_{ij}$ . Це саме стосується і величин  $\tilde{c}_{ikm}$ , значення яких відрізнятиметься від аналогічних  $c_{ikm}$ .

Виділимо у виразі (5.3.9) температурну залежність і знайдемо внесок до вільної енергії від ділянки КР. Маємо

$$F_{\text{КР}} = -kTN' [\tilde{\gamma}'_{01} + \tilde{\gamma}_1\tau + \tilde{\gamma}_2\tau^2 - \tilde{\gamma}_{10}\tau^{3\tilde{\nu}}], \quad (5.3.11)$$

де

$$\begin{aligned} \tilde{\gamma}'_{01} &= \bar{a}_0 + \tilde{\gamma}_{01}, & \tilde{\gamma}_2 &= \bar{a}_2 + \tilde{\gamma}_{03}, \\ \tilde{\gamma}'_1 &= \bar{a}_1 + \tilde{\gamma}_{02}, & \tilde{\gamma}_{10} &= \tilde{\gamma}'s^{-3m_0}. \end{aligned}$$

Вирази для  $\bar{a}_i$  ті ж, що і в (3.1.31) де, однак

$$\begin{aligned} x_{oc} &= \sqrt{3} \left[ \bar{q} - \tilde{f} + \tilde{c}_{2k} \tilde{R}^{(0)} \tilde{\varphi}^{-1/2} \right] (\tilde{\varphi} + \tilde{c}_{2k})^{-1/2}, \\ \tilde{R}^{(0)} &= \frac{\tilde{R}_{12}^{(0)}}{\tilde{E}_2 - \tilde{R}_{11}}. \end{aligned}$$

Підкреслимо, що нерегулярна частина вільної енергії КР  $F_{\text{КР}}^c$  пропорційна до  $\tau^{3\tilde{\nu}}$ , де

$$\tilde{\nu} = \frac{\ln s}{\ln \tilde{E}_1}. \quad (5.3.12)$$

При цьому відбувається перенормування критичного показника кореляційної довжини, що призводить до зміни критичної поведінки теплоємності та інших характеристик системи поблизу температури  $T_c$ .

При врахуванні залежності від хвильового вектора фур'є-образу потенціалу змінюється функціональний вигляд величини  $\tilde{d}_{n+1}(k)$ . Для вихідного значення  $d'(k)$  маємо вираз

$$a'_2 - \beta\tilde{\Phi}(k) = a'_2 - \beta\tilde{\Phi}(0) + 2b^2\beta\tilde{\Phi}(0)k^2.$$

Після усереднення  $k^2$  на інтервалі  $(B_1, B']$  та інтегрування за множиною КЗ нульового рівня коефіцієнт  $\tilde{d}(k)$  переходить у вираз

$$\tilde{d}_1(k) = \tilde{a}_2^{(1)} - \beta\tilde{\Phi}(0) + 2b^2\beta\tilde{\Phi}(0)(1 + \alpha_0)k^2.$$

Середнє значення  $\tilde{d}_1(k)$  на інтервалі  $k \in (B_2, B_1]$  можна подати у вигляді

$$\tilde{d}_1(B_2, B_1) = \tilde{d}_1(0) + \bar{q}\beta\tilde{\Phi}(0)s^{-2(1-\eta_0/2)},$$

де введено позначення

$$\eta_0 = \frac{\alpha_0}{\ln s}.$$

Виникає перенормування потенціалу взаємодії в термінах середніх значень, за рахунок врахування поправки  $\Delta\tilde{\Phi}(k)$ :

$$(1 + \alpha_0)\langle k^2 \rangle_{B_2, B_1} = \langle k^{2-\eta_0} \rangle_{B_2, B_1}.$$

Подібно, для  $n$ -ої блочної структури отримуємо

$$\tilde{d}_n(B_{n+1}, B_n) = \tilde{d}_n(0) + 2\beta\tilde{\Phi}(0)b^2\langle k^2 \rangle_{B_{n+1}, B_n} \prod_{m=0}^{n-1} (1 + \alpha_m), \quad (5.3.13)$$

що відповідає рівності

$$\tilde{d}_n(B_{n+1}, B_n) = \tilde{d}_n(0) + \bar{q}\beta\tilde{\Phi}(0) \prod_{m=0}^{n-1} s^{-2(1-\eta_m/2)}, \quad (5.3.14)$$

де

$$\eta_m = \frac{\alpha_m}{\ln s},$$

а  $\alpha_m$  визначене в (5.1.46). На ділянці КР ( $m \leq m_\tau$ ) виконуються рівності

$$\alpha_0 = \alpha_1 = \dots = \alpha_m = \alpha^*. \quad (5.3.15)$$

Тому величина  $d_n(B_{n+1}, B_n)$  може бути представлена у вигляді:

$$\tilde{d}_n(B_{n+1}, B_n) = \tilde{d}_n(0) + \bar{q}\beta\tilde{\Phi}(0)s^{-2n(1-\eta/2)}, \quad (5.3.16)$$

де для  $\eta$  знаходимо

$$\eta = \frac{\alpha^*}{\ln s}. \quad (5.3.17)$$

При цьому справедливе співвідношення:

$$(1 + \alpha^*)^n \langle k^2 \rangle_{B_{n+1}, B_n} = \langle k^{2-\eta} \rangle_{B_{n+1}, B_n}. \quad (5.3.18)$$

Якщо температура дорівнює критичній, то

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \tilde{d}_n(0) = 0$$

і для  $\tilde{d}_n(k)$  можна записати граничне співвідношення:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \tilde{d}_n(k) = \lim_{k \rightarrow \infty} 2\beta \tilde{\Phi}(0) b^2 k^{2-\eta}. \quad (5.3.19)$$

Розглянемо внесок довгохвильових флуктуацій у вільну енергію системи. Довжина хвилі, яка відповідає цим флуктуаціям, перевищує кореляційну довжину. Для  $T > T_c$  у системі, крім критичного, існує граничний гаусовий режим. Він відповідає області хвильових векторів

$$0 \leq k < B_{m_\tau},$$

де  $B_{m_\tau} = B' s^{-m_\tau}$ . Тут величина  $x_n$  (відповідно і  $y_n$ ) збільшується з ростом  $n$ . Це веде до різкого зменшення значень коефіцієнтів  $\alpha_n$  і функцій  $f_n$ ,  $G(x_n)$ ,  $\mathcal{K}(x_n)$ . Внесок у вільну енергію ГГР подібно до [315] розділятимемо на дві частини: перехідну область (ПО) і режим гаусових флуктуацій.

Вільна енергія, яка відповідає ПО, має вигляд:

$$F_{\text{ПО}} = -kTN' \tilde{f}_{\text{ПО}} \tau^{3\tilde{\nu}}, \quad (5.3.20)$$

де

$$\begin{aligned} \tilde{f}_{\text{ПО}} &= s^{-3\tilde{m}_0} \sum_{m=0}^{m'} s^{-3m} f_{m_\tau+m+1}, \\ f_{m_\tau+m+1} &= \frac{1}{2} \ln \tilde{y}_{m_\tau+m} + \frac{9}{4} (\tilde{y}_{m_\tau+m})^{-2} + \\ &+ \frac{\tilde{x}_{m_\tau+m+1}^2}{4} + \ln U(0, \tilde{x}_{m_\tau+m+1}), \end{aligned}$$

а значення  $\tilde{x}_{m_\tau+m+1}$  і  $\tilde{y}_{m_\tau+m}$  визначаються із співвідношень

$$\begin{aligned}\tilde{x}_{m_\tau+m+1} &= \sqrt{3} \left[ \tilde{q} + \tilde{f}(\tilde{E}_1^m - 1) \right] \left[ \tilde{\varphi} + \tilde{f}\tilde{\varphi}^{1/2}\tilde{R}_1^{(0)}\tilde{E}_1^m \right]^{-1/2}, \\ \tilde{y}_{m_\tau+m} &= s^{d/2} U(\tilde{x}_{m_\tau+m}) \left( \frac{3}{\varphi(\tilde{x}_{m_\tau+m})} \right)^{1/2}.\end{aligned}$$

Величину перехідної області  $[m_\tau + 1, m_\tau + m'' + 1]$  шукаємо відповідно до методики, описаної в додатку В.

Режиму гаусових флуктуацій відповідає вираз

$$\begin{aligned}Z' &= 2^{-1/2} \left( \pi P_2^{(p_\tau)} \right)^{-N_{p_\tau+1/2}} \times \\ &\times \int \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{p_\tau+1}} \tilde{d}_{p_\tau+1}(k) \rho_k \rho_{-k} \right] (d\rho)^{N_{p_\tau+1}},\end{aligned}\quad (5.3.21)$$

де  $p_\tau = m_\tau + 1 + m''$ ,

$$\begin{aligned}\tilde{d}_{p_\tau+1}(k) &= \left( P_2^{(p_\tau)} \right)^{-1} + \beta \left[ \tilde{\Phi}(B_{p_\tau+1}, B_{p_\tau}) - \tilde{\Phi}(k) \right], \\ P_2^{(p_\tau)} &= x_{p_\tau} U(x_{p_\tau}) [d_{p_\tau}(B_{p_\tau+1}, B_{p_\tau})]^{-1}.\end{aligned}\quad (5.3.22)$$

Для величини  $d_{p_\tau}(B_{p_\tau+1}, B_{p_\tau})$  знаходимо:

$$d_{p_\tau}(B_{p_\tau+1}, B_{p_\tau}) = \left( \frac{\tilde{c}_{1k}}{\tilde{f}} \right)^{(2-\eta)\tilde{\nu}} \tau^{\tilde{\gamma}} s^{-2m''} \beta \tilde{\Phi}(0) \tilde{d}_0, \quad (5.3.23)$$

де  $\tilde{f}$  визначене в (5.2.10),  $\tilde{\gamma} = (2-\eta)\tilde{\nu}$ . Для коефіцієнта  $\tilde{c}_{1k}$  маємо

$$\begin{aligned}\tilde{c}_{1k} &= \left( \tilde{c}_{11} + \frac{\tilde{c}_{12}}{(\beta_c \tilde{\Phi}(0))^2} \right) \tilde{D}^{-1}, \quad \tilde{D} = \frac{\tilde{E}_1 - \tilde{E}_2}{\tilde{R}_{11} - \tilde{E}_2}, \\ \tilde{c}_{11} &= 1 - \tilde{f} - \tilde{R}^{(0)} \tilde{\varphi}^{1/2}, \quad \tilde{c}_{12} = -a_4' \tilde{R}^{(0)} \tilde{\varphi}^{-1/2},\end{aligned}\quad (5.3.24)$$

а для  $\tilde{d}_0$  одержуємо

$$\tilde{d}_0 = \tilde{r} + \tilde{q}, \quad \tilde{r} = \tilde{f}(\tilde{E}_1^{m''} - 1). \quad (5.3.25)$$

Величину  $\tilde{d}_{p_r+1}(k)$  представимо у вигляді:

$$\tilde{d}_{p_r+1}(k) = \beta \tilde{\Phi}(0) \left[ \tau^{\tilde{\gamma}} \left( \frac{\tilde{c}_{1k}}{\tilde{f}} \right)^{\tilde{\gamma}} s^{-2m''} \tilde{g}_0 + 2b^2(1 + \alpha^*)^{m_r+1} k^2 \right], \quad (5.3.26)$$

де (див. (3.1.42) та (3.1.43))

$$\tilde{g}_0 = \tilde{d}_0 p_0 - \bar{q}. \quad (5.3.27)$$

У результаті із (5.3.21) отримуємо

$$F' = \frac{1}{2} k T N_{p_r+1} \left[ \ln P_2^{(p_r)} + \frac{1}{N_{p_r+1}} \sum_{k=0}^{B_{p_r+1}} \ln \tilde{d}_{p_r+1}(k) \right] - k T N \tilde{\gamma}_4 \beta^2 h^2 \tau^{-\tilde{\gamma}},$$

де  $\tilde{\gamma}_4$  виражається подібно як  $\gamma_4^+$  із (3.1.42)

$$\tilde{\gamma}_4 = \left( \frac{\tilde{f}}{\tilde{c}_{1k}} \right)^{\tilde{\gamma}} \frac{s^{2m''}}{2\beta \tilde{\Phi}(0) \tilde{g}_0}.$$

Виконуючи сумування за хвильовими векторами і приймаючи до уваги (5.3.22), (5.3.23), отримуємо

$$F' = -k T N' \tilde{f}^{(0)} \tau^{3\tilde{\nu}} - k T N \tilde{\gamma}_4 \beta^2 h^2 \tau^{-\tilde{\gamma}}, \quad (5.3.28)$$

де

$$\tilde{f}^{(0)} = \left( \frac{\tilde{c}_{1k}}{\tilde{f}} \right)^{3\tilde{\nu}} \bar{f}^{(0)}, \quad \bar{f}^{(0)} = s^{-3(m''+1)} f_T^{(0)},$$

$$f_T^{(0)} = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{\tilde{d}_0 p_0}{\tilde{g}_0} \right) - \frac{1}{2} \ln(1 + \tilde{a}_0^2) + \frac{1}{3} - (\tilde{a}_0)^{-2} + \frac{\arctg \tilde{a}_0}{\tilde{a}_0^3},$$

$$\tilde{a}_0 = 1/(s\sqrt{\tilde{g}_0}).$$

Повний вираз для вільної енергії має вигляд:

$$F = -kTN' [\tilde{\gamma}_0 + \tilde{\gamma}_1\tau + \tilde{\gamma}_2\tau^2 + \tilde{\gamma}_3\tau^{3\tilde{\nu}}] - kTN\tilde{\gamma}_4\beta^2 h^2 \tau^{-\tilde{\gamma}}, \quad (5.3.29)$$

де

$$\tilde{\gamma}_0 = \tilde{\gamma}'_{01} + s_0^3 \ln 2, \quad \tilde{\gamma}_3 = \tilde{f}_{\text{ПО}} - \tilde{\gamma}_{10} + \tilde{f}^{(0)}. \quad (5.3.30)$$

Ентропія, теплоємність та інші термодинамічні функції можуть бути отримані із (5.3.29) шляхом прямого диференціювання за температурою при  $h = 0$ .

Сприйнятливість на одну частинку отримуємо, знайшовши другу похідну вільної енергії за полем

$$\chi = \tilde{\chi}_0 \beta \tau^{-\tilde{\gamma}} \mu_{\text{Б}}^2.$$

Тут  $\tilde{\gamma}$  – критичний показник сприйнятливості

$$\tilde{\gamma} = (2 - \eta)\tilde{\nu}, \quad (5.3.31)$$

а  $\tilde{\chi}_0$  – її критична амплітуда

$$\tilde{\chi}_0 \doteq 2\tilde{\gamma}_4. \quad (5.3.32)$$

Отже, врахування залежності від хвильового вектора фур'є-образу потенціалу веде до перенормування критичних показників кореляційної довжини, сприйнятливості, теплоємності. Перенормовані критичні показники приведені в праці [350].

Перенормування критичного показника кореляційної довжини  $\tilde{\nu}$  пов'язане зі зміною більшого власного значення матриці перетворення  $\tilde{\mathcal{R}}$ . На відміну від  $\tilde{\nu}$ , критичний показник  $\tilde{\gamma}$  явно залежить від  $\eta$  і визначається відповідно до (5.3.31), де  $\tilde{\nu}$  – перенормований критичний показник кореляційної довжини. Теплоємність характеризується показником  $\tilde{\alpha} = 2 - d\tilde{\nu}$ .

## 5.4. Кореляційна функція і сприйнятливість системи в околі точки фазового переходу

Обчислення парної кореляційної функції поблизу точки фазового переходу другого роду передбачає дослідження її залежності від відстані між частинками, коли остання прямує до безмежності. В методі КЗ зручно працювати з фур'є-образом кореляційної функції  $G(T, k)$ , який пов'язаний із статистичною сумою системи співвідношенням:

$$G(T, k) = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial d(k)}. \quad (5.4.1)$$

Надалі користуватимось виразом для статистичної суми, який наведений у (2.1.11), (2.1.12).

Дослідження кореляційних функцій поблизу точки фазового переходу є предметом багатьох досліджень [8, 16, 213, 351]. Зазвичай, вони виконуються з використанням гаусової міри як базисної у методі функцій Гріна та з допомогою інших методів [126, 214, 352]. Особливість описаного нижче підходу до обчислення кореляційних функцій полягає у використанні негаусового розподілу флуктуацій як базисного. Поведінка  $G(T, k)$  при  $k \rightarrow 0$ , що відповідає великим відстаням, найважливіша при дослідженні критичних властивостей системи. У випадку  $T > T_c$ , для обчислення  $G(T, k)$  зручно представляти статистичну суму у вигляді

$$Z = Z_0 Z_{\text{КР}} Z_{\text{ПО}} Z'. \quad (5.4.2)$$

Тут  $Z_{\text{КР}}$  відповідає внеску негаусових флуктуацій,  $Z_{\text{ПО}}$  і  $Z'$  описує довгохвильові флуктуації, причому гранично великим віддальям ( $k \rightarrow 0$ ) відповідає  $Z'$ , вираз для якого приведений у (3.1.38). Отже, при розрахунку фур'є-образу парної кореляційної функції (5.4.1) для великих віддалей  $R \rightarrow \infty$  зручно скористатись формулою:

$$G(T, k)|_{k \rightarrow 0} = -\frac{1}{Z'} \frac{\partial Z'}{\partial \bar{d}(k)}, \quad (5.4.3)$$



в якій функціональна похідна за  $\vec{d}(k)$  відноситься до довгохвильової частини статистичної суми (5.4.2).

Запишемо вираз для фур'є-образу парної кореляційної функції й сприйнятливості системи при використанні четвірного базисного розподілу флуктуацій. На першому етапі обчислень нехтуватимемо поправкою на усереднення фур'є-образу потенціалу взаємодії, вважаючи  $\Delta\tilde{\Phi}(k) = 0$ . При цьому величина  $\alpha^*$  із (5.2.6) перетворюється в нуль, що веде до умови  $\eta = 0$ . При  $T > T_c$  вираз (5.4.3) набуває вигляду

$$G(T, k) = (d_{p_{\tau+1}}(k))^{-1}, \quad (5.4.4)$$

де величина  $d_{p_{\tau+1}}(k)$  визначена в (3.1.39). Використовуючи явний вираз для  $d_{p_{\tau+1}}(k)$  як функцію температури і хвильового вектора, отримуємо ( $k \rightarrow 0$ )

$$G(T, k) = \frac{1}{D\tau^{2\nu} + D_1k^2}. \quad (5.4.5)$$

Тут  $\nu$  – критичний показник кореляційної довжини,

$$D = \left(\frac{c_{1k}}{f_0}\right)^{2\nu} s^{-2m''} \beta\tilde{\Phi}(0)g_0[1 + (g_1 - 2\nu m_2)\tau^\Delta], \quad (5.4.6)$$

$$D_1 = 2\beta\tilde{\Phi}(0)b^2,$$

де використані позначення (3.1.42), (3.2.29). Зобразимо (5.4.5) у вигляді

$$G(T, k) = \frac{D_1^{-1}}{\kappa_+^2 + k^2} \quad (5.4.7)$$

і ототожнимо величину  $\kappa_+$  з оберненим кореляційним радіусом  $\xi_+$ . Для останнього знаходимо вираз:

$$\xi_+ = \xi_+^{(0)} \tau^{-\nu} (1 + a_\xi^+ \tau^\Delta). \quad (5.4.8)$$

Тут величина

$$\xi_+^{(0)} = \left(\frac{f_0}{c_{1k}}\right)^\nu b s^{m''} \left(\frac{2}{g_0}\right)^{1/2} \quad (5.4.9)$$

– основна критична амплітуда, а

$$a_{\xi}^{+} = \nu m_2 - \frac{g_1}{2} \quad (5.4.10)$$

– критична амплітуда для кореляційної довжини, яка визначає поправку до скейлінгу (показник  $\Delta$  визначений у (3.2.3), а величина  $m_2$  у (3.2.4)). Сприйнятливості при  $T > T_c$  можемо визначити із співвідношення

$$\chi_{+} = kT \lim_{k \rightarrow 0} G(T, k) \quad (5.4.11)$$

і представити у вигляді

$$\chi_{+} = \chi_{+}^{(0)} \tau^{-2\nu} (1 + a_{\chi}^{+} \tau^{\Delta}), \quad (5.4.12)$$

де

$$\chi_{+}^{(0)} = \beta \left( \frac{f_0}{c_{1k}} \right)^{2\nu} \frac{s^{2m''}}{\beta \bar{\Phi}(0) g_0}, \quad (5.4.13)$$

$$a_{\chi}^{+} = 2\nu m_2 - g_1.$$

Зазначимо, що між критичними амплітудами кореляційного радіуса  $a_{\xi}^{+}$  і сприйнятливості  $a_{\chi}^{+}$ , які визначають поправки до скейлінгу, маємо співвідношення:

$$a_{\xi}^{+} / a_{\chi}^{+} = \frac{1}{2}. \quad (5.4.14)$$

Розглянемо випадок, коли температура системи менша за критичну. Тоді статистичну суму моделі запишемо у вигляді:

$$Z = Z_0 Z_{\text{KP}} 2^{(N_{\mu_{\tau+1}} - 1)/2} [Q(P_{\mu_{\tau}})]^{N_{\mu_{\tau+1}}} Z_{\mu_{\tau+1}}. \quad (5.4.15)$$

Для розрахунку  $G(T, k)$  важливо знати  $Z_{\mu_{\tau+1}}$ , оскільки

$$G'(T, k) \Big|_{k \rightarrow 0} = - \frac{1}{Z_{\mu_{\tau+1}}} \frac{\partial Z_{\mu_{\tau+1}}}{\partial \bar{d}_{\mu_{\tau+1}}(k)}. \quad (5.4.16)$$

Вираз для  $Z_{\mu_r+1}$  наведений в (4.2.1). Використовуючи (5.4.16), знаходимо

$$G'(T, k) = [\bar{d}_{\mu_r+1}(k)]^{-1}. \quad (5.4.17)$$

Скориставшись результатами § 4.2, отримуємо:

$$G'(T, k) = \frac{1}{D'|\tau|^{2\nu} + D_1k^2}, \quad (5.4.18)$$

де

$$D' = 4f_0 \left( \frac{c_{1k}}{f_0} \right)^{2\nu} \beta \tilde{\Phi}(0) \left[ 1 - c_{2k} \left( \frac{c_{1k}}{f_0} \right)^\Delta 2\nu \Phi_0 |\tau|^\Delta \right], \quad (5.4.19)$$

$$D_1 = 2\beta \tilde{\Phi}(0) b^2.$$

Використовуючи отриманий вище вираз, знаходимо кореляційний радіус при  $T < T_c$

$$\xi_- = \xi_-^{(0)} |\tau|^{-\nu} (1 + a_\xi^- |\tau|^\Delta). \quad (5.4.20)$$

Тут  $\nu$  і  $\Delta$  ті ж, що і в (5.4.8)

$$\xi_-^{(0)} = b \left( \frac{f_0}{c_{1k}} \right)^\nu (2f_0)^{-1/2}, \quad (5.4.21)$$

$$a_\xi^- = c_{2k} \left( \frac{c_{1k}}{f_0} \right)^\Delta \nu \Phi_0.$$

Для сприйнятливості при  $T < T_c$  маємо

$$\chi_- = \chi_-^{(0)} |\tau|^{-2\nu} (1 + a_\chi^- |\tau|^\Delta), \quad (5.4.22)$$

де

$$\chi_-^{(0)} = \beta \left( \frac{f_0}{c_{1k}} \right)^{2\nu} \frac{1}{\beta \tilde{\Phi}(0)} (4f_0)^{-1}, \quad (5.4.23)$$

$$a_\chi^- = 2c_{2k} \left( \frac{c_{1k}}{f_0} \right)^\Delta \nu \Phi_0.$$

Як і в випадку  $T > T_c$ , тут

$$a_{\xi}^- / a_{\chi}^- = \frac{1}{2}. \quad (5.4.24)$$

Критичні амплітуди  $\xi_{\pm}^{(0)}$ ,  $\chi_{\pm}^{(0)}$ , а також  $a_{\xi}^{\pm}$ ,  $a_{\chi}^{\pm}$ , на відміну від критичних показників  $\nu$ ,  $\Delta$ , залежать від мікроскопічних параметрів гамільтоніану. Ця залежність зумовлена множниками  $c_{2k}$  і  $c_{1k}$  які наведені в (2.7.11). Однак, відношення критичних амплітуд вище і нижче  $T_c$  є універсальними величинами. Крім рівностей (5.4.14) і (5.4.24) маємо:

$$\xi_+^{(0)} / \xi_-^{(0)} = 2s^{m''} \left( \frac{f_0}{g_0} \right)^{1/2}, \quad (5.4.25)$$

а також

$$\chi_+^{(0)} / \chi_-^{(0)} = 4s^{2m''} \frac{f_0}{g_0}. \quad (5.4.26)$$

Слід звернути увагу, що універсальними величинами є також відношення [60, 120, 123, 125, 353]

$$\frac{a_{\xi}^+}{a_{\xi}^-}, \quad \frac{a_{\chi}^+}{a_{\chi}^-}, \quad \frac{a_{\xi}^+}{a_c^+}, \quad \frac{a_{\xi}^-}{a_c^-} \quad (5.4.27)$$

і ціла низка інших комбінацій критичних амплітуд, оскільки при цьому відбувається скорочення неуніверсального множника

$$c_{2k} \left( \frac{c_{1k}}{f_0} \right)^{\Delta}.$$

Приведені вище співвідношення отримані в наближенні  $\eta = 0$ . Врахування залежності від хвильового вектора у  $\tilde{\Phi}(k)$  при поталпному розрахунку статистичної суми дає змогу виконати аналогічні обчислення при  $\eta \neq 0$ . У цьому випадку вирази (5.4.4), (5.4.17) залишаються без змін. Іншими стають величини  $d_n(k)$ . У випадку  $T > T_c$  маємо вираз ( $k \rightarrow 0$ )

$$\tilde{G}(T, k) = \frac{1}{\tilde{D}\tau\tilde{\gamma} + \tilde{D}_1 k^2}, \quad (5.4.28)$$

де критичний показник  $\tilde{\gamma}$  наведений у (5.3.31),

$$\begin{aligned}\tilde{D} &= \left(\frac{\tilde{c}_{1k}}{\tilde{f}}\right)^{\tilde{\gamma}} \beta \tilde{\Phi}(0) s^{-2m''} \tilde{g}_0, \\ \tilde{D}_1 &= 2\beta \tilde{\Phi}(0) b^2 \left(\frac{\tilde{c}_{1k}}{\tilde{f}}\right)^{-\tilde{\nu}\eta} \tau^{-\eta\tilde{\nu}}.\end{aligned}\quad (5.4.29)$$

Вирази для кореляційного радіуса  $\tilde{\xi}_+$ , отримані з врахуванням поправки на усереднення потенціалу, мають вигляд:

$$\tilde{\xi}_+ = \tilde{\xi}_+^{(0)} \tau^{-\tilde{\nu}}. \quad (5.4.30)$$

Показник  $\tilde{\nu}$  визначений у (5.3.12), а для  $\tilde{\xi}_+^{(0)}$  отримуємо

$$\tilde{\xi}_+^{(0)} = \left(\frac{\tilde{f}}{\tilde{c}_{1k}}\right)^{\tilde{\nu}} b s^{m''} \left(\frac{2}{\tilde{g}_0}\right)^{1/2}, \quad (5.4.31)$$

де  $\tilde{c}_{1k}$  і  $\tilde{g}_0$  наведені в (5.3.24), (5.3.27). Сприйнятливість системи, розрахована із виразу (5.4.28) в границі  $k \rightarrow 0$ , представимо у вигляді

$$\tilde{\chi}_+ = \tilde{\chi}_+^{(0)} \tau^{-\tilde{\gamma}}, \quad (5.4.32)$$

де

$$\tilde{\chi}_+^{(0)} = 2\beta\tilde{\gamma}_4. \quad (5.4.33)$$

Вирази (5.4.31) і (5.4.33) переходять у (5.4.9) і (5.4.13) відповідно, якщо поправку, пов'язану з урахуванням залежності від хвильового вектора  $\tilde{\Phi}(k)$ , спрямувати до нуля.

## 5.5. Парна кореляційна функція при $T = T_c$

У проведених обчисленнях для кореляційної функції вище і нижче за  $T_c$  суттєвою була наявність в системі ділянки граничного гаусового режиму (при  $T > T_c$ ), або інверсного гаусового режиму (при  $T < T_c$ ). Кожний з них характеризується гаусовою базисною мірою. Особливістю цієї міри є неаналітична залежність дисперсії від температури.

У випадку  $T = T_c$  в системі існують сильні кореляції між спінами на як завгодно великих відстанях. При цьому ділянки гаусового режиму не виникає. При  $T = T_c$  область критичного режиму, що характеризується наявністю ренормгрупової симетрії, існує для всіх мод флуктуацій, включаючи  $k = 0$ . Тому тут незастосовний вираз (5.4.3) для обчислення  $G(T_c, k)$ .

Статистичну суму системи ізінговських спінів при  $T = T_c$  представимо у вигляді:

$$Z = Z_0 Z_{\text{КР}}, \quad (5.5.1)$$

де

$$Z_{\text{КР}} = \prod_{n=0}^{\infty} \tilde{Q}_n, \quad (5.5.2)$$

а вираз для  $\tilde{Q}_n$  наведений в (5.1.34). Обчислення фур'є-образу кореляційної функції виконуватимемо для кожної окремої блочної структури  $n$ . Позначимо через  $G_n$  середнє значення кореляційної функції для  $n$ -ої блочної структури. Введемо замість  $G(k) = \langle \rho_k \rho_{-k} \rangle$  величину

$$G_n = \frac{1}{N_n - N_{n+1}} \sum_{B_{n+1} < k \leq B_n} \langle \rho_k \rho_{-k} \rangle, \quad (5.5.3)$$

де символ  $\langle \dots \rangle$  відповідає усередненню за взаємодіючою системою негаусового типу. Величину  $G_n$  обчислюватимемо, використовуючи співвідношення

$$G_n = \frac{\beta}{N_n - N_{n+1}} \frac{\partial F_c}{\partial \tilde{d}_n(B_{n+1}, B_n)}. \quad (5.5.4)$$

Вільна енергія системи  $F_c$  має вигляд:

$$F_c = -kT_c \sum_{n=0}^{\infty} \left[ N_n \ln \tilde{Q}(d_n) + N_{n+1} \ln Q(P_n) \right]. \quad (5.5.5)$$

Особливістю приведених вище виразів для  $G_n$  і  $F_c$  є специфічна поведінка величин  $\tilde{d}_n(B_{n+1}, B_n)$  і  $\tilde{a}_4^{(n)}$  як функцій номера блочної структури  $n$  (див. (5.1.41)). У загальному випадку величини  $\alpha_n$ ,  $\tilde{r}_n$  і  $\tilde{u}_n$  залежать від номера фазового шару  $n$  (5.1.46), (5.1.47). Тільки при  $T = T_c$  вираз  $(1 + \alpha_n)$  не залежить від  $n$ . Використаємо для  $\tilde{r}_n$  і  $\tilde{u}_n$  розв'язки рівнянь РГ при  $T = T_c$ . Маємо:

$$\begin{aligned} \tilde{d}_n(B_{n+1}, B_n) &= s^{-n(2-\eta)} (\tilde{r} + q + \tilde{c}_2 \tilde{R} \tilde{E}_2^n), \\ \tilde{a}_4^{(n)} &= s^{-2n(2-\eta)} (\tilde{u} + \tilde{c}_2 \tilde{E}_2^n). \end{aligned} \quad (5.5.6)$$

тут  $\tilde{R}_{ij}$ ,  $\tilde{E}_l$  – матричні елементи і власні значення матриці перетворення  $\tilde{R}$ ,

$$\tilde{R} = \frac{\tilde{R}_{12}^{(0)}}{\tilde{E}_2 - \tilde{R}_{11}} \frac{(\tilde{u})^{-1/2}}{\beta_c \tilde{\Phi}(0)}, \quad \tilde{c}_2 = \tilde{c}_{2k} (\beta_c \tilde{\Phi}(0))^2.$$

Запишемо вираз для величини  $x_n$  із (5.1.35) при великих значеннях  $n$ . Відповідно до (5.5.6) (приймаючи до уваги, що  $\tilde{E}_2 < 1$ ) маємо:

$$x_n = \tilde{x} \left[ 1 + \left( \frac{\tilde{c}_2 \tilde{R}}{\tilde{r} + q} + \frac{\tilde{c}_2}{2\tilde{u}} \right) \tilde{E}_2^n \right]. \quad (5.5.7)$$

Величину  $\tilde{E}_2^n$  можна представити у вигляді:

$$\tilde{E}_2^n = s^{-n\omega},$$

де

$$\omega = \frac{\tilde{\Delta}}{\tilde{\nu}}; \quad \tilde{\Delta} = -\frac{\ln \tilde{E}_2}{\ln \tilde{E}_1}; \quad \tilde{\nu} = \frac{\ln s}{\ln \tilde{E}_1}.$$

Показник  $\tilde{\nu}$  характеризує поведінку кореляційної довжини,  $\tilde{\Delta}$  означає поправку до скейлінгу.

Розглянемо деяку блочну структуру з номером  $n_0$ . Запишемо вираз для  $G_n$  при  $n = n_0$ . Відповідно до (5.5.4), використовуючи приведені в (5.1.34) формули для  $\tilde{Q}(d_n)$  і  $Q(P_n)$ , знаходимо:

$$G_{n_0} = \frac{\beta}{N_{n_0} - N_{n_0+1}} \left[ \frac{\partial F_c}{\partial d_{n_0}(B_{n_0+1}, B_{n_0})} + \left( \frac{\partial F_c}{\partial x_{n_0}} + \frac{\partial F_c}{\partial y_{n_0}} \frac{dy_{n_0}}{dx_{n_0}} \right) \frac{\partial x_{n_0}}{\partial d_{n_0}(B_{n_0+1}, B_{n_0})} \right]. \quad (5.5.8)$$

Основна проблема при обчисленні  $G_{n_0}$  пов'язана з тим, що похідні в (5.5.8) відносяться не тільки до величин з індексами  $n_0$ , але й до всіх наступних з індексами  $n_0 + 1, n_0 + 2, \dots$

Перший доданок правої частини (5.5.8) можемо представити у вигляді:

$$\frac{\partial F_c}{\partial d_{n_0}} = kT_c \frac{(1 - s^{-3})^{-1}}{2} \sum_{n=n_0}^{\infty} N_n \frac{\partial \ln d_n(B_{n+1}, B_n)}{\partial d_{n_0}}. \quad (5.5.9)$$

У границі великих значень  $n$  величина  $\tilde{E}_2^n$  швидко спадає. З точністю до величин  $\tilde{E}_2^{n_0+m}$  на основі (5.5.6) отримуємо спрощені рекурентні співвідношення

$$\begin{aligned} d_{n_0+m}(B_{n_0+m+1}, B_{n_0+m}) &= s^{-m(2-\eta)} d_{n_0}(B_{n_0+1}, B_{n_0}), \\ a_4^{(n_0+m)} &= s^{-2m(2-\eta)} a_4^{(n_0)}. \end{aligned} \quad (5.5.10)$$

Використовуючи (5.5.10), із (5.5.9) отримуємо вираз:

$$\frac{(1 - s^{-3})^{-1}}{2} [d_{n_0}(B_{n_0+1}, B_{n_0})]^{-1}.$$

Він відповідає внескові до  $G_n$  від першого доданку правої частини (5.5.8). Інші доданки із (5.5.8) не дають внеску до  $G_{n_0}$ , оскільки  $x_n \approx \tilde{x}$  не залежить від  $d_{n_0}(B_{n_0+1}, B_{n_0})$  ( $E_2^{n_0+m} \ll 1$ ).



Отже, при  $T = T_c$  маємо:

$$G_{n_0} = \frac{1}{2}(1 - s^{-3})^{-1}[d_{n_0}(B_{n_0+1}, B_{n_0})]^{-1}. \quad (5.5.11)$$

Якщо скористатись співвідношенням

$$d_{n_0}(B_{n_0+1}, B_{n_0}) = (\tilde{r} + q)s^{-n_0(2-\eta)},$$

знаходимо

$$G_{n_0} = Gs^{n_0(2-\eta)}, \quad (5.5.12)$$

де

$$G = \frac{1}{2} \frac{(1 - s^{-3})^{-1}}{\tilde{r} + q}. \quad (5.5.13)$$

Величина  $G_{n_0}$  є фур'є-образом кореляційної функції  $n_0$ -ої блочної структури.

Кожному інтервалу значень хвильового вектора  $k \in (B_{n_0+1}, B_{n_0}]$ , де  $B_n = B's^{-n}$ , в процесі поетапного інтегрування статистичної суми співставляється середнє значення

$$\langle k^2 \rangle_{B_{n+1}, B_n} = B'^2 \bar{q} s^{-2n}. \quad (5.5.14)$$

Величина  $G_{n_0}$  виражається через середнє значення хвильового вектора  $n_0$ -ої блочної структури. При цьому її асимптотика за  $n$  відрізняється від виразу (5.5.14) внаслідок поправки на усереднення потенціалу. Саме врахування поправки приводить до виникнення біля доданку пропорційного до  $k^2 \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}$  (в експоненті функції розподілу) додаткових множників

$$(1 + \alpha_0)(1 + \alpha_1) \cdots (1 + \alpha_{n-1}).$$

При  $T = T_c$   $\alpha_0 = \alpha_1 = \cdots = \alpha_n = \alpha^*$ . Відповідно добуток  $(1 + \alpha_0) \cdots (1 + \alpha_{n-1})$  внаслідок малості  $\alpha_n$  можна представити у вигляді експоненти  $\exp(n\alpha^*)$ . Тоді (5.5.14) перепишемо у вигляді:

$$(1 + \alpha^*)^n \langle k^2 \rangle_{B_{n+1}, B_n} = s^{-n(2-\eta)} B'^2 \bar{q}. \quad (5.5.15)$$

Тут використана рівність  $\alpha^* = \eta \ln s$  (див. (5.2.31)). Порівнюючи (5.5.14) з (5.5.15) знаходимо, що

$$s^{-n(2-\eta)} B'^2 \bar{q} = \langle k^{2-\eta} \rangle_{B_{n+1}, B_n}. \quad (5.5.16)$$

Отже, врахування поправки на усереднення потенціалу приводить до заміни  $s^{-2n}$  на  $s^{-n(2-\eta)}$  і відповідає перенормуванню показника степеня з  $k^2$  на  $k^{2-\eta}$ . У результаті, фур'є-образ кореляційної функції  $n_0$ -ої блочної структури в границі  $n_0 \rightarrow \infty$ , що відповідає малим значенням хвильового вектора  $k$ , при  $T = T_c$  представимо у вигляді:

$$G_0 = \lim_{n_0 \rightarrow \infty} G_{n_0} = G \lim_{k \rightarrow 0} \langle k^{-2+\eta} \rangle, \quad (5.5.17)$$

де

$$G = \frac{b^2 (1 - s^{-3})^{-1}}{\bar{q} \tilde{r} + q}. \quad (5.5.18)$$

Величина  $\eta$  із (5.2.31) відповідає критичному показнику кореляційної функції.



## Розділ 6

# Дослідження моделей $\rho^{2m}$

Розвинутий у цій монографії підхід до опису фазових переходів у тривимірних ґраткових системах містить два основних наближення. Перше з них полягає в усередненні фур'є-образу потенціалу взаємодії  $\tilde{\Phi}(k)$  в кожному з інтервалів  $k \in (B_{n+1}, B_n]$ , де  $B_n = V/s^n$ . Вплив такого наближення на результати розрахунку термодинамічних і структурних функцій розглянуто в попередньому розділі. Нами запропонований наближений метод врахування залежності фур'є-образу потенціалу від хвильового вектора  $k$  шляхом його представлення у вигляді  $\beta\tilde{\Phi}(k) = \beta\tilde{\Phi}(B_1, V) + \Delta\tilde{\Phi}(k)$  та використання теорії збурень за величиною  $\Delta\tilde{\Phi}(k)$ . Друге наближення, яке використовується при розрахунку термодинамічних функцій, полягає у використанні найпростішого негаусового розподілу флуктуацій (модель  $\rho^4$ ). Однак, як випливає з (1.10.1), повне представлення статистичної суми тривимірної однокомпонентної ґраткової системи містить в показнику експоненти доданки, пропорційні до вищих степенів змінної  $\rho_k$ . При цьому наближення моделі  $\rho^4$  (врахування другого і четвертого степенів  $\rho_k$ ) є найпростішим. Загальнішими є моделі  $\rho^{2m}$  при  $m \geq 3$ , зокрема, модель  $\rho^6$  (другий, четвертий та шостий степені  $\rho_k$ ), модель  $\rho^8$  тощо. Модель  $\rho^{2m}$  передбачає для опису критичної поведінки використання розподілу флуктуацій, який містить у показнику експоненти другий, четвертий, ...  $2m$ -ий степені змінної  $\rho_k$ . При цьому є змога порівняти результати розрахунку одних і тих же величин, які відповідають різним на-

ближенням (модель  $\rho^4$ , модель  $\rho^6$  тощо). Як покажемо нижче, із зростанням порядку моделі  $m$  ці результати прямують до деякого граничного значення.

Метою цього розділу є узагальнення методу інтегрування статистичної суми однокомпонентної спінової системи для вищих базисних розподілів флуктуацій. Можливість прямого розрахунку виразу для статистичної суми і дослідження рекурентних співвідношень між коефіцієнтами ефективних блочних структур, які виникають при цьому, є особливо актуальною і суттєвою для розуміння природи подій поблизу точки фазового переходу. Важливою ланкою для досягнення основної мети наших досліджень – обчислення явних виразів для термодинамічних функцій в околі ТФП – є наведені в § 6.3 явні розв'язки рекурентних співвідношень як функції номера блочної ґратки і температури в наближенні моделі  $\rho^6$ .

Для доведення збіжності процедури обчислення критичного показника кореляційної довжини  $\nu$  розглянуті вищі моделі. Записані відповідні рекурентні співвідношення і показано, що критичний показник  $\nu$  має тенденцію до насичення в міру врахування вищих степенів змінної в показнику експоненти ефективного розподілу флуктуацій.

## 6.1. Результати розрахунку статистичної суми для вищих моделей

Обчислення статистичної суми системи в попередніх розділах виконувалось за допомогою наближеного виразу для якобіану переходу  $J(\rho)$ , який містить у показнику експоненти тільки другий і четвертий степені змінної. Принципово важливим є врахування вищих степенів змінної  $\rho_k$  у функції  $J(\rho)$ . Першому ускладненому негаусовому розподілу флуктуацій відповідає врахування доданку  $D_6$  у виразі (1.4.14). Далі слідує модель  $\rho^8$ , де крім  $D_2$ ,  $D_4$  і  $D_6$  враховується доданок пропорційний до  $D_8$  і т. д.

Запропонований нижче підхід дає змогу виконувати обчислення й отримати явні аналітичні вирази для термодинамічних функцій моделі  $\rho^{2m}$  з довільним скінченним значенням  $m$ . Такі обчислення досить громіздкі, однак не пов'язані з трудноща-

ми принципового характеру. Як побачимо з приведених нижче результатів, вже наближення моделі  $\rho^6$  приводить до надійних кількісних співвідношень. У зв'язку з цією обставиною в обчисленнях, які наведемо нижче, обмежимося наближенням моделі  $\rho^8$ . Вважаючи, що статистична сума вже проінтегрована за змінними  $\rho_k$  і  $\omega_k$  з індексами  $k \in (B', B)$  (див. § 2.5), запишемо для неї вихідний вираз у вигляді [354]

$$\begin{aligned}
 Z = 2^N \int \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{k \in B_0} \beta \tilde{\Phi}(k) \rho_k \rho_{-k} + \right. \\
 \left. + 2\pi i \sum_{k \in B_0} \rho_k \omega_k - \sum_{n=1}^4 \frac{(2\pi)^n}{(2n)!} \frac{M'_{2n}}{(N')^{n-1}} \times \right. \\
 \left. \times \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \in B_0}} \omega_{k_1} \dots \omega_{k_{2n}} \delta_{k_1 + \dots + k_{2n}} \right\} (d\rho)^{N'} (d\omega)^{N'}.
 \end{aligned} \quad (6.1.1)$$

Тут  $M'_2 = 1$ , а для  $M'_{2l}$  з  $l \geq 2$  маємо:

$$\begin{aligned}
 M'_4 &= 2 \left( 2\pi^3 \sqrt{2} \right)^{-1} (c/b)^3 \approx 0.022805 (c/b)^3, \\
 M'_6 &= 16 \left( 8\pi^6 \right)^{-1} (c/b)^6 \approx 0.002080 (c/b)^6, \\
 M'_8 &= 272 \left( 16\pi^9 \sqrt{2} \right)^{-1} (c/b)^9 \approx 0.000403 (c/b)^9.
 \end{aligned} \quad (6.1.2)$$

Якщо у виразі (6.1.1) припустити, що  $M'_8 = 0$ , отримаємо наближення шестирної моделі; при  $M'_6 = M'_8 = 0$  – четвірної моделі. Випадок  $M'_4 = M'_6 = M'_8 = 0$  відповідає гаусовому наближенню.

Ускладнення форми базисного розподілу флуктуацій не впливає на загальну схему розрахунку статистичної суми в околі точки фазового переходу. Якщо перехід від гаусового розподілу до четвірного принципово змінює методику розрахунку термодинамічних та структурних властивостей системи, то перехід від четвірного до вищих розподілів залишає схему обчислень без змін. Тому, при виконанні розрахунків у випадку моделі  $\rho^{2m}$  із  $m \geq 3$  використовуватимемо результати розділів 2–5.

Виконаємо у виразі (6.1.1) інтегрування за змінними  $\omega_k$  і зобразимо статистичну суму у вигляді:

$$Z = C' e^{a'_0 N'} \int \mathcal{W}'_8(\rho)(d\rho)^{N'}. \quad (6.1.3)$$

Тут коефіцієнт  $C' = 2^N \sqrt{2}^{N'-1}$ , а для підінтегральної функції маємо

$$\mathcal{W}'_8(\rho) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_0} d'(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \sum_{n=2}^4 \frac{a'_{2n}}{(2n)!} \times \right. \\ \left. \times (N')^{1-n} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n} \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}_0}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}} \right\}. \quad (6.1.4)$$

Як і в випадку четвірного розподілу, для коефіцієнта при квадратичному доданку маємо

$$d'(k) = a'_2 - \beta \check{\Phi}(k). \quad (6.1.5)$$

Постійна  $a'_0$  задається виразом

$$a'_0 = \ln \left\{ \pi^{-1} (12s_0^3)^{1/4} \int_0^\infty e^{-\eta' x^2 - x^4 - \xi' x^6 - \gamma' x^8} dx \right\}, \quad (6.1.6)$$

де

$$\eta' = \sqrt{3} s_0^{3/2}, \quad \xi' = \frac{8\sqrt{3}}{15} s_0^{-3/2}, \quad \gamma' = \frac{34}{35} s_0^{-3}, \quad (6.1.7)$$

а для решти коефіцієнтів  $a'_{2l}$  із (6.1.4) знаходимо

$$\begin{aligned} a'_2 &= (12s_0^3)^{1/2} F_2, & a'_4 &= 3(a'_2)^2 - 12s_0^3 F_4, \\ a'_6 &= (12s_0^3)^{3/2} [F_6 - 15F_4 F_2 + 30F_2^3], \\ a'_8 &= (12s_0^3)^2 [-F_8 + 28F_6 F_2 + 35F_4^2 - 420F_4 F_2^2 + 630F_2^4]. \end{aligned} \quad (6.1.8)$$

Функції  $F_{2l}(\eta', \xi', \gamma')$  є аналогами спеціальних функцій  $U(y)$ ,  $\varphi(y)$ , ..., які використовувалися нами у розділі 2 (див. (2.1.10)). Вони задаються інтегральним представленням:

$$F_{2l}(\eta', \xi', \gamma') = \int_0^\infty x^{2l} \exp(-\eta'x^2 - x^4 - \xi'x^6 - \gamma'x^8) dx \times \left[ \int_0^\infty \exp(-\eta'x^2 - x^4 - \xi'x^6 - \gamma'x^8) dx \right]^{-1}.$$

Для коефіцієнтів  $a'_{2l}$  при  $b = c$  знаходимо наступні числові значення

$$\begin{aligned} a'_0 &= -0.921789, & a'_2 &= 0.988684, \\ a'_4 &= 0.220347 \cdot 10^{-1}, & a'_6 &= 0.295838 \cdot 10^{-2}, \\ a'_8 &= 0.952463 \cdot 10^{-3}. \end{aligned} \quad (6.1.9)$$

Виконаємо у виразі (6.1.3) послідовне інтегрування за КЗ, що належать до множин нульового, першого і т. д. рівнів. Відповідно до [242, 354] для статистичної суми системи у наближенні моделі  $\rho^8$  отримуємо

$$Z_8 = C_{n+1} Q_0 Q_1 \dots Q_n [Q(P_n)]^{N_{n+1}} \int \mathcal{W}_{n+1}^{(8)}(\rho) (d\rho)^{N_{n+1}}. \quad (6.1.10)$$

Тут  $C_{n+1} = 2^N 2^{(N_{n+1})/2}$ ,  $Q_n$  – парціальна статистична сума  $n$ -ої блочної структури, для  $\mathcal{W}_{n+1}^{(8)}(\rho)$  маємо<sup>1</sup>

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_{n+1}^{(8)}(\rho) &= \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{n+1}} d_{n+1}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \right. \\ &\quad \left. - \sum_{m=1}^4 \frac{a_{2m}^{(n+1)} N_{n+1}^{1-m}}{(2m)!} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2m} \\ \mathbf{k}_i \in B_{n+1}}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_{2m}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2m}} \right\}, \end{aligned} \quad (6.1.11)$$

<sup>1</sup>В обчисленнях, які проводяться далі, наближення моделі  $\rho^8$  використовується як у  $\rho_{\mathbf{k}}$  так і в спряженому йому  $\omega_{\mathbf{k}}$  просторі.



де  $d_{n+1}(k) = a_2^{(n+1)} - \beta \tilde{\Phi}(k)$ ,  $a_{2m}^{(n+1)}$  – перенормовані коефіцієнти  $a'_{2n}$  із (6.1.4) після  $n$ -кратної процедури інтегрування.

Для парціальної статистичної суми  $Q_n$  у цьому наближенні отримуємо формулу аналогічну до (2.3.12)

$$Q_n = [Q(d_n)Q(P_{n-1})]^{N_n}, \quad (6.1.12)$$

причому для її складових маємо вирази:

$$Q(d_n) = 2 \left( \frac{24}{a_4^{(n)}} \right)^{1/4} \int_0^\infty \exp \{ -h_n x^2 - x^4 - \alpha_n x^6 - \beta_n x^8 \} dx,$$

$$Q(P_n) = \pi^{-1/2} s^{3/2} \left( \frac{a_4^{(n)}}{C(h_n, \alpha_n, \beta_n)} \right)^{1/4} \times$$

$$\times \int_0^\infty \exp \{ -\eta_n x^2 - x^4 - \xi_n x^6 - \gamma_n x^8 \} dx.$$

Аргументи  $h_n, \alpha_n, \beta_n$  (які надалі називатимемо основними) мають вигляд

$$h_n = d_n(B_{n+1}, B_n) (6/a_4^{(n)})^{1/2},$$

$$\alpha_n = \frac{\sqrt{6}}{15} \frac{a_6^{(n)}}{(a_4^{(n)})^{3/2}}, \quad \beta_n = \frac{1}{70} \frac{a_8^{(n)}}{(a_4^{(n)})^2}. \quad (6.1.13)$$

Для проміжних аргументів  $\eta_n, \xi_n$  і  $\gamma_n$  отримуємо

$$\eta_n = (6s^3)^{1/2} F_2(h_n, \alpha_n, \beta_n) [C(h_n, \alpha_n, \beta_n)]^{-1/2},$$

$$\xi_n = \frac{\sqrt{6}}{15} s^{-3/2} N(h_n, \alpha_n, \beta_n) [C(h_n, \alpha_n, \beta_n)]^{-3/2}, \quad (6.1.14)$$

$$\gamma_n = (70s^3)^{-1} R(h_n, \alpha_n, \beta_n) [C(h_n, \alpha_n, \beta_n)]^{-2}.$$

Тут

$$F_{2l}(h_n, \alpha_n, \beta_n) = \int_0^\infty x^{2l} \exp(-h_n x^2 - x^4 - \alpha_n x^6 - \beta_n x^8) dx \times$$

$$\times \left[ \int_0^\infty \exp(-h_n x^2 - x^4 - \alpha_n x^6 - \beta_n x^8) dx \right]^{-1}, \quad (6.1.15)$$

а решта спеціальних функцій виражаються через  $F_{2l}(h_n, \alpha_n, \beta_n)$  за допомогою рівностей:

$$\begin{aligned} C(h_n, \alpha_n, \beta_n) &= -F_4(h_n, \alpha_n, \beta_n) + 3F_2^2(h_n, \alpha_n, \beta_n), \\ N(h_n, \alpha_n, \beta_n) &= F_6(h_n, \alpha_n, \beta_n) - 15F_4(h_n, \alpha_n, \beta_n) \times \\ &\quad \times F_2(h_n, \alpha_n, \beta_n) + 30F_2^3(h_n, \alpha_n, \beta_n), \\ R(h_n, \alpha_n, \beta_n) &= -F_8(h_n, \alpha_n, \beta_n) + 28F_6(h_n, \alpha_n, \beta_n) \times \\ &\quad \times F_2(h_n, \alpha_n, \beta_n) + 35F_4^2(h_n, \alpha_n, \beta_n) - \\ &\quad - 420F_4(h_n, \alpha_n, \beta_n)F_2^2(h_n, \alpha_n, \beta_n) + \\ &\quad + 630F_2^4(h_n, \alpha_n, \beta_n). \end{aligned} \quad (6.1.16)$$

Запишемо загальні РС, що пов'язують між собою коефіцієнти ефективних гамільтоніанів  $(n+1)$ -ої та  $n$ -ої блочних структур:

$$\begin{aligned} r_{n+1} &= s^2[-q + u_n^{1/2}Y(h_n, \alpha_n, \beta_n)], \\ u_{n+1} &= s^{4-d}u_n B(h_n, \alpha_n, \beta_n), \\ \omega_{n+1} &= s^{6-2d}u_n^{3/2}D(h_n, \alpha_n, \beta_n), \\ v_{n+1} &= s^{8-3d}u_n^2H(h_n, \alpha_n, \beta_n), \end{aligned} \quad (6.1.17)$$

де введені позначення

$$\begin{aligned} r_n &= s^{2n}d_n(0), & u_n &= s^{4n}a_4^{(n)}, \\ \omega_n &= s^{6n}a_6^{(n)}, & v_n &= s^{8n}a_8^{(n)}. \end{aligned}$$

Функції, що входять до складу РС (6.1.17), задаються виразами:

$$\begin{aligned} Y(h_n, \alpha_n, \beta_n) &= s^{d/2}F_2(\eta_n, \xi_n, \gamma_n)[C(h_n, \alpha_n, \beta_n)]^{-1/2}, \\ B(h_n, \alpha_n, \beta_n) &= s^{2d}C(\eta_n, \xi_n, \gamma_n)[C(h_n, \alpha_n, \beta_n)]^{-1}, \\ D(h_n, \alpha_n, \beta_n) &= s^{7d/2}N(\eta_n, \xi_n, \gamma_n)[C(h_n, \alpha_n, \beta_n)]^{-3/2}, \\ H(h_n, \alpha_n, \beta_n) &= s^{5d}R(\eta_n, \xi_n, \gamma_n)[C(h_n, \alpha_n, \beta_n)]^{-2}. \end{aligned} \quad (6.1.18)$$

Спеціальні функції  $F_{2l}(x, y, z)$  задовільняють наступним рекурентним співвідношенням

$$\begin{aligned} 8zF_{2l+8}(x, y, z) &= (2l+1)F_{2l}(x, y, z) - 2xF_{2l+2}(x, y, z) - \\ &\quad - 4F_{2l+4}(x, y, z) - 6yF_{2l+6}(x, y, z), \end{aligned} \quad (6.1.19)$$

які дають змогу виразити їх через три незалежні функції, наприклад,

$$F_2(x, y, z), \quad F_4(x, y, z), \quad F_6(x, y, z).$$

Рекурентні співвідношення (6.1.17) відповідають наближено моделі  $\rho^8$ . Вони переходять у РС моделі  $\rho^6$  за умови  $\beta_n = 0$ . Тоді для спеціальних функцій справедливі наступні рекурентні співвідношення ( $z = 0$ ):

$$(2l + 1)F_{2l}(x, y) = 2xF_{2l+2}(x, y) + 4F_{2l+4}(x, y) + 6yF_{2l+6}(x, y). \quad (6.1.20)$$

Вони дають змогу виразити всі функції  $F_{2l}(x, y)$  через дві —  $F_2(x, y)$  і  $F_4(x, y)$ . У випадку використання моделі  $\rho^4$  маємо  $y = z = 0$ . Тут всі функції  $F_{2l}(x)$  можна виразити через одну, а саме через  $F_2(x)$  [355]. При цьому наведені вище РС для коефіцієнтів ефективних блочних структур (6.1.17) переходять у вирази, отримані нами в розділі 2.

## 6.2. Рекурентні співвідношення для моделі $\rho^6$ . Критичний показник кореляційної довжини

Розглянемо детальніше рекурентні співвідношення в наближенні шестирного базисного розподілу флуктуацій. Це перший ускладнений розподіл після найпростішого негаусового. РС у цьому наближенні представимо у вигляді [307, 310, 356]

$$\begin{aligned} r_{n+1} &= s^2[-q + u_n^{1/2}Y(h_n, \alpha_n)], \\ u_{n+1} &= s^{4-d}u_n B(h_n, \alpha_n), \\ w_{n+1} &= s^{6-2d}u_n^{3/2}D(h_n, \alpha_n). \end{aligned} \quad (6.2.1)$$

Для функцій, що входять у праву частину РС, маємо наступні співвідношення:

$$\begin{aligned} Y(h_n, \alpha_n) &= s^{3/2}F_2(\eta_n, \xi_n)[C(h_n, \alpha_n)]^{-1/2}, \\ B(h_n, \alpha_n) &= s^6C(\eta_n, \xi_n)[C(h_n, \alpha_n)]^{-1}, \\ D(h_n, \alpha_n) &= s^{21/2}N(\eta_n, \xi_n)[C(h_n, \alpha_n)]^{-3/2}, \end{aligned} \quad (6.2.2)$$

для яких справедливі вирази

$$F_{2l}(h_n, \alpha_n) = \int_0^\infty x^{2l} \exp(-h_n x^2 - x^4 - \alpha_n x^6) dx \times \\ \times \left[ \int_0^\infty \exp(-h_n x^2 - x^4 - \alpha_n x^6) dx \right]^{-1}, \quad (6.2.3)$$

$$C = -F_4 + 3F_2^2, \quad N = F_6 - 15F_4F_2 + 30F_2^3.$$

Аргументи  $h_n$  і  $\alpha_n$  мають вигляд

$$h_n = d_n(B_{n+1}, B_n) \left( \frac{6}{a_4^{(n)}} \right)^{1/2} = \sqrt{6} \frac{r_n + q}{(u_n)^{1/2}}, \quad (6.2.4)$$

$$\alpha_n = \frac{\sqrt{6}}{15} a_6^{(n)} (a_4^{(n)})^{-3/2} = \frac{\sqrt{6}}{15} w_n (u_n)^{-3/2}.$$

Функції  $F_{2l}(\eta_n, \xi_n)$ ,  $C(\eta_n, \xi_n)$ ,  $N(\eta_n, \xi_n)$  мають такий же функціональний вигляд що й (6.2.3), де як аргументи (т.зв. проміжні аргументи) виступають величини

$$\eta_n = (6s^3)^{1/2} F_2(h_n, \alpha_n) [C(h_n, \alpha_n)]^{-1/2}, \quad (6.2.5)$$

$$\xi_n = \frac{\sqrt{6}}{15} s^{-3/2} N(h_n, \alpha_n) [C(h_n, \alpha_n)]^{-3/2}.$$

Попередній аналіз критичної поведінки моделі  $\rho^6$  здійснений в працях [308, 309]. Він дав змогу зробити висновки щодо особливостей застосування шестирного розподілу порівняно з четвірним. Наближення, які використовувалися в цих працях, вимагали додаткових досліджень в області значень параметра ренормгрупи  $s$  близьких до одиниці.

Явний вигляд рекурентних співвідношень (6.2.1) для довільних параметрів  $s$  вперше отримали в [310]. Функції  $Y(h_n, \alpha_n)$ ,  $B(h_n, \alpha_n)$  і  $D(h_n, \alpha_n)$  представляють у вигляді степеневих рядів поблизу фіксованої точки

$$r_{n+1} = r_n = r^*, \quad u_{n+1} = u_n = u^*, \quad w_{n+1} = w_n = w^* \quad (6.2.6)$$

за степенями величин  $(h_n - h^*)$ ,  $(\alpha_n - \alpha^*)$ , де

$$h^* = \sqrt{6} \frac{r^* + q}{\sqrt{u^*}}, \quad \alpha^* = \frac{\sqrt{6}}{15} w^* (u^*)^{-3/2}. \quad (6.2.7)$$

У результаті використання такої процедури РС (6.2.1) запишемо у вигляді

$$\begin{aligned} r_{n+1} &= s^2 \left[ -q + \tilde{\mu}_0 u_n^{1/2} - \mu_1 \sqrt{6}(r_n + q) - \mu_2 \frac{\sqrt{6}}{15} \frac{w_n}{u_n} \right], \\ u_{n+1} &= s^{4-d} \left[ \tilde{\omega}_0 u_n - \omega_1 \sqrt{6}(r_n + q) u_n^{1/2} - \omega_2 \frac{\sqrt{6}}{15} \frac{w_n}{\sqrt{u_n}} \right], \\ w_{n+1} &= s^{6-2d} \left[ \tilde{\delta}_0 u_n^{3/2} - \delta_1 \sqrt{6}(r_n + q) u_n - \delta_2 \frac{\sqrt{6}}{15} w_n \right]. \end{aligned} \quad (6.2.8)$$

Тут

$$\begin{aligned} \tilde{\mu}_0 &= \mu_0 + \mu_1 h^* + \mu_2 \alpha^*, \\ \tilde{\omega}_0 &= \omega_0 + \omega_1 h^* + \omega_2 \alpha^*, \\ \tilde{\delta}_0 &= \delta_0 + \delta_1 h^* + \delta_2 \alpha^*, \end{aligned} \quad (6.2.9)$$

а для коефіцієнтів  $\mu_l$ ,  $\omega_l$  і  $\delta_l$  знаходимо

$$\begin{aligned} \mu_0 &= s^{3/2} P_{20} (p_{40})^{-1/2}, & \omega_0 &= s^6 P_{40} / p_{40}, \\ \mu_1 &= \mu_0 \left( P_{21} - \frac{1}{2} p_{41} \right), & \omega_1 &= \omega_0 (P_{41} - p_{41}), \\ \mu_2 &= \mu_0 \left( P_{22} - \frac{1}{2} p_{42} \right), & \omega_2 &= \omega_0 (P_{42} - p_{42}), \\ \delta_0 &= s^{21/2} P_{60} (p_{40})^{-3/2}, & \delta_1 &= \delta_0 \left( P_{61} - \frac{3}{2} p_{41} \right), \\ \delta_2 &= \delta_0 \left( P_{62} - \frac{3}{2} p_{42} \right). \end{aligned} \quad (6.2.10)$$

Зауважимо, що у застосованому тут лінійному наближенні ряди для функцій основних аргументів  $F_2(h_n, \alpha_n)$ ,  $C(h_n, \alpha_n)$ ,  $N(h_n, \alpha_n)$  записуються відповідно через коефіцієнти  $p_{2i}$ ,  $p_{4i}$ ,  $p_{6i}$  ( $i = 0, 1, 2$ ), а для функцій проміжних аргументів  $F_2(\eta_n, \xi_n)$ ,  $C(\eta_n, \xi_n)$ ,  $N(\eta_n, \xi_n)$  – через  $P_{2i}$ ,  $P_{4i}$ ,  $P_{6i}$  (див. додаток Є). Коефіцієнти  $p_{kl}$  виражаються через функції  $F_{2l}^* = F_{2l}(h^*, \alpha^*)$

$$\begin{aligned} p_{20} &= F_2^*, & p_{21} &= F_4^*/F_2^* - F_2^*, & p_{22} &= F_8^*/F_2^* - F_6^*, \\ p_{40} &= -F_4^* + 3F_2^{*2}, & p_{41} &= (p_{40})^{-1}(-F_6^* + 7F_4^*F_2^* - 6F_2^{*3}), \\ p_{42} &= (p_{40})^{-1}[-F_{10}^* + 6F_8^*F_2^* + F_6^*F_4^* - 6F_6^*F_2^{*2}], \\ p_{60} &= F_6^* - 15F_4^*F_2^* + 30F_2^{*3}, \\ p_{61} &= (p_{60})^{-1}[F_8^* - 16F_6^*F_2^* - 15F_4^{*2} + 120F_4^*F_2^{*2} - 90F_2^{*4}], \\ p_{62} &= (p_{60})^{-1}[F_{12}^* - 15(F_8^*F_4^* + F_{10}^*F_2^*) + 30F_6^*F_4^*F_2^* - \\ &\quad - F_6^{*2} + 90(F_8^*F_2^{*2} - F_6^*F_2^{*3})]. \end{aligned} \quad (6.2.11)$$

Між величинами  $F_{2l}^*$  існують РС (6.1.20). Для  $P_{kl}$  маємо

$$\begin{aligned} P_{20} &= F_2^{**}, & P_{2m} &= f_2^{(m)}, & P_{40} &= 3F_2^{**2} - F_4^{**}, \\ P_{4l} &= (P_{40})^{-1} [6f_2^{(l)}F_2^{**2} - f_4^{(l)}F_4^{**}], \\ P_{60} &= F_6^{**} - 15F_4^{**}F_2^{**} + 30F_2^{**3}, \\ P_{6l} &= (P_{60})^{-1} [f_6^{(l)}F_6^{**} - 15(f_2^{(l)} + f_4^{(l)})F_4^{**}F_2^{**} + 90f_2^{(l)}F_2^{**3}], \end{aligned} \quad (6.2.12)$$

де

$$f_{2m}^{(l)} = \eta^* \eta_l \left( F_2^{**} - \frac{F_{2l+2}^{**}}{F_{2l}^{**}} \right) + \xi^* \xi_l \left( F_6^{**} - \frac{F_{2l+6}^{**}}{F_{2l}^{**}} \right). \quad (6.2.13)$$

Для  $F_{2l}^{**}$  введено позначення  $F_{2l}^{**} = F_{2l}(\eta^*, \xi^*)$ . Постійні величини  $\eta^*$ ,  $\xi^*$  і  $\eta_l$ ,  $\xi_l$  знаходимо із співвідношень:

$$\begin{aligned} \eta^* &= s^{3/2} p_{20} (6/p_{40})^{1/2}, & \eta_l &= p_{2l} - \frac{1}{2} p_{4l}, \\ \xi^* &= s^{-3/2} \frac{\sqrt{6}}{15} p_{60} (p_{40})^{-3/2}, & \xi_l &= p_{6l} - \frac{3}{2} p_{4l}. \end{aligned} \quad (6.2.14)$$

Рівняння (6.2.8) характеризують зміну форми шестирного розподілу флуктуацій при збільшенні величини ефективних спінових блоків [310]. Фіксовану точку РС (6.2.8) знаходимо із умов (6.2.6). Величини  $h^*$  і  $\alpha^*$  визначаємо із системи рівнянь

$$\omega_0(h^*, \alpha^*) = s^{-1}, \quad \delta_0(h^*, \alpha^*) = \frac{15}{\sqrt{6}}\alpha^* \quad (6.2.15)$$

за додаткових умов:

$$\omega_1(h^*, \alpha^*) \neq 0, \quad \delta_2(h^*, \alpha^*) + \frac{15}{\sqrt{6}} - \delta_1(h^*, \alpha^*) \frac{\omega_2(h^*, \alpha^*)}{\omega_1(h^*, \alpha^*)} \neq 0.$$

Обчисливши відповідно до (6.2.15) значення  $h^*$  і  $\alpha^*$ , можемо знайти коефіцієнти  $\mu_l$ ,  $\omega_l$  і  $\delta_l$ , які входять до РС (6.2.8). Коефіцієнти цих РС подані в табл. 6.1, а величини  $h^*$  і  $\alpha^*$  – у табл. 6.2.

Здійснимо лінеаризацію РС (6.2.8) в околі фіксованої точки

$$\begin{pmatrix} r_{n+1} - r^* \\ u_{n+1} - u^* \\ w_{n+1} - w^* \end{pmatrix} = \mathcal{R} \begin{pmatrix} r_n - r^* \\ u_n - u^* \\ w_n - w^* \end{pmatrix}. \quad (6.2.16)$$

Для координат фіксованої точки  $r^*$ ,  $u^*$  і  $w^*$  маємо

$$r^* = -f_0\beta\tilde{\Phi}(0), \quad u^* = \varphi_0[\beta\tilde{\Phi}(0)]^2, \quad w^* = \psi_0[\beta\tilde{\Phi}(0)]^3, \quad (6.2.17)$$

де величини  $f_0$ ,  $\varphi_0$  і  $\psi_0$  не залежать від температури і мають вигляд:

$$\begin{aligned} f_0 &= \bar{q} \frac{Y(h^*, \alpha^*) - h^*/\sqrt{6}}{Y(h^*, \alpha^*) - h^*(s^2\sqrt{6})^{-1}}, \\ \varphi_0 &= \bar{q}^2 \frac{6}{(h^*)^2} (1 - s^{-2})^2 \left[ \sqrt{6}Y(h^*, \alpha^*)/h^* - s^{-2} \right]^{-2}, \\ \psi_0 &= \varphi_0^{3/2} D(h^*, \alpha^*). \end{aligned} \quad (6.2.18)$$

Здійснимо в (6.2.18) наступне нормування (див. табл. 6.2):

$$f_0 = \bar{f}_0\bar{q}, \quad \varphi_0 = \bar{\varphi}_0\bar{q}^2, \quad \psi_0 = \bar{\psi}_0\bar{q}^3.$$

Табл. 6.1. Коефіцієнти рекурентних співвідношень (6.2.8) для моделі  $\rho^6$ 

$s$	$\mu_0$	$\mu_1$	$\mu_2$	$\tilde{\mu}_0$
2.5000	0.7035	-0.2417	-0.2633	0.5991
2.7349	0.6534	-0.2322	-0.2815	0.6007
3.0000	0.6076	-0.2230	-0.2993	0.6000
3.5862	0.5312	-0.2059	-0.3303	0.5937
4.0000	0.4907	-0.1958	-0.3472	0.5872
5.0000	0.4192	-0.1756	-0.3769	0.5690

$s$	$\omega_0$	$\omega_1$	$\omega_2$	$\tilde{\omega}_0$
2.5000	0.4000	-0.1592	-0.3775	0.2878
2.7349	0.3656	-0.1538	-0.3819	0.2941
3.0000	0.3333	-0.1481	-0.3848	0.2978
3.5862	0.2788	-0.1366	-0.3856	0.2991
4.0000	0.2500	-0.1293	-0.3833	0.2968
5.0000	0.2000	-0.1140	-0.3737	0.2867

$s$	$\delta_0$	$\delta_1$	$\delta_2$	$\tilde{\delta}_0$
2.5000	1.3035	-0.4763	-2.0729	0.7669
2.7349	1.1476	-0.4520	-1.9931	0.7741
3.0000	1.0052	-0.4278	-1.9045	0.7724
3.5862	0.7811	-0.3850	-1.7316	0.7558
4.0000	0.6721	-0.3606	-1.6308	0.7411
5.0000	0.4991	-0.3129	-1.4419	0.7031



Табл. 6.2. Значення основних аргументів  $h^*$  і  $\alpha^*$  у фіксованій точці та її нормовані координати (модель  $\rho^6$ )

$s$	$h^*$	$\alpha^*$	$f_0$	$\bar{\varphi}_0$	$\bar{\psi}_0$
2.5000	0.20010	0.21285	0.9006	1.4803	2.3477
2.7349	0.00001	0.18740	1.0000	1.7576	2.6740
3.0000	-0.18647	0.16416	1.1098	2.0820	3.0199
3.5862	-0.50810	0.12755	1.3495	2.8388	3.7360
4.0000	-0.68775	0.10975	1.5179	3.4024	4.2180
5.0000	-1.02764	0.08151	1.9237	4.8476	5.3272

Легко бачити, що  $\bar{f}_0$ ,  $\bar{\varphi}_0$  і  $\bar{\psi}_0$  стають величинами незалежними від способу усереднення потенціалу взаємодії.

Елементи матриці  $\mathcal{R}$  записуються у вигляді:

$$\begin{aligned}
 R_{11} &= -s^2 \sqrt{6} \mu_1, \\
 R_{12} &= R_{12}^{(0)} (u^*)^{-1/2}, \quad R_{12}^{(0)} = s^2 \left( \frac{1}{2} \tilde{\mu}_0 + \alpha^* \mu_2 \right), \\
 R_{13} &= R_{13}^{(0)} (u^*)^{-1}, \quad R_{13}^{(0)} = -s^2 \sqrt{6} \mu_2 / 15, \\
 R_{21} &= R_{21}^{(0)} (u^*)^{1/2}, \quad R_{21}^{(0)} = -s \omega_1 \sqrt{6}, \\
 R_{22} &= s \left( \tilde{\omega}_0 - \frac{1}{2} \omega_1 h^* + \frac{1}{2} \omega_2 \alpha^* \right), \\
 R_{23} &= R_{23}^{(0)} (u^*)^{-1/2}, \quad R_{23}^{(0)} = -s \omega_2 \sqrt{6} / 15, \\
 R_{31} &= R_{31}^{(0)} u^*, \quad R_{31}^{(0)} = -\delta \sqrt{6}, \\
 R_{32} &= R_{32}^{(0)} (u^*)^{1/2}, \quad R_{32}^{(0)} = \frac{3}{2} \tilde{\delta}_0 - \delta_1 h^*, \\
 R_{33} &= \sqrt{6} \delta_2 / 15.
 \end{aligned} \tag{6.2.19}$$

Власні значення матриці перетворення (6.2.16)  $E_1$ ,  $E_2$  і  $E_3$  (див. табл. 6.3) характеризують тип фіксованої точки РС (6.2.8). Для

Табл. 6.3. Власні значення матриці перетворення  $\mathcal{R}$  із (6.2.16) (модель  $\rho^6$ ) і значення критичного показника кореляційної довжини  $\nu$

$s$	$E_1$	$E_2$	$E_3$	$\nu(\rho^6)$	$\nu(\rho^4)$
2.5000	4.2450	0.4500	0.0032	0.634	–
2.7349	4.8468	0.4367	0.0032	0.637	–
3.0000	5.5581	0.4221	0.0030	0.640	0.592
3.5862	7.2336	0.3923	0.0027	0.645	0.605
4.0000	8.4878	0.3737	0.0024	0.648	0.612
5.0000	11.7133	0.3366	0.0018	0.654	0.626

всіх параметрів  $s$  фіксована точка є сідловою ( $E_1 > 1$ ,  $E_2 < 1$ ,  $E_3 < 1$ ).

Порівнюючи величину критичного показника  $\nu$  отриманого для моделей  $\rho^4$  і  $\rho^6$  (див. табл. 6.3) знаходимо, що значення  $\nu$  для моделі  $\rho^6$  значно менше (ніж для моделі  $\rho^4$ ) залежать від  $s$ .

### 6.3. Розв'язок рекурентних співвідношень для моделі $\rho^6$

Дослідимо рекурентні співвідношення (6.2.1). Вони описують еволюцію коефіцієнтів ефективних базисних мір, які містять доданки з другим, четвертим й шостим степенями змінної в показнику експоненти. Наявність у цих РС фіксованої точки дає змогу отримати їхні явні розв'язки як функції номера  $n$ -ої блочної структури. Знайдемо ці розв'язки.

Матричні елементи  $R_{ij}$  матриці перетворення (6.2.16) можемо записати у вигляді:

$$R_{ij} = \sum_{l=1}^3 E_l w_{il} v_{lj}, \quad (6.3.1)$$

де  $E_l$  – власні значення, а  $w_{il}$  і  $v_{lj}$  – власні вектори, що відповідають матрицям  $R$  і  $R^T$ , відповідно. Використовуючи умову  $\sum_j R_{ij}w_{jl} = E_l w_{il}$ , отримуємо матрицю

$$W = w_{11} \begin{pmatrix} 1 & Aw_{12}^{(0)}(u^*)^{-1/2} & Bw_{13}^{(0)}(u^*)^{-1} \\ w_{21}^{(0)}(u^*)^{1/2} & A & Bw_{23}^{(0)}(u^*)^{-1/2} \\ w_{31}^{(0)}u^* & Aw_{32}^{(0)}(u^*)^{1/2} & B \end{pmatrix}, \quad (6.3.2)$$

де величина  $u^* = \varphi_0[\beta\tilde{\Phi}(0)]^2$  (див. формулу (6.2.17)) визначає фіксовану точку другої рівності РС (6.2.1),

$$\begin{aligned} w_{12}^{(0)} &= (E_2 - R_{22} - c_0 R_{23}^{(0)})/R_{21}^{(0)}, & w_{31}^{(0)} &= b_0, \\ w_{21}^{(0)} &= (E_1 - R_{11} - b_0 R_{13}^{(0)})/R_{12}^{(0)}, & w_{23}^{(0)} &= d_0, \\ w_{13}^{(0)} &= (E_3 - R_{33} - d_0 R_{32}^{(0)})/R_{31}^{(0)}, & w_{32}^{(0)} &= c_0. \end{aligned} \quad (6.3.3)$$

Тут  $A = w_{22}/w_{11}$ ,  $B = w_{33}/w_{11}$ , а для величин  $c_0$ ,  $b_0$  та  $d_0$  маємо:

$$\begin{aligned} b_0 &= \frac{(E_1 - R_{11})R_{32}^{(0)} + R_{31}^{(0)}R_{12}^{(0)}}{(E_1 - R_{33})R_{12}^{(0)} + R_{13}^{(0)}R_{32}^{(0)}}, \\ c_0 &= \frac{(E_2 - R_{22})R_{31}^{(0)} + R_{32}^{(0)}R_{21}^{(0)}}{(E_2 - R_{33})R_{21}^{(0)} + R_{23}^{(0)}R_{31}^{(0)}}, \\ d_0 &= \frac{(E_3 - R_{33})R_{21}^{(0)} + R_{23}^{(0)}R_{31}^{(0)}}{(E_3 - R_{22})R_{31}^{(0)} + R_{32}^{(0)}R_{21}^{(0)}}. \end{aligned} \quad (6.3.4)$$

Для власних векторів  $v_{lj}$  відповідно до умови

$$\sum_j v_{lj}R_{ji} = E_l v_{li}$$

отримуємо матрицю власних векторів транспонованої матриці

$$V = v_{11} \begin{pmatrix} 1 & v_{12}^{(0)}(u^*)^{-1/2} & v_{13}^{(0)}(u^*)^{-1} \\ v_{21}^{(0)}(u^*)^{1/2}E & E & v_{23}^{(0)}(u^*)^{-1/2}E \\ v_{31}^{(0)}u^*D & v_{32}^{(0)}(u^*)^{1/2}D & D \end{pmatrix}. \quad (6.3.5)$$

Тут

$$\begin{aligned} v_{12}^{(0)} &= (E_1 - R_{11} - e_0 R_{31}^{(0)})/R_{21}^{(0)}, & v_{13}^{(0)} &= e_0, & E &= v_{22}/v_{11}, \\ v_{21}^{(0)} &= (E_2 - R_{22} - l_0 R_{32}^{(0)})/R_{12}^{(0)}, & v_{23}^{(0)} &= l_0, & D &= v_{33}/v_{11}, \\ v_{31}^{(0)} &= (E_3 - R_{33} - g_0 R_{23}^{(0)})/R_{13}^{(0)}, & v_{32}^{(0)} &= g_0, \end{aligned} \quad (6.3.6)$$

а для  $e_0$ ,  $l_0$  і  $g_0$  маємо:

$$\begin{aligned} e_0 &= \left[ (E_1 - R_{11})R_{23}^{(0)} + R_{21}^{(0)}R_{13}^{(0)} \right] \left[ (E_1 - R_{33})R_{21}^{(0)} + R_{23}^{(0)}R_{31}^{(0)} \right]^{-1}, \\ l_0 &= \left[ (E_2 - R_{22})R_{13}^{(0)} + R_{12}^{(0)}R_{23}^{(0)} \right] \left[ (E_2 - R_{33})R_{12}^{(0)} + R_{13}^{(0)}R_{32}^{(0)} \right]^{-1}, \\ g_0 &= \left[ (E_3 - R_{33})R_{12}^{(0)} + R_{13}^{(0)}R_{32}^{(0)} \right] \left[ (E_3 - R_{22})R_{13}^{(0)} + R_{12}^{(0)}R_{23}^{(0)} \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (6.3.7)$$

Здійснимо  $l$ -кратне перетворення (6.2.16). В результаті отримуємо матрицю  $R^l$ , для елементів якої знаходимо

$$R_{ij}^l = \sum_k E_k^l w_{ik} v_{kj}. \quad (6.3.8)$$

Для матричних елементів  $R_{1j}^l$  отримуємо вирази

$$\begin{aligned} R_{11}^l &= V_1 \left[ E_1^l + A_0 w_{12}^{(0)} v_{21}^{(0)} E_2^l + B_0 w_{13}^{(0)} v_{31}^{(0)} E_3^l \right], \\ R_{12}^l &= V_1 \left[ v_{12}^{(0)} E_1^l + A_0 w_{12}^{(0)} E_2^l + B_0 w_{13}^{(0)} g_0 E_3^l \right] (u^*)^{-1/2}, \\ R_{13}^l &= V_1 \left[ e_0 E_1^l + A_0 w_{12}^{(0)} l_0 E_2^l + B_0 w_{13}^{(0)} E_3^l \right] (u^*)^{-1}, \end{aligned} \quad (6.3.9)$$

де

$$A_0 = \frac{w_{22}v_{22}}{w_{11}v_{11}}, \quad B_0 = \frac{w_{33}v_{33}}{w_{11}v_{11}}. \quad (6.3.10)$$

Добутки типу  $V_l = w_{il}v_{li}$  знаходимо з умови нормування

$$\sum_j v_{kj} w_{jl} = \delta_{kl}.$$

Це дає змогу отримати величини, що входять до складу матричних елементів (6.3.9). Маємо

$$\begin{aligned} V_1^{-1} &= 1 + e_0 b_0 + (E_1 - R_{11} - e_0 R_{31}^{(0)}) \frac{E_1 - R_{11} - b_0 R_{13}^{(0)}}{R_{12}^{(0)} R_{21}^{(0)}}, \\ V_2^{-1} &= 1 + c_0 l_0 + (E_2 - R_{22} - l_0 R_{32}^{(0)}) \frac{E_2 - R_{22} - c_0 R_{23}^{(0)}}{R_{12}^{(0)} R_{21}^{(0)}}, \\ V_3^{-1} &= 1 + d_0 g_0 + (E_3 - R_{33} - d_0 R_{32}^{(0)}) \frac{E_3 - R_{33} - g_0 R_{23}^{(0)}}{R_{13}^{(0)} R_{31}^{(0)}}. \end{aligned} \quad (6.3.11)$$

Для  $R_{2j}^l$  знаходимо

$$\begin{aligned} R_{21}^l &= V_1 \left[ w_{21}^{(0)} E_1^l + A_0 v_{21}^{(0)} E_2^l + B_0 d_0 v_{31}^{(0)} E_3^l \right] (u^*)^{1/2}, \\ R_{22}^l &= V_1 \left[ w_{21}^{(0)} v_{12}^{(0)} E_1^l + A_0 E_2^l + B_0 d_0 g_0 E_3^l \right], \\ R_{23}^l &= V_1 \left[ w_{21}^{(0)} e_0 E_1^l + A_0 l_0 E_2^l + B_0 d_0 E_3^l \right] (u^*)^{-1/2}. \end{aligned} \quad (6.3.12)$$

Аналогічно одержуємо

$$\begin{aligned} R_{31}^l &= V_1 \left[ b_0 E_1^l + A_0 c_0 v_{21}^{(0)} E_2^l + B_0 v_{31}^{(0)} E_3^l \right] u^*, \\ R_{32}^l &= V_1 \left[ b_0 v_{12}^{(0)} E_1^l + A_0 c_0 E_2^l + B_0 g_0 E_3^l \right] (u^*)^{1/2}, \\ R_{33}^l &= V_1 \left[ b_0 e_0 E_1^l + A_0 c_0 l_0 E_2^l + B_0 E_3^l \right]. \end{aligned} \quad (6.3.13)$$

Розв'язки  $l$ -кратно ітерованих рекурентних співвідношень знаходимо, використовуючи рівності (6.3.9)–(6.3.13):

$$\begin{aligned} r_l &= r^* + c_1 E_1^l + c_2 w_{12}^{(0)} (u^*)^{-1/2} E_2^l + c_3 w_{13}^{(0)} (u^*)^{-1} E_3^l, \\ u_l &= u^* + c_1 w_{21}^{(0)} (u^*)^{1/2} E_1^l + c_2 E_2^l + c_3 w_{23}^{(0)} (u^*)^{-1/2} E_3^l, \\ w_l &= w^* + c_1 w_{31}^{(0)} u^* E_1^l + c_2 w_{32}^{(0)} (u^*)^{1/2} E_2^l + c_3 E_3^l. \end{aligned} \quad (6.3.14)$$

Величини  $c_l$  отримуємо з початкових умов:

$$\begin{aligned} c_1 &= V_1 \left[ r - r^* + (u^*)^{-1/2} (u - u^*) v_{12}^{(0)} + (u^*)^{-1} e_0 (w - w^*) \right], \\ c_2 &= V_2 \left[ u - u^* + (u^*)^{1/2} v_{21}^{(0)} (r - r^*) + (u^*)^{-1/2} l_0 (w - w^*) \right], \\ c_3 &= V_3 \left[ w - w^* + u^* v_{31}^{(0)} (r - r^*) + (u^*)^{1/2} g_0 (u - u^*) \right]. \end{aligned} \quad (6.3.15)$$

Коефіцієнти  $r$ ,  $u$  і  $w$  характеризують початкову систему:

$$r = a'_2 - \beta \tilde{\Phi}(0), \quad u = a'_4, \quad w = a'_6, \quad (6.3.16)$$

а величини  $r^*$ ,  $u^*$  і  $w^*$ , відповідно до (6.2.17), визначають координати фіксованої точки РС (6.2.1). Рівняння (6.3.14) справедливі, зокрема, при  $T = T_c$ . Тут характерною є поведінка коефіцієнтів

$$\lim_{n \rightarrow \infty} r_n = r^*, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} u_n = u^*, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} w_n = w^*. \quad (6.3.17)$$

Виконання цих рівностей можливе лише у випадку, коли виконується умова

$$c_1(T_c) = 0. \quad (6.3.18)$$

Рівняння (6.3.18) визначає температуру фазового переходу  $T_c$ . У наближенні моделі  $\rho^6$  воно має вигляд:

$$\begin{aligned} a'_2 - \beta_c \tilde{\Phi}(0) - r^* + (a'_4 - u^*) (u^*)^{1/2} v_{12}^{(0)} + \\ + (a'_6 - w^*) (u^*)^{-1} v_{13}^{(0)} = 0. \end{aligned} \quad (6.3.19)$$

Підставляючи в (6.3.19) значення координат фіксованої точки при  $T = T_c$ , знаходимо наступне рівняння:

$$\sum_{l=0}^3 \Phi'_l \left[ \beta_c \tilde{\Phi}(0) \right]^l = 0. \quad (6.3.20)$$

Коефіцієнти  $\Phi'_i$  не залежать від температури і мають вигляд:

$$\begin{aligned} \Phi'_0 &= a'_6 v_{13}^{(0)} \varphi_0^{-1}, & \Phi'_1 &= a'_4 v_{12}^{(0)} \varphi_0^{-1/2}, \\ \Phi'_2 &= a'_2, & \Phi'_3 &= f_0 - 1 - v_{12}^{(0)} \varphi_0^{1/2} - v_{13}^{(0)} \psi_0 \varphi_0^{-1}. \end{aligned} \quad (6.3.21)$$

Рівняння (6.3.20) має два комплексно спряжених і один дійсний розв'язки. Останній визначає температуру фазового переходу  $T_c$  в одиницях  $\tilde{\Phi}(0)$ . Значення температури ФП при  $b = c$  подано в табл. 6.4.

Табл. 6.4. Значення оберненої температури фазового переходу  $\beta_c \tilde{\Phi}(0)$  та коефіцієнтів  $\tilde{c}_1^{(l)}$ ,  $c_{20}^{(l)}$  і  $c_{30}^{(l)}$ , що визначають явні розв'язки ренормгрупових співвідношень моделі  $\rho^6$

$s$	2.5000	2.7349	3.0000	3.5862	4.0000	5.0000
$\beta_c \tilde{\Phi}(0)$	1.1405	1.1506	1.1628	1.1929	1.2165	1.2805
$\tilde{c}_1^{(0)}$	0.7637	0.7641	0.7630	0.7555	0.7471	0.7205
$\tilde{c}_1^{(1)}$	0.0103	0.0100	0.0096	0.0088	0.0082	0.0070
$c_{20}^{(0)}$	-0.3297	-0.3820	-0.4449	-0.5972	-0.7142	-1.0240
$c_{20}^{(1)}$	-0.0893	-0.0872	-0.0851	-0.0807	-0.0776	-0.0703
$c_{20}^{(2)}$	0.0080	0.0083	0.0085	0.0089	0.0090	0.0089
$c_{30}^{(0)}$	0.3266	0.3642	0.4056	0.4952	0.5581	0.7091
$c_{30}^{(1)}$	0.0698	0.0654	0.0603	0.0503	0.0443	0.0333
$c_{30}^{(2)}$	-0.0147	-0.0140	-0.0133	-0.0118	-0.0108	-0.0089

Подамо залежність коефіцієнтів  $c_l(T)$  із (6.3.15) від відносної температури  $\tau = (T - T_c)/T_c$ .

У випадку  $\tau \ll 1$  величини  $c_1$ ,  $c_2$  і  $c_3$  зручно представляти у вигляді

$$c_1 = \tilde{c}_1 \tau \beta \tilde{\Phi}(0), \quad c_l = c_{l0} \left[ \beta \tilde{\Phi}(0) \right]^l, \quad (6.3.22)$$

де  $l = 2, 3$ . Для  $\tilde{c}_1, c_{20}, c_{30}$  маємо вирази:

$$\begin{aligned} \tilde{c}_1 &= V_1 \left[ 1 - f_0 + v_{12}^{(0)} \varphi_0^{1/2} + v_{13}^{(0)} \psi_0 \varphi_0^{-1} + a'_4 v_{12}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} \times \right. \\ &\quad \left. \times \left( \beta \tilde{\Phi}^2(0) \right)^{-1} + a'_6 v_{13}^{(0)} (T + T_c) (\beta_c \tilde{\Phi}(0))^{-2} (\varphi_0 T_c \beta \tilde{\Phi}(0))^{-1} \right], \\ c_{20} &= V_2 \left\{ -\varphi_0 - v_{21}^{(0)} (1 - f_0) \varphi_0^{1/2} - v_{23}^{(0)} \psi_0 \varphi_0^{-1/2} + a'_2 v_{21}^{(0)} \varphi_0^{1/2} \times \right. \\ &\quad \left. \times (\beta \tilde{\Phi}(0))^{-1} + a'_4 (\beta \tilde{\Phi}(0))^{-2} + a'_6 v_{23}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} (\beta \tilde{\Phi}(0))^{-3} \right\}, \\ c_{30} &= V_3 \left\{ -\psi_0 - v_{32}^{(0)} \varphi_0^{3/2} - v_{31}^{(0)} \varphi_0 (1 - f_0) + v_{31}^{(0)} a'_2 \varphi_0 (\beta \tilde{\Phi}(0))^{-1} + \right. \\ &\quad \left. + a'_4 v_{32}^{(0)} \varphi_0^{1/2} (\beta \tilde{\Phi}(0))^{-2} + a'_6 (\beta \tilde{\Phi}(0))^{-3} \right\}. \end{aligned} \quad (6.3.23)$$

Як і в моделі  $\rho^4$  [315], коефіцієнт  $c_1$  пропорційний до  $\tau$ , а величини  $c_2, c_3$  є заданими функціями температури. Вони відмінні від нуля при  $T = T_c$ .

В околі точки фазового переходу коефіцієнт  $\tilde{c}_1$  запишемо у вигляді розкладу за степенями  $\tau$

$$\tilde{c}_1 \approx \tilde{c}_1^{(0)} + \tilde{c}_1^{(1)} \tau, \quad (6.3.24)$$

де

$$\begin{aligned} \tilde{c}_1^{(0)} &= V_1 \left[ 1 - f_0 + v_{12}^{(0)} \varphi_0^{1/2} + v_{13}^{(0)} \psi_0 \varphi_0^{-1} + a'_4 v_{12}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} \times \right. \\ &\quad \left. \times (\beta_c \tilde{\Phi}(0))^{-2} + 2a'_6 v_{13}^{(0)} \varphi_0^{-1} (\beta_c \tilde{\Phi}(0))^{-3} \right], \\ \tilde{c}_1^{(1)} &= V_1 \left[ a'_4 v_{12}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} (\beta_c \tilde{\Phi}(0))^{-2} + 3a'_6 v_{13}^{(0)} \varphi_0^{-1} (\beta_c \tilde{\Phi}(0))^{-3} \right]. \end{aligned} \quad (6.3.25)$$

Для коефіцієнта  $c_{20}$  маємо подібне до (6.3.24) представлення, з тим, що він містить відмінний від нуля і незалежний від температури вільний член:

$$c_{20} = c_{20}^{(0)} + c_{20}^{(1)} \tau + c_{20}^{(2)} \tau^2. \quad (6.3.26)$$



Тут

$$\begin{aligned}
 c_{20}^{(0)} &= V_2 \left[ -\varphi_0 - (1 - f_0)\varphi_0^{1/2}v_{21}^{(0)} - v_{23}^{(0)}\psi_0\varphi_0^{-1/2} + a'_2v_{21}^{(0)}\varphi_0^{1/2} \times \right. \\
 &\quad \left. \times (\beta_c\tilde{\Phi}(0))^{-1} + a'_4(\beta_c\tilde{\Phi}(0))^{-2} + a'_6v_{23}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}(\beta_c\tilde{\Phi}(0))^{-3} \right], \\
 c_{20}^{(1)} &= V_2 \left[ a'_2v_{21}^{(0)}\varphi_0^{1/2}(\beta_c\tilde{\Phi}(0))^{-1} + 2a'_4(\beta_c\tilde{\Phi}(0))^{-2} + \right. \\
 &\quad \left. + 3a'_6v_{23}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}(\beta_c\tilde{\Phi}(0))^{-3} \right], \\
 c_{20}^{(2)} &= V_2 \left[ a'_4(\beta_c\tilde{\Phi}(0))^{-2} + 3a'_6v_{23}^{(0)}\varphi_0^{-1/2}(\beta_c\tilde{\Phi}(0))^{-3} \right]. \quad (6.3.27)
 \end{aligned}$$

Для коефіцієнта  $c_{30}$  одержуємо

$$c_{30} = c_{30}^{(0)} + c_{30}^{(1)}\tau + c_{30}^{(2)}\tau^2, \quad (6.3.28)$$

де

$$\begin{aligned}
 c_{30}^{(0)} &= V_3 \left[ -\psi_0 - \varphi_0^{3/2}v_{32}^{(0)} - \varphi_0(1 - f_0)v_{31}^{(0)} + a'_2v_{31}^{(0)}\varphi_0 \times \right. \\
 &\quad \left. \times (\beta_c\tilde{\Phi}(0))^{-1} + a'_4v_{32}^{(0)}\varphi_0^{1/2}(\beta_c\tilde{\Phi}(0))^{-2} + a'_6(\beta_c\tilde{\Phi}(0))^{-3} \right], \\
 c_{30}^{(1)} &= V_3 \left[ a'_2v_{31}^{(0)}\varphi_0(\beta_c\tilde{\Phi}(0))^{-1} + 2a'_4v_{32}^{(0)}\varphi_0^{1/2}(\beta_c\tilde{\Phi}(0))^{-2} + \right. \\
 &\quad \left. + 3a'_6(\beta_c\tilde{\Phi}(0))^{-3} \right], \\
 c_{30}^{(2)} &= V_3 \left\{ \frac{a'_4v_{32}^{(0)}\varphi_0^{1/2}}{[\beta_c\tilde{\Phi}(0)]^2} + \frac{3a'_6}{[\beta_c\tilde{\Phi}(0)]^3} \right\}. \quad (6.3.29)
 \end{aligned}$$

Критичні показники, що характеризують поправки до скейлінгу  $\Delta = -\ln E_2/\ln E_1$  та  $\Delta_2 = -\ln E_3/\ln E_1$ , можна обчислити з даних табл. 6.3. Коефіцієнти  $\tilde{c}_1^{(l)}$ ,  $c_{20}^{(l)}$ ,  $c_{30}^{(l)}$  при  $b = c$  подані в табл. 6.4.

Отримані нами явні розв'язки рівнянь РГ свідчать про їхню повну аналогію з відповідними рівняннями для моделі  $\rho^4$ . Отже, для моделі  $\rho^6$  при температурах близьких до  $T_c$  виникає критичний режим у поведінці коефіцієнтів  $r_l$ ,  $u_l$ ,  $w_l$ . Існування КР, відповідно до (6.3.14), забезпечується двома процесами.

Перший з них відповідає входу системи в КР. За нього відповідають доданки, пропорційні до менших власних значень матриці перетворення (6.2.16)  $E_2^l$  і  $E_3^l$ . Оскільки  $E_2$  і  $E_3$  менші від одиниці, то з ростом  $l$  роль цих доданків зменшується.

Другий процес полягає у виході системи із КР. Він описується доданком, який пропорційний  $E_1^l$ . Цей доданок з ростом  $l$  стає визначальним у поведінці (6.3.14). Ріст  $E_1^l$  для малих значень  $l$  компенсується малістю коефіцієнта  $c_1(\tau)$ . Оскільки  $c_1 \sim \tilde{c}_1 \tau$ , то природно, що існує область температур  $\tau < \tau^*$ , для якої в ефективних блочних структурах з номерами  $n < m_\tau$  існує КР.

## 6.4. Насичення критичного показника кореляційної довжини зі збільшенням порядку моделі

Наведені в §6.2 результати розрахунку критичного показника кореляційної довжини показують його тенденцію до насичення з ускладненням форми розподілу фаз флуктуацій густини спінового моменту. Дослідимо, наскільки суттєвою є наявність вищих степенів змінної в експоненті функції розподілу. Skorистаємося для цього запропонованим нами методом розрахунку критичного показника  $\nu$  для дослідження моделі  $\rho^{2l}$  з довільним  $l$ . У кожному конкретному випадку основна складність полягає в розв'язку системи  $l - 1$  рівнянь для основних параметрів фіксованої точки і розрахунку власних значень матриці порядку  $l \times l$ .

У випадку використання моделі  $\rho^8$  [354] маємо три основних параметри фіксованої точки  $h^*$ ,  $\alpha^*$  і  $\beta^*$ , які знаходимо із рівнянь (див. табл. 6.5):

$$s^{-1} = B(h^*, \alpha^*, \beta^*), \quad \alpha^* = \frac{\sqrt{6}}{15} D(h^*, \alpha^*, \beta^*), \quad (6.4.1)$$

$$\beta^* = (70s)^{-1} H(h^*, \alpha^*, \beta^*),$$

де функції  $B$ ,  $D$  і  $H$  визначені в (6.1.18).

Дослідимо рекурентні співвідношення (6.1.17) біля фіксованої точки  $(r^*, u^*, w^*, v^*)$ . Координати останньої визначаються із

Табл. 6.5. Значення основних аргументів у фіксованій точці для моделі  $\rho^8$ 

$s$	$h^*$	$\alpha^*$	$\beta^*$
2.0000	0.59415	0.26425	0.07033
2.2500	0.33172	0.22021	0.04443
2.5000	0.11587	0.18854	0.03090
2.6511	0.00005	0.17369	0.02597
2.7349	-0.06020	0.16650	0.02387
3.0000	-0.23432	0.14746	0.01910
3.5862	-0.54769	0.11804	0.01325
4.0000	-0.72511	0.10339	0.01071
5.0000	-1.05972	0.07893	0.00681

рівностей

$$\begin{aligned} r_{n+1} &= r_n = r^*, & u_{n+1} &= u_n = u^*, \\ w_{n+1} &= w_n = w^*, & v_{n+1} &= v_n = v^*. \end{aligned} \quad (6.4.2)$$

Рекурентні співвідношення запишемо у явному вигляді:

$$\begin{aligned} r_{n+1} &= s^2 \left[ -q + \tilde{\mu}_0 u_n^{1/2} - \mu_1 \sqrt{6}(r_n + q) - \mu_2 \frac{\sqrt{6}w_n}{15u_n} - \frac{\mu_3}{70} \frac{v_n}{u_n^{3/2}} \right], \\ u_{n+1} &= s \left[ \tilde{\omega}_0 u_n - \omega_1 \sqrt{6}(r_n + q)u_n^{1/2} - \omega_2 \frac{\sqrt{6}w_n}{15u_n^{1/2}} - \frac{\omega_3}{70} \frac{v_n}{u_n} \right], \\ w_{n+1} &= \tilde{\delta}_0 u_n^{3/2} - \delta_1 \sqrt{6}(r_n + q)u_n - \delta_2 \frac{\sqrt{6}}{15} w_n - \frac{\delta_3}{70} \frac{v_n}{u_n^{1/2}}, \\ v_{n+1} &= s^{-1} \left[ \tilde{\lambda}_0 u_n^2 - \lambda_1 \sqrt{6}(r_n + q)u_n^{3/2} - \lambda_2 \frac{\sqrt{6}}{15} w_n u_n^{1/2} - \frac{\lambda_3}{70} v_n \right]. \end{aligned} \quad (6.4.3)$$

Тут

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mu}_0 &= \mu_0 + \mu_1 h^* + \mu_2 \alpha^* + \mu_3 \beta^*, \\
 \tilde{\omega}_0 &= \omega_0 + \omega_1 h^* + \omega_2 \alpha^* + \omega_3 \beta^*, \\
 \tilde{\delta}_0 &= \delta_0 + \delta_1 h^* + \delta_2 \alpha^* + \delta_3 \beta^*, \\
 \tilde{\lambda}_0 &= \lambda_0 + \lambda_1 h^* + \lambda_2 \alpha^* + \lambda_3 \beta^*,
 \end{aligned} \tag{6.4.4}$$

а  $\mu_l$ ,  $\omega_l$ ,  $\delta_l$  і  $\lambda_l$  задовільняють таким співвідношенням:

$$\begin{aligned}
 \mu_0 &= s^{d/2} P_{20} (p_{40})^{-1/2}, & \mu_l &= \mu_0 \left( P_{2l} - \frac{1}{2} p_{4l} \right), \\
 \omega_0 &= s^{2d} P_{40} (p_{40})^{-1}, & \omega_l &= \omega_0 (P_{4l} - p_{4l}), \\
 \delta_0 &= s^{7d/2} P_{60} (p_{40})^{-3/2}, & \delta_l &= \delta_0 \left( P_{6l} - \frac{3}{2} p_{4l} \right), \\
 \lambda_0 &= s^{5d} P_{80} (p_{40})^{-2}, & \lambda_l &= \lambda_0 (P_{8l} - 2p_{4l}).
 \end{aligned} \tag{6.4.5}$$

Величини  $p_{ml}$  для  $m = 2, 4, 6$  і  $l = 0, 1, 2$  приведені в (6.2.11), де як  $F_{2l}^*$  слід використовувати  $F_{2l}(h^*, \alpha^*, \beta^*)$  із (6.1.15). У випадку  $m = 2, 4, 6$  та  $l = 3$  маємо

$$\begin{aligned}
 p_{23} &= F_{10}^* / F_2^* - F_8^*, \\
 p_{43} &= (p_{40})^{-1} [-F_{12}^* + 6F_{10}^* F_2^* + F_8^* F_4^* - 6F_8^* F_2^{*2}], \\
 p_{63} &= (p_{60})^{-1} [F_{14}^* - 15(F_{10}^* F_4^* + F_{12}^* F_2^*) - F_8^* F_6^* + \\
 &\quad + 30F_8^* F_4^* F_2^* + 90(F_{10}^* F_2^{*2} - F_8^* F_2^{*3})],
 \end{aligned}$$

а при  $m = 8$  і  $l = 0, 1, 2, 3$  знаходимо

$$\begin{aligned}
 p_{80} &= -F_8^* + 28F_6^* F_2^* + 35F_4^{*2} - 420F_4^* F_2^{*2} + 630F_2^{*4}, \\
 p_{81} &= (p_{80})^{-1} [-F_{10}^* + 29F_8^* F_2^* + 98F_6^* F_4^* - 476F_6^* F_2^{*2} - \\
 &\quad - 910F_4^{*2} F_2^* + 3780F_4^* F_2^{*3} - 2520F_2^{*5}], \\
 p_{82} &= (p_{80})^{-1} [-F_{14}^* + 70F_{10}^* F_4^* + 28F_{12}^* F_2^* + 29F_8^* F_6^* - \\
 &\quad - 840F_8^* F_4^* F_2^* - 420F_{10}^* F_2^{*2} + 1260F_6^* F_4^* F_2^{*2} - \\
 &\quad - 56F_6^{*2} F_2^* - 70F_6^* F_4^{*2} + 2520(F_8^* - F_6^* F_2^*) F_2^{*3}],
 \end{aligned}$$

$$p_{83} = (p_{80})^{-1}[-F_{16}^* + 70F_{12}^*F_4^* + 28(F_{14}^*F_2^* + F_{10}^*F_6^*) - \\ - 840F_{10}^*F_4^*F_2^* + F_8^{*2} - 56F_8^*F_6^*F_2^* - 70F_8^*F_4^{*2} - \\ - 420F_{12}^*F_2^{*2} + 1260F_8^*F_4^*F_2^{*2} + 2520(F_{10}^*F_2^{*3} - F_8^*F_2^{*4})].$$

Для  $P_{ml}$  (подібно до  $p_{ml}$ ) у (6.2.12) задані формули при  $m = 2, 4, 6$  і всіх значень  $l$ . Причому, при  $m = 8$  маємо

$$P_{80} = -F_8^{**} + 28F_6^{**}F_2^{**} + 35F_4^{**2} - 420F_4^{**}F_2^{**2} + 630F_2^{**4}, \\ P_{8l} = (P_{80})^{-1}[-F_8^{**}f_8^{(l)} + 28F_6^{**}F_2^{**}(f_6^{(l)} + f_2^{(l)}) + 70F_4^{**2}f_4^{(l)} - \\ - 420F_4^{**}F_2^{**2}(f_4^{(l)} + 2f_2^{(l)}) + 2520F_4^{**2}f_2^{(l)}].$$

Тут  $F_{2l}^{**} = F_{2l}(\eta^*, \xi^*, \gamma^*)$ , а

$$f_{2m}^{(l)} = \eta^*\eta_l(F_{2m}^{**} - F_{2m+2}^{**}/F_{2m}^{**}) + \xi^*\xi_l(F_6^{**} - F_{2m+6}^{**}/F_{2m}^{**}) + \\ + \gamma^*\gamma_l(F_8^{**} - F_{2m+8}^{**}/F_{2m}^{**}),$$

де

$$\eta^* = s^{3/2}p_{20}(6/p_{40})^{1/2}, \quad \eta_l = p_{2l} - \frac{1}{2}p_{4l}, \\ \xi^* = s^{-3/2}\sqrt{6}p_{60}(15p_{40}^{3/2})^{-1}, \quad \xi_l = p_{6l} - \frac{3}{2}p_{4l}, \\ \gamma^* = s^{-3}p_{80}(70p_{40}^2)^{-1}, \quad \gamma_l = p_{8l} - 2p_{4l}.$$

Значення коефіцієнтів  $\mu_l$ ,  $\omega_l$ ,  $\delta_l$  і  $\lambda_l$  подані в табл. 6.6.

Виконаємо лінеаризацію РС (6.4.3) в околі фіксованої точки (6.4.2)

$$\begin{pmatrix} r_{n+1} - r^* \\ u_{n+1} - u^* \\ w_{n+1} - w^* \\ v_{n+1} - v^* \end{pmatrix} = \mathcal{R} \begin{pmatrix} r_n - r^* \\ u_n - u^* \\ w_n - w^* \\ v_n - v^* \end{pmatrix} \quad (6.4.6)$$

та обчислимо власні значення матриці переходу  $\mathcal{R}$ .

Табл. 6.6. Значення коефіцієнтів РС (6.4.3) для моделі  $\rho^8$ 

$s$	$\mu_0$	$\mu_1$	$\mu_2$	$\mu_3$	$\tilde{\mu}_0$
2.0000	0.8123	-0.2548	-0.2048	-0.2114	0.5920
2.2500	0.7427	-0.2448	-0.2333	-0.2601	0.5986
2.5000	0.6865	-0.2357	-0.2568	-0.3042	0.6014
2.6511	0.6571	-0.2304	-0.2690	-0.3284	0.6018
2.7349	0.6420	-0.2276	-0.2751	-0.3411	0.6018
3.0000	0.5994	-0.2190	-0.2922	-0.3784	0.6004
3.5862	0.5261	-0.2024	-0.3215	-0.4489	0.5931
4.0000	0.4866	-0.1925	-0.3375	-0.4917	0.5861
5.0000	0.4167	-0.1728	-0.3665	-0.5792	0.5670

$s$	$\omega_0$	$\omega_1$	$\omega_2$	$\omega_3$	$\tilde{\omega}_0$
2.0000	0.5000	-0.1752	-0.3270	-0.4120	0.2805
2.2500	0.4444	-0.1663	-0.3485	-0.4701	0.2916
2.5000	0.4000	-0.1592	-0.3614	-0.5131	0.2976
2.6511	0.3772	-0.1554	-0.3659	-0.5329	0.2998
2.7349	0.3656	-0.1534	-0.3677	-0.5422	0.3007
3.0000	0.3333	-0.1475	-0.3710	-0.5662	0.3024
3.5862	0.2788	-0.1359	-0.3713	-0.6007	0.3015
4.0000	0.2500	-0.1285	-0.3691	-0.6171	0.2984
5.0000	0.2000	-0.1132	-0.3611	-0.6430	0.2871

$s$	$\delta_0$	$\delta_1$	$\delta_2$	$\delta_3$	$\tilde{\delta}_0$
2.0000	1.6182	-0.4744	-1.8058	-2.4890	0.6841
2.2500	1.3485	-0.4237	-1.7878	-2.6490	0.6965
2.5000	1.1545	-0.3966	-1.7431	-2.7230	0.6958
2.6511	1.0636	-0.3865	-1.7112	-2.7408	0.6952
2.7349	1.0196	-0.3820	-1.6931	-2.7451	0.6952
3.0000	0.9030	-0.3706	-1.6373	-2.7424	0.6960
3.5862	0.7228	-0.3500	-1.5297	-2.7003	0.6982
4.0000	0.6331	-0.3357	-1.4662	-2.6626	0.6964
5.0000	0.4834	-0.3007	-1.3393	-2.5665	0.6788

Продовження табл. 6.6

$s$	$\lambda_0$	$\lambda_1$	$\lambda_2$	$\lambda_3$	$\tilde{\lambda}_0$
2.0000	9.8464	-0.1061	-16.9583	-25.7480	3.4912
2.2500	6.9975	0.2538	-14.4892	-24.1277	2.8191
2.5000	5.4071	0.1398	-12.7028	-22.5336	2.3321
2.6511	4.8191	-0.0174	-11.9600	-21.7830	2.1761
2.7349	4.5702	-0.1136	-11.6361	-21.4415	2.1278
3.0000	4.0102	-0.4156	-10.9115	-20.6559	2.1041
3.5862	3.3253	-0.9214	-10.1307	-19.8275	2.3715
4.0000	2.9981	-1.1326	- 9.7977	-19.4918	2.5977
5.0000	2.3827	-1.3320	- 9.0582	-18.6429	2.9523

Табл. 6.7. Власні значення матриці  $\mathcal{R}$  із (6.4.6) (модель  $\rho^8$ )

$s$	$E_1$	$E_2$	$E_3$	$E_4$
2.0000	2.9349	0.5489	0.0123	0.00001
2.2500	3.5177	0.5345	0.0136	0.00002
2.5000	4.1390	0.5114	0.0135	0.00002
2.6511	4.5283	0.4964	0.0129	0.00002
2.7349	4.7480	0.4882	0.0125	0.00002
3.0000	5.4599	0.4640	0.0111	0.00002
3.5862	7.1188	0.4201	0.0081	0.00001
4.0000	8.3559	0.3957	0.0065	0.00001
5.0000	11.5438	0.3509	0.0041	0.00001

Як показують розрахунки [354], одне із її власних значень завжди більше, а три інші – менші від одиниці (див. табл. 6.7). Отже, фіксована точка  $(r^*, u^*, w^*, v^*)$  має тип “сідла” і, відповідно, описує критичну поведінку моделі.

Аналогічні розрахунки можуть бути проведені і для складніших моделей. Так, у праці [357] розраховано критичний показник моделі  $\rho^{10}$ . Було показано, що рекурентні співвідношення для цієї моделі записуються у вигляді

$$u_m^{(n+1)} = s^{m - \frac{m-2}{2}d} \left[ -q\delta_{m-2} + (u_4^{(n)})^{m/4} Y_m(h^{(n)}) \right], \quad (6.4.7)$$

де  $m = 2, 4, 6, 8, 10$ ,  $q = \beta \tilde{\Phi}(0) b^2 B'^2 (1 + s^{-2})$ ,

$$\begin{aligned} d_n(B_{n+1}, B_n) &= s^{-2n} (u_2^{(n)} + q), \quad u_2^{(n)} = s^{2d} d_n(0), \\ u_j^{(n)} &= s^{j \cdot n} a_j^{(n)}, \quad j = 4, 6, 8, 10. \end{aligned} \quad (6.4.8)$$

Функції  $Y_m(h^{(n)})$  виражаються через  $C_m(t)$ , де величина  $t$  може стосуватися як набору основних аргументів  $h^{(n)} = \{h_2^{(n)}, h_4^{(n)}, \dots, h_{10}^{(n)}\}$ , де

$$\begin{aligned} h_2^{(n)} &= d_n(B_{n+1}, B_n) \left( \frac{6}{a_4^{(n)}} \right)^{1/2}, \quad h_4^{(n)} = 1, \\ h_6^{(n)} &= \frac{\sqrt{6}}{15} a_6^{(n)} (a_4^{(n)})^{-3/2}, \quad h_8^{(n)} = \frac{a_8^{(n)}}{70} (a_4^{(n)})^{-2}, \\ h_{10}^{(n)} &= \frac{\sqrt{6}}{3150} a_{10}^{(n)} (a_4^{(n)})^{-5/2}, \end{aligned} \quad (6.4.9)$$

так і набору проміжних аргументів  $\eta^{(n)} = \{\eta_2^{(n)}, \eta_4^{(n)}, \dots, \eta_{10}^{(n)}\}$  з компонентами

$$\begin{aligned} \eta_2^{(n)} &= (6s^d)^{1/2} C_2(h^{(n)}) [C_4(h^{(n)})]^{-1/2}, \quad \eta_4^{(n)} = 1, \\ \eta_6^{(n)} &= \frac{\sqrt{6}}{15} s^{-d/2} C_6(h^{(n)}) [C_4(h^{(n)})]^{-3/2}, \\ \eta_8^{(n)} &= \frac{1}{70} s^{-d} C_8(h^{(n)}) [C_4(h^{(n)})]^{-2}, \\ \eta_{10}^{(n)} &= \frac{\sqrt{6}}{3150} s^{-3d/2} C_{10}(h^{(n)}) [C_4(h^{(n)})]^{-5/2}. \end{aligned} \quad (6.4.10)$$



Спеціальні функції  $C_{2l}$  мають вигляд:

$$\begin{aligned} C_2 &= F_2, & C_4 &= -F_4 + 3F_2^2, \\ C_6 &= F_6 - 15F_4F_2 + 30F_2^3, \\ C_8 &= -F_8 + 28F_6F_2 + 35F_4^2 - 420F_4F_2^2 + 630F_2^4, \\ C_{10} &= F_{10} - 45F_8F_2 - 210F_6F_4 + 1260F_6F_2^2 + \\ &+ 3150F_4^2F_2 - 18900F_4F_2^3 + 22680F_2^5, \end{aligned} \quad (6.4.11)$$

де

$$\begin{aligned} F_{2l}(t) &= \int_0^\infty x^{2l} \exp \left[ - \sum_{l=1}^5 t_{2l} x^{2l} \right] dx \times \\ &\times \left[ \int_0^\infty \exp \left( - \sum_{l=1}^5 t_{2l} x^{2l} \right) dx \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (6.4.12)$$

Функції  $F_{2l}(t)$  задовільняють таким рекурентним співвідношенням

$$\begin{aligned} 10t_{10}F_{2l+10}(t) &= (2l+1)F_{2l}(t) - 2t_2F_{2l+2}(t) - 4t_4F_{2l+4}(t) - \\ &- 6t_6F_{2l+6}(t) - 8t_8F_{2l+8}(t), \end{aligned} \quad (6.4.13)$$

які з врахуванням рівності  $F_0(t) = 1$  дають змогу виразити всі функції  $F_{2l}(t)$  з (6.4.12) через чотири незалежні, наприклад  $F_2(t)$ ,  $F_4(t)$ ,  $F_6(t)$  та  $F_8(t)$ .

Поведінка моделі  $\rho^{10}$  несуттєво відрізняється від критичної поведінки моделі  $\rho^8$ . Графік залежності  $\nu(s)$  для досліджуваних моделей  $\rho^{10}$ ,  $\rho^8$  та для моделей  $\rho^6$  і  $\rho^4$  зображений на рис. 6.1. З нього видно, що характер поведінки функції  $\nu(s)$  для моделі  $\rho^8$  якісно співпадає з результатами розрахунків для моделей  $\rho^6$  і  $\rho^4$ . Для великих значень  $s$  криві  $\nu(s)$  для моделей  $\rho^8$  і  $\rho^6$  майже співпадають. У границі  $s \rightarrow 1$  маємо суттєву різницю, яка обумовлена використанням тієї чи іншої густини міри. Криві для критичного показника  $\nu$  моделей  $\rho^{10}$  та  $\rho^8$  майже співпадають при  $s > 2$ . Крива  $\nu(s)$  для моделі  $\rho^8$  йде вище порівняно з відповідною кривою для моделі  $\rho^6$  і значно вище від кривої для

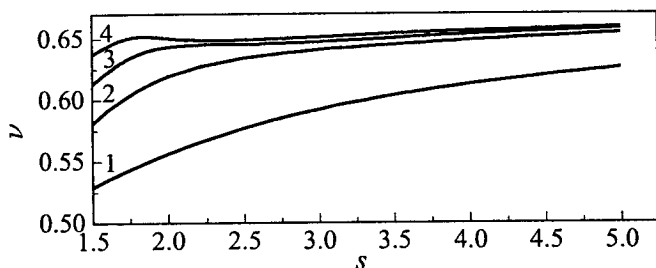


Рис. 6.1. Залежність критичного показника кореляційної довжини  $\nu$  від параметра ренормгрупи  $s$  для різних типів моделей. Крива 1 відповідає моделі  $\rho^4$ , 2 –  $\rho^6$ , 3 –  $\rho^8$ , 4 –  $\rho^{10}$

Табл. 6.8. Критичні показники кореляційної довжини моделей  $\rho^8$ ,  $\rho^6$  і  $\rho^4$  без врахування поправки на усереднення потенціалу

$s$	$\nu(\rho^8)$	$\nu(\rho^6)$	$\nu(\rho^4)$
2.0000	0.644	–	–
2.2500	0.645	–	–
2.5000	0.645	0.634	–
2.6511	0.646	0.636	–
2.7349	0.646	0.637	–
3.0000	0.647	0.640	0.592
3.5862	0.651	0.645	0.605
4.0000	0.653	0.648	0.612
5.0000	0.658	0.654	0.626

моделі  $\rho^4$ . Характерною особливістю моделі  $\rho^8$  є суттєве послаблення залежності критичного показника  $\nu$  від параметра  $s$  (див. табл. 6.8).

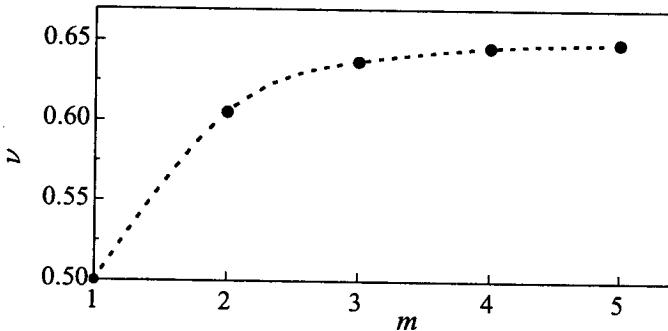


Рис. 6.2. Насичення критичного показника кореляційної довжини  $\nu$  з ускладненням порядку моделі  $m$

З проведених розрахунків видно, що при використанні моделі  $\rho^8$  в інтервалі значень  $2 < s < 4$  отримуємо постійні (з точністю до 1%) значення критичного показника кореляційної довжини.

Підкреслимо, що для кожної із моделей  $\rho^{2m}$ , які розглядалися вище, можна виділити особливе значення параметра  $s^*$ , при якому величина  $h^*$  (або  $x^*$  для моделі  $\rho^4$ ) перетворюється в нуль. При такому  $s^*$  виконується рівність  $f_0 = \bar{q}$ , де  $f_0$  задане в (2.4.8), (6.2.18) і визначає одну із координат фіксованої точки, а  $\bar{q}$  – середнє значення  $k^2$  на інтервалі  $(s^{-1}, 1]$ . З'ясовується, що з ростом  $m$  ( $m$  – порядок моделі  $\rho^{2m}$ )  $s^*$  зменшується. При цьому маємо такі особливі значення параметра ренормгрупи  $s^*$  для моделей  $\rho^{2m}$ :

$$\begin{aligned}
 \rho^4 & \quad s^* = 3.5862, \\
 \rho^6 & \quad s_1^* = 2.7349, \\
 \rho^8 & \quad s_2^* = 2.6511, \\
 \rho^{10} & \quad s_3^* = 2.6108.
 \end{aligned}
 \tag{6.4.14}$$

На рис. 6.2 зображена залежність  $\nu$  від ускладнення порядку моделі для  $s = s^*$ . Чітко видно тенденцію до насичення величини  $\nu$  із збільшенням  $m$ , де  $m$  характеризує порядок моделі  $\rho^{2m}$ .

Залежність критичного показника кореляційної довжини від параметра  $s$  є наслідком наближень у процесі розрахунків. Збільшення точності обчислень приводить до зникнення залежності  $\nu$  від  $s$  [358, 359]. Подібна ситуація спостерігається при використанні методу РГ у реальному просторі [360, 361], у варіаційних методах [362–364]. При цьому встановлено [363], що в області  $s_1^d < 3.1627$  друга похідна вільної енергії стає від'ємною, що призводить до нестабільності системи. Це накладає обмеження на значення параметра РГ знизу  $s > s_1$ . Ще однією обставиною, яка впливає на точність обчислень у методі КЗ, є усереднення потенціалу [16]. Інтервал усереднення  $k \in (B_{n+1}, B_n]$  визначається параметром  $s$ , і чим більше  $s$ , тим більша поправка, пов'язана з усередненням  $\tilde{\Phi}(k)$  (див. розділ 5). Отримуємо обмеження зверху на значення параметра  $s$ . Отже, при обчисленні критичних показників найзручнішими є проміжні значення параметра  $s$ .



## Розділ 7

# Результати числового інтегрування статистичної суми

У цьому розділі приведені результати прямого числового розрахунку основних характеристик тривимірної ізінгоподібної моделі поблизу точки фазового переходу. Основною метою проведених обчислень є встановлення загальних закономірностей поведінки тривимірних систем у критичній області. При розрахунках використовується негаусовий розподіл флуктуацій. Розроблена оригінальна методика розрахунку температури фазового переходу  $T_c$ , здійснені оцінки величини критичної області. Особлива увага приділяється дослідженню еволюції коефіцієнтів у блочних гамільтоніанах, що виникають при поетапному інтегруванні виразу для статистичної суми. Шляхом його прямого обчислення встановлена наявність поблизу ТФП двох основних режимів зміни цих коефіцієнтів. Перший із них – критичний режим. Він існує як вище, так і нижче від температури фазового переходу і характеризується строго синхронною зміною коефіцієнтів при другому, четвертому і вищих степенях колективної змінної в показнику експоненти ефективного розподілу флуктуацій при переході від однієї блочної структури до іншої. При температурі фазового переходу КР спостерігається для всіх номерів блочних структур. У випадку  $T \neq T_c$  ділянка КР обмежена. Вона зменшується з віддаленням температури від  $T_c$  й існує для певного числа  $m_T$  блочних структур (див. розділ 2). При  $n > m_T$  КР переходить у т. зв. граничний гаусовий режим. Останній відповідає змінним

$\rho_k$  з малими значеннями хвильових векторів і характеризується зростанням основної змінної  $x_n$  із (2.3.14) зі збільшенням  $n$ . Для температур нижчих від критичної із зростанням  $n$  ділянка КР замінюється ділянкою інверсного гаусового режиму. Особливість ІГР полягає у тому, що поряд з ростом абсолютної величини аргумента  $x_n$ , коефіцієнт при другому степені змінної  $\rho_k$  змінює свій знак з додатного на від'ємний. Проведений числовий розрахунок залежності номера блочної структури  $m_\tau$  від температури  $\tau$ . Визначена величина корелюючих блоків для температур, близьких до температури фазового переходу. Знайдено критичний показник кореляційної довжини.

Використовуючи отримані при числових обчисленнях закономірності зміни коефіцієнтів ефективних блочних структур, досліджені властивості матриці лінеаризованого перетворення ренормалізаційної групи. Проведені поблизу ТФП прямі числові обчислення виявили три характерні області зміни її власних значень  $E_1, E_2$ . У першій області, що відповідає короткохвильовим флуктуаціям, існує фіксована точка типу сідла, причому більше власне значення  $E_1 = s^{1/\nu}$ , де  $\nu$  – критичний показник кореляційної довжини. Друга (перехідна) область, що відповідає виходу системи із критичного режиму, характеризується суттєвою зміною власних значень. Встановлено, що величина перехідної області не залежить від температури. Вона визначається декількома номерами ефективних блочних структур. Нарешті, у третій області, що відповідає довгохвильовим флуктуаціям, реалізується фіксована точка типу нестійкого вузла, причому більше власне значення дорівнює  $s^2$ . Порівняно результати числового розрахунку коефіцієнтів ефективних блочних структур з даними, отриманими із аналітичних формул (2.6.20). Встановлено, що входу системи в КР відповідає менше, а виходу з неї – більші власне значення матриці ренормгрупового перетворення. Крім моделі  $\rho^4$ , числові розрахунки статистичної суми системи виконані також для моделі  $\rho^6$ .

## 7.1. Область критичної точки

Метод КЗ дає змогу здійснити прямий числовий розрахунок статистичної суми системи за методикою, що описана в § 2.2. Це стає можливим завдяки послідовному переходу від спінових до колективних змінних [16, 242], що дає змогу знайти початкові значення коефіцієнтів  $a_{2n}$  якобіану переходу (1.4.17) для досліджуваної системи. Їх розрахунок можна вести для різних наближень функції

$$f_{2m}(\omega) = \exp \left( \sum_{n=1}^m D_{2n}(\omega) \right). \quad (7.1.1)$$

Найпростішим наближенням є гаусове, для якого  $f_{2m}$  має вигляд:

$$f_2(\omega) = \exp \left( -2\pi^2 \mathcal{M}_2 \omega^2 \right).$$

Такий розподіл, проте, не дає змоги дослідити істинну поведінку термодинамічних функцій поблизу ТФП. Як було показано в розділі 1, критична поведінка тривимірної ізінгоподібної системи в області, що містить ТФП може бути описана четвірним розподілом флуктуацій. Він дає змогу якісно описати поведінку системи і характеризується розподілом

$$f_4(\omega) = \exp \left( -2\pi^2 \mathcal{M}_2 \omega^2 - \frac{(2\pi)^4}{4!} \mathcal{M}'_4 \omega^4 \right). \quad (7.1.2)$$

Використання вищих ніж  $f_4(\omega)$  наближень для функції  $f_{2m}(\omega)$  приводить лише до кількісних змін характеристик системи поблизу критичної точки і не впливає на загальний характер обчислень (див. розділ 6).

Обчислюємо вираз для статистичної суми

$$Z = C e^{a_0 N} \int (d\rho)^N \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in B} d(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \sum_{n \geq 2} N^{1-n} \frac{a_{2n}}{(2n!)} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n} \\ \mathbf{k}_i \in B}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}} \right], \quad (7.1.3)$$



де  $C = 2^N \sqrt{2}^{N-1}$ , а для фур'є-образу потенціалу використовується параболічна апроксимація  $\tilde{\Phi}(k) = \tilde{\Phi}(0)(1 - 2b^2 k^2)$ . Значення коефіцієнтів  $a_{2n}$  відомі. Вони залежать від форми функції  $f_{2m}$  із (7.1.1) і наведені в (1.4.29) та табл. 1.1. Числові значення  $a_{2n}$  важливі для визначення температури фазового переходу  $T_c$ , амплітуд термодинамічних і кореляційних функцій. Щодо критичних показників, то вихідні значення  $a_{2n}$  на них не впливають. Для їх розрахунку достатньо знати закономірності зміни коефіцієнтів  $d(k)$ ,  $a_{2n}$  при утворенні блочних структур.

Розглянемо результати числового інтегрування статистичної суми у наближенні моделі  $\rho^4$  (див. розділ 2). Параметр  $s$ , який характеризує послідовність ефективних блочних структур, вибератимемо із умови:

$$s = \frac{B_n}{B_{n+1}} = 2. \quad (7.1.4)$$

Відповідно до (7.1.4), далі всі таблиці та рисунки подані для  $s = 2$ . Як середнє значення фур'є-образу потенціалу на інтервалі  $(B_{n+1}, B_n]$  використовуватимемо середнє геометричне значення (див. (2.6.1), (2.6.2)). Кінцевою метою є інтегрування виразу для статистичної суми за всіма змінними  $\rho_k$  з  $k \neq 0$  і отримання функції розподілу типу  $\mathcal{W}(\rho_0) = \exp[E_4(\rho_0)]$ , де

$$E_4(\rho_0) = -\frac{1}{2}\tilde{d}(0)\rho_0^2 - \frac{\tilde{a}_4}{4!N}\rho_0^4, \quad (7.1.5)$$

а  $\tilde{d}(0)$  і  $\tilde{a}_4$  – залежні від температури коефіцієнти, перенормовані внаслідок врахування внесків від змінних  $\rho_k$  з  $k \neq 0$ . З умови екстремуму

$$\frac{\partial E_4(\rho_0)}{\partial \rho_0} = 0 \quad (7.1.6)$$

знаходимо

$$\rho_0 = \pm \left[ -\frac{6N\tilde{d}(0)}{\tilde{a}_4} \right]^{1/2}. \quad (7.1.7)$$

Виникнення відмінного від нуля середнього моменту може бути зумовлене тільки із зміною знаку коефіцієнта  $\tilde{d}(0)$  з додатного на від'ємний, оскільки коефіцієнт  $\tilde{a}_4$  завжди додатний. Ця обставина використана при визначенні температури фазового переходу  $T_c$ . Як  $T_c$  вибиралась температура, для якої справедливі співвідношення:

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} d_n(B_{n+1}, B_n) &= 0, \\ \lim_{n \rightarrow \infty} d_n(B_n) &\geq 0, \\ \lim_{n \rightarrow \infty} d_n(B_{n+1}) &\leq 0. \end{aligned} \quad (7.1.8)$$

Пошук критичної температури проводився в інтервалі

$$T_H < T_c < T_B, \quad (7.1.9)$$

де  $T_H = \tilde{\Phi}(0)/2a_2$  – температура, нижче від якої середнє значення коефіцієнта  $d(k)$  на інтервалі  $[0, B]$  завжди від'ємне,  $T_B = \tilde{\Phi}(0)/a_2$  температура, для якої всі значення  $d(k)$  на інтервалі  $[0, B]$  завжди додатні. Якщо у процесі обчислення статистичної суми величина  $d_n(0)$  при деякому значенні  $n = n_0$  стає додатною, то це є свідченням того, що вибрана температура  $T$  вища від  $T_c$ . Справді, оскільки завжди  $a_2^{(n+1)} \geq a_2^{(n)}$ , то  $d_{n+1}(k) \geq d_n(k)$  і, відповідно, величина  $d_{n_0+m}(0)$  буде додатною для всіх  $m$ . Критерієм того, що  $T < T_c$  є від'ємність  $d_{n_0}(B_{n_0+1}, B_{n_0})$ . Табл. 7.1 відображає пошук температури фазового переходу і зміну відповідних величин. У результаті проведених розрахунків одержуємо

$$\beta_c \Phi(0) = 0.832288294. \quad (7.1.10)$$

Приймаючи до уваги, що температура фазового переходу у гаусовому наближенні дорівнює  $T_c^{(r)} = \tilde{\Phi}(0)/a_2$ , при  $s = 2$  отримуємо

$$\Theta = \frac{T_c}{T_c^{(r)}} = 0.7748858. \quad (7.1.11)$$

Табл. 7.1. Пошук температури фазового переходу  $T_c$  при поетапному числовому інтегруванні статистичної суми моделі  $\rho^4$ . Тут  $n = n_0$  – номер блочної структури, після якого крива  $d_n(k, T)$  піднімається над віссю абсцис (у випадку  $T > T_c$ ), або коли середнє значення  $d_n(B_{n+1}, B_n; T)$  стає від'ємним (при  $T < T_c$ )

$\beta\bar{\Phi}(0)$	$n_0$	$d_{n_0}(0)$	$d_{n_0}(B_{n_0+1}, B_{n_0})$	Ознака
0.7000000	1	$+0.783816 \times 10^{-1}$	$+0.194632 \times 10^0$	$T > T_c$
0.7500000	1	$+0.313333 \times 10^{-1}$	$+0.155887 \times 10^0$	$T > T_c$
0.8000000	2	$+0.150987 \times 10^{-1}$	$+0.483130 \times 10^{-1}$	$T > T_c$
0.8500000	3	$-0.144160 \times 10^{-1}$	$-0.539348 \times 10^{-2}$	$T < T_c$
0.8250000	3	$+0.233609 \times 10^{-2}$	$+0.108992 \times 10^{-1}$	$T > T_c$
0.8375000	4	$-0.363781 \times 10^{-2}$	$-0.146458 \times 10^{-2}$	$T < T_c$
0.8312500	5	$+0.385682 \times 10^{-3}$	$+0.924976 \times 10^{-3}$	$T > T_c$
0.8343750	5	$-0.115886 \times 10^{-2}$	$-0.617551 \times 10^{-3}$	$T < T_c$
0.8328125	6	$-0.261723 \times 10^{-3}$	$-0.126646 \times 10^{-3}$	$T < T_c$
0.8320313	6	$+0.765355 \times 10^{-4}$	$+0.211533 \times 10^{-3}$	$T > T_c$
0.8324219	7	$-0.596714 \times 10^{-4}$	$-0.258852 \times 10^{-4}$	$T < T_c$
0.8322266	9	$+0.211615 \times 10^{-4}$	$+0.233181 \times 10^{-4}$	$T > T_c$
0.8323242	8	$-0.140774 \times 10^{-4}$	$-0.562888 \times 10^{-5}$	$T < T_c$
0.8322754	8	$+0.191968 \times 10^{-5}$	$+0.104154 \times 10^{-4}$	$T > T_c$
0.8322998	9	$-0.374528 \times 10^{-5}$	$-0.160043 \times 10^{-5}$	$T < T_c$
0.8322876	10	$+0.119762 \times 10^{-6}$	$+0.694710 \times 10^{-6}$	$T > T_c$
0.8322937	10	$-0.128735 \times 10^{-5}$	$-0.748158 \times 10^{-6}$	$T < T_c$
0.8322882	11	$+0.383419 \times 10^{-7}$	$+0.205921 \times 10^{-6}$	$T > T_c$
0.8322889	13	$-0.287173 \times 10^{-7}$	$-0.855788 \times 10^{-8}$	$T < T_c$

Подібно обчислено значення  $T_c$  для інших параметрів  $s$ . На рис. 7.1 зображена залежність відношення  $T_c/T_c^{(r)}$  від параметра  $s$ . Із нього випливає, що залежність  $T_c$  від вибору того, чи іншого способу обчислення мало впливає на значення  $T_c$ , причому при  $s > 2$  ця залежність майже зникає.

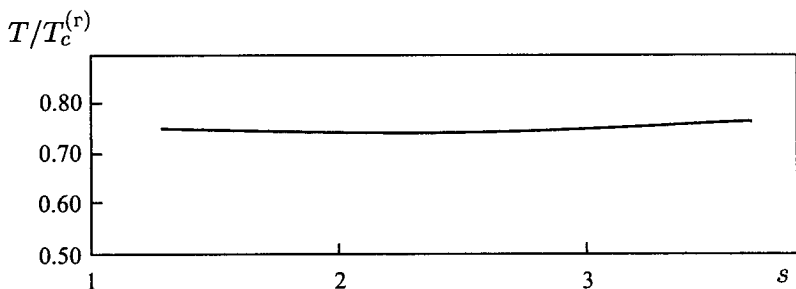


Рис. 7.1. Відношення температури фазового переходу, отриманої при числовому розрахунку (модель  $\rho^4$ ) до критичної температури в гаусовому наближенні  $T_c^{(r)} = \tilde{\Phi}(0)/a_2$  як функція параметра ренормгрупи  $s$

Критичній температурі відповідає унікальна залежність коефіцієнтів  $d_n(B_{n+1}, B_n)$ ,  $a_4^{(n)}$ ,  $P_2^{(n)}$  і  $P_4^{(n)}$ , а також основної  $x_n$  і проміжної змінної  $y_n$  від  $n$  – номера блочної структури (рис. 7.2). З'ясовується, що коефіцієнти  $d_n(B_{n+1}, B_n)$ ,  $a_4^{(n)}$  лінійно спадають з ростом  $n$ , і криві для їх логарифмів мають постійний від'ємний нахил

$$\ln d_n(B_{n+1}, B_n; T_c) = \ln c_1 - A_1 n, \quad (7.1.12)$$

де (при  $s = 2$ )  $c_1 = 0.3655$ ,  $A_1 = 1.3863$ ,

$$\ln a_4^{(n)}(T_c) = \ln c_2 - A_2 n, \quad (7.1.13)$$

де  $c_2 = 0.1826$ ,  $A_2 = 2.7726$ . Це приводить до залежностей

$$d_n(B_{n+1}, B_n; T_c) = c_1 e^{-A_1 n}, \quad a_4^{(n)}(T_c) = c_2 e^{-A_2 n}, \quad (7.1.14)$$

які виконуються для всіх значень  $n$ . Зазначимо, що справедливе співвідношення

$$A_2 = 2A_1. \quad (7.1.15)$$

Воно відображає суттєву властивість системи при  $T = T_c$ , названу нами в [316, 319] критичним режимом. Із (7.1.15) випливає, що

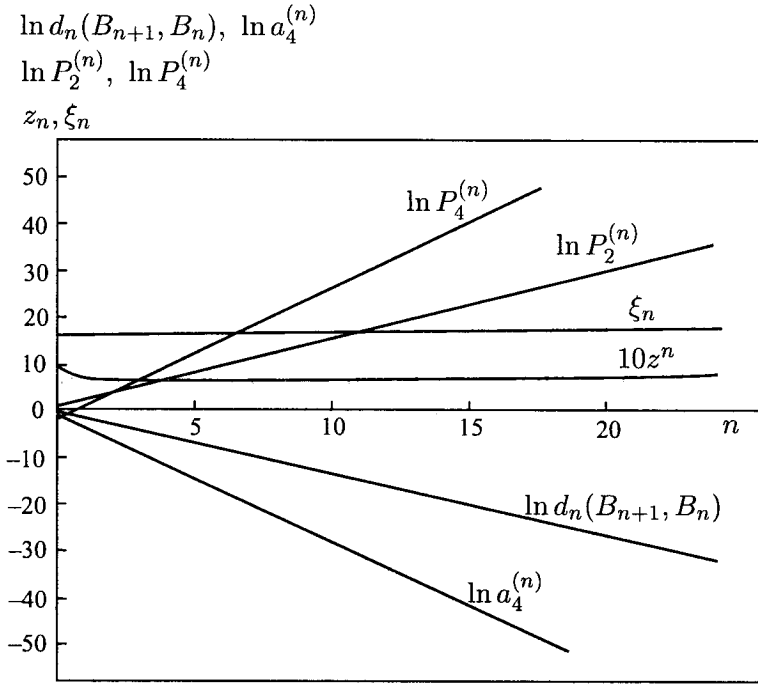


Рис. 7.2. Характер еволюції коефіцієнтів блочних гамільтоніанів (модель  $\rho^4$ ) при поетапному обчисленні статистичної суми у випадку  $T = T_c$ . Лінійна залежність логарифмів приведених величин від номера блочної структури  $n$  названа критичним режимом. Тут  $z_n = x_n^2/4$ ,  $\xi_n = 0.75(P_2^{(n)})^2/P_4^{(n)}$

при  $T = T_c$  основна змінна  $x_n$  з ростом  $n$  залишається постійною величиною<sup>1</sup>

$$z^* = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x_n^2(T_c)}{4} = \frac{3c_1^2}{4c_2}. \quad (7.1.16)$$

Характер еволюції змінної  $z^{(n)}$  такий, що  $z^{(0)}(T_c) = 0.5488$  при  $n = 0$  і після декількох кроків інтегрування досягає постійного

<sup>1</sup>Ця обставина була використана нами при проведенні аналітичних розрахунків (розділ 2).

значення

$$z^* = 0.6054, \quad (7.1.17)$$

яке при  $T = T_c$  не змінюється з ростом номера  $n$  (рис. 7.2). Результат (7.1.17) узгоджується із значенням основної змінної  $x^*$  у фіксованій точці, що отриманий у розділі 2.

Розподіл у просторі полів ( $\omega_k$  простір) характеризується коефіцієнтами  $P_2^{(n)}$ ,  $P_4^{(n)}$ , поведінка яких при  $T = T_c$  описується подібними рівняннями

$$\begin{aligned} \ln P_2^{(n)} &= \ln f_1 + A_1 n, \\ \ln P_4^{(n)} &= \ln f_2 + A_2 n, \end{aligned} \quad (7.1.18)$$

де  $f_1$ ,  $f_2$  – постійні величини, які для  $s = 2$  дорівнюють:  $f_1 = 1.9275$ ,  $f_2 = 0.1795$ . При цьому проміжний аргумент також залишається постійним

$$\xi^* = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{3}{4} \frac{[P_2^{(n)}(T_c)]^2}{P_4^{(n)}(T_c)} = \frac{3f_1^2}{4f_2}. \quad (7.1.19)$$

Для  $s = 2$  маємо, що  $\xi^* = 16.0921$ .

Подібна поведінка коефіцієнтів спостерігається і для інших значень параметра  $s$  [320]. При цьому величини  $A_1$  і  $A_2$  в області КР досить добре апроксимуються функціями

$$A_1 = 2 \ln s, \quad A_2 = 4 \ln s. \quad (7.1.20)$$

У випадку температур відмінних від  $T_c$  траєкторія коефіцієнтів  $d_n(B_{n+1}, B_n)$ ,  $a_4^{(n)}$  зображена на рис. 7.3. При  $T = T_c$  вона закінчується в початку координат. При  $T > T_c$  траєкторії відхиляються від критичної вгору, а для  $T < T_c$  – вниз. На рис. 7.4 зображені результати числового розрахунку величини  $z^*$  для чотвірного базисного розподілу залежно від параметра  $s$ . Ця залежність є важливою характеристикою при дослідженні критичної поведінки моделі в границі  $s \rightarrow 1$ . Тут РС (2.3.18) можуть бути представлені у вигляді розкладів за зворотніми степенями  $z_n$

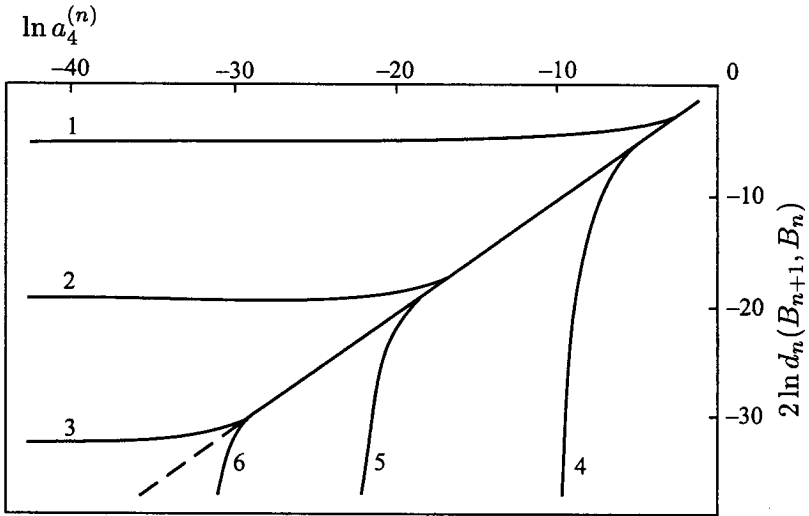


Рис. 7.3. Поведінка коефіцієнтів моделі  $\rho^4$  поблизу  $T_c$ . Криві 1, 2, 3 відповідають температурам  $T_1 > T_2 > T_3 > T_c$ , криві 4, 5, 6 – температурам  $T_4 < T_5 < T_6 < T_c$ . При  $T > T_c$  коефіцієнт  $d_n(B_{n+1}, B_n)$  стає незалежним від номера  $n$ , зменшується із наближенням температури до  $T_c$ . Для  $T < T_c$  коефіцієнт  $d_n(B_{n+1}, B_n)$  змінює знак з додатного на від'ємний при фіксованому значенні  $a_4^{(n)}$

(див., наприклад, [322,323]), оскільки  $z^*$  різко зростає при прямуванні  $s$  до одиниці. В області проміжних значень  $s$  ( $1.5 < s < 4.5$ ) величина  $z^*$  не перевищує одиниці.

Розглянемо поведінку коефіцієнтів  $d_n(B_{n+1}, B_n)$  та  $a_4^{(n)}$  при температурах, відмінних від критичної. У випадку  $T_1 > T_c$  коефіцієнт  $d_n(B_{n+1}, B_n)$  завжди додатний. З ростом  $n$  він спочатку спадає від свого вихідного значення і виходить на постійну величину в області КР. Тривалість перебування його в КР залежить від значення величини  $\tau = (T - T_c)/T_c$  і тим більша, чим менше  $\tau$ . При  $n > m_\tau$  криві для  $\ln d_n(B_{n+1}, B_n)$  виходять із області КР на горизонтальну ділянку, де величина  $d_n(B_{n+1}, B_n)$  стає постійною і не залежить від  $n$ . Крива для  $\ln a_4^{(n)}$  поводи-

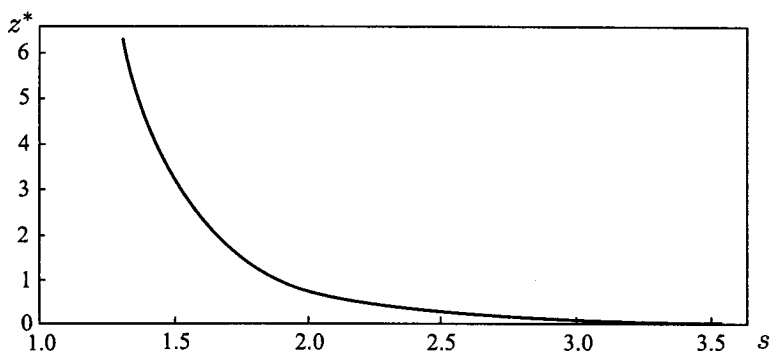


Рис. 7.4. Залежність основної змінної  $z^*$  (див. (7.1.16)) від параметра ренормгрупи  $s$  при  $T = T_c$

ться аналогічно, однак після виходу із КР продовжує спадати, хоча повільніше, ніж у КР [321]. Така поведінка коефіцієнтів  $d_n(B_{n+1}, B_n; T_1)$  та  $a_4^{(n)}(T_1)$  визначає поведінку основної змінної  $z_n$  (рис. 7.5). При  $n < m_\tau$  крива  $z_n(T_1)$  як функція  $n$  майже співпадає із кривою  $z_n(T_c)$ , однак при  $n > m_\tau$  величина  $z_n(T_1)$  починає різко зростати. Характер поведінки  $P_2^{(n)}(T_1)$  і  $P_4^{(n)}(T_1)$  аналогічний до  $d_n(B_{n+1}, B_n; T_1)$  і  $a_4^{(n)}(T_1)$ . При  $n < m_\tau$  вони знаходяться у КР, а при  $n > m_\tau$  відбувається вихід із КР, причому  $P_2^{(n)}(T_1)$  стає незалежним від  $n$ , а  $P_4^{(n)}(T_1)$  зменшується з ростом номера  $n$  [321, 365]. Це приводить до збільшення проміжної змінної  $\xi_n = y_n^2/4$  при  $n > m_\tau$ . Отже, після виходу із КР система описується гаусовим розподілом флуктуацій.

У випадку  $T < T_c$  виникає відмінний від нуля середній спіновий момент, який накладає відбиток на поведінку згаданих вище величин. Характерним у цьому відношенні є величина  $d_n(B_{n+1}, B_n)$ . Після виходу із КР відбувається зміна її знаку з додатного на від'ємний. Суттєво, що при цьому коефіцієнт  $a_4^{(n)}$  залишається додатним, хоча його спадання з ростом  $n$  прискорюється порівняно із випадком  $T = T_c$ . При цьому основна змінна  $z_n$  зменшується (крива 3 на рис. 7.5). Розподіл залишається негаусовим. Зазначимо, що у процесі інтегрування статистичної су-



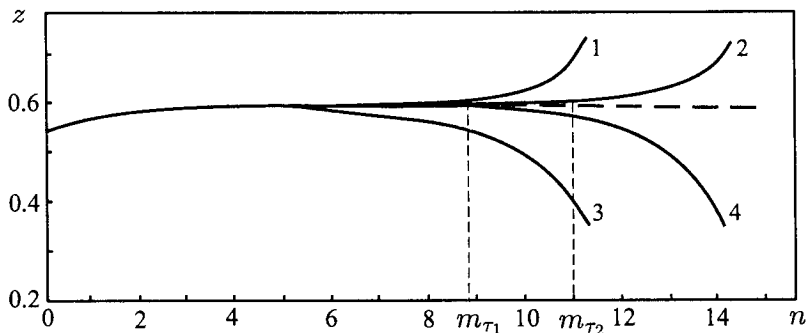


Рис. 7.5. Вихід із КР (модель  $\rho^4$ ) основної змінної  $z_n$ . Криві 1,2 відповідають температурам  $T_1 = 0.7748987T_c^{(r)}$ ,  $T_2 = 0.7748865T_c^{(r)}$  ( $T_1 > T_2 > T_c$ ), криві 3,4 – температурам  $T_3 = 0.7748846T_c^{(r)}$ ,  $T_4 = 0.7748852T_c^{(r)}$  ( $T_3 < T_4 < T_c$ ), відповідно. Величини  $m_{\tau_1}$ ,  $m_{\tau_2}$  характеризують точку виходу системи із КР при температурах  $T_1$  і  $T_2$ , відповідно.

ми коефіцієнт  $d_n(B_{n+1}, B_n)$  без будь-яких зовнішніх припущень змінює свій знак з додатного на від'ємний. Це узгоджується із припущенням теорії Ландау, в якій зміна знаку коефіцієнта при квадратичному доданку постулюється. Однак якщо в теорії Ландау припускається, що  $d_n(0) = C_1(T - T_c)$  і тим самим зміна знаку закладається в теорію штучно, то в запропонованому нами підході зміна знаку величини  $d_n(0)$  відбувається природно.

## 7.2. Дослідження інтегральних рекурентних співвідношень і порівняння з результатами аналітичних обчислень

Результати числових розрахунків, що наведені у попередньому параграфі свідчать про наявність у системі при  $T \rightarrow T_c$  ділянки КР. Коефіцієнти  $d_n$ ,  $a_4^{(n)}$  при цьому змінюються з ростом  $n$

відповідно до співвідношень:

$$\begin{aligned} d_n(B_{n+1}, B_n; T_c) &= c_1 s^{-2n}, \\ a_4^{(n)} T_c &= c_2 s^{-4n}. \end{aligned} \quad (7.2.1)$$

Виконаємо при інтегруванні статистичної суми заміну змінних

$$\rho'_k = \rho_k s^{-1}, \quad (7.2.2)$$

У результаті такої заміни величини  $d_n(B_{n+1}, B_n; T_c)$  і  $a_4^{(n)}(T_c)$  не залежатимуть від  $n$ . Зауважимо, що масштабні перетворення (7.2.2) не впливають на поведінку основної  $z_n$  і проміжної  $\xi_n$  змінних [365]. На рис. 7.6 зображені криві залежності величин  $r_n + q$  та  $u_n$  від  $n$  при виконанні масштабних перетворень (7.2.2). Із нього видно, що вхід у КР однаковий для всіх  $\tau$  ( $\tau < 10^{-3}$ ), а вихід із нього характеризується числом  $m_\tau$ . Вихід із КР сильно залежить від  $\tau$  і здійснюється тим пізніше, чим менше  $\tau$ . Подібна картина спостерігається і для коефіцієнтів  $P_2^{(n)}$ ,  $P_4^{(n)}$ ,  $\xi_n$  [316, 365].

При детальнішому розгляді встановлено, що область співпадіння кривих для різних значень  $\tau \neq 0$  на вході та в самому критичному режимі замінюється областю неперервної залежності від  $\tau$  як від параметра [316]. Наприклад, основна змінна  $z_n$  при  $T > T_c$  входить у КР не за кривою  $z_n(T_c)$ , а дещо вище від неї. При температурах  $T < T_c$  маємо відхилення  $z_n(T)$  у протилежний бік. Показано, що завжди існує область температур  $T_2 < T < T_1$ , у якій для кожної температури  $T$  є такий інтервал  $(0, m_\tau)$ , що для всіх  $n < m_\tau$  величини  $d_n(B_{n+1}, B_n)$ ,  $a_4^{(n)}$ ,  $z_n$ ,  $P_2^{(n)}$ ,  $P_4^{(n)}$ ,  $\xi_n$  є неперервними функціями від  $\tau$ . Це означає, що для кожного  $\epsilon > 0$  знайдеться таке  $\delta > 0$ , що для  $\tau + \epsilon$  виконуватимуться співвідношення:

$$\begin{aligned} |d_n(B_{n+1}, B_n; \tau) - d_n(B_{n+1}, B_n; \tau + \epsilon)| &< \delta, \\ |a_4^{(n)}(\tau) - a_4^{(n)}(\tau + \epsilon)| &< \delta, \\ |P_2^{(n)}(\tau) - P_2^{(n)}(\tau + \epsilon)| &< \delta, \\ |P_4^{(n)}(\tau) - P_4^{(n)}(\tau + \epsilon)| &< \delta. \end{aligned} \quad (7.2.3)$$

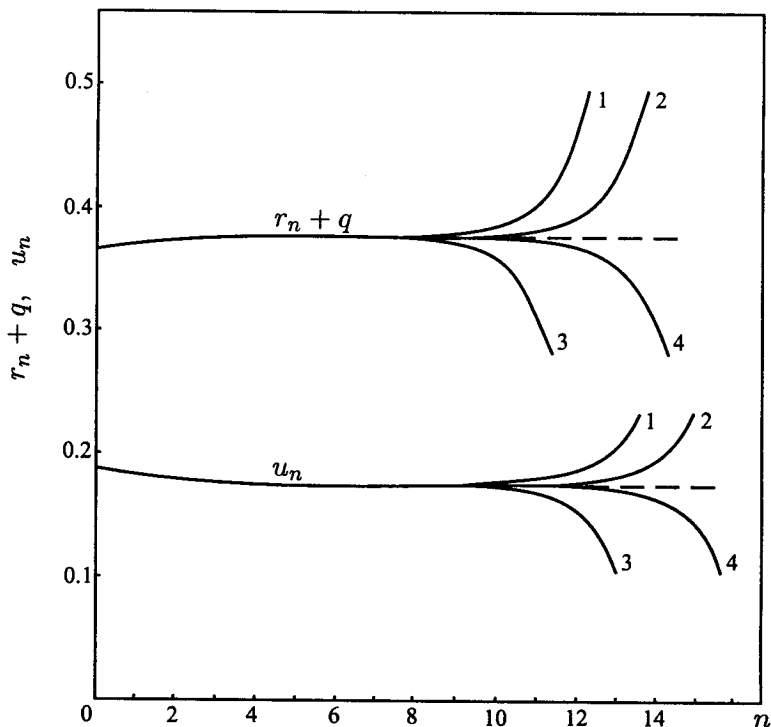


Рис. 7.6. Відхилення від критичного режиму коефіцієнтів  $r_n + q = s^{2n} d_n(B_{n+1}, B_n)$  та  $u_n = s^{4n} a_4^{(n)}$  у рамках моделі  $\rho^4$ . Позначення ті ж, що й на рис. 7.5

В області неперервної залежності виконуються умови на стійкість системи РС (2.3.18) за лінійним наближенням, і, крім цього, задання для них початкових умов при деякому  $n_0 < m_\tau/2$  еквівалентне заданню вихідних умов при  $n = n_0 = 0$ .

Замінімо РС (2.3.18) або (2.4.4) їх лінійним наближенням (2.6.13). При  $s = 2$  для  $r^*$  і  $u^*$  маємо:  $r^* = -0.1719$  і  $u^* = 0.1730$ . Оскільки нам відомі коефіцієнти  $r_n$  і  $u_n$  для кожного  $n$ , а також координати фіксованої точки, то можна обчислити елементи матриці перетворення (2.6.16). Однак при виконанні числових об-

числень зручно використовувати співвідношення, які не містять  $r^*$  і  $u^*$ , оскільки їх важко визначити з великою точністю. Введемо величини

$$g_n = r_n - r_{n-1}, \quad a_n = u_n - u_{n-1}. \quad (7.2.4)$$

У результаті, замість (2.6.13) матимемо перетворення:

$$\begin{pmatrix} g_{n+1} \\ a_{n+1} \end{pmatrix} = \mathcal{R}_n \begin{pmatrix} g_n \\ a_n \end{pmatrix}. \quad (7.2.5)$$

Елементи  $R_{ij}^{(n)}$  матриці перетворення (7.2.5) визначаються співвідношеннями:

$$\begin{aligned} R_{11}^{(n)} &= D_n(g_{n+1}a_{n-1} - g_n a_n), \\ R_{12}^{(n)} &= D_n(g_n g_n - g_{n-1}g_{n+1}), \\ R_{21}^{(n)} &= D_n(a_{n+1}a_{n-1} - a_n a_n), \\ R_{22}^{(n)} &= D_n(a_n g_n - g_{n-1}a_{n+1}), \end{aligned} \quad (7.2.6)$$

де  $D_n^{-1} = g_n a_{n-1} - g_{n-1} a_n$ . У КР елементи  $R_{ij}^{(n)}$  не залежать від  $n$  і є постійними величинами. Наприклад, для  $s = 2$  знаходимо:

$$\begin{aligned} R_{11} &= 3.2713, & R_{12} &= 2.3424, \\ R_{21} &= 0.2436, & R_{22} &= 0.7427. \end{aligned} \quad (7.2.7)$$

Власні значення матриці перетворення (7.2.5) дорівнюють:  $E_1 = 3.480$ ,  $E_2 = 0.504$ .

У випадку  $T \neq T_c$  величини  $E_{1,2}^{(n)}$  стають функціями номера блочної структури  $n$  (див. рис. 7.7). При цьому можна виділити три ділянки для величин  $E_{1,2}^{(n)}$  як функцій номера  $n$ . Перша з них відповідає критичному режиму. Тут при  $s = 2$   $E_1^I = 3.480$ ,  $E_2^I = 0.504$ . Фіксована точка рекурентних співвідношень (7.2.5) має тип сідла. При цьому вхід у КР зв'язаний з меншим власним значенням  $E_2$ , вихід із КР – з більшим власним значенням  $E_1$ . У другій ділянці значень  $E_1^{II}$ ,  $E_2^{II}$  (при  $n \geq m_\tau$ ) відбувається

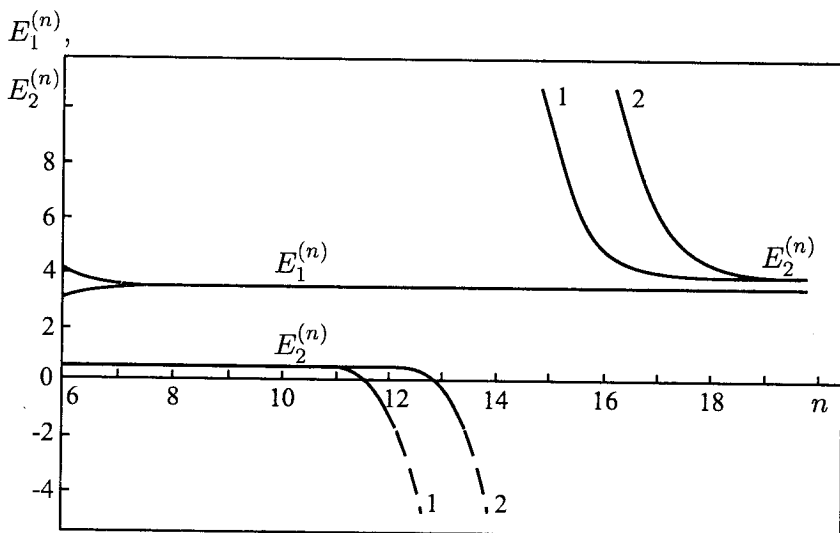


Рис. 7.7. Власні значення  $E_1^{(n)}$ ,  $E_2^{(n)}$  матриці перетворення (7.2.5) при  $T > T_c$  як функції номера блочної структури  $n$ . Розрив кривих для  $E_2^{(n)}$  відповідає області переходу системи з критичного в граничний гаусовий режим. Величина перехідної області не залежить від температури. (Позначення див. рис. 7.5)

швидкий вихід системи із КР. Третя ділянка характеризується новими власними значеннями

$$E_1^{III} = 3.480, \quad E_2^{III} = 4.000. \quad (7.2.8)$$

Реалізується фіксована точка типу нестійкого вузла.

Рівняння (2.6.20) дають змогу описати еволюцію величин  $r_n$  і  $u_n$  з ростом  $n$ . Встановлено, що за малих значень  $\tau$ , криві для  $r_n$  і  $u_n$  (як функції  $n$ ) мають горизонтальну ділянку. Остання пов'язана з умовою  $E_2^I < 1$ . Із зростанням номера  $n$  пропорційний до  $E_2^I$  доданок стає малим і  $r \rightarrow r^*$ ,  $u_n \rightarrow u^*$ . Для кожного  $\tau \neq 0$  завжди знайдеться таке  $m_\tau$ , що переважатиме доданок пропорційний до  $c_1 E_1^{m_\tau}$  і горизонтальна ділянка зникне. Порівнюючи форму рівнянь (2.6.20) з результатами числового розрахунку, приходимо до таких висновків:

- вхід у критичний режим описується меншим власним значенням  $E_2$  матриці лінійного перетворення РГ. Величина входу системи в КР визначається нерівністю

$$|r^*| \gg c_{2\tau} [\beta \tilde{\Phi}(0)]^2 E_2^{m'} R. \quad (7.2.9)$$

Оскільки ділянка КР виникає за малих значень  $\tau$ , із (7.2.9) випливає, що ділянка входу у КР  $(0, m')$  майже не залежить від температури  $T$ ;

- вихід із КР зв'язаний з більшим власним значенням  $E_1$  і визначається із рівності

$$|r^*| \approx c_{1\tau} |\tau| \beta \tilde{\Phi}(0) E_1^{m_\tau}, \quad (7.2.10)$$

де  $m_\tau$  – номер шару блочної структури, після якого відбувається вихід з КР. Із (7.2.10) знаходимо

$$m_\tau = -\frac{\ln |\tau|}{\ln E_1} + m_0, \quad (7.2.11)$$

де  $m_0 = \ln(|r^*|/c_{1\tau} \beta \tilde{\Phi}(0)) / \ln E_1$ . У випадку, коли  $\tau = 0$ ,  $m_\tau \rightarrow 0$  і КР існує для всіх  $n > m'$ ;

- наявність КР визначається величиною  $\tau^*$ . Умовою виникнення ділянки КР є рівність

$$|\tau^*| c_{1\tau} \beta^* \tilde{\Phi}(0) E_1^{m_{\tau^*}} = |r^*|, \quad (7.2.12)$$

яка визначає температуру  $\tau^*$ . Для всіх  $\tau < \tau^*$  у системі існуватиме ділянка КР.

Приведені вище висновки підтверджуються даними числових розрахунків. У табл. 7.2, 7.3 подано порівняння результатів обчислення функцій

$$r_n = f_1(n), \quad u_n = f_2(n)$$

за формулами (2.6.20) з даними числових розрахунків відповідних величин [316, 317] при  $\tau = 1.5 \times 10^{-9}$  і  $s = 2$ .

Табл. 7.2. Порівняння результатів числового обчислення коефіцієнта  $r_n^{(\text{числ.})}$  і значень  $r_n$ , отриманих згідно із (2.6.20)

$n$	$c_1 E_1^n$	$c_2 R E_2^n$	$r_n$	$r_n^{(\text{числ.})}$
0	$1.16 \times 10^{-9}$	-0.0082	0.365	0.365
1		-0.0044	0.369	0.369
2		-0.0023	0.371	0.371
3		-0.0012	0.372	0.372
4		-0.0007	0.373	0.373
5		-0.0004	0.373	0.373
6		-0.0002	0.374	0.374
7		-0.0001	0.374	0.374
8		0.0000	0.374	0.374
9	0.0000		0.374	0.374
10	0.0003		0.374	0.374
11	0.0010		0.375	0.375
12	0.0035		0.377	0.378
13	0.0121		0.386	0.389
14	0.0421		0.416	0.426
15	0.1460		0.520	0.556
16	0.5062		0.880	1.025
17	1.755		2.129	2.785
18	6.086		6.459	9.694
19	21.101		21.474	37.230
20	73.162		73.536	147.322

Значення величин  $r_n$  і  $u_n$ , отримані згідно із (2.6.20) і в результаті числових розрахунків [365], суттєво відрізняються між собою для великих  $n$  – після виходу системи із КР. Це пояснюється тим, що для  $n > m_\tau$  у системі реалізується інший тип фіксованої точки ( $E_1 > 1$ ,  $E_2 = s^2$ ) і розв'язок (2.6.20) тут незастосовний.

Табл. 7.3. Порівняння результатів числового обчислення коефіцієнта  $u_n^{(\text{числ.})}$  і значень  $u_n$ , отриманих згідно із (2.6.20)

$n$	$c_1 R_1 E_1^n$	$c_2 E_2^n$	$u_n$	$u_n^{(\text{числ.})}$
0	$9.918 \times 10^{-11}$	0.0095	0.183	0.183
1		0.0051	0.178	0.178
2		0.0014	0.176	0.176
3		0.0008	0.175	0.175
4		0.0004	0.174	0.174
5		0.0002	0.173	0.173
6		0.0001	0.173	0.173
7		0.0000	0.173	0.173
8			0.173	0.173
9			0.173	0.173
10			0.173	0.173
11	0.0000		0.173	0.173
12	0.0003		0.173	0.173
13	0.0010		0.174	0.174
14	0.0036		0.177	0.177
15	0.0125		0.186	0.189
16	0.0433		0.216	0.227
17	0.1500		0.323	0.344
18	0.5200		0.693	0.638
19	1.840		2.013	1.259
20	6.255		6.428	2.513



### 7.3. Числовий розрахунок критичного показника кореляційної довжини моделі $\rho^4$

Як показано вище, характерною рисою термодинамічної системи в області температури ФП є наявність області критичного режиму в поведінці коефіцієнтів  $d_n, a_4^{(n)}$  як функцій номера ефективної блочної структури  $n$ . Характер входу і виходу системи із КР добре пояснюється використанням явних розв'язків рівнянь РГ. Величина області КР  $(0, m_\tau)$  є важливою характеристикою для опису поведінки термодинамічних систем поблизу ТФП. Для кожної температури  $\tau \neq 0$  система виходить із області КР при деякому фіксованому значенні хвильового вектора  $B_{m_\tau}$  і швидко переходить у область ГР. Вираз для статистичної суми в точці виходу із КР має вигляд

$$Z = Z_{m_\tau} \int (d\rho)^{N_{m_\tau+1}} \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{m_\tau+1}} d_{m_\tau+1}(k) \rho_k \rho_{-k} - \frac{1}{4!} N_{m_\tau+1}^{-1} a_4^{(m_\tau+1)} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \leq B_{m_\tau+1}}} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} \right], \quad (7.3.1)$$

де  $N_{m_\tau+1} = N s^{-3(m_\tau+1)}$ , а  $Z_{m_\tau}$  відповідає результату інтегрування за всіма КЗ  $\rho_k$  з  $k \geq B_{m_\tau}$ . Між спіновими блоками з розмірами меншими від  $B_{m_\tau}^{-3}$  існує сильна кореляція. При дальшому інтегруванні статистичної суми (7.3.1) виникають ефективні спінові блоки все більших розмірів, однак кореляція між ними різко послаблюється. Величина  $B_{m_\tau}^{-3}$  відповідає максимальному за даної температури розміру блока в системі спінових блоків, між якими існує кореляція. Тому величина  $B_{m_\tau}^{-1}$  співмірна з кореляційною довжиною системи  $\xi$ . Температурну залежність величини  $B_{m_\tau}$  можна отримати із даних числового розрахунку статистичної суми [316, 319].

Розглянемо механізм входу і виходу системи із КР на прикладі зміни основної змінної  $z_n$  залежно від температури. Для  $T > T_c$  маємо сукупність кривих, зображених на рис. 7.8. Температури

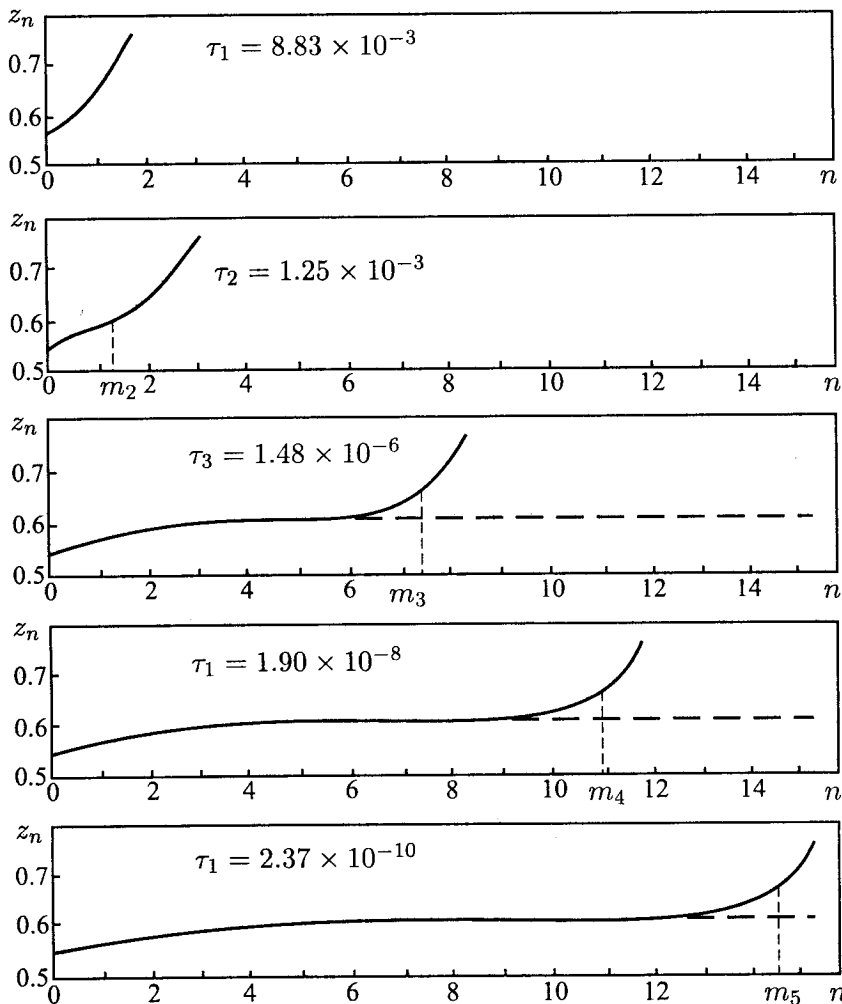


Рис. 7.8. Величина області критичного режиму для  $T > T_c$  (модель  $\rho^4$ ). При температурах  $\tau \geq \tau_1$  ділянка критичного режиму відсутня. Для  $\tau = \tau_2$  на кривій  $z_n$  як функції  $n$  з'являється точка перегину. При дальшому зниженні температури  $0 < \tau_5 < \tau_4 < \tau_3$  для низки значень  $n$  виникає ділянка КР

$\tau_1$  відповідає відсутність ділянки КР. Для цієї температури значення  $z_n$  стрімко зростають з ростом  $n$ , тому статистична сума може бути розрахована на основі гаусового базисного розподілу. При  $\tau = \tau_2$  на кривій  $z_n$ , як функції  $n$ , з'являється точка перегину. Температурам  $\tau_3, \tau_4, \dots$  відповідають криві з ділянкою КР. При обчисленні статистичної суми при таких температурах слід використовувати негаусовий розподіл флуктуацій.

Зробимо оцінку швидкості відходу кривих  $z_n(\tau)$  від їхнього критичного значення  $z^*$  залежно від величини  $\tau$ . Нехай  $B_{m_\tau}$  – значення хвильового вектора, при якому починається вихід системи із КР. Величина  $B_{m_\tau}$  зв'язана з  $m_\tau$  співвідношенням

$$B_{m_\tau} = B s^{-m_\tau}. \quad (7.3.2)$$

Введемо параметр

$$\Delta_n(\tau) = |z_n(\tau) - z_n(0)|, \quad (7.3.3)$$

що визначає величину відходу траєкторії  $z_n(\tau)$  від критичної. Апроксимуємо температурну залежність  $B_{m_\tau}$  виразом

$$B_{m_\tau} = B_0 |\tau|^\nu, \quad (7.3.4)$$

де  $B_0$  – постійна величина, а  $\nu$  характеризує швидкість виходу системи із КР. Тоді отримуємо вираз:

$$\nu = \frac{\ln B_{m_\tau} - \ln B_0}{\ln |\tau|}, \quad (7.3.5)$$

з якого знаходимо  $\nu$ , оскільки відома температурна залежність величин, що входять у праву частину (7.3.5). Сталу  $B_0$  визначимо, скориставшись тим, що при великих значеннях  $\tau$  ( $\tau > 1.245 \times 10^{-3}$ ) справедливе гаусове наближення і залежність  $B_{m_\tau}$  від  $\tau$  має “класичний” характер, тобто  $\nu = 0.500$ . Тоді зафіксувавши температуру  $T_B$ , для якої криві  $z_n(T_B)$  не входять у КР, маємо

$$B_{m_\tau}(T_B) = B_0 \tau_B^{1/2}, \quad (7.3.6)$$

звідки знаходимо

$$B_0 = B_{m_\tau}(T_B) \tau_B^{-1/2}. \quad (7.3.7)$$

У табл. 7.4 наведені числові значення величини  $B_0$  для різних можливих  $\tau_B$  залежно від  $\Delta$ . Для кожного  $B_0$  (табл. 7.4) відповідно

Табл. 7.4. Значення масштабного множника  $B_0$  у випадку  $T > T_c$  при числовому розрахунку критичного показника кореляційної довжини моделі  $\rho^4$

$-\ln \tau$	$\tau_B, 10^{-2}$	$B_0$	$B_0$	$B_0$	$B_0$
		$\Delta = 0.4$	$\Delta = 1.4$	$\Delta = 19.4$	$\Delta = 49.4$
3.00	4.9787	0.7868	0.4216	0.1160	0.0569
3.50	3.0197	0.7926	0.4913	0.1363	0.0593
3.75	2.3518	0.8151	0.5123	0.1254	0.0640
4.00	1.8316	0.7930	0.4781	0.1136	0.0632

до (7.3.5) проводилось обчислення  $\nu(T)$ . Еволюція ефективного критичного показника  $\nu$  зі зміною  $\tau$  зображена на рис. 7.9. При цьому з'ясується, що при  $T > T_c$  незалежно від вибору  $\tau_B$  і величини  $\Delta$  у границі  $\tau \rightarrow 0$  отримуємо одне й те ж значення ( $s = 2$ )

$$\nu^{(+)} = \lim_{T \rightarrow T_c} \nu(T) = 0.550 \pm 0.005. \quad (7.3.8)$$

Аналогічні обчислення проводились і для  $T < T_c$ . Для визначення величини  $B_0$  у (7.3.4) вибирались температури  $T_H$ , для яких ділянка КР на кривих  $z_n(T_H)$  відсутня. Отримані значення подані в табл. 7.5. Для кожного значення  $\Delta$  проводилось обчислення величини  $\nu(T)$  за відповідних початкових умов. У процесі обчислень з'ясувалось, що у границі  $\tau \rightarrow 0$  значення  $\nu^{(-)}$  не залежить від вибору  $\Delta$  і  $\tau_H$  і при  $s = 2$  дорівнює (див. рис. 7.10)

$$\nu^{(-)} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \nu^{(-)}(\tau) = 0.550 \pm 0.005. \quad (7.3.9)$$

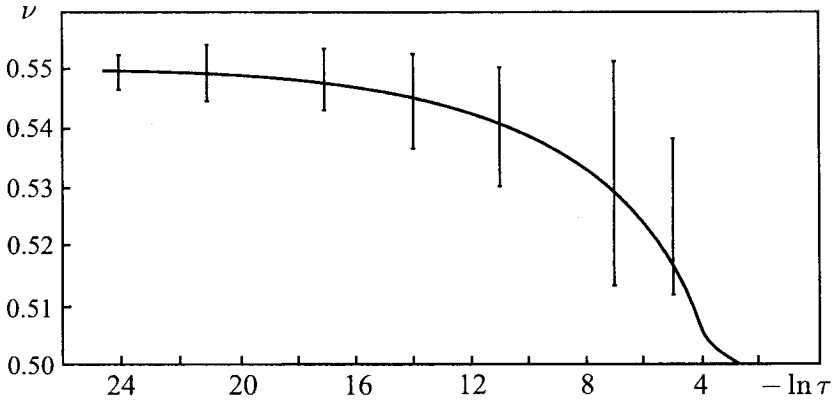


Рис. 7.9. Результат прямого числового розрахунку критичного показника кореляційної довжини  $\nu$  (формула (7.3.5)) при  $T > T_c$  (модель  $\rho^4$ ,  $s = 2$ ). З наближенням температури до  $T_c$  значення  $\nu$  змінюється від класичного  $\nu = 0.500$  до  $\nu = 0.550 \pm 0.005$

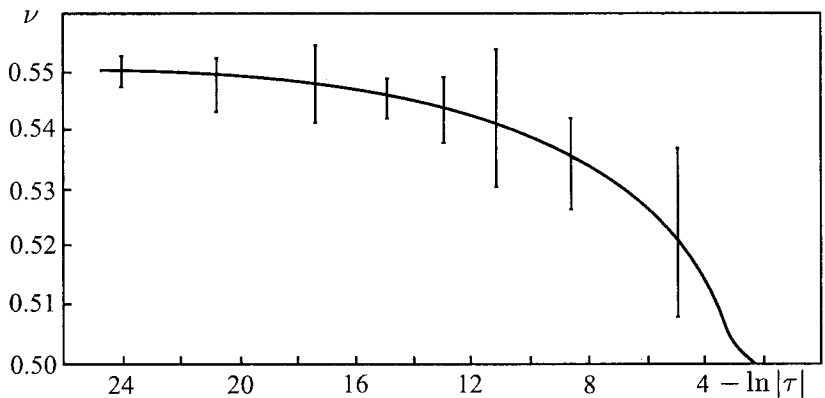


Рис. 7.10. Ефективний критичний показник кореляційної довжини  $\nu$  при  $T < T_c$  (модель  $\rho^4$ ,  $s = 2$ )

Табл. 7.5. Значення масштабного множника  $B_0$  у випадку  $T < T_c$  при числовому розрахунку критичного показника кореляційної довжини моделі  $\rho^4$

	$B_0$	$B_0$	$B_0$	$B_0$
$ \tau_H $	$\Delta = 0.1$	$\Delta = 0.4$	$\Delta = 0.5$	$\Delta = 0.605$
$8.2085 \times 10^{-2}$	—	0.7388	0.6300	0.5484
$4.9787 \times 10^{-2}$	1.5562	0.7298	0.5947	0.4903
$3.0197 \times 10^{-2}$	1.5853	0.7144	0.5924	0.4947
$1.8316 \times 10^{-2}$	1.8803	0.7002	0.6044	0.5338

Подібні обчислення були проведені й для інших значень параметра  $s$ . Були отримані значення критичного показника  $\nu$ , що співпадають у межах точності розрахунку з даними праць [314, 328, 329].

## 7.4. Результати числового розрахунку для моделі $\rho^6$

При дослідженні критичної поведінки моделі Ізінґа використання четвірного базисного розподілу є необхідною умовою. Природно, що виникає питання про врахування вищих степенів змінної  $\rho_k$  у показнику функції розподілу і дослідження їхнього впливу на загальну поведінку системи в околі  $T_c$ . Числовий аналіз тривимірної ізінґоподібної системи на основі шестирного базисного розподілу проведений у праці [366]. Розглянемо статистичну суму, де для якобіану переходу  $J(\rho)$  використано шестирне наближення:

$$Z = C r^{-a_0 N} \int \mathcal{W}_6(\rho)(d\rho)^N. \quad (7.4.1)$$

Тут

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_6(\rho) = \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} d(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \sum_{n=2}^3 N^{1-n} \times \right. \\ \left. \times \frac{a_{2n}}{(2n)!} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n} \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}} \right]. \end{aligned} \quad (7.4.2)$$

Розрахунки, як і у випадку моделі  $\rho^4$ , проводитимемо при  $s = 2$  і параболічній апроксимації фур'є-образу потенціалу для всього інтервалу значень хвильового вектора  $\mathbf{k}$  ( $k \leq B = (b\sqrt{2})^{-1}$ ). Коefіцієнти  $a_{2m}$  у випадку  $b = b_{min}$  дорівнюють:  $a_2 = 0.5585988$ ,  $a_4 = 0.1844991$ ,  $a_6 = 0.3629097$ . Статистична сума обчислюється за методикою, описаною в розділі 2. У результаті інтегрування за множиною змінних  $\rho_{\mathbf{k}}$  нульового рівня приходимо до виразу:

$$Z = 2^N Q_0 [Q(P)]^{N_1} 2^{(N_1-1)/2} \int \mathcal{W}_6^{(1)}(\rho) (d\rho)^{N_1}, \quad (7.4.3)$$

де

$$N_1 = Ns^{-3}, \quad Q_0 = [Q(\mathcal{M})Q(d)]^N, \quad (7.4.4)$$

причому

$$\begin{aligned} Q(d) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(\eta) d\eta, \\ f(\eta) &= \exp \left[ -\frac{1}{2} d(B_1, B) \eta^2 - \frac{a_4}{4!} \eta^4 - \frac{a_6}{6!} \eta^6 \right], \end{aligned} \quad (7.4.5)$$

а

$$\begin{aligned} Q(P) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{P}(\mu) d\mu, \\ \mathcal{P}(\mu) &= \exp \left[ -\frac{1}{2} P_2 \mu^2 - \frac{1}{4!} P_4 \mu^4 - \frac{1}{6!} P_6 \mu^6 \right]. \end{aligned} \quad (7.4.6)$$

Для розрахунку коефіцієнтів  $P_{2m}$  використовуємо вирази:

$$\begin{aligned} P_2 &= Q_2(d), & P_4 &= s^{-3} [-Q_4(d) + 3Q_2^2(d)], \\ P_6 &= s^{-6} [Q_6(d) - 15Q_4(d)Q_2(d) + 30Q_2^3(d)], \end{aligned} \quad (7.4.7)$$

де моменти  $Q_{2m}(d)$  обчислюють за формулою

$$Q_{2m}(d) = [Q_0(d)]^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \eta^{2m} f(\eta) d\eta. \quad (7.4.8)$$

Ефективний базисний розподіл  $\mathcal{W}_6^{(1)}(\rho)$  у (7.4.3) має вигляд

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_6^{(1)}(\rho) &= \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{k \in B_1} d_1(k) \rho_k \rho_{-k} - \sum_{n=2}^3 N_1^{1-n} \times \right. \\ &\quad \left. \times \frac{a_{2n}^{(1)}}{(2n)!} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_{2n} \\ k_i \in B_1}} \rho_{k_1} \cdots \rho_{k_{2n}} \delta_{k_1 + \dots + k_{2n}} \right]. \end{aligned} \quad (7.4.9)$$

Коефіцієнти  $a_{2m}^{(1)}$  визначаються співвідношеннями:

$$\begin{aligned} a_2^{(1)} &= \beta \tilde{\Phi}(B_1, B) + Q_2(P), & a_4^{(1)} &= -Q_4(P) + 30Q_2^2(P), \\ a_6^{(1)} &= Q_6(P) - 15Q_4(P)Q_2(P) + 30Q_2^3(P). \end{aligned} \quad (7.4.10)$$

Тут

$$Q_{2m}(P) = [Q(P)]^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \mu^{2m} \mathcal{P}(\mu) d\mu. \quad (7.4.11)$$

Подібно виконується інтегрування у наступних множинах КЗ. Приведені вище формули (7.4.3)–(7.4.11) дають змогу здійснити числове інтегрування статистичної суми. Згідно з визначенням (7.1.8), для моделі  $\rho^6$  обчислена температура фазового переходу. При  $s = 2$  отримано [366]

$$\beta_c \tilde{\Phi}(0) = 0.86983820419. \quad (7.4.12)$$



Відношення знайденого  $T_c$  до значення температури ФП у гаусовому наближенні дорівнює

$$\Theta = \frac{T_c}{T_c^{(r)}} = 0.6421871,$$

що свідчить про пониження  $T_c$  при переході від четвірної до шестирної густини міри (див. (7.1.11)). При  $T = T_c$  для коефіцієнтів  $a_{2m}^{(n)}$ ,  $P_{2m}^{(n)}$  виникає КР. Якщо їх представити у вигляді

$$A_{n+1}(T) = A_n(T)s^{\alpha_A^{(n)}}, \quad (7.4.13)$$

то показник  $\alpha_A^{(n)}$  при  $T = T_c$  стає незалежним від індекса  $n$  і приймає значення:

$$\begin{aligned} \alpha_{a_2} &= 0.000, & \alpha_d &= -2.000, & \alpha_{a_4} &= -4.000, & \alpha_{a_6} &= -6.000, \\ \alpha_{P_2} &= 2.000, & \alpha_{P_4} &= 4.000, & \alpha_{P_6} &= 6.000. \end{aligned} \quad (7.4.14)$$

У випадку використання шестирної густини міри замість основної змінної  $x_n$  (або  $z_n$ ) виникає два аргументи:

$$h_n = \sqrt{6} \frac{d_n(B_{n+1}, B_n)}{(a_4^{(n)})^{1/2}}, \quad \alpha_n = \frac{\sqrt{6}}{15} \frac{a_6^{(n)}}{(a_4^{(n)})^{3/2}}. \quad (7.4.15)$$

При  $T = T_c$  вони приймають постійні значення ( $s = 2$ ):

$$\begin{aligned} h^* &= 0.8298, & \alpha_h &= 0.000, \\ \alpha^* &= 0.2854, & \alpha_\alpha &= 0.000. \end{aligned} \quad (7.4.16)$$

Для проміжних змінних

$$\eta_m = \sqrt{6} \frac{P_2^{(n)}}{(P_4^{(n)})^{1/2}}, \quad \xi_n = \frac{\sqrt{6}}{15} \frac{P_6^{(n)}}{(P_4^{(n)})^{3/2}} \quad (7.4.17)$$

при температурі фазового переходу маємо:

$$\eta^* = 8.4000, \quad \xi^* = 0.2793. \quad (7.4.18)$$

Співвідношення (7.4.14) для коефіцієнтів  $a_{2m}^{(n)}$ ,  $P_{2m}^{(n)}$  свідчать про наявність у системі КР.

При температурі  $T_1 > T_c$  ( $\beta_1 \tilde{\Phi}(0) = 0.86983814240$ ) для величин  $d_n(B_{n+1}, B_n)$ ,  $a_4^{(n)}$ ,  $a_6^{(n)}$  виникає картина, зображена на рис. 7.11. Величина  $d_n(B_{n+1}, B_n)$  при  $n > m_\tau$  стає постійною, зменшення коефіцієнта  $a_4^{(n)}$  з ростом  $n$  призупиняється, а величина  $a_6^{(n)}$  при  $n > m_\tau$  зменшується з тією ж швидкістю, що й при  $n < m_\tau$ .

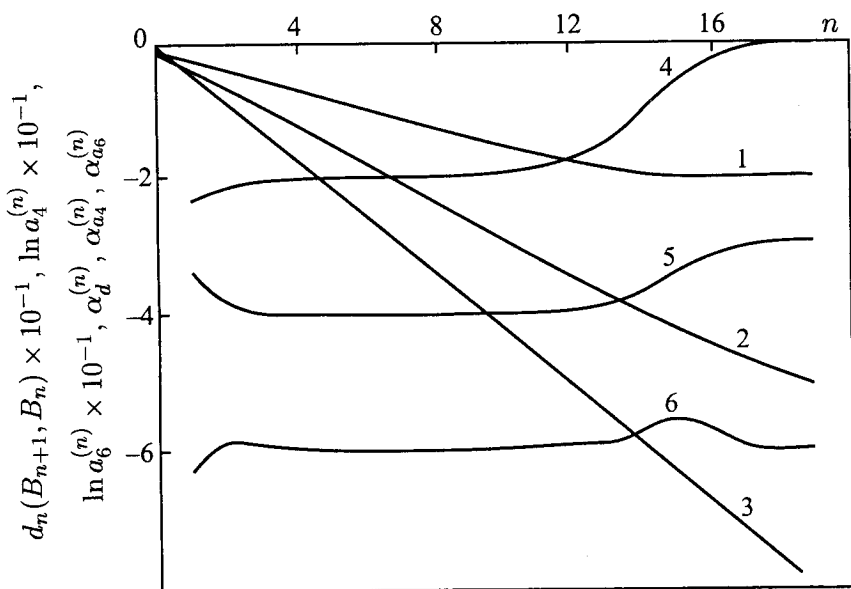


Рис. 7.11. Залежності логарифмів коефіцієнтів  $d_n(B_{n+1}, B_n)$ ,  $a_4^{(n)}$  і  $a_6^{(n)}$  (криві 1, 2, 3, відповідно) і показників  $\alpha_d^{(n)}$ ,  $\alpha_{a_4}^{(n)}$ ,  $\alpha_{a_6}^{(n)}$  (криві 4, 5, 6), що визначають залежності величин  $d_{n+1}(B_{n+2}, B_{n+1}) = d_n(B_{n+1}, B_n) s^{\alpha_d^{(n)}}$ ,  $a_4^{(n+1)} = a_4^{(n)} s^{\alpha_{a_4}^{(n)}}$ ,  $a_6^{(n+1)} = a_6^{(n)} s^{\alpha_{a_6}^{(n)}}$ , від номера блочної структури  $n$  у моделі  $\rho^6$  при температурі  $T_1 > T_c$ , для якої  $\beta_1 \tilde{\Phi}(0) = 0.86983814240$

У границі  $n \rightarrow \infty$  величини  $h_n$  і  $\alpha_n$  мають такі асимптотики (див. (7.4.13)):

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \alpha_h^{(n)} = 1.500, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \alpha_\alpha^{(n)} = -1.500. \quad (7.4.19)$$

Зростання коефіцієнтів  $P_{2m}^{(n)}$  при  $T = T_1$  зупиняється і величини  $\alpha_{P_{2m}}^{(n)}$  змінюють свою асимптотику (рис. 7.12). Основна роль тут належить коефіцієнтові  $P_2^{(n)}$ , решта ж  $P_{2m}^{(n)}$  ( $m \geq 2$ ) стають несуттєвими. Така поведінка коефіцієнтів  $a_{2m}^{(n)}$  і  $P_{2m}^{(n)}$  свідчить про наявність у системі при  $T = T_1$  і  $n > m_\tau$  граничного гаусового режиму, в якому

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \alpha_\eta^{(n)} = 1.500, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \alpha_\xi^{(n)} = -1.500. \quad (7.4.20)$$

Ділянка ГГР існує для всіх  $0 < \tau < \tau^*$ , де  $\tau^*$  визначається аналогічно як у моделі  $\rho^4$ .

У низькотемпературній області коефіцієнт  $d_n(B_{n+1}, B_n)$  змінює знак зі збільшенням  $n$ . Числові розрахунки, проведені для  $T_2 < T_c(\beta_2 \Phi(0) = 0.86983833313)$  дають змогу отримати залежність, зображену на рис. 7.13. Поведінка показника  $\alpha_d^{(n)}$  специфічна при  $T = T_2$  (рис. 7.14). При цьому величини  $a_4^{(n)}$ ,  $a_6^{(n)}$ , починають швидко зменшуватись, залишаючись додатними. Для величин  $\alpha_{a_4}^{(n)}$ ,  $\alpha_{a_6}^{(n)}$  отримуємо криві, зображені на рис. 7.15. Виникає т. зв. інверсний гаусовий режим.

Характерною особливістю ІГР є та обставина, що за абсолютною величиною квадратичний доданок у ефективному базисному розподілі  $\mathcal{W}_6^{(n)}(\rho)$  великий порівняно з четвірним і шестирним доданками і мав би давати основний внесок до статистичної суми від довгохвильових фаз флуктуацій. Однак, внаслідок від'ємності коефіцієнта  $d_n(B_{n+1}, B_n)$  розподіл носить суттєво негаусовий характер. Коефіцієнти  $P_{2m}^{(n)}$  у випадку  $T < T_c$  зростають зі збільшенням  $n$ . Відповідно змінюються їх показники  $\alpha_{P_{2m}}^{(n)}$ , які при виході системи із КР починають зростати і, на відміну від випадку  $T > T_c$ , не виходять на насичення (див. [366]).

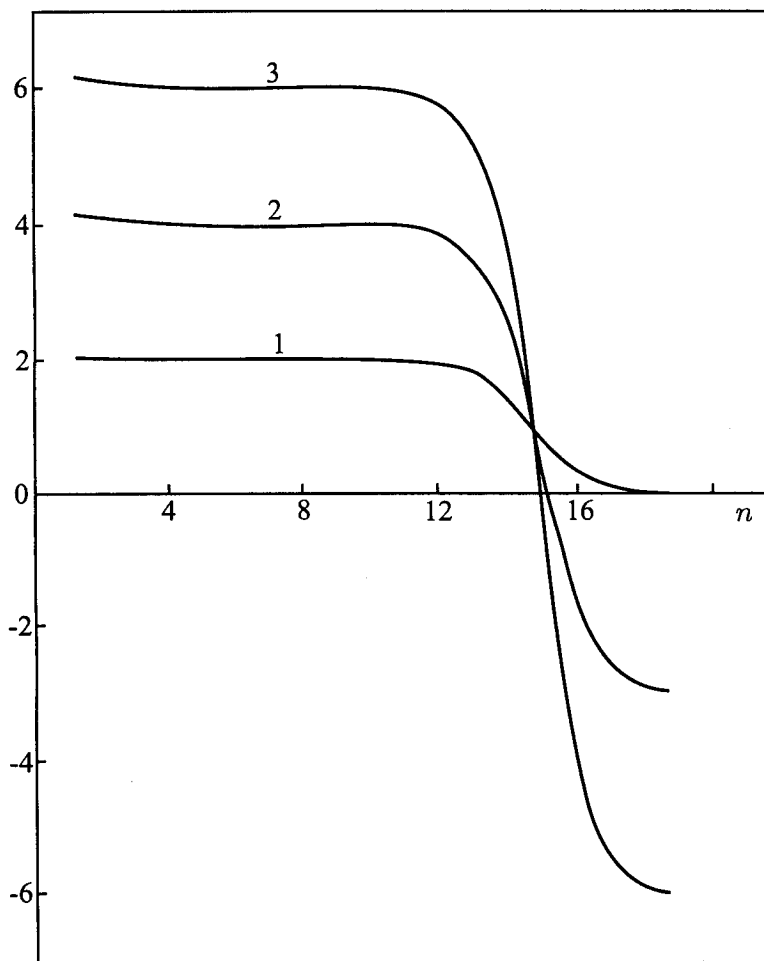
$\alpha_{P_2}^{(n)}, \alpha_{P_4}^{(n)}, \alpha_{P_6}^{(n)}$ 


Рис. 7.12. Залежність показників  $\alpha_{P_{2m}}^{(n)}$ , де  $m = 1, 2, 3$  (криві 1, 2, 3, відповідно), що визначаються співвідношеннями  $P_{2m}^{(n+1)} = P_{2m} s \alpha_{P_{2m}}^{(n)}$ , від номера блочної структури  $n$  при  $T = T_1$  (модель  $\rho^6$ )

$$d_n(B_{n+1}, B_n) \times 10^{-8}$$

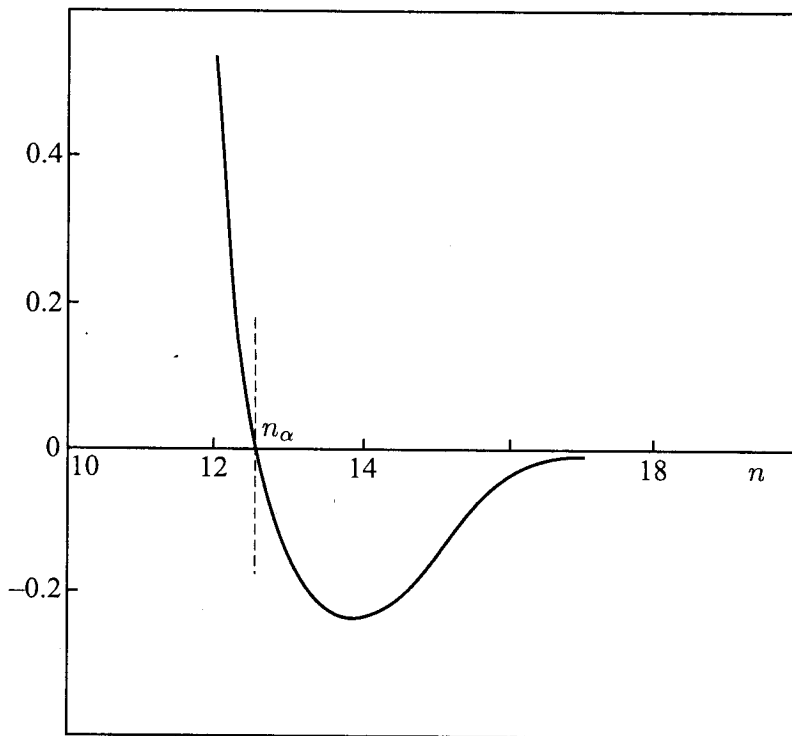


Рис. 7.13. Еволюція коефіцієнта  $d_n(B_{n+1}, B_n)$  моделі  $\rho^6$  при  $T_2 < T_c$  ( $\beta_2 \tilde{\Phi}(0) = 0.8698383313$ ) із ростом  $n$  після виходу із КР. Ділянка від'ємних значень цього коефіцієнта при  $n > n_\alpha$  характерна для температур, які нижчі від  $T_c$

Використовуючи методику, яка описана в § 7.3, можемо виконати обчислення показника кореляційної довжини. Формула (7.3.5) дає змогу не тільки знайти границю

$$\nu = \lim_{T \rightarrow T_c} \nu(T) = -m_\tau \frac{\ln s}{\ln |\tau|}, \quad (7.4.21)$$

але й прослідкувати характер залежності  $\nu$  від температури при

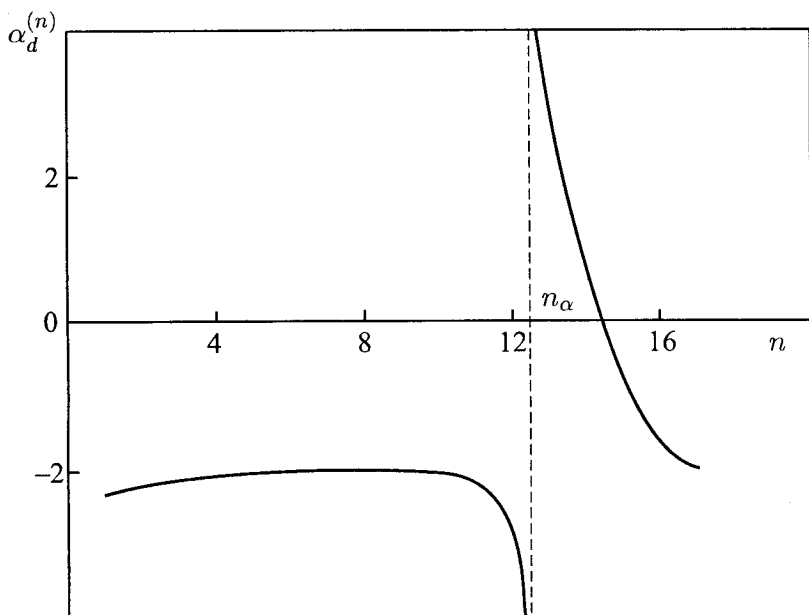


Рис. 7.14. Поведінка величини  $\alpha_d^{(n)}$  моделі  $\rho^6$  при  $T_2 < T_c$  із збільшенням номера  $n$ . За винятком перехідної області, коефіцієнт  $\alpha_d^{(n)}$  дорівнює  $-2$  для всіх значень  $n$ . Тут  $d_{n+1}(B_{n+2}, B_{n+1}) = d_n(B_{n+1}, B_n)s^{\alpha_d^{(n)}}$

$\tau \rightarrow 0$ . Зауважимо, що у цьому підході немає принципової відмінності у способі розрахунку критичного показника кореляційної довжини для температур вищих і нижчих за критичну. На рис. 7.16 і 7.17 зображені результати обчислення кривих  $\nu(T)$  для  $T > T_c$  і  $T < T_c$ . Із даних числового розрахунку випливає, що значення  $\nu$  слабо залежать від параметра  $\Delta$ . Якщо ж вибирати різні  $T_B$  (при  $T > T_c$ ), або  $T_H$  (при  $T < T_c$ ) для визначення  $B_0$  у (7.3.4), то спочатку спостерігається деякий розкид значень  $\nu$ , який, однак зникає зі зменшенням  $|\tau|$ .

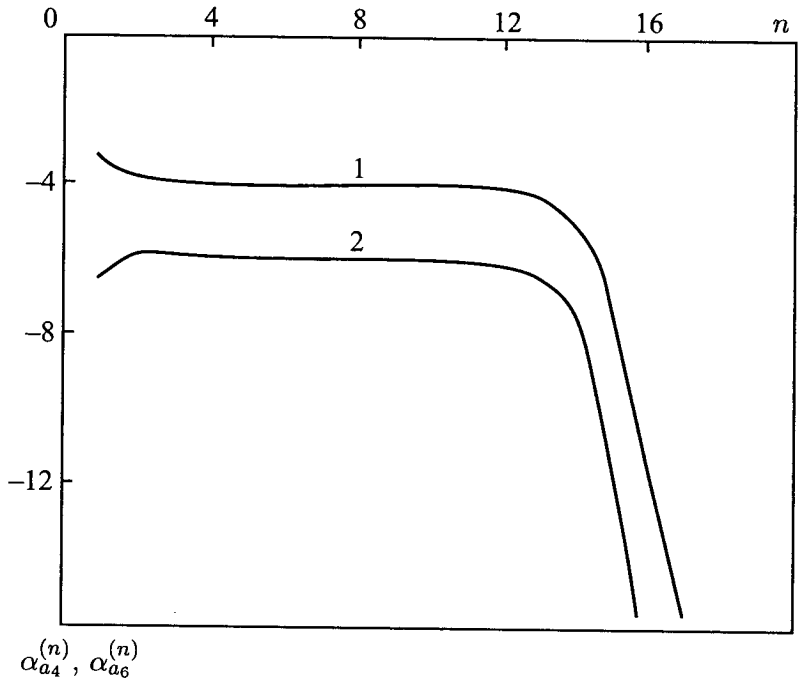


Рис. 7.15. Поведінка величин  $\alpha_{a_{2m}}^{(n)}$  ( $m = 2, 3$  і криві 1, 2 відповідно) як функцій номера блочної структури  $n$  для моделі  $\rho^6$  при  $T_2 < T_c$ . Після виходу із КР показники степенів  $\alpha_{a_{2m}}^{(n)}$  виразів  $a_{2m}^{(n+1)} = a_{2m}^{(n)} s^{\alpha_{a_{2m}}^{(n)}}$  швидко зростають за абсолютною величиною.

У границі  $\tau \rightarrow 0$  ( $T > T_c$ ) величина  $\nu$  при  $s = 2$  змінюється в межах

$$\nu^{(+)} = 0.601 \div 0.605, \quad (7.4.22)$$

а при  $T < T_c$

$$\nu^{(-)} = 0.601 \div 0.604. \quad (7.4.23)$$

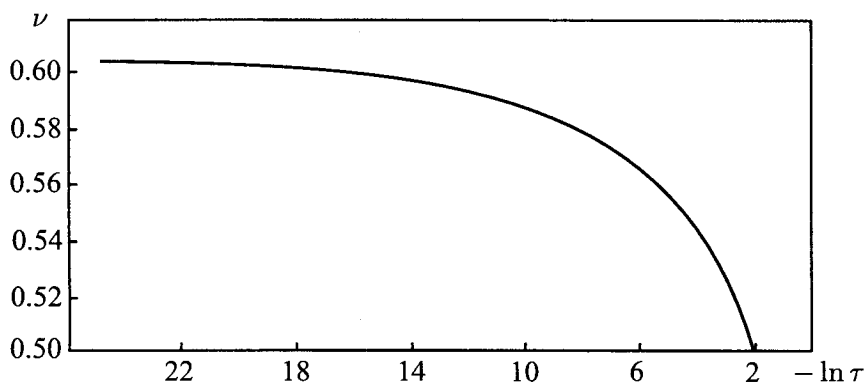


Рис. 7.16. Поведінка ефективного критичного показника кореляційної довжини  $\nu$  моделі  $\rho^6$  для  $T > T_c$  ( $s = 2$ )

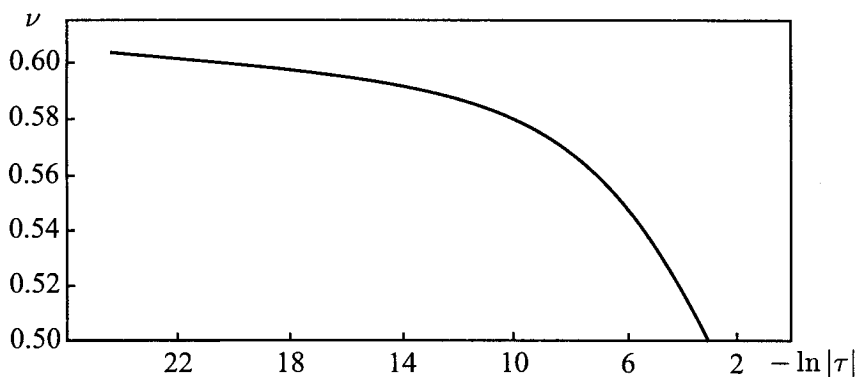


Рис. 7.17. Результат числового розрахунку критичного показника  $\nu$  моделі  $\rho^6$  при  $T < T_c$  ( $s = 2$ )





## Розділ 8

# Термодинамічні характеристики ізінгоподібної системи в наближенні моделі $\rho^6$ з врахуванням конфлуентної поправки. Високотемпературна область

Цей розділ присвячений узагальненню запропонованого вище методу обчислення термодинамічних функцій поблизу точки фазового переходу на модель  $\rho^6$ . Як було показано в розділі 1, для опису критичної поведінки тривимірних ізінгоподібних систем як базисний не можна використовувати гаусовий розподіл, оскільки його дисперсія прямує до безмежності з наближенням до точки фазового переходу. Найпростішою нетривіальною моделлю, яка може бути використана для опису фазового переходу, є модель  $\rho^4$ . Дослідженню критичної поведінки системи в рамках цієї моделі присвячені розділи 2–5. Використання вищих моделей, типу  $\rho^{2m}$  з  $m > 2$ , приводить до адекватнішого опису фазового переходу в тривимірних спінових системах. Як показано в розділі 6, ускладнення форми базисного розподілу зменшує залежність результатів розрахунку для критичного показника  $\nu$  від параметра ренормгрупи  $s$ . Моделі  $\rho^6$  належить особливе місце при описі фазового переходу. Її використання дає змогу не лише вийти за рамки класичного наближення, але й одержати кількісні характеристики фазового переходу другого роду.

Поведінка тривимірної ізінгівської системи в рамках моделі  $\rho^6$  вивчається в цьому розділі при температурах вищих від  $T_c$ . Розвинуто оригінальний метод розрахунку термодинамічних характеристик тривимірної ізінгоподібної моделі поблизу  $T_c$  з врахуванням першої конfluентної поправки. Окремо розглянуто внески в термодинамічні функції ізінгівського феромагнетика (вільну енергію, ентропію, внутрішню енергію, теплоємність) від короткохвильових та довгохвильових мод коливань густини спінового моменту. У виразах для основних критичних амплітуд та амплітуд конfluентної поправки виділено універсальний множник, який не залежить від мікроскопічних параметрів системи. Аналізується вплив останніх на розмір критичної області. Проведені числові оцінки розміру критичної області, температури фазового переходу, основних критичних амплітуд та амплітуд поправок до скейлінгу теплоємності й сприйнятливості системи для різних значень радіуса ефективної дії експонентно спадного потенціалу взаємодії.

Статистичний опис у методі КЗ основних властивостей тривимірної ізінгівської феромагнетика здійснено із врахуванням мікроскопічних параметрів системи. Отримані результати можуть знайти застосування при інтерпретації експериментальних даних з вивчення поведінки реальних речовин поблизу точки фазового переходу другого роду, а запропонована методика розрахунку термодинамічних характеристик у критичній області може бути використана для опису тривимірних ізінгоподібних систем з конкретним видом потенціалу взаємодії між частинками.

## 8.1. Загальні положення

Апроксимація підінтегральної функції у виразі для якобіану переходу визначає вибір моделі (модель  $\rho^4$ ,  $\rho^6$  тощо), в рамках якої проводиться розрахунок їхніх критичних властивостей. Найпростіше наближення, яке дає змогу вийти за рамки класичної поведінки, відповідає моделі  $\rho^4$  і ґрунтується на використанні чотвірної густини міри. Для такого наближення виконано розрахунок основних критичних показників термодинамічних характеристик, повних виразів для цих характеристик із врахуванням

конфлуентних поправок, проаналізовано відношення для критичних амплітуд (див. розділи 3, 4). Через наближеність обчислення статистичної суми, у зв'язку із обмеженням моделлю  $\rho^4$ , одержані результати (критичні показники, амплітуди, термодинамічні функції) мають деяку залежність від параметра ренормалізаційної групи  $s$ . Ця залежність значно послаблюється в процесі ускладнення форми негаусової міри (переходу до складніших моделей  $\rho^6$ ,  $\rho^8$ ,  $\rho^{10}$ ). Про це свідчать проведені в розділі 6 дослідження поведінки критичного показника кореляційної довжини  $\nu$  для моделей  $\rho^{2m}$  ( $m = 3, 4, 5$ ), а також безпосереднє співставлення графіків температурних залежностей термодинамічних характеристик, розрахованих для моделей  $\rho^4$  і  $\rho^6$  для різних параметрів  $s$  [344, 367]. Залежність результатів обчислень від параметра  $s$  вивчена і повністю контрольована. Для кожної з моделей  $\rho^{2m}$  існує виділене значення параметра  $s = s^*$  ( $s^* = 3.5862$  для моделі  $\rho^4$ ,  $s^* = 2.7349$  для моделі  $\rho^6$ ,  $s^* = 2.6511$  для моделі  $\rho^8$ ,  $s^* = 2.6108$  для моделі  $\rho^{10}$ ), пов'язане з перетворенням у нуль у фіксованій точці середнього значення коефіцієнта при другому степені змінної ефективної міри<sup>1</sup>. Значення  $s$ , близькі до  $s^*$ , оптимальні для цієї методики розрахунку. Різниця форма РС між коефіцієнтами ефективних блочних структур добре працює саме у цій області  $s$ . Для способів поділу фазового простору КЗ на підмножини із значеннями  $s$ , близькими до  $s^*$  одержуємо достовірні результати, які узгоджуються з даними експериментальних і теоретичних досліджень [344, 367]. Результати розрахунків у рамках моделі  $\rho^6$  приводяться в цьому розділі для деяких значень  $s$ , близьких до оптимальних для цього способу обчислень.

На користь обраної для дослідження моделі  $\rho^6$  свідчать і праці [368, 369], в яких вивчається ефективний потенціал для скалярної теорії поля в трьох вимірностях у парамагнетній та феромагнетній фазах, відповідно. У цих працях розглядається модель Ізінга на простій кубічній ґратці із взаємодією найближчих сусідів. При цьому використовуються одержані з допомогою методу Монте-Карло ймовірнісні розподіли середньої намагненості

<sup>1</sup> Слід зазначити, що в цьому та наступних розділах величинам у фіксованій точці приписується зверху індекс "(0)", а не "\*", як у попередніх розділах

тривимірної моделі Ізінґа у зовнішньому полі. Показано, що доданок, пропорційний до шостого степеня змінної в ефективному потенціалі відіграє важливу роль. У [368] також обчислено універсальні чотири- і шеститочкові константи зв'язку. Зазначимо, що розрахунок безрозмірних  $2n$ -точкових ( $n \geq 2$ ) перенормованих констант зв'язку може здійснюватись, крім Монте-Карло техніки [368,370,371], і на основі інших підходів. Наприклад, у випадку тривимірної моделі Ізінґа з цією метою в [372,373] використано теоретико-польовий РГ підхід у трьох вимірах, а в [169,374] – високотемпературні розклади.

При обчисленні термодинаміки тривимірної ізінґівської системи в рамках моделі  $\rho^6$  враховуються доданки, які визначають поправку до скейлінгу. Розрахунки вище від температури фазового переходу  $T_c$  приведені у працях [375,376]. Одержані вирази для основних критичних амплітуд і амплітуд першої конфлуентної поправки дають змогу дослідити їхню залежність від мікроскопічних параметрів системи (радіуса дії потенціалу  $b$ , постійної ґратки  $c$ ).

Виходитимемо із виразу для статистичної суми в наближенні моделі  $\rho^6$ . Припустивши в (1.4.14), що  $n = 3$  та інтегруючи в (1.3.15) за  $N - N'$  змінними  $\rho_{\mathbf{k}}$  з індексами  $B' < k \leq B$ , отримуємо:

$$Z = 2^N 2^{(N'-1)/2} e^{a'_0 N'} \int \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B'} d'(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \sum_{l=2}^3 \frac{a'_{2l}}{(2l)!(N')^{l-1}} \sum_{k_1, \dots, k_{2l} \leq B'} \rho_{\mathbf{k}_1} \cdots \rho_{\mathbf{k}_{2l}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2l}} \right] (d\rho)^{N'}. \quad (8.1.1)$$

$$\text{Тут } N' = N s_0^{-3}, \quad s_0 = B/B' = \pi \sqrt{2} b/c,$$

$$d'(k) = a'_2 - \beta \tilde{\Phi}(k). \quad (8.1.2)$$

Коефіцієнти  $a'_{2l}$  визначають із співвідношень:

$$\begin{aligned} a'_0 &= \ln Q(\mathcal{M}), & Q(\mathcal{M}) &= (12s_0^3)^{1/4} \pi^{-1} I_0(\eta', \xi'), \\ a'_2 &= (12s_0^3)^{1/2} F_2(\eta', \xi'), \\ a'_4 &= 12s_0^3 C(\eta', \xi'), \\ a'_6 &= (12s_0^3)^{3/2} N(\eta', \xi'). \end{aligned} \quad (8.1.3)$$

Вони є функціями відношення  $b/c$  (див. табл. 8.1). Тут роль аргументів відіграють величини

$$\eta' = \sqrt{3} s_0^{3/2}, \quad \xi' = \frac{8\sqrt{3}}{15s_0^{3/2}}. \quad (8.1.4)$$

Спеціальні функції  $C(\eta', \xi')$  і  $N(\eta', \xi')$  мають вигляд

$$\begin{aligned} C(\eta', \xi') &= -F_4(\eta', \xi') + 3F_2^2(\eta', \xi'), \\ N(\eta', \xi') &= F_6(\eta', \xi') - 15F_4(\eta', \xi')F_2(\eta', \xi') + 30F_2^3(\eta', \xi'), \end{aligned} \quad (8.1.5)$$

Табл. 8.1. Значення коефіцієнтів  $a'_{2l}$  для різних  $b$

$b$	$b_I$	$b_{II}$	$b_{III}$	$c$	$2c$
$a'_0$	-1.0196	-0.9863	-0.9764	-0.9218	-0.9193
$a'_2$	0.7023	0.7820	0.8083	0.9887	0.9986
$a'_4$	0.2212	0.2163	0.2086	0.0220	0.0028
$a'_6$	0.4379	0.3895	0.3547	0.0031	0.0000

$b$	$5c$	$7c$
$a'_0$	-0.9190	-0.9189
$a'_2$	0.9999	1.0000
$a'_4$	0.0002	0.0000
$a'_6$	0.0000	0.0000

де

$$F_{2l}(\eta', \xi') = I_{2l}(\eta', \xi') / I_0(\eta', \xi'),$$

$$I_{2l}(\eta', \xi') = \int_0^\infty t^{2l} \exp(-\eta' t^2 - t^4 - \xi' t^6) dt. \quad (8.1.6)$$

Як бачимо із табл. 8.1, при  $b \gg c a'_2 \rightarrow 1$ ,  $a'_{2l} \rightarrow 0$  для  $l \geq 2$  і підінтегральна функція виразу (8.1.1) за своєю формою наближається до гаусового розподілу. У випадку співмірності радіуса дії потенціалу і постійної ґратки коефіцієнти  $a'_{2l}$  ненульові для всіх значень  $l \geq 0$  і в показнику експоненти підінтегрального виразу (8.1.1) потрібно, крім гаусового, приймати до уваги доданки, пропорційні до вищих степенів змінної  $\rho_k$ . Далі розглядатимемо саме цей випадок. Значення  $b = b_I = c/(2\sqrt{3})$  відповідає взаємодії найближчих сусідів,  $b = b_{II} = 0.3379c$  – перших і других сусідів,  $b = b_{III} = 0.3584c$  – перших, других і третіх сусідів [334].

Збільшення кількості доданків у виразах (1.4.14), (1.5.1) відповідає ускладненню форми негаусової густини міри (ускладненню моделі). Кількісно критичні явища тривимірного ізінґівського феромагнетика в рамках методу КЗ можуть бути описані вже в наближенні моделі  $\rho^6$ . Це підтверджується розрахунком, поведінки коефіцієнтів вихідного виразу для статистичної суми і критичного показника кореляційної довжини  $\nu$  для послідовності моделей  $\rho^{2m}$  ( $m = 2, 3, 4, 5$ ) [16, 354, 356–359], обчисленням і порівнянням термодинамічних функцій та універсальних характеристик для моделей  $\rho^4$  і  $\rho^6$  (див., наприклад, [341, 344, 367]). Розгляд такої послідовності моделей був потрібним для оцінки збіжності процедури обчислення критичного показника  $\nu$ , з'ясування питань про залежність від параметра РГ  $s$  і доцільність використання вищих негаусових розподілів. Було встановлено, що в процесі ускладнення форми розподілу флуктуацій залежність критичного показника  $\nu$  від параметра РГ  $s$  поступово зменшується і, починаючи з шестирної густини міри, спостерігається незначна зміна значення показника  $\nu$ , який має тенденцію до насичення з ростом величини  $m$ , що характеризує порядок моделі  $\rho^{2m}$ . Цікавим є й те, що при  $m \geq 3$  числові значення коефіцієнтів  $a'_{2l}$ , які входять до статистичної суми (вираз аналогічний (8.1.1)),

мало змінюються із подальшим підвищенням порядку розподілу, тобто із збільшенням кількості доданків у (1.4.14).

Однією з переваг методу КЗ при описі фазового переходу є наявність серед КЗ  $\rho_k$  змінної, пов'язаної з параметром порядку. Для моделі, яка розглядається в цій книзі такою змінною є  $\rho_0$ . Ми не можемо виділити у виразі (8.1.1) внеску лише від  $\rho_0$ , оскільки всі змінні  $\rho_k$  зв'язані між собою. Використаємо запропонований у попередніх розділах метод обчислення (8.1.1). Інтегрування починається із змінних  $\rho_k$  з великими значеннями  $k$  (порядку границі півзони Бріллюена) і закінчується  $\rho_k$  з  $k \rightarrow 0$ . У результаті поетапного розрахунку статистичної суми кількість змінних інтегрування у виразі для неї поступово зменшується. Після інтегрування за  $n + 1$  множинами КЗ одержуємо

$$Z = 2^N 2^{(N_{n+1}-1)/2} Q_0 Q_1 \dots \dots Q_n [Q(P_n)]^{N_{n+1}} \int \mathcal{W}_6^{(n+1)}(\rho) (d\rho)^{N_{n+1}}. \quad (8.1.7)$$

Тут  $N_{n+1} = N' s^{-3(n+1)}$ ,

$$\begin{aligned} Q_0 &= \left[ e^{a'_0} Q(d) \right]^{N'} , & Q_1 &= [Q(P)Q(d_1)]^{N_1} , \dots , \\ Q_n &= [Q(P_{n-1})Q(d_n)]^{N_n} , \\ Q(d_n) &= 2 \left( 24/a_4^{(n)} \right)^{1/4} I_0(h_n, \alpha_n), \\ Q(P_n) &= \pi^{-1} \left( s^3 a_4^{(n)} / C(h_n, \alpha_n) \right)^{1/4} I_0(\eta_n, \xi_n). \end{aligned} \quad (8.1.8)$$

Основні аргументи

$$h_n = d_n(B_{n+1}, B_n) (6/a_4^{(n)})^{1/2}, \quad \alpha_n = \frac{\sqrt{6}}{15} a_6^{(n)} / (a_4^{(n)})^{3/2} \quad (8.1.9)$$

визначаються середнім значенням коефіцієнта  $d_n(k)$  у  $n$ -ій блочній структурі, тобто  $d_n(B_{n+1}, B_n)$ , і величинами  $a_4^{(n)}$ ,  $a_6^{(n)}$ . Ефективний розподіл флуктуацій у  $(n + 1)$ -ій блочній структурі



$\mathcal{W}_6^{(n+1)}(\rho)$  має вигляд:

$$\mathcal{W}_6^{(n+1)}(\rho) = \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{n+1}} d_{n+1}(k) \rho_k \rho_{-k} - \sum_{l=2}^3 \frac{a_{2l}^{(n+1)}}{(2l)! N_{n+1}^{l-1}} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_{2l} \\ k_i \leq B_{n+1}}} \rho_{k_1} \cdots \rho_{k_{2l}} \delta_{k_1 + \dots + k_{2l}} \right]. \quad (8.1.10)$$

Тут  $B_{n+1} = B's^{-(n+1)}$ ,  $d_{n+1}(k) = a_2^{(n+1)} - \beta \tilde{\Phi}(k)$ ,  $a_{2l}^{(n+1)}$  – перенормовані значення коефіцієнтів  $a_{2l}$ . Проміжні змінні  $\eta_n$ ,  $\xi_n$  є функціями  $h_n$  і  $\alpha_n$ . Вони задаються виразами

$$\begin{aligned} \eta_n &= (6s^3)^{1/2} F_2(h_n, \alpha_n) [C(h_n, \alpha_n)]^{-1/2}, \\ \xi_n &= \frac{\sqrt{6}}{15} s^{-3/2} N(h_n, \alpha_n) [C(h_n, \alpha_n)]^{-3/2}, \end{aligned} \quad (8.1.11)$$

де вигляд спеціальних функцій  $C(h_n, \alpha_n)$ ,  $N(h_n, \alpha_n)$  визначений у (8.1.5). Коефіцієнти  $d_n(B_{n+1}, B_n)$ ,  $a_4^{(n)}$ ,  $a_6^{(n)}$  зв'язані з коефіцієнтами  $(n+1)$ -ої блочної структури з допомогою РС (див. вище § 6.2), роз'язки яких (див. § 6.3) будуть використані при обчисленні вільної енергії системи.

Основна ідея розрахунку на мікроскопічному рівні явних виразів для вільної енергії та інших термодинамічних функцій системи поблизу  $T_c$  ( $\tau < \tau^* \sim 10^{-2}$ ,  $\tau = (T - T_c)/T_c$ ) полягає в роздільному врахуванні внесків від короткохвильових і довгохвильових мод коливань густини спінового моменту, як це описано в розділах 3 та 4.

Короткохвильові моди характеризуються наявністю РГ симетрії і описуються негаусовим розподілом флуктуацій. Вони відповідають області критичного режиму, яка спостерігається вище і нижче від  $T_c$ . Тут використовується метод РГ (див., наприклад, [13]). Розрахунок виразу, що описує внесок у вільну енергію від короткохвильових мод коливань спінової густини зв'язаний із сумуванням парціальних вільних енергій за номерами  $n < n_\tau$

до точки виходу системи із ділянки КР. Головною задачею при цьому є виділення явної залежності від номера блочної структури. Для цього використовують розв'язки РС. Врахування в них більшого власного значення ( $E_1 > 1$ ) матриці лінійного перетворення РГ дає змогу описати поблизу  $T_c$  основну сингулярність для теплоємності. Менші власні значення ( $E_2 < 1$ ,  $E_3 < 1$ ) відповідають за виникнення поправок до скейлінгу. За рахунок врахування короткохвильових мод коливань спінової густини відбувається перенормування дисперсії розподілу, що описує довгохвильові моди. Останнім у випадку  $T > T_c$  відповідає область граничного гаусового режиму. Спосіб врахування внеску довгохвильових мод коливань у вільну енергію системи якісно відрізняється від методики обчислення короткохвильової частини статистичної суми. Розрахунок цього внеску ґрунтується на використанні гаусової міри як базисної. Тут розвинуто прямий метод розрахунку. Вихідними даними для нього є результати, одержані при врахуванні короткохвильових мод.

Зазначимо, що проведені розрахунки в рамках моделі  $\rho^6$  справедливі у вузькому околі  $T_c$ . Розв'язки РС для вказаної моделі дають змогу оцінити розмір цієї області температур  $\tau < \tau^*$ , в якій існує КР, що відповідає наявності сильно скорельованих спінових блоків. Значення  $\tau^*$  для малих радіусів дії потенціалу взаємодії  $b$  порядку сотих [341]. Для великих  $b$  важливо коректно врахувати вхід у КР. Розрахунки свідчать, що для великих значень  $b$  розміри критичної області швидко зменшуються [375]. Це зрозуміло, оскільки умова  $b \gg c$  відповідає переходу до моделі з далекодіючою взаємодією, яка може бути описана з використанням гаусового розподілу мод коливань спінової густини (див. (8.1.1) та табл. 8.1) і виявляє класичну критичну поведінку.

Обчисливши окремо внески у вільну енергію від короткохвильових  $F_{\text{КР}}$  і довгохвильових  $F_{\text{ГГР}}$  мод коливань спінової густини, можна знайти повний вираз для вільної енергії системи

$$F = F_0 + F_{\text{КР}} + F_{\text{ГГР}}. \quad (8.1.12)$$

Тут  $F_0 = -kTN \ln 2$  – вільна енергія  $N$  незваємодіючих спінів. Перейдемо до обчислення внесків  $F_{\text{КР}}$  і  $F_{\text{ГГР}}$ .

## 8.2. Розрахунок внеску в термодинамічні функції системи від короткохвильових флуктуацій

Статистичну суму моделі в (8.1.7) представимо у вигляді [367, 377]

$$Z = 2^N Z_{\text{КР}} Z_{\text{ГГР}}. \quad (8.2.1)$$

Множник  $Z_{\text{КР}}$  описує внесок короткохвильових флуктуацій  $\rho_{\mathbf{k}}$  з  $\mathbf{k} \in [B_{m_\tau}, B']$  (область КР). Величина  $B_{m_\tau} = B' s^{-m_\tau}$  визначається номером блочної структури  $m_\tau$ , який характеризує точку виходу системи із КР. Множник  $Z_{\text{ГГР}}$  містить внески довгохвильових флуктуацій з  $\mathbf{k} \in [0, B_{m_\tau})$  і відповідає ГГР.

Розглянемо величину  $Z_{\text{КР}}$ . Для неї маємо:

$$Z_{\text{КР}} = \prod_{n=0}^{m_\tau} \left[ \frac{2}{\pi} \left( \frac{24}{C(\eta_{n-1}, \xi_{n-1})} \right)^{1/4} I_0(h_n, \alpha_n) I_0(\eta_{n-1}, \xi_{n-1}) \right]^{N_n}. \quad (8.2.2)$$

Розрахунок цієї величини пов'язаний з представленням правої частини формули (8.2.2) у вигляді явної функції від номера блочної структури  $n$ . Зазначимо, що в (8.2.2) при  $n = 0$   $\eta_{-1} \equiv \eta'$ ,  $\xi_{-1} \equiv \xi'$ . В області КР основні  $h_n$ ,  $\alpha_n$  і проміжні  $\eta_n$ ,  $\xi_n$  аргументи близькі до своїх значень у фіксованій точці  $h^{(0)}$ ,  $\alpha^{(0)}$  і  $\eta^{(0)}$ ,  $\xi^{(0)}$ . Тому функції від цих аргументів тут можна апроксимувати степеневими рядами відносно відхилень аргументів від їхніх фіксованих значень (див. додаток Є або [367, 378]). Проміжні аргументи і функції від них представляються через відхилення основних аргументів від їх значень у фіксованій точці. Використовуючи співвідношення для  $I_0(h_n, \alpha_n)$ ,  $I_0(\eta_{n-1}, \xi_{n-1})$ ,  $C(\eta_{n-1}, \xi_{n-1})$  з врахуванням квадратів відхилень основних аргументів, із (8.2.2) визначаємо вільну енергію, яка відповідає

$n$ -ій блочній структурі (див. додаток Є):

$$F_n = -kTN_n \left[ f_{\text{KP}}^{(0)} + \varphi_1(h_{n-1} - h^{(0)}) + \varphi_2(\alpha_{n-1} - \alpha^{(0)}) + \right. \\ \left. + \varphi_3(h_n - h^{(0)}) + \varphi_4(\alpha_n - \alpha^{(0)}) + \varphi'_1(h_{n-1} - h^{(0)})^2 + \right. \\ \left. + \varphi'_2(\alpha_{n-1} - \alpha^{(0)})^2 + \varphi'_3(h_n - h^{(0)})^2 + \varphi'_4(\alpha_n - \alpha^{(0)})^2 + \right. \\ \left. + \varphi'_5(h_{n-1} - h^{(0)})(\alpha_{n-1} - \alpha^{(0)}) + \varphi'_6(h_n - h^{(0)})(\alpha_n - \alpha^{(0)}) \right], \\ f_{\text{KP}}^{(0)} = \ln \left( \frac{2(24)^{1/4}}{\pi} \right) - 1/4 \ln P_{40} + \ln I_0^* + \ln I_0^{**},$$

$$\varphi_k = b_k + P_{4k}/4, \quad k = 1, 2, \quad (8.2.3)$$

$$\varphi_3 = -F_2^*, \quad \varphi_4 = -F_6^*,$$

$$\varphi'_k = b'_k - \frac{1}{2}b_k^2 - P'_{4k}/4 + P_{4k}^2/8,$$

$$\varphi'_3 = F_4^*/2 - F_2^{*2}/2, \quad \varphi'_4 = F_{12}^*/2 - F_6^{*2}/2,$$

$$\varphi'_5 = b'_3 - b_1b_2 - P'_{43}/4 + P_{41}P_{42}/4,$$

$$\varphi'_6 = F_8^* - F_2^*F_6^*.$$

Величини, що входять у  $f_{\text{KP}}^{(0)}$ ,  $\varphi_i$ ,  $\varphi'_j$ , у кінцевому результаті є функціями основних аргументів у фіксованій точці. Вони приведені у додатку Є.

Виділимо в  $F_n$  явну залежність від номера  $n$ . Використовуючи розв'язки (6.3.14) РС (6.2.1), для  $h_n$  і  $\alpha_n$  (8.1.9) знаходимо:

$$h_n = h^{(0)} + c_1 H_1(u^{(0)})^{-1/2} E_1^n + c_2 H_2(u^{(0)})^{-1} E_2^n + \\ + c_3 H_3(u^{(0)})^{-3/2} E_3^n + c_1 c_2 H_4(u^{(0)})^{-3/2} E_1^n E_2^n + \\ + c_1 c_2^2 H_5(u^{(0)})^{-5/2} E_1^n E_2^{2n} + c_2^2 H_6(u^{(0)})^{-2} E_2^{2n} + \\ + c_1^2 H_7(u^{(0)})^{-1} E_1^{2n} + c_1^2 c_2 H_8(u^{(0)})^{-2} E_1^{2n} E_2^n + \\ + c_1^2 c_2^2 H_9(u^{(0)})^{-3} E_1^{2n} E_2^{2n}; \\ \alpha_n = \alpha^{(0)} + c_1 L_1(u^{(0)})^{-1/2} E_1^n + c_2 L_2(u^{(0)})^{-1} E_2^n + \\ + c_3 L_3(u^{(0)})^{-3/2} E_3^n + c_1 c_2 L_4(u^{(0)})^{-3/2} E_1^n E_2^n +$$

$$\begin{aligned}
& + c_1 c_2^2 L_5(u^{(0)})^{-5/2} E_1^n E_2^{2n} + c_2^2 L_6(u^{(0)})^{-2} E_2^{2n} + \\
& + c_1^2 L_7(u^{(0)})^{-1} E_1^{2n} + c_1^2 c_2 L_8(u^{(0)})^{-2} E_1^{2n} E_2^n + \\
& + c_1^2 c_2^2 L_9(u^{(0)})^{-3} E_1^{2n} E_2^{2n}, \tag{8.2.4}
\end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}
H_1 &= \sqrt{6} - 1/2 h^{(0)} w_{21}^{(0)}, \\
H_2 &= \sqrt{6} w_{12}^{(0)} - 1/2 h^{(0)}, \\
H_3 &= \sqrt{6} w_{13}^{(0)} - 1/2 h^{(0)} w_{23}^{(0)}, \\
H_4 &= 3/4 h^{(0)} w_{21}^{(0)} - \sqrt{6}/2 \left( 1 + w_{12}^{(0)} w_{21}^{(0)} \right), \\
H_5 &= 3\sqrt{6}/4 \left( 1/2 + w_{12}^{(0)} w_{21}^{(0)} - 5/(4\sqrt{6}) h^{(0)} w_{21}^{(0)} \right), \\
H_6 &= 1/2 \left( 3/4 h^{(0)} - \sqrt{6} w_{12}^{(0)} \right), \\
H_7 &= w_{21}^{(0)}/2 \left( 3/4 h^{(0)} w_{21}^{(0)} - \sqrt{6} \right), \\
H_8 &= 3\sqrt{6}/4 w_{21}^{(0)} \left( 1 + 1/2 w_{12}^{(0)} w_{21}^{(0)} - 5/(4\sqrt{6}) h^{(0)} w_{21}^{(0)} \right), \\
H_9 &= 15\sqrt{6}/16 w_{21}^{(0)} \left( 7/(4\sqrt{6}) h^{(0)} w_{21}^{(0)} - 1 - w_{12}^{(0)} w_{21}^{(0)} \right); \\
L_1 &= \sqrt{6}/15 w_{31}^{(0)} - 3/2 \alpha^{(0)} w_{21}^{(0)}, \tag{8.2.5} \\
L_2 &= \sqrt{6}/15 w_{32}^{(0)} - 3/2 \alpha^{(0)}, \\
L_3 &= \sqrt{6}/15 - 3/2 \alpha^{(0)} w_{23}^{(0)}, \\
L_4 &= 15/4 \alpha^{(0)} w_{21}^{(0)} - \sqrt{6}/10 \left( w_{31}^{(0)} + w_{21}^{(0)} w_{32}^{(0)} \right), \\
L_5 &= \sqrt{6}/4 \left( 1/2 w_{31}^{(0)} + w_{21}^{(0)} w_{32}^{(0)} - 105/(4\sqrt{6}) \alpha^{(0)} w_{21}^{(0)} \right), \\
L_6 &= 1/2 \left( 15/4 \alpha^{(0)} - \sqrt{6}/5 w_{32}^{(0)} \right), \\
L_7 &= w_{21}^{(0)}/2 \left( 15/4 \alpha^{(0)} w_{21}^{(0)} - \sqrt{6}/5 w_{31}^{(0)} \right), \\
L_8 &= \sqrt{6}/4 w_{21}^{(0)} \left( w_{31}^{(0)} + 1/2 w_{21}^{(0)} w_{32}^{(0)} - 105/(4\sqrt{6}) \alpha^{(0)} w_{21}^{(0)} \right),
\end{aligned}$$

$$L_9 = 7\sqrt{6}/16 w_{21}^{(0)} \left( 45/(4\sqrt{6}) \alpha^{(0)} w_{21}^{(0)} - w_{31}^{(0)} - w_{21}^{(0)} w_{32}^{(0)} \right).$$

Вирази для  $u^{(0)}$ ,  $w_{il}^{(0)}$ ,  $c_1$ ,  $c_2$ ,  $c_3$  містяться у розділі 6 (див. (6.2.17), (6.3.3), (6.3.22)). Зазначимо, що у виразах для  $h_n$  і  $\alpha_n$  (див. (8.2.4)) доданком, пропорційним  $E_3^n$ , який появляється для моделі  $\rho^6$ , можна знехтувати ( $E_3$  несуттєве порівняно з  $E_1$ ,  $E_2$  (див. табл. 6.3, § 6.2)). Парціальна вільна енергія  $n$ -ої блочної структури записується у вигляді:

$$\begin{aligned} F_n = & -kTN's^{-3n} \left[ f_{\text{KP}}^{(0)} + f_{\text{KP}}^{(1)}(u^{(0)})^{-1/2} c_1 E_1^n + f_{\text{KP}}^{(2)}(u^{(0)})^{-1} c_2 E_2^n + \right. \\ & + f_{\text{KP}}^{(3)}(u^{(0)})^{-3/2} c_3 E_3^n + f_{\text{KP}}^{(4)}(u^{(0)})^{-3/2} c_1 c_2 E_1^n E_2^n + \\ & + f_{\text{KP}}^{(5)}(u^{(0)})^{-5/2} c_1 c_2^2 E_1^n E_2^{2n} + f_{\text{KP}}^{(6)}(u^{(0)})^{-2} c_2^2 E_2^{2n} + \\ & + f_{\text{KP}}^{(7)}(u^{(0)})^{-1} c_1^2 E_1^{2n} + f_{\text{KP}}^{(8)}(u^{(0)})^{-2} c_1^2 c_2 E_1^{2n} E_2^n + \\ & \left. + f_{\text{KP}}^{(9)}(u^{(0)})^{-3} c_1^2 c_2^2 E_1^{2n} E_2^{2n} \right]. \end{aligned} \quad (8.2.6)$$

Тут

$$\begin{aligned} f_{\text{KP}}^{(k)} &= H_k (\varphi_3 + \varphi_1/E_k) + L_k (\varphi_4 + \varphi_2/E_k), \quad k = 1, 2, 3, \\ f_{\text{KP}}^{(4)} &= H_4 [\varphi_3 + \varphi_1/(E_1 E_2)] + L_4 [\varphi_4 + \varphi_2/(E_1 E_2)] + \\ &+ 2H_1 H_2 [\varphi'_3 + \varphi'_1/(E_1 E_2)] + 2L_1 L_2 [\varphi'_4 + \varphi'_2/(E_1 E_2)] + \\ &+ (H_1 L_2 + H_2 L_1) [\varphi'_6 + \varphi'_5/(E_1 E_2)], \\ f_{\text{KP}}^{(5)} &= H_5 [\varphi_3 + \varphi_1/(E_1 E_2^2)] + L_5 [\varphi_4 + \varphi_2/(E_1 E_2^2)] + \\ &+ 2(H_1 H_6 + H_2 H_4) [\varphi'_3 + \varphi'_1/(E_1 E_2^2)] + 2(L_1 L_6 + L_2 L_4) \times \\ &\times [\varphi'_4 + \varphi'_2/(E_1 E_2^2)] + (H_1 L_6 + H_6 L_1 + H_2 L_4 + H_4 L_2) \times \\ &\times [\varphi'_6 + \varphi'_5/(E_1 E_2^2)], \\ f_{\text{KP}}^{(6)} &= H_6 (\varphi_3 + \varphi_1/E_2^2) + L_6 (\varphi_4 + \varphi_2/E_2^2) + H_2^2 (\varphi'_3 + \varphi'_1/E_2^2) + \\ &+ L_2^2 (\varphi'_4 + \varphi'_2/E_2^2) + H_2 L_2 (\varphi'_6 + \varphi'_5/E_2^2), \quad (8.2.7) \\ f_{\text{KP}}^{(7)} &= H_7 (\varphi_3 + \varphi_1/E_1^2) + L_7 (\varphi_4 + \varphi_2/E_1^2) + H_1^2 (\varphi'_3 + \varphi'_1/E_1^2) + \\ &+ L_1^2 (\varphi'_4 + \varphi'_2/E_1^2) + H_1 L_1 (\varphi'_6 + \varphi'_5/E_1^2), \end{aligned}$$

$$f_{\text{КР}}^{(8)} = H_8 [\varphi_3 + \varphi_1/(E_1^2 E_2)] + L_8 [\varphi_4 + \varphi_2/(E_1^2 E_2)] + \\ + 2(H_1 H_4 + H_2 H_7) [\varphi'_3 + \varphi'_1/(E_1^2 E_2)] + 2(L_1 L_4 + L_2 L_7) \times \\ \times [\varphi'_4 + \varphi'_2/(E_1^2 E_2)] + (H_1 L_4 + H_4 L_1 + H_2 L_7 + H_7 L_2) \times \\ \times [\varphi'_6 + \varphi'_5/(E_1^2 E_2)],$$

$$f_{\text{КР}}^{(9)} = H_9 [\varphi_3 + \varphi_1/(E_1 E_2)^2] + L_9 [\varphi_4 + \varphi_2/(E_1 E_2)^2] + \\ + (2H_1 H_5 + 2H_2 H_8 + H_4^2 + 2H_6 H_7) [\varphi'_3 + \varphi'_1/(E_1 E_2)^2] + \\ + (2L_1 L_5 + 2L_2 L_8 + L_4^2 + 2L_6 L_7) [\varphi'_4 + \varphi'_2/(E_1 E_2)^2] + \\ + (H_1 L_5 + H_5 L_1 + H_2 L_8 + H_8 L_2 + H_4 L_4 + H_6 L_7 + \\ + H_7 L_6) [\varphi'_6 + \varphi'_5/(E_1 E_2)^2].$$

Отже, парціальна вільна енергія  $n$ -ої блочної структури  $F_n$  складається із незалежної від номера блочної структури  $n$  частини  $f_{\text{КР}}^{(0)}$ , яка є універсальною величиною, і доданків, що містять залежність від  $n$ . На відміну від  $f_{\text{КР}}^{(0)}$  вони залежать від мікроскопічних параметрів гамільтоніану системи. У формулу для парціальної вільної енергії входить  $c_1$  – один із коефіцієнтів розв'язків РС, якому притаманна специфічна залежність від температури. На основі виразу для  $c_1$  отримуємо рівняння для величини  $\beta_c \tilde{\Phi}(0)$ , яка визначає температуру фазового переходу (див. [310]). Залежність  $\beta_c A$  ( $A$  – постійна потенціалу взаємодії (1.2.2)) від відношення радіуса дії потенціалу  $b$  до постійної ґратки  $s$  для випадку  $s = 3$  зображена на рис. 8.1.

Здійснюючи сумування виразу для  $F_n$  (8.2.6) за номерами блочних структур, обчислюємо  $F_{\text{КР}}$ :

$$F_{\text{КР}} = F'_0 + F'_{\text{КР}}, \\ F'_0 = -kTN'[\ln Q(\mathcal{M}) + \ln Q(d)], \\ F'_{\text{КР}} = \sum_{n=1}^{m_\tau} F_n. \quad (8.2.8)$$

Номер  $m_\tau$ , що визначає точку виходу системи із ділянки КР при

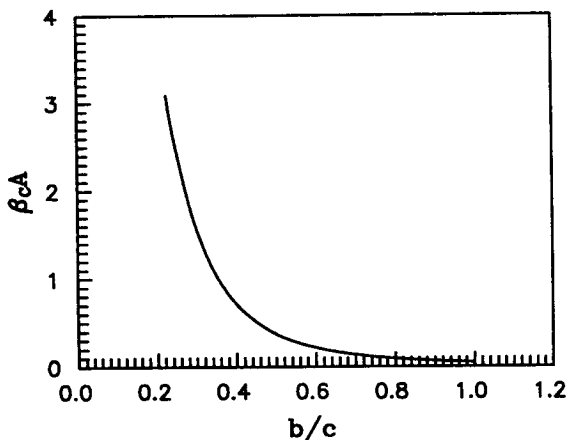


Рис. 8.1. Залежність оберненої температури фазового переходу від відношення радіуса дії потенціалу взаємодії до постійної ґратки (модель  $\rho^6$ )

$T > T_c$ , знаходимо із умови [333, 376]:

$$\frac{r_{m_\tau+1} - r^{(0)}}{r^{(0)}} = -\delta, \quad (8.2.9)$$

де  $\delta$  – постійна величина ( $\delta \leq 1$ ),  $r^{(0)}$  – одна з координат фіксованої точки,  $r_n$  характеризує коефіцієнт при другому степені змінної густини міри  $n$ -ої блочної структури. При розрахунках прийmemo  $\delta = 1$ . Тоді  $r_{m_\tau+1} = 0$  або  $d_{m_\tau+1}(0) = r_{m_\tau+1} s^{-2(m_\tau+1)} = 0$  і криві  $d_n(k)$  для всіх  $n > m_\tau$  перебуватимуть над віссю абсцис. На основі (8.2.9) і виразу для  $r_n$  (див. (6.3.14)) при  $n = m_\tau + 1$  одержуємо рівняння для  $m_\tau$ :

$$\begin{aligned} \tilde{c}_1 \tau E_1^{m_\tau+1} = f_0 \delta - c_{20} w_{12}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} E_2^{m_\tau+1} - \\ - c_{30} w_{13}^{(0)} \varphi_0^{-1} E_3^{m_\tau+1}. \end{aligned} \quad (8.2.10)$$

Величини, що входять у (8.2.10), приведені в § 6.2 та § 6.3. В області  $\tau \ll 1$  при розв'язуванні рівняння (8.2.10) зручно скористатись методом послідовних наближень, приймаючи до уваги,



що  $E_2^{m_\tau+1} \ll 1$ ,  $E_3^{m_\tau+1} \ll 1$ . У нульовому наближенні рівняння (8.2.10) представляється у вигляді

$$\tilde{c}_1 \tau E_1^{m_\tau^{(0)}+1} = f_0 \delta. \quad (8.2.11)$$

Розв'язком останнього є вираз

$$m_\tau^{(0)} = -\frac{\ln \tau}{\ln E_1} + m_0 - 1. \quad (8.2.12)$$

Тут

$$m_0 = m_c, \quad m_c = \frac{\ln(f_0 \delta / \tilde{c}_1^{(0)})}{\ln E_1}. \quad (8.2.13)$$

Вираз для  $\tilde{c}_1^{(0)}$  подано у §6.3 (див.(6.3.25)). Перше наближення записується з врахуванням малості доданків, пропорційних  $E_2^{m_\tau+1}$ ,  $E_3^{m_\tau+1}$ , для яких використовується нульове наближення, тобто права частина рівняння (8.2.10) включатиме члени, пропорційні  $E_2^{m_\tau^{(0)}+1} = E_2^{m_0} \tau^{\Delta_1}$ ,  $E_3^{m_\tau^{(0)}+1} = E_3^{m_0} \tau^{\Delta_2}$ :

$$\begin{aligned} \tilde{c}_1 \tau E_1^{m_\tau+1} = f_0 \delta - c_{20} w_{12}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} E_2^{m_\tau^{(0)}+1} - \\ - c_{30} w_{13}^{(0)} \varphi_0^{-1} E_3^{m_\tau^{(0)}+1}. \end{aligned} \quad (8.2.14)$$

Зауважимо, що в правій частині рівняння (8.2.14) надалі нехтуватимемо доданком, пропорційним  $E_3^{m_\tau^{(0)}+1}$ , оскільки в цих розрахунках враховується лише перша конфлуентна поправка (визначається доданком, пропорційним  $\tau^{\Delta_1}$ ,  $\Delta_1 = -\ln E_2 / \ln E_1$ ) і не приймається до уваги друга конфлуентна поправка (визначається доданком, пропорційним  $\tau^{\Delta_2}$ ,  $\Delta_2 = -\ln E_3 / \ln E_1$ ). Це зв'язано із тим, що внесок першої конфлуентної поправки в термодинамічні функції моделі поблизу  $T_c$  суттєвіший порівняно з незначним внеском другої поправки ( $\Delta_1$  порядку 0.5,  $\Delta_2 > 2$ ,

див. [344, 367]). Розв'язуючи (8.2.14), одержуємо

$$\begin{aligned} m_\tau &= m_\tau^{(0)} + m_{\Delta_1} \tau^{\Delta_1}, \\ m_{\Delta_1} &= \frac{m_2}{\ln E_1}, \quad m_2 = -c_{\Delta_1} \Phi_0, \\ c_{\Delta_1} &= c_{20}^{(0)} \left( \frac{\bar{c}_1^{(0)}}{f_0 \delta} \right)^{\Delta_1}, \quad \Phi_0 = \frac{w_{12}^{(0)}}{f_0 \delta \sqrt{\varphi_0}}. \end{aligned} \quad (8.2.15)$$

Величина  $c_{20}^{(0)}$  приводиться у § 6.3 (див. (6.3.27)). Підкреслимо, що у вищому наближенні рівняння (8.2.10) приводить до розв'язку типу (8.2.15), де додатково появляються доданки, пропорційні  $\tau^{2\Delta_1}$  тощо, якими при обчисленнях також нехтуватимемо. У вираз для  $m_\tau$  (8.2.15), крім поправочного доданка, входить доданок  $m_\tau^{(0)}$ , який містить величину  $m_0$  (8.2.13). Її залежність від параметра РГ  $s$  для випадку  $b = c$  зображена на рис. 8.2 суцільною кривою. Штриховою кривою зображений графік  $m_0(s)$  для мо-

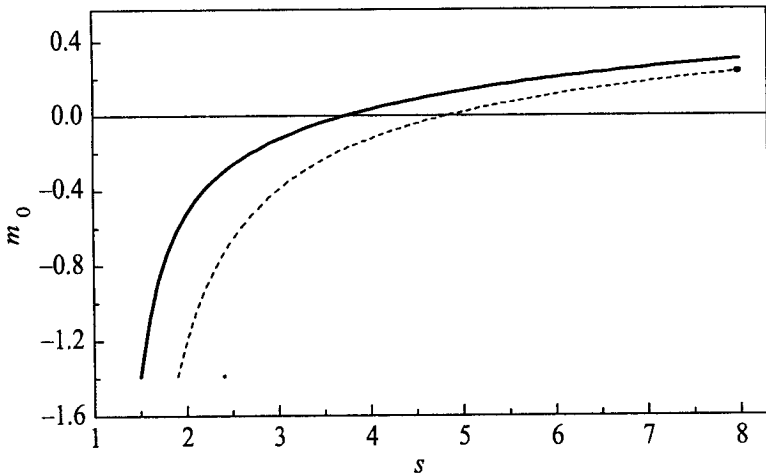


Рис. 8.2. Графік залежності величини  $m_0(s)$ , яка входить у вираз для точки виходу системи із КР. Суцільна крива відповідає моделі  $\rho^6$ , штрихова – моделі  $\rho^4$

делі  $\rho^4$  (див. (2.8.23) при  $\tau = 0$ , розділ 2). Як бачимо, при  $s = s^*$  ( $s^* = 3.5862$  для моделі  $\rho^4$ ,  $s^* = 2.7349$  для моделі  $\rho^6$ ) одержуємо близькі значення  $m_0$  для цих моделей.

Маючи вираз для  $m_\tau$  (8.2.15), повернемося до розрахунку  $F_{\text{КР}}$  (8.2.8). Враховуючи співвідношення

$$\begin{aligned} E_1^{m_\tau+1} &= \frac{f_0 \delta (1 + m_2 \tau^{\Delta_1})}{\tilde{c}_1 \tau}, \\ E_2^{m_\tau^{(0)}+1} &= \left( \frac{\tilde{c}_1^{(0)}}{f_0 \delta} \right)^{\Delta_1} \tau^{\Delta_1}, \\ s^{-3(m_\tau+1)} &= s^{-3(m_\tau^{(0)}+1)} (1 + \mathcal{N}_1^+ \tau^{\Delta_1}), \\ s^{-3(m_\tau^{(0)}+1)} &= s^{-3m_0} \tau^{3\nu}, \quad s^{-3m_0} = c_\nu^3, \\ c_\nu &= \left( \frac{\tilde{c}_1^{(0)}}{f_0 \delta} \right)^\nu, \quad \nu = \frac{\ln s}{\ln E_1}, \\ \mathcal{N}_1^+ &= -3\nu m_2 = 3\nu c_{\Delta_1} \Phi_0, \end{aligned} \tag{8.2.16}$$

знаходимо:

$$F_{\text{КР}} = -kTN' \left[ \gamma_0 + \delta_0 - \gamma_3^{(\text{КР})(0)+} \tau^{3\nu} - \gamma_3^{(\text{КР})(1)+} \tau^{3\nu+\Delta_1} \right], \tag{8.2.17}$$

де

$$\begin{aligned} \gamma_0 &= s^{-3} \left[ \frac{f_{\text{КР}}^{(0)}}{1-s^{-3}} + \frac{f_{\text{КР}}^{(1)} \varphi_0^{-1/2} \tilde{c}_1 \tau E_1}{1-E_1 s^{-3}} + \frac{f_{\text{КР}}^{(2)} \varphi_0^{-1/2} c_{20} E_2}{1-E_2 s^{-3}} + \right. \\ &+ \frac{f_{\text{КР}}^{(3)} \varphi_0^{-3/2} c_{30} E_3}{1-E_3 s^{-3}} + \frac{f_{\text{КР}}^{(4)} \varphi_0^{-3/2} \tilde{c}_1 \tau c_{20} E_1 E_2}{1-E_1 E_2 s^{-3}} + \\ &+ \frac{f_{\text{КР}}^{(5)} \varphi_0^{-5/2} \tilde{c}_1 c_{20}^2 \tau E_1 E_2^2}{1-E_1 E_2^2 s^{-3}} + \frac{f_{\text{КР}}^{(6)} \varphi_0^{-2} c_{20}^2 E_2^2}{1-E_2^2 s^{-3}} + \\ &+ \left. \frac{f_{\text{КР}}^{(7)} \varphi_0^{-1} \tilde{c}_1^2 \tau^2 E_1^2}{1-E_1^2 s^{-3}} + \frac{f_{\text{КР}}^{(8)} \varphi_0^{-2} \tilde{c}_1^2 c_{20} \tau^2 E_1^2 E_2}{1-E_1^2 E_2 s^{-3}} + \right] \end{aligned}$$

$$\left. + \frac{f_{\text{KP}}^{(9)} \varphi_0^{-3} \tilde{c}_1^2 c_{20}^2 \tau^2 E_1^2 E_2^2}{1 - E_1^2 E_2^2 s^{-3}} \right],$$

$$\delta_0 = \ln Q(\mathcal{M}) + \ln Q(d),$$

$$\gamma_3^{(\text{KP})(l)+} = c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{\gamma}_3^{(\text{KP})(l)+}, \quad l = 0, 1,$$

$$\bar{\gamma}_3^{(\text{KP})(0)+} = \gamma^+, \quad \bar{\gamma}_3^{(\text{KP})(1)+} = \gamma_{\Delta_1}^+ - \Phi_0(\gamma_{11}^+ - 3\nu\gamma^+). \quad (8.2.18)$$

Тут

$$\begin{aligned} \gamma^+ &= \frac{f_{\text{KP}}^{(0)}}{1 - s^{-3}} + \frac{f_{\text{KP}}^{(1)} \varphi_0^{-1/2} f_0 \delta}{1 - E_1 s^{-3}} + \frac{f_{\text{KP}}^{(7)} \varphi_0^{-1} (f_0 \delta)^2}{1 - E_1^2 s^{-3}}, \\ \gamma_{\Delta_1}^+ &= \frac{f_{\text{KP}}^{(2)} \varphi_0^{-1}}{1 - E_2 s^{-3}} + \frac{f_{\text{KP}}^{(4)} \varphi_0^{-3/2} f_0 \delta}{1 - E_1 E_2 s^{-3}} + \frac{f_{\text{KP}}^{(8)} \varphi_0^{-2} (f_0 \delta)^2}{1 - E_1^2 E_2 s^{-3}}, \\ \gamma_{11}^+ &= \frac{f_{\text{KP}}^{(1)} \varphi_0^{-1/2} f_0 \delta}{1 - E_1 s^{-3}} + \frac{2f_{\text{KP}}^{(7)} \varphi_0^{-1} (f_0 \delta)^2}{1 - E_1^2 s^{-3}}. \end{aligned} \quad (8.2.19)$$

Величини  $\gamma_0$  і  $\delta_0$  (8.2.18) є функціями температури, оскільки виражаються через  $\tilde{c}_1$ ,  $c_{20}$ ,  $c_{30}$  (див. (6.3.24), (6.3.26), (6.3.28)), а також  $Q(d)$  (див. (8.1.8) при  $n = 0$ ). Виділимо в них залежність від температури. В результаті для коефіцієнта  $\gamma_0$  запишемо:

$$\begin{aligned} \gamma_0 &= \gamma_0^{(0)} + \gamma_0^{(1)} \tau + \gamma_0^{(2)} \tau^2, \\ \gamma_0^{(0)} &= s^{-3} \left[ \frac{f_{\text{KP}}^{(0)}}{1 - s^{-3}} + \frac{f_{\text{KP}}^{(2)} \varphi_0^{-1} c_{20}^{(0)} E_2}{1 - E_2 s^{-3}} + \frac{f_{\text{KP}}^{(3)} \varphi_0^{-3/2} c_{30}^{(0)} E_3}{1 - E_3 s^{-3}} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{f_{\text{KP}}^{(6)} \varphi_0^{-2} (c_{20}^{(0)})^2 E_2^2}{1 - E_2^2 s^{-3}} \right], \\ \gamma_0^{(1)} &= s^{-3} \left[ \frac{f_{\text{KP}}^{(1)} \varphi_0^{-1/2} \tilde{c}_1^{(0)} E_1}{1 - E_1 s^{-3}} + \frac{f_{\text{KP}}^{(2)} \varphi_0^{-1} c_{20}^{(1)} E_2}{1 - E_2 s^{-3}} + \right. \\ &\quad + \frac{f_{\text{KP}}^{(3)} \varphi_0^{-3/2} c_{30}^{(1)} E_3}{1 - E_3 s^{-3}} + \frac{f_{\text{KP}}^{(4)} \varphi_0^{-3/2} \tilde{c}_1^{(0)} c_{20}^{(0)} E_1 E_2}{1 - E_1 E_2 s^{-3}} + \\ &\quad \left. + \frac{f_{\text{KP}}^{(5)} \varphi_0^{-5/2} \tilde{c}_1^{(0)} (c_{20}^{(0)})^2 E_1 E_2^2}{1 - E_1 E_2^2 s^{-3}} + \frac{2f_{\text{KP}}^{(6)} \varphi_0^{-2} c_{20}^{(0)} c_{20}^{(1)} E_2^2}{1 - E_2^2 s^{-3}} \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\gamma_0^{(2)} = & s^{-3} \left[ \frac{f_{\text{KP}}^{(1)} \varphi_0^{-1/2} \tilde{c}_1^{(1)} E_1}{1 - E_1 s^{-3}} + \frac{f_{\text{KP}}^{(2)} \varphi_0^{-1} c_{20}^{(2)} E_2}{1 - E_2 s^{-3}} + \right. \\
& + \frac{f_{\text{KP}}^{(3)} \varphi_0^{-3/2} c_{30}^{(2)} E_3}{1 - E_3 s^{-3}} + \frac{f_{\text{KP}}^{(4)} \varphi_0^{-3/2} (\tilde{c}_1^{(0)} c_{20}^{(1)} + \tilde{c}_1^{(1)} c_{20}^{(0)}) E_1 E_2}{1 - E_1 E_2 s^{-3}} + \\
& + \frac{f_{\text{KP}}^{(5)} \varphi_0^{-5/2} [2\tilde{c}_1^{(0)} c_{20}^{(0)} c_{20}^{(1)} + \tilde{c}_1^{(1)} (c_{20}^{(0)})^2] E_1 E_2^2}{1 - E_1 E_2^2 s^{-3}} + \\
& + \frac{f_{\text{KP}}^{(6)} \varphi_0^{-2} [(c_{20}^{(1)})^2 + 2c_{20}^{(0)} c_{20}^{(2)}] E_2^2}{1 - E_2^2 s^{-3}} + \\
& + \frac{f_{\text{KP}}^{(7)} \varphi_0^{-1} (\tilde{c}_1^{(0)})^2 E_1^2}{1 - E_1^2 s^{-3}} + \frac{f_{\text{KP}}^{(8)} \varphi_0^{-2} (\tilde{c}_1^{(0)})^2 c_{20}^{(0)} E_1^2 E_2}{1 - E_1^2 E_2 s^{-3}} + \\
& \left. + \frac{f_{\text{KP}}^{(9)} \varphi_0^{-3} (\tilde{c}_1^{(0)})^2 (c_{20}^{(0)})^2 E_1^2 E_2^2}{1 - E_1^2 E_2^2 s^{-3}} \right]. \tag{8.2.20}
\end{aligned}$$

Для  $\delta_0$  одержуємо

$$\begin{aligned}
\delta_0 &= \delta_0^{(0)} + \delta_0^{(1)} \tau + \delta_0^{(2)} \tau^2, \\
\delta_0^{(0)} &= \ln Q(\mathcal{M}) + \ln Q(d; T_c), \\
\delta_0^{(1)} &= -\frac{\sqrt{6}}{(a'_4)^{1/2}} (1 - \bar{q}) \beta_c \tilde{\Phi}(0) F_2(h_c, \alpha), \\
\delta_0^{(2)} &= -\frac{3}{a'_4} (1 - \bar{q})^2 (\beta_c \tilde{\Phi}(0))^2 [F_2^2(h_c, \alpha) - F_4(h_c, \alpha)] + \tag{8.2.21} \\
& + \frac{\sqrt{6}}{(a'_4)^{1/2}} (1 - \bar{q}) \beta_c \tilde{\Phi}(0) F_2(h_c, \alpha), \quad \bar{q} = \frac{1 + s^{-2}}{2}, \\
h_c &= \frac{\sqrt{6}}{(a'_4)^{1/2}} [a'_2 - \beta_c \tilde{\Phi}(0)(1 - \bar{q})], \quad \alpha = \frac{\sqrt{6}}{15} \frac{a'_6}{(a'_4)^{3/2}}.
\end{aligned}$$

Отже, для вільної енергії КР маємо:

$$F_{\text{КР}} = -kTN' \left[ \gamma_0^{(\text{КР})} + \gamma_1\tau + \gamma_2\tau^2 - \right. \\ \left. - \gamma_3^{(\text{КР})(0)+} \tau^{3\nu} - \gamma_3^{(\text{КР})(1)+} \tau^{3\nu+\Delta_1} \right], \quad (8.2.22)$$

$$\gamma_0^{(\text{КР})} = \gamma_0^{(0)} + \delta_0^{(0)}, \quad \gamma_k = \gamma_0^{(k)} + \delta_0^{(k)} \quad k = 1, 2.$$

Коефіцієнти  $\gamma_0^{(\text{КР})}$ ,  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  (див.(8.2.22)), як і  $m_2$  та  $\mathcal{N}_1^+$  (див. (8.2.15), (8.2.16)), неуніверсальні, оскільки в них входять величини  $\tilde{c}_1^{(l)}$ ,  $c_{20}^{(i)}$ ,  $c_{30}^{(i)}$  ( $l = 0, 1; i = 0, 1, 2$ ), які залежать від мікроскопічних параметрів гамільтоніану. Коефіцієнти  $\gamma_3^{(\text{КР})(l)+}$  ( $l = 0, 1$ ) приведені в (8.2.18). Тут величини  $\tilde{\gamma}_3^{(\text{КР})(l)+}$  не залежать від мікроскопічних параметрів. Залежні від них множники  $c_\nu$ ,  $c_{\Delta_1}$ , а також  $s_0$  подані в табл. 8.2 для різних значень  $s$  та  $b$ . При  $s = 2.7349$  основна змінна в фіксованій точці задовільняє умові  $h^{(0)} \approx 0$  (див. табл. 6.2).

Використовуючи  $F_{\text{КР}}$ , обчислимо інші термодинамічні функції системи в області КР при  $T > T_c$ . Для ентропії  $S_{\text{КР}} = -\partial F_{\text{КР}}/\partial T$ , внутрішньої енергії  $U_{\text{КР}} = F_{\text{КР}} + TS_{\text{КР}}$  і теплоємності  $C_{\text{КР}} = T\partial S_{\text{КР}}/\partial T$  знаходимо

$$S_{\text{КР}} = kN' \left[ s^{(\text{КР})(0)} + c_0\tau + u_3^{(\text{КР})(0)+} \tau^{1-\alpha} + u_3^{(\text{КР})(1)+} \tau^{1-\alpha+\Delta_1} \right], \\ U_{\text{КР}} = kTN' \left[ \gamma_1 + u_1\tau + u_3^{(\text{КР})(0)+} \tau^{1-\alpha} + u_3^{(\text{КР})(1)+} \tau^{1-\alpha+\Delta_1} \right], \\ C_{\text{КР}} = kN' \left[ c_0 + c_3^{(\text{КР})(0)+} \tau^{-\alpha} + c_3^{(\text{КР})(1)+} \tau^{\Delta_1-\alpha} \right], \quad (8.2.23)$$

Табл. 8.2. Неуніверсальні множники  $c_\nu$ ,  $c_{\Delta_1}$ , а також  $s_0$  при різних значеннях радіуса дії  $b$  потенціалу взаємодії та параметра РГ  $s$ 

$b$	$b_I$	$b_{II}$	$b_{III}$	$c$	$2c$
$s_0$	1.2825	1.5011	1.5922	4.4429	8.8858
$s = 2.0000$					
$c_\nu$	1.7006	1.6514	1.6318	1.4412	1.4303
$c_{\Delta_1}$	-0.1130	-0.1637	-0.1828	-0.3386	-0.3464
$s = 2.7349$					
$c_\nu$	1.4168	1.3764	1.3605	1.2097	1.2011
$c_{\Delta_1}$	-0.2671	-0.3075	-0.3227	-0.4468	-0.4530
$s = 3.0000$					
$c_\nu$	1.3373	1.2997	1.2849	1.1462	1.1383
$c_{\Delta_1}$	-0.3243	-0.3629	-0.3774	-0.4952	-0.5012

де

$$\begin{aligned}
 s^{(KP)(0)} &= \gamma_0^{(KP)} + \gamma_1, & c_0 &= 2(\gamma_1 + \gamma_2), \\
 u_3^{(KP)(l)+} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{u}_3^{(KP)(l)+}, & l &= 0, 1, \\
 \bar{u}_3^{(KP)(0)+} &= -3\nu \bar{\gamma}_3^{(KP)(0)+}, \\
 \bar{u}_3^{(KP)(1)+} &= -(3\nu + \Delta_1) \bar{\gamma}_3^{(KP)(1)+}, \\
 u_1 &= \gamma_1 + 2\gamma_2, & & (8.2.24) \\
 c_3^{(KP)(l)+} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{c}_3^{(KP)(l)+}, \\
 \bar{c}_3^{(KP)(0)+} &= -3\nu(3\nu - 1) \bar{\gamma}_3^{(KP)(0)+}, \\
 \bar{c}_3^{(KP)(1)+} &= -(3\nu + \Delta_1)(3\nu + \Delta_1 - 1) \bar{\gamma}_3^{(KP)(1)+}, \\
 \alpha &= 2 - 3\nu.
 \end{aligned}$$

### 8.3. Розрахунок внеску в термодинамічні характеристики системи від довгохвильових флуктуацій

Обчислення внеску у вільну енергію тривимірної моделі Ізінга від довгохвильових мод коливань спінової густини ( $k < B's^{-m_\tau}$ ) з врахуванням першої конфлуентної поправки здійснюється за схемою, запропонованою в попередніх розділах. Після виходу із КР система переходить у ГРР. В області ГРР вираз частини статистичної суми  $Z_{ГРР}$  із (8.2.1) має вигляд

$$\begin{aligned}
 Z_{ГРР} = & \int \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{m_\tau+1}} [d_{m_\tau}(k) - d_{m_\tau}(B_{m_\tau+1}, B_{m_\tau})] \rho_k \rho_{-k} - \right. \\
 & - 2\pi i \sum_{k \leq B_{m_\tau+1}} \omega_k \rho_k - \sum_{l=1}^3 \frac{(2\pi)^{2l}}{(2l)!} N_{m_\tau+1}^{1-l} \times \\
 & \times \sum_{k_1, \dots, k_{2l} \leq B_{m_\tau+1}} P_{2l}^{(m_\tau)} \omega_{k_1} \cdots \omega_{k_{2l}} \times \\
 & \left. \times \delta_{k_1 + \dots + k_{2l}} \right\} (d\rho)^{N_{m_\tau+1}} (d\omega)^{N_{m_\tau+1}}. \quad (8.3.1)
 \end{aligned}$$

Коефіцієнти  $P_{2l}^{(m_\tau)}$  визначаються співвідношеннями:

$$\begin{aligned}
 P_2^{(m_\tau)} &= \left( \frac{24}{a_4^{(m_\tau)}} \right)^{1/2} F_2(h_{m_\tau}, \alpha_{m_\tau}), \\
 P_4^{(m_\tau)} &= \frac{24}{a_4^{(m_\tau)}} s^{-d} C(h_{m_\tau}, \alpha_{m_\tau}), \\
 P_6^{(m_\tau)} &= \left( \frac{24}{a_4^{(m_\tau)}} \right)^{3/2} s^{-2d} N(h_{m_\tau}, \alpha_{m_\tau}).
 \end{aligned}$$

При розрахунку  $Z_{ГРР}$  зручно виділити дві області значень хвильових векторів. Перша – перехідна область (ПО), яка відповідає значенням  $\mathbf{k}$ , близьким до  $B_{m_\tau}$ , друга – гаусова область,



що відноситься до малих значень хвильового вектора ( $k \rightarrow 0$ ). Після інтегрування статистичної суми в декількох блочних структурах, які йдуть за точкою виходу із КР і визначають величину ПО, система описується гаусовою густиною міри. Отже, маємо

$$Z_{\text{ГГР}} = Z_{\text{ГГР}}^{(1)} Z_{\text{ГГР}}^{(2)}. \quad (8.3.2)$$

Розглянемо детальніше внесок до статистичної суми моделі від ПО.

**Перехідна область.** Ця область містить  $\tilde{m}_0$  блочних структур. Нижня межа ПО визначається точкою виходу системи із ділянки КР ( $n = m_\tau + 1$ ). Верхня межа ( $n = m_\tau + \tilde{m}_0 + 1$ ) визначає початок області, де справедливий гаусовий розподіл мод коливань густини спінового моменту. Перехід системи в область ГГР супроводжується ростом величини  $h_n$  як функції  $n$  [377]. Тому умовою для отримання  $\tilde{m}_0$  є рівність:

$$|h_{m_\tau + \tilde{m}'_0}| = \frac{A_0}{1 - s^{-3}}, \quad (8.3.3)$$

де  $A_0$  - велике число ( $A \geq 10$ ). Знайдене із (8.3.3)  $\tilde{m}'_0$  і визначає число  $\tilde{m}_0$ .

Обчислимо внесок  $F_{\text{ГГР}}^{(1)}$  у вільну енергію, що відповідає  $Z_{\text{ГГР}}^{(1)}$ . Він має вигляд

$$F_{\text{ГГР}}^{(1)} = -kTN_{m_\tau+1} \sum_{m=0}^{\tilde{m}_0} s^{-3m} f_{\text{ГГР}_1}(m), \quad (8.3.4)$$

$$f_{\text{ГГР}_1}(m) = \ln \left( \frac{2}{\pi} \right) + \frac{1}{4} \ln 24 - \frac{1}{4} \ln C(\eta_{m_\tau+m}, \xi_{m_\tau+m}) + \\ + \ln I_0(h_{m_\tau+m+1}, \alpha_{m_\tau+m+1}) + \ln I_0(\eta_{m_\tau+m}, \xi_{m_\tau+m}).$$

Із праць [317, 321, 366], які містять результати з числового розрахунку статистичної суми моделі Ізінга і дослідження РС, випливає, що в ПО еволюцію коефіцієнтів ефективних густин мір з ростом номера  $n$  достатньо добре описують розв'язки РГ типу. Тому  $F_{\text{ГГР}}^{(1)}$  розраховуватимемо з використанням розв'язків РС (6.2.1).

На основі (6.3.14) одержуємо:

$$\begin{aligned}
 r_{m_\tau+m} &= \beta \tilde{\Phi}(0) \left( \bar{r}_{m_\tau+m}^{(0)} + \bar{r}_{m_\tau+m}^{(1)} \tau^{\Delta_1} \right), \\
 \bar{r}_{m_\tau+m}^{(0)} &= f_0 (\delta E_1^{m-1} - 1), \\
 \bar{r}_{m_\tau+m}^{(1)} &= c_{\Delta_1} E_2^{m-1} \varphi_0^{-1/2} w_{12}^{(0)} e_{1m}, \\
 e_{1m} &= 1 - (E_1/E_2)^{m-1}; \\
 u_{m_\tau+m} &= (\beta \tilde{\Phi}(0))^2 \left( \bar{u}_{m_\tau+m}^{(0)} + \bar{u}_{m_\tau+m}^{(1)} \tau^{\Delta_1} \right), \\
 \bar{u}_{m_\tau+m}^{(0)} &= \varphi_0 + f_0 \delta \varphi_0^{1/2} w_{21}^{(0)} E_1^{m-1}, \\
 \bar{u}_{m_\tau+m}^{(1)} &= c_{\Delta_1} E_2^{m-1} e_{2m}, \\
 e_{2m} &= 1 - w_{12}^{(0)} w_{21}^{(0)} (E_1/E_2)^{m-1}; \\
 w_{m_\tau+m} &= (\beta \tilde{\Phi}(0))^3 \left( \bar{w}_{m_\tau+m}^{(0)} + \bar{w}_{m_\tau+m}^{(1)} \tau^{\Delta_1} \right), \\
 \bar{w}_{m_\tau+m}^{(0)} &= \psi_0 + f_0 \delta \varphi_0 w_{31}^{(0)} E_1^{m-1}, \\
 \bar{w}_{m_\tau+m}^{(1)} &= c_{\Delta_1} E_2^{m-1} \varphi_0^{1/2} w_{32}^{(0)} e_{3m}, \\
 e_{3m} &= 1 - \frac{w_{12}^{(0)} w_{31}^{(0)}}{w_{32}^{(0)}} (E_1/E_2)^{m-1}.
 \end{aligned} \tag{8.3.5}$$

Використовуючи (6.2.4), (8.3.5), для основних аргументів знаходимо:

$$\begin{aligned}
 h_{m_\tau+m} &= h_{m_\tau+m}^{(0)} \left( 1 + h_{m_\tau+m}^{(1)} \tau^{\Delta_1} \right), \\
 h_{m_\tau+m}^{(0)} &= \sqrt{6} \frac{\bar{r}_{m_\tau+m}^{(0)} + \bar{q}}{(\bar{u}_{m_\tau+m}^{(0)})^{1/2}}, \\
 h_{m_\tau+m}^{(1)} &= c_{\Delta_1} \bar{h}_{m_\tau+m}^{(1)}, \\
 \bar{h}_{m_\tau+m}^{(1)} &= E_2^{m-1} \varphi_0^{-1/2} \left( \frac{w_{12}^{(0)} e_{1m}}{\bar{r}_{m_\tau+m}^{(0)} + \bar{q}} - \frac{1}{2} \frac{\varphi_0^{1/2} e_{2m}}{\bar{u}_{m_\tau+m}^{(0)}} \right); \\
 \alpha_{m_\tau+m} &= \alpha_{m_\tau+m}^{(0)} \left( 1 + \alpha_{m_\tau+m}^{(1)} \tau^{\Delta_1} \right),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\alpha_{m_\tau+m}^{(0)} &= \frac{\sqrt{6}}{15} \frac{\bar{w}_{m_\tau+m}^{(0)}}{(\bar{u}_{m_\tau+m}^{(0)})^{3/2}}, \\ \alpha_{m_\tau+m}^{(1)} &= c_{\Delta_1} \bar{\alpha}_{m_\tau+m}^{(1)}, \\ \bar{\alpha}_{m_\tau+m}^{(1)} &= E_2^{m-1} \varphi_0^{1/2} \left( \frac{w_{32}^{(0)} e_{3m}}{\bar{w}_{m_\tau+m}^{(0)}} - \frac{3}{2} \frac{\varphi_0^{-1/2} e_{2m}}{\bar{u}_{m_\tau+m}^{(0)}} \right).\end{aligned}\quad (8.3.6)$$

Виділимо температурну залежність у виразах для проміжних аргументів

$$\begin{aligned}\eta_{m_\tau+m} &= (6s^3)^{1/2} F_2(h_{m_\tau+m}, \alpha_{m_\tau+m}) [C(h_{m_\tau+m}, \alpha_{m_\tau+m})]^{-1/2}, \\ \xi_{m_\tau+m} &= \frac{\sqrt{6}}{15} s^{-3/2} N(h_{m_\tau+m}, \alpha_{m_\tau+m}) [C(h_{m_\tau+m}, \alpha_{m_\tau+m})]^{-3/2}.\end{aligned}\quad (8.3.7)$$

Функції, що входять у (8.3.7), можна представити у вигляді рядів за степенями малих відхилень  $(h_{m_\tau+m} - h_{m_\tau+m}^{(0)})$  та  $(\alpha_{m_\tau+m} - \alpha_{m_\tau+m}^{(0)})$ . Використовуючи результати додатку Є, одержимо:

$$\begin{aligned}\eta_{m_\tau+m} &= \eta_{m_\tau+m}^{(0)} \left[ 1 - \left( \bar{\eta}_1^{(m_\tau+m)} h_{m_\tau+m}^{(0)} h_{m_\tau+m}^{(1)} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \bar{\eta}_2^{(m_\tau+m)} \alpha_{m_\tau+m}^{(0)} \alpha_{m_\tau+m}^{(1)} \right) \tau^{\Delta_1} \right], \\ \xi_{m_\tau+m} &= \xi_{m_\tau+m}^{(0)} \left[ 1 - \left( \bar{\xi}_1^{(m_\tau+m)} h_{m_\tau+m}^{(0)} h_{m_\tau+m}^{(1)} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \bar{\xi}_2^{(m_\tau+m)} \alpha_{m_\tau+m}^{(0)} \alpha_{m_\tau+m}^{(1)} \right) \tau^{\Delta_1} \right].\end{aligned}\quad (8.3.8)$$

Тут  $\eta_{m_\tau+m}^{(0)}$ ,  $\bar{\eta}_1^{(m_\tau+m)}$ ,  $\bar{\eta}_2^{(m_\tau+m)}$ ,  $\xi_{m_\tau+m}^{(0)}$ ,  $\bar{\xi}_1^{(m_\tau+m)}$ ,  $\bar{\xi}_2^{(m_\tau+m)}$  визначаються через  $F_{2l}^{*(m_\tau+m)} = I_{2l}^{*(m_\tau+m)} / I_0^{*(m_\tau+m)}$ , де

$$I_{2l}^{*(m_\tau+m)} = \int_0^\infty x^{2l} \exp(-h_{m_\tau+m}^{(0)} x^2 - x^4 - \alpha_{m_\tau+m}^{(0)} x^6) dx. \quad (8.3.9)$$

Обчислюючи на основі приведених у додатку Є виразів функції, що входять у  $f_{\text{ГР}_1}(m)$  (8.3.4), отримуємо з точністю до  $\tau^{\Delta_1}$

співвідношення:

$$\begin{aligned}
 f_{\Gamma\Gamma P_1}(m) &= f_{\Gamma\Gamma P_1}^{(0)}(m) + f_{\Gamma\Gamma P_1}^{(1)}(m)\tau^{\Delta_1}, \\
 f_{\Gamma\Gamma P_1}^{(0)}(m) &= \ln\left(\frac{2}{\pi}\right) + \frac{1}{4} \ln 24 - \frac{1}{4} \ln C(\eta_{m_\tau+m}^{(0)}, \xi_{m_\tau+m}^{(0)}) + \\
 &\quad + \ln I_0(h_{m_\tau+m+1}^{(0)}, \alpha_{m_\tau+m+1}^{(0)}) + \ln I_0(\eta_{m_\tau+m}^{(0)}, \xi_{m_\tau+m}^{(0)}), \\
 f_{\Gamma\Gamma P_1}^{(1)}(m) &= \varphi_1^{(m_\tau+m)} h_{m_\tau+m}^{(0)} h_{m_\tau+m}^{(1)} + \varphi_2^{(m_\tau+m)} \alpha_{m_\tau+m}^{(0)} \alpha_{m_\tau+m}^{(1)} + \\
 &\quad + \varphi_3^{(m_\tau+m+1)} h_{m_\tau+m+1}^{(0)} h_{m_\tau+m+1}^{(1)} + \\
 &\quad + \varphi_4^{(m_\tau+m+1)} \alpha_{m_\tau+m+1}^{(0)} \alpha_{m_\tau+m+1}^{(1)}, \\
 \varphi_k^{(m_\tau+m)} &= b_k^{(m_\tau+m)} + P_{4k}^{(m_\tau+m)}/4, \quad k = 1, 2, \\
 \varphi_3^{(m_\tau+m+1)} &= -F_2^{*(m_\tau+m+1)}, \quad \varphi_4^{(m_\tau+m+1)} = -F_6^{*(m_\tau+m+1)}.
 \end{aligned} \tag{8.3.10}$$

Величини  $b_k^{(m_\tau+m)}$ ,  $P_{4k}^{(m_\tau+m)}$  залежать як від  $F_{2l}^{*(m_\tau+m)}$ , так і від  $F_{2l}^{**(m_\tau+m)} = I_{2l}^{**(m_\tau+m)}/I_0^{**(m_\tau+m)}$ , де

$$I_{2l}^{**(m_\tau+m)} = \int_0^\infty x^{2l} \exp(-\eta_{m_\tau+m}^{(0)} x^2 - x^4 - \xi_{m_\tau+m}^{(0)} x^6) dx. \tag{8.3.11}$$

Як бачимо, важливим моментом при розрахунку  $f_{\Gamma\Gamma P_1}(m)$  є представлення спеціальних функцій у вигляді розкладів за степенями малих відхилень основних аргументів  $h_{m_\tau+m}$  і  $\alpha_{m_\tau+m}$  від їх значень у нульовому наближенні, тобто від  $h_{m_\tau+m}^{(0)}$  і  $\alpha_{m_\tau+m}^{(0)}$  із (8.3.6). Пригадаємо, що в області КР враховувались відхилення основних аргументів  $h_n$  і  $\alpha_n$  ( $n \leq m_\tau$ ) від їх значень в фіксованій точці  $h^{(0)}$  і  $\alpha^{(0)}$ .

Для здійснення сумування за  $m$  в  $F_{\Gamma\Gamma P}^{(1)}$  (8.3.4) потрібно мати величину  $\tilde{m}_0$ . Враховуючи у виразі для  $h_{m_\tau+\tilde{m}'_0}$  (див. (8.3.6))

тільки перший доданок, згідно (8.3.3) знаходимо:

$$\begin{aligned}\tilde{m}'_0 &= \frac{\ln L_0 - \ln \delta}{\ln E_1} + 1, \\ L_0 &= A_1 + (A_1^2 - A_2)^{1/2}, \\ A_1 &= 1 - \frac{\bar{q}}{f_0} + \frac{A_0^2 \varphi_0^{1/2} w_{21}^{(0)}}{12 f_0 (1 - s^{-3})^2}, \\ A_2 &= 1 - 2 \frac{\bar{q}}{f_0} + \left(\frac{\bar{q}}{f_0}\right)^2 - \frac{A_0^2 \varphi_0}{6 f_0^2 (1 - s^{-3})^2}.\end{aligned}\tag{8.3.12}$$

У подальших розрахунках за  $\tilde{m}_0$  вибираємо найближче до  $\tilde{m}'_0$  ціле число. Оцінка величини  $\tilde{m}'_0$  показала (рис. 8.3), що вона несуттєво відрізняється від аналогічної у випадку моделі  $\rho^4$  величини  $m''_0$  (В.5). Кінцевий результат для  $F_{\text{ГГР}}^{(1)}$  (8.3.4) запишемо у вигляді:

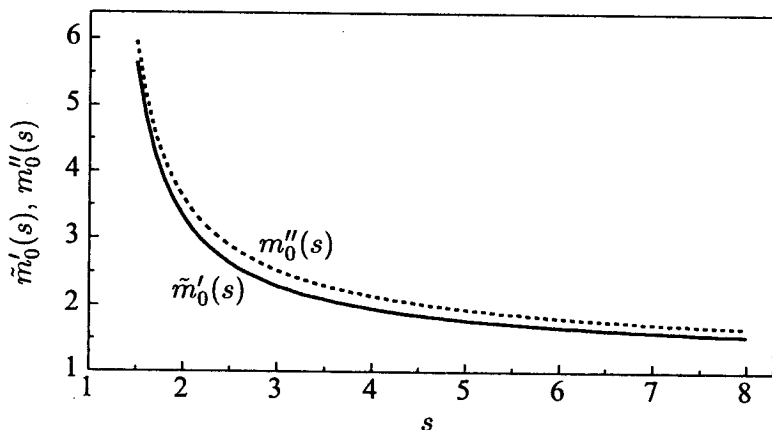


Рис. 8.3. Криві залежності величин  $\tilde{m}'_0(s)$  (модель  $\rho^6$ ) та  $m''_0(s)$  (модель  $\rho^4$ ), що визначають величину ПО

$$\begin{aligned}
 F_{\Gamma\Gamma P}^{(1)} &= -kTN' \left[ f_{\text{ПО}}^{(0)} \tau^{3\nu} + f_{\text{ПО}}^{(1)} \tau^{3\nu+\Delta_1} \right], \\
 f_{\text{ПО}}^{(l)} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{f}_{\text{ПО}}^{(l)}, \quad l = 0, 1, \\
 \bar{f}_{\text{ПО}}^{(0)} &= \sum_{m=0}^{\tilde{m}_0} s^{-3m} f_{\Gamma\Gamma P_1}^{(0)}(m), \\
 \bar{f}_{\text{ПО}}^{(1)} &= \bar{f}_{\text{ПО}1} + 3\nu\Phi_0 \bar{f}_{\text{ПО}}^{(0)}, \\
 \bar{f}_{\text{ПО}1} &= c_{\Delta_1}^{-1} \sum_{m=0}^{\tilde{m}_0} s^{-3m} f_{\Gamma\Gamma P_1}^{(1)}(m).
 \end{aligned} \tag{8.3.13}$$

Перейдемо до обчислення внеску у вільну енергію системи від довгохвильових мод коливань в області хвильових векторів

$$k \leq B' s^{-m'_\tau}, \quad m'_\tau = m_\tau + \tilde{m}_0 + 2. \tag{8.3.14}$$

**Область малих значень хвильового вектора ( $k \rightarrow 0$ ).** Вводячи в розгляд нескінченно мале зовнішнє магнетне поле  $\mathcal{H}$  ( $h = \mu_B \mathcal{H}$ ,  $\mu_B$  – магнетон Бора), для частини вільної енергії, що відповідає  $Z_{\Gamma\Gamma P}^{(2)}$  із (8.3.2), одержуємо:

$$F_{\Gamma\Gamma P}^{(2)} = \frac{1}{2} kT \left[ N_{m'_\tau} \ln P_2^{(m'_\tau-1)} + \sum_{k=0}^{B_{m'_\tau}} \ln \tilde{d}_{m'_\tau}(k) - \frac{\beta^2 N h^2}{\tilde{d}_{m'_\tau}(0)} \right]. \tag{8.3.15}$$

Запис кінцевої формули для  $F_{\Gamma\Gamma P}^{(2)}$  вимагає розгляду виразів для величин:

$$\begin{aligned}
 P_2^{(m'_\tau-1)} &= 2h_{m'_\tau-1} F_2(h_{m'_\tau-1}, \alpha_{m'_\tau-1}) [d_{m'_\tau-1}(B_{m'_\tau}, B_{m'_\tau-1})]^{-1}, \\
 \tilde{d}_{m'_\tau}(k) &= [P_2^{(m'_\tau-1)}]^{-1} + \beta \tilde{\Phi}(B_{m'_\tau}, B_{m'_\tau-1}) - \beta \tilde{\Phi}(k).
 \end{aligned} \tag{8.3.16}$$

Для  $d_{m'_\tau-1}(B_{m'_\tau}, B_{m'_\tau-1})$  маємо стандартне представлення

$$d_{m'_\tau-1}(B_{m'_\tau}, B_{m'_\tau-1}) = s^{-2(m'_\tau-1)} (r_{m'_\tau-1} + q), \tag{8.3.17}$$

де

$$r_{m'_\tau-1} = \beta \tilde{\Phi}(0) \left( \bar{r}_{m'_\tau-1}^{(0)} + \bar{r}_{m'_\tau-1}^{(1)} \tau^{\Delta_1} \right), \quad (8.3.18)$$

а  $\bar{r}_{m'_\tau-1}^{(0)}$ ,  $\bar{r}_{m'_\tau-1}^{(1)}$  відповідають  $\bar{r}_{m_\tau+m}^{(0)}$ ,  $\bar{r}_{m_\tau+m}^{(1)}$  із (8.3.5) при  $m = \tilde{m}_0 + 1$ . Величина  $q = \bar{q} \beta \tilde{\Phi}(0)$  визначає середнє значення потенціалу в  $n$ -ій блочній структурі  $\beta \tilde{\Phi}(B_{n+1}, B_n) = \beta \tilde{\Phi}(0) - q/s^{2n}$ . В якості

$$\begin{aligned} h_{m'_\tau-1} &= h_{m'_\tau-1}^{(0)} \left( 1 + h_{m'_\tau-1}^{(1)} \tau^{\Delta_1} \right), \\ \alpha_{m'_\tau-1} &= \alpha_{m'_\tau-1}^{(0)} \left( 1 + \alpha_{m'_\tau-1}^{(1)} \tau^{\Delta_1} \right) \end{aligned} \quad (8.3.19)$$

виступають відповідні величини із (8.3.6) при  $m = \tilde{m}_0 + 1$ .

Позначаючи через  $p$  вираз

$$p = h_{m'_\tau-1} F_2 \left( h_{m'_\tau-1}, \alpha_{m'_\tau-1} \right), \quad (8.3.20)$$

і представляючи його у вигляді

$$p^{-1} = p_0 (1 + p_1 \tau^{\Delta_1}), \quad (8.3.21)$$

для коефіцієнтів  $p_0$ ,  $p_1$  знаходимо:

$$\begin{aligned} p_0 &= \left[ h_{m'_\tau-1}^{(0)} p_{20}^{(m'_\tau-1)} \right]^{-1}, \\ p_1 &= -h_{m'_\tau-1}^{(1)} \left( 1 - p_{21}^{(m'_\tau-1)} h_{m'_\tau-1}^{(0)} \right) + p_{22}^{(m'_\tau-1)} \alpha_{m'_\tau-1}^{(0)} \alpha_{m'_\tau-1}^{(1)}. \end{aligned} \quad (8.3.22)$$

Зазначимо, що для  $F_2(h_{m'_\tau-1}, \alpha_{m'_\tau-1})$  тут ми використали розклад із додатку Є, який з точністю до  $\tau^{\Delta_1}$  дає змогу отримати

співвідношення:

$$\begin{aligned}
 F_2(h_{m'_\tau-1}, \alpha_{m'_\tau-1}) &= p_{20}^{(m'_\tau-1)} \left[ 1 - \left( p_{21}^{(m'_\tau-1)} h_{m'_\tau-1}^{(0)} h_{m'_\tau-1}^{(1)} + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + p_{22}^{(m'_\tau-1)} \alpha_{m'_\tau-1}^{(0)} \alpha_{m'_\tau-1}^{(1)} \right) \tau^{\Delta_1} \right], \\
 p_{20}^{(m'_\tau-1)} &= F_2^{*(m'_\tau-1)}, \quad p_{21}^{(m'_\tau-1)} = \frac{F_4^{*(m'_\tau-1)}}{F_2^{*(m'_\tau-1)}} - F_2^{*(m'_\tau-1)}, \\
 p_{22}^{(m'_\tau-1)} &= \frac{F_8^{*(m'_\tau-1)}}{F_2^{*(m'_\tau-1)}} - F_6^{*(m'_\tau-1)}. \tag{8.3.23}
 \end{aligned}$$

Тут  $F_{2l}^{*(m'_\tau-1)} = I_{2l}^{*(m'_\tau-1)} / I_0^{*(m'_\tau-1)}$ , де

$$I_{2l}^{*(m'_\tau-1)} = \int_0^\infty x^{2l} \exp(-h_{m'_\tau-1}^{(0)} x^2 - x^4 - \alpha_{m'_\tau-1}^{(0)} x^6) dx. \tag{8.3.24}$$

З врахуванням (8.3.21) для  $P_2^{(m'_\tau-1)}$ ,  $\tilde{d}_{m'_\tau}(k)$  із (8.3.16) маємо:

$$\begin{aligned}
 P_2^{(m'_\tau-1)} &= \left\{ \frac{1}{2} s^{-2(m'_\tau-1)} \beta \tilde{\Phi}(0) p_0 (\bar{r}_{m'_\tau-1}^{(0)} + \bar{q}) \left[ 1 + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \left( \frac{\bar{r}_{m'_\tau-1}^{(1)}}{\bar{r}_{m'_\tau-1}^{(0)} + \bar{q}} + p_1 \right) \tau^{\Delta_1} \right] \right\}^{-1}, \\
 \tilde{d}_{m'_\tau}(k) &= s^{-2(m'_\tau-1)} \beta \tilde{\Phi}(0) \tilde{G} + 2\beta \tilde{\Phi}(0) b^2 k^2, \tag{8.3.25} \\
 \tilde{G} &= g_0 (1 + g_1 \tau^{\Delta_1}), \\
 g_0 &= \frac{1}{2} \left[ \bar{r}_{m'_\tau-1}^{(0)} p_0 + (p_0 - 2) \bar{q} \right], \\
 g_1 &= \frac{1}{2} \frac{p_0}{g_0} \left[ p_1 (\bar{r}_{m'_\tau-1}^{(0)} + \bar{q}) + \bar{r}_{m'_\tau-1}^{(1)} \right].
 \end{aligned}$$

Сума  $\frac{1}{2} \sum_{k=0}^{B_{m'_\tau}} \ln \tilde{d}_{m'_\tau}(k)$ , що входить у  $F_{\Gamma\Gamma P}^{(2)}$  (8.3.15), розраховується з допомогою переходу до сферичної зони Бріллюена та ін-



тегрування за  $k$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{B_{m'_\tau}} \ln \tilde{d}_{m'_\tau}(k) &= N_{m'_\tau} \left\{ \frac{1}{2} \ln(\tilde{G} + s^{-2}) + \ln s - \right. \\ &\quad - m'_\tau \ln s + \frac{1}{2} \ln(\beta \tilde{\Phi}(0)) - \frac{1}{3} + \tilde{G} s^2 - \\ &\quad \left. - (\tilde{G} s^2)^{3/2} \operatorname{arctg} \left[ (\tilde{G} s^2)^{-1/2} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (8.3.26)$$

Одержані вирази (8.3.25), (8.3.26) дають змогу записати  $F_{\Gamma\Gamma\rho}^{(2)}$  у вигляді:

$$\begin{aligned} F_{\Gamma\Gamma\rho}^{(2)} &= -kTN's^{-3m'_\tau} \left[ f^{(0)} + f^{(1)} \tau^{\Delta_1} \right] - \\ &\quad - \beta N h^2 s^{2(m'_\tau-1)} \left[ 2\beta \tilde{\Phi}(0) g_0 \right]^{-1} (1 - g_1 \tau^{\Delta_1}), \\ f^{(0)} &= -\frac{1}{2} \ln \left( \frac{s^{-2} + g_0}{g_0 + \bar{q}} \right) + \frac{1}{3} - g'_0 \left[ 1 - \sqrt{g'_0} \operatorname{arctg} \left( \frac{1}{\sqrt{g'_0}} \right) \right], \\ f^{(1)} &= \frac{1}{2} \left( \frac{g_0 g_1}{g_0 + \bar{q}} - \frac{g_1}{(g'_0)^{-1} + 1} - \frac{g'_0 g_1}{(g'_0)^{-1} + 1} \right) - \\ &\quad - g'_0 g_1 \left[ 1 - \frac{3}{2} \sqrt{g'_0} \operatorname{arctg} \left( \frac{1}{\sqrt{g'_0}} \right) \right], \quad g'_0 = s^2 g_0. \end{aligned} \quad (8.3.27)$$

Виділяючи температурну залежність у множниках  $s^{-3m'_\tau}$ ,  $s^{2(m'_\tau-1)}$ , приходимо до кінцевої формули для  $F_{\Gamma\Gamma\rho}^{(2)}$ :

$$\begin{aligned} F_{\Gamma\Gamma\rho}^{(2)} &= -kTN' \left[ f^{(0)'} \tau^{3\nu} + f^{(1)'} \tau^{3\nu + \Delta_1} \right] - \\ &\quad - \beta N \gamma_4^+ h^2 \tau^{-2\nu} (1 + a_\chi^+ \tau^{\Delta_1}), \\ f^{(l)'} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{f}^{(l)'}, \quad \bar{f}^{(0)'} = s^{-3(\bar{m}_0+1)} f^{(0)}, \\ \bar{f}^{(1)'} &= \bar{f}_{1'} + 3\nu \Phi_0 \bar{f}^{(0)'}, \quad \bar{f}_{1'} = c_{\Delta_1}^{-1} s^{-3(\bar{m}_0+1)} f^{(1)}, \\ \gamma_4^+ &= c_\nu^{-2} \bar{\gamma}_4^+ / (\beta \tilde{\Phi}(0)), \quad \bar{\gamma}_4^+ = s^{2\bar{m}_0} / (2g_0), \\ a_\chi^+ &= -g_1 - 2\nu c_{\Delta_1} \Phi_0. \end{aligned} \quad (8.3.28)$$

Для загального виразу  $F_{\text{ГГР}} = F_{\text{ГГР}}^{(1)} + F_{\text{ГГР}}^{(2)}$ , який відповідає внеску у вільну енергію від довгохвильових мод коливань густини спінового моменту, на основі (8.3.13), (8.3.28) маємо:

$$\begin{aligned} F_{\text{ГГР}} &= -kTN' \left[ f_{\text{ГГР}}^{(0)} \tau^{3\nu} + f_{\text{ГГР}}^{(1)} \tau^{3\nu+\Delta_1} \right] - \\ &\quad - \beta N \gamma_4^+ h^2 \tau^{-2\nu} (1 + a_x^+ \tau^{\Delta_1}), \\ f_{\text{ГГР}}^{(l)} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{f}_{\text{ГГР}}^{(l)}, \quad \bar{f}_{\text{ГГР}}^{(l)} = \bar{f}_{\text{ПО}}^{(l)} + \bar{f}^{(l)'} . \end{aligned} \quad (8.3.29)$$

При  $\mathcal{H} = 0$  ентропія, внутрішня енергія та теплоємність системи, що відповідають ГГР, визначаються наступними співвідношеннями:

$$\begin{aligned} S_{\text{ГГР}} &= kN' \left[ u_3^{(\text{ГГР})(0)} \tau^{1-\alpha} + u_3^{(\text{ГГР})(1)} \tau^{1-\alpha+\Delta_1} \right], \\ U_{\text{ГГР}} &= kTN' \left[ u_3^{(\text{ГГР})(0)} \tau^{1-\alpha} + u_3^{(\text{ГГР})(1)} \tau^{1-\alpha+\Delta_1} \right], \\ C_{\text{ГГР}} &= kN' \left[ c_3^{(\text{ГГР})(0)} \tau^{-\alpha} + c_3^{(\text{ГГР})(1)} \tau^{\Delta_1-\alpha} \right], \end{aligned} \quad (8.3.30)$$

де

$$\begin{aligned} u_3^{(\text{ГГР})(l)} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{u}_3^{(\text{ГГР})(l)}, \\ \bar{u}_3^{(\text{ГГР})(0)} &= 3\nu \bar{f}_{\text{ГГР}}^{(0)}, \\ \bar{u}_3^{(\text{ГГР})(1)} &= (3\nu + \Delta_1) \bar{f}_{\text{ГГР}}^{(1)}, \\ c_3^{(\text{ГГР})(l)} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{c}_3^{(\text{ГГР})(l)}, \\ \bar{c}_3^{(\text{ГГР})(0)} &= 3\nu(3\nu - 1) \bar{f}_{\text{ГГР}}^{(0)}, \\ \bar{c}_3^{(\text{ГГР})(1)} &= (3\nu + \Delta_1)(3\nu + \Delta_1 - 1) \bar{f}_{\text{ГГР}}^{(1)}. \end{aligned} \quad (8.3.31)$$

У результаті послідовного врахування коротко- і довгохвильових мод коливань спінової густини розрахуємо повні вирази для вільної енергії та інших термодинамічних функцій тривимірної моделі Ізінга біля точки фазового переходу.

## 8.4. Термодинамічні характеристики системи при $T > T_c$

За відсутності зовнішнього поля вільна енергія системи (8.1.12) з врахуванням (8.2.22) і (8.3.29) набуває вигляду:

$$\begin{aligned}
 F &= -kTN' \left[ \gamma_0 + \gamma_1 \tau + \gamma_2 \tau^2 + \gamma_3^{(0)+} \tau^{3\nu} + \gamma_3^{(1)+} \tau^{3\nu+\Delta_1} \right], \\
 \gamma_0 &= s_0^3 \ln 2 + \gamma_0^{(KP)}, \quad \gamma_3^{(l)+} = c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{\gamma}_3^{(l)+}, \\
 \bar{\gamma}_3^{(l)+} &= -\bar{\gamma}_3^{(KP)(l)+} + \bar{f}_{ГГР}^{(l)}, \quad l = 0, 1.
 \end{aligned} \tag{8.4.1}$$

Коефіцієнти  $\gamma_1, \gamma_2$  подані в (8.2.22). Доданки, пропорційні цілим степеням  $\tau$  у (8.4.1), виникають завдяки врахуванню лише короткохвильових мод коливань. Члени, пропорційні до  $\tau^{3\nu}, \tau^{3\nu+\Delta_1}$  (неаналітична частина вільної енергії), формуються в результаті врахування як коротко-, так і довгохвильових мод коливань. Причому перша конфлуентна поправка виникає при врахуванні у розв'язках (6.3.14) РС (6.2.1) меншого власного значення  $E_2$  матриці лінійного перетворення РГ (6.2.16).

Основна перевага виразу для  $F$  полягає в наявності співвідношень, які зв'язують його коефіцієнти з мікроскопічними параметрами системи і координатами фіксованої точки РС. У коефіцієнтах  $\gamma_3^{(l)+}$  ( $l = 0, 1$ ) залежність від мікроскопічних параметрів виділена (див. (8.4.1)). Вони представлені у вигляді добутку універсальної частини  $\bar{\gamma}_3^{(l)+}$  і неуніверсального множника, залежного через  $\tilde{c}_1^{(0)}$  (6.3.25),  $c_{20}^{(0)}$  (6.3.27) від мікроскопічних параметрів. Подібно представляються основні критичні амплітуди і амплітуди конфлуентної поправки теплоємності та інших термодинамічних характеристик системи. Коефіцієнти  $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2$  для різних значень параметра  $s$  і радіуса ефективної дії потенціалу  $b$  містяться в табл. 8.3, а універсальні величини  $\bar{\gamma}_3^{(l)+}$  – у табл. 8.4.

Коефіцієнти у виразах для ентропії, внутрішньої енергії, теплоємності виражаються через коефіцієнти вільної енергії. Для цих величин при  $\mathcal{H} = 0$  з врахуванням першої конфлуентної по-

Табл. 8.3. Коефіцієнти  $\gamma_0$ ,  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  виразу для вільної енергії  $F$  (8.4.1)

$b$	$b_I$	$b_{II}$	$b_{III}$	$c$	$2c$
$s = 2.0000$					
$\gamma_0$	1.8758	2.7464	3.1962	61.1798	486.699
$\gamma_1$	-0.8032	-0.7759	-0.7651	-0.6734	-0.6701
$\gamma_2$	-4.4816	-3.9551	-3.7548	-2.0482	-1.9599
$s = 2.7349$					
$\gamma_0$	1.8776	2.7496	3.2000	61.1930	486.713
$\gamma_1$	-0.7063	-0.6952	-0.6913	-0.6924	-0.6978
$\gamma_2$	-4.6948	-4.1735	-3.9764	-2.2672	-2.1665
$s = 3.0000$					
$\gamma_0$	1.8789	2.7516	3.2023	61.1999	486.720
$\gamma_1$	-0.6867	-0.6795	-0.6773	-0.7020	-0.7100
$\gamma_2$	-4.5304	-4.0342	-3.8466	-2.1971	-2.0936

Табл. 8.4. Універсальні складові коефіцієнтів неаналітичної частини вільної енергії

$s$	$\bar{\gamma}_3^{(0)+}$	$\bar{\gamma}_3^{(1)+}$
2.0000	0.9699	0.6508
2.7349	1.8654	0.7263
3.0000	2.1770	0.7162

правки одержуємо:

$$\begin{aligned}
 S &= kN' \left[ s^{(0)} + c_0\tau + u_3^{(0)+} \tau^{1-\alpha} + u_3^{(1)+} \tau^{1-\alpha+\Delta_1} \right], \\
 U &= kTN' \left[ \gamma_1 + u_1\tau + u_3^{(0)+} \tau^{1-\alpha} + u_3^{(1)+} \tau^{1-\alpha+\Delta_1} \right], \\
 C &= kN' \left[ c_0 + c_3^{(0)+} \tau^{-\alpha} + c_3^{(1)+} \tau^{\Delta_1-\alpha} \right].
 \end{aligned}
 \tag{8.4.2}$$

Тут

$$\begin{aligned}
 s^{(0)} &= \gamma_0 + \gamma_1, \\
 u_3^{(l)+} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{u}_3^{(l)+}, \\
 \bar{u}_3^{(0)+} &= 3\nu \bar{\gamma}_3^{(0)+}, \quad \bar{u}_3^{(1)+} = (3\nu + \Delta_1) \bar{\gamma}_3^{(1)+}, \\
 c_3^{(l)+} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{c}_3^{(l)+}, \\
 \bar{c}_3^{(0)+} &= 3\nu(3\nu - 1) \bar{\gamma}_3^{(0)+}, \\
 \bar{c}_3^{(1)+} &= (3\nu + \Delta_1)(3\nu + \Delta_1 - 1) \bar{\gamma}_3^{(1)+}.
 \end{aligned} \tag{8.4.3}$$

Коефіцієнти  $c_0$ ,  $u_1$  подані в (8.2.24).

Формулу для теплоємності (див. (8.4.2)) досліджуваної моделі можна переписати у вигляді [379, 380]

$$\begin{aligned}
 \frac{C}{kN'} &= \frac{A^+}{\alpha} \tau^{-\alpha} (1 + \alpha a_c^+ \tau^{\Delta_1}) + B^+, \\
 A^+ &= c_\nu^3 \alpha \bar{c}_3^{(0)+}, \quad a_c^+ = \frac{c_{\Delta_1}}{\alpha} \frac{\bar{c}_3^{(1)+}}{\bar{c}_3^{(0)+}}, \quad B^+ = c_0.
 \end{aligned} \tag{8.4.4}$$

Сприйнятливість системи на одну частинку

$$\chi = -\frac{1}{N} \frac{\partial^2 F_{\text{ГГР}}}{\partial \mathcal{H}^2} \tag{8.4.5}$$

можна обчислити, використовуючи (8.3.29). При нескінченно малих значеннях зовнішнього поля  $\mathcal{H}$  поблизу  $T_c$  вона задається виразом:

$$\begin{aligned}
 \chi &= \Gamma^+ \tau^{-\gamma} (1 + a_\chi^+ \tau^{\Delta_1}) \frac{\mu_B^2}{\bar{\Phi}(0)}, \\
 \Gamma^+ &= 2c_\nu^{-2} \bar{\gamma}_4^+, \quad \gamma = 2\nu, \\
 a_\chi^+ &= c_{\Delta_1} \bar{a}_\chi^+, \quad \bar{a}_\chi^+ = -\bar{g}_1 - 2\nu \Phi_0, \quad \bar{g}_1 = \frac{g_1}{c_{\Delta_1}}.
 \end{aligned} \tag{8.4.6}$$

Табл. 8.5. Значення коефіцієнтів у виразах для теплоємності  $C/kN'$  (8.4.4) та сприйнятливості  $\chi$  (8.4.6)

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

Тут величина  $\bar{g}_1$  не залежить від мікроскопічних параметрів і обчислюється в результаті виключення із  $g_1$  (8.3.25) неуніверсального фактора  $c_{\Delta_1} = c_{20}^{(0)} [\bar{z}_1^{(0)} / (f_0 \delta)]^{\Delta_1}$ . Коефіцієнт  $\bar{\gamma}_4^+$  приведений в (8.3.28).

Коефіцієнти для теплоємності  $C/kN'$  (8.4.4) та сприйнятливості  $\chi$  (8.4.6) подано в табл. 8.5.

Слід підкреслити, що обчислені амплітуди конфлуентних поправок  $a_c^+$ ,  $a_\chi^+$  узгоджуються із результатами праці [132], де роз-

глядаються поправки до скейлінгових амплітуд для моделей Ізінга із взаємодією між найближчими сусідами на простій кубічній, об'ємоцентрованій кубічній і гранецентрованій кубічній ґратках. У [132] показано, що амплітуди поправок для сприйнятливості, кореляційної довжини, теплоємності та спонтанної намагніченості мають від'ємний знак для всіх трьох ґраток. Там же зазначено узгодження одержаних результатів з результатами високо-температурних розкладів і даними теоретико-польового аналізу.

## Розділ 9

# Термодинамічні характеристики ізінгоподібної системи в наближенні моделі $\rho^6$ з врахуванням конфлуентної поправки. Низькотемпературна область

У цьому розділі на основі моделі  $\rho^6$  викладено спосіб розрахунку термодинамічних характеристик тривимірної однокомпонентної спінової системи в області температур нижче від критичної. Розроблена методика врахування першої конфлуентної поправки. Цей спосіб розрахунку розвинутий в працях [381, 382] і є логічним продовженням праць [344, 367, 377, 383], в яких термодинамічні функції обчислювались у рамках моделі  $\rho^6$  без врахування конфлуентних поправок.

Важливе місце в цьому розділі відводиться розрахунку мікроскопічного аналога вільної енергії Ландау, аналізу коефіцієнтів у виразі для нього.

У низькотемпературній області ( $T < T_c$ ) для різних радіусів ефективної дії експонентно спадного потенціалу взаємодії обчислено вираз для середнього спінового моменту, знайдені основні критичні амплітуди та амплітуди конфлуентної поправки теплоємності і сприйнятливості системи. Приведені графіки температурних залежностей ентропії та інших термодинамічних характеристик в околі  $T_c$  для різних значень вказаного радіуса. Прослід-



ковано поведінку вільної енергії системи в точці фазового переходу, середнього спінового моменту, теплоємності за умов зростання відношення радіуса дії потенціалу до постійної простої кубічної ґратки. Показано, що врахування шостого степеня змінної в показнику експоненти розподілу мод коливань густини спінового моменту приводить до послаблення залежності термодинамічних функцій системи від параметра РГ  $s$ . Результати представлених у розділі розрахунків, їх порівняння з даними інших авторів підтверджують висновок про те, що модель  $\rho^6$  порівняно з моделлю  $\rho^4$  забезпечує кількісний опис критичної поведінки тривимірного ізінґівського феромагнетика.

Розвинута в цьому розділі методика розрахунку термодинамічних характеристик однокомпонентної спінової системи може бути узагальнена на випадок системи з  $n$ -компонентним параметром порядку.

## 9.1. Схема розрахунку вільної енергії системи при $T < T_c$

Як і при  $T > T_c$ , вільну енергію системи обчислюватимемо, розділяючи внески від коротко- і довгохвильових мод коливань спінової густини. При  $T < T_c$  маємо:

$$F = F_0 + F_{\text{КР}} + F_{\text{ІГР}}, \quad (9.1.1)$$

де  $F_0 = -kTN \ln 2$  відповідає вільній енергії невзаємодіючих спінів,  $F_{\text{КР}}$  – внеску у вільну енергію від короткохвильових мод коливань густини спінового моменту (область критичного режиму), а  $F_{\text{ІГР}}$  – від довгохвильових мод коливань (область інверсного гаусового режиму).

В області КР справедливі розв'язки РС РГ типу (6.3.14). ІГР, на відміну від граничного гаусового режиму при  $T > T_c$ , описується негаусовою густиною міри. Зазначимо, що у випадку  $T < T_c$  в системі виникає відмінний від нуля параметр порядку. Він не вводиться як незалежна величина, а визначається прямими розрахунками. Це можливо тому, що серед множини КЗ є змінна  $\rho_0$ , зв'язана із параметром порядку. Тільки після виділення вільної енергії впорядкування розподіл стає гаусовим.

Коротко- і довгохвильові фази флуктуацій спінової густини при  $T < T_c$  розділяє блочна структура з номером  $\mu_\tau$ . КР існує для номерів  $n \leq \mu_\tau$ , а ІГР – для  $n > \mu_\tau$ . Умовою для визначення  $\mu_\tau$  є рівність [381, 382]

$$\frac{r_{\mu_\tau+1} - r^{(0)}}{r^{(0)}} = \delta. \quad (9.1.2)$$

Тут  $\delta$  – постійна величина ( $\delta \leq 1$ ),  $r_{\mu_\tau+1}$  визначається із розв'язків РС,  $r^{(0)}$  відповідає одній із координат фіксованої точки. У розрахунках виберемо  $\delta = 1$ , що узгоджується з такою ж умовою для  $\delta$ , використаною нами при  $T > T_c$  (див. §8.2). Згідно (9.1.2) отримуємо рівняння:

$$\tilde{c}_1 |\tau| E_1^{\mu_\tau+1} = f_0 \delta + c_{20} w_{12}^{(0)} \varphi_0^{-1/2} E_2^{\mu_\tau+1} + c_{30} w_{13}^{(0)} \varphi_0^{-1} E_3^{\mu_\tau+1}, \quad (9.1.3)$$

де

$$\begin{aligned} \tilde{c}_1 &= \tilde{c}_1^{(0)} - \tilde{c}_1^{(1)} |\tau|, \\ c_{20} &= c_{20}^{(0)} - c_{20}^{(1)} |\tau| + c_{20}^{(2)} |\tau|^2, \\ c_{30} &= c_{30}^{(0)} - c_{30}^{(1)} |\tau| + c_{30}^{(2)} |\tau|^2. \end{aligned} \quad (9.1.4)$$

Величини, що входять у (9.1.3), (9.1.4), означені у §6.2 та §6.3.

Як і у випадку  $T > T_c$ , (9.1.3) розв'язуватимемо методом послідовних наближень. На основі двох наближень (нульового та першого) знаходимо:

$$\begin{aligned} \mu_\tau &= \mu_\tau^{(0)} - m_{\Delta_1} |\tau|^{\Delta_1}, \\ \mu_\tau^{(0)} &= -\frac{\ln |\tau|}{\ln E_1} + \mu_0 - 1, \quad \mu_0 = m_c. \end{aligned} \quad (9.1.5)$$

Величини  $m_{\Delta_1}$ ,  $\Delta_1$ ,  $m_c$  співпадають з відповідними величинами при  $T > T_c$  (див. розділ 8).

Вираз для номера блочної структури  $\mu_\tau$ , який визначає точку виходу системи із ділянки КР при  $T < T_c$ , дає змогу знайти як  $F_{\text{КР}}$ , так і  $F_{\text{ІГР}}$ . Перейдемо до цих розрахунків. Зазначимо, що обчислення термодинамічних характеристик проводиться з врахуванням доданку, який пропорційний  $|\tau|^{\Delta_1}$  і визначає першу конфлуентну поправку.

## 9.2. Внески до термодинамічних функцій системи від області критичного режиму

Розрахунок внеску у вільну енергію системи від області КР  $F_{\text{КР}}$ , як і при  $T > T_c$ , пов'язаний із сумуванням парціальних вільних енергій за номерами блочних структур. Виділяючи явну залежність від номера структури, використовуючи (9.1.5) і співвідношення

$$\begin{aligned} E_1^{\mu_\tau+1} &= \frac{f_0 \delta (1 - m_2 |\tau|^{\Delta_1})}{\tilde{c}_1 |\tau|}, \\ E_2^{\mu_\tau^{(0)}+1} &= \left( \frac{\tilde{c}_1^{(0)}}{f_0 \delta} \right)^{\Delta_1} |\tau|^{\Delta_1}, \\ s^{-3(\mu_\tau+1)} &= s^{-3(\mu_\tau^{(0)}+1)} (1 + \mathcal{N}_1^- |\tau|^{\Delta_1}), \\ s^{-3(\mu_\tau^{(0)}+1)} &= s^{-3\mu_0} |\tau|^{3\nu}, \quad s^{-3\mu_0} = c_\nu^3, \\ \mathcal{N}_1^- &= -\mathcal{N}_1^+, \end{aligned} \tag{9.2.1}$$

приходимо до виразу

$$\begin{aligned} F_{\text{КР}} &= -kTN' \left[ \gamma_0 + \delta_0 - \gamma_3^{(\text{КР})(0)-} |\tau|^{3\nu} - \right. \\ &\quad \left. - \gamma_3^{(\text{КР})(1)-} |\tau|^{3\nu+\Delta_1} \right]. \end{aligned} \tag{9.2.2}$$

Величини  $m_2$ ,  $c_\nu$ ,  $\mathcal{N}_1^+$ , а також  $N'$  ті ж, що й при  $T > T_c$  (див. § 8.1 та § 8.2). Коефіцієнти  $\gamma_0$  і  $\delta_0$  одержуємо із відповідних виразів для випадку  $T > T_c$ , вважаючи, що в  $\tau = -|\tau|$ . Коефіцієнти  $\gamma_3^{(\text{КР})(l)-}$  подамо у формі, де виділено універсальний множник  $\tilde{\gamma}_3^{(\text{КР})(l)-}$ , що не залежить від мікроскопічних параметрів системи. Маємо:

$$\begin{aligned} \gamma_3^{(\text{КР})(l)-} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \tilde{\gamma}_3^{(\text{КР})(l)-}, \quad l = 0, 1, \\ \tilde{\gamma}_3^{(\text{КР})(0)-} &= \gamma^-, \quad \tilde{\gamma}_3^{(\text{КР})(1)-} = \gamma_{\Delta_1}^- - \Phi_0(\gamma_{11}^- + 3\nu\gamma^-). \end{aligned} \tag{9.2.3}$$

Тут

$$\begin{aligned}\gamma^- &= \frac{f_{\text{КР}}^{(0)}}{1-s^{-3}} - \frac{f_{\text{КР}}^{(1)}\varphi_0^{-1/2}f_0\delta}{1-E_1s^{-3}} + \frac{f_{\text{КР}}^{(7)}\varphi_0^{-1}(f_0\delta)^2}{1-E_1^2s^{-3}}, \\ \gamma_{\Delta_1}^- &= \frac{f_{\text{КР}}^{(2)}\varphi_0^{-1}}{1-E_2s^{-3}} - \frac{f_{\text{КР}}^{(4)}\varphi_0^{-3/2}f_0\delta}{1-E_1E_2s^{-3}} + \frac{f_{\text{КР}}^{(8)}\varphi_0^{-2}(f_0\delta)^2}{1-E_1^2E_2s^{-3}}, \\ \gamma_{11}^- &= \frac{f_{\text{КР}}^{(1)}\varphi_0^{-1/2}f_0\delta}{1-E_1s^{-3}} - \frac{2f_{\text{КР}}^{(7)}\varphi_0^{-1}(f_0\delta)^2}{1-E_1^2s^{-3}}.\end{aligned}\quad (9.2.4)$$

Значимо, що  $c_{\Delta_1}$ ,  $\Phi_0$ ,  $\nu$  та величини, які входять у (9.2.4), такі ж, як і в §8.2. Там же визначені і коефіцієнти формул

$$\begin{aligned}\gamma_0 &= \gamma_0^{(0)} - \gamma_0^{(1)}|\tau| + \gamma_0^{(2)}|\tau|^2, \\ \delta_0 &= \delta_0^{(0)} - \delta_0^{(1)}|\tau| + \delta_0^{(2)}|\tau|^2,\end{aligned}\quad (9.2.5)$$

з допомогою яких на основі (9.2.2) обчислюємо вільну енергію, що відповідає області КР. Її подамо у вигляді

$$\begin{aligned}F_{\text{КР}} &= -kTN' \left[ \gamma_0^{(\text{КР})} - \gamma_1|\tau| + \gamma_2|\tau|^2 - \gamma_3^{(\text{КР})(0)-}|\tau|^{3\nu} - \right. \\ &\quad \left. - \gamma_3^{(\text{КР})(1)-}|\tau|^{3\nu+\Delta_1} \right],\end{aligned}\quad (9.2.6)$$

де залежні від мікроскопічних параметрів системи  $\gamma_0^{(\text{КР})}$ ,  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  співпадають із відповідними величинами при  $T > T_c$  (див. (8.2.22)). Критичний показник кореляційної довжини  $\nu$  для деяких значень параметра поділу  $s$  фазового простору КЗ на множини подано у табл. 6.3, а показник  $\Delta_1 = -\ln E_2 / \ln E_1 - \nu$  у табл. 9.1.

Здійснюючи диференціювання виразу (9.2.6) за температурою, знаходимо такі вирази для ентропії  $S_{\text{КР}}$ , внутрішньої енергії  $U_{\text{КР}}$  та теплоємності  $C_{\text{КР}}$  в області КР:

$$\begin{aligned}S_{\text{КР}} &= kN' \left[ s^{(\text{КР})(0)} - c_0|\tau| + u_3^{(\text{КР})(0)-}|\tau|^{1-\alpha} + u_3^{(\text{КР})(1)-}|\tau|^{1-\alpha+\Delta_1} \right], \\ U_{\text{КР}} &= kTN' \left[ \gamma_1 - u_1|\tau| + u_3^{(\text{КР})(0)-}|\tau|^{1-\alpha} + u_3^{(\text{КР})(1)-}|\tau|^{1-\alpha+\Delta_1} \right], \\ C_{\text{КР}} &= kN' \left[ c_0 - c_3^{(\text{КР})(0)-}|\tau|^{-\alpha} - c_3^{(\text{КР})(1)-}|\tau|^{\Delta_1-\alpha} \right].\end{aligned}\quad (9.2.7)$$

Табл. 9.1. Критичні показники моделі  $\rho^6$ 

$s$	$\Delta_1$	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$
2.0000	0.653	0.143	0.309	1.238
2.5000	0.552	0.099	0.317	1.268
2.7349	0.525	0.088	0.319	1.275
3.0000	0.503	0.079	0.320	1.281
3.5000	0.476	0.066	0.322	1.290
3.5862	0.473	0.064	0.323	1.291
4.0000	0.460	0.055	0.324	1.296

Тут

$$\begin{aligned}
 u_3^{(\text{KP})(l)-} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{u}_3^{(\text{KP})(l)-}, & l = 0, 1, \\
 \bar{u}_3^{(\text{KP})(0)-} &= 3\nu \bar{\gamma}_3^{(\text{KP})(0)-}, \\
 \bar{u}_3^{(\text{KP})(1)-} &= (3\nu + \Delta_1) \bar{\gamma}_3^{(\text{KP})(1)-}, \\
 c_3^{(\text{KP})(l)-} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{c}_3^{(\text{KP})(l)-}, \\
 \bar{c}_3^{(\text{KP})(0)-} &= 3\nu(3\nu - 1) \bar{\gamma}_3^{(\text{KP})(0)-}, \\
 \bar{c}_3^{(\text{KP})(1)-} &= (3\nu + \Delta_1)(3\nu + \Delta_1 - 1) \bar{\gamma}_3^{(\text{KP})(1)-}.
 \end{aligned} \tag{9.2.8}$$

Інші коефіцієнти визначені в (8.2.24). Критичний показник теплоємності  $\alpha = 2 - 3\nu$  подано в табл. 9.1.

### 9.3. Внески від області інверсного гаусового режиму

Розрахуємо внесок у вільну енергію системи від області ІГР

$$F_{\text{ІГР}} = -kTN' s^{-3(\mu_\tau+1)} \ln \left[ \sqrt{2} Q(P_{\mu_\tau}) \right] - kT \ln Z_{\mu_\tau+1}, \tag{9.3.1}$$

де

$$\sqrt{2} Q(P_{\mu_\tau}) = \left( \frac{4s^3 u_{\mu_\tau} s^{-4\mu_\tau}}{\pi^4 C(h_{\mu_\tau}, \alpha_{\mu_\tau})} \right)^{1/4} I_0(\eta_{\mu_\tau}, \xi_{\mu_\tau}), \quad (9.3.2)$$

а для  $Z_{\mu_\tau+1}$  у наближенні моделі  $\rho^6$  маємо:

$$\begin{aligned} Z_{\mu_\tau+1} = & \int \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{\mu_\tau+1}} d_{\mu_\tau+1}(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \right. \\ & \left. - \sum_{l=2}^3 \frac{a_{2l}^{(\mu_\tau+1)}}{(2l)! N_{\mu_\tau+1}^{l-1}} \sum_{k_1, \dots, k_{2l} \leq B_{\mu_\tau+1}} \rho_{\mathbf{k}_1} \cdots \rho_{\mathbf{k}_{2l}} \times \right. \\ & \left. \times \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2l}} \right] (d\rho)^{N_{\mu_\tau+1}}. \end{aligned} \quad (9.3.3)$$

При цьому виходитимемо із співвідношень:

$$\begin{aligned} r_{\mu_\tau+m} &= -\beta \tilde{\Phi}(0) \left( \bar{r}_{\mu_\tau+m}^{(m)} - \bar{r}_{\mu_\tau+m}^{(1)} |\tau|^{\Delta_1} \right), \\ \bar{r}_{\mu_\tau+m}^{(m)} &= f_0 (\delta E_1^{m-1} + 1), \\ \bar{r}_{\mu_\tau+m}^{(1)} &= c_{\Delta_1} E_2^{m-1} \varphi_0^{-1/2} w_{12}^{(0)} e_{1m}; \\ u_{\mu_\tau+m} &= (\beta \tilde{\Phi}(0))^2 \left( \bar{u}_{\mu_\tau+m}^{(0)} + \bar{u}_{\mu_\tau+m}^{(1)} |\tau|^{\Delta_1} \right), \\ \bar{u}_{\mu_\tau+m}^{(0)} &= \varphi_0 - f_0 \delta \varphi_0^{1/2} w_{21}^{(0)} E_1^{m-1}, \\ \bar{u}_{\mu_\tau+m}^{(1)} &= c_{\Delta_1} E_2^{m-1} e_{2m}; \\ w_{\mu_\tau+m} &= (\beta \tilde{\Phi}(0))^3 \left( \bar{w}_{\mu_\tau+m}^{(0)} + \bar{w}_{\mu_\tau+m}^{(1)} |\tau|^{\Delta_1} \right), \\ \bar{w}_{\mu_\tau+m}^{(0)} &= \psi_0 - f_0 \delta \varphi_0 w_{31}^{(0)} E_1^{m-1}, \\ \bar{w}_{\mu_\tau+m}^{(1)} &= c_{\Delta_1} E_2^{m-1} \varphi_0^{1/2} w_{32}^{(0)} e_{3m}, \end{aligned} \quad (9.3.4)$$

на основі яких для величин  $h_{\mu_\tau+m} = (r_{\mu_\tau+m} + q) \left( \frac{6}{u_{\mu_\tau+m}} \right)^{1/2}$ ,  
 $\alpha_{\mu_\tau+m} = \frac{\sqrt{6}}{15} \frac{w_{\mu_\tau+m}}{(u_{\mu_\tau+m})^{3/2}}$  одержуємо

$$\begin{aligned}
 h_{\mu_\tau+m} &= h_{\mu_\tau+m}^{(0)} \left( 1 + h_{\mu_\tau+m}^{(1)} |\tau|^{\Delta_1} \right), \\
 h_{\mu_\tau+m}^{(0)} &= \sqrt{6} \frac{\bar{q} - \bar{r}_{\mu_\tau+m}^{(m)}}{(\bar{u}_{\mu_\tau+m}^{(0)})^{1/2}}, \\
 h_{\mu_\tau+m}^{(1)} &= c_{\Delta_1} \bar{h}_{\mu_\tau+m}^{(1)}, \\
 \bar{h}_{\mu_\tau+m}^{(1)} &= E_2^{m-1} \varphi_0^{-1/2} \left( \frac{w_{12}^{(0)} e_{1m}}{\bar{q} - \bar{r}_{\mu_\tau+m}^{(m)}} - \frac{1}{2} \frac{\varphi_0^{1/2} e_{2m}}{\bar{u}_{\mu_\tau+m}^{(0)}} \right); \\
 \alpha_{\mu_\tau+m} &= \alpha_{\mu_\tau+m}^{(0)} \left( 1 + \alpha_{\mu_\tau+m}^{(1)} |\tau|^{\Delta_1} \right), \\
 \alpha_{\mu_\tau+m}^{(0)} &= \frac{\sqrt{6}}{15} \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+m}^{(0)}}{(\bar{u}_{\mu_\tau+m}^{(0)})^{3/2}}, \\
 \alpha_{\mu_\tau+m}^{(1)} &= c_{\Delta_1} \bar{\alpha}_{\mu_\tau+m}^{(1)}, \\
 \bar{\alpha}_{\mu_\tau+m}^{(1)} &= E_2^{m-1} \varphi_0^{1/2} \left( \frac{w_{32}^{(0)} e_{3m}}{\bar{w}_{\mu_\tau+m}^{(0)}} - \frac{3}{2} \frac{\varphi_0^{-1/2} e_{2m}}{\bar{u}_{\mu_\tau+m}^{(0)}} \right).
 \end{aligned} \tag{9.3.5}$$

Вирази для  $e_{1m}$ ,  $e_{2m}$ ,  $e_{3m}$  приведені в (8.3.5).

Обчислимо перший доданок правої частини виразу для  $F_{\Gamma R}$  (9.3.1). Величини  $h_{\mu_\tau}$  і  $\alpha_{\mu_\tau}$ , які входять у цей доданок, знаходимо із співвідношень (9.3.5) при  $m = 0$ . Для функції  $C(h_{\mu_\tau}, \alpha_{\mu_\tau})$  використаємо представлення у вигляді ряду відносно малих відхилень її аргументів (див. додаток Є або [378]). З точністю до  $|\tau|^{\Delta_1}$  запишемо:

$$C(h_{\mu_\tau}, \alpha_{\mu_\tau}) = p_{40}^{(\mu_\tau)} \left[ 1 - (p_{41}^{(\mu_\tau)} h_{\mu_\tau}^{(0)} h_{\mu_\tau}^{(1)} + p_{42}^{(\mu_\tau)} \alpha_{\mu_\tau}^{(0)} \alpha_{\mu_\tau}^{(1)}) |\tau|^{\Delta_1} \right]. \tag{9.3.6}$$

Тут коефіцієнти  $p_{4j}^{(\mu_\tau)}$  ( $j = 0, 1, 2$ ) – функції  $F_{2l}^{*(\mu_\tau)} = I_{2l}^{*(\mu_\tau)} / I_0^{*(\mu_\tau)}$ ,

де

$$I_{2l}^{*(\mu_\tau)} = \int_0^\infty x^{2l} \exp(-h_{\mu_\tau}^{(0)} x^2 - x^4 - \alpha_{\mu_\tau}^{(0)} x^6) dx. \quad (9.3.7)$$

Величини

$$\begin{aligned} \eta_{\mu_\tau} &= \sqrt{6} s^{3/2} F_2(h_{\mu_\tau}, \alpha_{\mu_\tau}) [C(h_{\mu_\tau}, \alpha_{\mu_\tau})]^{-1/2}, \\ \xi_{\mu_\tau} &= \frac{\sqrt{6}}{15} s^{-3/2} N(h_{\mu_\tau}, \alpha_{\mu_\tau}) [C(h_{\mu_\tau}, \alpha_{\mu_\tau})]^{-3/2} \end{aligned} \quad (9.3.8)$$

після використання розкладів для функцій, через які вони виражаються (додаток Є), і виділення в них температурної залежності задаються виразами, аналогічними випадку  $T > T_c$  (див. (8.3.8)):

$$\begin{aligned} \eta_{\mu_\tau} &= \eta_{\mu_\tau}^{(0)} \left[ 1 - \left( \bar{\eta}_1^{(\mu_\tau)} h_{\mu_\tau}^{(0)} h_{\mu_\tau}^{(1)} + \bar{\eta}_2^{(\mu_\tau)} \alpha_{\mu_\tau}^{(0)} \alpha_{\mu_\tau}^{(1)} \right) |\tau|^{\Delta_1} \right], \\ \xi_{\mu_\tau} &= \xi_{\mu_\tau}^{(0)} \left[ 1 - \left( \bar{\xi}_1^{(\mu_\tau)} h_{\mu_\tau}^{(0)} h_{\mu_\tau}^{(1)} + \bar{\xi}_2^{(\mu_\tau)} \alpha_{\mu_\tau}^{(0)} \alpha_{\mu_\tau}^{(1)} \right) |\tau|^{\Delta_1} \right]. \end{aligned} \quad (9.3.9)$$

У (9.3.2) входить функція  $I_0(\eta_{\mu_\tau}, \xi_{\mu_\tau})$ . На основі приведеної для неї в додатку Є аналітичної форми з врахуванням пропорційного до  $|\tau|^{\Delta_1}$  доданка отримуємо:

$$\begin{aligned} I_0(\eta_{\mu_\tau}, \xi_{\mu_\tau}) &= I_0^{**(\mu_\tau)} \left[ 1 + \left( b_1^{(\mu_\tau)} h_{\mu_\tau}^{(0)} h_{\mu_\tau}^{(1)} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + b_2^{(\mu_\tau)} \alpha_{\mu_\tau}^{(0)} \alpha_{\mu_\tau}^{(1)} \right) |\tau|^{\Delta_1} \right], \\ b_k^{(\mu_\tau)} &= \eta_{\mu_\tau}^{(0)} \bar{\eta}_k^{(\mu_\tau)} F_2^{**(\mu_\tau)} + \xi_{\mu_\tau}^{(0)} \bar{\xi}_k^{(\mu_\tau)} F_6^{**(\mu_\tau)}, \quad k = 1, 2. \end{aligned} \quad (9.3.10)$$

Тут  $F_{2l}^{**(\mu_\tau)} = I_{2l}^{**(\mu_\tau)} / I_0^{**(\mu_\tau)}$ , де

$$I_{2l}^{**(\mu_\tau)} = \int_0^\infty x^{2l} \exp(-\eta_{\mu_\tau}^{(0)} x^2 - x^4 - \xi_{\mu_\tau}^{(0)} x^6) dx. \quad (9.3.11)$$

Тепер, маючи вирази для  $s^{-3(\mu_\tau+1)}$  (див. (9.2.1)) та  $u_{\mu_\tau}$  (див. (9.3.4)), а також  $C(h_{\mu_\tau}, \alpha_{\mu_\tau})$  та  $I_0(\eta_{\mu_\tau}, \xi_{\mu_\tau})$  (9.3.10), представимо



перший доданок правої частини рівності (9.3.1) у вигляді

$$\begin{aligned} & -kTN' s^{-3(\mu_\tau+1)} \ln \left[ \sqrt{2} Q(P_{\mu_\tau}) \right] = \\ & = -kTN' \left( \gamma_g |\tau|^{3\nu} + s^{-3(\mu_\tau+1)} \ln \frac{\sqrt{\beta \tilde{\Phi}(0)}}{s^{\mu_\tau+1}} \right). \end{aligned} \quad (9.3.12)$$

Коефіцієнти  $\gamma_g^{(l)}$  величини

$$\gamma_g = \gamma_g^{(0)} + \gamma_g^{(1)} |\tau|^{\Delta_1} \quad (9.3.13)$$

визначаються співвідношеннями:

$$\begin{aligned} \gamma_g^{(l)} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{\gamma}_g^{(l)}, \quad l = 0, 1, \\ \bar{\gamma}_g^{(0)} &= \ln \left[ \left( \frac{4s^7 \bar{u}_{\mu_\tau}^{(0)}}{\pi^4 p_{40}^{(\mu_\tau)}} \right)^{1/4} I_0^{**(\mu_\tau)} \right], \\ \bar{\gamma}_g^{(1)} &= \bar{\gamma}_{g1} - 3\nu \Phi_0 \bar{\gamma}_g^{(0)}, \\ \bar{\gamma}_{g1} &= \frac{1}{4} \frac{\bar{u}_{\mu_\tau}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_\tau}^{(0)}} + \left( \frac{1}{4} p_{41}^{(\mu_\tau)} + b_1^{(\mu_\tau)} \right) h_{\mu_\tau}^{(0)} \bar{h}_{\mu_\tau}^{(1)} + \\ &+ \left( \frac{1}{4} p_{42}^{(\mu_\tau)} + b_2^{(\mu_\tau)} \right) \alpha_{\mu_\tau}^{(0)} \bar{\alpha}_{\mu_\tau}^{(1)}. \end{aligned} \quad (9.3.14)$$

Зауважимо, що  $p_{40}^{(\mu_\tau)} = C(h_{\mu_\tau}^{(0)}, \alpha_{\mu_\tau}^{(0)})$ ,  $I_0^{**(\mu_\tau)} = I_0(\eta_{\mu_\tau}^{(0)}, \xi_{\mu_\tau}^{(0)})$ . Це впливає із рядів відповідних функцій (додаток Є), де як аргументи покладаються  $h_{\mu_\tau}^{(0)}$  і  $\alpha_{\mu_\tau}^{(0)}$ ,  $\eta_{\mu_\tau}^{(0)}$  і  $\xi_{\mu_\tau}^{(0)}$ . Величини  $\bar{u}_{\mu_\tau}^{(1)}$ ,  $\bar{h}_{\mu_\tau}^{(1)}$ ,  $\bar{\alpha}_{\mu_\tau}^{(1)}$  не залежать від  $b$ ,  $c$ ,  $\tilde{\Phi}(0)$ . Вони одержані в результаті виключення із  $\bar{u}_{\mu_\tau}^{(1)}$ ,  $h_{\mu_\tau}^{(1)}$ ,  $\alpha_{\mu_\tau}^{(1)}$  неуніверсального фактора  $c_{\Delta_1}$ .

Другий доданок правої частини (9.3.1) зв'язаний із розрахунком  $Z_{\mu_\tau+1}$  (9.3.3), де

$$\begin{aligned} N_{\mu_\tau+1} &= s^{-3(\mu_\tau+1)} N', \\ d_{\mu_\tau+1}(k) &= s^{-2(\mu_\tau+1)} r_{\mu_\tau+1} + \tilde{q} k^2, \quad \tilde{q} = 2b^2 \beta \tilde{\Phi}(0), \\ a_4^{(\mu_\tau+1)} &= s^{-4(\mu_\tau+1)} u_{\mu_\tau+1}, \\ a_6^{(\mu_\tau+1)} &= s^{-6(\mu_\tau+1)} w_{\mu_\tau+1}, \end{aligned} \quad (9.3.15)$$

а  $r_{\mu_\tau+1}$ ,  $u_{\mu_\tau+1}$ ,  $w_{\mu_\tau+1}$  обчислюються із (9.3.4) при  $m = 1$ . Значимо, що при цьому  $\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(1)} = 0$ .

У блочній структурі, яка описується  $Z_{\mu_\tau+1}$ , існує відмінний від нуля середній спіновий момент. Для виділення вільної енергії, що відповідає впорядкуванню, яке виникло в системі, здійснимо у виразі для  $Z_{\mu_\tau+1}$  заміну змінних

$$\rho_{\mathbf{k}} = \rho'_{\mathbf{k}} + \sqrt{N} \langle \bar{\sigma} \rangle \delta_{\mathbf{k}}. \quad (9.3.16)$$

Параметр зміщення  $\langle \bar{\sigma} \rangle$  визначаємо із умови екстремуму макроскопічної частини гамільтоніану  $(\mu_\tau + 1)$ -ої блочної структури [383, 384]:

$$\begin{aligned} \langle \bar{\sigma} \rangle^2 &= 10 \frac{a_4^{(\mu_\tau+1)}}{a_6^{(\mu_\tau+1)}} \frac{N_{\mu_\tau+1}}{N} (-1 + b_2), \\ b_2 &= \left( 1 + \frac{6}{5} \frac{a_6^{(\mu_\tau+1)} |d_{\mu_\tau+1}(0)|}{(a_4^{(\mu_\tau+1)})^2} \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (9.3.17)$$

Одночасно включимо в розгляд постійне зовнішнє поле  $\mathcal{H}$  і виділимо із сум за  $k$  доданки з  $k = 0$ . Тоді від  $Z_{\mu_\tau+1}$  (9.3.3) приходимо до виразу (Ж.1), який приведений у додатку Ж. Замість коефіцієнта  $d_{\mu_\tau+1}(k)$  (див. (9.3.15)), що був від'ємним, при квадратичному доданку стоїть коефіцієнт  $\bar{d}_{\mu_\tau+1}(k)$ , строго додатний для всіх  $k$ , включаючи  $k = 0$ . Інтеграли за всіма  $\rho_{\mathbf{k}}$  при  $k \neq 0$  можна розраховувати в гаусовому базисі. В результаті інтегрування в

(Ж.1) за змінними  $\rho_k$  з  $k \neq 0$  (див. додаток Ж) отримуємо:

$$Z_{\mu_\tau+1} = e^{-\beta F'_{\mu_\tau+1}} \int \exp \left[ \beta \sqrt{N} \rho_0 h + \tilde{B} \rho_0^2 - \frac{G}{N} \rho_0^4 - \frac{D}{N^2} \rho_0^6 \right] d\rho_0. \quad (9.3.18)$$

Тут вираз

$$\begin{aligned} -\beta F'_{\mu_\tau+1} = & N_{\mu_\tau+1} \left\{ \frac{5}{2} |d_{\mu_\tau+1}(0)| \left( \mathcal{I}_1 + \frac{5}{2} |d_{\mu_\tau+1}(0)| \mathcal{I}_2 \right) - \right. \\ & - \frac{\mathcal{I}_1^2}{8} \left( a_4^{(\mu_\tau+1)} + \frac{a_6^{(\mu_\tau+1)} \mathcal{I}_1}{6} \right) + \frac{(a_4^{(\mu_\tau+1)})^2}{8} \left[ \frac{\mathcal{I}_4}{6} + \mathcal{I}_1^2 \mathcal{I}_2 \left( \frac{1}{2} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{5}{3} (-1 + b_2) \right) \right] - \frac{5}{4} |d_{\mu_\tau+1}(0)| \mathcal{I}_1 \mathcal{I}_2 \left( a_4^{(\mu_\tau+1)} + \right. \\ & \left. + \frac{a_6^{(\mu_\tau+1)} \mathcal{I}_1}{4} \right) + \frac{(a_6^{(\mu_\tau+1)})^2}{32} \left[ \frac{\mathcal{I}_6}{45} + \frac{\mathcal{I}_1^2}{2} \left( \frac{\mathcal{I}_4}{3} + \frac{\mathcal{I}_1^2 \mathcal{I}_2}{4} \right) \right] + \\ & + \frac{a_4^{(\mu_\tau+1)} a_6^{(\mu_\tau+1)} \mathcal{I}_1}{16} \left( \frac{\mathcal{I}_4}{3} + \frac{\mathcal{I}_1^2 \mathcal{I}_2}{2} \right) - \frac{5}{3} \frac{(a_4^{(\mu_\tau+1)})^2}{a_6^{(\mu_\tau+1)}} \times \\ & \times \left[ (-1 + b_2) \left( \mathcal{I}_1 - a_4^{(\mu_\tau+1)} \mathcal{I}_2 \left( \frac{\mathcal{I}_1}{2} - \frac{10}{3} \frac{a_4^{(\mu_\tau+1)}}{a_6^{(\mu_\tau+1)}} \right) \right) \right] - \\ & \left. - (7 - 5b_2) |d_{\mu_\tau+1}(0)| \mathcal{I}_2 \right] - \frac{1}{2N_{\mu_\tau+1}} \sum_{k \leq B_{\mu_\tau+1}}^i \ln \frac{\bar{d}_{\mu_\tau+1}(k)}{\pi} \left. \right\} \quad (9.3.19) \end{aligned}$$

відповідає внескові у вільну енергію системи від змінних  $\rho_k$  з  $k \rightarrow 0$ , однак  $k \neq 0$ . Величини  $\mathcal{I}_l$  подані в додатку Ж. Явні вирази для коефіцієнтів  $\tilde{B}$ ,  $G$  та  $D$  розраховуються подібно до того, як це було зроблено в додатку Г для моделі  $\rho^4$ . Коефіцієнт

$\tilde{B}$  задається співвідношеннями:

$$\begin{aligned}\tilde{B} &= \tilde{B}^{(0)}|\tau|^{2\nu}\beta\tilde{\Phi}(0)(1 + \tilde{B}^{(1)}|\tau|^{\Delta_1}), \\ \tilde{B}^{(0)} &= \frac{1}{2}c_\nu\tilde{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)}B_1^{(0)}, \quad \tilde{B}^{(1)} = B_1^{(1)} - 2\nu c_{\Delta_1}\Phi_0,\end{aligned}\quad (9.3.20)$$

де вирази для  $B_1^{(0)}$  та  $B_1^{(1)}$  містяться у додатку Ж. Для коефіцієнта  $G$  запишемо:

$$G = G^{(0)}|\tau|^\nu(\beta\tilde{\Phi}(0))^2(1 + G^{(1)}|\tau|^{\Delta_1}). \quad (9.3.21)$$

Тут  $G^{(0)} = c_\nu s_0^3 G_1^{(0)}$ ,  $G^{(1)} = G_1^{(1)} - \nu c_{\Delta_1}\Phi_0$ , а величини  $G_1^{(0)}$  та  $G_1^{(1)}$  подано в додатку Ж. Коефіцієнт  $D$  можна представити у вигляді

$$D = D^{(0)}(\beta\tilde{\Phi}(0))^3(1 + D^{(1)}|\tau|^{\Delta_1}), \quad (9.3.22)$$

де  $D^{(0)} = s_0^6 D_1^{(0)}$ ,  $D^{(1)} = D_1^{(1)}$ , а вирази для  $D_1^{(0)}$  та  $D_1^{(1)}$  приведені в додатку Ж.

Виходячи із одержаної вище температурної залежності коефіцієнтів  $\tilde{B}$ ,  $G$ ,  $D$ , бачимо, що у випадку  $T \rightarrow T_c$  коефіцієнти при  $\rho_0^2$  та  $\rho_0^4$  у (9.3.18) прямують до нуля, а коефіцієнт при  $\rho_0^6$  при цьому стає відмінною від нуля постійною. Ця постійна включає як універсальну частину  $D_1^{(0)}$ , так і фактор, залежний від мікроскопічних параметрів системи.

Обчислимо  $Z_{\mu_\tau+1}$  методом перевалу (див., наприклад, [385]). Маємо

$$Z_{\mu_\tau+1} = \sqrt{\frac{2\pi}{E_0''(\bar{\rho})}} \exp[-\beta F'_{\mu_\tau+1} - N E_0(\bar{\rho})], \quad (9.3.23)$$

де  $\bar{\rho}$  – точка екстремуму виразу

$$E_0(\rho) = D\rho^6 + G\rho^4 - \tilde{B}\rho^2 - \beta h\rho, \quad (9.3.24)$$

який виникає в експоненті підінтегральної функції (9.3.18) при заміні змінної

$$\rho_0 = \sqrt{N}\rho. \quad (9.3.25)$$

Для  $E_0(\bar{\rho})$ , що входить у (9.3.23), при  $h = 0$  знаходимо:

$$E_0(\bar{\rho}) = -s^{-3(\mu_\tau+1)} s_0^{-3} E_0^{(0)} (1 + E_0^{(1)} |\tau|^{\Delta_1}). \quad (9.3.26)$$

Вирази для коефіцієнтів  $E_0^{(0)}$  та  $E_0^{(1)}$  приведені в додатку Ж. Тепер запишемо згідно (9.3.1) внесок у вільну енергію системи при  $T < T_c$  від довгохвильових мод коливань густини спінового моменту:

$$F_{\text{ІГР}} = -kTN' \left[ \gamma_{\text{ІГР}}^{(0)} |\tau|^{3\nu} + \gamma_{\text{ІГР}}^{(1)} |\tau|^{3\nu+\Delta_1} \right], \quad (9.3.27)$$

$$\gamma_{\text{ІГР}}^{(l)} = \gamma_3^{(l)(\mu_\tau)} + \gamma_3^{(l)(\sigma)}, \quad l = 0, 1.$$

Доданок  $\gamma_3^{(l)(\mu_\tau)}$  визначає вільну енергію після виходу з КР (внесок від змінних  $\rho_k$  з індексами  $0 < k \leq B_{\mu_\tau+1}$ ), а  $\gamma_3^{(l)(\sigma)}$  – вільну енергію впорядкування. Ці доданки обчислюються згідно наступних формул

$$\begin{aligned} \gamma_3^{(l)(\mu_\tau)} &= \gamma_g^{(l)} + \gamma_\rho^{(l)}, & \gamma_\rho^{(l)} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{\gamma}_\rho^{(l)}, \\ \bar{\gamma}_\rho^{(1)} &= \bar{\gamma}_{\rho 1} - 3\nu \Phi_0 \bar{\gamma}_\rho^{(0)}, & \gamma_3^{(l)(\sigma)} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{\gamma}_3^{(l)(\sigma)}, \\ \bar{\gamma}_3^{(0)(\sigma)} &= E_0^{(0)}, & \bar{\gamma}_3^{(1)(\sigma)} &= E_0^{(0)} \left( \bar{E}_0^{(1)} - 3\nu \Phi_0 \right), \end{aligned} \quad (9.3.28)$$

де величини  $\gamma_g^{(l)}$  приведені в (9.3.14), а  $\bar{\gamma}_\rho^{(0)}$  та  $\bar{\gamma}_{\rho 1}$  – в додатку Ж. Вираз для  $\bar{E}_0^{(1)}$  отримується в результаті виключення із  $E_0^{(1)}$  неуніверсального множника  $c_{\Delta_1}$ .

Ентропія  $S_{\text{ІГР}}$ , внутрішня енергія  $U_{\text{ІГР}}$ , теплоємність  $C_{\text{ІГР}}$ , що відповідають ІГР, запишуться у вигляді

$$\begin{aligned} S_{\text{ІГР}} &= S_{\mu_\tau} + S_{\langle \sigma \rangle}, & U_{\text{ІГР}} &= U_{\mu_\tau} + U_{\langle \sigma \rangle}, \\ C_{\text{ІГР}} &= C_{\mu_\tau} + C_{\langle \sigma \rangle}. \end{aligned} \quad (9.3.29)$$

Складові цих термодинамічних характеристик задовільняють

співвідношення

$$\begin{aligned}
S_\eta &= -kN' \left[ u_3^{(0)(\eta)} |\tau|^{1-\alpha} + u_3^{(1)(\eta)} |\tau|^{1-\alpha+\Delta_1} \right], \\
U_\eta &= -kTN' \left[ u_3^{(0)(\eta)} |\tau|^{1-\alpha} + u_3^{(1)(\eta)} |\tau|^{1-\alpha+\Delta_1} \right], \\
C_\eta &= kN' \left[ c_3^{(0)(\eta)} |\tau|^{-\alpha} + c_3^{(1)(\eta)} |\tau|^{\Delta_1-\alpha} \right], \\
u_3^{(l)(\eta)} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{u}_3^{(l)(\eta)}, \quad l = 0, 1, \\
\bar{u}_3^{(0)(\eta)} &= 3\nu \bar{\gamma}_3^{(0)(\eta)}, \quad \bar{u}_3^{(1)(\eta)} = (3\nu + \Delta_1) \bar{\gamma}_3^{(1)(\eta)}, \\
c_3^{(l)(\eta)} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{c}_3^{(l)(\eta)}, \\
\bar{c}_3^{(0)(\eta)} &= 3\nu(3\nu - 1) \bar{\gamma}_3^{(0)(\eta)}, \\
\bar{c}_3^{(1)(\eta)} &= (3\nu + \Delta_1)(3\nu + \Delta_1 - 1) \bar{\gamma}_3^{(1)(\eta)}.
\end{aligned} \tag{9.3.30}$$

Тут індекс  $\eta$  може приймати два значення:  $\mu_\tau$  і  $(\sigma)$ . Коефіцієнти  $\bar{\gamma}_3^{(l)(\mu_\tau)} = \bar{\gamma}_g^{(l)} + \bar{\gamma}_\rho^{(l)}$  ( $l = 0, 1$ ), а також  $\bar{\gamma}_3^{(l)(\sigma)}$ , які приведені в (9.3.28), не залежать від мікроскопічних параметрів системи.

Отже, здійснено розрахунок вільної енергії в області ІГР. Виходячи із виразу для  $F_{\text{ІГР}}$  (9.3.27), обчислено інші термодинамічні функції, які відповідають ІГР. Вираз (9.3.27) містить вільну енергію впорядкування, що отримується в результаті інтегрування за КЗ  $\rho_0$ , середнє значення якої пропорційне параметру порядку – одній із суттєвих характеристик фазового переходу.

## 9.4. Мікроскопічний аналог розкладу Ландау для моделі $\rho^6$ . Параметр порядку і сприйнятливість

Роль параметра порядку досліджуваної системи відіграє середній спіновий момент. Він зумовлений наявністю нижче температури фазового переходу відмінного від нуля значення  $\bar{\rho}_0$ , при якому підінтегральний вираз (9.3.18) має екстремум. Після ви-

конання в ньому заміни (9.3.25) отримуємо

$$Z_{\mu_{\tau+1}} = e^{-\beta E'_{\mu_{\tau+1}}} \sqrt{N} \int e^{-NE_0(\rho)} d\rho \quad (9.4.1)$$

і розрахунок параметра порядку полягає в знаходженні точки  $\bar{\rho}$  екстремуму  $E_0(\rho)$  (9.3.24). Величина  $\bar{\rho}$  співпадає із середнім значенням  $\rho$ , яке відповідає рівноважному значенню параметра порядку [367,384]. Вираз  $E_0(\rho)$  відповідає мікроскопічному аналогу вільної енергії Ландау. Через  $E_0(\bar{\rho})$ , яке співпадає за формою з розкладом вільної енергії в ряд за степенями параметра порядку, виражається  $Z_{\mu_{\tau+1}}$  після використання методу перевалу для обчислення інтегралу в (9.4.1)<sup>1</sup>. Результат такого обчислення записаний вище в (9.3.23).

Вираз (9.3.24) одержано шляхом послідовного виключення з розгляду змінних  $\rho_k$  з  $k \neq 0$ , завдяки чому обчислено коефіцієнти виразу  $E_0(\rho)$  (див. табл. 9.2). Числові дані в табл. 9.2 подано для деяких значень радіуса дії потенціалу  $b$  і параметра РГ  $s$ . Як і у випадку  $T > T_c$  (розділ 8), в області малих значень хвильових векторів при  $b = b_I = c/(2\sqrt{3})$  параболічна апроксимація фур'є-образу експонентно спадного потенціалу взаємодії відповідає аналогічній апроксимації фур'є-образу потенціалу взаємодії найближчих сусідів, при  $b = b_{II} = 0.3379c$  – перших і других сусідів, при  $b = b_{III} = 0.3584c$  – перших, других і третіх сусідів. Отже, немає потреби постулювати будь-яку залежність коефіцієнтів виразу (9.3.24) від температури (як це має місце у розкладі Ландау), оскільки аналітична форма їх залежності від температури та мікроскопічних параметрів системи знайдена шляхом прямих розрахунків і представлена в (9.3.20)–(9.3.22). На відміну від теорії Ландау залежність цих коефіцієнтів від температури є неаналітичною.

Перейдемо до розрахунку середнього спінового моменту. Точку  $\bar{\rho}$  визначаємо з умови екстремуму  $\frac{\partial E_0(\rho)}{\partial \rho} = 0$ , яка приводить

<sup>1</sup>Завдяки наявності множника  $N$  у показнику експоненти підінтегральний вираз у (9.4.1) має різко виражений максимум у точці  $\bar{\rho}$

Табл. 9.2. Величини, що визначають коефіцієнти у виразі для мікроскопічного аналогу вільної енергії Ландау (модель  $\rho^6$ )

	$b$	$b_I$	$b_{II}$	$b_{III}$	$c$	$2c$
$s = 2.0000$						
$\tilde{B}^{(0)}$	1.0106	0.9530	0.9305	0.7258	0.7149	
$\tilde{B}^{(1)}$	-0.2733	-0.3959	-0.4420	-0.8188	-0.8375	
$G^{(0)}$	0.0550	0.0857	0.1010	1.9382	15.3880	
$G^{(1)}$	-0.8919	-1.2918	-1.4423	-2.6720	-2.7330	
$D^{(0)}$	0.0009	0.0023	0.0033	1.5614	99.9318	
$D^{(1)}$	-0.6952	-0.9377	-1.0470	-1.9396	-1.9839	
$s = 2.7349$						
$\tilde{B}^{(0)}$	0.9417	0.8888	0.8683	0.6865	0.6768	
$\tilde{B}^{(1)}$	-0.4451	-0.5124	-0.5377	-0.7445	-0.7550	
$G^{(0)}$	0.0690	0.1074	0.1267	2.4478	19.4434	
$G^{(1)}$	-1.1718	-1.3491	-1.4157	-1.9601	-1.9876	
$D^{(0)}$	0.0012	0.0031	0.0044	2.0825	133.281	
$D^{(1)}$	-0.8853	-1.0193	-1.0696	-1.4809	-1.5017	
$s = 3.0000$						
$\tilde{B}^{(0)}$	0.9115	0.8610	0.8415	0.6697	0.6605	
$\tilde{B}^{(1)}$	-0.4755	-0.5321	-0.5533	-0.7261	-0.7348	
$G^{(0)}$	0.0732	0.1141	0.1346	2.6087	20.7264	
$G^{(1)}$	-1.1967	-1.3392	-1.3926	-1.8275	-1.8495	
$D^{(0)}$	0.0013	0.0033	0.0047	2.2185	141.986	
$D^{(1)}$	-0.9113	-1.0199	-1.0606	-1.3918	-1.4085	

до рівняння:

$$6D\rho^5 + 4G\rho^3 - 2\tilde{B}\rho - \frac{h}{kT} = 0. \quad (9.4.2)$$

Загальний розв'язок рівняння (9.4.2) знайти складно. Детальні-



щому дослідженню рівняння стану присвячений розділ 10. Однак зовсім просто ми одержуємо розв'язки в двох граничних випадках. Перший із них відноситься до відсутності зовнішнього поля. У випадку  $h = 0$  отримуємо біквадратне рівняння

$$6D\bar{\rho}^4 + 4G\bar{\rho}^2 - 2\bar{B} = 0, \quad (9.4.3)$$

яке шляхом заміни змінної

$$\bar{\rho}^2 = y \quad (9.4.4)$$

зводиться до рівняння

$$6Dy^2 + 4Gy - 2\bar{B} = 0. \quad (9.4.5)$$

Розв'язуючи це рівняння і виділяючи явно температурну залежність, приходимо до формули для середнього спінового моменту  $\langle \sigma \rangle = \bar{\rho} = \sqrt{y}$ :

$$\langle \sigma \rangle = \langle \sigma \rangle^{(0)} |\tau|^\beta (1 + \langle \sigma \rangle^{(1)} |\tau|^{\Delta_1}), \quad (9.4.6)$$

де

$$\langle \sigma \rangle^{(0)} = c_\nu^{1/2} (\beta_c \tilde{\Phi}(0))^{-1/2} s_0^{-3/2} \langle \bar{\sigma} \rangle^{(0)},$$

$$\langle \sigma \rangle^{(1)} = \langle \sigma \rangle_1 - \frac{1}{2} c_{\Delta_1} \nu \Phi_0,$$

$$\langle \bar{\sigma} \rangle^{(0)} = \left\{ \frac{G_1^{(0)}}{3D_1^{(0)}} \left[ -1 + \left( 1 + \frac{3}{2} \frac{\bar{r}_{\mu\tau+1}^{(0)} B_1^{(0)} D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2} \right)^{1/2} \right] \right\}^{1/2},$$

$$\langle \sigma \rangle_1 = \frac{3}{8} \frac{\bar{r}_{\mu\tau+1}^{(0)} B_1^{(0)} D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2} (B_1^{(1)} - 2G_1^{(1)} + D_1^{(1)}) \times$$

$$\times \left( 1 + \frac{3}{2} \frac{\bar{r}_{\mu\tau+1}^{(0)} B_1^{(0)} D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2} \right)^{-1/2} \left[ -1 + \left( 1 + \right.$$

Табл. 9.3. Коефіцієнти виразу для середнього спінового моменту  $\langle\sigma\rangle$  (див. (9.4.6)) для деяких значень радіуса дії потенціалу  $b$  і параметра РГ  $s$ 

$b$	$b_I$	$b_{II}$	$b_{III}$	$c$	$2c$
$s = 2.0000$					
$\langle\sigma\rangle^{(0)}$	2.7329	2.0684	1.8700	0.3747	0.1321
$\langle\sigma\rangle^{(1)}$	0.2499	0.3619	0.4040	0.74849	0.7656
$s = 2.7349$					
$\langle\sigma\rangle^{(0)}$	2.3854	1.8027	1.6288	0.3248	0.1145
$\langle\sigma\rangle^{(1)}$	0.3034	0.3493	0.3666	0.5076	0.5147
$s = 3.0000$					
$\langle\sigma\rangle^{(0)}$	2.2861	1.7269	1.5600	0.3107	0.1095
$\langle\sigma\rangle^{(1)}$	0.3046	0.3409	0.3545	0.4651	0.4707

$$+ \frac{3}{2} \left[ \frac{\bar{r}_{\mu\tau+1}^{(0)} B_1^{(0)} D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2} \right]^{1/2} \Big]^{-1} + \frac{1}{2} (G_1^{(1)} - D_1^{(1)}).$$

Значення критичного показника середнього спінового моменту  $\beta = \nu/2$  подано в табл. 9.1. Коефіцієнти  $\langle\sigma\rangle^{(l)}$  містяться в табл. 9.3. Криві залежності  $\langle\sigma\rangle$  від  $\tau$  для різних значень  $b$  зображені на рис. 9.1. На цьому і на наступних рис. 9.2–9.9 графічний матеріал приводиться для параметра РГ  $s = 3$ .

Другий граничний тип розв'язку рівняння (9.4.2) відноситься до випадку  $T = T_c$ . Тоді  $\bar{B} = 0$ ,  $G = 0$  і ми одержуємо рівняння

$$6D\bar{\rho}^5 = \frac{h}{kT}, \quad (9.4.7)$$

або в зручнішій формі

$$\bar{\rho} = \bar{\rho}_0 h^{1/\delta}, \quad (9.4.8)$$

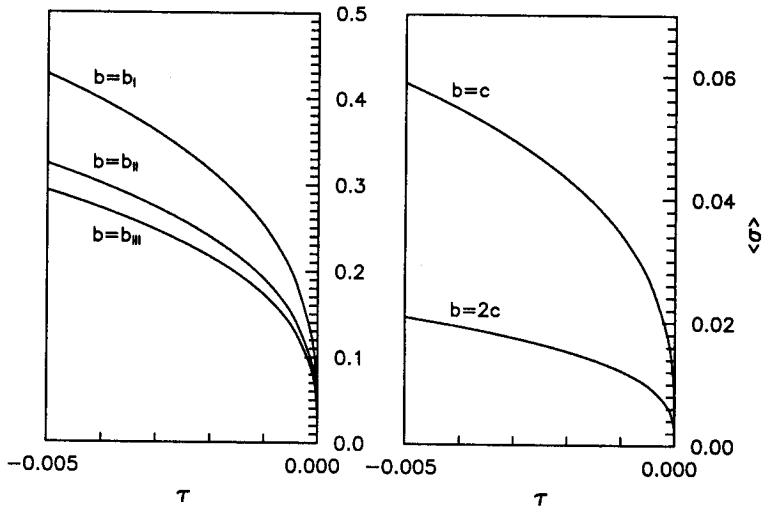


Рис. 9.1. Температурна залежність середнього спінового моменту в рамках моделі  $\rho^6$  для різних значень радіуса дії потенціалу  $b$ . Тут  $b_I = c/(2\sqrt{3})$ ,  $b_{II} = 0.3379c$ ,  $b_{III} = 0.3584c$

де критичний показник  $\delta$  приймає значення

$$\delta = 5. \quad (9.4.9)$$

Для критичної амплітуди  $\bar{\rho}_0$  маємо:

$$\bar{\rho}_0 = \left[ 6kT_c s_0^6 D_1^{(0)} (\beta_c \tilde{\Phi}(0))^3 \right]^{-1/5}. \quad (9.4.10)$$

Зазначимо важливий момент. Якщо розв'язок для  $\bar{\rho}$  (див. (9.4.6)) мало чим відрізняється від аналогічного розв'язку для моделі  $\rho^4$  (розділ 4), то розв'язок (9.4.8) є принципово новим. Розв'язок такого типу не може бути отриманий подібним чином у рамках моделі  $\rho^4$ . Він підтверджує особливе місце моделі  $\rho^6$  серед моделей  $\rho^{2m}$  і показує, що модель  $\rho^6$  справді оптимальна для опису критичних властивостей тривимірних статистичних систем.

Рівняння (9.4.2) дає змогу обчислити сприйнятливність системи на одну частинку

$$\chi = \mu_B \frac{\partial \langle \sigma \rangle}{\partial \mathcal{H}}. \quad (9.4.11)$$

Маємо

$$\chi = \frac{\mu_B^2}{kT} \left[ 30D\bar{\rho}^4 + 12G\bar{\rho}^2 - 2\bar{B} \right]^{-1}. \quad (9.4.12)$$

Вираз для  $\chi$  з врахуванням температурної залежності коефіцієнтів  $\bar{B}$ ,  $G$  і  $D$  (див. (9.3.20)–(9.3.22)) приведемо в наступному параграфі.

## 9.5. Термодинамічні характеристики 3D моделі як функції температури і мікроскопічних параметрів системи

Знайдемо повні вирази для термодинамічних характеристик ізінгоподібної системи в наближенні моделі  $\rho^6$  з врахуванням першої конфлуентної поправки (випадок  $\mathcal{H} = 0$ ).

Одержані вище внески у вільну енергію тривимірної однокомпонентної моделі поблизу  $T_c$  від областей КР та ІГР дають змогу подати її повну вільну енергію (9.1.1) у вигляді

$$F = -kTN' \left[ \gamma_0 - \gamma_1 |\tau| + \gamma_2 |\tau|^2 + \gamma_3^{(0)-} |\tau|^{3\nu} + \gamma_3^{(1)-} |\tau|^{3\nu + \Delta_1} \right]. \quad (9.5.1)$$

Всі коефіцієнти (9.5.1) є функціями мікроскопічних параметрів системи, тобто радіуса дії потенціалу  $b$ , фур'є-образу потенціалу  $\tilde{\Phi}(0)$  при  $k = 0$ , постійної ґратки  $c$ . Вирази для коефіцієнтів  $\gamma_0$ ,  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  знайдені при розгляді високотемпературної області (див. (8.2.22), (8.4.1)). Їх значення, на відміну від  $\gamma_3^{(l)-}$  ( $l = 0, 1$ ), не залежать від того, для яких температур, вищих чи нижчих від ТФП, виконуються розрахунки. Коефіцієнти  $\gamma_3^{(l)-}$  мають форму

добутку універсальної величини відносно мікроскопічних параметрів  $\bar{\gamma}_3^{(l)-}$  і неуніверсального множника  $c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l$ , залежного від них:

$$\begin{aligned} \gamma_3^{(l)-} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{\gamma}_3^{(l)-}, \\ \bar{\gamma}_3^{(l)-} &= -\bar{\gamma}_3^{(KP)(l)-} + \bar{\gamma}_{\text{ІГР}}^{(l)}, \quad \bar{\gamma}_{\text{ІГР}}^{(l)} = \bar{\gamma}_g^{(l)} + \bar{\gamma}_\rho^{(l)} + \bar{\gamma}_3^{(l)(\sigma)}. \end{aligned} \quad (9.5.2)$$

Числові значення коефіцієнтів  $\bar{\gamma}_3^{(l)-}$  подано в табл. 9.4.

Табл. 9.4. Величини  $\bar{\gamma}_3^{(l)-}$  для деяких значень  $s$

$s$	$\bar{\gamma}_3^{(0)-}$	$\bar{\gamma}_3^{(1)-}$
2.0000	1.7599	-6.7968
2.7349	2.7650	-3.6743
3.0000	3.1073	-3.0714

Виходячи із виразу для вільної енергії (9.5.1), можна знайти інші термодинамічні функції при  $T < T_c$ . Так, для ентропії  $S$ , внутрішньої енергії  $U$  і теплоємності  $C$  системи справедливі вирази

$$\begin{aligned} S &= kN' \left[ s^{(0)} - c_0 |\tau| - u_3^{(0)-} |\tau|^{1-\alpha} - u_3^{(1)-} |\tau|^{1-\alpha+\Delta_1} \right], \\ U &= kTN' \left[ \gamma_1 - u_1 |\tau| - u_3^{(0)-} |\tau|^{1-\alpha} - u_3^{(1)-} |\tau|^{1-\alpha+\Delta_1} \right], \\ C &= kN' \left[ c_0 + c_3^{(0)-} |\tau|^{-\alpha} + c_3^{(1)-} |\tau|^{\Delta_1-\alpha} \right], \end{aligned} \quad (9.5.3)$$

де  $s^{(0)}$ ,  $c_0$ ,  $u_1$  співпадають із відповідними величинами при  $T > T_c$  (див. (8.2.24), (8.4.3)), а структура інших коефіцієнтів у плані

універсальності задається співвідношеннями:

$$\begin{aligned}
 u_3^{(l)-} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{u}_3^{(l)-}, \\
 \bar{u}_3^{(0)-} &= 3\nu \bar{\gamma}_3^{(0)-}, \quad \bar{u}_3^{(1)-} = (3\nu + \Delta_1) \bar{\gamma}_3^{(1)-}, \\
 c_3^{(l)-} &= c_\nu^3 c_{\Delta_1}^l \bar{c}_3^{(l)-}, \\
 \bar{c}_3^{(0)-} &= 3\nu(3\nu - 1) \bar{\gamma}_3^{(0)-}, \\
 \bar{c}_3^{(1)-} &= (3\nu + \Delta_1)(3\nu + \Delta_1 - 1) \bar{\gamma}_3^{(1)-}.
 \end{aligned} \tag{9.5.4}$$

Представимо теплоємність із (9.5.3) аналогічно до випадку  $T > T_c$  залежністю

$$\begin{aligned}
 \frac{C}{kN'} &= \frac{A^-}{\alpha} |\tau|^{-\alpha} (1 + \alpha a_c^- |\tau|^{\Delta_1}) + B^-, \\
 A^- &= c_\nu^3 \alpha \bar{c}_3^{(0)-}, \quad a_c^- = \frac{c_{\Delta_1}}{\alpha} \frac{\bar{c}_3^{(1)-}}{\bar{c}_3^{(0)-}}, \quad B^- = c_0.
 \end{aligned} \tag{9.5.5}$$

Для відношень основних критичних амплітуд і амплітуд поправок до скейлінгу при температурах вище і нижче критичної отримано:

$$\frac{A^+}{A^-} = \frac{\bar{c}_3^{(0)+}}{\bar{c}_3^{(0)-}}, \quad \frac{a_c^+}{a_c^-} = \frac{\bar{c}_3^{(1)+}}{\bar{c}_3^{(1)-}} \frac{\bar{c}_3^{(0)-}}{\bar{c}_3^{(0)+}}. \tag{9.5.6}$$

Зауважимо, що  $B^-$  співпадає із  $B^+$  із (8.4.4). Амплітуди  $A^-$ ,  $a_c^-$  подані в табл. 9.5.

Сприйнятливість на одну частинку як функцію температури і мікроскопічних параметрів системи визначаємо на основі (9.4.12). Для неї можна записати:

$$\begin{aligned}
 \chi &= \Gamma^- |\tau|^{-\gamma} (1 + a_\chi^- |\tau|^{\Delta_1}) \frac{\mu_B^2}{\bar{\Phi}(0)}, \\
 \Gamma^- &= c_\nu^{-2} \left\{ \frac{10}{3} \frac{(G_1^{(0)})^2}{D_1^{(0)}} \left[ -1 + \left( 1 + \frac{3}{2} \frac{\bar{r}_{\mu\tau+1}^{(0)} B_1^{(0)} D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2} \right)^{1/2} \right] \right\} \times
 \end{aligned}$$

Табл. 9.5. Числові значення амплітуд  $A^-$ ,  $a_c^-$ ,  $\Gamma^-$ ,  $a_\chi^-$ 

	$b$	$b_I$	$b_{II}$	$b_{III}$	$c$	$2c$
$s = 2.0000$						
$A^-$	1.9734	1.8071	1.7436	1.2012	1.1741	
$a_c^-$	7.2567	10.5104	11.7347	21.7395	22.2353	
$\Gamma^-$	0.2133	0.2262	0.2317	0.2970	0.3015	
$a_\chi^-$	0.1872	0.2711	0.3027	0.5608	0.5736	
$s = 2.7349$						
$A^-$	1.2026	1.1027	1.0648	0.7486	0.7328	
$a_c^-$	8.1288	9.3588	9.8206	13.5975	13.7882	
$\Gamma^-$	0.2341	0.2480	0.2539	0.3211	0.3257	
$a_\chi^-$	0.3536	0.4071	0.4272	0.5915	0.5998	
$s = 3.0000$						
$A^-$	1.0331	0.9484	0.9164	0.6506	0.6373	
$a_c^-$	7.9599	8.9081	9.2633	12.1558	12.3022	
$\Gamma^-$	0.2437	0.2580	0.2640	0.3318	0.3364	
$a_\chi^-$	0.3884	0.4346	0.4519	0.5931	0.6002	

$$\times \left[ \frac{1}{5} + \left( 1 + \frac{3 \bar{r}_{\mu_r+1}^{(0)} B_1^{(0)} D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2} \right)^{1/2} - \bar{r}_{\mu_r+1}^{(0)} B_1^{(0)} \right]^{-1},$$

$$a_\chi^- = c_{\Delta_1} \bar{a}_\chi^-, \quad \bar{a}_\chi^- = \bar{\chi}_{01}^- + 2\nu\Phi_0, \quad \bar{\chi}_{01}^- = \chi_{01}^- c_{\Delta_1}^{-1}, \quad (9.5.7)$$

$$\chi_{01}^- = \bar{\Gamma}^- \left\{ \frac{8 (G_1^{(0)})^2}{3 D_1^{(0)}} \left[ -1 + \left( 1 + \frac{3 \bar{r}_{\mu_r+1}^{(0)} B_1^{(0)} D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2} \right)^{1/2} \right] \times \right. \\ \left. \times (2G_1^{(1)} - D_1^{(1)}) + 2\bar{r}_{\mu_r+1}^{(0)} B_1^{(0)} (B_1^{(1)} - 2G_1^{(1)} + D_1^{(1)}) \times \right.$$

$$\times \left( 1 + \frac{3}{2} \frac{\bar{r}_{\mu\tau+1}^{(0)} B_1^{(0)} D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2} \right)^{-1/2} - 4\bar{r}_{\mu\tau+1}^{(0)} B_1^{(0)} B_1^{(1)} \Bigg\}.$$

Тут  $\bar{\Gamma}^- = \Gamma^- c_v^2$ . Значення критичного показника сприйнятливості  $\gamma = 2\nu$  подано в табл. 9.1, а амплітуд  $\Gamma^-$ ,  $a_{\chi}^-$  – у табл. 9.5.

За результатами розрахунків для високотемпературної (розділ 8) і низькотемпературної (цей розділ) областей можна отримати графіки температурних залежностей ентропії  $S/kN$ , теплоємності  $C/kN$ , сприйнятливості  $\chi$  (в одиницях  $\mu_B^2/A$ ,  $A = \bar{\Phi}(0)/[8\pi(b/c)^3]$  – постійна потенціалу взаємодії) поблизу  $T_c$  для різних значень радіуса дії потенціалу  $b$  (див. рис. 9.2–9.4).

Розвинута тут методика розрахунку дає змогу прослідкувати еволюцію термодинамічних характеристик з ростом відношення радіуса дії потенціалу  $b$  до постійної ґратки  $c$ . Така еволюція вільної енергії системи  $F/N$  (в одиницях  $A$ ) у точці фазового переходу ( $\tau = 0$ ), а також середнього спінового моменту  $\langle\sigma\rangle$  при  $\tau = -10^{-3}$  і теплоємності системи  $C/kN$  при  $|\tau| = 10^{-3}$  зображена відповідно на рис. 9.5–9.7.

Порівняння отриманих для моделей  $\rho^4$  і  $\rho^6$  графіків температурних залежностей середнього спінового моменту та теплоємності із результатами інших авторів для тривимірної моделі Ізінґа ілюструють рис. 9.8 та 9.9, взяті з праць [381, 382]. Обчислення виконані за відсутності зовнішнього поля для випадку простої кубічної ґратки та взаємодії найближчих сусідів. У розрахунках ми вибирали радіус дії потенціалу  $b = b_I = c/(2\sqrt{3})$ . Наближення моделі  $\rho^6$  включає першу конфлуентну поправку, а моделі  $\rho^4$  – першу і другу конфлуентні поправки (див. розділи 3 та 4, а також [327, 343, 349, 386]). На рис. 9.8 лінія 1 відповідає моделі  $\rho^4$ , 2 – моделі  $\rho^6$ , 3 – даним праці [131]. На рис. 9.9 високотемпературна область представлена кривими 1, 2, 3, а низькотемпературна область – кривими 1', 2', 3'. Криві 1 і 1' на цьому рисунку одержані з використанням моделі  $\rho^4$ , 2 і 2' – моделі  $\rho^6$ , 3 і 3' – результати праці [131]. Зазначимо, що автори [131] здійснили числове дослідження основних критичних амплітуд сприйнятливості, кореляційної довжини, теплоємності, спонтанної намагнетиче-



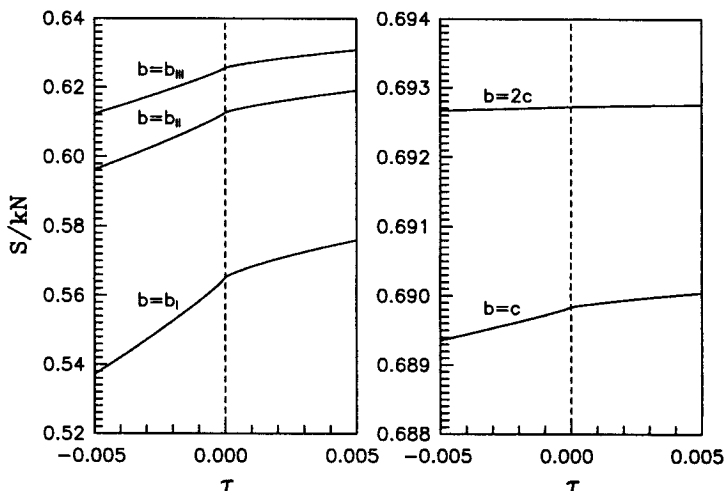


Рис. 9.2. Залежність ентропії системи від  $\tau$  для різних  $b$ . Позначення ті ж, що й на рис. 9.1

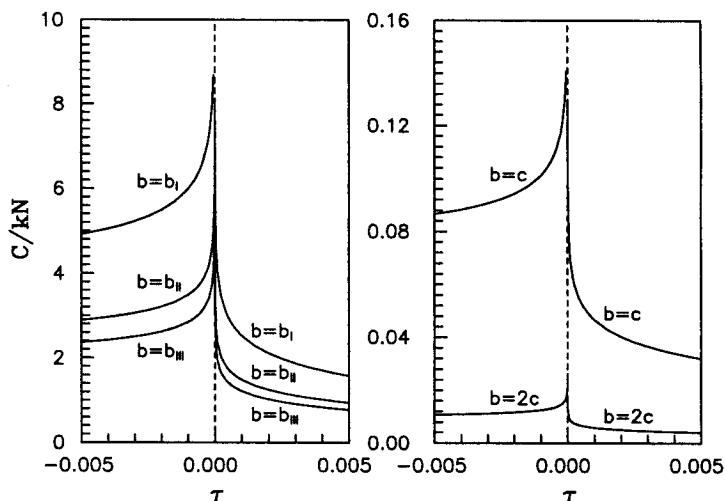


Рис. 9.3. Теплоємність спінової системи при різних значеннях  $b$ . Позначення ті ж, що й на рис. 9.1

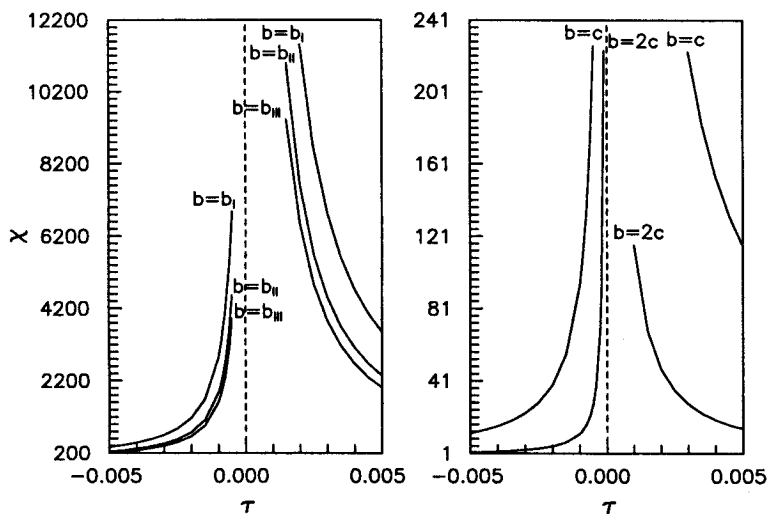


Рис. 9.4. Температурна залежність сприйнятливості системи для різних значень  $b$ . Позначення ті ж, що і на рис. 9.1

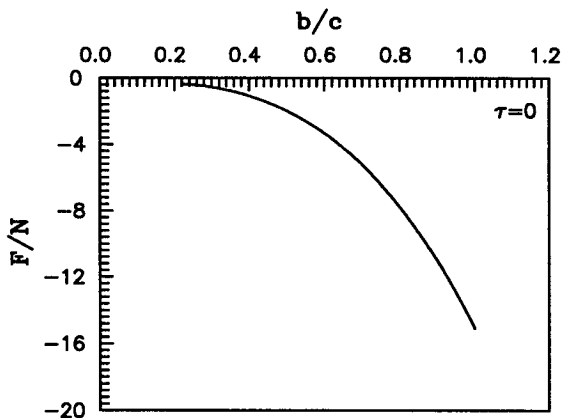


Рис. 9.5. Залежність вільної енергії системи в точці фазового переходу ( $\tau = 0$ ) від відношення радіуса дії експонентно спадного потенціалу взаємодії  $b$  до постійної простої кубічної ґратки  $c$

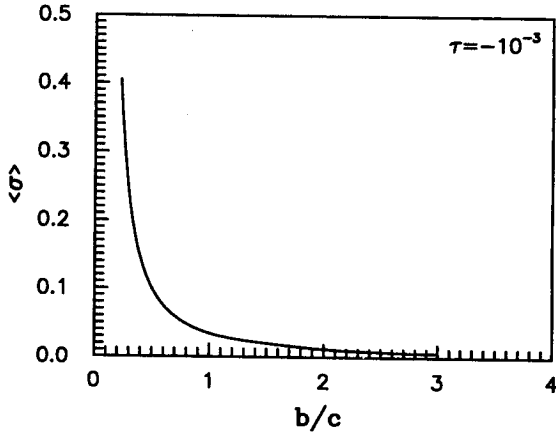


Рис. 9.6. Поведінка середнього спінового моменту із збільшенням відношення  $b/c$

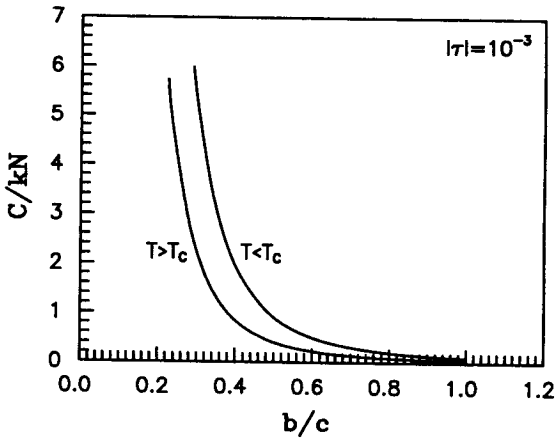


Рис. 9.7. Еволюція теплоємності системи із зростанням відношення  $b/c$

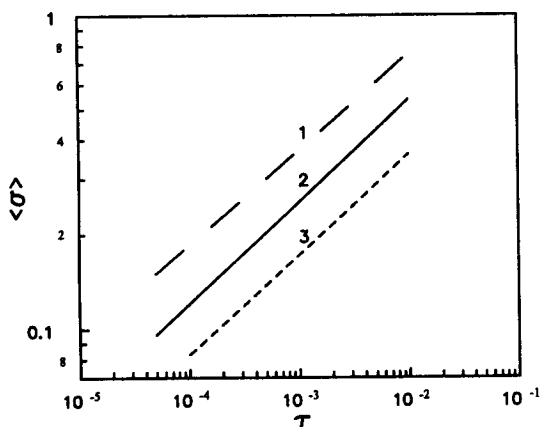


Рис. 9.8. Температурна залежність параметра порядку тривимірної моделі Ізінга на простій кубічній ґратці: 1 відповідає моделі  $\rho^4$ , 2 – моделі  $\rho^6$ , 3 – даним [131]

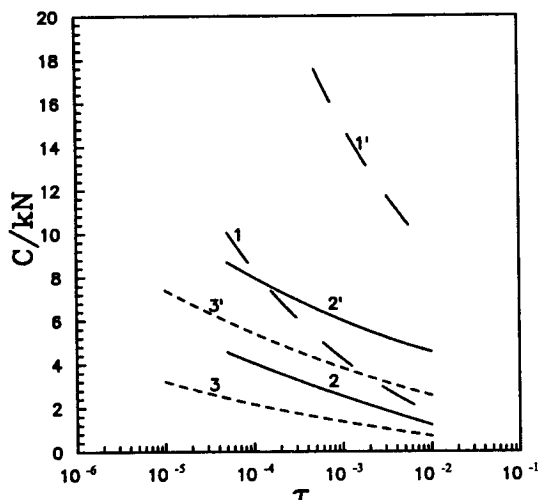


Рис. 9.9. Залежність теплоємності системи від  $\tau = |T - T_c|/T_c$ . Криві 1, 2, 3 відповідають випадку  $T > T_c$ , 1', 2', 3' –  $T < T_c$ , причому 1, 1' – моделі  $\rho^4$ , 2, 2' – моделі  $\rho^6$ , 3, 3' – результатам [131]

ності тривимірної ізінгівської системи, універсальних відношень цих амплітуд. Тут використані сучасні оцінки критичної температури і показників у поєднанні з диференціальними апроксимантами при екстраполяції наявних рядів. Як бачимо із рис. 9.8 і 9.9, графіки для моделі  $\rho^6$  краще узгоджуються з результатами праці [131], ніж оцінки в наближенні моделі  $\rho^4$ .

Одержані вирази для термодинамічних характеристик дають змогу також оцінити вплив ускладнення форми негаусової густини міри на їх залежність від параметра РГ  $s$ . Безпосереднє порівняння графіків температурних залежностей термодинамічних функцій, обчислених для різних значень параметра  $s$  і моделей  $\rho^4$  та  $\rho^6$ , підтверджує висновок про послаблення залежності цих функцій від  $s$  з переходом до складнішого розподілу мод коливань густини спінового моменту. Криві залежностей середнього спінового моменту, сприйнятливості (в одиницях  $\mu_B^2/\Phi(0)$ ), ентропії та теплоємності системи від  $\tau$  для  $s = 2, 2.5, 3$  зображені відповідно на рис. 9.10–9.13. Суцільні криві на цих рисунках відповідають моделі  $\rho^6$  без врахування конфлуентних поправок, а штрихові криві – моделі  $\rho^4$  з врахуванням першої і другої конфлуентних поправок. Як бачимо, залежність термодинамічних характеристик від  $s$  для моделі  $\rho^6$  зменшується порівняно з моделлю  $\rho^4$ .

Отже, в рамках шестирної густини міри (модель  $\rho^6$ ) на мікроскопічному рівні здійснено опис критичної поведінки однокомпонентної спінової системи. В єдиному підході одержано універсальні (критичні показники) і неуніверсальні (вирази та значення основних критичних амплітуд і амплітуд конфлуентних поправок термодинамічних характеристик) величини. Проведено порівняння з моделлю  $\rho^4$ . Результати проведених досліджень показують, що модель  $\rho^6$  забезпечує кількісну картину опису. Отримані результати для тривимірної ізінгоподібної системи з використанням моделей  $\rho^4$  і  $\rho^6$  узгоджуються з даними інших авторів. Так, наприклад нами в [344, 382] отримані критичні показники кореляційної довжини  $\nu = 0.637$ , теплоємності  $\alpha = 0.088$ , середнього спінового моменту  $\beta = 0.319$ , сприйнятливості  $\gamma = 1.275$ , показник першої поправки до скейлінгу  $\Delta_1 = 0.525$  (модель  $\rho^6$ ,  $s = s^*$ ), а також універсальні відношення крити-

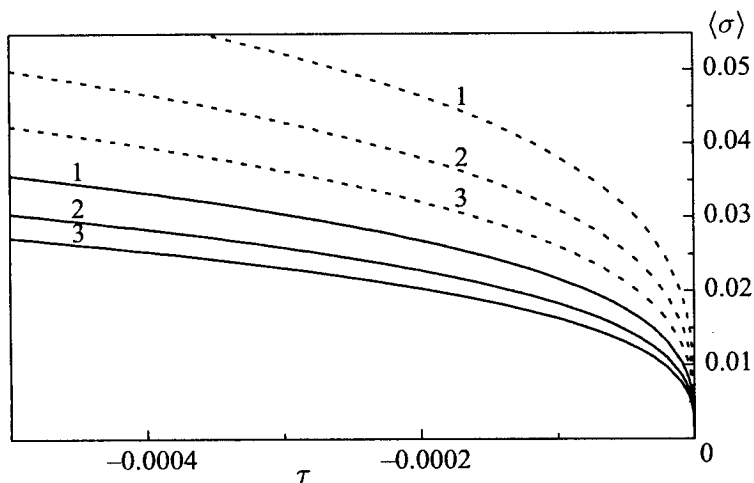


Рис. 9.10. Середній спіновий момент  $\langle \sigma \rangle$  для різних значень параметра РГ  $s$  в рамках моделі  $\rho^6$  (суцільні криві). Для порівняння приведений середній спіновий момент, розрахований у наближеній моделі  $\rho^4$  (штрихові криві). Кривій 1 відповідають значення  $s = 2$ , 2 -  $s = 2.5$ , 3 -  $s = 3$

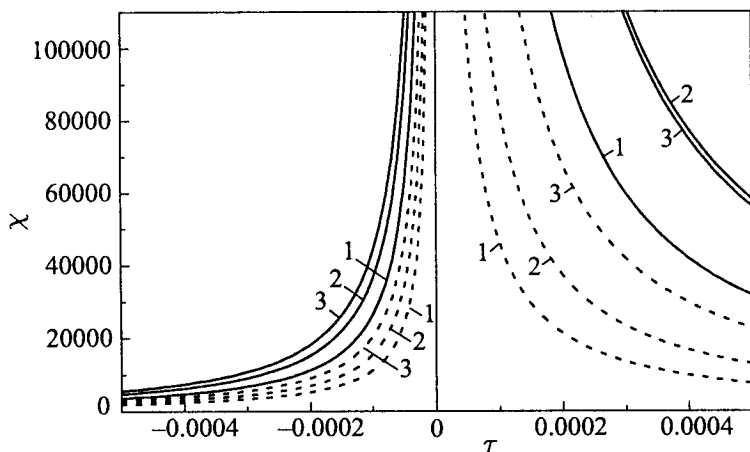


Рис. 9.11. Температурна залежність сприйнятливості системи з використанням моделей  $\rho^6$  та  $\rho^4$ . Позначення ті ж, що й на рис. 9.10

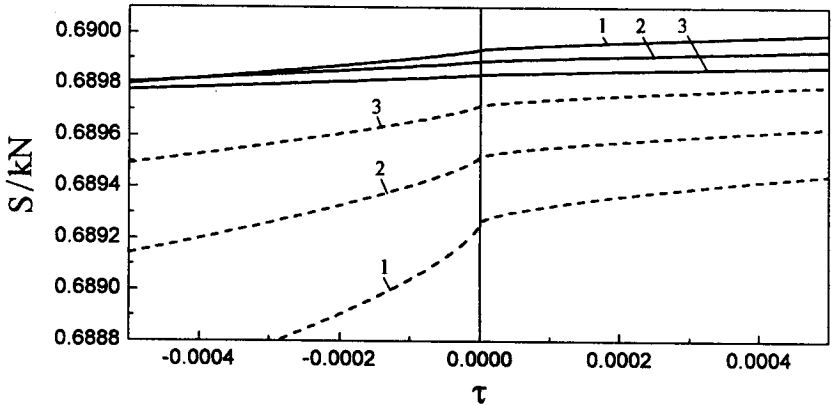


Рис. 9.12. Залежність ентропії системи від  $\tau$  (моделі  $\rho^6$  і  $\rho^4$ ). Позначення ті ж, що й на рис. 9.10

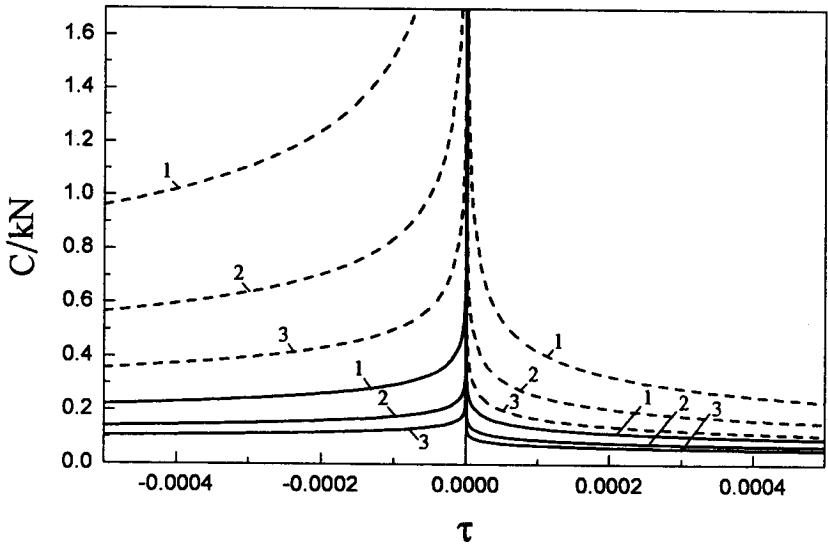


Рис. 9.13. Теплоємність системи в наближенні моделі  $\rho^6$ . Порівняння з моделлю  $\rho^4$ . Позначення ті ж, що й на рис. 9.10

чних амплітуд теплоємності  $A^+/A^- = 0.435$ , сприйнятливості  $\Gamma^+/\Gamma^- = 6.967$  і їх комбінації  $\mathcal{P} = [1 - A^+/A^-]/\alpha = 3.054$ ,  $R_c^+ = A^+\Gamma^+/[s_0^3(\langle\sigma\rangle^{(0)})^2] = 0.098$  (модель  $\rho^4$ ,  $s = s^*$ ), де  $s_0 = \pi\sqrt{2}b/c$ ,  $\langle\sigma\rangle^{(0)}$  – критична амплітуда середнього спінового моменту (див. (9.4.6)). Вони узгоджуються із значеннями  $\nu = 0.630$ ,  $\alpha = 0.110$ ,  $\beta = 0.325$ ,  $\gamma = 1.241$ ,  $\Delta_1 = 0.498$ ,  $A^+/A^- = 0.465$ ,  $\Gamma^+/\Gamma^- = 5.12$ ,  $\mathcal{P} = 3.90$ ,  $R_c^+ = 0.052$ , одержаними в рамках теоретико-польового підходу [101, 118, 387], та із значеннями  $\nu = 0.638$ ,  $\alpha = 0.125$ ,  $\beta = 0.312$ ,  $\gamma = 1.250$ ,  $\Delta_1 = 0.50$ ,  $A^+/A^- = 0.51$ ,  $\Gamma^+/\Gamma^- = 5.07$ ,  $R_c^+ = 0.059$ , розрахованими з допомогою високотемпературних розкладів [144, 147, 148, 158, 388]. Існуючі нині методи дають змогу обчислювати універсальні величини з досить високою точністю (див., наприклад, [28, 131, 340, 389, 390]). Перевага методу КЗ полягає в змозі одержанти та дослідити вирази для термодинамічних характеристик як функції мікроскопічних параметрів системи.





## Розділ 10

# Розрахунок на мікроскопічному рівні рівняння стану тривимірної спінової моделі

У попередньому розділі, виходячи із рівняння стану для моделі  $\rho^6$ , знайдено як критичний показник  $\beta$ , що характеризує температурну залежність параметра порядку, так і критичний показник  $\delta$ , що описує його реакцію на зовнішнє поле. Однак з'ясувалось, що в рамках моделей  $\rho^{2m}$ , де  $m \geq 3$  (тобто починаючи з моделі  $\rho^6$ ), показник  $\delta$  можна розраховувати без будь-яких додаткових припущень.

Предметом цього розділу є вивчення рівняння стану тривимірної однокомпонентної системи. На основі шестирної густини міри запропонований метод розрахунку рівняння стану тривимірної ізінгоподібної системи, що дає змогу описати у критичній області поведінку параметра порядку як функцію температури, зовнішнього поля і мікроскопічних параметрів системи. Розглянуто області температур вище та нижче від  $T_c$ . Виконано дослідження температурної та польової залежності параметра порядку спінової системи.

## 10.1. Параметр порядку однокомпонентної системи і роль довгохвильових флуктуацій

Вихідним пунктом дослідження служитиме вираз для статистичної суми тривимірної ізінгоподібної системи у зовнішньому полі. Гамільтоніан системи задано виразом (1.2.1). Для фур'є-образу потенціалу взаємодії використовуватимемо апроксимацію (1.2.12), де покладемо  $\bar{\Phi} = 0$ . Можемо записати [333, 391]

$$\begin{aligned}
 Z = & 2^N 2^{(N'-1)/2} \exp(a'_0 N') \int \exp[-1/2 \sum_{k \leq B'} d'(k) \rho_k \rho_{-k} - \\
 & - \sum_{l \geq 2} \frac{1}{(2l)!} (N')^{1-l} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_{2l} \\ k_i \leq B'}} a'_{2l} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_{2l}} \times \\
 & \times \delta_{k_1 + \dots + k_{2l}} + \sqrt{N} \beta h \rho_0] (d\rho)^{N'}. \quad (10.1.1)
 \end{aligned}$$

Як бачимо із приведених вище формул (2.5.9), (2.5.12), (2.5.13)<sup>1</sup>, початкові значення коефіцієнтів  $a'_{2l}$  залежать від мікроскопічних параметрів системи. У випадку  $b \gg c$  для коефіцієнтів  $a'_{2l}$  справедливі співвідношення (2.5.14). Для достатньо великих значень радіуса дії потенціалу  $b$  знаходимо

$$a_0^{(\Gamma)} = \lim_{b/c \rightarrow \infty} a'_0 = -\frac{1}{2} \ln(2\pi), \quad a_2^{(\Gamma)} = \lim_{b/c \rightarrow \infty} a'_2 = 1, \quad (10.1.2)$$

всі інші  $a'_{2l}$  ( $l \geq 2$ ) прямують до нуля. Статистична сума (10.1.1) в цьому наближенні набуває вигляду:

$$Z = \frac{2^{N-1/2}}{\pi^{N'/2}} \int \exp[-\frac{1}{2} \sum_{k \leq B'} (1 - \beta \bar{\Phi}(k)) \rho_k \rho_{-k} + \sqrt{N} \beta h \rho_0] (d\rho)^{N'}. \quad (10.1.3)$$

<sup>1</sup>Приведені формули відповідають наближенню моделі  $\rho^4$ . У випадку використання складніших моделей типу  $\rho^6$  і вище, отримуємо аналогічні вирази, в яких функції параболічного циліндра переходять у складніші спеціальні функції з більшою кількістю аргументів (див. розділ 6).

Температура фазового переходу  $T_c^{(\Gamma)}$ , що відповідає границі  $b/c \rightarrow \infty$ , визначається співвідношенням

$$\beta_c^{(\Gamma)} \tilde{\Phi}(0) = 1.$$

При температурах нижчих від  $T_c^{(\Gamma)}$  вираз (10.1.3) приводить до нефізичних розбіжностей вільної енергії та інших характеристик моделі, які зв'язані з нехтуванням негаусовими доданками в (10.1.1). Останні є малими, однак принципово впливають на опис фазового переходу. Умова  $b \gg c$  відповідає переходу до моделі з далекосяжним потенціалом взаємодії. Він відповідає розгляду специфічної модельної системи, що не має реального фізичного аналога.

Далі вважатимемо, що радіус дії потенціалу  $b$  і постійна ґратки  $c$  – співмірні величини. У цьому випадку коефіцієнти  $a'_{2l}$  для всіх значень  $l \geq 0$  приймають ненульові значення і в показнику експоненти підінтегрального виразу (10.1.1) необхідно брати до уваги, крім гаусового, доданки, які пропорційні вищим степеням змінної  $\rho_{\mathbf{k}}$ .

Для проведення конкретних розрахунків обмежимося у (10.1.1) шостим степенем змінної  $\rho_{\mathbf{k}}$ . Отже, статистична сума розглядатиметься нами в наближенні моделі  $\rho^6$ , тобто

$$\begin{aligned} Z = & 2^N 2^{(N'-1)/2} \exp(a'_0 N') \int \exp[-1/2 \sum_{\mathbf{k} \leq B'} d'(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \\ & - \frac{1}{4! N'} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_i \leq B'}} a'_4 \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} - \\ & - \frac{1}{6! (N')^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_6 \\ \mathbf{k}_i \leq B'}} a'_6 \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_6} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_6} + \sqrt{N} \beta h \rho_0] (d\rho)^{N'}. \end{aligned} \quad (10.1.4)$$

Тепер перейдемо до розрахунку самого рівняння стану, яке і в останні роки не втрачає своєї актуальності (див., наприклад, [392], де рівняння стану для систем класу універсальності тривимірної моделі Ізінґа досліджується в рамках теоретико-

польового підходу з використанням технічних прийомів РГ). Загальна ідея отримання рівняння стану полягає в обчисленні найбільш ймовірного значення  $\rho_0$ . У випадку досліджуваної моделі змінна  $\rho_0$  відповідає оператору  $\hat{\rho}_0 = 1/N \sum_1 \sigma_1$ , середнє значення якого зв'язане з параметром порядку. Приступимо до обговорення умови, яка може бути використана для одержання рівняння стану. Здійснимо в (10.1.4) заміну змінних

$$\rho_{\mathbf{k}} = \rho'_{\mathbf{k}} + \sqrt{N} \eta \delta_{\mathbf{k}}, \quad (10.1.5)$$

що еквівалентно виділенню із змінної  $\rho_0$  деякої макроскопічної величини. Внаслідок такої заміни із (10.1.4) знаходимо

$$Z = 2^N 2^{(N'-1)/2} \exp(a'_0 N') \exp(-NE(\eta)) \int \mathcal{W}(\rho, \eta) (d\rho)^{N'}. \quad (10.1.6)$$

Тут

$$E(\eta) = r\eta^2 + u\eta^4 + v\eta^6 - \beta h\eta, \quad (10.1.7)$$

де  $r = (a'_2 - \beta \tilde{\Phi}(0))/2$ ,  $u = \frac{a'_4}{4!} s_0^3$ ,  $v = \frac{a'_6}{6!} s_0^6$ , а вираз для  $\mathcal{W}(\rho, \eta)$  набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \mathcal{W}(\rho, \eta) = & \exp\{-1/2 \sum_{\mathbf{k} \leq B'} \tilde{d}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - \\ & - \frac{\tilde{a}_3}{3! N'} \sum_{\mathbf{k}_i \leq B'} \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \rho_{\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3} - \\ & - \frac{\tilde{a}_4}{4! N'} \sum_{\mathbf{k}_i \leq B'} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} - \\ & - \frac{\tilde{a}_5}{5! (N')^2} \sum_{\mathbf{k}_i \leq B'} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_5} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_5} - \\ & - \frac{\tilde{a}_6}{6! (N')^2} \sum_{\mathbf{k}_i \leq B'} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_6} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_6} + \sqrt{N} \tilde{h} \rho_0\}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\tilde{d}(k) &= \tilde{a}_2 - \beta \tilde{\Phi}(k), \quad \tilde{a}_2 = a'_2 + \frac{\eta^2}{2} s_0^3 (a'_4 + \frac{a'_6 \eta^2}{12} s_0^3), \\ \tilde{a}_3 &= \sqrt{N} \eta (a'_4 + \frac{a'_6 \eta^2}{6} s_0^3), \quad \tilde{a}_4 = a'_4 + \frac{a'_6 \eta^2}{2} s_0^3, \\ \tilde{a}_5 &= a'_6 \sqrt{N} \eta, \quad \tilde{a}_6 = a'_6, \\ \tilde{h} &= \beta h - d'(0) \eta - \frac{\eta^3}{3!} s_0^3 (a'_4 + \frac{a'_6 \eta^2}{20} s_0^3).\end{aligned}$$

Розрахунок величини  $\eta$  здійснюється із відомого рівняння

$$\frac{\partial \tilde{E}(\eta)}{\partial \eta} = 0, \quad (10.1.8)$$

в якому

$$\tilde{E}(\eta) = E(\eta) + E_1(\eta). \quad (10.1.9)$$

Тут  $E(\eta)$  задано в (10.1.7), а для  $E_1(\eta)$  маємо

$$E_1(\eta) = -\frac{1}{N} \ln Z_\eta, \quad (10.1.10)$$

де

$$Z_\eta = \int \mathcal{W}(\rho, \eta) (d\rho)^{N'}. \quad (10.1.11)$$

Серед розв'язків цього нелінійного рівняння слід вибрати ті, які відповідають умові стійкості системи. Друга похідна  $\tilde{E}(\eta)$  має задовільняти нерівність

$$\frac{\partial^2 \tilde{E}(\eta)}{\partial \eta^2} \geq 0. \quad (10.1.12)$$

Основна проблема при розв'язуванні рівняння (10.1.8) полягає в коректному врахуванні внеску від доданку  $E_1(\eta)$ . Перед тим, як приступити до її вирішення, розглянемо рівняння (10.1.8) у

простому наближенні. Припустимо, що  $E_1(\eta) = \text{const}$ , а для  $E(\eta)$  обмежимося виразом

$$E(\eta) = r\eta^2 + u\eta^4 - x\eta. \quad (10.1.13)$$

Тут  $r = r'(T - T_c^{(\Gamma)})$ ,  $r' = a_2'/(2T_c^{(\Gamma)})$ ,  $T_c^{(\Gamma)} = \tilde{\Phi}(0)/a_2'$ ,  $x = \beta h$ . Тоді згідно (10.1.8) параметр порядку (при  $h = 0$ ) визначається співвідношенням

$$\eta = \pm \left( \frac{r'T_c^{(\Gamma)}}{2u} \right)^{1/2} |\tau_0|^\beta, \quad (10.1.14)$$

де

$$\tau_0 = \frac{T - T_c^{(\Gamma)}}{T_c^{(\Gamma)}}. \quad (10.1.15)$$

Критичний показник  $\beta$ , який відповідає цьому наближенню, дорівнює “класичному” значенню  $1/2$ . За наявності зовнішнього поля ( $h \neq 0$ ) формула (10.1.13) приводить до такого рівняння стану

$$2r\eta + 4u\eta^3 = x. \quad (10.1.16)$$

У випадку  $T = T_c^{(\Gamma)}$  параметр порядку

$$\eta = (4u)^{-1/3} x^{1/\delta}, \quad (10.1.17)$$

де критичний показник  $\delta$  набуває “класичного” значення ( $\delta = 3$ ).

Критичні показники  $\beta$  і  $\delta$  не змінюються при включенні до (10.1.13) доданка  $v\eta^6$ . Величина  $E(\eta)$  у (10.1.6) є, по суті, розкладом Ландау для вільної енергії за степенями параметра порядку [36]. Коефіцієнт біля  $\eta^2$  пропорційний<sup>2</sup>  $T - T_c^{(\Gamma)}$ , а коефіцієнти біля вищих степенів  $\eta$  постійні [17, 36]. Відмінність “класичних”

<sup>2</sup>Пропорційність  $r$  до  $T - T_c^{(\Gamma)}$  пов'язана з нехтуванням залежності від  $\eta$  у  $W(\rho, \eta)$ .

критичних показників від істинних (див., наприклад, [101]) пов'язана з нехтуванням залежності від  $\eta$  у виразі для  $E_1(\eta)$ , що входить до складу (10.1.9). Отже, можна зробити висновок, що використання розкладу Ландау (10.1.7) для побудови рівняння стану можливе лише за умови, коли величина (10.1.10) як функція  $\eta$  не впливає суттєво на  $\bar{E}(\eta)$  із (10.1.9). Як зазначимо нижче, це справедливо для далеких від точки фазового переходу температур, а не в критичній області. Тут інтегрування за змінними  $\rho_k$  у (10.1.11) приводить до суттєвої відмінності виразів  $E(\eta)$  і  $\bar{E}(\eta)$ .

Врахування в (10.1.8) доданку  $E_1(\eta)$  згідно (10.1.9)–(10.1.11) становить один із можливих способів розрахунку параметра порядку. Основою цього способу є одержання явного виразу  $Z_\eta$  як функції  $\eta$ . Вигляд підінтегральної функції, що входить до (10.1.11), свідчить про досить складний шлях реалізації вказаного способу.

Інший спосіб отримання рівняння стану полягає в тому, що вихідний вираз із (10.1.4) інтегрується за всіма змінними  $\rho_k$ , крім  $\rho_0$ , а обчислення параметра порядку  $\eta$  пов'язане із знаходженням значення КЗ  $\rho_0$ , при якому є екстремум підінтегрального виразу (див. §9.3 та §9.4)

$$Z = Z_\mu \int \exp E(\rho_0) d\rho_0. \quad (10.1.18)$$

Тут  $Z_\mu$  – це не залежна від параметра порядку частина статистичної суми. Вираз для  $E(\rho_0)$  одержується шляхом послідовного виключення з розгляду КЗ  $\rho_k$  з  $k \neq 0$ .

У цьому розділі запропонований об'єднаний варіант першого і другого описаних вище способів розрахунку рівняння стану. Спочатку статистична сума (10.1.4) інтегрується за “несуттєвими” змінними  $\rho_k$  з  $B_{m_\tau} < k \leq B'$ , де  $B_{m_\tau} = B' s^{-m_\tau}$ ,  $m_\tau$  – номер ефективної блочної структури, після якого відбувається вихід системи з критичного режиму<sup>3</sup>. Це відповідає ідеології другого способу розрахунку. Коли розміри ефективних спінових блоків стають порядку кореляційної довжини системи  $\xi$  (і при подальшому інтегруванні перевищували б його), застосовують перший

<sup>3</sup>Область КР характеризується РГ симетрією і відповідає наявності сильнороскельованих спінових блоків.



спосіб одержання рівняння стану. Перевага запропонованого методу одержання рівняння стану полягає в тому, що у виразі для  $\bar{E}(\eta)$  (10.1.9) величина  $E_1(\eta)$  не змінює залежності  $\bar{E}(\eta)$  від  $\eta$ , оскільки при розгляді достатньо великих за розмірами ефективних спінових блоків вона прямує до постійного значення. З іншого боку, якщо температура не близька до  $T_c$ , відпадає потреба у попередньому виключенні “несуттєвих” змінних  $\rho_k$ , оскільки в цьому випадку кореляційна довжина системи співмірна з радіусом дії потенціалу взаємодії ( $\xi \sim b \sim c$ ). Тут добре працює теорія Ландау і вираз (10.1.7) цілком може бути використаний для побудови рівняння стану.

Наступні параграфи присвячені методу розрахунку рівняння стану в області температур, що включає критичну точку.

## 10.2. Рівняння стану системи при $T > T_c$

Розглянемо статистичну суму (10.1.4) ізінгівської системи. Її обчислення здійснюється за методикою, описаною в розділі 2. При  $T > T_c$  статистична сума в наближенні моделі  $\rho^6$  набуває вигляду (див. (8.1.7)):

$$Z = 2^N 2^{(N_{m_\tau+1}-1)/2} Q_0 Q_1 \dots Q_{m_\tau} [Q(P_{m_\tau})]^{N_{m_\tau+1}} \times \int \mathcal{W}_6^{(m_\tau+1)}(\rho)(d\rho)^{N_{m_\tau+1}}. \quad (10.2.1)$$

Тут  $Q_n$  – парціальна статистична сума  $n$ -ої блочної структури,  $N_{m_\tau+1} = N' s^{-3(m_\tau+1)}$ . Ефективна густина міри  $\mathcal{W}_6^{(m_\tau+1)}(\rho)$  визначається виразом

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_6^{(m_\tau+1)}(\rho) = \exp\{-1/2 \sum_{k \leq B_{m_\tau+1}} (s^{-2(m_\tau+1)} r_{m_\tau+1} + \\ + 2\beta \tilde{\Phi}(0) b^2 k^2) \rho_k \rho_{-k} - \frac{u_{m_\tau+1}}{4! N'} s^{-(m_\tau+1)} \times \\ \times \sum_{k_i \leq B_{m_\tau+1}} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1+\dots+k_4} - \frac{w_{m_\tau+1}}{6! (N')^2} \times \\ \times \sum_{k_i \leq B_{m_\tau+1}} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_6} \delta_{k_1+\dots+k_6} + \sqrt{N} \beta h \rho_0\}, \end{aligned} \quad (10.2.2)$$

а  $Q(P_{m_\tau})$  виражається через функції основних і проміжних аргументів. Виконаємо в (10.2.1) заміну змінних

$$\rho_k = \rho'_k + \sqrt{N}\sigma\delta_k, \quad (10.2.3)$$

а значення  $\sigma$  визначимо з рівняння

$$\frac{\partial E^{(1)}(\sigma, m_\tau + 1)}{\partial \sigma} = 0, \quad (10.2.4)$$

де

$$\begin{aligned} E^{(1)}(\sigma, m_\tau + 1) = & -N\left(\frac{1}{2}s^{-2(m_\tau+1)}r_{m_\tau+1}\sigma^2 + \right. \\ & + \frac{1}{4!}s_0^3s^{-(m_\tau+1)}u_{m_\tau+1}\sigma^4 + \\ & \left. + \frac{1}{6!}s_0^6w_{m_\tau+1}\sigma^6 - \beta h\sigma\right). \end{aligned} \quad (10.2.5)$$

Зазначимо, що заміна змінних (10.2.3) з першого погляду здається еквівалентною до (10.1.5), де було одержано вираз для розкладу Ландау за степенями параметра порядку. Однак вона принципово інша. Нагадаємо, що вираз (10.1.7) правильно описуватиме критичну поведінку системи лише в тому випадку, коли величина  $Z_\eta$  (10.1.11) містить слабку залежність від  $\eta$  і не змінює принципово виразу для  $\tilde{E}(\eta)$ . Така ситуація складається тоді, коли  $\mathcal{W}(\rho, \eta)$  є гаусовою густиною міри і передбачає при інтегруванні статистичної суми розділення змінних. Тому заміна змінних (10.2.3) має здійснюватися на  $(m_\tau + 1)$ -му етапі інтегрування статистичної суми, оскільки розподіл фаз флуктуацій для блочних структур при  $n > m_\tau$  стає гаусовим (див. розділи 2 та 8). Для знаходження розв'язку (10.2.4) потрібно визначити точку виходу  $m_\tau$  системи з КР. При цьому, як і раніше, використовуватимемо умову

$$\frac{r_{m_\tau+1} - r^{(0)}}{r^{(0)}} = -\delta,$$

де  $\delta$  – деяка постійна ( $0 < \delta \leq 1$ ). Поблизу фіксованої точки величини  $r_n, u_n, w_n$  задовільняють формулам (див. §6.3):

$$\begin{aligned} r_n &= r^{(0)} + c_1 E_1^n + c_2 w_{12}^{(0)} (u^{(0)})^{-1/2} E_2^n + c_3 w_{13}^{(0)} (u^{(0)})^{-1} E_3^n, \\ u_n &= u^{(0)} + c_1 w_{21}^{(0)} (u^{(0)})^{1/2} E_1^n + c_2 E_2^n + c_3 w_{23}^{(0)} (u^{(0)})^{-1/2} E_3^n, \\ w_n &= w^{(0)} + c_1 w_{31}^{(0)} u^{(0)} E_1^n + c_2 w_{32}^{(0)} (u^{(0)})^{1/2} E_2^n + c_3 E_3^n. \end{aligned} \quad (10.2.6)$$

Тут  $E_l$  – власні значення матриці лінійного перетворення РГ. Координати фіксованої точки  $r^{(0)} = -f_0 \beta \tilde{\Phi}(0)$ ,  $u^{(0)} = \varphi_0 (\beta \tilde{\Phi}(0))^2$ ,  $w^{(0)} = \psi_0 (\beta \tilde{\Phi}(0))^3$  характеризуються універсальними величинами, які в наближенні моделі  $\rho^6$  при  $s = 3$  приймають значення:  $f_0 = 0.6166$ ,  $\varphi_0 = 0.6426$ ,  $\psi_0 = 0.5178$ .

Коефіцієнти  $c_l$  як функції температури та вирази для незалежних від температури величин  $w_{il}^{(0)}$  приведені в §6.3. Використовуючи явні розв'язки РС (10.2.6) для величин  $r_n, u_n, w_n$  і приймаючи до уваги те, що  $E_2^{m_\tau+1} \ll 1$  і  $E_3^{m_\tau+1} \ll 1$ , одержуємо рівняння для визначення  $m_\tau$ :

$$c_1 E_1^{m_\tau+1} = \delta f_0 \beta \tilde{\Phi}(0). \quad (10.2.7)$$

Це рівняння можна узагальнити, враховуючи доданки, пропорційні  $E_1^{m_\tau+1}$  ( $l \geq 2$ ), що приведе до скейлінгових поправок (див. §8.2). Із (10.2.7) знаходимо

$$m_\tau = -\frac{\ln \tau}{\ln E_1} + m_0 - 1, \quad (10.2.8)$$

де, як і раніше,  $\tau = (T - T_c)/T_c$ ,  $m_0 = \ln(\delta f_0 / \tilde{c}_1^{(0)}) / \ln E_1$ ,  $E_1$  – більше власне значення матриці лінійного перетворення РГ. Величина  $\tilde{c}_1^{(0)}$  задається виразом (6.3.25). Приймаючи до уваги значення температури фазового переходу  $\beta_c \tilde{\Phi}(0) = 1.1628$  (випадок  $s = 3, b = c$ ), знаходимо  $\tilde{c}_1^{(0)} = 0.7630$  [344, 367]. Зазначимо, що справедлива така рівність:

$$s^{-(m_\tau+1)} = \tau^\nu c_\nu, \quad c_\nu = \left(\frac{\tilde{c}_1^{(0)}}{\delta f_0}\right)^\nu. \quad (10.2.9)$$

Для критичного показника кореляційної довжини моделі  $\rho^6$  отримуємо  $\nu = 0.640$  (див. табл. 6.3).

Величина  $m_\tau$  характеризує розміри ділянки КР. Оскільки  $m_\tau \sim -\ln \tau$ , то в границі  $\tau \rightarrow 0$  маємо  $m_\tau \rightarrow \infty$  і тоді область КР існує для довільно великого значення номера  $n$ . При  $\tau \neq 0$  вихід із КР визначається величиною  $\delta$ . Для проведення розрахунків зручно представити  $\delta$  у вигляді

$$\delta = \delta_0 \tau^\kappa, \quad (10.2.10)$$

де показник  $\kappa \geq 0$ . При  $\kappa > 0$  вихід із КР малий і це дає змогу описати поведінку  $r_n$  як функції  $n$  при  $\tau \rightarrow 0$ . Для скінченних значень  $\tau$  величина  $\delta$  є порядку  $r^{(0)}$  і тут має виконуватися граничний перехід  $\kappa \rightarrow 0$ , що відповідає рівності  $\delta = \delta_0$ . Використовуючи розв'язки РС (10.2.6), запишемо вирази для величин  $r_{m_\tau+1}$ ,  $u_{m_\tau+1}$ ,  $w_{m_\tau+1}$ . З врахуванням (10.2.10) маємо:

$$r_{m_\tau+1} = -\beta \tilde{\Phi}(0) \bar{r}_{m_\tau+1}, \quad \bar{r}_{m_\tau+1} = f_0(1 - \delta_0 \tau^\kappa), \quad (10.2.11)$$

$$u_{m_\tau+1} = (\beta \tilde{\Phi}(0))^2 \bar{u}_{m_\tau+1}, \quad \bar{u}_{m_\tau+1} = \varphi_0 \left( 1 + \frac{f_0 w_{21}^{(0)}}{\sqrt{\varphi_0}} \delta_0 \tau^\kappa \right),$$

$$w_{m_\tau+1} = (\beta \tilde{\Phi}(0))^3 \bar{w}_{m_\tau+1}, \quad \bar{w}_{m_\tau+1} = \psi_0 \left( 1 + \frac{f_0 \varphi_0 w_{31}^{(0)}}{\psi_0} \delta_0 \tau^\kappa \right).$$

Далі вважатимемо, що  $\kappa \ll 1$ . Інтегрування статистичної суми (10.2.1) при  $\tau > 0$  з використанням негаусового розподілу є необхідним лише для від'ємних значень  $r_n$  ( $\bar{r}_n > 0$ ). При  $r_n > 0$  ( $\bar{r}_n < 0$ ) розподіл мод коливань густини спінового моменту набуває гаусового характеру. У критичній області еволюція  $r_n$  з ростом номера  $n$  [333, 391] схематично нагадує картину поведінки  $x_n$  на рис. 4.1. На ділянці  $n \leq m_\tau$  величина  $r_n$  близька до незалежного від  $n$  від'ємного значення  $r^{(0)}$ . При  $n > m_\tau$  спостерігається зростання  $r_n$  із збільшенням  $n$ . При деякому значенні  $n$  ( $n > m_\tau$ ) коефіцієнт  $r_n$  стає додатним і продовжує залишатися таким для всіх  $n > m$ . Зміна знаку величини  $r_n$  досягається у другій блочній структурі, яка утворюється після точки виходу системи із КР (при конкретному значенні  $\delta$ ). Далі всі розрахунки

вестимемо для  $(m_\tau + 2)$ -ої блочної структури. Для конкретності виберемо  $\delta_0 = 0.3$ . На основі (10.2.6) запишемо:

$$r_{m_\tau+2} = -\beta\tilde{\Phi}(0)\bar{r}_{m_\tau+2}, \quad \bar{r}_{m_\tau+2} = f_0(1 - E_1\delta_0\tau^\varkappa), \quad (10.2.12)$$

$$u_{m_\tau+2} = (\beta\tilde{\Phi}(0))^2\bar{u}_{m_\tau+2}, \quad \bar{u}_{m_\tau+2} = \varphi_0\left(1 + \frac{f_0w_{21}^{(0)}}{\sqrt{\varphi_0}}E_1\delta_0\tau^\varkappa\right),$$

$$w_{m_\tau+2} = (\beta\tilde{\Phi}(0))^3\bar{w}_{m_\tau+2}, \quad \bar{w}_{m_\tau+2} = \psi_0\left(1 + \frac{f_0\varphi_0w_{31}^{(0)}}{\psi_0}E_1\delta_0\tau^\varkappa\right).$$

Графік залежності коефіцієнтів  $\bar{r} \equiv \bar{r}_{m_\tau+m}$ ,  $\bar{u} \equiv \bar{u}_{m_\tau+m}$ ,  $\bar{w} \equiv \bar{w}_{m_\tau+m}$  від  $\delta$  при  $m = 1$  зображений на рис.10.1, а, та при  $m = 2$  - на рис. 10.1, б.

Точка виходу  $m_\tau$  (10.2.8) системи із КР з врахуванням температурної залежності  $\delta$  (10.2.10) набуває форми

$$m_\tau = -(1 - \varkappa)\frac{\ln \tau}{\ln E_1} + m'_0 - 1, \quad (10.2.13)$$

де  $m'_0$  визначається аналогічною до  $m_0$  рівністю при заміні в ній  $\delta$  величиною  $\delta_0$ . Приймаючи до уваги (10.2.10), знаходимо

$$s^{-(m_\tau+2)} = \tau^{(1-\varkappa)\nu} s^{-m'_0-1}. \quad (10.2.14)$$

Рівняння відносно параметра  $\sigma$  одержуємо із (10.2.4), де як  $E^{(1)}(\sigma, m_\tau + 1)$  використовують вираз  $E^{(2)}(\sigma, m_\tau + 2)$ , що містить величини  $r_{m_\tau+2}$ ,  $u_{m_\tau+2}$ ,  $w_{m_\tau+2}$ . Беручи до уваги (10.2.12), приходимо до рівняння

$$\begin{aligned} \tau^{5\nu/2}[I_{11}\sigma_0\tau^{-2\nu\varkappa} - I_{12}\sigma_0\tau^{-(2\nu-1)\varkappa} - I_{21}\sigma_0^3\tau^{-\nu\varkappa} - \\ - I_{31}\sigma_0^5 - I_{22}\sigma_0^3\tau^{(1-\nu)\varkappa} - I_{32}\sigma_0^5\tau^\varkappa] = -\beta h. \end{aligned} \quad (10.2.15)$$

Тут введено таке позначення:

$$\sigma = \sigma_0\tau^{\nu/2}. \quad (10.2.16)$$

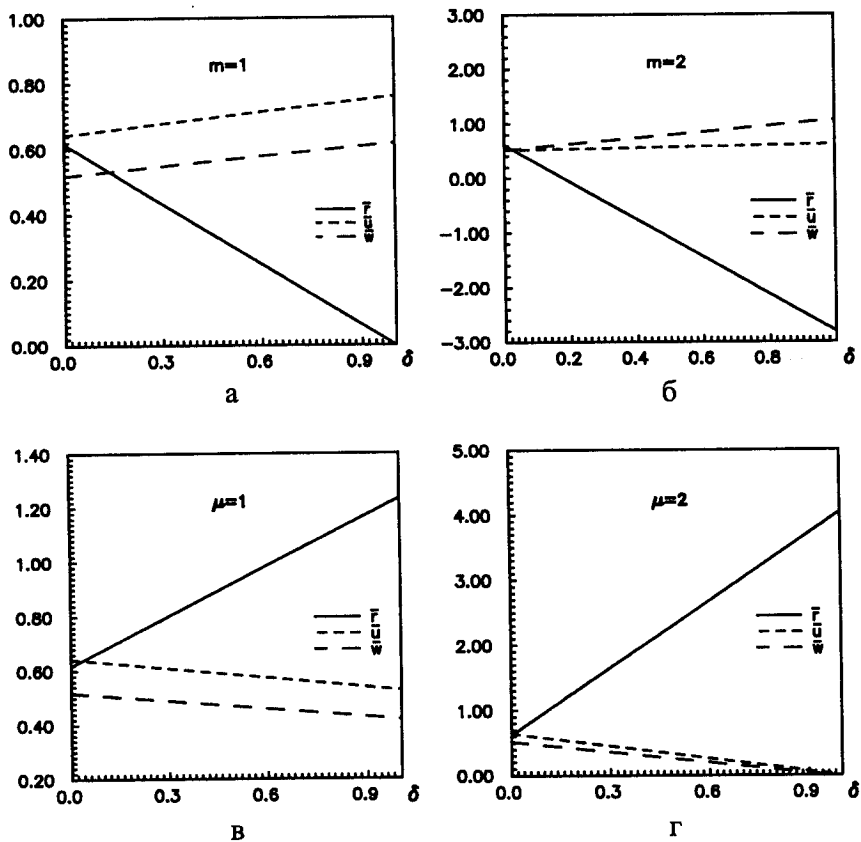


Рис. 10.1. Графік залежності складових коефіцієнтів ефективної густини міри від  $\delta$  у першій і в другій блочних структурах після виходу системи із КР при  $\tau > 0$  (а і б) і при  $\tau < 0$  (в і г)

Для коефіцієнтів  $I_{mn}$  маємо:

$$\begin{aligned}
 I_{11} &= f_0 \beta \tilde{\Phi}(0) s^{-2(m'_0+1)}, \\
 I_{12} &= I_{11} \delta_0 E_1, \\
 I_{21} &= \frac{\varphi_0}{6} s_0^3 (\beta \tilde{\Phi}(0))^2 s^{-(m'_0+1)}, \\
 I_{22} &= I_{21} \delta_0 \frac{f_0}{\sqrt{\varphi_0}} w_{21}^{(0)} E_1, \\
 I_{31} &= \frac{\psi_0}{5!} s_0^6 (\beta \tilde{\Phi}(0))^3, \\
 I_{32} &= I_{31} \delta_0 \frac{f_0 \varphi_0}{\psi_0} w_{31}^{(0)} E_1.
 \end{aligned} \tag{10.2.17}$$

Доданки в лівій частині (10.2.15) пропорційні різним степеням  $\tau$  ( $\tau \ll 1$ ). Два останніх доданки є членами вищого порядку малості за  $\tau$ , і ними можна знехтувати. Тому рівняння (10.2.15) перепишемо у вигляді:

$$\beta h = [I_{31} \sigma_0^5 + I_{21} \sigma_0^3 \tau^{-\nu \kappa} + I_{12} \sigma_0 \tau^{-(2\nu-1)\kappa} - I_{11} \sigma_0 \tau^{-2\nu \kappa}] \tau^{5\nu/2}. \tag{10.2.18}$$

У границі  $\kappa \rightarrow 0$  знаходимо

$$I_{31} \sigma^5 + I_{21} \sigma^3 \tau^\nu + (I_{12} - I_{11}) \sigma \tau^{2\nu} = \beta h. \tag{10.2.19}$$

Величини  $I_{mn}$  означені в (10.2.17). Рівняння (10.2.19) є рівнянням стану при  $T > T_c$ . З нього можна одержати додаткову умову для величини  $\delta_0$ , що входить у  $\delta$  (10.2.10). Приймаючи до уваги додатність коефіцієнта біля  $\sigma^2$  у (10.2.5) або коефіцієнта при  $\sigma$  у (10.2.19), маємо

$$\begin{aligned}
 I_{12} - I_{11} &= I_{11}(-1 + \delta_0 E_1), & \delta_0 E_1 &> 1, \\
 \delta_0 > \delta_0' &= 1/E_1, & \delta_0' &= 0.1799.
 \end{aligned} \tag{10.2.20}$$

### 10.3. Рівняння стану системи при $T < T_c$

Розрахунок рівняння стану в області температур  $T < T_c$  здійснимо аналогічно до описаної вище схеми. Визначимо точку виходу системи із КР при  $\tau < 0$ . Для цього температурного діапазону справедливе вже відоме нам співвідношення (див. § 9.1)

$$\frac{r_{\mu_\tau+1} - r^{(0)}}{r^{(0)}} = \delta.$$

Враховуючи вираз  $r_n$  (10.2.6), із цього співвідношення одержуємо рівняння для  $\mu_\tau$ :

$$c_1 E_1^{\mu_\tau+1} = -\delta f_0 \beta \tilde{\Phi}(0). \quad (10.3.1)$$

Величину  $\delta$  представимо у вигляді

$$\delta = \delta_0 |\tau|^\kappa. \quad (10.3.2)$$

Точка виходу із КР при  $T < T_c$  описується співвідношенням

$$\mu_\tau = -(1 - \kappa) \frac{\ln |\tau|}{\ln E_1} + m'_0 - 1. \quad (10.3.3)$$

Виходячи із (10.2.6), (10.3.1) і (10.3.2), знаходимо коефіцієнти шестирної густини міри  $(\mu_\tau + 2)$ -ої блочної структури:

$$r_{\mu_\tau+2} = -\beta \tilde{\Phi}(0) \bar{r}_{\mu_\tau+2}, \quad \bar{r}_{\mu_\tau+2} = f_0 (1 + E_1 \delta_0 |\tau|^\kappa), \quad (10.3.4)$$

$$u_{\mu_\tau+2} = (\beta \tilde{\Phi}(0))^2 \bar{u}_{\mu_\tau+2}, \quad \bar{u}_{\mu_\tau+2} = \varphi_0 \left(1 - \frac{f_0 w_{21}^{(0)}}{\sqrt{\varphi_0}} E_1 \delta_0 |\tau|^\kappa\right),$$

$$w_{\mu_\tau+2} = (\beta \tilde{\Phi}(0))^3 \bar{w}_{\mu_\tau+2}, \quad \bar{w}_{\mu_\tau+2} = \psi_0 \left(1 - \frac{f_0 \varphi_0 w_{31}^{(0)}}{\psi_0} E_1 \delta_0 |\tau|^\kappa\right).$$

Еволюція величин  $\bar{r} \equiv \bar{r}_{\mu_\tau+\mu}$ ,  $\bar{u} \equiv \bar{u}_{\mu_\tau+\mu}$ ,  $\bar{w} \equiv \bar{w}_{\mu_\tau+\mu}$  з ростом  $\delta$  в першій ( $\mu = 1$ ) і в другій ( $\mu = 2$ ) ефективних блочних структурах після виходу системи із КР при  $\tau < 0$  зображена відповідно на



рис. 10.1, в і 10.1, г. Провівши відповідні обчислення, запишемо рівняння для  $\sigma$

$$\begin{aligned} & \sigma f_0 \beta \tilde{\Phi}(0) s^{-2(m'_0+1)} |\tau|^{2\nu(1-\kappa)} + \\ & + \sigma f_0 \beta \tilde{\Phi}(0) \delta_0 E_1 |\tau|^\kappa s^{-2(m'_0+1)} |\tau|^{2\nu(1-\kappa)} - \\ & - \frac{\sigma^3}{6} s_0^3 \varphi_0 (\beta \tilde{\Phi}(0))^2 s^{-(m'_0+1)} |\tau|^{\nu(1-\kappa)} + \\ & + \frac{\sigma^3}{6} s_0^3 \sqrt{\varphi_0} (\beta \tilde{\Phi}(0))^2 s^{-(m'_0+1)} \delta_0 f_0 w_{21}^{(0)} E_1 |\tau|^{\nu(1-\kappa)} |\tau|^\kappa - \\ & - \frac{\sigma^5}{5!} s_0^6 \psi_0 (\beta \tilde{\Phi}(0))^3 + \frac{\sigma^5}{5!} s_0^6 (\beta \tilde{\Phi}(0))^3 \delta_0 f_0 \varphi_0 w_{31}^{(0)} E_1 |\tau|^\kappa + \beta h = 0. \end{aligned} \quad (10.3.5)$$

Зробимо в (10.3.5) заміну змінних

$$\sigma = \sigma_0 |\tau|^{\nu/2}. \quad (10.3.6)$$

Отримуємо

$$\begin{aligned} & |\tau|^{5\nu/2} [I_{11} \sigma_0 |\tau|^{-2\nu\kappa} + I_{12} \sigma_0 |\tau|^{-(2\nu-1)\kappa} - I_{21} \sigma_0^3 |\tau|^{-\nu\kappa} - \\ & - I_{31} \sigma_0^5 + I_{22} \sigma_0^3 |\tau|^{(1-\nu)\kappa} + I_{32} \sigma_0^5 |\tau|^\kappa] = -\beta h. \end{aligned} \quad (10.3.7)$$

У границі  $\kappa \rightarrow 0$  приходимо до рівняння

$$I_{31} \sigma^5 + I_{21} \sigma^3 |\tau|^\nu - (I_{11} + I_{12}) \sigma |\tau|^{2\nu} = \beta h. \quad (10.3.8)$$

#### 10.4. Температурна та польова залежність параметра порядку тривимірної спінової моделі

Запишемо рівняння (10.2.19) і (10.3.8) у зручнішій формі. Маємо:

$$D\sigma^5 + G\tau^\nu \sigma^3 + B(\delta_0 E_1 - 1)\tau^{2\nu} \sigma - \beta h = 0 \quad (10.4.1)$$

для  $\tau > 0$  і

$$D\sigma^5 + G|\tau|^\nu\sigma^3 - B(\delta_0 E_1 + 1)|\tau|^{2\nu}\sigma - \beta h = 0 \quad (10.4.2)$$

для  $\tau < 0$ . Тут

$$\begin{aligned} D &= (\beta\bar{\Phi}(0))^3 s_0^6 \frac{\psi_0}{5!}, \\ G &= \frac{(\beta\bar{\Phi}(0))^2}{6} s_0^3 s^{-1} \varphi_0 c'_\nu, \\ B &= \beta\bar{\Phi}(0) f_0 s^{-2} (c'_\nu)^2. \end{aligned} \quad (10.4.3)$$

Вираз для  $c'_\nu$  одержуємо із  $c_\nu$  (10.2.9), покладаючи  $\delta = \delta_0$ . У загальному випадку рівняння (10.4.1) і (10.4.2) можна представити одним, а саме [333, 391]:

$$D\sigma^5 + G|\tau|^\nu\sigma^3 + B\left(\delta_0 E_1 \frac{\tau}{|\tau|} - 1\right)|\tau|^{2\nu}\sigma - \beta h = 0. \quad (10.4.4)$$

Розв'язки цього рівняння залежать від температури, зовнішнього поля і мікроскопічних параметрів системи:

$$\sigma = \sigma(\tau, x, b/c), \quad (10.4.5)$$

де  $x = \beta h$  – узагальнене поле.

У випадку  $b = c(2\sqrt{3})^{-1}$ , який відповідає взаємодії найближчих сусідів, одержуємо

$$D = 0.0302, \quad G = 0.2522, \quad B = 0.4886. \quad (10.4.6)$$

Для простоти розрахунків обмежимося цим частинним випадком і розглянемо залежність параметра порядку (10.4.5) від температури і поля. Підставимо в рівняння (10.4.4)  $\tau = 0$ . У результаті зникають доданки, пропорційні  $|\tau|^\nu$ ,  $|\tau|^{2\nu}$ , і ми приходимо до виразу:

$$\sigma^5 = \frac{x}{D}. \quad (10.4.7)$$

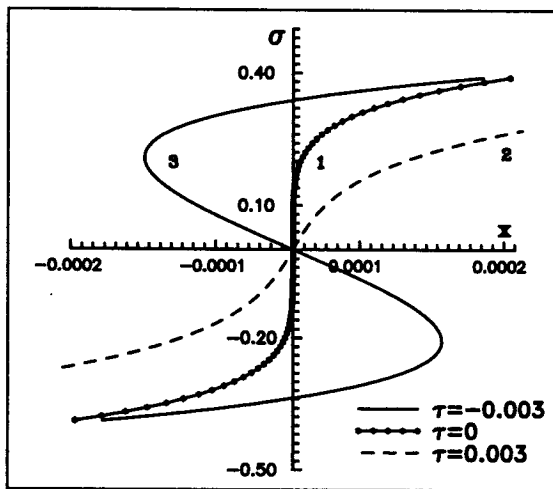


Рис. 10.2. Залежність параметра порядку від зовнішнього поля. Тут  $x = \beta h$

Звідси можемо визначити критичний показник  $\delta$ , який характеризує залежність  $\sigma = \sigma_{\text{кр}} x^{1/\delta}$ , та критичну амплітуду  $\sigma_{\text{кр}}$  ( $\delta = 5, \sigma_{\text{кр}} = D^{-1/5}$ ).

Залежність  $\sigma = \sigma(x)$  для  $b = c(2\sqrt{3})^{-1}$  і  $\tau = 0$  зображена на рис. 10.2 кривою 1. Для температур  $\tau > 0$  криві  $\sigma = \sigma(x)$  знаходяться між кривою 1 і віссю  $0x$  (див. криву 2). При температурах  $\tau < 0$  така залежність представлена кривою 3 ( $\tau = -0.003$ ).

У випадку нульового зовнішнього магнетного поля ( $x = 0$ ) рівняння стану (10.4.4) має вигляд:

$$D\sigma^5 + G|\tau|^\nu \sigma^3 + B \left( \delta_0 E_1 \frac{\tau}{|\tau|} - 1 \right) |\tau|^{2\nu} \sigma = 0. \quad (10.4.8)$$

Воно має тривіальний розв'язок

$$\sigma = 0 \quad (10.4.9)$$

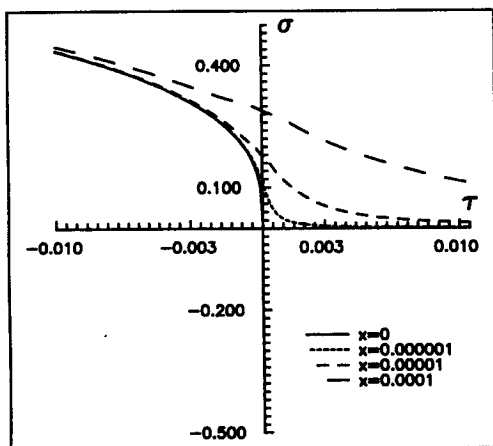


Рис. 10.3. Температурна залежність параметра порядку однокомпонентної спінової системи в рамках моделі  $\rho^6$  при  $b = c(2\sqrt{3})^{-1}$  і  $s = 3$

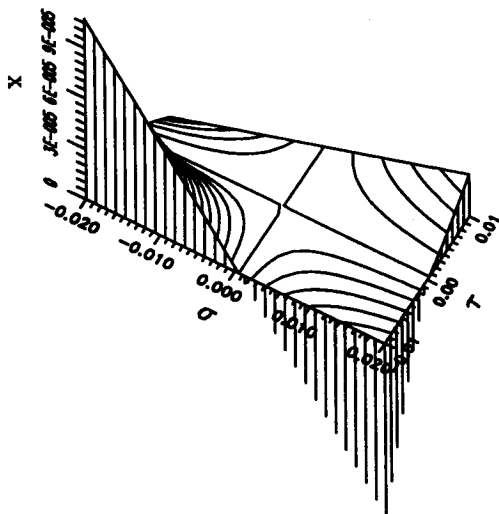


Рис. 10.4. Параметр порядку в безпосередньому околі критичної температури

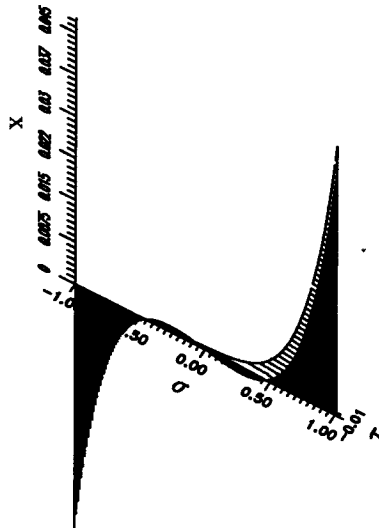
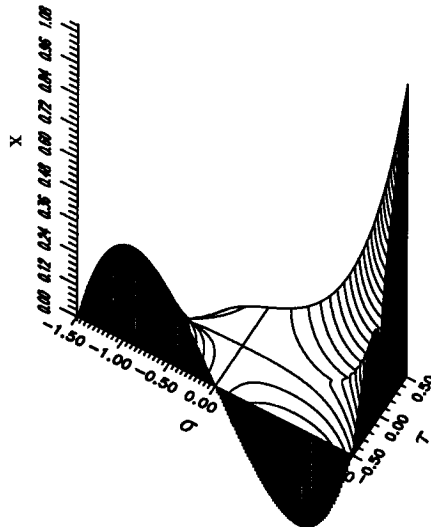


Рис. 10.5. Поведінка параметра порядку у зовнішньому полі

Рис. 10.6. Температурна і польова залежність розв'язку  $\sigma = \sigma(\tau, x)$  рівняння стану тривимірної моделі Ізінга для випадку  $b = c(2\sqrt{3})^{-1}$

і розв'язки типу

$$\sigma^2 = \left\{ -\frac{G}{2D} \pm \left[ \frac{G^2}{4D^2} - \frac{B}{D} (\delta_0 E_1 \frac{\tau}{|\tau|} - 1) \right]^{1/2} \right\} |\tau|^\nu. \quad (10.4.10)$$

Знак плюс перед квадратною дужкою в правій частині рівності (10.4.10) відповідає фізичним розв'язкам. Знак мінус пов'язаний з уявними розв'язками. Легко бачити, що при  $T > T_c$  дійсних розв'язків немає, а при  $T < T_c$  обидва розв'язки дійсні. Зазначимо, що при одержанні рівняння стану не враховувались внески, що визначають поправки до скейлінгу. Вони пропорційні малій величині  $|\tau|^{\Delta_l}$ , де  $\Delta_l = -\ln E_{l+1} / \ln E_1$  ( $l = 1, 2$ ). Для  $b = c$  і параметра  $s = 3$  у наближенні моделі  $\rho^6$  отримуємо  $\Delta_1 = 0.503$ ,  $\Delta_2 = 3.379$  (див., наприклад, [344, 383]).

Криві залежності  $\sigma = \sigma(\tau)$  за певних значень  $x$  (або  $h$ ) зображені на рис. 10.3. У загальному випадку  $\sigma = \sigma(\tau, x)$  має вигляд поверхні, яка зображена на рис. 10.4–10.6. На першому з них (рис. 10.4) маємо близьку до критичної область температур  $-0.01 < \tau < 0.01$ . Однак тут не видно дійсної залежності  $\sigma$  від  $h$ . Це добре видно на рис. 10.5, де збільшено інтервал для величини  $\sigma$ . Загальну поведінку поверхні  $\sigma = \sigma(\tau, x)$  представлено на рис. 10.6.



## Додатки

### А. Розклади спеціальних функцій в околі фіксованої точки

Розкладемо функції  $U(x_n)$  і  $\varphi(x_n)$  (див. (2.3.21)) у ряди в околі точки  $x^*$ . Маємо

$$U(x_n) = U(x^*) \left[ 1 + \sum_{l \geq 1} \frac{1}{l!} \partial_l (x_n - x^*)^l \right], \quad (\text{A.1})$$

де

$$\partial_l = [U(x^*)]^{-1} \frac{\partial^l U(x_n)}{\partial x_n^l} \Big|_{x_n=x^*}.$$

Похідні функції  $U(x)$  виражаються з допомогою виразів

$$\begin{aligned} U'(x) &= \frac{1}{2} U^2(x) + xU(x) - 1, \\ U''(x) &= \frac{1}{2} U^3(x) + \frac{3}{2} xU^2(x) + x^2U(x) - x, \dots \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Функцію  $\varphi(x_n)$  запишемо у вигляді

$$\varphi(x_n) = \varphi(x^*) \left[ 1 + \sum_{l \geq 1} \frac{1}{l!} q_l (x_n - x^*)^l \right]. \quad (\text{A.3})$$

Тут

$$q_l = [\varphi(x^*)]^{-1} \frac{\partial^l \varphi(x_n)}{\partial x_n^l} \Big|_{x_n=x^*}, \quad (\text{A.4})$$



а для похідних функції  $\varphi(x)$  знаходимо

$$\begin{aligned}\varphi'(x) &= 6U'(x)U(x) + 2U(x) + 2xU'(x), \\ \varphi''(x) &= 6U''(x)U(x) + 2xU''(x) + 6(U'(x))^2 + 4U'(x), \dots\end{aligned}\quad (\text{A.5})$$

Функції проміжного аргумента  $y$  зобразимо у вигляді рядів за степенями  $y_n - y^*$ , де величина  $y^*$  визначається співвідношенням (див. табл. 2.4)

$$y^* = s^{3/2}U(x^*) \left( \frac{3}{\varphi(x^*)} \right)^{1/2}. \quad (\text{A.6})$$

Зауважимо, що поблизу фіксованої точки величина  $y_n$  близька до  $y^*$  із (A.6), а її відхилення від  $y^*$  пропорційні до відхилень основного аргумента  $x_n$  від його значення у фіксованій точці. Для  $y_n$  одержуємо

$$y_n = y^* \left[ 1 + \sum_{l \geq 1} r_l (x_n - x^*)^l \right], \quad (\text{A.7})$$

де коефіцієнти  $r_l$  є незалежними від  $n$  постійними і мають вигляд

$$\begin{aligned}r_1 &= \partial_1 - \frac{1}{2}q_1, \\ r_2 &= \frac{1}{2}\partial_2 - \frac{1}{2}\partial_1 q_1 - \frac{1}{4}q_2 + \frac{3}{8}q_1^2, \dots\end{aligned}$$

Це дає змогу записати функції  $U(y_n)$  і  $\varphi(y_n)$  у вигляді рядів в околі точки  $y^*$ :

$$\begin{aligned}U(y_n) &= U(y^*) \left[ 1 + \sum_{l \geq 1} \frac{1}{l!} P_l (y_n - y^*)^l \right], \\ \varphi(y_n) &= \varphi(y^*) \left[ 1 + \sum_{l \geq 1} \frac{1}{l!} Q_l (y_n - y^*)^l \right].\end{aligned}\quad (\text{A.8})$$

Тут

$$\begin{aligned}
 P_l &= [U(y^*)]^{-1} \left. \frac{\partial^l U(y_n)}{\partial y_n^l} \right|_{y_n=y^*}, \\
 Q_l &= [\varphi(y^*)]^{-1} \left. \frac{\partial^l \varphi(y_n)}{\partial y_n^l} \right|_{y_n=y^*},
 \end{aligned}
 \tag{A.9}$$

а вирази для похідних функцій  $U(y)$  і  $\varphi(y)$  задані в (A.2) і (A.5). Для функції  $U(y_n)$  отримуємо:

$$U(y_n) = U(y^*) \left[ 1 + \sum_{l \geq 1} a_l (x_n - x^*)^l \right],
 \tag{A.10}$$

де

$$a_1 = P_1 y^* r_1, \quad a_2 = P_1 y^* r_2 + \frac{1}{2} P_2 (y^* r_1)^2, \dots$$

Аналогічно для  $\varphi(y_n)$  знаходимо:

$$\varphi(y_n) = \varphi(y^*) \left[ 1 + \sum_{l \geq 1} b_l (x_n - x^*)^l \right].
 \tag{A.11}$$

Тут

$$b_1 = Q_1 y^* r_1, \quad b_2 = Q_1 y^* r_2 + \frac{1}{2} Q_2 (y^* r_1)^2, \dots$$

Для від'ємних значень  $x_n$  введемо позначення  $h_n = -x_n$ . Аналогічно попередньому викладу, виберемо точку розкладу  $h^*$ , відповідне їй  $y^* = s^{3/2} V(h^*) (12/W(h^*))^{1/2}$  і представимо функції  $V(h_n)$  і  $W(h_n)$  (див. § 2.4) у вигляді рядів за степенями  $(h_n - h^*)$ . Для  $V(h_n)$  справедливим буде розклад

$$V(h_n) = V(h^*) \left[ 1 + \sum_{l \geq 1} \frac{1}{l!} D_l (h_n - h^*)^l \right],
 \tag{A.12}$$

де

$$D_l = [V(h^*)]^{-1} \frac{\partial^l V(h_n)}{\partial h_n^l} \Big|_{h_n=h^*}.$$

Похідні функції  $V(h_n)$  мають вигляд:

$$V'(h) = -V^2(h) + hV(h) + \frac{1}{2},$$

$$V''(h) = 2V^3(h) - 3hV^2(h) + h^2V(h) + \frac{1}{2}h, \dots$$

Аналогічно запишемо

$$W(h_n) = W(h^*) \left[ 1 + \sum_{l \geq 1} \frac{1}{l!} W_l (h_n - h^*)^l \right]. \quad (\text{A.13})$$

Тут

$$W_l = [W(h^*)]^{-1} \frac{\partial^l W(h_n)}{\partial h_n^l} \Big|_{h_n=h^*}.$$

Для похідних функції  $W(h)$  отримуємо

$$W'(h) = 24V'(h)V(h) - 4V(h) + 4hV'(h),$$

$$W''(h) = 24V''(h)V(h) + 24[V'(h)]^2 - 8V'(h) - 4hV''(h), \dots$$

Для проміжної змінної  $y_n$  існує представлення

$$y_n = y^* + y^* \sum_{l \geq 1} R_l (h_n - h^*)^l, \quad (\text{A.14})$$

де відповідно до (2.4.19), (A.12) і (A.13) отримуємо:

$$R_1 = D_1 - \frac{1}{2}W_1,$$

$$R_2 = \frac{1}{2}D_2 - \frac{1}{2}D_1W_1 - \frac{1}{4}W_2 + \frac{3}{8}W_1^2.$$

Для функції  $U(y_n)$  проміжної змінної маємо:

$$U(y_n) = U(y^*) \left[ 1 + \sum_{l \geq 1} \alpha_l (h_n - h^*)^l \right], \quad (\text{A.15})$$

де

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= P_1 y^* R_1, \\ \alpha_2 &= P_1 y^* R_2 + \frac{1}{2} P_2 (y^* R_1)^2, \dots \end{aligned}$$

Для  $\varphi(y_n)$  одержуємо

$$\varphi(y_n) = \varphi(y^*) \left[ 1 + \sum_{l \geq 1} \beta_l (h_n - h^*)^l \right]. \quad (\text{A.16})$$

Тут

$$\begin{aligned} \beta_1 &= Q_1 y^* R_1, \\ \beta_2 &= Q_1 y^* R_2 + \frac{1}{2} Q_2 (y^* R_1)^2, \dots \end{aligned}$$

Коефіцієнти  $P_l$  і  $Q_l$  визначені в (A.9).

## Б. Рекурентні співвідношення в граничних випадках

Знайдемо явний вигляд наближених рекурентних співвідношень (2.3.18) у границі великих і малих значень аргумента  $x_n$ . Для функцій  $M(x_n)$  і  $E(x_n)$  із (2.3.19) та (2.3.20) використовува- тимемо представлення через функції Макдональда  $K_\nu(z_n)$ , де  $z_n = x_n^2/4$ . Маємо

$$M_n = \frac{\sqrt{\xi_n} \mathcal{K}(\xi_n)}{\sqrt{z_n} \mathcal{K}(z_n)} - 1, \quad E_n = s^{2d} \frac{\mathcal{L}(\xi_n)}{\mathcal{L}(z_n)}, \quad (\text{Б.1})$$

де

$$\xi_n = \frac{3}{2} s^d \frac{\mathcal{K}^2(z_n)}{\mathcal{L}(z_n)}, \quad (\text{Б.2})$$

а

$$z_n = 3 \left[ a_2^{(n)} - \beta \Phi(B_{n+1}, B_n) \right]^2 (4a_4^{(n)})^{-1}. \quad (\text{Б.3})$$

Для  $\mathcal{K}(z_n)$  і  $\mathcal{L}(z_n)$  справедливі вирази

$$\begin{aligned} \mathcal{K}(z_n) &= \sqrt{z_n} \left( \frac{K_{3/4}(z_n)}{K_{1/4}(z_n)} - 1 \right), \\ \mathcal{L}(z_n) &= 6\mathcal{K}^2(z_n) + 4\sqrt{z_n}\mathcal{K}(z_n) - 1. \end{aligned} \quad (\text{Б.4})$$

Наведемо співвідношення, які пов'язують функції параболічного циліндра  $U(a, x_n)$  із функціями Макдональда  $K_\nu(x_n^2/4)$ :

$$\begin{aligned} K_{1/4} \left( \frac{x_n^2}{4} \right) &= \left( \frac{2\pi}{x_n} \right)^{1/2} U(0, x_n), \\ K_{3/4} \left( \frac{x_n^2}{4} \right) &= \frac{2\sqrt{2\pi}}{x\sqrt{x_n}} \frac{d}{dx_n} U(0, x_n), \end{aligned} \quad (\text{Б.5})$$

а також

$$U(x_n) = 2\mathcal{K} \left( \frac{x_n^2}{4} \right), \quad \varphi(x_n) = 2\mathcal{L} \left( \frac{x_n^2}{4} \right). \quad (\text{Б.6})$$

Тепер перейдемо до РС у випадку великих та малих значень аргумента  $z_n$ .

**Явний вигляд РС у випадку великих значень аргумента  $z_n$ .** Розглянемо асимптотичні властивості спеціальних функцій  $\mathcal{K}(z_n)$  і  $\mathcal{L}(z_n)$ . Аргумент цих функцій  $z_n$  обернено пропорційний до коефіцієнта  $a_4^{(n)}$ . Тому умова

$$z_n \gg 1 \quad (\text{Б.7})$$

відповідає припущенню про малість коефіцієнта  $a_4^{(n)}$  при четвертому степені змінної  $\rho_k$  у показнику експоненти ефективної густини міри  $n$ -ої блочної структури порівняно з коефіцієнтом  $d_n(B_{n+1}, B_n)$  при другому степені  $\rho_k$ . Зазначимо, що функції  $K(z_n)$  регулярні всюди, за винятком від'ємної напіввісі  $(-\infty, 0)$ . Комбінації функцій  $K_\nu(x)$ , які входять до складу РС (2.3.18), є регулярними за довільних значень аргумента, причому у розкладах за  $z_n$  слід вважати, що  $\sqrt{[d_n(B_{n+1}, B_n)]^2} = d_n(B_{n+1}, B_n)$ . Використаємо для функцій  $K_\nu(x)$  представлення через функції Бесселя уявного аргумента  $I_\nu(x)$ :

$$K_\nu(x) = \frac{\pi I_{-\nu}(x) - I_\nu(x)}{2 \sin \pi \nu}. \quad (\text{Б.8})$$

У випадку великих значень аргумента функції  $K_\nu(x)$  представляються у вигляді такого степеневого ряду [304]:

$$K_\nu(x) = \left(\frac{\pi}{2x}\right)^{1/2} e^{-x} \sum_{m=0}^{M-1} (2x)^{-m} \frac{1}{m!} \frac{\Gamma(m + \nu + 1/2)}{\Gamma(m - \nu + 1/2)} + R_{M,\nu}, \quad (\text{Б.9})$$

де  $\Gamma$  – гамма-функція,

$$R_{M,\nu} = \Theta \frac{\Gamma(\nu - M + 1/2)}{\Gamma(\nu + M + 1/2)} \frac{1}{M!} (2x)^{-M}.$$

Для функцій  $K_\nu(x)$  справедливі рекурентні співвідношення

$$x \frac{d}{dx} K_\nu(x) = -\nu K_\nu(x) - x K_{\nu-1}(x)$$

і виконується рівність  $K_\nu(x) = K_{-\nu}(x)$ . Знаходимо вирази для функцій  $\mathcal{K}(z_n)$  і  $\mathcal{L}(z_n)$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{K}(z_n) &= \frac{1}{4\sqrt{z_n}} \left[ 1 - \frac{3}{8} \frac{1}{z_n} + \frac{3}{8} \frac{1}{z_n^2} - \frac{297}{512} \frac{1}{z_n^3} + \frac{153}{128} \frac{1}{z_n^4} - \dots \right], \\ \mathcal{L}(z_n) &= \frac{3}{32} \frac{1}{z_n^2} \left[ 1 - \frac{21}{8} \frac{1}{z_n} + \frac{447}{64} \frac{1}{z_n^2} - \dots \right]. \end{aligned} \quad (\text{Б.10})$$

Отриманих виразів, однак недостатньо для знаходження явного виду РС. Додатково потрібно мати вираз для проміжної змінної  $\xi_n$ . Приймаючи до уваги співвідношення (Б.2) і використовуючи вирази (Б.4), отримуємо

$$\xi_n = \frac{N_n}{N_{n+1}} z_n \left( 1 + \frac{15}{8} \frac{1}{z_n} - \frac{75}{64} \frac{1}{z_n^2} + \dots \right). \quad (\text{Б.11})$$

Тут  $N_n/N_{n+1} = s^d$  ( $s > 1$ ),  $d$  – розмірність простору. Оскільки розглядається випадок великих значень аргумента  $z_n$  (Б.7), то із співвідношення (Б.11) випливає, що аргумент  $\xi_n$  приймає також великі значення, причому

$$\xi_n > z_n \gg 1. \quad (\text{Б.12})$$

Приймаючи до уваги (Б.12), розкладаємо функції  $\mathcal{K}(\xi_n)$  і  $\mathcal{L}(\xi_n)$  у ряди за оберненими степенями їх аргумента. Використовуючи (Б.10) та (Б.11), у першому порядку за  $z_n^{-1}$  отримуємо такий вигляд РС:

$$\begin{aligned} a_2^{(n+1)} &= a_2^{(n)} + \frac{1}{2} \left( 1 - s^{-d} \right) \frac{a_4^{(n)}}{d_n(B_{n+1}, B_n)}, \\ a_4^{(n+1)} &= s^{-d} a_4^{(n)} \left\{ 1 - \frac{3}{2} \left( 1 - s^{-d} \right) \frac{a_4^{(n)}}{[d_n(B_{n+1}, B_n)]^2} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{Б.13})$$

Ці РС відповідають наближенню звичайної теорії збурень за гаусовими моментами, тобто використанню при інтегруванні статистичної суми гаусового розподілу як базового<sup>4</sup>. Умовою застосовності цього наближення є виконання співвідношення (Б.7), яке передбачає, що

$$a_4^{(n)} \ll [d_n(B_{n+1}, B_n)]^2.$$

Подібного роду наближення широко використовується при дослідженні критичної поведінки різних систем [104, 109, 312]. Із (Б.13)

<sup>4</sup>Наявність множника  $(1 - s^{-d})$  у другому рівнянні (Б.13) пов'язане з врахуванням доданків пропорційних до  $1/z_n$  із  $P_6 \nu_m^6$  у (2.2.32).

легко отримати відомі рекурентні співвідношення К. Вільсона [93]. Віднімемо від правої і лівої частин першого рівняння (Б.13) величину  $\beta\tilde{\Phi}(0)$  та введемо позначення (2.4.3). Тоді беручи до уваги (2.4.2), одержуємо такі РС:

$$\begin{aligned} r_{n+1} &= s^2 \left[ r_n + \frac{1}{2} (1 - s^{-d}) \frac{u_n}{r_n + q} \right], \\ u_{n+1} &= s^{4-d} u_n \left[ 1 - \frac{3}{2} (1 - s^{-d}) \frac{u_n}{(r_n + q)^2} \right]. \end{aligned} \quad (\text{Б.14})$$

Ці рівняння співпадають з РС К. Вільсона. Врахування другого наближення за  $z_n^{-1}$  у спеціальних функціях  $\mathcal{K}(z_n)$  і  $\mathcal{L}(z_n)$  дає змогу доповнити отримані в (Б.13) РС, однак коректне врахування коефіцієнтів у подальших доданках потребує самоузгодженого врахування відповідних членів, які виникають із величин  $P_6, P_8$  тощо (див. розділ 6).

РС (Б.14) отримані нами у наближенні великих значень аргумента  $z_n$ . Тому застосування асимптотичних рядів для функцій  $K_\nu(z_n)$  при описі критичних властивостей систем, очевидно, виправдане у границі  $s \rightarrow 1$ .

**Явний вигляд РС у випадку малих значень аргумента  $z_n$ .** Використаємо при аналізі РС (2.3.18) представлення функцій  $K_\nu(z_n)$  за степенями  $(z_n)^{m/2}$ . Таке представлення є неасимптотичним рядом. Розглянемо випадок [313, 314]

$$z_n < 1. \quad (\text{Б.15})$$

Для малих значень аргументів справедливі наступні представлення:

$$\begin{aligned} K_{1/4}(z_n) &= \pi(2z_n)^{-1/4} \left[ \Gamma\left(\frac{3}{4}\right) \right]^{-1} \left\{ 1 - 4\gamma\left(\frac{z_n}{2}\right)^{1/2} + \right. \\ &+ \frac{4}{3}\left(\frac{z_n}{2}\right)^2 - \frac{16}{5}\gamma\left(\frac{z_n}{2}\right)^{2.5} + \frac{8}{21}\left(\frac{z_n}{2}\right)^4 - \frac{32}{45}\gamma\left(\frac{z_n}{2}\right)^{4.5} + \\ &\left. + \frac{32}{693}\left(\frac{z_n}{2}\right)^6 - \frac{128}{1755}\gamma\left(\frac{z_n}{2}\right)^{6.5} + \dots \right\}, \end{aligned} \quad (\text{Б.16})$$



а також

$$K_{3/4}(z_n) = \pi 2^{1/4} z_n^{-3/4} [\Gamma(1/4)]^{-1} \left\{ 1 - 4/3 \gamma^{-1} \left(\frac{z_n}{2}\right)^{3/2} + \right. \\ \left. + 4 \left(\frac{z_n}{2}\right)^2 - \frac{16}{21} \gamma^{-1} \left(\frac{z_n}{2}\right)^{3.5} + 1.6 \left(\frac{z_n}{2}\right)^4 - \dots \right\}, \quad (\text{Б.17})$$

де  $\gamma = \frac{\Gamma(3/4)}{\Gamma(1/4)} \approx 0.337989$ . Приймаючи до уваги (Б.4), отримуємо

$$\mathcal{K}(z_n) = \gamma \sqrt{2} \sum_{m \geq 0} l_m \left(\frac{z_n}{2}\right)^{m/2}, \quad (\text{Б.18})$$

де

$$l_0 = 1, \quad l_1 = 4\gamma - \gamma^{-1}, \quad l_2 = 16\gamma^2, \\ l_3 = 64\gamma^3 - 4/(3\gamma), \quad l_4 = 256\gamma^6 - 8/3, \\ l_5 = 1024\gamma^5 - 18.5\gamma, \\ l_6 = 4096\gamma^6 - 256\gamma^2/3 + 128/5, \dots, \quad (\text{Б.19})$$

а також

$$\mathcal{L}(z_n) = (12\gamma^2 - 1) \sum_{m \geq 0} q_m (z_n/2)^{m/2}, \quad (\text{Б.20})$$

де

$$q_0 = 1, \quad q_1 = 8\gamma (12\gamma^2 - 1)^{-1} (1 + 3\gamma l_1), \\ q_2 = 4\gamma (12\gamma^2 - 1)^{-1} (2l_1 + 6\gamma l_2 + 3\gamma l_1^2), \\ q_3 = 8\gamma (12\gamma^2 - 1)^{-1} (l_2 + 3\gamma l_3 + 3\gamma l_1 l_2), \\ q_4 = 4\gamma (12\gamma^2 - 1)^{-1} (3l_3 + 6\gamma l_4 + 6\gamma l_1 l_2 + 3\gamma l_2^2), \\ q_5 = 8\gamma (12\gamma^2 - 1)^{-1} (l_4 + 3\gamma(l_5 + l_1 l_4 + l_2 l_3)), \\ q_6 = 4\gamma (12\gamma^2 - 1)^{-1} (l_5 + 6\gamma(l_6 + l_1 l_5 + l_2 l_4) + 3\gamma l_3^2), \dots \quad (\text{Б.21})$$

Використовуючи (Б.18), (Б.20), із (Б.2) знаходимо:

$$\xi_n = s^d \xi_0 \left[ 1 + \sum_{m \geq 1} r_m (z_n/2)^{m/2} \right], \quad (\text{Б.22})$$

де

$$\begin{aligned} r_1 &= 2l_1 - q_1, \\ r_2 &= q_1^2 - q_2 + l_1^2 + 2l_2 - 2l_1q_1, \\ r_3 &= 2q_1(q_2 + l_1q_1 - l_2) + 2(l_3 + l_1l_2 - l_1q_2) - q_3 - q_1^3 - l_1^2q_1, \\ r_4 &= 4l_1q_1q_2 + q_1^2 + q_1^2(2l_2 - 3q_2 + l_1^2 + q_1^2) + 2(q_1q_3 - l_1q_3 - \\ &\quad - l_1q_1^3 - l_2q_2 - l_3q_1 - l_1l_2q_2 + l_4 + l_1l_3) - l_1^2q_2 + q_2^2 - q_4. \end{aligned} \quad (\text{Б.23})$$

Тут постійна

$$\xi^{(0)} = \frac{3\gamma^2}{12\gamma^2 - 1}$$

є величиною порядку одиниці ( $\xi^{(0)} = 0.924146$ ) і за наявності в (Б.22) множника  $s^d$  знаходимо, що  $\xi_n > z_n$ . Більше того, при  $s > 2$  справедливе співвідношення  $\xi_n \gg 1$ . Це дає змогу скористатись формулами (Б.10) для функцій  $\mathcal{K}(\xi_n)$  і  $\mathcal{L}(\xi_n)$  при визначенні явного виду РС у випадку  $z_n < 1$ . У результаті отримуємо такі РС:

$$\begin{aligned} a_2^{(n+1)} &= a_2^{(n)} + \mu'_0 \sqrt{a_4^{(n)}} + \mu'_1 d_n(B_{n+1}, B_n) + \\ &\quad + \mu'_2 \frac{[d_n(B_{n+1}, B_n)]^2}{\sqrt{a_4^{(n)}}} + \dots, \end{aligned} \quad (\text{Б.24})$$

$$\begin{aligned} a_4^{(n+1)} &= s^{-d} \left[ \omega'_0 a_4^{(n)} + \omega'_1 (a_4^{(n)})^{1/2} \times \right. \\ &\quad \left. \times d_n(B_{n+1}, B_n) + \omega'_2 [d_n(B_{n+1}, B_n)]^2 + \dots \right], \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}
 \mu'_0 &= 0.604 \left[ 1 - 0.406s^{-d} + 0(s^{-2d}) \right], \\
 \mu'_1 &= 0.594 \left[ 1 - 0.059s^{-d} + 0(s^{-2d}) \right], \\
 \mu'_2 &= 0.170 \left[ 1 + 0.412s^{-d} + 0(s^{-2d}) \right], \\
 \omega'_0 &= 0.296 \left[ 1 - 2.840s^{-d} + 0(s^{-2d}) \right], \\
 \omega'_1 &= 0.333 \left[ 1 - 0.719s^{-d} + 0(s^{-2d}) \right], \\
 \omega'_2 &= 0.044 \left[ 1 + 11.568s^{-d} + 0(s^{-2d}) \right].
 \end{aligned}
 \tag{Б.25}$$

РС (Б.24) якісно відрізняються від співвідношень (Б.13), однак аналогічні за своєю структурою до (2.4.10). Здійснюючи в РС (Б.24) заміну (2.4.3), отримуємо:

$$\begin{aligned}
 r_{n+1} &= s^2 \left[ r_n + \mu'_0 \sqrt{u_n} + \mu'_1 (r_n + q) + \mu'_2 \frac{(r_n + q)^2}{\sqrt{u_n}} + \dots \right], \\
 u_{n+1} &= s^{4-d} \left[ \omega'_0 u_n + \omega'_1 \sqrt{u_n} (r_n + q) + \omega'_2 (r_n + q)^2 + \dots \right].
 \end{aligned}
 \tag{Б.26}$$

Коефіцієнти  $\mu'_i$  і  $\omega'_i$  на відміну від (2.4.11), (2.4.12) задаються простими виразами. Однак вони застосовні в області великих значень параметра  $s$ . Це обмеження, тим не менше, повністю виправдане, оскільки величина  $z_n$  (або  $x_n$ ) мала в області значень параметра  $s = s^*$  ( $s^* = 3.5862$ ), що забезпечує достатньо високу точність визначення коефіцієнтів, заданих у (Б.25).

Збільшення точності при розрахунку коефіцієнтів  $\mu'_i$  і  $\omega'_i$  у (Б.24) можна досягнути, відмовившись від асимптотичних рядів для функцій  $\mathcal{K}(\xi_n)$  і  $\mathcal{L}(\xi_n)$ . Представимо ці функції рядами за степенями  $(\xi_n - \xi_n^{(0)})$ , де  $\xi_n^{(0)} = s^d \xi^{(0)}$ . У результаті загальні РС

(2.3.18) набувають вигляду

$$\begin{aligned} a_2^{(n+1)} &= a_2^{(n)} + (a_4^{(n)})^{1/2} \sum_{l \geq 0} \mu_l^{(n)} (z_n)^{l/2}, \\ a_4^{(n+1)} &= a_4^{(n)} s^{-d} \sum_{l \geq 0} \omega_l^{(n)} (z_n)^{l/2}. \end{aligned} \quad (\text{Б.27})$$

Тут

$$\begin{aligned} \mu_0^{(n)} &= s^{d/2} \left( \frac{2}{12\gamma^2 - 1} \right)^{1/2} \mathcal{K}(\xi_n^{(0)}), \\ \omega_0^{(n)} &= s^{2d} \mathcal{L}(\xi_n^{(0)}) / \mathcal{L}(0), \end{aligned} \quad (\text{Б.28})$$

де  $\gamma$  означено вище,  $\mathcal{L}(0) = 12\gamma^2 - 1$ . Коефіцієнти  $\mu_l^{(n)}$  для  $l \geq 1$  визначаються виразами

$$\mu_l^{(n)} = (3/8)^{l/2} \sum_{m=0}^l f_{l-m}^{(n)} C_m, \quad (\text{Б.29})$$

де  $f_0^{(n)} = 1$ ,  $C_0 = 1$ ,  $C_1 = 2.2937$ ,  $C_2 = 2.2212$ ,  $C_3 = 0.7989$  і т. д., а для  $f_l^{(n)}$  маємо:

$$\begin{aligned} f_1^{(n)} &= r_1 \xi_n^{(0)} \mathcal{K}'(\xi_n^{(0)}) / \mathcal{K}(\xi_n^{(0)}), \\ f_2^{(n)} &= r_2 \xi_n^{(0)} \mathcal{K}'(\xi_n^{(0)}) / \mathcal{K}(\xi_n^{(0)}) + 1/2 (r_1 \xi_n^{(0)})^2 \mathcal{K}''(\xi_n^{(0)}) / \mathcal{K}(\xi_n^{(0)}), \\ f_3^{(n)} &= r_3 \xi_n^{(0)} \mathcal{K}'(\xi_n^{(0)}) / \mathcal{K}(\xi_n^{(0)}) + r_1 r_2 (\xi_n^{(0)})^2 \times \\ &\quad \times \mathcal{K}''(\xi_n^{(0)}) / \mathcal{K}(\xi_n^{(0)}) + 1/6 (r_1 \xi_n^{(0)})^3 \mathcal{K}'''(\xi_n^{(0)}) / \mathcal{K}(\xi_n^{(0)}), \end{aligned} \quad (\text{Б.30})$$

де величини  $r_l$  визначені в (Б.23) і дорівнюють  $r_1 = 1.3740$ ,  $r_2 = 1.1992$ ,  $r_3 = 0.3790$ . Для коефіцієнтів  $\omega_l^{(n)}$  при  $l \geq 1$  знаходимо

$$\omega_l^{(n)} = (3/8)^{l/2} \sum_{m=0}^l F_{l-m}^{(n)} \varphi_m, \quad (\text{Б.31})$$

де  $F_0 = 1$ ,  $\varphi_0 = 1$ ,  $\varphi_1 = 4.5874$ ,  $\varphi_2 = 9.7034$ ,  $\varphi_3 = 11.7699$  і т. д., а для  $F_l^{(n)}$  маємо:

$$F_1^{(n)} = r_1 \xi_n^{(0)} \mathcal{L}'(\xi_n^{(0)}) / \mathcal{L}(\xi_n^{(0)}), \quad (\text{Б.32})$$

$$F_2^{(n)} = r_2 \xi_n^{(0)} \mathcal{L}'(\xi_n^{(0)}) / \mathcal{L}(\xi_n^{(0)}) + 1/2 (r_1 \xi_n^{(0)})^2 \mathcal{L}''(\xi_n^{(0)}) / \mathcal{L}(\xi_n^{(0)}),$$

$$F_3^{(n)} = r_3 \xi_n^{(0)} \mathcal{L}'(\xi_n^{(0)}) / \mathcal{L}(\xi_n^{(0)}) + r_1 r_2 (\xi_n^{(0)})^2 \times \\ \times \mathcal{L}''(\xi_n^{(0)}) / \mathcal{L}(\xi_n^{(0)}) + 1/6 (r_1 \xi_n^{(0)})^3 \mathcal{L}'''(\xi_n^{(0)}) / \mathcal{L}(\xi_n^{(0)}).$$

Здійснюючи в (Б.27) перехід від величин  $d_n$ ,  $a_4^{(n)}$  до  $r_n$ ,  $u_n$  відповідно до (2.4.3), отримуємо

$$r_{n+1} = s^2 \left[ r_n + \mu_0'' u_n^{1/2} + \mu_1'' (r_n + q) + \mu_2'' \frac{(r_n + q)^2}{(u_n)^{1/2}} + \dots \right], \\ u_{n+1} = s^{4-d} \left[ \omega_0'' u_n + \omega_1'' u_n^{1/2} (r_n + q) + \omega_2'' (r_n + q)^2 + \dots \right], \quad (\text{Б.33})$$

де

$$\mu_l'' = (3/4)^{l/2} \mu_l^{(n)}, \quad \omega_l'' = (3/4)^{l/2} \omega_l^{(n)}. \quad (\text{Б.34})$$

При конкретних розрахунках потрібно фіксувати параметр  $s$ , від якого залежить величина  $\xi_n^{(0)} = s^3 \xi^{(0)}$ , а відповідно і коефіцієнти  $\mu_l^{(n)}$ ,  $\omega_l^{(n)}$ . З'ясується, що зміна коефіцієнтів  $\mu_l^{(n)}$  і  $\omega_l^{(n)}$  суттєва тільки в області  $s \in (1, 2)$ . При  $s > 3$  коефіцієнти  $u_l''$  та  $\omega_l''$  майже постійні і з ростом  $s$  прямують до  $\mu_l'$ ,  $\omega_l'$  з (Б.25).

## В. Внесок у вільну енергію від перехідної області

Знайдемо значення основної і проміжної змінної після виходу системи із КР, використовуючи рівняння РГ. Відповідно до (3.1.19) отримуємо:

$$x_{m_r+m}^{(0)} = \sqrt{3} \frac{\bar{q} + f_0 (E_1^{m-1} - 1)}{(\varphi_0 + f_0 \varphi_0^{1/2} R_1^{(0)} E_1^{m-1})^{1/2}}, \quad (\text{В.1})$$

де  $f_0$  і  $\varphi_0$  визначають координати фіксованої точки, а величина  $R_1^{(0)}$  виражається через елементи матриці  $\mathcal{R}$  та її власне значення  $E_1$ . Для проміжної змінної маємо:

$$y_{m_\tau+m}^{(0)} = s^{3/2} U(x_{m_\tau+m}^{(0)}) \left( \frac{3}{\varphi(x_{m_\tau+m}^{(0)})} \right)^{1/2}. \quad (\text{B.2})$$

З врахуванням отриманих вище виразів із (3.1.16) знаходимо величину

$$f_{m_\tau+m}^{(0)} = \frac{1}{2} \ln y_{m_\tau+m-1}^{(0)} + \frac{9}{4} (y_{m_\tau+m-1}^{(0)})^{-2} + \frac{(x_{m_\tau+m}^{(0)})^2}{4} + \ln U(0, x_{m_\tau+m}^{(0)}) \quad (\text{B.3})$$

при  $m = 1, 2, \dots$ . Потрібно відзначити характерну особливість останнього виразу. Оскільки  $x_{m_\tau+m}^{(0)}$  і  $y_{m_\tau+m}^{(0)}$  не залежать від температури, то й величина  $f_{m_\tau+m}^{(0)}$  не змінюється з ростом  $\tau$ . Величини  $x_{m_\tau+m}^{(0)}$ ,  $y_{m_\tau+m}^{(0)}$ ,  $f_{m_\tau+m}^{(0)}$  є універсальними постійними і залежно від параметра  $s$  та  $m$  набувають числових значень, поданих у табл. В.1.

Табл. В.1. Значення величин  $x_{m_\tau+m}^{(0)}$  і  $y_{m_\tau+m}^{(0)}$ , а також  $f_{m_\tau+m}^{(0)}$  у  $m$ -ій (після виходу із КР) блочній структурі при  $s = 4$

$m$	$x_{m_\tau+m}^{(0)}$	$y_{m_\tau+m}^{(0)}$	$f_{m_\tau+m}^{(0)}$
0	-0.0550	15.1780	-
1	0.9631	19.5840	1.2044
2	8.0095	67.5988	0.4472
3	34.0580	273.3410	0.3429
4	110.6630	885.5750	0.4521

Величина перехідної області визначається кількістю номерів ефективних блочних структур  $m''$ , які відраховуються від точки виходу системи із КР:  $m_{\tau+1}, \dots, m_{\tau+1+m''}$ . Кількість номерів  $m''$  можна отримати із умови<sup>5</sup>

$$|x_{m_{\tau}+m''_0}| = \frac{\alpha}{1-s^{-3}}. \quad (\text{B.4})$$

Тут  $\alpha$  – велике число ( $\alpha = 10$ ). У працях з числового розрахунку статистичної суми моделі Ізінга [316, 321] (див. також § 7.2) було показано, що еволюція коефіцієнтів ефективних базисних мір у ПО з достатнім ступенем точності описується рівняннями РГ (2.6.20). Тому для основного аргумента  $x_n$  на границі ПО маємо

$$x_{m_{\tau}+m''_0} = \sqrt{3} \frac{f_0(E_1^{m''_0} - 1) + \bar{q}}{(\varphi_0 + f_0\varphi_0^{1/2} E_1^{m''_0-1} R_1^{(0)})^{1/2}}.$$

Звідки, з врахуванням (B.4), отримуємо

$$m''_0 = \frac{\ln E_0}{\ln E_1} + 1, \quad (\text{B.5})$$

де введені такі позначення

$$E_0 = E_{01} + \left[ E_{01}^2 + \frac{\alpha^2 \varphi_0}{3f_0^2(1-s^{-3})^2} - \left(1 - \frac{\bar{q}}{f_0}\right)^2 \right]^{1/2},$$

$$E_{01} = 1 - \frac{\bar{q}}{f_0} + \frac{\alpha^2 \varphi_0^{1/2} R_1^{(0)}}{6f_0(1-s^{-2})^2}.$$

Величини, що визначають  $m''_0$  не залежать від температури і є універсальними сталими. Однак залежно від параметра  $s$  величина  $m''_0$  набуває різних значень (див. рис. B.1). Надалі як

<sup>5</sup>Зауважимо, що умова (B.4) по суті еквівалентна введенню величини  $n_{\tau}$  із (2.8.12). Розмір ПО  $m''$  для проміжних значень параметра РГ  $s$ , що визначається з цієї умови, становить декілька блочних структур (див. рис. B.1).

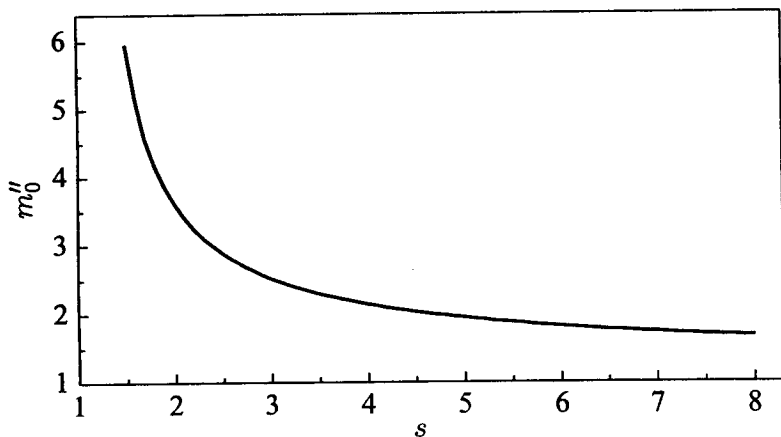


Рис. В.1. Залежність величини перехідної області  $m_0''$  від параметра  $s$

$m''$  використовуватимемо найближче до  $m_0''$  ціле число. Внесок у вільну енергію від ПО має вигляд

$$F_{\text{ПО}} = -kTN' s^{-3(m_{\tau}+1)} \sum_{m=0}^{m''} s^{-3m} f_{m_{\tau}+m+1}. \quad (\text{B.6})$$

Скориставшись даними табл. В.1 і рис. В.1, можемо розрахувати вираз

$$F_{\text{ПО}} = -kTN' f_{\text{ПО}}^{(0)} \tau^{3\nu}, \quad (\text{B.7})$$

де

$$f_{\text{ПО}}^{(0)} = \left( \frac{c_{1k}}{f_0} \right)^{3\nu} \bar{f}_{\text{ПО}}^{(0)}, \quad \bar{f}_{\text{ПО}}^{(0)} = \sum_{m=0}^{m''} s^{-3m} f_{m_{\tau}+m+1}^{(0)}. \quad (\text{B.8})$$



### Г. Розрахунок коефіцієнтів, що визначають вираз для мікроскопічного аналога вільної енергії Ландау (модель $\rho^4$ )

Розрахуємо явні вирази для величин  $\tilde{B}$  і  $G$  із (4.2.23). Відповідно до результатів праць [346, 347], після інтегрування довгохвильової частини статистичної суми (4.2.8) за всіма змінними  $\rho_{\mathbf{k}}$  з  $\mathbf{k} \neq 0$  приходимо до виразу

$$Z_{\mu_{\tau+1}} = e^{-\beta F'_{\mu_{\tau+1}}} \int \exp \left[ \beta \sqrt{N} h \rho_0 + \tilde{B} \rho_0^2 - \frac{1}{N} G \rho_0^4 \right] d\rho_0, \quad (\text{Г.1})$$

де  $F'_{\mu_{\tau+1}}$  визначено в (4.2.22). Коефіцієнти  $\tilde{B}$  і  $G$  задовільняють співвідношенням

$$\begin{aligned} \tilde{B} &= \tilde{A}_2 + \frac{3}{2} |d_{\mu_{\tau+1}}(0)| \left( 1 - \frac{3}{2} a_{\mu_{\tau+1}} \mathcal{I}_2 \right), \\ G &= \frac{1}{4!} a_{\mu_{\tau+1}} \frac{N}{N_{\mu_{\tau+1}}} \left( 1 - \frac{3}{2} a_{\mu_{\tau+1}} \mathcal{I}_2 \right). \end{aligned} \quad (\text{Г.2})$$

Величини  $d_{\mu_{\tau+1}}(0)$  і  $a_{\mu_{\tau+1}}$  задані в (4.2.3). Для отримання явного виду коефіцієнта  $\tilde{A}_2$  потрібно детальніше дослідити властивості величин  $\mathcal{I}_l$  із (4.2.16)–(4.2.19). Використовуючи (4.2.16), знаходимо

$$\mathcal{I}_1 = s^{2(\mu_{\tau+1})} \frac{\alpha_1}{(\beta \tilde{\Phi}(0))}, \quad \alpha_1 = \mathcal{L} x_{\tau}^2, \quad (\text{Г.3})$$

де величини  $\mathcal{L}$  та  $x_{\tau}$  визначені в (4.2.17). Для  $\mathcal{I}_l$  при  $l \geq 2$  маємо

$$\mathcal{I}_l = s^{2l(\mu_{\tau+1})} \frac{\alpha_l}{(\beta \tilde{\Phi}(0))^l}, \quad (\text{Г.4})$$

де

$$\alpha_l = \alpha_1^l + 6e_1^l \left( 1 + 2 \times 2^{-l/2} e_2^l \right),$$

причому

$$e_1 = \frac{6}{\pi^2(4\bar{r}_{\mu\tau+1}^{(0)} + 1)},$$

$$e_2 = (2\pi)^{-1} \left[ \sin(\pi\sqrt{2}) - \pi\sqrt{2} \cos(\pi\sqrt{2}) \right] = 0.034861.$$

Температурна залежність величин  $\mathcal{I}_l$  міститься у множнику  $s^{2l(\mu\tau+1)}$ . У табл. Г.1 наведені значення незалежних від мікроскопічних параметрів величин  $x_r$  та  $\alpha_l$ .

Табл. Г.1. Значення  $x_r$  та коефіцієнтів  $\alpha_l$  (модель  $\rho^4$ )

$s$	3	$s^*$	4	5
$x_r$	0.7758	0.6811	0.6323	0.5483
$\alpha_1$	0.4485	0.3664	0.3249	0.2558
$\alpha_2$	0.3199	0.2129	0.1672	0.1033
$\alpha_3$	0.1069	0.0582	0.0405	0.0197
$\alpha_4$	0.0428	0.0190	0.0118	0.0045

Відповідно до (Г.2)–(Г.4) з врахуванням (4.2.20) для  $\tilde{B}$  знаходимо

$$\tilde{B} = 1/2|r_{\mu\tau+1}|\tilde{B}_1 s^{-2(\mu\tau+1)}, \quad (\text{Г.5})$$

де

$$\tilde{B}_1 = 1 - u_{\mu\tau+1}(\beta\tilde{\Phi}(0))^{-2}\alpha_{11} - \frac{(u_{\mu\tau+1})^2(\beta\tilde{\Phi}(0))^{-3}}{2r_{\mu\tau+1}}\alpha_{22},$$

$$\alpha_{11} = \frac{3}{2}\alpha_2 + \frac{1}{4} \frac{\mathcal{L}}{(\bar{r}_{\mu\tau+1}^{(0)})^2}, \quad (\text{Г.6})$$

$$\alpha_{22} = \frac{\alpha_1\alpha_2}{2} + \frac{\alpha_3}{3}.$$

Аналогічно для  $G$  одержуємо

$$G = \frac{1}{4!} u_{\mu_\tau+1} s^{-(\mu_\tau+1)} s_0^3 \left( 1 - \frac{3}{2} u_{\mu_\tau+1} (\beta \tilde{\Phi}(0))^{-2} \alpha_2 \right). \quad (\Gamma.7)$$

Приймаючи до уваги температурну залежність величин  $r_{\mu_\tau+1}$ ,  $u_{\mu_\tau+1}$  згідно до (4.2.4), а також величини  $\mu_\tau$  із (4.1.13), отримуємо:

$$\begin{aligned} \tilde{B} &= \tilde{B}^{(0)} |_\tau |^{2\nu} \beta \tilde{\Phi}(0) \left( 1 + \tilde{B}^{(1)} |_\tau |^\Delta + \tilde{B}^{(2)} |_\tau |^{2\Delta} + \tilde{B}^{(3)} |_\tau \right), \\ G &= G^{(0)} |_\tau |^\nu (\beta \tilde{\Phi}(0))^2 \left( 1 + G^{(1)} |_\tau |^\Delta + G^{(2)} |_\tau |^{2\Delta} + G^{(3)} |_\tau \right). \end{aligned} \quad (\Gamma.8)$$

Для коефіцієнтів  $\tilde{B}^{(l)}$  маємо вирази

$$\begin{aligned} \tilde{B}^{(0)} &= c_\nu^2 f_0 B_1^{(0)}, \quad B_1^{(0)} = 1 - \alpha_{11} \bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)} + \alpha_{22} \frac{(\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{2\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}, \\ \tilde{B}^{(1)} &= B_1^{(1)} - 2\nu c_\Delta \Phi_0, \quad B_1^{(1)} = c_\Delta \frac{D}{B_1^{(0)}} \left( \alpha_{22} \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}{\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} - \alpha_{11} \right), \\ \tilde{B}^{(2)} &= B_1^{(2)} - 2\nu c_\Delta \Phi_0 B_1^{(1)} + 2\nu c_\Delta^2 \Phi_0^2 (\nu + \Delta + 1/2), \\ B_1^{(2)} &= c_\Delta^2 D (B_1^{(0)})^{-1} \left[ \Delta \Phi_0 \left( \alpha_{11} - \alpha_{22} \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}{\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \right) + \frac{\alpha_{22} D}{2\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \right], \\ \tilde{B}^{(3)} &= 2\nu \frac{c_{1k1}}{c_{1k}}. \end{aligned} \quad (\Gamma.9)$$

Для  $G^{(l)}$  знаходимо

$$\begin{aligned} G^{(0)} &= c_\nu s_0^3 \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}{4!} e_3, \quad e_3 = 1 - 3/2 \alpha_2 \bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}, \\ G^{(1)} &= c_\Delta \left[ D \left( 1/\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)} - 3\alpha_2 \right) / e_3 - \nu \Phi_0 \right], \\ G^{(2)} &= c_\Delta^2 \left\{ 3D \Phi_0 \alpha_2 (\nu + \Delta) / e_3 - D [\Phi_0 (\nu + \Delta) + 3/2 \alpha_2 D] \times \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times \left( e_3 \bar{u}_{\mu_r+1}^{(0)} \right)^{-1} + \nu \Phi_0^2 \left( \Delta + \frac{\nu+1}{2} \right) \Big\}, \\
 G^{(3)} = & \nu \frac{c_{1k1}}{c_{1k}}. \tag{Г.10}
 \end{aligned}$$

Структура коефіцієнтів  $\tilde{B}^{(l)}$  і  $G^{(l)}$  така, що дає змогу виділити залежність від мікроскопічних параметрів системи. При  $l = 0, 3$  ця залежність є досить простою:

$$\begin{aligned}
 \tilde{B}^{(0)} &= c_\nu^2 \cdot \text{const}, & \tilde{B}^{(3)} &= \frac{c_{1k1}}{c_{1k}} \cdot \text{const}, \\
 G^{(0)} &= c_\nu s_0^3 \cdot \text{const}, & G^{(3)} &= \frac{c_{1k1}}{c_{1k}} \cdot \text{const}.
 \end{aligned}$$

### Д. Розрахунок внесків вищих порядків при врахуванні поправки на усереднення потенціалу

Запишемо загальний вигляд оператора  $\hat{\Delta}_1$  із (5.1.9). Врахуємо внески при проміжному інтегруванні статистичної суми (інтегрування за змінними  $\nu_{\mathbf{k}}$  у (2.2.22)) від вищих коефіцієнтів  $S_{2n}$ . Це дає змогу отримати додаткові внески до основного доданку (5.1.9). Маємо [350]

$$\begin{aligned}
 \hat{\Delta}_g &= \frac{1}{2(2\pi i)^2} \sum_{l_1, l_2} \frac{1}{N'} \sum_{B_1 < k \leq B'} \Delta g(k) e^{-i\mathbf{k}(l_1 - l_2)} \times \\
 & \times \left\{ \left( \frac{S_4}{3!} \right)^2 \frac{1}{(2\pi i)^6 (N')^3} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_6 \\ \mathbf{k}_i \leq B_1}} \frac{\partial^6}{\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \partial \rho_{\mathbf{k}_6}} \times \right. \\
 & \times \exp[-i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)l_1 - i(\mathbf{k}_4 + \mathbf{k}_5 + \mathbf{k}_6)l_2] + \\
 & + 2 \frac{S_4 S_6}{3!5!} \frac{1}{(2\pi i)^8 (N')^4} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_8 \\ \mathbf{k} \leq B_1}} \frac{\partial^8}{\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \partial \rho_{\mathbf{k}_8}} \times \\
 & \times \exp[-i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)l_1 - i(\mathbf{k}_4 + \dots + \mathbf{k}_8)l_2] +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{(2\pi i)^{10} (N')^5} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{10} \\ k_i \leq B_1}} \frac{\partial^{10}}{\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \partial \rho_{\mathbf{k}_{10}}} \times \\
& \times \left[ 2 \frac{S_4 S_8}{3! 7!} \exp[-i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) \mathbf{l}_1 - i(\mathbf{k}_4 + \dots + \mathbf{k}_{10}) \mathbf{l}_2] + \right. \\
& + \left. \left( \frac{S_6}{5!} \right)^2 \exp[-i(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_5) \mathbf{l}_1 - i(\mathbf{k}_6 + \dots + \mathbf{k}_{10}) \mathbf{l}_2] \right] + \\
& + \frac{2 S_6 S_8}{5! 7!} \frac{1}{(2\pi i)^{12} (N')^6} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{12} \\ k_i \leq B_1}} \frac{\partial^{12}}{\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \partial \rho_{\mathbf{k}_{12}}} \times \\
& \times \exp[-i(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_5) \mathbf{l}_1 - i(\mathbf{k}_6 + \dots + \mathbf{k}_{12}) \mathbf{l}_2] + \\
& + \left( \frac{S_8}{7!} \right)^2 \frac{1}{(2\pi i)^{14}} \frac{1}{(N')^7} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{14} \\ k_i \leq B_1}} \frac{\partial^{14}}{\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \partial \rho_{\mathbf{k}_{14}}} \times \\
& \times \exp[-i(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_7) \mathbf{l}_1 - i(\mathbf{k}_8 + \dots + \mathbf{k}_{14}) \mathbf{l}_2] + \dots \left. \right\}. \quad (\text{Д.1})
\end{aligned}$$

Зауважимо, що дія оператора  $\hat{\Delta}_g$  на функцію  $I(R_2, R_4)$  (див. розділ 5) не приводить до зміни функціонального вигляду величини  $\Delta_g^{(1)}$  (5.1.21). Справді, знайдемо результат дії оператора

$$\frac{\partial^8}{\partial \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \partial \rho_{\mathbf{k}_8}} \quad (\text{Д.2})$$

на функцію  $I(R_2, R_4)$ . У результаті отримуємо

$$\begin{aligned}
\Delta_g^{(2)} = & - \frac{S_4 S_6}{(2\pi)^{10}} s^{-3} R_2^4 q t \left[ \frac{1}{12} N' F_0 - \frac{1}{2} R_2 \left( A_0 + \frac{F_0}{3} s^3 \right) \times \right. \\
& \times \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \leq B_1} \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + c'^2 \frac{1}{4} B_0 R_2 \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \leq B_1} k^2 \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + \quad (\text{Д.3}) \\
& \left. + R_2^2 \left( 2A_0 + 3s^{-d} C_0 \right) \frac{1}{4! N_1} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ k_i \leq B_1}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right].
\end{aligned}$$

Скористаємося співвідношенням

$$\frac{S_4 S_6}{(2\pi)^{10}} R_2 = 9 \frac{\varphi^2(x)}{(a'_4)^2} \lambda(x), \quad (\text{Д.4})$$

де введене таке позначення

$$\lambda(x) = \frac{\varphi_1(x) y U(y)}{\varphi(x) U(x)}. \quad (\text{Д.5})$$

Вираз для сумарної поправки від (5.1.25) та (Д.3) має вигляд

$$\begin{aligned} \Delta_g^{(1+2)} = & -\frac{3}{4} R_2^3 q t \frac{\varphi^2(x)}{(a'_4)^2} \left\{ N' F'_0 - 3 R_2 A'_0 \sum_{\substack{k \leq B_1 \\ k_i \leq B_1}} \rho_k \rho_{-k} + \right. \\ & + \frac{3}{2} c'^2 R_2 B'_0 \sum_{k \leq B_1} k^2 \rho_k \rho_{-k} + \\ & \left. + \frac{3}{2} s^{-3} R_2^2 C'_0 \frac{1}{N_1} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_4 \\ k_i \leq B_1}} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_4} \delta_{k_1} \dots \delta_{k_4} \right\}, \quad (\text{Д.6}) \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} F'_0 = F_0 [1 + s^{-3} \lambda(x)], \quad A'_0 = A_0 \left[ 1 + \left( s^{-3} + \frac{F_0}{3A_0} \right) \lambda(x) \right], \\ B'_0 = B_0 [1 + s^{-3} \lambda(x)], \quad C'_0 = C_0 \left[ 1 + \left( s^{-3} + \frac{2A_0}{3C_0} \right) \lambda(x) \right]. \quad (\text{Д.7}) \end{aligned}$$

Врахування вищих порядків операторів  $\partial/\partial\rho_k$  приводить до перенормування постійних, приведених у (5.1.26).

## Е. Розрахунок явного вигляду функції $Z(\bar{x})$

Один із способів розрахунку (5.1.24) пов'язаний з переходом від сумування за хвильовими векторами  $\mathbf{k}$  до інтегрування за  $\mathbf{k}$  у сферичній зоні Бріллюена згідно правила

$$\frac{1}{N'} \sum_{B_1 < k \leq B'} \dots = \frac{6}{\pi} \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{N'} \int_{B_1}^{B'} \dots dk. \quad (\text{E.1})$$

У результаті виконання такого прийому для (5.1.24) знаходимо

$$Y(\bar{x}) = \frac{3}{\pi^3} \frac{1}{\bar{x}^3} \left[ \sin(\pi\bar{x}) - \pi\bar{x} \cos(\pi\bar{x}) - \sin\left(\frac{\pi\bar{x}}{s}\right) + \frac{\pi\bar{x}}{s} \cos\left(\frac{\pi\bar{x}}{s}\right) \right]. \quad (\text{E.2})$$

Неважко зауважити, що  $Y(\bar{x})$  виражається через сферичні функції Бесселя

$$J_{3/2}(z) = \left(\frac{2}{\pi z}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{z} \sin z - \cos z\right)$$

згідно співвідношення

$$Y(\bar{x}) = \frac{6}{\pi} \left[ (2\bar{x})^{-3/2} J_{3/2}(\pi\bar{x}) - (2\bar{x}s)^{-3/2} J_{3/2}\left(\frac{\pi\bar{x}}{s}\right) \right].$$

Виділення символу Кронекера у виразі для  $\mathcal{I}_1(\bar{x})$  є важливим елементом розрахунків<sup>6</sup>. У випадку  $s \rightarrow 1$  величина  $\mathcal{I}_1(\bar{x})$  переходить у символ Кронекера  $\mathcal{I}_1(\bar{x})|_{s \rightarrow 1} = \delta_1$ , оскільки при  $s \rightarrow 1$  маємо  $B_1 \rightarrow B'$ .

<sup>6</sup>У випадку, коли не виділяється символ Кронекера в  $\mathcal{I}_1(\bar{x})$  маємо брати до уваги різницю між значеннями хвильових векторів у кристалічній ґратці з періодом  $c'$  та  $c_1 = c's$ . Справді, формально обчислюючи вираз для  $\mathcal{I}_1(\bar{x})$  із (5.1.22) шляхом переходу до інтегрування за хвильовими векторами у сферичній зоні Бріллюена з границею  $B_1 = B'/s$ , одержуємо вираз

$$\frac{3}{(\pi\bar{x})^3} \left[ \sin\left(\frac{\pi\bar{x}}{s}\right) - \frac{\pi\bar{x}}{s} \cos\left(\frac{\pi\bar{x}}{s}\right) \right].$$

У границі  $s \rightarrow 1$  цей вираз (на відміну від (5.1.23)) переходить у символ Кронекера лише наближено і справедливе лише для певних значень параметра  $\bar{x}$  ( $\bar{x} = 0$  та  $\bar{x} \gg 1$ ).

Вперше спроба розрахунку критичного показника  $\eta$  у методі КЗ була здійснена в [393]. Однак саме відсутність умови (5.1.23) не дала змоги підійти до вирішення цієї задачі.

Друга величина в (5.1.22) також може бути обчислена шляхом інтегрування. Маємо

$$I_2(\bar{x}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{6}{\pi} 4\pi \frac{1}{N'} \int_{B_1}^{B'} \frac{\sin k\bar{x}c'}{k\bar{x}c'} \frac{q - 2b^2k^2\tilde{\Phi}(0)}{1 - P_2(q - 2b^2k^2\beta\tilde{\Phi}(0))} k^2 dk, \quad (E.3)$$

де

$$\bar{q} = \frac{q}{\beta\tilde{\Phi}(0)}, \quad \bar{q} = \frac{3}{5} \frac{1 - s^{-5}}{1 - s^{-3}}; \quad 2b^2B'^2 = 1, \quad 2b^2B_1^2 = s^{-2}.$$

Приймаючи до уваги, що

$$P_2 = \left(\frac{3}{a_4'}\right)^{1/2} U(x),$$

величину  $I_2(\bar{x})$  можемо записати у вигляді

$$I_2(\bar{x}) = q \cdot t[Y(\bar{x}) - Z(\bar{x})], \quad (E.4)$$

де для спрощення розрахунків ми ввели величину

$$t = \left\langle \frac{1}{1 - P_2q + 2b^2P_2\beta\tilde{\Phi}(0)k^2} \right\rangle_{B_1, B'},$$

а символ  $\langle \dots \rangle_{B_1, B'}$  позначає середнє геометричне усереднення в інтервалі індексів  $(B_1, B']$ . Маємо

$$t = \left(\frac{\bar{a}_4'}{3}\right)^{1/2} \frac{1}{U(x)} t_0, \quad (E.5)$$

$$t_0 = \frac{3}{1 + s^{-1} + s^{-2}} + \frac{3a}{1 - s^{-3}} I_0.$$



Величина  $I_0$  розраховується з врахуванням знаку величини

$$a = \bar{q} - \sqrt{\frac{\bar{a}'_4}{3}} \frac{1}{U(x)},$$

де  $\bar{a}'_4 = a'_4(\beta\tilde{\Phi}(0))^{-2}$ , і дорівнює

$$I_0 = \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{a}} \ln \left| \frac{(1 - \sqrt{a})(s^{-1} + \sqrt{a})}{(1 + \sqrt{a})(s^{-1} - \sqrt{a})} \right|, & a > 0, \\ \frac{1}{\sqrt{|a|}} \left( \arctg |a|^{-1/2} - \arctg \frac{1}{s\sqrt{|a|}} \right), & a < 0. \end{cases} \quad (\text{E.6})$$

Функція  $\mathcal{Z}(\bar{x})$  обчислюється згідно виразу

$$\mathcal{Z}(\bar{x}) = \frac{2\beta\tilde{\Phi}(0)b^2}{q} \frac{1}{N'} \sum_{B_1 < k \leq B'} k^2 e^{-ikl}.$$

Переходячи до сферичної зони Бріллоена та інтегрування за хвильовими векторами, для

$$\mathcal{Z}(\bar{x}) = \frac{2\beta\tilde{\Phi}(0)b^2}{q} \frac{6}{\pi} \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi \frac{V}{N'} \int_{B_1}^{B'} \frac{\sin kl}{kl} k^4 dk$$

отримуємо

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(\bar{x}) = \frac{3}{\pi^2 \bar{q} \bar{x}^2} & \left\{ \left[ 3 \frac{\sin(\pi \bar{x})}{\pi \bar{x}} - \cos(\pi \bar{x}) + 6 \frac{\cos(\pi \bar{x})}{(\pi \bar{x})^2} - \right. \right. \\ & - \left. 6 \frac{\sin(\pi \bar{x})}{(\pi \bar{x})^3} \right] - s^{-3} \left[ 3 \frac{\sin(\pi \bar{x}/s)}{\pi \bar{x}/s} - \cos(\pi \bar{x}/s) + \right. \\ & \left. \left. + 6 \frac{\cos(\pi \bar{x}/s)}{(\pi \bar{x}/s)^2} - 6 \frac{\sin(\pi \bar{x}/s)}{(\pi \bar{x}/s)^3} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{E.7})$$

Використовуючи означення сферичних функцій Беселля, знаходимо

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(\bar{x}) = \frac{6}{\pi \bar{q}} (2\bar{x})^{-3/2} & \left[ J_{3/2}(\pi \bar{x}) - \frac{2}{\pi \bar{x}} J_{5/2}(\pi \bar{x}) - \right. \\ & \left. - s^{-7/2} J_{3/2} \left( \frac{\pi \bar{x}}{s} \right) + \frac{2}{\pi \bar{x}} s^{-5/2} J_{5/2} \left( \frac{\pi \bar{x}}{s} \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{E.8})$$

Табл. Е.1. Кількість частинок  $\rho(\bar{x})$ , які перебувають у вузлах простої кубічної ґратки на віддалі  $\bar{x}$  від початку координат, а також кількість тих же частинок  $\rho_1(\bar{x}) = \sum_{\Theta} \rho_{\Theta}(\bar{x}) \cos^2 \Theta$  з врахуванням їх кутового розподілу ( $\rho_{\Theta}(\bar{x})$  – кількість частинок, для яких  $\cos^2 \Theta$  приймає однакові значення,  $\Theta$  – кут між віссю  $Oz$  і напрямком на частинку)

$\bar{x}^2$	$\rho(\bar{x})$	$\cos^2 \Theta$	$\rho_{\Theta}(\bar{x})$	$\rho_1(\bar{x})$	$\bar{x}^2 \rho_1(\bar{x})$
1	2	3	4	5	6
1	6	0	4	2	2
2	12	0	4	4	8
		1/2	8		
3	8	1/3	8	8/3	8
4	6	0	4	2	8
		1	2		
		0	8		
5	24	4/5	8	8	40
		1/5	8		
6	24	1/6	16	8	48
		2/3	8		
7	0	-	-	-	-
8	12	0	4	4	32
		1/2	8		
		0	4		
9	30	4/9	16	10	90
		1	2		
		1/9	8		
		0	8		
10	24	9/10	8	8	80
		1/10	8		
11	24	1/11	16	8	88
		9/11	8		
12	8	1/3	8	8/3	32
		0	8		
13	24	4/13	8	8	104
		9/13	8		

1	2	3	4	5	6
		2/7	16		
14	48	9/14	16	16	224
		1/14	16		
15	0	—	—	—	—
16	6	0	4	2	32
		1	2		
		0	8		
		4/17	16		
17	48	16/17	8	16	272
		9/17	8		
		1/17	8		
		0	4		
		1/18	16		
18	36	8/9	8	12	216
		1/2	8		
19	24	1/19	8	8	152
		9/19	16		
		0	8		
20	24	1/5	8	8	160
		4/5	8		
		1/21	16		
21	48	4/21	16	16	336
		16/21	16		
22	24	9/22	16	8	176
		2/11	8		
23	0	—	—	—	—
24	24	1/6	16	8	192
		2/3	8		
		0	12		
25	30	1	2	10	250
		9/25	8		
		16/25	8		

1	2	3	4	5	6
		0	8		
26	72	1/26	24		
		9/26	16	24	624
		8/13	16		
		25/26	8		
		1/27	16		
27	32	25/27	8	32/3	288
		1/3	8		
28	0	-	-	-	-
		16/29	16		
		4/29	24		
29	72	25/29	8	24	696
		9/29	16		
		0	8		
		2/15	16		
30	48	5/6	16	16	480
		1/30	16		
31	0	-	-	-	-
32	12	0	4	4	128
		1/2	8		
		16/33	16		
33	48	4/33	16	16	528
		25/33	8		
		1/33	8		
		0	8		
34	48	9/34	24	16	544
		25/34	8		
		8/17	8		
		9/35	16		
35	48	5/7	16	16	560
		1/35	16		
		0	4		
36	30	1	2	10	360
		4/9	16		
		1/9	8		

1	2	3	4	5	6
		0	8		
37	24	36/37	8	8	296
		1/37	8		
		1/38	16		
		18/19	8		
38	72	9/38	16	24	912
		25/38	16		
		2/19	16		
39	0	-	-	-	-
		0	8		
40	24	1/10	8	8	320
		9/10	8		
		0	8		
		1/41	16		
		4/41	16		
41	96	36/41	16	32	1312
		16/41	24		
		25/41	8		
		9/41	8		
		8/21	16		
42	48	25/42	16	16	672
		1/42	16		
43	24	9/43	16	8	344
		25/43	8		
44	24	1/11	16	8	352
		9/11	8		
		0	8		
		4/45	16		
45	72	1/5	8	24	1080
		12/15	8		
		16/45	16		
		5/9	16		
		9/46	16		
46	48	18/23	16	16	736
		1/46	16		

1	2	3	4	5	6
47	0	—	—	—	—
48	8	1/3	8	8/3	128
		0	4		
		9/49	16		
49	54	1	2	18	882
		36/49	16		
		4/49	16		
		0	12		
		49/50	8		
50	84	1/50	8	28	1400
		1/2	24		
		8/25	16		
		9/50	16		
		1/51	24		
51	48	25/51	16	16	816
		49/51	8		
		0	8		
52	24	4/13	8	8	416
		9/13	8		
		0	8		
		16/53	16		
53	72	36/53	16	24	1272
		4/53	8		
		49/53	8		
		1/53	16		
		1/54	16		
		2/27	24		
54	96	49/54	16	32	1728
		25/54	16		
		1/6	16		
		2/3	8		

Табл. Е.2. Величини  $F_0, A_0, B_0, C_0$  із (5.1.26) для деяких значень параметра  $s$ 

$s$	3	$s^*$	4	5
$F_0$	-0.0094	-0.0120	-0.0133	-0.0151
$A_0$	0.0386	0.0471	0.0510	0.0563
$B_0$	0.0118	0.0160	0.0178	0.0201
$C_0$	-0.0398	-0.0440	-0.0452	-0.0474

Через функції  $Y(\bar{x})$  (Е.2) та  $Z(\bar{x})$  (Е.8) визначаються величини  $F_0, A_0, B_0, C_0$  (5.1.26). При сумуванні в (5.1.26) враховується  $\bar{x}$  – віддаль до частинок, а  $\rho(\bar{x})$  – їхня кількість (див. табл. Е.1),  $\rho_1(\bar{x})$  – кількість тих самих частинок з врахуванням їхнього кутового розподілу

$$\rho_1(\bar{x}) = \sum_{\Theta} \rho_{\Theta}(\bar{x}) \cos^2 \Theta.$$

Тут  $\rho_{\Theta}(\bar{x})$  – кількість частинок, розміщених на віддалі  $\bar{x}$  від початку координат, для яких  $\cos^2 \Theta$  однаковий ( $\Theta$  – кут між віссю  $Oz$  і напрямком на частинку), причому

$$\rho(\bar{x}) = \sum_{\Theta} \rho_{\Theta}(\bar{x}).$$

Значення величин  $F_0, A_0, B_0$  та  $C_0$  подані в табл. Е.2.

### Є. До розрахунку парціальної вільної енергії $n$ -ої блочної структури в наближенні моделі $\rho^6$

Розглянемо детальніше структуру виразу (8.2.2). Функції  $I_0(x, y)$ , та  $C(x, y)$ , що входять до його складу, визначені відповідно в (8.1.6) та (8.1.5).

В області КР основні  $h_n$ ,  $\alpha_n$  та проміжні  $\eta_n$ ,  $\xi_n$  аргументи (див. формули (8.1.9), (8.1.11)) близькі до своїх значень у фіксованій точці. У зв'язку з цим функції, що залежать від цих аргументів, представлятимемо у вигляді степеневих рядів відносно відхилень цих аргументів від їх значень у фіксованій точці.

Вираз для  $I_0(h_n, \alpha_n)$  одержимо із співвідношення (див. (8.1.6))

$$\begin{aligned} I_{2l}(h_n, \alpha_n) = & I_{2l}^* + I_{2l+2}^* \left( h^{(0)} - h_n \right) + I_{2l+6}^* \left( \alpha^{(0)} - \alpha_n \right) + \\ & + \frac{I_{2l+4}^*}{2} \left( h^{(0)} - h_n \right)^2 + \frac{I_{2l+12}^*}{2} \left( \alpha^{(0)} - \alpha_n \right)^2 + \\ & + I_{2l+8}^* \left( h^{(0)} - h_n \right) \left( \alpha^{(0)} - \alpha_n \right) \end{aligned} \quad (\text{Є.1})$$

при  $l = 0$ . Для  $I_0(h_n, \alpha_n)$  знаходимо

$$\begin{aligned} I_0(h_n, \alpha_n) = & I_0^* \left[ 1 + F_2^* \left( h^{(0)} - h_n \right) + F_6^* \left( \alpha^{(0)} - \alpha_n \right) + \right. \\ & + \frac{F_4^*}{2} \left( h^{(0)} - h_n \right)^2 + \frac{F_{12}^*}{2} \left( \alpha^{(0)} - \alpha_n \right)^2 + \\ & \left. + F_8^* \left( h^{(0)} - h_n \right) \left( \alpha^{(0)} - \alpha_n \right) \right], \end{aligned} \quad (\text{Є.2})$$

де

$$F_{2l}^* = I_{2l}^*/I_0^*, \quad I_{2l}^* = \int_0^\infty x^{2l} \exp \left( -h^{(0)}x^2 - x^4 - \alpha^{(0)}x^6 \right) dx.$$

Із формули (див. (8.1.6))

$$\begin{aligned} F_{2l}(h_n, \alpha_n) = & F_{2l}^* \left[ 1 + \left( h^{(0)} - h_n \right) \left( \frac{F_{2l+2}^*}{F_{2l}^*} - F_2^* \right) + \left( \alpha^{(0)} - \alpha_n \right) \times \right. \\ & \left( \frac{F_{2l+6}^*}{F_{2l}^*} - F_6^* \right) + \left( h^{(0)} - h_n \right)^2 \left( \frac{F_{2l+4}^*}{2F_{2l}^*} - \frac{F_{2l+2}^*}{F_{2l}^*} F_2^* - \frac{F_4^*}{2} + F_2^{*2} \right) + \\ & + \left( \alpha^{(0)} - \alpha_n \right)^2 \left( \frac{F_{2l+12}^*}{2F_{2l}^*} - \frac{F_{2l+6}^*}{F_{2l}^*} F_6^* - \frac{F_{12}^*}{2} + F_6^{*2} \right) + \left( h^{(0)} - h_n \right) \times \\ & \left. \times \left( \alpha^{(0)} - \alpha_n \right) \left( \frac{F_{2l+8}^*}{F_{2l}^*} - \frac{F_{2l+6}^*}{F_{2l}^*} F_2^* - \frac{F_{2l+2}^*}{F_{2l}^*} F_6^* - F_8^* + 2F_2^* F_6^* \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{Є.3})$$



знаходимо функції  $F_2(h_n, \alpha_n)$ ,  $F_4(h_n, \alpha_n)$  та  $F_6(h_n, \alpha_n)$ , потрібні для обчислення  $C(h_n, \alpha_n)$  та  $N(h_n, \alpha_n)$ . Наприклад, для функції  $F_2(h_n, \alpha_n)$  маємо:

$$\begin{aligned}
 F_2(h_n, \alpha_n) = p_{20} & \left[ 1 + p_{21} \left( h^{(0)} - h_n \right) + \right. \\
 & + p_{22} \left( \alpha^{(0)} - \alpha_n \right) + p'_{21} \left( h^{(0)} - h_n \right)^2 + \\
 & \left. + p'_{22} \left( \alpha^{(0)} - \alpha_n \right)^2 + p'_{23} \left( h^{(0)} - h_n \right) \left( \alpha^{(0)} - \alpha_n \right) \right].
 \end{aligned} \tag{Є.4}$$

Коефіцієнти  $p_{2m}$  та  $p'_{2m}$  цього представлення одержуємо із співвідношень

$$\begin{aligned}
 p_{20} &= F_2^*, \quad p_{21} = \frac{F_4^*}{F_2^*} - F_2^*, \quad p_{22} = \frac{F_8^*}{F_2^*} - F_6^*, \\
 p'_{21} &= \frac{F_6^*}{2F_2^*} - \frac{3}{2}F_4^* + F_2^{*2}, \\
 p'_{22} &= \frac{F_{14}^*}{2F_2^*} - \frac{F_{12}^*}{2} - \frac{F_8^*}{F_2^*}F_6^* + F_6^{*2}, \\
 p'_{23} &= \frac{F_{10}^*}{F_2^*} - 2F_8^* - \frac{F_6^*}{F_2^*}F_4^* + 2F_6^*F_2^*.
 \end{aligned} \tag{Є.5}$$

Подібні вирази легко отримати і для функцій  $F_4(h_n, \alpha_n)$ ,  $F_6(h_n, \alpha_n)$  (див., наприклад, [367]). Використовуючи розклади для функцій  $F_2(h_n, \alpha_n)$ ,  $F_4(h_n, \alpha_n)$ ,  $F_6(h_n, \alpha_n)$ , обчислимо відповідно до (8.1.5) вирази для функцій  $C(h_n, \alpha_n)$  та  $N(h_n, \alpha_n)$ , які входять до складу РС моделі  $\rho^6$ . Саме ці функції визначають проміжні аргументи  $\eta_n$  та  $\xi_n$  (8.1.11). Для  $C(h_n, \alpha_n)$  знаходимо:

$$\begin{aligned}
 C(h_n, \alpha_n) = p_{40} & \left[ 1 + p_{41} \left( h^{(0)} - h_n \right) + p_{42} \left( \alpha^{(0)} - \alpha_n \right) + \right. \\
 & + p'_{41} \left( h^{(0)} - h_n \right)^2 + p'_{42} \left( \alpha^{(0)} - \alpha_n \right)^2 + \\
 & \left. + p'_{43} \left( h^{(0)} - h_n \right) \left( \alpha^{(0)} - \alpha_n \right) \right].
 \end{aligned} \tag{Є.6}$$

Тут коефіцієнти  $p_{4m}$  та  $p'_{4m}$  мають вигляд

$$\begin{aligned}
 p_{40} &= -F_4^* + 3F_2^{*2}, & (\text{Є.7}) \\
 p_{41} &= (p_{40})^{-1} [-F_6^* + 7F_4^*F_2^* - 6F_2^{*3}], \\
 p_{42} &= (p_{40})^{-1} [-F_{10}^* + 6F_8^*F_2^* + F_6^*F_4^* - 6F_6^*F_2^{*2}], \\
 p'_{41} &= (p_{40})^{-1} \left[ -\frac{F_8^*}{2} + 4F_6^*F_2^* + \frac{7}{2}F_4^{*2} - 16F_4^*F_2^{*2} + 9F_2^{*4} \right], \\
 p'_{42} &= (p_{40})^{-1} \left[ -\frac{F_{16}^*}{2} + 3F_{14}^*F_2^* + \frac{F_{12}^*F_4^*}{2} - 3F_{12}^*F_2^{*2} + \right. \\
 &\quad \left. + F_{10}^*F_6^* + 3F_8^{*2} - 12F_8^*F_6^*F_2^* - F_6^{*2}F_4^* + 9F_6^{*2}F_2^{*2} \right], \\
 p'_{43} &= (p_{40})^{-1} [-F_{12}^* + 7F_{10}^*F_2^* + 7F_8^*F_4^* - \\
 &\quad - 18F_8^*F_2^{*2} + F_6^{*2} - 14F_6^*F_4^*F_2^* + 18F_6^*F_2^{*3}].
 \end{aligned}$$

Аналогічно для функції  $N(h_n, \alpha_n)$  одержуємо таке представлення:

$$\begin{aligned}
 N(h_n, \alpha_n) &= p_{60} \left[ 1 + p_{61} (h^{(0)} - h_n) + p_{62} (\alpha^{(0)} - \alpha_n) + \right. \\
 &\quad \left. + p'_{61} (h^{(0)} - h_n)^2 + p'_{62} (\alpha^{(0)} - \alpha_n)^2 + \right. & (\text{Є.8}) \\
 &\quad \left. + p'_{63} (h^{(0)} - h_n) (\alpha^{(0)} - \alpha_n) \right].
 \end{aligned}$$

Коефіцієнти розкладу  $p_{6m}$  та  $p'_{6m}$  записують у вигляді:

$$\begin{aligned}
 p_{60} &= F_6^* - 15F_4^*F_2^* + 30F_2^{*3}, \\
 p_{61} &= (p_{60})^{-1} [F_8^* - 16F_6^*F_2^* - 15F_4^{*2} + 120F_4^*F_2^{*2} - 90F_2^{*4}], \\
 p_{62} &= (p_{60})^{-1} [F_{12}^* - 15F_{10}^*F_2^* - 15F_8^*F_4^* + 90F_8^*F_2^{*2} + \\
 &\quad + 30F_6^*F_4^*F_2^* - F_6^{*2} - 90F_6^*F_2^{*3}], \\
 p'_{61} &= (p_{60})^{-1} \left[ \frac{F_{10}^*}{2} - \frac{17}{2}F_8^*F_2^* - 23F_6^*F_4^* + \right. \\
 &\quad \left. + 76F_6^*F_2^{*2} + 135F_4^{*2}F_2^* - 360F_4^*F_2^{*3} + 180F_2^{*5} \right], \\
 p'_{62} &= (p_{60})^{-1} \left[ \frac{F_{18}^*}{2} - \frac{15}{2}F_{16}^*F_2^* - \frac{15}{2}F_{14}^*F_4^* + 45F_{14}^*F_2^{*2} - \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{3}{2}F_{12}^*F_6^* + 30F_{12}^*F_4^*F_2^* - 45F_{12}^*F_2^{*3} - 15F_{10}^*F_8^* + \\
& + 30F_{10}^*F_6^*F_2^* + 90F_8^{*2}F_2^* + 30F_8^*F_6^*F_4^* - 270F_8^*F_6^*F_2^{*2} + \\
& + F_6^{*3} - 45F_6^{*2}F_4^*F_2^* + 180F_6^{*2}F_2^{*3}], \\
p'_{63} = & (p_{60})^{-1} [F_{14}^* - 16F_{12}^*F_2^* - 30F_{10}^*F_4^* + 120F_{10}^*F_2^{*2} - \\
& - 17F_8^*F_6^* + 240F_8^*F_4^*F_2^* - 360F_8^*F_2^{*3} + 32F_6^{*2}F_2^* + \\
& + 30F_6^*F_4^{*2} - 360F_6^*F_4^*F_2^{*2} + 360F_6^*F_2^{*4}]. \quad (\text{Є.9})
\end{aligned}$$

Використовуючи розклади для функцій  $F_2(h_n, \alpha_n)$ ,  $C(h_n, \alpha_n)$ , знаходимо вираз для  $\eta_n$  (8.1.11):

$$\begin{aligned}
\eta_n = \eta^{(0)} \left[ 1 + \bar{\eta}_1 (h^{(0)} - h_n) + \bar{\eta}_2 (\alpha^{(0)} - \alpha_n) + \bar{\eta}'_1 (h^{(0)} - h_n)^2 + \right. \\
\left. + \bar{\eta}'_2 (\alpha^{(0)} - \alpha_n)^2 + \bar{\eta}'_3 (h^{(0)} - h_n) (\alpha^{(0)} - \alpha_n) \right]. \quad (\text{Є.10})
\end{aligned}$$

Для коефіцієнтів  $\bar{\eta}_l, \bar{\eta}'_l$  маємо

$$\begin{aligned}
\eta^{(0)} = s^{3/2} p_{20} (6/p_{40})^{1/2}, \quad \bar{\eta}_m = p_{2m} - \frac{1}{2} p_{4m}, \\
\bar{\eta}'_m = \frac{1}{2} \left[ \frac{3}{4} p_{4m}^2 - p_{2m} p_{4m} + 2p'_{2m} - p'_{4m} \right], \quad m = 1, 2, \quad (\text{Є.11}) \\
\bar{\eta}'_3 = \frac{1}{2} \left[ \frac{3}{2} p_{41} p_{42} - p_{21} p_{42} - p_{22} p_{41} + 2p'_{23} - p'_{43} \right].
\end{aligned}$$

Аналогічно одержуємо вираз для  $\xi_n$ :

$$\begin{aligned}
\xi_n = \xi^{(0)} \left[ 1 + \bar{\xi}_1 (h^{(0)} - h_n) + \bar{\xi}_2 (\alpha^{(0)} - \alpha_n) + \bar{\xi}'_1 (h^{(0)} - h_n)^2 + \right. \\
\left. + \bar{\xi}'_2 (\alpha^{(0)} - \alpha_n)^2 + \bar{\xi}'_3 (h^{(0)} - h_n) (\alpha^{(0)} - \alpha_n) \right], \quad (\text{Є.12})
\end{aligned}$$

де коефіцієнти  $\bar{\xi}_l$  та  $\bar{\xi}'_l$  мають вигляд:

$$\begin{aligned} \xi^{(0)} &= \frac{\sqrt{6}}{15} s^{-3/2} p_{60} (p_{40})^{-3/2}, \quad \bar{\xi}_m = p_{6m} - \frac{3}{2} p_{4m}, \\ \bar{\xi}'_m &= \frac{3}{2} \left[ \frac{5}{4} p_{4m}^2 - p_{6m} p_{4m} + \frac{2}{3} p'_{6m} - p'_{4m} \right], \\ \bar{\xi}'_3 &= \frac{3}{2} \left[ \frac{5}{2} p_{41} p_{42} - p_{61} p_{42} - p_{62} p_{41} + \frac{2}{3} p'_{63} - p'_{43} \right]. \end{aligned} \quad (\text{Є.13})$$

Ми одержали представлення проміжних аргументів (Є.10), (Є.12) через основні аргументи. Запишемо тепер спеціальні функції проміжних аргументів через основні аргументи.

Подамо вираз для величини  $I_{2l}(\eta_{n-1}, \xi_{n-1})$  як функції  $(h_{n-1} - h^{(0)})$  та  $(\alpha_{n-1} - \alpha^{(0)})$ . Маємо розклад:

$$\begin{aligned} I_{2l}(\eta_{n-1}, \xi_{n-1}) &= I_{2l}^{**} + \left[ \eta^{(0)} \bar{\eta}_1 I_{2l+2}^{**} + \xi^{(0)} \bar{\xi}_1 I_{2l+6}^{**} \right] (h_{n-1} - h^{(0)}) + \\ &+ \left[ \eta^{(0)} \bar{\eta}_2 I_{2l+2}^{**} + \xi^{(0)} \bar{\xi}_2 I_{2l+6}^{**} \right] (\alpha_{n-1} - \alpha^{(0)}) + \left[ \frac{(\eta^{(0)} \bar{\eta}_1)^2}{2} I_{2l+4}^{**} + \right. \\ &+ \frac{(\xi^{(0)} \bar{\xi}_1)^2}{2} I_{2l+12}^{**} + \eta^{(0)} \xi^{(0)} \bar{\eta}_1 \bar{\xi}_1 I_{2l+8}^{**} - \eta^{(0)} \bar{\eta}'_1 I_{2l+2}^{**} - \\ &- \xi^{(0)} \bar{\xi}'_1 I_{2l+6}^{**} \left. \right] (h_{n-1} - h^{(0)})^2 + \left[ \frac{(\eta^{(0)} \bar{\eta}_2)^2}{2} I_{2l+4}^{**} + \frac{(\xi^{(0)} \bar{\xi}_2)^2}{2} I_{2l+12}^{**} + \right. \\ &+ \eta^{(0)} \xi^{(0)} \bar{\eta}_2 \bar{\xi}_2 I_{2l+8}^{**} - \eta^{(0)} \bar{\eta}'_2 I_{2l+2}^{**} - \xi^{(0)} \bar{\xi}'_2 I_{2l+6}^{**} \left. \right] (\alpha_{n-1} - \alpha^{(0)})^2 + \\ &+ \left[ (\eta^{(0)})^2 \bar{\eta}_1 \bar{\eta}_2 I_{2l+4}^{**} + (\xi^{(0)})^2 \bar{\xi}_1 \bar{\xi}_2 I_{2l+12}^{**} + \eta^{(0)} \xi^{(0)} \times \right. \\ &\times (\bar{\eta}_1 \bar{\xi}_2 + \bar{\eta}_2 \bar{\xi}_1) I_{2l+8}^{**} - \eta^{(0)} \bar{\eta}'_3 I_{2l+2}^{**} - \xi^{(0)} \bar{\xi}'_3 I_{2l+6}^{**} \left. \right] \times \\ &\times (h_{n-1} - h^{(0)}) (\alpha_{n-1} - \alpha^{(0)}), \end{aligned} \quad (\text{Є.14})$$

в якому для  $I_{2l}^{**}$  використане позначення

$$I_{2l}^{**} = \int_0^\infty x^{2l} \exp(-\eta^{(0)} x^2 - x^4 - \xi^{(0)} x^6) dx. \quad (\text{Є.15})$$

Функції  $F_{2l}(\eta_n, \xi_n)$  можуть бути записані у вигляді, подібному до (Є.14):

$$F_{2l}(\eta_{n-1}, \xi_{n-1}) = F_{2l}^{**} \left[ 1 + \bar{f}_{2l}^{(1)} \left( h^{(0)} - h_{n-1} \right) + \right. \\ \left. + \bar{f}_{2l}^{(2)} \left( \alpha^{(0)} - \alpha_{n-1} \right) + \bar{f}_{2l}^{(1)'} \left( h^{(0)} - h_{n-1} \right)^2 + \right. \\ \left. + \bar{f}_{2l}^{(2)'} \left( \alpha^{(0)} - \alpha_{n-1} \right)^2 + \bar{f}_{2l}^{(3)'} \left( h^{(0)} - h_{n-1} \right) \left( \alpha^{(0)} - \alpha_{n-1} \right) \right]. \quad (\text{Є.16})$$

Тут введені позначення

$$\bar{f}_{2l}^{(m)} = (F_{2l}^{**})^{-1} \left[ \eta^{(0)} \bar{\eta}_m \bar{F}_{2l}^{(2)} + \xi^{(0)} \bar{\xi}_m \bar{F}_{2l}^{(6)} \right], \quad (\text{Є.17}) \\ \bar{f}_{2l}^{(m)'} = (F_{2l}^{**})^{-1} \left[ (\eta^{(0)} \bar{\eta}_m)^2 \bar{F}_{2l}^{(4)} + (\xi^{(0)} \bar{\xi}_m)^2 \bar{F}_{2l}^{(12)} + \right. \\ \left. + \eta^{(0)} \xi^{(0)} \bar{\eta}_m \bar{\xi}_m \bar{F}_{2l}^{(8)} + \eta^{(0)} \bar{\eta}_m' \bar{F}_{2l}^{(2)} + \xi^{(0)} \bar{\xi}_m' \bar{F}_{2l}^{(6)} \right], \\ \bar{f}_{2l}^{(3)'} = (F_{2l}^{**})^{-1} \left[ 2(\eta^{(0)})^2 \bar{\eta}_1 \bar{\eta}_2 \bar{F}_{2l}^{(4)} + 2(\xi^{(0)})^2 \bar{\xi}_1 \bar{\xi}_2 \bar{F}_{2l}^{(12)} + \right. \\ \left. + \eta^{(0)} \xi^{(0)} (\bar{\eta}_1 \bar{\xi}_2 + \bar{\eta}_2 \bar{\xi}_1) \bar{F}_{2l}^{(8)} + \eta^{(0)} \bar{\eta}_3' \bar{F}_{2l}^{(2)} + \xi^{(0)} \bar{\xi}_3' \bar{F}_{2l}^{(6)} \right],$$

причому для  $\bar{F}_{2l}^{(2m)}$  маємо вирази

$$\bar{F}_{2l}^{(2)} = F_{2l}^{**} F_2^{**} - F_{2l+2}^{**}, \quad \bar{F}_{2l}^{(6)} = F_{2l}^{**} F_6^{**} - F_{2l+6}^{**}, \\ \bar{F}_{2l}^{(4)} = \frac{F_{2l+4}^{**}}{2} - F_{2l+2}^{**} F_2^{**} - \frac{F_{2l}^{**} F_4^{**}}{2} + F_{2l}^{**} F_2^{**2}, \\ \bar{F}_{2l}^{(12)} = \frac{F_{2l+12}^{**}}{2} - F_{2l+6}^{**} F_6^{**} - \frac{F_{2l}^{**} F_{12}^{**}}{2} + F_{2l}^{**} F_6^{**2}, \\ \bar{F}_{2l}^{(8)} = F_{2l+8}^{**} - F_{2l+6}^{**} F_2^{**} - F_{2l+2}^{**} F_6^{**} - F_{2l}^{**} F_8^{**} + 2F_{2l}^{**} F_2^{**} F_6^{**},$$

де

$$F_{2l}^{**} = I_{2l}^{**} / I_0^{**}. \quad (\text{Є.18})$$

Приведені вище формули для  $I_{2l}(\eta_{n-1}, \xi_{n-1})$  та  $F_{2l}(\eta_{n-1}, \xi_{n-1})$  дають змогу отримати квадратичне за  $(h^{(0)} - h_{n-1})$ ,  $(\alpha^{(0)} - \alpha_{n-1})$

наближення функцій  $I_0(\eta_{n-1}, \xi_{n-1})$ ,  $F_2(\eta_{n-1}, \xi_{n-1})$ ,  $C(\eta_{n-1}, \xi_{n-1})$ ,  $N(\eta_{n-1}, \xi_{n-1})$ . Так, для величини  $I_0(\eta_{n-1}, \xi_{n-1})$  знаходимо

$$\begin{aligned} I_0(\eta_{n-1}, \xi_{n-1}) = I_0^{**} \left[ 1 + b_1 \left( h_{n-1} - h^{(0)} \right) + b_2 \left( \alpha_{n-1} - \alpha^{(0)} \right) + \right. \\ \left. + b'_1 \left( h_{n-1} - h^{(0)} \right)^2 + b'_2 \left( \alpha_{n-1} - \alpha^{(0)} \right)^2 + \right. \\ \left. + b'_3 \left( h_{n-1} - h^{(0)} \right) \left( \alpha_{n-1} - \alpha^{(0)} \right) \right]. \quad (\text{Є.19}) \end{aligned}$$

Тут

$$\begin{aligned} b_m &= \eta^{(0)} \bar{\eta}_m F_2^{**} + \xi^{(0)} \bar{\xi}_m F_6^{**}, \\ b'_m &= \frac{(\eta^{(0)} \bar{\eta}_m)^2}{2} F_4^{**} + \frac{(\xi^{(0)} \bar{\xi}_m)^2}{2} F_{12}^{**} + \\ &+ \eta^{(0)} \xi^{(0)} \bar{\eta}_m \bar{\xi}_m F_8^{**} - \eta^{(0)} \bar{\eta}'_m F_2^{**} - \xi^{(0)} \bar{\xi}'_m F_6^{**}, \quad (\text{Є.20}) \\ b'_3 &= (\eta^{(0)})^2 \bar{\eta}_1 \bar{\eta}_2 F_4^{**} + (\xi^{(0)})^2 \bar{\xi}_1 \bar{\xi}_2 F_{12}^{**} + \\ &+ \eta^{(0)} \xi^{(0)} (\bar{\eta}_1 \bar{\xi}_2 + \bar{\eta}_2 \bar{\xi}_1) F_8^{**} - \eta^{(0)} \bar{\eta}'_3 F_2^{**} - \xi^{(0)} \bar{\xi}'_3 F_6^{**}. \end{aligned}$$

Для  $F_2(\eta_{n-1}, \xi_{n-1})$  маємо:

$$\begin{aligned} F_2(\eta_{n-1}, \xi_{n-1}) = P_{20} \left[ 1 + P_{21} \left( h^{(0)} - h_{n-1} \right) + P_{22} \left( \alpha^{(0)} - \alpha_{n-1} \right) + \right. \\ \left. + P'_{21} \left( h^{(0)} - h_{n-1} \right)^2 + P'_{22} \left( \alpha^{(0)} - \alpha_{n-1} \right)^2 + \right. \\ \left. + P'_{23} \left( h^{(0)} - h_{n-1} \right) \left( \alpha^{(0)} - \alpha_{n-1} \right) \right], \quad (\text{Є.21}) \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} P_{20} &= F_2^{**}, & P_{2m} &= \bar{f}_2^{(m)}, \\ P'_{2m} &= \bar{f}_2^{(m)'}, & P'_{23} &= \bar{f}_2^{(3)'}. \end{aligned}$$

Для функції  $C(\eta_{n-1}, \xi_{n-1})$  одержуємо

$$\begin{aligned} C(\eta_{n-1}, \xi_{n-1}) = P_{40} \left[ 1 + P_{41} \left( h^{(0)} - h_{n-1} \right) + P_{42} \left( \alpha^{(0)} - \alpha_{n-1} \right) + \right. \\ \left. + P'_{41} \left( h^{(0)} - h_{n-1} \right)^2 + P'_{42} \left( \alpha^{(0)} - \alpha_{n-1} \right)^2 + \right. \\ \left. + P'_{43} \left( h^{(0)} - h_{n-1} \right) \left( \alpha^{(0)} - \alpha_{n-1} \right) \right]. \quad (\text{Є.22}) \end{aligned}$$

Тут

$$\begin{aligned}
 P_{40} &= -F_4^{**} + 3F_2^{**2}, \\
 P_{4m} &= (P_{40})^{-1} \left[ 6F_2^{**2} \bar{f}_2^{(m)} - F_4^{**} \bar{f}_4^{(m)} \right], \\
 P'_{4m} &= (P_{40})^{-1} \left[ 3F_2^{**2} \left( (\bar{f}_2^{(m)})^2 + 2\bar{f}_2^{(m)'} \right) - F_4^{**} \bar{f}_4^{(m)'} \right], \quad (\text{Є.23}) \\
 P'_{43} &= (P_{40})^{-1} \left[ 6F_2^{**2} \left( \bar{f}_2^{(1)} \bar{f}_2^{(2)} + \bar{f}_3^{(3)'} \right) - F_4^{**} \bar{f}_4^{(3)'} \right].
 \end{aligned}$$

Нарешті, для функції  $N(\eta_{n-1}, \xi_{n-1})$  знаходимо:

$$\begin{aligned}
 N(\eta_{n-1}, \xi_{n-1}) &= P_{60} \left[ 1 + P_{61} \left( h^{(0)} - h_{n-1} \right) + P_{62} \left( \alpha^{(0)} - \alpha_{n-1} \right) + \right. \\
 &\quad + P'_{61} \left( h^{(0)} - h_{n-1} \right)^2 + P'_{62} \left( \alpha^{(0)} - \alpha_{n-1} \right)^2 + \\
 &\quad \left. + P'_{63} \left( h^{(0)} - h_{n-1} \right) \left( \alpha^{(0)} - \alpha_{n-1} \right) \right], \quad (\text{Є.24})
 \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}
 P_{60} &= F_6^{**} - 15F_4^{**} F_2^{**} + 30F_2^{**3}, \quad (\text{Є.25}) \\
 P_{6m} &= (P_{60})^{-1} \left[ F_6^{**} \bar{f}_6^{(m)} - 15F_4^{**} F_2^{**} \left( \bar{f}_4^{(m)} + \bar{f}_2^{(m)} \right) + 90F_2^{**3} \bar{f}_2^{(m)} \right], \\
 P'_{6m} &= (P_{60})^{-1} \left[ F_6^{**} \bar{f}_6^{(m)'} - 15F_4^{**} F_2^{**} \left( \bar{f}_2^{(m)} \bar{f}_4^{(m)} + \bar{f}_2^{(m)'} + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \bar{f}_4^{(m)'} \right) + 90F_2^{**3} \left[ (\bar{f}_2^{(m)})^2 + \bar{f}_2^{(m)'} \right] \right], \quad m = 1, 2, \\
 P'_{63} &= (P_{60})^{-1} \left[ F_6^{**} \bar{f}_6^{(3)'} - 15F_4^{**} F_2^{**} \left( \bar{f}_2^{(1)} \bar{f}_4^{(2)} + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \bar{f}_2^{(2)} \bar{f}_4^{(1)} + \bar{f}_2^{(3)'} + \bar{f}_4^{(3)'} \right) + 90F_2^{**3} \left( 2\bar{f}_2^{(1)} \bar{f}_2^{(2)} + \bar{f}_2^{(3)'} \right) \right].
 \end{aligned}$$

Використовуючи вирази для величин  $I_0(h_n, \alpha_n)$ ,  $I_0(\eta_{n-1}, \xi_{n-1})$ ,  $C(\eta_{n-1}, \xi_{n-1})$ , відповідно до (8.2.2) отримуємо вираз (8.2.3) для парціальної вільної енергії  $n$ -ої блочної структури.

Отже, парціальна вільна енергія  $F_n$  представляється у вигляді ряду за степенями відхилень основних аргументів від їх значень у фіксованій точці. У праці [377] для  $F_n$  використовувалось лінійне наближення. У цьому додатку, як і при розрахунках для моделі  $\rho^4$  [315, 346], у виразі для  $F_n$  враховуються також квадрати відхилень. Це дає змогу порівняти результати розрахунків для моделей  $\rho^4$  і  $\rho^6$ . Зазначимо, що при обчисленні елементів матриці лінеаризації РС поблизу фіксованої точки, квадратичні доданки зникають і матричні елементи, власні значення цієї матриці і критичний показник кореляційної довжини залишаються такими ж, як і при використанні для РС лінійного наближення.

## Ж. До обчислення довгохвильової частини статистичної суми системи (модель $\rho^6$ )

Виходитимемо з виразу для тієї частини статистичної суми (див. (9.3.3)), яка описує довгохвильові флуктуації в наближенні моделі  $\rho^6$ . Маємо:

$$\begin{aligned}
 Z_{\mu_{\tau+1}} = & \exp(-\beta F_{\sigma} + \beta F_h) \int d\rho_0 \exp\left(\beta\sqrt{N}h\rho_0 - \frac{\bar{d}_{\mu_{\tau+1}}(0)\rho_0^2}{2} - \right. \\
 & - \frac{b_3^{(\mu_{\tau+1})}}{3!N^{\mu_{\tau+1}/2}}\rho_0^3 - \frac{b_4^{(\mu_{\tau+1})}}{4!N^{\mu_{\tau+1}}}\rho_0^4 - \frac{b_5^{(\mu_{\tau+1})}}{5!N^{\mu_{\tau+1}/2}}\rho_0^5 - \quad (\text{Ж.1}) \\
 & \left. - \frac{a_6^{(\mu_{\tau+1})}}{6!N^{\mu_{\tau+1}/2}}\rho_0^6\right) \int \exp\left[-\frac{1}{2} \sum'_{k \leq B_{\mu_{\tau+1}}} \bar{d}_{\mu_{\tau+1}}(k)\rho_k\rho_{-k}\right] \times \\
 & \times \exp(p_0 + p_1\rho_0 + p_2\rho_0^2 + p_3\rho_0^3 + p_4\rho_0^4) (d\rho)^{N_{\mu_{\tau+1}}-1}.
 \end{aligned}$$



Тут штрих біля суми за  $k$  означає  $k \neq 0$ ,

$$\begin{aligned}
 -\beta F_\sigma &= \frac{10}{3} |d_{\mu_\tau+1}(0)| \frac{a_4^{(\mu_\tau+1)}}{a_6^{(\mu_\tau+1)}} N_{\mu_\tau+1} (-1 + b_2) - \\
 &\quad - \frac{25}{18} \frac{(a_4^{(\mu_\tau+1)})^3}{(a_6^{(\mu_\tau+1)})^2} N_{\mu_\tau+1} (-1 + b_2)^2, \\
 \beta F_h &= \beta h \left[ 10 \frac{a_4^{(\mu_\tau+1)}}{a_6^{(\mu_\tau+1)}} N N_{\mu_\tau+1} (-1 + b_2) \right]^{1/2}, \\
 h &= \mu_B \mathcal{H},
 \end{aligned} \tag{Ж.2}$$

величина  $b_2$  задана в (9.3.17). Для коефіцієнтів підінтегрального виразу (Ж.1) маємо

$$\begin{aligned}
 \bar{d}_{\mu_\tau+1}(k) &= 4 |d_{\mu_\tau+1}(0)| - \frac{10}{3} \frac{(a_4^{(\mu_\tau+1)})^2}{a_6^{(\mu_\tau+1)}} (-1 + b_2) + \tilde{q} k^2, \\
 b_3^{(\mu_\tau+1)} &= \left( \frac{10}{a_6^{(\mu_\tau+1)}} \right)^{1/2} (a_4^{(\mu_\tau+1)})^{3/2} (-1 + b_2)^{1/2} \times \\
 &\quad \times \left[ 1 + \frac{5}{3} (-1 + b_2) \right], \\
 b_4^{(\mu_\tau+1)} &= a_4^{(\mu_\tau+1)} [1 + 5(-1 + b_2)], \\
 b_5^{(\mu_\tau+1)} &= \left( 10 a_4^{(\mu_\tau+1)} a_6^{(\mu_\tau+1)} \right)^{1/2} (-1 + b_2)^{1/2},
 \end{aligned} \tag{Ж.3}$$

а величини  $p_0, p_1, \dots, p_4$  задаються формулами

$$\begin{aligned}
 p_0 &= -\frac{b_3^{(\mu_\tau+1)}}{3! N_{\mu_\tau+1}^{1/2}} \sum'_{k_i \leq B_{\mu_\tau+1}} \rho_{k_1} \cdots \rho_{k_3} \delta_{k_1 + \dots + k_3} - \\
 &\quad - \frac{b_4^{(\mu_\tau+1)}}{4! N_{\mu_\tau+1}} \sum'_{k_i \leq B_{\mu_\tau+1}} \rho_{k_1} \cdots \rho_{k_4} \delta_{k_1 + \dots + k_4} -
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{b_5^{(\mu_\tau+1)}}{5!N_{\mu_\tau+1}^{3/2}} \sum'_{k_i \leq B_{\mu_\tau+1}} \rho_{k_1} \cdots \rho_{k_5} \delta_{k_1+\dots+k_5} - \\
& - \frac{a_6^{(\mu_\tau+1)}}{6!N_{\mu_\tau+1}^2} \sum'_{k_i \leq B_{\mu_\tau+1}} \rho_{k_1} \cdots \rho_{k_6} \delta_{k_1+\dots+k_6}, \\
p_1 = & - \frac{b_3^{(\mu_\tau+1)}}{2N_{\mu_\tau+1}^{1/2}} \sum'_{k \leq B_{\mu_\tau+1}} \rho_k \rho_{-k} - \frac{b_4^{(\mu_\tau+1)}}{3!N_{\mu_\tau+1}} \sum'_{k_i \leq B_{\mu_\tau+1}} \rho_{k_1} \cdots \rho_{k_3} \times \\
& \times \delta_{k_1+\dots+k_3} - \frac{b_5^{(\mu_\tau+1)}}{4!N_{\mu_\tau+1}^{3/2}} \sum'_{k_i \leq B_{\mu_\tau+1}} \rho_{k_1} \cdots \rho_{k_4} \delta_{k_1+\dots+k_4} - \\
& - \frac{a_6^{(\mu_\tau+1)}}{5!N_{\mu_\tau+1}^2} \sum'_{k_i \leq B_{\mu_\tau+1}} \rho_{k_1} \cdots \rho_{k_5} \delta_{k_1+\dots+k_5}, \quad (\text{Ж.4}) \\
p_2 = & - \frac{b_4^{(\mu_\tau+1)}}{4N_{\mu_\tau+1}} \sum'_{k \leq B_{\mu_\tau+1}} \rho_k \rho_{-k} - \frac{b_5^{(\mu_\tau+1)}}{12N_{\mu_\tau+1}^{3/2}} \sum'_{k_i \leq B_{\mu_\tau+1}} \rho_{k_1} \cdots \rho_{k_3} \times \\
& \times \delta_{k_1+\dots+k_3} - \frac{a_6^{(\mu_\tau+1)}}{48N_{\mu_\tau+1}^2} \sum'_{k_i \leq B_{\mu_\tau+1}} \rho_{k_1} \cdots \rho_{k_4} \delta_{k_1+\dots+k_4}, \\
p_3 = & - \frac{b_5^{(\mu_\tau+1)}}{12N_{\mu_\tau+1}^{3/2}} \sum'_{k \leq B_{\mu_\tau+1}} \rho_k \rho_{-k} - \frac{a_6^{(\mu_\tau+1)}}{36N_{\mu_\tau+1}^2} \sum'_{k_i \leq B_{\mu_\tau+1}} \rho_{k_1} \cdots \rho_{k_3} \times \\
& \times \delta_{k_1+\dots+k_3}, \\
p_4 = & - \frac{a_6^{(\mu_\tau+1)}}{48N_{\mu_\tau+1}^2} \sum'_{k \leq B_{\mu_\tau+1}} \rho_k \rho_{-k}.
\end{aligned}$$

Величина  $b_2$ , через яку виражається коефіцієнт  $\bar{d}_{\mu_\tau+1}(k)$  (див. (Ж.3)), і самий цей коефіцієнт після виділення в них залежності від температури набувають вигляду:

$$b_2 = b_2^{(0)}(1 + b_2^{(1)}|\tau|^{\Delta_1}),$$

$$\begin{aligned}
 b_2^{(0)} &= \left( 1 + \frac{6 \bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)} \bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}{5 (\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2} \right)^{1/2}, \\
 b_2^{(1)} &= -\frac{3 \bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)} \bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}{5 (\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2} \left( 1 + \frac{6 \bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)} \bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}{5 (\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2} \right)^{-1} \times \\
 &\quad \times \left( 2 \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} - \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \right); \\
 \bar{d}_{\mu_\tau+1}(k) &= \bar{d}_{\mu_\tau+1}(0) + \bar{q}k^2, \\
 \bar{d}_{\mu_\tau+1}(0) &= c_\nu^2 |\tau|^{2\nu} \beta \tilde{\Phi}(0) \bar{d}_{\mu_\tau+1}^{(0)}(0) \left( 1 + \bar{d}_{\mu_\tau+1}^{(1)}(0) |\tau|^{\Delta_1} \right), \\
 \bar{d}_{\mu_\tau+1}^{(0)}(0) &= 4\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} - \frac{10 (\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{3 \bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} (-1 + b_2^{(0)}), \quad (\text{Ж.5}) \\
 \bar{d}_{\mu_\tau+1}^{(1)}(0) &= - \left[ 4\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} - \frac{10 (\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{3 \bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} (-1 + b_2^{(0)}) \right]^{-1} \times \\
 &\quad \times \left[ \frac{10 (\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{3 \bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} (-1 + b_2^{(0)}) \left( 2 \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} - \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \frac{b_2^{(0)} b_2^{(1)}}{-1 + b_2^{(0)}} \right) \right] - 2\nu c_{\Delta_1} \Phi_0.
 \end{aligned}$$

Графік залежності величини

$$B_6 \equiv \bar{d}_{\mu_\tau+1}^{(0)}(0) = 4\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} - \frac{10}{3} (b_2^{(0)} - 1) \frac{(\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}},$$

що входить у  $\bar{d}_{\mu_\tau+1}(k)$  (Ж.5), від параметра  $z$  зображено на рис. Ж.1. Штриховою лінією показана залежність аналогічної величини  $4f_0$  для моделі  $\rho^4$ . Як видно із рис. Ж.1, величина  $B_6$ , а відповідно, і  $\bar{d}_{\mu_\tau+1}(k)$  є додатними для всіх  $z$ .

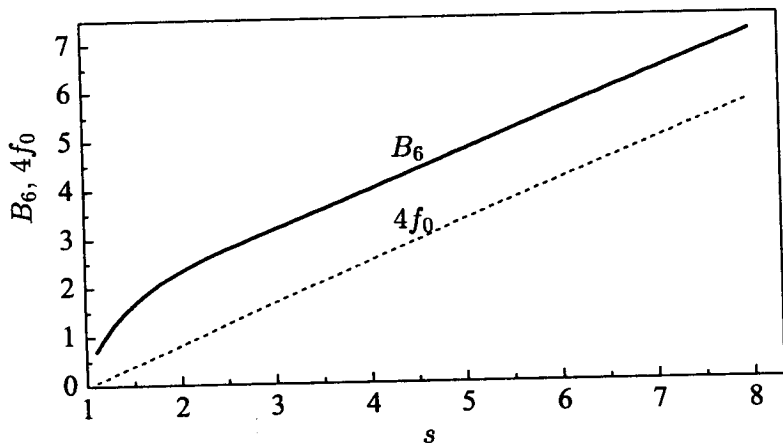


Рис. Ж.1. Графік залежності від параметра ренормгрупи  $s$  величини  $B_6$  у випадку моделі  $\rho^6$  та відповідної їй величини  $4f_0$  у випадку моделі  $\rho^4$

Розкладаємо вираз  $\exp(p_0 + p_1\rho_0 + p_2\rho_0^2 + p_3\rho_0^3 + p_4\rho_0^4)$  у ряд, обмежуємося членами другого порядку малості і виконуємо інтегрування в (Ж.1) за змінними  $\rho_k$  з  $k \neq 0$  з використанням гаусового базисного розподілу

$$\mathcal{W}_G^{(\mu_r+1)}(\rho) = \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum'_{k \leq B_{\mu_r+1}} \bar{d}_{\mu_r+1}(k) \rho_k \rho_{-k} \right]. \quad (\text{Ж.6})$$

Збираючи одержаний ряд за середніми відносно гаусового розподілу (Ж.6) в експоненту, отримуємо

$$\begin{aligned} Z_{\mu_r+1} = & \exp(-\beta F_\sigma + \beta F_h - \beta F_m) \prod_{k \neq 0}^{B_{\mu_r+1}} \left( \frac{\pi}{\bar{d}_{\mu_r+1}(k)} \right)^{1/2} \times \\ & \times \int \exp(\tilde{A}_1 \rho_0 + \tilde{A}_2 \rho_0^2 + \tilde{A}_3 \rho_0^3 + \tilde{A}_4 \rho_0^4 + \tilde{A}_5 \rho_0^5 + \\ & + \tilde{A}_6 \rho_0^6 + \tilde{A}_7 \rho_0^7 + \tilde{A}_8 \rho_0^8) d\rho_0, \end{aligned} \quad (\text{Ж.7})$$

де

$$\begin{aligned}
-\beta F_m &= \langle p_0 \rangle + 1/2 (\langle p_0^2 \rangle - \langle p_0 \rangle^2), \\
\tilde{A}_1 &= \langle p_1 \rangle + \langle p_0 p_1 \rangle - \langle p_0 \rangle \langle p_1 \rangle + \beta \sqrt{N} h, \\
\tilde{A}_2 &= \langle p_2 \rangle + 1/2 (\langle p_1^2 \rangle - \langle p_1 \rangle^2) + \\
&\quad + \langle p_0 p_2 \rangle - \langle p_0 \rangle \langle p_2 \rangle - 1/2 \tilde{d}_{\mu_r+1}(0), \\
\tilde{A}_3 &= \langle p_3 \rangle + \langle p_0 p_3 \rangle - \langle p_0 \rangle \langle p_3 \rangle + \langle p_1 p_2 \rangle - \\
&\quad - \langle p_1 \rangle \langle p_2 \rangle - \frac{b_3^{(\mu_r+1)}}{3! \sqrt{N_{\mu_r+1}}}, \\
\tilde{A}_4 &= \langle p_4 \rangle + 1/2 (\langle p_2^2 \rangle - \langle p_2 \rangle^2) + \langle p_0 p_4 \rangle - \\
&\quad - \langle p_0 \rangle \langle p_4 \rangle + \langle p_1 p_3 \rangle - \langle p_1 \rangle \langle p_3 \rangle - \frac{b_4^{(\mu_r+1)}}{4! N_{\mu_r+1}}, \\
\tilde{A}_5 &= \langle p_1 p_4 \rangle - \langle p_1 \rangle \langle p_4 \rangle + \\
&\quad + \langle p_2 p_3 \rangle - \langle p_2 \rangle \langle p_3 \rangle - \frac{b_5^{(\mu_r+1)}}{5! N_{\mu_r+1}^{3/2}}, \\
\tilde{A}_6 &= 1/2 (\langle p_3^2 \rangle - \langle p_3 \rangle^2) + \\
&\quad + \langle p_2 p_4 \rangle - \langle p_2 \rangle \langle p_4 \rangle - \frac{a_6^{(\mu_r+1)}}{6! N_{\mu_r+1}^2}, \\
\tilde{A}_7 &= \langle p_3 p_4 \rangle - \langle p_3 \rangle \langle p_4 \rangle, \\
\tilde{A}_8 &= 1/2 (\langle p_4^2 \rangle - \langle p_4 \rangle^2). \tag{Ж.8}
\end{aligned}$$

Для розрахунку явних виразів для частини вільної енергії  $F_m$  та коефіцієнтів  $\tilde{A}_i$  знайдемо моменти  $\langle p_n \rangle$ ,  $\langle p_n^2 \rangle$ ,  $\langle p_i p_n \rangle$ . Особливістю виразу (Ж.1) є виконання заміни змінних (9.3.16). Така заміна приводить до суттєвого збільшення коефіцієнта  $\tilde{d}_{\mu_r+1}(k)$  при квадратичному доданку функції розподілу порівняно з коефіцієнтами при вищих степенях  $\rho_k$ . Це дає змогу використовувати при розрахунку моментів гаусовий розподіл. У результаті

знаходимо

$$\begin{aligned}
 \langle p_0 \rangle &= -1/8N_{\mu_\tau+1}\mathcal{I}_1^2 \left( b_4^{(\mu_\tau+1)} + 1/6a_6^{(\mu_\tau+1)}\mathcal{I}_1 \right), \\
 \langle p_1 \rangle &= -1/2N_{\mu_\tau+1}^{1/2}\mathcal{I}_1 \left( b_3^{(\mu_\tau+1)} + 1/4b_5^{(\mu_\tau+1)}\mathcal{I}_1 \right), \\
 \langle p_2 \rangle &= -1/4\mathcal{I}_1 \left( b_4^{(\mu_\tau+1)} + 1/4a_6^{(\mu_\tau+1)}\mathcal{I}_1 \right), \\
 \langle p_3 \rangle &= -\frac{b_5^{(\mu_\tau+1)}}{12N_{\mu_\tau+1}^{1/2}}\mathcal{I}_1, \\
 \langle p_4 \rangle &= -\frac{a_6^{(\mu_\tau+1)}}{48N_{\mu_\tau+1}}\mathcal{I}_1.
 \end{aligned} \tag{Ж.9}$$

Складніші середні від квадратів величин  $\langle p_n^2 \rangle$  записуються у вигляді:

$$\begin{aligned}
 \langle p_0^2 \rangle &= \frac{1}{2}N_{\mu_\tau+1} \left\{ \frac{1}{3}b_3^{(\mu_\tau+1)}\mathcal{I}_3 \left( b_3^{(\mu_\tau+1)} + b_5^{(\mu_\tau+1)}\mathcal{I}_1 \right) + \right. \\
 &+ \frac{1}{4}b_4^{(\mu_\tau+1)} \left( \frac{1}{3}\mathcal{I}_4 + \mathcal{I}_1^2\mathcal{I}_2 \right) + \frac{1}{12} \left( b_5^{(\mu_\tau+1)} \right)^2 \left( \frac{1}{5}\mathcal{I}_5 + \mathcal{I}_1^2\mathcal{I}_3 \right) + \\
 &+ \frac{1}{8} \left( a_6^{(\mu_\tau+1)} \right)^2 \left[ \frac{1}{45}\mathcal{I}_6 + \frac{1}{2}\mathcal{I}_1^2 \left( \frac{1}{4}\mathcal{I}_1^2\mathcal{I}_2 + \frac{1}{3}\mathcal{I}_4 \right) \right] + \\
 &+ \left. \frac{1}{4}b_4^{(\mu_\tau+1)}a_6^{(\mu_\tau+1)}\mathcal{I}_1 \left( \frac{1}{3}\mathcal{I}_4 + \frac{1}{2}\mathcal{I}_1^2\mathcal{I}_2 \right) \right\} + \frac{1}{64}N_{\mu_\tau+1}^2\mathcal{I}_1^4 \times \\
 &\times \left[ \left( b_4^{(\mu_\tau+1)} \right)^2 + \frac{1}{3}a_6^{(\mu_\tau+1)}\mathcal{I}_1 \left( b_4^{(\mu_\tau+1)} + \frac{1}{12}a_6^{(\mu_\tau+1)}\mathcal{I}_1 \right) \right], \\
 \langle p_1^2 \rangle &= \frac{1}{4}N_{\mu_\tau+1}\mathcal{I}_1^2 \left[ \left( b_3^{(\mu_\tau+1)} \right)^2 + \frac{1}{2}b_5^{(\mu_\tau+1)}\mathcal{I}_1 \left( b_3^{(\mu_\tau+1)} + \right. \right. \\
 &+ \left. \left. \frac{1}{8}b_5^{(\mu_\tau+1)}\mathcal{I}_1 \right) \right] + \frac{1}{2} \left[ b_3^{(\mu_\tau+1)}\mathcal{I}_2 \left( b_3^{(\mu_\tau+1)} + b_5^{(\mu_\tau+1)}\mathcal{I}_1 \right) + \right. \\
 &+ \left. \frac{1}{3}b_4^{(\mu_\tau+1)}\mathcal{I}_3 \left( b_4^{(\mu_\tau+1)} + a_6^{(\mu_\tau+1)}\mathcal{I}_1 \right) + \frac{1}{4} \left( b_5^{(\mu_\tau+1)} \right)^2 \left( \frac{1}{3}\mathcal{I}_4 + \right. \right. \\
 &+ \left. \left. \mathcal{I}_1^2\mathcal{I}_2 \right) + \frac{1}{12} \left( a_6^{(\mu_\tau+1)} \right)^2 \left( \frac{1}{5}\mathcal{I}_5 + \mathcal{I}_1^2\mathcal{I}_3 \right) \right],
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle p_2^2 \rangle &= \frac{1}{16} \mathcal{I}_1^2 \left[ \left( b_4^{(\mu_{\tau+1})} \right)^2 + \frac{1}{2} a_6^{(\mu_{\tau+1})} \mathcal{I}_1 \left( b_4^{(\mu_{\tau+1})} + \frac{1}{8} a_6^{(\mu_{\tau+1})} \mathcal{I}_1 \right) \right] + \\
&+ \frac{1}{8} \frac{1}{N_{\mu_{\tau+1}}} \left[ b_4^{(\mu_{\tau+1})} \mathcal{I}_2 \left( b_4^{(\mu_{\tau+1})} + a_6^{(\mu_{\tau+1})} \mathcal{I}_1 \right) + \right. \\
&+ \left. \frac{1}{3} \left( b_5^{(\mu_{\tau+1})} \right)^2 \mathcal{I}_3 + \frac{1}{4} \left( a_6^{(\mu_{\tau+1})} \right)^2 \left( \frac{1}{3} \mathcal{I}_4 + \mathcal{I}_1^2 \mathcal{I}_2 \right) \right], \\
\langle p_3^2 \rangle &= \frac{1}{144} \frac{\left( b_5^{(\mu_{\tau+1})} \right)^2}{N_{\mu_{\tau+1}}} \mathcal{I}_1^2 + \frac{1}{72} \frac{1}{N_{\mu_{\tau+1}}^2} \left[ \left( b_5^{(\mu_{\tau+1})} \right)^2 \mathcal{I}_2 + \right. \\
&+ \left. \frac{1}{3} \left( a_6^{(\mu_{\tau+1})} \right)^2 \mathcal{I}_3 \right], \\
\langle p_4^2 \rangle &= \frac{\left( a_6^{(\mu_{\tau+1})} \right)^2}{1152 N_{\mu_{\tau+1}}^2} \left( \frac{1}{2} \mathcal{I}_1^2 + 1/N_{\mu_{\tau+1}} \mathcal{I}_2 \right). \tag{Ж.10}
\end{aligned}$$

Для середніх типу  $\langle p_l p_n \rangle$  знаходимо вирази

$$\begin{aligned}
\langle p_0 p_1 \rangle &= \frac{1}{2} N_{\mu_{\tau+1}}^{1/2} \left\{ b_3^{(\mu_{\tau+1})} b_4^{(\mu_{\tau+1})} \left( \frac{1}{3} \mathcal{I}_3 + \frac{1}{2} \mathcal{I}_2 \mathcal{I}_1 \right) + \frac{1}{2} b_3^{(\mu_{\tau+1})} \times \right. \\
&\times a_6^{(\mu_{\tau+1})} \mathcal{I}_1 \left( \frac{1}{3} \mathcal{I}_3 + \frac{1}{4} \mathcal{I}_1 \mathcal{I}_2 \right) + \frac{1}{2} b_4^{(\mu_{\tau+1})} b_5^{(\mu_{\tau+1})} \times \\
&\times \left[ \frac{1}{6} \mathcal{I}_4 + \mathcal{I}_1 \left( \frac{1}{3} \mathcal{I}_3 + \frac{1}{2} \mathcal{I}_1 \mathcal{I}_2 \right) \right] + \frac{1}{4} b_5^{(\mu_{\tau+1})} a_6^{(\mu_{\tau+1})} \times \\
&\times \left[ \frac{1}{15} \mathcal{I}_5 + \mathcal{I}_1 \left( \frac{1}{3} \mathcal{I}_1 \mathcal{I}_3 + \frac{1}{6} \mathcal{I}_4 + \frac{1}{4} \mathcal{I}_1^2 \mathcal{I}_2 \right) \right] \left. \right\} + \\
&+ \frac{1}{8} N_{\mu_{\tau+1}}^{3/2} \mathcal{I}_1^3 \left[ \frac{1}{2} b_4^{(\mu_{\tau+1})} \left( b_3^{(\mu_{\tau+1})} + \frac{1}{4} b_5^{(\mu_{\tau+1})} \mathcal{I}_1 \right) + \right. \\
&+ \left. \frac{1}{3} a_6^{(\mu_{\tau+1})} \mathcal{I}_1 \left( b_3^{(\mu_{\tau+1})} + \frac{1}{16} b_5^{(\mu_{\tau+1})} \mathcal{I}_1 \right) \right], \\
\langle p_0 p_2 \rangle &= \frac{1}{4} \left[ \frac{1}{3} b_5^{(\mu_{\tau+1})} \mathcal{I}_3 \left( b_3^{(\mu_{\tau+1})} + \frac{1}{2} b_5^{(\mu_{\tau+1})} \mathcal{I}_1 \right) + \frac{1}{2} \left( b_4^{(\mu_{\tau+1})} \right)^2 \times \right. \\
&\times \mathcal{I}_1 \mathcal{I}_2 + \frac{1}{4} b_4^{(\mu_{\tau+1})} a_6^{(\mu_{\tau+1})} \left( \frac{1}{3} \mathcal{I}_4 + \frac{3}{2} \mathcal{I}_1^2 \mathcal{I}_2 \right) +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{1}{8} \left( a_6^{(\mu_r+1)} \right)^2 \mathcal{I}_1 \left( \frac{1}{3} \mathcal{I}_4 + \frac{1}{2} \mathcal{I}_1^2 \mathcal{I}_2 \right) \Big] + \frac{1}{32} N_{\mu_r+1} \times \\
 & \times \mathcal{I}_1^3 \left[ b_4^{(\mu_r+1)} \left( b_4^{(\mu_r+1)} + \frac{5}{12} a_6^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1 \right) + \frac{1}{24} \left( a_6^{(\mu_r+1)} \right)^2 \mathcal{I}_1^2 \right], \\
 \langle p_0 p_3 \rangle & = \frac{1}{12} N_{\mu_r+1}^{-1/2} \left[ \frac{1}{3} b_3^{(\mu_r+1)} a_6^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_3 + \right. \\
 & + \frac{1}{2} b_4^{(\mu_r+1)} b_5^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1 \mathcal{I}_2 + \frac{1}{2} b_5^{(\mu_r+1)} a_6^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1 \left( \frac{1}{3} \mathcal{I}_3 + \frac{1}{4} \mathcal{I}_1 \mathcal{I}_2 \right) \Big] + \\
 & + \frac{1}{96} N_{\mu_r+1}^{1/2} b_5^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1^3 \left( b_4^{(\mu_r+1)} + \frac{1}{6} a_6^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1 \right), \\
 \langle p_0 p_4 \rangle & = \frac{1}{96} a_6^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1 \left[ \frac{1}{4} \mathcal{I}_1^2 \left( b_4^{(\mu_r+1)} + \frac{1}{6} a_6^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1 \right) + \right. \\
 & + N_{\mu_r+1}^{-1} \mathcal{I}_2 \left( b_4^{(\mu_r+1)} + \frac{1}{4} a_6^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1 \right) \Big], \\
 \langle p_1 p_2 \rangle & = \frac{1}{8} N_{\mu_r+1}^{1/2} \mathcal{I}_1^2 \left[ \left( b_4^{(\mu_r+1)} + \frac{1}{4} a_6^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1 \right) \left( b_3^{(\mu_r+1)} + \frac{1}{4} \times \right. \right. \\
 & \times b_5^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1 \Big) \Big] + \frac{1}{4} N_{\mu_r+1}^{-1/2} \left\{ b_3^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_2 \left( b_4^{(\mu_r+1)} + \frac{1}{2} a_6^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1 \right) + \right. \\
 & + b_4^{(\mu_r+1)} b_5^{(\mu_r+1)} \left( \frac{1}{3} \mathcal{I}_3 + \frac{1}{2} \mathcal{I}_1 \mathcal{I}_2 \right) + \frac{1}{2} b_5^{(\mu_r+1)} a_6^{(\mu_r+1)} \left[ \frac{1}{6} \mathcal{I}_4 + \right. \\
 & \left. \left. + \mathcal{I}_1 \left( \frac{1}{2} \mathcal{I}_1 \mathcal{I}_2 + \frac{1}{3} \mathcal{I}_3 \right) \right] \right\}, \\
 \langle p_1 p_3 \rangle & = \frac{1}{24} b_5^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1^2 \left( b_3^{(\mu_r+1)} + \frac{1}{4} b_5^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1 \right) + \\
 & + \frac{1}{12} N_{\mu_r+1}^{-1} \left[ b_5^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_2 \left( b_3^{(\mu_r+1)} + \frac{1}{2} b_5^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1 \right) + \right. \\
 & \left. + \frac{1}{3} a_6^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_3 \left( b_4^{(\mu_r+1)} + \frac{1}{2} a_6^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1 \right) \right], \\
 \langle p_1 p_4 \rangle & = \frac{1}{48} N_{\mu_r+1}^{-1/2} a_6^{(\mu_r+1)} \left[ \frac{1}{2} \mathcal{I}_1^2 \left( b_3^{(\mu_r+1)} + \frac{1}{4} b_5^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1 \right) + \right.
 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
& + N_{\mu_r+1}^{-1} \mathcal{I}_2 \left( b_3^{(\mu_r+1)} + \frac{1}{2} b_5^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1 \right) \Big], \\
\langle p_2 p_3 \rangle & = \frac{1}{24} N_{\mu_r+1}^{-1/2} b_5^{(\mu_r+1)} \left\{ \frac{1}{2} \mathcal{I}_1^2 \left( b_4^{(\mu_r+1)} + \frac{1}{4} a_6^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1 \right) + \right. \\
& + N_{\mu_r+1}^{-1} \left[ b_4^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_2 + a_6^{(\mu_r+1)} \left( \frac{1}{3} \mathcal{I}_3 + \frac{1}{2} \mathcal{I}_1 \mathcal{I}_2 \right) \right] \Big\}, \\
\langle p_2 p_4 \rangle & = \frac{1}{96} N_{\mu_r+1}^{-1} a_6^{(\mu_r+1)} \left[ \frac{1}{2} \mathcal{I}_1^2 \left( b_4^{(\mu_r+1)} + \frac{1}{4} a_6^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1 \right) + \right. \\
& + N_{\mu_r+1}^{-1} \mathcal{I}_2 \left( b_4^{(\mu_r+1)} + \frac{1}{2} a_6^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1 \right) \Big], \\
\langle p_3 p_4 \rangle & = \frac{1}{228} N_{\mu_r+1}^{-3/2} b_5^{(\mu_r+1)} a_6^{(\mu_r+1)} \left( \frac{1}{2} \mathcal{I}_1^2 + N_{\mu_r+1}^{-1} \mathcal{I}_2 \right). \quad (\text{Ж.11})
\end{aligned}$$

Величини  $\mathcal{I}_1, \mathcal{I}_2, \dots, \mathcal{I}_6$ , що входять у формули (Ж.9)–(Ж.11), обчислюємо за допомогою переходу до сферичної зони Бріллюена і заміни сумування за хвильовими векторами інтегруванням за  $k \in (0, B_{\mu_r+1}]$ , як це запропоновано в [318, 348]. Для  $\mathcal{I}_1$  отримуємо:

$$\begin{aligned}
\mathcal{I}_1 & = \frac{1}{N_{\mu_r+1}} \sum'_{k \leq B_{\mu_r+1}} \frac{1}{\bar{d}_{\mu_r+1}(k)} = \\
& = \mathcal{L} \left[ 4|d_{\mu_r+1}(0)| - \frac{10}{3} \frac{(a_4^{(\mu_r+1)})^2}{a_6^{(\mu_r+1)}} (-1 + b_2) \right]^{-1}. \quad (\text{Ж.12})
\end{aligned}$$

Тут

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} & = 3 \frac{x_r - \arctg x_r}{x_r^3}, \\
x_r & = x_r^{(0)} (1 + x_r^{(1)} |_{\tau} |^{\Delta_1}), \\
x_r^{(0)} & = \left[ 4\bar{r}_{\mu_r+1}^{(0)} - \frac{10}{3} \frac{(\bar{u}_{\mu_r+1}^{(0)})^2}{\bar{w}_{\mu_r+1}^{(0)}} (-1 + b_2^{(0)}) \right]^{-1/2}, \quad (\text{Ж.13})
\end{aligned}$$

$$x_r^{(1)} = \frac{1}{2} \left[ 4\bar{r}_{\mu_r+1}^{(0)} - \frac{10 (\bar{u}_{\mu_r+1}^{(0)})^2}{3 \bar{w}_{\mu_r+1}^{(0)}} (-1 + b_2^{(0)}) \right]^{-1} \times \\ \times \left[ \frac{10 (\bar{u}_{\mu_r+1}^{(0)})^2}{3 \bar{w}_{\mu_r+1}^{(0)}} (-1 + b_2^{(0)}) \left( 2 \frac{\bar{u}_{\mu_r+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_r+1}^{(0)}} - \frac{\bar{w}_{\mu_r+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_r+1}^{(0)}} + \frac{b_2^{(0)} b_2^{(1)}}{-1 + b_2^{(0)}} \right) \right].$$

З врахуванням співвідношення для  $b_2$  (Ж.5), а також (9.3.15), (9.3.4) та

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}^{(0)} + \mathcal{L}^{(1)} |\tau|^{\Delta_1}, \\ \mathcal{L}^{(0)} = 3 \frac{x_r^{(0)} - \arctg x_r^{(0)}}{(x_r^{(0)})^3}, \quad (\text{Ж.14}) \\ \mathcal{L}^{(1)} = 3x_r^{(1)} \left[ \frac{1}{1 + (x_r^{(0)})^2} - \mathcal{L}^{(0)} \right],$$

вираз (Ж.12) можна представити в зручнішій формі:

$$\mathcal{I}_1 = \frac{s^{2(\mu_r+1)}}{\beta \bar{\Phi}(0)} \alpha_1, \\ \alpha_1 = \alpha_1^{(0)} (1 + \alpha_1^{(1)} |\tau|^{\Delta_1}), \\ \alpha_1^{(0)} = \mathcal{L}^{(0)} \left[ 4\bar{r}_{\mu_r+1}^{(0)} - \frac{10 (\bar{u}_{\mu_r+1}^{(0)})^2}{3 \bar{w}_{\mu_r+1}^{(0)}} (-1 + b_2^{(0)}) \right]^{-1}, \quad (\text{Ж.15}) \\ \alpha_1^{(1)} = (\mathcal{L}^{(0)})^{-1} \left\{ \left[ 4\bar{r}_{\mu_r+1}^{(0)} - \frac{10 (\bar{u}_{\mu_r+1}^{(0)})^2}{3 \bar{w}_{\mu_r+1}^{(0)}} (-1 + b_2^{(0)}) \right]^{-1} \times \right. \\ \times \left[ \frac{10 (\bar{u}_{\mu_r+1}^{(0)})^2}{3 \bar{w}_{\mu_r+1}^{(0)}} (-1 + b_2^{(0)}) \left( 2 \frac{\bar{u}_{\mu_r+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_r+1}^{(0)}} - \frac{\bar{w}_{\mu_r+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_r+1}^{(0)}} + \frac{b_2^{(0)} b_2^{(1)}}{-1 + b_2^{(0)}} \right) \right] \mathcal{L}^{(0)} + \mathcal{L}^{(1)} \left. \right\}.$$

Аналогічні рівності справедливі і для інших  $\mathcal{I}_m = \sum_{\mathbf{r}} g^m(\mathbf{r})$  ( $m = 2, 3, \dots, 6$ ), де

$$g(\mathbf{r}) = \frac{1}{N_{\mu_\tau+1}} \sum'_{k \leq B_{\mu_\tau+1}} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{\bar{d}_{\mu_\tau+1}(k)} \quad (\text{Ж.16})$$

або

$$g(\mathbf{r}) = g^{(0)}(1 + g^{(1)}|\boldsymbol{\tau}|^{\Delta_1}),$$

$$g^{(0)} = \frac{6s^{2(\mu_\tau+1)}}{\beta\tilde{\Phi}(0)(B_{\mu_\tau+1}r)^3} \left[ 8\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} - \frac{20}{3} \frac{(\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} (-1 + b_2^{(0)}) + 1 \right]^{-1} \times \\ \times [\sin(B_{\mu_\tau+1}r) - B_{\mu_\tau+1}r \cos(B_{\mu_\tau+1}r)], \quad (\text{Ж.17})$$

$$g^{(1)} = \left[ 8\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} - \frac{20}{3} \frac{(\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} (-1 + b_2^{(0)}) + 1 \right]^{-1} \times \\ \times \left[ \frac{20}{3} \frac{(\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} (-1 + b_2^{(0)}) \left( 2 \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} - \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} + \frac{b_2^{(0)}b_2^{(1)}}{-1 + b_2^{(0)}} \right) \right].$$

Для них знаходимо

$$\mathcal{I}_m = \frac{s^{2m(\mu_\tau+1)}}{(\beta\tilde{\Phi}(0))^m} \alpha_m, \quad m = 2, 3, \dots, 6,$$

$$\alpha_m = \alpha_m^{(0)}(1 + \alpha_m^{(1)}|\boldsymbol{\tau}|^{\Delta_1}),$$

$$\alpha_m^{(0)} = (\alpha_1^{(0)})^m + 6e_1^m \left( 1 + \frac{e_2^m}{2^{m/2-1}} \right), \quad (\text{Ж.18})$$

$$\alpha_m^{(1)} = (\alpha_m^{(0)})^{-1} \left[ m(\alpha_1^{(0)})^m \alpha_1^{(1)} + 6me_1^m g^{(1)} \left( 1 + \frac{e_2^m}{2^{m/2-1}} \right) \right],$$

$$e_1 = 6\pi^{-2} \left[ 8\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} - \frac{20}{3} \frac{(\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} (-1 + b_2^{(0)}) + 1 \right]^{-1},$$

$$e_2 = (2\pi)^{-1} \left[ \sin(\pi\sqrt{2}) - \pi\sqrt{2} \cos(\pi\sqrt{2}) \right] = 0.034861.$$

Табл. Ж.1. Значення величин  $\alpha_l$  при  $T = T_c$  (модель  $\rho^6$ )

$s$	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\alpha_3$	$\alpha_4$	$\alpha_5$	$\alpha_6$
2.0000	0.3456	0.1893	0.0488	0.0151	0.0050	0.0017
2.5000	0.2981	0.1406	0.0313	0.0083	0.0024	0.0007
2.7349	0.2821	0.1258	0.0265	0.0067	0.0018	0.0005
3.0000	0.2664	0.1122	0.0223	0.0053	0.0014	0.0004
3.5000	0.2412	0.0918	0.0165	0.0036	0.0008	0.0002
3.5862	0.2373	0.0888	0.0158	0.0033	0.0008	0.0002
4.0000	0.2201	0.0764	0.0126	0.0025	0.0005	0.0001

Величини  $\alpha_l (l = 1, 2, \dots, 6)$  при  $\tau = 0$  подані в табл. Ж.1.

Приймаючи до уваги (Ж.9), (Ж.10), для  $-\beta F_m$  (див. (Ж.8)) знаходимо наступний вираз:

$$\begin{aligned}
 -\beta F_m = & 1/4 N_{\mu_r+1} \left\{ -1/2 \left( b_4^{(\mu_r+1)} + 1/6 a_6^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1 \right) \mathcal{I}_1^2 + \right. \\
 & + 1/3 b_3^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_3 \left( b_3^{(\mu_r+1)} + b_5^{(\mu_r+1)} \mathcal{I}_1 \right) + 1/4 \left( b_4^{(\mu_r+1)} \right)^2 \left( 1/3 \mathcal{I}_4 + \right. \\
 & + \mathcal{I}_1^2 \mathcal{I}_2 \left. \right) + 1/12 \left( b_5^{(\mu_r+1)} \right)^2 \left( 1/5 \mathcal{I}_5 + \mathcal{I}_1^2 \mathcal{I}_3 \right) + 1/8 \left( a_6^{(\mu_r+1)} \right)^2 \times \\
 & \times \left[ 1/45 \mathcal{I}_6 + 1/2 \mathcal{I}_1^2 \left( 1/4 \mathcal{I}_1^2 \mathcal{I}_2 + 1/3 \mathcal{I}_4 \right) \right] + 1/4 b_4^{(\mu_r+1)} a_6^{(\mu_r+1)} \times \\
 & \times \mathcal{I}_1 \left( 1/3 \mathcal{I}_4 + 1/2 \mathcal{I}_1^2 \mathcal{I}_2 \right) \left. \right\}. \quad (\text{Ж.19})
 \end{aligned}$$

Так само можемо отримати аналогічні вирази і для  $\tilde{A}_i$  із (Ж.8) (див., наприклад, [344, 367]).

Виконуючи заміну змінної

$$\rho_0 = \rho'_0 - \sqrt{N}(\bar{\sigma}), \quad (\text{Ж.20})$$

легко переконатися, що в показнику підінтегральної функції (Ж.7) зникнуть доданки, які пропорційні непарним степеням змінної  $\rho_0$ . У результаті для  $Z_{\mu_r+1}$  одержуємо представлення (9.3.18), в якому величини  $\tilde{B}$ ,  $G$ ,  $D$  визначаються відповідно

складовими  $B_1^{(0)}$  і  $B_1^{(1)}$ ,  $G_1^{(0)}$  і  $G_1^{(1)}$ ,  $D_1^{(0)}$  і  $D_1^{(1)}$  (див. (9.3.20)–(9.3.22)).

Приведемо також вирази для величин  $B_1^{(0)}$ ,  $B_1^{(1)}$ :

$$\begin{aligned}
 B_1^{(0)} &= 1 - \frac{\alpha_1^{(0)}}{2\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \left( \bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)} + \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}\alpha_1^{(0)}}{4} \right) + \frac{(\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \times \\
 &\times \left[ \frac{5}{3} (-1 + b_2^{(0)})\alpha_2^{(0)} \left( \frac{\alpha_1^{(0)}}{2} + \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{\alpha_1^{(0)}\alpha_2^{(0)}}{2} + \right. \right. \\
 &\left. \left. + \frac{\alpha_3^{(0)}}{3} \right) \right] - \frac{5}{2} \alpha_2^{(0)} \left( \bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)} + \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}\alpha_1^{(0)}}{2} \right) + \frac{(\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{8\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \times \\
 &\times \left[ \frac{\alpha_5^{(0)}}{15} + \alpha_1^{(0)} \left( \frac{\alpha_1^{(0)}\alpha_3^{(0)}}{3} + \frac{1}{2} \left( \frac{\alpha_4^{(0)}}{3} + \frac{(\alpha_1^{(0)})^2\alpha_2^{(0)}}{2} \right) \right) \right] + \\
 &+ \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}{2\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \left[ \frac{\alpha_4^{(0)}}{12} + \alpha_1^{(0)} \left( \frac{3}{8} \alpha_1^{(0)}\alpha_2^{(0)} + \frac{\alpha_3^{(0)}}{3} \right) \right], \\
 B_1^{(1)} &= (B_1^{(0)})^{-1} \left\{ -\frac{\alpha_1^{(0)}}{2\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \left[ \bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)} \left( \alpha_1^{(1)} + \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \right) + \right. \right. \\
 &+ \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}\alpha_1^{(0)}}{4} \left( 2\alpha_1^{(1)} + \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \right) \left. \right] + \frac{(\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \left[ \frac{5}{3} (-1 + \right. \\
 &+ b_2^{(0)})\alpha_2^{(0)} \left[ \frac{\alpha_1^{(0)}}{2} \left( \alpha_1^{(1)} + \alpha_2^{(1)} + 2 \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} + \frac{b_2^{(0)}b_2^{(1)}}{-1 + b_2^{(0)}} \right) + \right. \\
 &+ \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \left( \alpha_2^{(1)} + 3 \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} - \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} + \frac{b_2^{(0)}b_2^{(1)}}{-1 + b_2^{(0)}} \right) \left. \right] + \\
 &+ \frac{1}{2} \left[ \frac{\alpha_1^{(0)}\alpha_2^{(0)}}{2} \left( \alpha_1^{(1)} + \alpha_2^{(1)} + 2 \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \right) + \frac{\alpha_3^{(0)}}{3} \left( \alpha_3^{(1)} + \right. \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + 2 \frac{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} \left. \right] \left. \right] - \frac{5}{2} \alpha_2^{(0)} \left[ \bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)} \left( \alpha_2^{(1)} + \frac{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} \right) + \right. \\
 & + \frac{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)} \alpha_1^{(0)}}{2} \left( \alpha_1^{(1)} + \alpha_2^{(1)} + \frac{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} \right) \left. \right] + \frac{(\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)})^2}{8\bar{r}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} \left[ \frac{\alpha_5^{(0)}}{15} \times \right. \\
 & \times \left( \alpha_5^{(1)} + 2 \frac{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} \right) + \alpha_1^{(0)} \left[ \frac{\alpha_1^{(0)} \alpha_3^{(0)}}{3} \left( 2\alpha_1^{(1)} + \alpha_3^{(1)} + \right. \right. \\
 & + 2 \frac{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} \left. \right) + \frac{1}{2} \left[ \frac{\alpha_4^{(0)}}{3} \left( \alpha_1^{(1)} + \alpha_4^{(1)} + 2 \frac{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} \right) + \right. \\
 & + \frac{(\alpha_1^{(0)})^2 \alpha_2^{(0)}}{2} \left( 3\alpha_1^{(1)} + \alpha_2^{(1)} + 2 \frac{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} \right) \left. \right] \left. \right] \left. \right] + \\
 & + \frac{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)} \bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}}{2\bar{r}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} \left[ \frac{\alpha_4^{(0)}}{12} \left( \alpha_4^{(1)} + \frac{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} + \frac{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} \right) + \right. \\
 & + \alpha_1^{(0)} \left[ \frac{3}{8} \alpha_1^{(0)} \alpha_2^{(0)} \left( 2\alpha_1^{(1)} + \alpha_2^{(1)} + \frac{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} + \frac{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} \right) + \right. \\
 & \left. \left. + \frac{\alpha_3^{(0)}}{3} \left( \alpha_1^{(1)} + \alpha_3^{(1)} + \frac{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} + \frac{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} \right) \right] \right] \left. \right] \left. \right] \left. \right\}. \quad (\text{Ж.21})
 \end{aligned}$$

Для  $G_1^{(0)}$ ,  $G_1^{(1)}$  маємо:

$$\begin{aligned}
 G_1^{(0)} &= \frac{1}{24} \left[ \bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)} + \frac{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}}{2} \left( \alpha_1^{(0)} + 5\bar{r}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)} \alpha_2^{(0)} \right) \right] - \\
 & - \frac{(\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)})^2 \alpha_2^{(0)}}{8} \left[ \frac{1}{2} + \frac{5}{9} (-1 + b_2^{(0)}) \right] - \frac{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)} \bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}}{12} \times \\
 & \times \left( \frac{7}{8} \alpha_1^{(0)} \alpha_2^{(0)} + \frac{\alpha_3^{(0)}}{3} \right) - \frac{(\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)})^2}{24} \left[ \frac{\alpha_4^{(0)}}{8} + \alpha_1^{(0)} \times \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \left( \frac{7}{16} \alpha_1^{(0)} \alpha_2^{(0)} + \frac{\alpha_3^{(0)}}{3} \right) \Bigg], \\
G_1^{(1)} = & (G_1^{(0)})^{-1} \left\{ \frac{1}{24} \left[ \bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(1)} + \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}{2} \left[ \alpha_1^{(0)} \left( \alpha_1^{(1)} + \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \right) + \right. \right. \right. \\
& + 5\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} \alpha_2^{(0)} \left( \alpha_2^{(1)} + \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \right) \Bigg] - \frac{(\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2 \alpha_2^{(0)}}{8} \left[ \frac{1}{2} \left( \alpha_2^{(1)} + \right. \right. \\
& + 2 \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \Bigg) + \frac{5}{9} (-1 + b_2^{(0)}) \left( \alpha_2^{(1)} + 2 \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \right. \\
& + \left. \left. \frac{b_2^{(0)} b_2^{(1)}}{-1 + b_2^{(0)}} \right) \right] - \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)} \bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}{12} \left[ \frac{7}{8} \alpha_1^{(0)} \alpha_2^{(0)} \left( \alpha_1^{(1)} + \alpha_2^{(1)} + \right. \right. \\
& + \left. \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} + \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \right) + \frac{\alpha_3^{(0)}}{3} \left( \alpha_3^{(1)} + \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} + \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \right) \Bigg] - \\
& - \frac{(\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{24} \left[ \frac{\alpha_4^{(0)}}{8} \left( \alpha_4^{(1)} + 2 \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \right) + \alpha_1^{(0)} \left[ \frac{7}{16} \alpha_1^{(0)} \times \right. \right. \\
& \times \alpha_2^{(0)} \left( 2\alpha_1^{(1)} + \alpha_2^{(1)} + 2 \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \right) + \frac{\alpha_3^{(0)}}{3} \left( \alpha_1^{(1)} + \alpha_3^{(1)} + \right. \\
& \left. \left. + 2 \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \right) \right] \Bigg] \Bigg\}. \tag{Ж.22}
\end{aligned}$$

Для коефіцієнтів  $D_1^{(0)}$  та  $D_1^{(1)}$  знаходимо:

$$\begin{aligned}
D_1^{(0)} = & \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}{48} \left( \frac{1}{15} - \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)} \alpha_2^{(0)}}{2} \right) - \frac{(\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{48} \times \\
& \times \left( \frac{\alpha_1^{(0)} \alpha_2^{(0)}}{4} + \frac{\alpha_3^{(0)}}{9} \right), \tag{Ж.23}
\end{aligned}$$

$$D_1^{(1)} = (D_1^{(0)})^{-1} \left\{ \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}{48} \left[ \frac{1}{15} \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} - \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)} \alpha_2^{(0)}}{2} \left( \alpha_2^{(1)} + \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} + \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \right) \right] - \frac{(\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{48} \left[ \frac{\alpha_3^{(0)}}{9} \left( \alpha_3^{(1)} + 2 \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \right) \right] + \frac{\alpha_1^{(0)} \alpha_2^{(0)}}{4} \left( \alpha_1^{(1)} + \alpha_2^{(1)} + 2 \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \right) \right] \right\}.$$

Приведені вище складові дають змогу обчислити величини  $E_0^{(0)}$  та  $E_0^{(1)}$ , через які можна виразити  $Z_{\mu_\tau+1}$  (9.3.23). Ці величини, що входять до складу (9.3.26), мають вигляд:

$$E_0^{(0)} = \frac{2}{27} \frac{(G_1^{(0)})^3}{(D_1^{(0)})^2} \left[ -1 + \left( 1 + \frac{3}{2} \frac{\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} B_1^{(0)} D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2} \right)^{1/2} \right] + \frac{\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} B_1^{(0)} G_1^{(0)}}{6D_1^{(0)}} \left[ -1 + \frac{2}{3} \left( 1 + \frac{3}{2} \frac{\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} B_1^{(0)} D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2} \right)^{1/2} \right],$$

$$E_0^{(1)} = (E_0^{(0)})^{-1} \left\{ \frac{2}{27} \frac{(G_1^{(0)})^3}{(D_1^{(0)})^2} \left[ -1 + \left( 1 + \frac{3}{2} \times \right. \right. \right. \quad (\text{Ж.24})$$

$$\left. \left. \left. \frac{\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} B_1^{(0)} D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2} \right)^{1/2} \right] (3G_1^{(1)} - 2D_1^{(1)}) + \frac{\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} B_1^{(0)} G_1^{(0)}}{6D_1^{(0)}} \times \right.$$

$$\left. \left[ \left( 1 + \frac{3}{2} \frac{\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} B_1^{(0)} D_1^{(0)}}{(G_1^{(0)})^2} \right)^{1/2} \left( B_1^{(1)} - \frac{D_1^{(1)}}{3} \right) - \right.$$

$$\left. \left. \left. - (B_1^{(1)} + G_1^{(1)} - D_1^{(1)}) \right] \right\}.$$



Співвідношення (9.3.12) та (9.3.23) дають змогу обчислити на основі (9.3.1) вільну енергію в області ІГР. Вона задається виразом (9.3.27). Подамо явні вирази для величин  $\bar{\gamma}_\rho^{(0)}$  і  $\bar{\gamma}_{\rho 1}$ , які є складовими частинами її коефіцієнтів (9.3.28):

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}_\rho^{(0)} = & \frac{5}{2} \bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} \left( \alpha_1^{(0)} + \frac{5}{2} \bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} \alpha_2^{(0)} \right) - \frac{(\alpha_1^{(0)})^2}{8} \left( \bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)} + \right. \\ & \left. + \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)} \alpha_1^{(0)}}{6} \right) + \frac{(\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{8} \left[ \frac{\alpha_4^{(0)}}{6} + (\alpha_1^{(0)})^2 \alpha_2^{(0)} \left( \frac{1}{2} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{5}{3} (-1 + b_2^{(0)}) \right) \right] - \frac{5}{4} \bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} \alpha_1^{(0)} \alpha_2^{(0)} \times \\ & \times \left( \bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)} + \frac{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)} \alpha_1^{(0)}}{4} \right) + \frac{(\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{32} \left[ \frac{\alpha_6^{(0)}}{45} + \frac{(\alpha_1^{(0)})^2}{2} \times \right. \\ & \times \left. \left( \frac{\alpha_4^{(0)}}{3} + \frac{(\alpha_1^{(0)})^2 \alpha_2^{(0)}}{4} \right) \right] + \frac{\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)} \bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)} \alpha_1^{(0)}}{16} \left( \frac{\alpha_4^{(0)}}{3} + \right. \\ & \left. + \frac{(\alpha_1^{(0)})^2 \alpha_2^{(0)}}{2} \right) - \frac{5}{3} \frac{(\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \left[ (-1 + b_2^{(0)}) \left( \alpha_1^{(0)} - \right. \right. \\ & \left. \left. - \bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)} \alpha_2^{(0)} \left( \frac{\alpha_1^{(0)}}{2} - \frac{10 \bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)}}{3 \bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \right) \right) - (7 - 5b_2^{(0)}) \times \right. \\ & \left. \times \bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} \alpha_2^{(0)} \right] - \frac{1}{2} \ln \left[ \left( 1 + 4\bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} - \frac{10}{3} \frac{(\bar{u}_{\mu_\tau+1}^{(0)})^2}{\bar{w}_{\mu_\tau+1}^{(0)}} \times \right. \right. \\ & \left. \left. \times (-1 + b_2^{(0)}) \right) \pi^{-1} \right] + \frac{1}{3} - \frac{\mathcal{L}^{(0)}}{3}, \\ \bar{\gamma}_{\rho 1} = & \frac{5}{2} \bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} \left( \alpha_1^{(0)} \bar{\alpha}_1^{(1)} + \frac{5}{2} \bar{r}_{\mu_\tau+1}^{(0)} \alpha_2^{(0)} \bar{\alpha}_2^{(1)} \right) - \frac{(\alpha_1^{(0)})^2}{8} \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times \left[ \bar{u}_{\mu_r+1}^{(0)} \left( 2\bar{\alpha}_1^{(1)} + \frac{\bar{u}_{\mu_r+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_r+1}^{(0)}} \right) + \frac{\bar{w}_{\mu_r+1}^{(0)} \alpha_1^{(0)}}{6} \left( 3\bar{\alpha}_1^{(1)} + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{\bar{w}_{\mu_r+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_r+1}^{(0)}} \right) \right] + \frac{(\bar{u}_{\mu_r+1}^{(0)})^2}{8} \left[ \frac{\alpha_4^{(0)}}{6} \left( \bar{\alpha}_4^{(1)} + 2 \frac{\bar{u}_{\mu_r+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_r+1}^{(0)}} \right) + \right. \\
 & \left. + (\alpha_1^{(0)})^2 \alpha_2^{(0)} \left[ \frac{1}{2} \left( 2\bar{\alpha}_1^{(1)} + \bar{\alpha}_2^{(1)} + 2 \frac{\bar{u}_{\mu_r+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_r+1}^{(0)}} \right) + \frac{5}{3} (-1 + b_2^{(0)}) \times \right. \right. \\
 & \left. \left. \times \left( 2\bar{\alpha}_1^{(1)} + \bar{\alpha}_2^{(1)} + 2 \frac{\bar{u}_{\mu_r+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_r+1}^{(0)}} + \frac{b_2^{(0)} \bar{b}_2^{(1)}}{-1 + b_2^{(0)}} \right) \right] \right] - \quad (\text{Ж.25}) \\
 & - \frac{5}{4} \bar{r}_{\mu_r+1}^{(0)} \alpha_1^{(0)} \alpha_2^{(0)} \left[ \bar{u}_{\mu_r+1}^{(0)} \left( \bar{\alpha}_1^{(1)} + \bar{\alpha}_2^{(1)} + \frac{\bar{u}_{\mu_r+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_r+1}^{(0)}} \right) + \right. \\
 & \left. + \frac{\bar{w}_{\mu_r+1}^{(0)} \alpha_1^{(0)}}{4} \left( 2\bar{\alpha}_1^{(1)} + \bar{\alpha}_2^{(1)} + \frac{\bar{w}_{\mu_r+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_r+1}^{(0)}} \right) \right] + \frac{(\bar{w}_{\mu_r+1}^{(0)})^2}{32} \left[ \frac{\alpha_6^{(0)}}{45} \times \right. \\
 & \left. \times \left( \bar{\alpha}_6^{(1)} + 2 \frac{\bar{w}_{\mu_r+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_r+1}^{(0)}} \right) + \frac{(\alpha_1^{(0)})^2}{2} \left[ \frac{\alpha_4^{(0)}}{3} \left( 2\bar{\alpha}_1^{(1)} + \bar{\alpha}_4^{(1)} + \right. \right. \right. \\
 & \left. \left. + 2 \frac{\bar{w}_{\mu_r+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_r+1}^{(0)}} \right) + \frac{(\alpha_1^{(0)})^2 \alpha_2^{(0)}}{4} \left( 4\bar{\alpha}_1^{(1)} + \bar{\alpha}_2^{(1)} + \right. \right. \\
 & \left. \left. + 2 \frac{\bar{w}_{\mu_r+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_r+1}^{(0)}} \right) \right] \right] + \frac{\bar{u}_{\mu_r+1}^{(0)} \bar{w}_{\mu_r+1}^{(0)} \alpha_1^{(0)}}{16} \left[ \frac{\alpha_4^{(0)}}{3} \left( \bar{\alpha}_1^{(1)} + \bar{\alpha}_4^{(1)} + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{\bar{u}_{\mu_r+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_r+1}^{(0)}} + \frac{\bar{w}_{\mu_r+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_r+1}^{(0)}} \right) + \frac{(\alpha_1^{(0)})^2 \alpha_2^{(0)}}{2} \left( 3\bar{\alpha}_1^{(1)} + \bar{\alpha}_2^{(1)} + \frac{\bar{u}_{\mu_r+1}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_r+1}^{(0)}} + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{\bar{w}_{\mu_r+1}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_r+1}^{(0)}} \right) \right] - \frac{5 (\bar{u}_{\mu_r+1}^{(0)})^2}{3 \bar{w}_{\mu_r+1}^{(0)}} \left[ (-1 + b_2^{(0)}) \left[ \alpha_1^{(0)} \left( \bar{\alpha}_1^{(1)} + \right. \right. \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 2 \frac{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} - \frac{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} + \frac{b_2^{(0)}\bar{b}_2^{(1)}}{-1 + b_2^{(0)}} \Big) - \bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}\alpha_2^{(0)} \left[ \frac{\alpha_1^{(0)}}{2} \times \right. \\
& \times \left( \bar{\alpha}_1^{(1)} + \bar{\alpha}_2^{(1)} + 3 \frac{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} - \frac{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} + \frac{b_2^{(0)}\bar{b}_2^{(1)}}{-1 + b_2^{(0)}} \right) - \\
& \left. - \frac{10}{3} \frac{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}}{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} \left( \bar{\alpha}_2^{(1)} + 4 \frac{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} - 2 \frac{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} + \frac{b_2^{(0)}\bar{b}_2^{(1)}}{-1 + b_2^{(0)}} \right) \right] \Big] - \\
& - \left[ 7 \left( \bar{\alpha}_2^{(1)} + 2 \frac{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} - \frac{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} \right) - 5b_2^{(0)} \left( \bar{\alpha}_2^{(1)} + 2 \frac{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} - \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} + \bar{b}_2^{(1)} \right) \right] \bar{r}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}\alpha_2^{(0)} \Big] + \frac{1}{2} \left[ \frac{10}{3} \frac{(\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)})^2}{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} (-1 + \right. \\
& \left. + b_2^{(0)}) \left( 2 \frac{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} - \frac{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}}{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} + \frac{b_2^{(0)}\bar{b}_2^{(1)}}{-1 + b_2^{(0)}} \right) \right] \left[ 1 + 4\bar{r}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)} - \right. \\
& \left. - \frac{10}{3} \frac{(\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)})^2}{\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(0)}} (-1 + b_2^{(0)}) \right]^{-1} - \frac{\bar{L}^{(1)}}{3}.
\end{aligned}$$

Вирази для  $\bar{u}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}$ ,  $\bar{w}_{\mu_{\tau+1}}^{(1)}$ ,  $\bar{\alpha}_1^{(1)}$ ,  $\bar{\alpha}_2^{(1)}$ ,  $\bar{\alpha}_4^{(1)}$ ,  $\bar{\alpha}_6^{(1)}$ ,  $\bar{b}_2^{(1)}$ ,  $\bar{L}^{(1)}$  можна одержати шляхом виключення із відповідних ім величин неуні-  
 версального множника  $\mathcal{S}_{\Delta_1}$ .

## Література

- [1] *Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В.* Введение в теорию квантовых полей. — М.: Наука, 1984. — 597 с.
- [2] *Amit D.J.* Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena. — Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 1984. — 392 p.
- [3] *Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е.* Методы квантовой теории поля в статистической физике. — М.: Физматгиз, 1962. — 444 с.
- [4] *Вонсовский С.В.* Магнетизм. — М.: Наука, 1971. — 1032 с.
- [5] *Уайт Р.М.* Квантовая теория магнетизма. — М.: Мир, 1972. — 308 с.
- [6] *Бонч-Бруевич В.Л., Тябликов С.В.* Метод функций Грина в статистической физике. — М.: Мир, 1961. — 312 с.
- [7] Статистическая физика и квантовая теория поля / Сб. под ред. Боголюбова Н.Н. — М.: Наука, 1983. — 456 с.
- [8] *Изомов Ю.А., Кассан-Оглы Ф.А., Скрыбин Ю.Н.* Полевые методы в теории ферромагнетизма. — М.: Наука, 1974. — 224 с.
- [9] *Браут Р.* Фазовые переходы. — М.: Мир, 1967. — 288 с.
- [10] *Фишер М.* Природа критического состояния. — М.: Мир, 1968. — 222 с.

- [11] *Стелли Г.* Фазовые переходы и критические явления. – М.: Мир, 1973. – 419 с.
- [12] *Дайсон Ф., Монтролл Э., Кац М., Фишер М.* Устойчивость и фазовые переходы. – М.: Мир, 1973. – 374 с.
- [13] *Ма Ш.* Современная теория критических явлений. – М.: Мир, 1980. – 298 с.
- [14] *Синай Я.Г.* Теория фазовых переходов. Строгие результаты. – М.: Наука, 1980. – 207 с.
- [15] *Паташинский А.З., Покровский В.Л.* Флуктуационная теория фазовых переходов. – М.: Наука, 1982. – 381 с.
- [16] *Юлиновский И.Р.* Фазовые переходы второго рода. Метод коллективных переменных. – Киев: Наук. думка, 1985. – 224 с.
- [17] *Изюмов Ю.А., Сыромятников В.Н.* Фазовые переходы и симметрия кристаллов. – М.: Наука, 1984. – 248 с.
- [18] Phase Transitions and Critical Phenomena. V. 10. Eds. Domb C., Lebowitz J.L. – London: Academic Press, 1986. – 370 p.
- [19] *Марч Н., Паринелло М.* Коллективные эффекты в твердых телах и жидкостях. – М.: Мир, 1986. – 320 с.
- [20] *Иванченко Ю.М., Лисянский А.А., Филиппов А.Э.* Флуктуационные эффекты в системах с конкурирующими взаимодействиями. – Киев: Наук. думка, 1989. – 280 с.
- [21] *Попов В.Н.* Континуальные интегралы в квантовой теории поля. – М.: Атомиздат, 1976. – 256 с.
- [22] *Васильев А.Н.* Функциональные методы в квантовой теории поля и статистике. – Л.: Изд-во Ленинград. университета, 1976. – 295 с.
- [23] *Вакарчук И.А., Рудавский Ю.К.* Метод функционального интегрирования в теории спиновых систем // ТМФ. – 1981. – Т. 49, № 2. – С. 234–247.

- [24] *Wegner F.J.* Critical phenomena and scale invariance / In: Lect. Notes in Phys. V. 54. "Critical Phenomena" Sitges International School on Statistical Mechanics, June 1976, Sitges, Barcelona, Spain. Eds. Brey J. and Jones R.B. - Berlin-Heidelberg-New York: Springer-Verlag, 1976. - P. 1-29.
- [25] *Thompson C. J.* The statistical mechanics of phase transitions // Contemp. Phys. - 1978. - V. 19, N 3. - P. 203-224.
- [26] *Флёрн П.* Фазовые переходы, критические явления и неустойчивости // УФН. - 1982. - Т. 138, № 1. - С. 129-145.
- [27] *Камилов И.К., Муртазаев А.К., Алиев Х.К.* Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло // УФН. - 1999. - Т. 169, № 7. - С. 773-795.
- [28] *Pelissetto A., Vicari E.* Critical phenomena and renormalization- group theory. - 2000. - 167 p. - (Preprint cond-mat/0012164).
- [29] *Baker G.A., Jr.* Quantitative Theory of Critical Phenomena. - San Diego: Academic Press, Inc., 1990. - 366 p.
- [30] *Binney J.J., Dowrick N.J., Fisher A.J., Newman M.E.J.* The Theory of Critical Phenomena. An Introduction to the Renormalization Group. - Oxford: Clarendon Press, 1992. - 464 p.
- [31] *Chaikin P.M., Lubensky T.C.* Principles of Condensed Matter Physics. - Cambridge: Cambridge University Press, 1995. - 699 p.
- [32] *Domb C.* The Critical Point. A Historical Introduction to the Modern Theory of Critical Phenomena. - London: Taylor & Francis Ltd., 1996. - 376 p.
- [33] *Kleinert H., Schulte-Frohlinde V.* Critical Properties of  $\varphi^4$ -Theories. - Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2001. - 485 p.

- [34] *Senegors H.L.* Critical exponents at the turn of the century // *Physica A.* - 1976. - V. 82, N 3. - P. 319-351.
- [35] *Ландау Л.Д.* К теории фазовых переходов // *ЖЭТФ.* - 1937. - Т. 7, № 1. - С. 19-32.
- [36] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. Ч. I. - М.: Наука, 1976. - 584 с.
- [37] *Блинц Р., Жежи Б.* Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. - М.: Мир, 1975. - 400 с.
- [38] *Лайнс М., Гласс А.* Сегнетоэлектрики и родственные им материалы / Под ред. Леманова В.В., Смоленского Г.А. - М.: Мир, 1981. - 735 с.
- [39] *Гинзбург В.Л.* Несколько замечаний о фазовых переходах второго рода и микроскопической теории сегнетоэлектриков // *ФТТ.* - 1960. - Т. 2, №9. - С. 2031-2043.
- [40] *Боголюбов Н.Н., Садовников Б.И.* Некоторые вопросы статистической механики. - М.: Высшая школа, 1975. - 352 с.
- [41] *Боголюбов Н.Н.* Проблемы динамической теории в статистической физике. - М.: Л.: Гостехиздат, 1946. - 119 с.
- [42] *Боголюбов Н.Н.* Избранные труды в трех томах. Т. 2. Киев: Наук. думка, 1970. - 522 с.
- [43] *Wilson K.G., Kogut J.* The renormalization group and the  $\epsilon$ -expansion // *Phys. Rep. C.* - 1974. - V. 12, N 2. - P. 75-199.
- [44] *Berlin T.H., Kas M.* The spherical model of a ferromagnet // *Phys. Rev.* - 1952. - V. 86, N 6. - P. 821-835.
- [45] *Хачатурян А.Г.* Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. - М.: Наука, 1974. - 384 с.
- [46] *Югловский И.Р., Гурский З.А.* Квантово-статистическая теория неупорядоченных систем. - Киев: Наук. думка, 1991. - 288 с.

- [47] *Анисимов М.А.* Критические явления в жидкостях и жидких кристаллах. - М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987. - 272 с.
- [48] *Yukhnovskii I.R.* Investigation in the vicinity of the critical point // *Z. Naturforsch.* - 1988. - V. 43a. - P. 734-740.
- [49] *Иодик И.М., Коломиец В.А., Югиновский И.Р.* Критическая точка системы жидкость-газ в методе коллективных переменных // *ТМФ.* - 1987. - Т. 73, № 2. - С. 264-280.
- [50] *Bagnuls C., Bervillier C., Meiron D.I., Nickel B.G.* Nonasymptotic critical behavior from field theory at  $d = 3$ . II. The ordered-phase case // *Phys. Rev. B.* - 1987. - V. 35, N 7. - P. 3585-3607.
- [51] *Gonchar N.S.* Correlation functions of some continuous model systems and description of phase transitions // *Phys. Rep.* - 1989. - V. 172, N 5. - P. 275-337.
- [52] *Москаленко В.А.* К теории металлических спиновых стекол. - Кишинев: Штиинца, 1985. - 187 с.
- [53] *Гильзбург С.Л.* Микроскопическая теория спиновых волн в спиновых стеклах // *ЖЭТФ.* - 1978. - Т. 75, №4. - С. 1497-1503.
- [54] *Вахе В.Г., Ларкин А.И.* О фазовых переходах второго рода // *ЖЭТФ.* - 1965. - Т. 49, №3. - С. 975-989.
- [55] *Вахе В.Г.* Введение в теорию сегнетоэлектриков. - М.: Наука, 1972. - 327 с.
- [56] *Вакарчук И.А.* К микроскопической теории  $\lambda$ -перехода в жидком  $He^4$ . I // *ТМФ.* - 1978. - Т. 36, №1. - С. 122-135.
- [57] *Ma S.K.* The  $1/n$  expansion / In: *Phase Transitions and Critical Phenomena*, V. 6. Eds. Domb C., Green M.S. - New York: Academic Press, 1976. - P. 250-293.



- [58] *Onsager L.* Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition // *Phys. Rev.* – 1944. – V. 65, N 1. – P. 117-149.
- [59] *Вдовиченко Н.В.* Спонтанная намагниченность плоской дипольной решетки // *ЖЭТФ.* – 1965. – Т. 48, № 2. – С. 526-530.
- [60] *Рязанов Г.В.* Корреляционные функции конечной модели Изинга // *ЖЭТФ.* – 1968. – Т. 54, № 3. – С. 1010-1015.
- [61] *Vugrij F.I.* Fermionization of a generalized two-dimensional Ising model. – Kiev, 1986. – 24 p. – (Preprint / Acad. Sci. Ukr. SSR. Inst. Theor. Phys.; ITP-86-6E).
- [62] *Бэжстер Р.* Точно решаемые модели в статистической механике. – М.: Мир, 1985. – 488 с.
- [63] *Боголюбов Н.Н.* Квазисредние в задачах статистической механики / В сб.: Избранные труды в трех томах. Т. 3. – Киев: Наук. думка, 1971. – С. 174-243.
- [64] *Hohenberg P.* Existence of long-range order in one and two dimensions // *Phys. Rev.* – 1967. – V. 158, N 2. – P. 383-386.
- [65] *Mermin N.D., Wagner H.* Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two- dimensional isotropic Heisenberg models // *Phys. Rev. Lett.* – 1966. – V. 17, N 22. – P. 1133-1136.
- [66] *Gell-Mann M., Low F.E.* Quantum electrodynamics of small distances // *Phys. Rev.* – 1954. – V. 95, N 5. – P. 1300-1312.
- [67] *Stueckelberg E.C.G., Petermann A.* La normalization des constantes dans la theorie des quanta // *Helv. Phys. Acta.* – 1953. – V. 25, N 5. – P. 499-520.
- [68] *Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В.* О ренормализационной группе в квантовой электродинамике // *ДАН СССР.* – 1955. – Т. 103, № 2. – С. 203-206.

- [69] *Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В.* Группа мультипликативной ренормировки в квантовой теории поля // *ЖЭТФ*. 1956. Т. 30, № 1. - С. 77-86.
- [70] *Joyce G.S.* Spherical model with long-range ferromagnetic interaction // *Phys. Rev.* - 1966. - V. 146, N 1. - P. 349-358.
- [71] *Suzuki M.* On the expansion theory of critical exponents // *Progr. Theor. Phys.* - 1973. - V. 50., N 2. - P. 393-408.
- [72] *Oppermann R.* Crossover exponent on the anisotropic  $N$ -vector model // *Phys. Lett. A.* - 1974. - V. 47, N 5. - P. 383-384.
- [73] *Fisher M.E., Ma S., Nickel B.G.* Critical exponent for long-range interactions // *Phys. Rev. Lett.* - 1972. - V. 29, N 14. - P. 917-920.
- [74] *Suzuki M., Yamazaki Y., Igarashi G.* Wilson-type expansions of critical exponents for long-range interactions // *Phys. Lett. A.* - 1972. - V. 42, N 4. - P. 313-314.
- [75] *Yamazaki Y., Suzuki M.* Critical behavior of isotropic systems with long-range interactions // *Progr. Theor. Phys.* - 1977. - V. 57, N 6. - P. 1886-1899.
- [76] *Ma S.K.* Introduction to the renormalization group // *Rev. Mod. Phys.* - 1973. - V. 45, N 4. - P. 589-614.
- [77] *Brezin E., Le Guillou J.C., Zinn-Justin J.* Field theoretical approach to critical phenomena / In: *Phase Transitions and Critical Phenomena*. V. 6. Eds. Domb C., Green M.S. - New York: Academic Press, 1976. - P. 127-249.
- [78] *Aharony A.* Dependence of universal critical behavior on symmetry and range of interaction / In: *Phase Transitions and Critical Phenomena*. V. 6. Eds. Domb C., Green M.S. - New York: Academic Press, 1976. - P. 358-424.

- [79] *Yamazaki Y.* Critical behaviour of isotropic spin systems with long- and short-range interactions // *Nuovo Cim.* - 1980. - V. 55A, N 1. - P. 59-77.
- [80] *Praveczi E.* Critical exponents and corrections to scaling VI. Comparison of results for the 3D Ising and 3D Heisenberg model with experimental findings. - Budapest, 1985. - 9 p. - (Preprint. Central Research Institute for Physics, Hungary; KFKI-1985-49).
- [81] *Plakida N.M., Tonchev N.S.* Quantum effects in a  $d$ -dimensional exactly solvable model for a structural phase transition // *Physica A.* - 1986. - V. 136, N 7. - P. 176-188.
- [82] *Плакида Н.М., Тончев Н.С.* Точно решаемая  $d$ -мерная модель структурного фазового перехода // *ТМФ.* - 1985. - Т. 63, № 2. - С. 270-279.
- [83] *Widom B.* Equation of state in the neighborhood of the critical point // *J. Chem. Phys.* - 1965. - V. 43, N 11. - P. 3898-3905.
- [84] *Domb C., Hunter D.L.* On the critical behavior of ferromagnets // *Proc. Phys. Soc.* - 1965. - V. 86, N 5. - P. 1147-1151.
- [85] *Kadanoff L.P.* Scaling laws for Ising models near  $T_c$  // *Physics.* - 1966. - V. 2, N 6. - P. 263-273.
- [86] *Паташинский А.З., Покровский В.Л.* О поведении упорядочивающихся систем вблизи точки фазового перехода // *ЖЭТФ.* - 1966. - Т. 50, № 2. - С. 439-447.
- [87] *Ларкин А.И., Хмельницкий Д.Е.* Фазовый переход в одноосных сегнетоэлектриках // *ЖЭТФ.* - 1969. - Т. 56, № 6. - С. 2087-2098.
- [88] *Anderson P.W.* A poor man's derivation on scaling laws for the Kondo problem // *J. Phys. C.* - 1970. - V. 3, N 12. - P. 2436-2441.

- [89] *Wilson K.G.* Renormalization group and critical phenomena. I. Renormalization group and Kadanoff scaling picture // *Phys. Rev. B.* – 1971. – V. 4, N 9. – P. 3174–3183.
- [90] *Wilson K.G.* Renormalization group and critical phenomena. II. Phase-space cell analysis of critical behavior // *Phys. Rev. B.* – 1971. – V. 4, N 9. – P. 3184–3205.
- [91] *Wilson K.G., Fisher M.E.* Critical exponents in 3.99 dimensions // *Phys. Rev. Lett.* – 1972. – V. 28, N 4. – P. 240–243.
- [92] *Wilson K.G.* Feynman-graph expansion for critical exponents // *Phys. Rev. Lett.* – 1972. – V. 82, N 9. – P. 548–551.
- [93] *Вильсон К., Козут Дж.* Ренормализационная группа и  $\epsilon$ -разложение. – М.: Мир, 1975. – 256 с.
- [94] *Niemeijer Th., Van Leeuwen J.M.J.* Wilson theory for two-dimensional Ising spin systems // *Physica A.* – 1974. – V. 71, N 1. – P. 17–40.
- [95] *Gonzales J.J., Hauhe E.H., Hemmer P.C.* Wilson theory. I. An exactly solvable example // *J. Phys. Rev. B.* – 1975. – V. 11, N 5. – P. 1952–1959.
- [96] *Di Castro C., Jona Lasinio G.* On the microscopic foundations of the scaling laws // *Phys. Lett. A.* – 1969. – V. 29, N 6. – P. 322–325.
- [97] *Хмельницкий Д.Е.* Фазовый переход второго рода в неоднородных телах // *ЖЭТФ.* – 1975. – Т. 68, № 5. – С. 1960–1968.
- [98] *Lubensky T.C.* Critical properties of random-spin models from the  $\epsilon$ -expansion // *Phys. Rev. B.* – 1975. – V. 11, N 9. – P. 3573–3580.
- [99] *Fisher M.E.* Phase transition, symmetry and dimensionality // *Physics.* – 1972. – V. 4, N 1. – P. 43–89.

- [100] *Parisi G.* Field-theoretic approach to second-order phase transitions in two- and three-dimensional systems // *J. Stat. Phys.* - 1980. - V. 23, N 1. - P. 49-82.
- [101] *Le Guillou J.C., Zinn-Justin J.* Critical exponents from field theory // *Phys. Rev. B.* - 1980. - V. 21, N 9. - P. 3976-3998.
- [102] *Le Guillou J.C., Zinn-Justin J.* Accurate critical exponents from the  $\epsilon$ -expansion // *J. Phys. Lett. (FR).* - 1985. - V. 46, N 4. - P. 137-141.
- [103] *Gohner G.R., Riedel E.K.* Renormalization-group calculation of critical exponents in three dimensions // *Phys. Rev. Lett.* - 1975. - V. 34, N 14. - P. 856-859.
- [104] *Гинзбург С.Л.* Определение фиксированной точки и критических индексов // *ЖЭТФ.* - 1975. - Т. 68, №1. - С. 273-286.
- [105] *Tsuneto T., Ueno S.* Critical exponents in three dimensions // *Progr. Theor. Phys.* - 1975. - V. 54, N 11. - P. 1570-1572.
- [106] *Anselmino M., Passarino G.* Some considerations about a  $\varphi^4$ -model in statistical mechanics // *Nuovo Cim.* - 1976. - V. 32B, N 2. - P. 415-426.
- [107] *Baker G.A., Jr., Nickel B.G., Green M.S., Meiron D.I.* Ising-model critical indices in three dimensions from the Callan-Symanzik equation // *Phys. Rev. Lett.* - 1976. - V. 36, N 23. - P. 1351-1354.
- [108] *Литатов Л.Н.* Расходимость ряда теории возмущений и квазиклассика // *ЖЭТФ.* - 1977. - Т. 72, №2. - С. 411-427.
- [109] *Соколов А.Н.* Уравнение ренормализационной группы и термодинамические аномалии вблизи трикритической точки // *ЖЭТФ.* - 1975. - Т. 77, №4. - С. 1598-1614.

- [110] *Липатов Л.Н.* Вычисление функции Гелл-Манна-Тоу в скалярной теории с сильной нелинейностью // ЖЭТФ. 1976. Т. 71, № 6. – С. 2010–2024.
- [111] *Владимиров А.А., Казаков Д.И., Тарасов О.В.* О вычислении критических индексов методами квантовой теории поля // ЖЭТФ. – 1979. – Т. 77, № 3. – С. 1035–1045.
- [112] *Казаков Д.И., Тарасов О.В., Ширков Д.В.* Аналитическое продолжение результатов теории возмущений модели  $g\varphi^4$  в область  $g \geq 1$  // ТМФ. – 1979. – Т. 38, № 1. – С. 15–25.
- [113] *Казаков Д.И., Ширков Д.В.* Суммирование асимптотических рядов в квантовой теории поля. – Дубна, 1980. – 60 с. – (Препринт ОИЯИ; Р2-80-462).
- [114] *Baker G.A., Jr., Nickel B.G., Meiron D.I.* Critical indices from perturbation analysis of the Gallan-Symanzik equation // Phys. Rev. B. – 1978. – V. 17, N 3. – P. 1365–1374.
- [115] *Chang M.-C., Houghton A.* Critical amplitude ratio of the confluent singular term for the specific heat: calculations to order  $\epsilon^2$  for systems with continuous symmetry // Phys. Rev. B. – 1980. – V. 21, N 5. – P. 1881–1892.
- [116] *Jensen S.J.K., Mouritsen O.G.* Critical parameters for the heat capacity of three-dimensional Ising ferromagnets // J. Phys. A. – 1982. – V. 15, N 8. – P. 2631–2636.
- [117] *Kaufman M., Andelman D.* Critical amplitude of the Potts model: Zeros and divergences // Phys. Rev. B. – 1984. – V. 29, N 7. – P. 4010–4016.
- [118] *Bagnuls C., Bervillier C., Boccara E.* Estimates of universal combinations between thermodynamic critical amplitudes for Ising-like systems // Phys. Lett. A. – 1984. – V. 103, N 9. – P. 411–415.
- [119] *Chase S.I., Kaufman M.* Renormalization-group analysis of heat-capacity critical amplitudes // Phys. Rev. B. – 1986. – V. 33, N 1. – P. 239–244.

- [120] *Bervillier C.* Estimate of a universal critical amplitude ratio from its  $\epsilon$ -expansion up to  $\epsilon^2$  // *Phys. Rev. B.* – 1986. – V. 34, N 11. – P. 8141–8143.
- [121] *Wegner F.J.* Corrections to scaling laws // *Phys. Rev. B.* – 1972. – V. 5, N 11. – P. 4529–4536.
- [122] *Wegner F.J.* The critical state, general aspects / In: *Phase Transitions and Critical Phenomena. V. 6.* Eds. Domb C., Green M.S. – New York: Academic Press, 1976. – P. 7–124.
- [123] *Bervillier C., Godreche C.* Universal combination of critical amplitudes from field theory // *Phys. Rev. B.* – 1980. – V. 21, N 11. – P. 5427–5431.
- [124] *Brezin E., Le Guillou J.C., Zinn-Justin J.* Universal ratios of critical amplitudes near four dimensions // *Phys. Lett. A.* – 1974. – V. 47, N 4. – P. 285–287.
- [125] *Bagnuls C., Bervillier C.* Nonasymptotic critical behavior from field theory at  $d = 3$ . The disordered-phase case // *Phys. Rev. B.* – 1985. – V. 32, N 11. – P. 7209–7231.
- [126] *Мицдал А.А.* Корреляционные функции в теории фазовых переходов. Нарушение законов подобия // *ЖЭТФ.* – 1970. – Т. 59, №3. – С. 1015–1031.
- [127] *Мицдал А.А.* Фазовые переходы в калибровочных и спиновых решеточных системах // *ЖЭТФ.* – 1975. – Т. 69, № 4. – С. 1457–1465.
- [128] *Козицкий Ю.В., Юлновский И.Р.* Обобщенная иерархическая модель скалярного ферромагнетика в методе коллективных переменных // *ТМФ.* – 1982. – Т. 51, №2. – С. 268–277.
- [129] *Bleher P.M.* Construction of non-Gaussian selfsimilar random fields with hierarchical structure // *Commun. Math. Phys.* – 1982. – V. 84, N 4. – P. 557–578.

- [130] *Kadanoff L.P.* Notes on Migdal's recursion formulas // *Annals of Physics.* – 1976. – V. 100, N 1. – P. 359–394.
- [131] *Liu A.J., Fisher M.E.* The three-dimensional Ising model revisited numerically // *Physica A.* – 1989. – V. 156, N 1. – P. 35–76.
- [132] *Liu A.J., Fisher M.E.* On the corrections to scaling in three-dimensional Ising models // *J. Stat. Phys.* – 1990. – V. 58, N 3–4. – P. 431–442.
- [133] *Lee J., Kosterlitz J.M.* New numerical method to study phase transitions // *Phys. Rev. Lett.* – 1990. – V. 65, N 2. – P. 137–140.
- [134] *Novotny M.A.* Transfer matrix studies of  $d \geq 3$  Ising models // *J. Appl. Phys.* – 1990. – V. 67, N 9, Pt 2B. – P. 5448–5450.
- [135] *Yurishchev M.A.* Critical finite-size-scaling amplitudes of a fully anisotropic three-dimensional Ising model // *Phys. Rev. E.* – 1997. – V. 55, N 4. – P. 3915–3925.
- [136] *Souza I., Lobo C., Seixas J.* Testing a simple criterion for the critical temperature // *Phys. Rev. B.* – 1997. – V. 55, N 10. – P. 6356–6359.
- [137] *Meyer H., Angles d'Auriac J.-C.* Random matrix theory and classical statistical mechanics: spin models // *Phys. Rev. E.* – 1997. – V. 55, N 6. – P. 6608–6617.
- [138] *Moore M.A., Jasnov D., Wortis M.* Spin-spin correlation function of the three-dimensional Ising ferromagnet above the Curie temperature // *Phys. Rev. Lett.* – 1969. – V. 22, N 18. – P. 940–943.
- [139] *Gaunt D.S., Baker G.A.* Low temperature critical exponents from high-temperature series // *Phys. Rev. B.* – 1970. – V. 1, N 3. – P. 1184–1210.



- [140] *Domb C.* Ising model // In: Phase Transitions and Critical Phenomena. V. 3. Eds. Domb C., Green M.S. - New York: Academic Press, 1974. - P. 357-484.
- [141] *Zinn-Justin J.* Analysis of high temperature series of the spin  $S$  Ising model on the body-centered cubic lattice // *J. Physique.* - 1981. - V. 42, N 6. - P. 783-792.
- [142] *Essam J.W., Sykes M.F.* The crystal statistics of the diamond lattice // *Physica.* - 1963. - V. 29, N 4. - P. 378-388.
- [143] *Fisher M.E., Burford R.J.* Theory of critical-point scattering and correlations. I. The Ising model // *Phys. Rev.* - 1967. - V. 156, N 2. - P. 583-622.
- [144] *Gaunt D.S., Sykes M.F.* Estimation of critical indices for the three-dimensional Ising model // *J. Phys. A.* - 1973. - V. 6, N 10. - P. 1517-1526.
- [145] *Ferer M., Moore M.A., Wortis M.* Critical indices and amplitudes of classical planar models in finite field for temperatures greater than  $T_c$  // *Phys. Rev. B.* - 1973. - V. 8, N 11. - P. 5205-5212.
- [146] *Baker G.A.* Ising-model, spin-spin correlations on the hypercubical lattices // *Phys. Rev. B.* - 1974. - V. 9, N 11. - P. 4908-4913.
- [147] *Saul D.M., Wortis M., Jasnov D.* Confluent singularities and the correction-to-scaling exponent for the  $d = 3$  fcc Ising model // *Phys. Rev. B.* - 1975. - V. 11, N 7. - P. 2571-2578.
- [148] *Camp W.J., Van Dyke J.P.* High-temperature series for the susceptibility of the spin- $s$  Ising model: analysis of confluent singularities // *Phys. Rev. B.* - 1975. - V. 11, N 7. - P. 2579-2596.
- [149] *Baker G.A.* Analysis of hyperscaling in the Ising model by the high-temperature series method // *Phys. Rev. B.* - 1977. - V. 15, N 3. - P. 1552-1559.

- [150] *Gaunt D.S., Sykes M.F.* The critical exponent  $\gamma$  for the three-dimensional Ising model // *J. Phys. A.* - 1979. - V. 12, N 1. - P. L25-L28.
- [151] *Bessis D., Monssa P., Turchetti G.* Subdominant critical indices for the ferromagnetic susceptibility of the spin 1/2 Ising model // *J. Phys. A.* - 1980. - V. 13, N 8. - P. 2763-2773.
- [152] *Okabe Yutaka, Ohno Kaoru.* Systematic study on the critical amplitude  $\Gamma$  for the classical  $n$ -vector model in the high-temperature expansion // *J. Phys. Soc. Jap.* - 1984. - V. 53, N 9. - P. 3070-3073.
- [153] *Sykes M.F., Essam J.W., Gaunt D.S.* Derivation of low-temperature expansions for the Ising model of a ferromagnet and an antiferromagnet // *J. Math. Phys.* - 1965. - V. 6, N 2. - P. 283-290.
- [154] *Sykes M.F., Martin J.L., Hunter D.L.* Specific heat of a three-dimensional Ising ferromagnet above the Curie temperature // *Proc. Phys. Soc.* - 1967. - V. 91, N 3. - P. 671-677.
- [155] *Sykes M.F., Gaunt D.S., Essam J.W., Elliott C.J.* Derivation of low-temperature expansions for Ising model. VI. Three-dimensional lattices-temperature grouping // *J. Phys. A.* - 1973. - V. 6, N 10. - P. 1507-1516.
- [156] *Sykes M.F., Gaunt D.S., Essam J.W., Hunter D.L.* Derivation of low-temperature expansions for Ising model. II. General theory // *J. Math. Phys.* - 1973. - V. 14, N 8. - P. 1060-1065.
- [157] *Hunter D.L., Baker G.A.* Methods of series analysis. I. Comparison of current methods used in the theory of critical phenomena // *Phys. Rev. B.* - 1973. - V. 7, N 7. - P. 3346-3392.
- [158] *Camp W.J., Saul D.M., Van Dyke J.P., Wortis M.* Series analysis of corrections to scaling for the spin-pair correlations of the spin- $s$  Ising model: confluent singularities, universality

- and hyperscaling // Phys. Rev. B. - 1976. - V. 14, N 9. - P. 3990-4001.
- [159] *Zinn-Justin J.* Analysis of Ising model critical exponents from high-temperature series expansion // J. Physique. - 1979. - V. 40, N 10. - P. 969-975.
- [160] *Sykes M.F., Hunter D.L.* Low-temperature expansion data for the Ising model: simple cubic and simple quadratic lattices // J. Phys. A. - 1980. - V. 13, N 3. - P. 1121-1127.
- [161] *Ferer M., Velgakis M.J.* Hyperscaling in the three-dimensional Ising model // Phys. Rev. B. - 1983. - V. 27, N 5. - P. 2839-2854.
- [162] *Decker Karsten.* Critical behaviour of the 3d Ising model from an extended low-temperature expansion of the inverse correlation length // Nucl. Phys. B. - 1985. - V. 257, N 3. - P. 419-432.
- [163] *Guttman A.J.* The high-temperature susceptibility and spin-spin correlation function of the three-dimensional Ising model // J. Phys. A. - 1987. - V. 20, N 7. - P. 1855-1863.
- [164] *Horiguchi T., Nagai O., Miyashita S.* Low- and high-temperature behaviors of ferromagnetic Ising model of infinite-spin // J. Phys. Soc. Jap. - 1992. - V. 61, N 1. - P. 308-321.
- [165] *Bhanot G., Creutz M., Glässner U., Schilling K.* Specific-heat exponent for the three-dimensional Ising model from a 24th-order high-temperature series // Phys. Rev. B. - 1994. - V. 49, N 18. - P. 12909-12914.
- [166] *Butera P., Comi M.* N-vector spin models on the simple-cubic and body-centered-cubic lattices: a study of the critical behavior of the susceptibility and of the correlation length by high-temperature series extended to order  $\beta^{21}$  // Phys. Rev. B. - 1997. - V. 56, N 13. - P. 8212-8240.

- [167] *Butera P., Comi M.* Critical specific heats of the  $N$ -vector spin models on the simple cubic and bcc lattices // Phys. Rev. B. - 1999. - V. 60, N 9. - P. 6749-6760.
- [168] *Butera P., Comi M.* Extension to order  $\beta^{23}$  of the high-temperature expansions for the spin- $\frac{1}{2}$  Ising model on simple cubic and body-centered cubic lattices // Phys. Rev. B. - 2000. - V. 62, N 22. - P. 14837-14843.
- [169] *Campostrini M., Pelissetto A., Rossi P., Vicari E.* Improved high-temperature expansion and critical equation of state of three-dimensional Ising-like systems // Phys. Rev. E. - 1999. - V. 60, N 4. - P. 3526-3563.
- [170] *Maijer P.H., Farrell R.A.* Pade approximations and the critical exponents in the two- and three-dimensional Ising models // Phys. Rev. B. - 1975. - V. 12, N 1. - P. 243-252.
- [171] *Бейкер Дж., мл., Грейвс-Моррис П.* Аппроксимации Паде. - М.: Мир, 1986. - 502 с.
- [172] Методы Монте-Карло в статистической физике / Под ред. Биндера К. - М.: Мир, 1982. - 400 с.
- [173] *Swendsen R.H.* Monte-Carlo renormalization-group transformations in momentum space // Phys. Rev. Lett. - 1981. - V. 47, N 16. - P. 1159-1162.
- [174] *Pawley G.S., Swendsen R.H., Wallace D.J., Wilson K.G.* Monte-Carlo renormalization-group calculations of critical behavior in the simple-cubic Ising model // Phys. Rev. B. - 1984. - V. 29, N 7. - P. 4030-4040.
- [175] *Swendsen R.H.* Monte-Carlo calculation of renormalized coupling parameters. I.  $d = 2$  Ising model // Phys. Rev. B. - 1984. - V. 30, N 7. - P. 3866-3874.
- [176] *Swendsen R.H.* Monte-Carlo calculation of renormalized coupling parameters. II.  $d = 3$  Ising model // Phys. Rev. B. - 1984. - V. 30, N 7. - P. 3875-3881.

- [177] *Swendsen R.H.* Monte-Carlo renormalization group // *J. Stat. Phys.* - 1984. - V. 34, N 5. - P. 963-973.
- [178] *Jensen S.J.K.* Heat capacity of the  $S = \infty$  Ising ferromagnet studied by MonteCarlo simulation // *J. Phys. A.* - 1984. - V. 17, N 5. - P. 1149-1155.
- [179] *Binder K.* The Monte Carlo method for the study of phase transitions. A review of some recent progress // *J. Comput. Phys.* - 1985. - V. 59, N 1. - P. 1-55.
- [180] *Novotny M.A., Landau D.P.* Monte Carlo renormalization group for quantum systems // *Phys. Rev. B.* - 1985. - V. 31, N 3. - P. 1449-1456.
- [181] *Greutz M., Mitra P., Moriarty K.J.M.* Computer investigations of the three-dimensional Ising model // *J. Stat. Phys.* - 1986. - V. 42, N 5-6. - P. 823-832.
- [182] *Chen K., Ferrenberg A.M., Landau D.P.* Monte Carlo study of critical behavior in the three-dimensional classical Heisenberg ferromagnet // *J. Appl. Phys.* - 1993. - V. 73, N 5. - P. 5488-5490.
- [183] *Costa B.V., Costa J.E.R., Landau D.P.* Monte Carlo and spin dynamics study of the anisotropic Heisenberg model in two dimensions // *J. Appl. Phys.* - 1997. - V. 81, N 8. - P. 5746-5748.
- [184] *Marinari E.* Complex zeroes of the  $d = 3$  Ising model: finite-size scaling and critical amplitudes // *Nucl. Phys. B.* - 1984. - V. 235, N 1. - P. 123-134.
- [185] *Blöte H.W.J., Compagner A., Croockewit J.H., Fonk Y.T.J.C., Heringa J.R., Hoogland A., Smit T.S., Van Willigen A.L.* Monte Carlo renormalization of the three-dimensional Ising model // *Physica. A.* - 1989. - V. 161, N 1. - P. 1-22.

- [186] *Lai Pik-Yin, Mon K.K.* Monte Carlo studies of universal critical amplitudes for the three-dimensional Ising model: correlation length and renormalized coupling // *Phys. Rev. B.* - 1989. - V. 10, N 16. - P. 11120-11122.
- [187] *Schlijper A.G., Van Bergen A.R.D., Smit B.* Local-states method for the calculation of free energies in Monte-Carlo simulations of latticemodels // *Phys. Rev. A.* - 1990. - V. 41, N 2. - P. 1175-1178.
- [188] *Livet F.* The cluster updating Monte Carlo algorithm applied to the 3d Ising problem // *Europhys. Lett.* - 1991. - V. 16, N 2. - P. 139-142.
- [189] *Baillie C.F.* A new MCRG calculation of the critical behavior of the 3d Ising model // *Comput. Phys. Commun.* - 1991. - V. 65, N 1-3. - P. 17-23.
- [190] *Ferrenberg A.M., Landau D.P.* Critical behavior of the three-dimensional Ising model: a high-resolution Monte Carlo study // *Phys. Rev. B.* - 1991. - V. 44, N 10. - P. 5081-5091.
- [191] *Landau D.P., Ferrenberg A.M.* A high resolution Monte Carlo study of critical behavior: the three-dimensional Ising model // *J. Kor. Phys. Soc.* - 1993. - V. 26. - P. S371-S377.
- [192] *Caselle M., Hasenbusch M.* Universal amplitude ratios in the three-dimensional Ising model // *J. Phys. A.* - 1997. - V. 30. - P. 4963-4982.
- [193] *Landau D.P.* Computer simulation studies of magnetic phase transitions // *J. Magn. Magn. Mater.* - 1999. - V. 200. - P. 231-247.
- [194] *Holovach Yu.* Phase transition in continuous symmetry model in general dimensions-fixed dimension renormalization group approach // *Int. Journ. Mod. Phys. A.* - 1993. - V. 8, N 30. - P. 5329-5351.

- [195] *Holovach Yu.* Critical exponents of Ising-like systems in general dimensions // *Theor. Math. Phys.* – 1993. – V. 96, N 3. – P. 482–495.
- [196] *Holovach Yu., Shpot M.* Critical exponents of random Ising-like systems in general dimensions // *J. Stat. Phys.* – 1992. – V. 66, N 3/4. – P. 867–883.
- [197] *Von Ferber C., Holovach Yu.* Statistics of multicomponent polymer stars // *Cond. Matt. Phys.* – 1997. – N 10. – P. 9–40.
- [198] *Von Ferber C., Holovach Yu.* Copolymer networks and stars: scaling exponents // *Phys. Rev. E.* – 1997. – V. 56, N 6. – P. 6370–6386.
- [199] *Паташинский А.З., Покровский В.Л.* Метод ренормгруппы в теории фазовых переходов // *УФН.* – 1977. – Т. 121, № 1. – С. 55–96.
- [200] *Климонтович Ю.Л.* О флуктуациях в критической области // *ТМФ.* – 1979. – Т. 76, № 5. – С. 1632–1643.
- [201] *Gaunt D.S.*  $1/d$  expansions for critical amplitudes // *J. Phys. A.* – 1986. – V. 19, N 3. – P. L149–L153.
- [202] *Halvorsen E., Bartkowiak M.* Linked cluster expansion and  $1/d$  expansions for classical spin systems // *Phys. Rev. B.* – 2001. – V. 63, N 1. – 014403 (11 pages).
- [203] *Psaltakis Gregory C.*  $1/n$  expansion for quantum Heisenberg antiferromagnets // *Phys. Rev. B.* – 1989. – V. 39, N 4. – P. 2834–2837.
- [204] *Вакарчук И.А., Рудавский Ю.К., Юзюковский И.Р.* Приближенное преобразование ренормализационной группы в теории фазовых переходов. I. Дифференциальное уравнение ренормгруппы // *ТМФ.* – 1982. – Т. 50, № 2. – С. 313–320.
- [205] *Вакарчук И.А., Рудавский Ю.К.* Приближенное преобразование ренормализационной группы в теории фазовых переходов. II. Уравнение для неподвижных точек и линейный

- оператор ренормализационной группы // ТМФ. – 1982. – Т. 51, № 1. – С. 102-110.
- [206] *Reich W., Cofta H.* Renormalization group free energy for an Ising ferromagnet on a simple cubic lattice // Phys. Stat. Sol. (b). – 1986. – V. 134, N 1. – P. K31-K34.
- [207] *Reich W.* Thermodynamic functions for a three-dimensional ferromagnet within Niemeijer and Van Leeuwen's method // Phys. Stat. Sol. (b). – 1988. – V. 149, N 2. – P. K163-K165.
- [208] *Chakraborty K.G., Tucker J.W.* Linear chain approximation for an anisotropic cubic spin-one Ising model // Physica A. – 1986. – V. 137, N 1-2. – P. 111-121.
- [209] *Faleiro Ferreira J.R.* A variational linear approach for the free energy applied to the Ising model // Phys. Stat. Sol. (b). – 1988. – V. 148, N 2. – P. 709-714.
- [210] *Зубарев Д.Н.* Двухвременные функции Грина в статистической физике // УФН. – 1960. – Т. 71, №1. – С. 71-116.
- [211] *Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В.* Метод функций Грина в статистической механике. – М: Физматгиз, 1961. – 312 с.
- [212] *Рудой Ю.Г.* Современное состояние метода двухвременных функций Грина в квантовой теории магнетизма / В сб.: Статистическая физика и квантовая теория поля. Под ред. Боголюбова Н.Н. – М.: Наука, 1973. – С. 97-164.
- [213] *Федяшин В.К.* Применение функций Грина и корреляционных функций к изучению модели Изинга / В сб.: Статистическая физика и квантовая теория поля. Под ред. Боголюбова Н.Н. – М.: Наука, 1973. – С. 241-261.
- [214] *Тябликов С.В.* Методы квантовой теории магнетизма. – М.: Наука, 1975. – 528 с.
- [215] *Горбатов В.И.* Функции Грина в модели Изинга / В сб.: Материаловед. узкощелев. и слоист. полупровод. Ред. Товстюк К.Д. и др. – Киев: Наук. думка, 1989. – С. 17-20.



- [216] *Дубровский И.М.* Об интерпретации экспериментов по определению критических индексов вблизи точки фазового перехода второго рода // ФТТ (Ленинград). 1990. - Т. 33, № 12. - С. 3629-3631.
- [217] *Cavalotti P.L., Alberti M., Bozzini B., Iudica A., Nobili L., Ossi P.M.* Statistical thermodynamics of ordering in ferromagnets // J. Magn. Magn. Mater. 1992. - V. 104-107, N 2. - P. 905-907.
- [218] *Mattson J., Djurberg C., Nordblad P.* Determination of the critical exponent  $\beta$  from measurements of a weak spontaneous magnetisation in the 3d Ising antiferromagnet  $FeF_2$  // J. Magn. Magn. Mater. 1994. - V. 136. - P. L23-L28.
- [219] *Маломуж Н.П., Фисенко А.И.* Исследование флуктуаций в окрестности двойной критической точки бинарных растворов // УФЖ. - 1989. - Т. 34, № 7. - С. 1043-1049.
- [220] *Malomuzh N.P., Veytsman B.A.* The double critical points classification and thermodynamic properties in their vicinities // Physica A. - 1990. - V. 168, N 2. - P. 833-852.
- [221] *Parola A., Reatto L.* Microscopic approach to critical phenomena in binary fluids // Phys. Rev. A. - 1991. - V. 44, N 10. - P. 6600-6615.
- [222] *Bulavin L.A., Oleinikova A.V., Petrovitskij A.V.* Influence of ions on the critical behaviour of a binary mixture near the consolute point // Int. J. Thermophys. 1996. - V. 17, N 1. - P. 137-145.
- [223] *Булавин Л.А.* Критичні явища у рідинах. - Київ: Редакційно-видавничий центр "Київський університет". 1997. - 174 с.
- [224] *Bulavin L.A., Chalyi A.V., Oleinikova A.V.* Equilibration in a gravitational field near the critical consolute point // J. Mol. Liq. - 1998. - V. 75. - P. 103-114.

- [225] *Kadanoff L.P.* Scaling and universality in statistical physics // *Physica A.* – 1990. – V. 163, N 1. – P. 1-14.
- [226] *Lei G.* A family of methods for the solution of lattice models // *J. Comput. Phys.* – 1991. – V. 92, N 1. – P. 106-141.
- [227] *Mano H., Nakao K.* Study of critical phenomena by spin-cluster approximation series: Ising spin system // *J. Phys. Soc. Jap.* – 1991. – V. 60, N 2. – P. 548-561.
- [228] *Kinosita Y., Kawashima N., Suzuki M.* Coherent-anomaly analysis of series expansions and its application to the Ising model // *J. Phys. Soc. Jap.* – 1992. – V. 61, N 11. – P. 3887-3901.
- [229] *Thompson C.J.* Validity of mean-field theories in critical phenomena // *Progr. Theor. Phys.* – 1992. – V. 87, N 3. – P. 535-559.
- [230] *Hilfer R.* Scaling theory and the classification of phase transitions // *Mod. Phys. Lett. B.* – 1992. – V. 6, N 13. – P. 773-784.
- [231] *Булавін Л.А., Чалий О.В., Чалий К.О.* Специфіка критичних явищ в малих об'ємах рідин // *УФЖ.* – 1995. – Т. 40, № 8. – С. 809-812.
- [232] *Булавін Л.А., Гаврюшенко Д.А., Сысоев В.М.* Расчет профиля плотности жидкости в плоских несмачиваемых порах // *ЖФХ.* – 1996. – Т. 70, № 3. – С. 559-561.
- [233] *Васильєв О.М., Чалий О.В.* Кореляційні властивості просторово обмежених систем у наближенні Мюнстера // *УФЖ.* – 1998. – Т. 43, № 5. – С. 572-576.
- [234] *Васильєв О.М., Чалий О.В.* Метод Мюнстера для тримоментного наближення і зсув критичних параметрів в анізотропній необмеженій системі // *УФЖ.* – 2000. – Т. 45, № 1. – С. 118-123.

- [235] *Fisher M.E.* Renormalization group theory: its basis and formulation in statistical physics // *Rev. Mod. Phys.* - 1998. - V. 70, N 2. - P. 653-681.
- [236] *Pelissetto A., Rossi P., Vicary E.* Crossover scaling from classical to nonclassical critical behavior // *Phys. Rev. E.* - 1998. - V. 58, N 6. - P. 7146-7150.
- [237] *Anisimov M.A., Luijten E., Agayan V.A., Sengers J.V., Binder K.* Shape of crossover between mean-field and asymptotic critical behavior in a three-dimensional Ising lattice // *Phys. Lett. A.* - 1999. - V. 264. - P. 63-67.
- [238] *Fisher M.E.* The nature of criticality in ionic fluids // *J. Phys.: Condens. Matter.* - 1996. - V. 8, N 47. - P. 9103-9109.
- [239] *Anisimov M.A.* Crossover criticality in complex fluids // *J. Phys.: Condens. Matter.* - 2000. - V. 12, N 8A. - P. 451-457.
- [240] *Bagnuls C., Bervillier C.* Exact renormalization group equations. An introductory review. - 2000. - 59 p. - (Preprint hep-th/0002034).
- [241] *Bagnuls C., Bervillier C.* Exact renormalization group equations and the field theoretical approach to critical phenomena. - 2001. - 15 p. - (Preprint hep-th/0101110).
- [242] *Юзновский И.Р.* Статистическая сумма трехмерной модели Изинга // *ДАН СССР.* - 1977. - Т. 232, №2. - С. 312-315.
- [243] *Юзновский И.Р.* Статистическая сумма трехмерной модели Изинга // *ТМФ.* - 1978. - Т. 36, №3. - С. 373-399.
- [244] *Yukhnovskii I.R.* Solution of the three-dimensional Ising model for description of the second-order phase transition // *Riv. Nuovo Cim.* - 1989. - V. 12, N 1. - P. 1-119.
- [245] *Зубарев Д.Н.* Вычисление конфигурационных интегралов для системы частиц с кулоновским взаимодействием // *ДАН СССР.* - 1954. - Т. 95, №4. - С. 757-760.

- [246] Юзловский И.Р. Применение коллективных переменных и учет короткодействующих сил в теории систем заряженных частиц // ЖЭТФ. – 1958. – Т. 34, №2. – С. 379–389.
- [247] Боголюбов Н.Н., Зубарев Д.Н. Волновая функция нижнего состояния системы взаимодействующих бозе-частиц // ЖЭТФ. – 1955. – Т. 28, №2. – С. 129–139.
- [248] Yukhnovsky I.R., Vakarchuk I.A. Application of the displacement and collective variable method for describing liquid Helium near absolute zero. – Kiev, 1977. – 67 p. – (Preprint/Acad. Sci. Ukr. SSR. Inst. Theor. Phys: ITP-77 25E).
- [249] Ваврух М.В. Двухсортная система фермионов при низких температурах // УФЖ. – 1968. – Т. 13, №5. – С. 733–742.
- [250] Ваврух М.В. Статистическая сумма водородной системы в металлическом состоянии // ТМФ. – 1978. – Т. 36, №3. – С. 400–413.
- [251] Юзловский И.Р., Головки М.Ф. Статистическая теория классических равновесных систем. – Киев: Наук. думка, 1980. – 372 с.
- [252] Вакарчук И.А., Рудавский Ю.К., Понедилок Г.В. Микроскопическая теория аморфных и жидких ферромагнетиков / В сб.: Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. – Д17-81-758. – Дубна: ОИЯИ, 1981. – С. 307–317.
- [253] Вакарчук И.А., Понедилок Г.В., Рудавский Ю.К. Теория жидких магнетиков // ТМФ. – 1984. – Т. 58, №3. – С. 445–460.
- [254] Блажиевський Л.Ф., Юзловський І.Р. Про представлення взаємодії в колективних змінних // УФЖ. – 1965. – Т. 10, №10. – С. 1083–1092.
- [255] Блажиевський Л.Ф. Квазирелятивістські колективні змінні і інтеграли по траєкторіям в статистическій

- механике вырожденных систем // УФЖ. – 1986. – Т. 31, № 2. – С. 297–303.
- [256] *Ваврух М.В.*  $n$ -частичные корреляционные функции взаимодействующего электронного газа // ТМФ. – 1982. – Т. 50, № 3. – С. 438–449.
- [257] *Мрыглод И.М.* Критические амплитуды  $n$ -компонентной модели структурного фазового перехода // Изв. АН СССР. Сер. физич. – 1991. – Т. 55, № 7. – С. 1467–1469.
- [258] *Yukhnovskii I.R., Korynevskii N.A.* The investigation of the ferroelectric phase transition in cluster systems of order-disorder type. III. Free energy // Phys. Stat. Sol. (b). – 1991. – V. 163. – P. 355–367.
- [259] *Yukhnovskii I.R., Idzyk I.M., Kolomiets V.O.* Investigation of a homogeneous many-particle system in the vicinity of the critical point // J. Stat. Phys. – 1995. – V. 80, N 1–2. – P. 405–443.
- [260] *Yukhnovskii I.R., Patsahan O.V.* Grand canonical distribution for multicomponent system in the collective variables method // J. Stat. Phys. – 1995. – V. 81, N 3–4. – P. 647–672.
- [261] *Patsahan O.V., Kozlovskii M.P., Melnyk R.S.* Ab initio study of the vapour-liquid critical point of a symmetrical binary fluid mixture // J. Phys.: Condens. Matter. – 2000. – V. 12. – P. 1595–1612.
- [262] *Юхновский И.Р., Рудаковский Ю.К., Головач Ю.В.* Исследование критического поведения  $n$ -компонентной модели Стенли в методе коллективных переменных / В сб.: Термодинамика необратимых процессов. – М.: Наука, 1987. – С. 49–55.
- [263] *Козловський М.П., Усатенко З.Є.* Дослідження критичної поведінки  $n$ -компонентної моделі магнетика. II. Розрахунок вільної енергії при температурах  $T > T_c$  // УФЖ. – 1997. – Т. 42, № 3. – С. 368–380.

- [264] *Usatenko Z.E., Kozlovskii M.P.* Thermodynamic characteristics of the classical  $n$ -vector magnetic model in three dimensions // *Phys. Rev. B.* – 2000. – V. 62, N 14. – P. 9599–9615.
- [265] *Илнытский Я. М., Козловский М.П., Якуhnовский И.Р.* On the theory of phase transitions by the collective variables method // *Int. J. Mod. Phys. B.* – 1997. – V. 11, N 8. – P. 1009–1022.
- [266] *Юзловский И.Р., Рудаковский Ю.К.* Представление коллективных переменных для модели Изинга // *УФЖ.* – 1977. – Т. 22, № 1. – С. 50–59.
- [267] *Бом Д.* Общая теория коллективных переменных. – М.: Мир, 1964. – 152 с.
- [268] *Гинзбург В.Л., Ландау Л.Д.* К теории сверхпроводимости // *ЖЭТФ.* – 1960. – Т. 20, № 12. – С. 1064–1082.
- [269] *Heller P.* Experimental investigations of critical phenomena // *Rep. Progr. Phys.* – 1967. – V. 30, N 3. – P. 731–826.
- [270] *Kadanoff L.P., Götze W., Hamblen D., Hecht R., Lewis E.A.S., Palciauskas V.V., Raul M., Swift J.* Static phenomena near critical points: theory and experiment // *Rev. Mod. Phys.* – 1967. – V. 39, N 2. – P. 395–431.
- [271] *Fisher M.E.* The theory of equilibrium critical phenomena // *Rep. Progr. Phys.* – 1967. – V. 30, N 2. – P. 615–730.
- [272] *Fisher M.E.* Correlation functions and the critical region of simple fluids // *J. Math. Phys.* – 1964. – V. 5, N 7. – P. 944–962.
- [273] *Боголюбов Н.Н., мл.* Метод исследования модельных гамильтонианов. – М.: Наука, 1974. – 176 с.
- [274] *Domb C., Sykes M.F.* Use of series expansions for the Ising model susceptibility and excluded volume problem // *J. Math. Phys.* – 1961. – V. 2, N 1. – P. 63–67.

- [275] *Jasnov D., Wortis M.* High-temperature critical indices for the classical anisotropic Heisenberg model // *Phys. Rev.* - 1968. - V. 176, N 2. - P. 739-750.
- [276] *Gaunt D.S., Domb C.* The specific heat of the three-dimensional Ising model below  $T_c$  // *J. Phys. C.* - 1968. - V. 1, N 4. - P. 1038-1045.
- [277] *Brout R.* Theoretical methods in the critical region of a phase transition // *Phys. Rep.* - 1974. - V. 10, N 1. - P. 1-61.
- [278] *Bagnuls C., Berwillier C.* Confluent singularities of the renormalised coupling constant at  $D = 3$  // *J. Phys. A.* - 1986. - V. 19, N 2. - P. L85-L89.
- [279] *Stanley H.E.* Some critical properties of quantum mechanical Heisenberg ferro- and antiferromagnets // *J. Appl. Phys.* - 1969. - V. 40, N 3. - P. 1546-1548.
- [280] *Stanley H.E.* Critical indices for a system of spins of arbitrary dimensionality situated on a lattice of arbitrary dimensionality // *J. Appl. Phys.* - 1969. - V. 40, N 3. - P. 1272-1274.
- [281] *Baker G.A., Jr.* Ising model with a scaling interaction // *Phys. Rev. B.* - 1972. - V. 5, N 7. - P. 2622-2633.
- [282] *Harbus F., Stanley H.E.* Use of scaling theory to predict amplitudes: verification of double-power-law behavior for crossover of lattice dimensionality // *Phys. Rev. B.* - 1973. - V. 8, N 5. - P. 2268-2272.
- [283] *Хуанг К.* Статистическая механика. - М.: Мир, 1966. - 520 с.
- [284] *Исигара А.* Статистическая физика. - М.: Мир, 1973. - 472 с.
- [285] *Балеску Р.* Равновесная и неравновесная статистическая механика. Т. 1. - М.: Мир, 1978. - 406 с.

- [286] *Климонтович Ю.Л.* Статистическая физика. - М.: Наука, 1983. - 450 с.
- [287] *Зубарев Д.Н.* Об одном новом методе в теории взаимодействующих ферми-частиц // ЖЭТФ. - 1953. - Т. 25, № 5. - С. 548-559.
- [288] *Пацаган О.В., Юхновский И.Р.* Фазовые переходы в двухкомпонентных пространственно-однородных системах. I. Гауссово приближение функционала статистической суммы // ТМФ. - 1987. - Т. 72, № 3. - С. 452-461.
- [289] *Пацаган О.В., Юхновский И.Р.* Термодинамические функции двухкомпонентной пространственно-однородной системы в окрестности критической точки расщепления // ТМФ. - 1989. - Т. 81, № 3. - С. 455-467.
- [290] *Гурский З.А., Вараницкий В.И.* Свободная энергия бинарных сплавов. Расчет в области высоких температур // ФММ. - 1984. - Т. 57, № 5. - С. 883-891.
- [291] *Юхновский И.Р., Рудаковский Ю.К.* Применение метода коллективных переменных к модели Изинга. I. Статистическая сумма. - Киев, 1974. - 37 с. - (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-74-171Р).
- [292] *Юхновский И.Р., Рудаковский Ю.К.* Применение метода коллективных переменных к модели Изинга. II. Исследование поведения парной корреляционной функции в окрестности точки фазового перехода. - Киев, 1975. - 19 с. - (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-75-13Р).
- [293] *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.
- [294] *Юхновский И.Р.* Распределение флуктуационных спиновых волн в модели Изинга в области, содержащей критическую точку // УФЖ. - 1977. - Т. 22, № 2. - С. 315-324.



- [295] Юзновский И.Р. Описание фазового перехода второго рода в методе коллективных переменных. I. Распределение фаз флуктуаций плотности вблизи  $T_c$ . – Киев, 1976. – 46 с. – (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-76-15Р).
- [296] Юзновский И.Р. К общей теории фазовых переходов второго рода // Физика многочастич. систем. – 1983. – Вып. 4. – С. 3–25.
- [297] Юзновский И.Р., Рудаковский Ю.К. Поведение моментов гауссового базисного распределения флуктуаций плотности спинового момента в парной корреляционной функции модели Изинга в окрестности критической точки // УФЖ. – 1977. – Т. 22, № 2. – С. 186–205.
- [298] Юзновский И.Р., Рудаковский Ю.К. Обоснование формы базисного распределения вблизи точки фазового перехода в модели Изинга // ДАН СССР. – 1977. – Т. 233, № 4. – С. 579–582.
- [299] Юзновский И.Р., Идзик И.М. Групповые разложения для свободной энергии с выделенной системой отсчета. – Киев, 1981. – 23 с. – (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-81-126Р).
- [300] Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами / Под ред. Абрамовиц М., Стриган И. – М.: Наука, 1979. – 832 с.
- [301] Юзновский 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).
- [302] Юзновский И.Р. Интегрирование статистической суммы трехмерной модели Изинга в методе коллективных переменных. I // УФЖ. – 1977. – Т. 22, № 2. – С. 325–335.
- [303] Юзновский И.Р. Интегрирование статистической суммы трехмерной модели Изинга в методе коллективных переменных. II // УФЖ. – 1977. – Т. 22, № 3. – С. 484–493.

- [304] *Градштейн И.С., Рыжик И.М.* Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. – М.: Наука, 1971. – 1108 с.
- [305] *Южновский И.Р., Рудаковский Ю.К., Козловский М.П.* Исследование свойств "парциальных статистических сумм" в трехмерной модели Изинга. – Киев, 1976. – 28 с. – (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-76-122Р).
- [306] *Вакарчук И.А., Рудаковский Ю.К., Головач Ю.В.* Исследование модели " $\varphi^6$ " в рамках приближенного преобразования ренормализационной группы. – Киев, 1981. – 20 с. – (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-81-87Р).
- [307] *Козловский М.П.* Критические свойства модели Изинга. Модель  $\rho^6$ . Общие рекуррентные соотношения. – Киев, 1982. – 32 с. – (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-82-104Р).
- [308] *Козловский М.П.* Критические свойства модели Изинга. Модель  $\rho^6$ . Приближенный расчет. – Киев, 1982. – 39 с. – (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-82-80Р).
- [309] *Козловский М.П.* Критическое поведение трехмерной модели Изинга. Модель " $\rho^6$ " // Физика многочастич. систем. – 1983. – Вып. 4. – С. 37-44.
- [310] *Козловский М.П.* Решения уравнений ренормгруппы для системы изинговских спинов в модели  $\rho^6$ . – Киев, 1984. – 38 с. – (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-84-35Р).
- [311] *Южновский И.Р., Козловский М.П.* Рекуррентные соотношения в трехмерной модели Изинга // УФЖ. – 1977. – Т. 22, № 7. – С. 1125-1134.
- [312] *Южновский И.Р., Рудаковский 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).

- [313] Юзловский И.Р., Козловский М.П. Критический индекс для корреляционной длины в трехмерной модели Изинга // ДАН СССР. - 1977. - Т. 236, №4. - С. 846-849.
- [314] Юзловский И.Р., Козловский М.П. Ренормализационная группа в трехмерной модели Изинга. - Киев, 1978. - 35 с. - (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-78-128Р).
- [315] Kozlowsky M.P., Pylyuk I.V. Free energy and other thermodynamical functions above the second-order phase transition point. - Kiev, 1985. - 48 p. - (Preprint/Acad. Sci. Ukr. SSR. Inst. Theor. Phys.; ITP-85-23E).
- [316] Юзловский И.Р., Козловский М.П., Коломиец В.А. Исследование критических свойств трехмерной модели Изинга с помощью масштабных преобразований. - Киев, 1980. - 53 с. - (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-80-28Р).
- [317] Юзловский И.Р., Козловский М.П., Коломиец В.А. Аналитическое решение уравнений ренормализационной группы // УФЖ. - 1982. - Т. 27, №9. - С. 1399-1403.
- [318] Yukhnovskiy I.R. Solution of the three-dimensional Ising model in the temperature region below critical point. - Kiev, 1983. - 39 p. - (Preprint/Acad. Sci. Ukr. SSR. Inst. Theor. Phys.; ITP-83-85E).
- [319] Юзловский 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).
- [320] Юзловский И.Р., Козловский М.П., Коломиец В.А. О выборе оптимального способа деления фазового пространства коллективных переменных в трехмерной модели Изинга. - Киев, 1980. - 37 с. - (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-80-121Р).

- [321] Юзловский И.Р., Козловский М.П., Коломиец В.А. Численное интегрирование статистической суммы трехмерной модели Изинга методом коллективных переменных // УФЖ. - 1982. - Т. 27, № 6. - С. 925-930.
- [322] Ільницький Я.М., Козловський М.П. Процедура перерозкладу. Застосування до асимптотичних рядів теорії збурень. - Київ, 1990. - 16 с. - (Препринт/АН УРСР. Ін-т теорет. фізики; ІТФ-90-38У).
- [323] Козловский М.П., Ільницький Я.Н. Неуниверсальные термодинамические характеристики модели Изинга при размерности пространства близкой к четырем в методе коллективных переменных. - Киев, 1988. - 20 с. - (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-88-69Р).
- [324] Юзловский И.Р., Козловский М.П., Коломиец В.А. Расчет критических показателей трехмерной модели Изинга. - Киев, 1981. - 33 с. - (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-81-47Р).
- [325] Юзловский 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).
- [326] Козловский М.П., Пылюк И.В. Расчет поправок к скейлингу в выражениях для термодинамических функций модели Изинга. - Киев, 1989. - 29 с. - (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-89-24Р).
- [327] Пылюк И.В. Термодинамические функции трехмерного изинговского ферромагнетика в окрестности точки фазового перехода с учетом первой и второй конфлуентных поправок. - Киев, 1990. - 40 с. - (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-90-12Р).
- [328] Козловский М.П. Корреляционная длина в трехмерной модели Изинга // УФЖ. - 1978. - Т. 23, № 7. - С. 1057-1064.

- [329] *Козловский М.П.* Приближенные рекуррентные соотношения трехмерной модели Изинга в методе коллективных переменных. – Киев, 1981. – 41 с. – (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-81-82Р).
- [330] *Козловський М.П., Юхновський І.Р.* Метод самоузгодженого опису критичної поведінки тривимірних ізінгоподібних систем на мікроскопічному рівні. – Львів, 1997. – 96 с. – (Препринт/НАН України. Ін-т фізики конденсованих систем; ICMP-97-25U).
- [331] *Kozlovskii M.P., Dukhovii V.V., Pylyuk I.V.* Self-consistent description of the critical behaviour of three-dimensional Ising-like systems: the phase transition temperature as a function of microscopic parameters // *Ukr. J. Phys.* – 2000. – V. 45, N 4-5. – P. 512-514.
- [332] *Козловський М.П., Пылюк І.В., Усатенко З.Є.* Дослідження залежності температури фазового переходу ізінгоподібних систем від параметрів потенціалу взаємодії // *УФЖ.* – 1995. – Т. 40, № 10. – С. 1141-1149.
- [333] *Духовый В.В., Козловский М.П., Пылюк И.В.* Расчет на микроскопическом уровне уравнения состояния трехмерной модели Изинга // *ТМФ.* – 1996. – Т. 107, № 2. – С. 288-306.
- [334] *Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V., Usatenko Z.E.* Method of calculating the critical temperature of three-dimensional Ising-like system using the non-Gaussian distribution // *Phys. Stat. Sol. (b).* – 1996. – V. 197. – P. 465-477.
- [335] *Козловский М.П., Пылюк И.В., Юхновский И.Р.* Термодинамические функции трехмерной модели Изинга вблизи точки фазового перехода с учетом поправок к скейлингу. I. Случай  $T > T_c$  // *ТМФ.* – 1991. – Т. 87, № 2. – С. 293-316.
- [336] *Kozlovskii M.P., Dukhovii V.V., Pylyuk I.V.* Dependence of the critical temperature on microscopic parameters in the

- three-dimensional Ising-like systems // Cond. Matt. Phys. (Lviv). – 2000. – V. 3, N 4(24). – P. 727–736.
- [337] *Baker G.A., Jr.* Certain general order-disorder models in the limit of long-range interactions // Phys. Rev. – 1962. – V. 126, N 6. – P. 2071–2078.
- [338] *Ferer M., Wortis M.* High-temperature series and critical amplitudes for the spin-spin correlations of the three-dimensional Ising ferromagnet // Phys. Rev. B. – 1972. – V. 6, N 9. – P. 3426–3444.
- [339] *Reich W.* Determination of critical temperature for three-dimensional Ising systems // J. Phys. A. – 1984. – V. 17, N 18. – P. 3553–3558.
- [340] *Landau D.P.* Computer simulation studies of critical phenomena // Physica A. – 1994. – V. 205. – P. 41–64.
- [341] *Пылюк И.В.* Критическое поведение трехмерной изинговской системы. Зависимость термодинамических характеристик от микроскопических параметров // ТМФ. – 1998. – Т. 117, №3. – С. 442–470.
- [342] *Yukhnovskii I.R., Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V.* A method for the calculation of thermodynamic functions for the 3D model systems in the critical region // Z. Naturforsch. – 1991. – V. 46a. – P. 1–7.
- [343] *Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V.* Entropy and specific heat of the 3D Ising model as functions of temperature and microscopic parameters of the system // Phys. Stat. Sol. (b). – 1994. – V. 183. – P. 243–249.
- [344] *Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V., Dukhovii V.V.* Calculation method for the three-dimensional Ising ferromagnet thermodynamics within the frames of  $\rho^6$  model // Cond. Matt. Phys. (Lviv). – 1997. – N 11. – P. 17–49.

- [345] *Козловский М.П.* Область применимости ренормгрупповых соотношений при описании фазового перехода второго рода / В сб.: Труды совещания "Ренормгруппа-86". Д2-87-123. — Дубна: ОИЯИ, 1987. — С. 300-314.
- [346] *Козловский М.П., Ильницкий Я.Н., Пылюк И.В.* Свободная энергия и другие термодинамические функции трехмерной модели Изинга ниже точки фазового перехода. — Киев, 1985. — 33 с. — (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-85-107Р).
- [347] *Козловский М.П., Пылюк И.В.* Сравнение выражений для термодинамических функций модели Изинга при температурах выше и ниже критической в трехмерном пространстве. — Киев, 1989. — 35 с. — (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-89-42Р).
- [348] *Yukhnovsky I.R., Kozlovsky M.P., Shpot M.A.* Free energy, entropy and heat capacity in the critical region at  $T < T_c$ . — Kiev, 1984. — 40 p. — (Preprint/Acad. Sci. Ukr. SSR. Inst. Theor. Phys.; ITP-84-144E).
- [349] *Козловский М.П., Пылюк И.В., Юзюковский И.Р.* Термодинамические функции трехмерной модели Изинга вблизи точки фазового перехода с учетом поправок к скейлингу. II. Случай  $T < T_c$  // ТМФ. — 1991. — Т. 87, №3. — С. 434-455.
- [350] *Юзюковский И.Р., Козловский М.П., Пылюк И.В.* Учет поправки на усреднение потенциала в методе поэтапного вычисления статсуммы однокомпонентной спиновой системы вблизи  $T_c$ . — Киев, 1988. — 43 с. — (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-88-105Р).
- [351] *Юзюковский И.Р., Козловский М.П.* Корреляционная функция трехмерной модели Изинга вблизи точки фазового перехода. — Киев, 1989. — 21 с. — (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-89-69Р).
- [352] *Стасюк И.В.* Уравнение для спиновых корреляторов в модели Изинга // ФММ. — 1971. — Т. 41, №4. — С. 699-704.

- [353] *Aharony A., Fisher M.E.* Nonlinear scaling fields and corrections to scaling near criticality // *Phys. Rev. B.* - 1983. - V. 27, N 7. - P. 4397-4400.
- [354] *Пылюк И.В., Козловский М.П.* Исследование модели Изинга с использованием негауссовых базисных мер. - Киев, 1987. - 28 с. - (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-87-31Р).
- [355] *Козловский М.П.* Рекуррентные соотношения трехмерной модели Изинга в окрестности точки фазового перехода // *ДАН УССР. Сер. А.* - 1984. - № 10. - С. 58-61.
- [356] *Козловский М.П.* Неасимптотическая форма рекуррентных соотношений трехмерной модели Изинга // *ТМФ.* - 1989. - Т. 78, № 3. - С. 422-433.
- [357] *Пылюк И.В.* Критическое поведение трехмерной однокомпонентной спиновой системы в методе коллективных переменных при усложнении базисной меры. - Киев, 1988. - 33 с. - (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-88-107Р).
- [358] *Козловский М.П., Пылюк И.В.* Расчет критического показателя корреляционной длины трехмерной модели Изинга с использованием негауссовых базисных мер / В сб.: Труды Всесоюзной конф. "Современные проблемы статистической физики". Т. 2. - Киев: Наук. думка, 1989. - С. 50-56.
- [359] *Козловський М.П., Пилуок І.В.* Дослідження критичних характеристик тривимірної моделі Ізінга з використанням негауссових густин мір // *УФЖ.* - 1990. - Т. 35, № 1. - С. 146-147.
- [360] *Niemeijer Th., Van Leeuwen J.M.J.* Renormalization theory for Ising-like spin systems / In: *Phase Transitions and Critical Phenomena.* V. 6. Eds. Domb C., Green M.S. - New York: Academic Press, 1976. - P. 425-505.



- [361] *Burkhardt T.W., Van Leeuwen J.M.J.* Progress and problems in real-space renormalization // *Top. Curr. Phys.* – 1982. – V. 30, N 1. – P. 1–31.
- [362] *Kadanoff L.P., Houghton A., Yalabik M.C.* Variational approximation for renormalization group transitions // *J. Stat. Phys.* – 1976. – V. 14, N 2. – P. 171–203.
- [363] *Van Saarloos W., Van Leeuwen J.M.J.* Variational principles in renormalization theory // *Physica A.* – 1978. – V. 92, N 3–4. – P. 323–342.
- [364] *Droz M., Ausloos M., Gunton J.D.* Some difficulties associated with parameter-dependent renormalization-group transformations // *Phys. Rev. B.* – 1978. – V. 18, N 1. – P. 388–393.
- [365] *Юхновский И.Р., Козловский М.П., Коломиец В.А.* Исследование трехмерной модели Изинга с помощью масштабных преобразований // *УФЖ.* – 1982. – Т. 27, № 6. – С. 930–935.
- [366] *Козловский М.П., Пылюк И.В., Коломиец В.А.* Численное исследование статистической суммы трехмерной модели Изинга на основе шестерного базисного распределения. – Киев, 1984. – 41 с. – (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-84-177Р).
- [367] *Козловский М.П., Пылюк И.В.* Термодинамика трехмерного изинговского ферромагнетика в окрестности точки фазового перехода в рамках модели  $\rho^6$ . Сравнение с моделью  $\rho^4$ . – Киев, 1990. – 53 с. – (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-90-81Р).
- [368] *Tsypin M.M.* Universal effective potential for scalar field theory in three dimensions by Monte Carlo computation // *Phys. Rev. Lett.* – 1994. – V. 73, N 15. – P. 2015–2018.
- [369] *Tsypin M.M.* Effective potential for a scalar field in three dimensions: Ising model in the ferromagnetic phase // *Phys. Rev. B.* – 1997. – V. 55, N 14. – P. 8911–8917.

- [370] *Baker G.A., Jr., Kawashima N.* Renormalized coupling constant in the Ising model // *J. Phys. A.* – 1996. – V. 29, N 22. – P. 7183-7197.
- [371] *Kim J.-K.* Critical renormalized coupling constants in the symmetric phase of the Ising models // *J. Phys. A.* – 2000. – V. 33, N 14. – P. 2675-2684.
- [372] *Sokolov A.I., Ul'kov V.A., Orlov E.V.* On free energy of three-dimensional Ising model at criticality // *J. Phys. Stud. (Lviv).* – 1997. – V. 1, N 3. – P. 362-365.
- [373] *Sokolov A.I., Orlov E.V., Ul'kov V.A.* Universal sextic effective interaction at criticality // *Phys. Lett. A.* – 1997. – V. 227. – P. 255-258.
- [374] *Butera P., Comi M.*  $2n$ -point renormalized coupling constants in the three-dimensional Ising model: estimates by high temperature series to order  $\beta^{17}$  // *Phys. Rev. E.* – 1997. – V. 55, N 6. – P. 6391-6396.
- [375] *Пылюк И.В.* Описание критического поведения изинговского ферромагнетика в приближении модели  $\rho^6$  с учетом конфлуентной поправки. I. Область выше точки фазового перехода // *ФНТ.* – 1999. – Т. 25, № 11. – С. 1170-1185.
- [376] *Пылюк І.В., Козловський М.П.* Термодинамічні характеристики тривимірної ізингівської системи в наближенні моделі  $\rho^6$  з врахуванням конфлуентної поправки. I. Високотемпературна область. – Львів, 1997. – 34 с. – (Препринт/НАН України. Ін-т фізики конденсованих систем; ІСМР-97-06U).
- [377] *Козловський М.П., Пылюк И.В.* Расчет термодинамических функций вблизи точки фазового перехода в приближении шестерной базисной меры. – Киев, 1987. – 29 с. – (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ 87-9P).
- [378] *Пылюк І.В.* Спеціальні функції для дослідження критичних властивостей тривимірної моделі Ізинга в рамках шестирної густини міри // *УФЖ.* – 1996. – Т. 41, № 9. – С. 885-894.

- [379] *Bagnuls C., Berwillier C.* Critical confluent corrections: universality and estimates of amplitude ratios from field theory at  $d = 3$  // *Phys. Rev. B.* – 1981. – V. 24, N 3. – P. 1226–1235.
- [380] *Nicoll J.F., Albright P.C.* Background fluctuations and Wegner corrections // *Phys. Rev. B.* – 1986. – V. 34, N 3. – P. 1991–1996.
- [381] *Пилюк І.В., Козловський М.П.* Термодинамічні характеристики тривимірної ізінгівської системи в наближенні моделі  $\rho^6$  з врахуванням конфлуентної поправки. II. Низькотемпературна область. – Львів, 1997. – 32 с. – (Препринт/НАН України. Ін-т фізики конденсованих систем; ISMP-97-07U).
- [382] *Пылюк И.В.* Описание критического поведения изинговского ферромагнетика в приближении модели  $\rho^6$  с учетом конфлуентной поправки. II. Область ниже точки фазового перехода // *ФНТ.* – 1999. – Т. 25, № 12. – С. 1271–1281.
- [383] *Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V., Dukhovii V.V.* Calculation method for the three-dimensional Ising ferromagnet thermodynamics within the frames of  $\rho^6$  model. – 1999. – 41 p. – (Preprint cond-mat/9907468).
- [384] *Yukhnovskii I.R.* Phase Transitions of the Second Order. Collective Variables Method. – Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 1987. – 327 p.
- [385] *Мигдал А.Б.* Качественные методы в квантовой теории. – М.: Наука, 1975. – 335 с.
- [386] *Пылюк И.В., Козловский М.П.* Вклад конфлуентных поправок в термодинамику трехмерной модели Изинга // *Изв. АН СССР. Сер. физич.* – 1991. – V. 55, № 3. – С. 597–601.
- [387] *Barmatz M., Hohenberg P.C., Kornblit A.* Scaled-equation-of-state analysis of the specific heat in fluids and magnets near critical point // *Phys. Rev. B.* – 1975. – V. 12, N 5. – P. 1947–1968.

- [388] *Aharony A., Hohenberg P.C.* Universal relations among thermodynamic critical amplitudes // *Phys. Rev. B.* – 1976. – V. 13, N 7. – P. 3081–3090.
- [389] *Guida R., Zinn-Justin J.* Critical exponents of the N-vector model // *J. Phys. A.* – 1998. – V. 31, N 40. – P. 8103–8121.
- [390] *Folk R., Holovatch Yu., Yavors'kii T.* The correction-to-scaling exponent in dilute systems // *Письма в ЖЭТФ.* – 1999. – Т. 69, N 10. – С. 698–702.
- [391] *Kozlovskii M.P., Pylyuk I.V., Dukhovii V.V.* Equation of state of the 3D Ising model with an exponentially decreasing potential in the external field // *J. Magn. Magn. Mater.* – 1997. – V. 169. – P. 335–342.
- [392] *Guida R., Zinn-Justin J.* 3D Ising model: the scaling equation of state // *Nucl. Phys. B.* – 1997. – V. 489 [FS]. – P. 626–652.
- [393] *Юхновский И.Р., Ткачук В.М.* Малый критический индекс. I. Учет поправки, связанной с усреднением потенциала. – Киев, 1981. – 27 с. – (Препринт/АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-81-70Р).

## Предметний покажчик

Апроксиманти Паде, 23	197, 226, 227, 231,
Асимптотичний ряд, 20, 487, 490	250, 278, 292, 295, 298, 309, 311, 316, 321, 322, 329, 337, 349, 350, 352, 354, 355, 363-365, 382,
Багаточастинкові взаємодії, 51	387, 391, 393, 394, 397, 399, 408, 414, 425, 426, 433, 464, 465, 467, 471, 485, 493
Базисна густина міри, 37, 76, 77, 95, 96, 102, 103	
Базисний розподіл, 104, 105, 174, 270, 316, 317, 370, 378, 385	
Базисний розподіл, четвір- ний 30, 32, 107, 108, 111, 113, 129, 130, 151, 202, 203, 250, 270, 304, 357, 373	
Базисний розподіл, шестир- ний 30, 322, 373	
Блочна ґратка, 20, 115, 136, 258, 285	
Блочна структура, 133, 139, 168, 173, 175, 177, 182, 183, 193, 195,	
	<b>Вимірність простору, 20</b>
	Вільна енергія, 10, 11, 23, 24, 32, 33, 35, 37-39, 67, 75, 81, 85, 91, 101, 104, 107, 147, 176-178, 181, 183, 187-191, 193, 195, 199, 201-203, 207, 211, 212, 225, 227, 230, 233, 237-239, 241, 243, 246, 250,

- 252, 257–259, 261,  
268, 269, 293, 294,  
297, 299, 302, 347,  
386, 392–394, 405,  
407, 408, 413, 418,  
419, 424, 426, 428,  
433, 434, 436–438,  
443, 444, 459, 462,  
492, 495, 510, 519,  
524, 536
- Вільна енергія Ландау, 75,  
231, 236, 423, 437,  
438
- Віріальний ряд, 77, 84, 88
- Власні вектори, 10, 160, 330
- Внутрішня енергія, 33, 207,  
213, 225, 252, 386,  
405, 417, 418, 427,  
436, 444
- Гамільтоніан, 11, 15, 17–19,  
21, 27, 42, 45, 51, 54,  
65, 76, 105, 111, 112,  
129, 130, 149, 177,  
178, 193, 213, 226,  
249, 254, 255, 307,  
321, 398, 405, 433,  
458
- Гамільтоніан, блочний, 20,  
31, 34, 132, 136, 174,  
281, 349, 356
- Гамільтоніан Гінзбурга–  
Ландау, 30
- Гамільтоніан, модельний, 49
- Гамма-функція, 485
- Гаусова міра, 37, 78, 79, 85,  
89, 107, 179, 260, 269,  
303, 309, 393, 408,  
465
- Гаусовий розподіл, 36, 71,  
78, 102, 104, 108, 179,  
187, 385
- Гаусовий розподіл, ефектив-  
ний, 35
- Гіпотеза масштабної інварі-  
антності, 19, 20
- Граничний гаусовий режим,  
32, 177, 206, 299, 309,  
349, 364, 368, 378
- Груповий інтеграл, 36, 37,  
77, 89, 90
- Густина міри, 77, 118, 235
- Густина міри, ефективна,  
485
- Густина міри, негаусова, 390
- Густина міри, четвірна, 190,  
376, 386
- Густина міри, шестирна, 103,  
376, 390, 457, 471

- Густина спінового моменту, 41, 177, 207, 209, 243, 268, 337, 392, 408, 417, 424, 467
- Дипольний момент, 10
- Ефективна взаємодія, 15
- Екранований потенціал, 77, 83, 87–91, 103
- Ентропія, 11, 15, 16, 24, 33, 38, 204, 205, 211, 213, 225, 252, 268, 302, 386, 405, 417, 418, 423, 427, 436, 444, 447, 448
- Закони скейлінгу, 40
- Зона Бріллоуена, 30, 41, 43, 45, 46, 53, 114, 120, 124, 131, 155, 226, 415, 502, 504, 528
- Інверсний гаусовий режим, 32, 206, 239
- Колективні ефекти, 9, 37, 112
- Колективні змінні, 10, 66, 115, 190, 351
- Конфлуентна поправка, 195, 215, 256, 386, 400, 407, 447
- Кооперативні ефекти, 13
- Кореляційна довжина, 11, 22, 40, 185, 193, 209, 211, 228, 270, 299, 302, 304, 311, 329, 346, 368, 380, 387, 390, 422, 427, 447, 452, 463, 467, 519
- Кореляційна функція, 19, 20, 66, 67, 69, 90, 269, 270, 277, 309, 312, 352
- Кореляційна функція, бінарна, 34, 37, 69, 85, 88, 90, 99, 101, 303
- Кореляційна функція, парна, 40
- Кореляційний радіус, 305, 308
- Кристалічна ґратка, 9, 67
- Критична амплітуда, 203, 266, 305
- Критична область, 17, 19, 167, 170, 217, 231, 386, 457
- Критична опалесценція, 26

- Критична поведінка, 10  
Критична температура, 20,  
242, 299, 353, 355,  
475  
Критична точка, 9, 15, 18, 19,  
115, 147, 177, 464  
Критичний режим, 31, 170,  
178, 195, 225, 239,  
293–295, 356, 362,  
363, 368, 392, 463  
Критичні амплітуди, 11, 39,  
41, 217, 225, 257, 268,  
270, 307  
Критичний показник, 10, 14,  
19–21, 23–26, 32, 34,  
39–41, 105, 162, 178,  
188, 191, 209, 225,  
228, 268, 269, 302,  
307, 308, 336, 344,  
347, 352, 371, 373,  
385, 386, 428, 441,  
442, 452, 457, 462,  
463, 474, 503, 519  
Критичний показник коре-  
ляційної довжини,  
297, 302, 316, 329,  
337, 345, 346, 350,  
372, 381, 383, 390  
Критичний показник коре-  
ляційної функції,  
313  
Критичний показник тепло-  
ємності, 11, 23, 209  
Критичні явища, 13, 37  
Кумулянти, 58, 68, 83, 88,  
150  
Кумулянтний розклад, 68,  
221  
Квантова теорія поля, 13, 18  
Магнетики, 13, 17, 106  
Магнетне впорядкування, 16  
Магнетний момент, 15  
Магнетні системи, 10  
Макроскопічні параметри,  
10  
Матриця переходу, 203, 228,  
288, 291, 294, 302,  
310, 329, 337, 340,  
362–364  
Метод когерентної аномалії,  
26  
Метод колективних змінних,  
27, 28, 37, 52–60  
Метод Монте-Карло, 24, 25,  
217, 221, 387  
Метод перевалу, 237, 435, 438  
Метод ренормгрупи, 11, 25,  
221, 246, 347



- Мікроскопічний аналог вільної енергії Ландау, 11, 231
- Мікроскопічні параметри системи, 34, 211, 221, 213, 226, 231, 241, 252, 386, 418, 427, 435, 438, 444, 445, 455, 458, 473, 499
- Модель  $\rho^4$ , 35, 194, 206, 222, 268, 269, 315, 322, 329, 335, 336, 344–346, 350, 356, 371, 386, 412, 424, 442, 447, 452, 519
- Модель  $\rho^6$ , 35, 194, 203, 222, 268, 315, 323, 327–329, 333–336, 344, 350, 379, 380, 385–387, 390, 393, 397, 401, 412, 423, 424, 428, 429, 437, 439, 442, 443, 447, 452, 457, 459, 464, 466, 467, 519
- Модель  $\rho^8$ , 194, 203, 222, 268, 315, 319, 322, 337, 341, 344, 346, 387
- Модель  $\rho^{10}$ , 343, 344, 387
- Модель Берліна–Каца, 18
- Модель Вакса–Ларкіна, 18
- Модель Гайзенберга, 18
- Модель Ізінга, 10, 17–19, 22–24, 26, 29, 42, 51, 84, 190, 204, 220, 349, 373, 387, 388, 407, 408, 417, 422, 447, 459, 494
- Модель Поттса, 24
- Наближення середнього поля, 26**
- Негаусовий розподіл, 37
- Низькотемпературний розклад, 22
- Оператор переходу, 52, 56
- Параметр порядку, 10, 14, 16, 25, 29, 30, 32, 33, 37–39, 73, 104, 178, 226, 237, 238, 246, 258, 266, 391, 424, 437, 457, 460, 462, 463, 465, 472–476
- Параметр ренормгрупи, 142, 186, 323, 345, 347, 355, 359, 385, 387, 390, 401, 406, 418,

- 438, 441, 452, 490,  
494, 510, 522
- Перетворення Вільсона, 27
- Перехідна область, 196, 199,  
299, 408
- Попраки до скейлінгу, 11,  
191, 195, 203, 211,  
214, 217, 226, 242,  
264, 266, 268, 305,  
311, 336, 386, 393,  
445, 466, 477
- Постійна ґратки, 147, 163,  
209, 211, 222, 242,  
252, 388, 390, 398,  
443, 447, 459
- Потенціал взаємодії, 10, 30,  
42, 47, 49, 109, 130,  
214, 217, 270, 291,  
298, 304, 315, 328,  
386, 393, 398, 406,  
458, 459
- Процедура самоузгодження,  
267
- Радіус дії потенціалу, 11,  
212, 221, 242, 252,  
388, 424, 438, 441–  
443, 447, 458, 459
- Радіус ефективної дії, 42, 45
- Радіус кореляції, 15, 17, 78,  
89
- Рекурентні співвідношення,  
20, 136, 284, 285, 311,  
316, 321–323, 327,  
329, 337, 344, 483,  
485
- Рекурентні співвідношення  
Вільсона, 147, 487
- Ренормгрупова симетрія, 42,  
309
- Рівняння Ейлера, 30, 70, 147
- Рівняння стану, 457, 459, 462,  
470, 471, 474, 477
- Розклад високотемператур-  
ний, 22
- Розподіл флуктуацій, 15, 31,  
107, 108, 233, 315,  
316, 326
- Розподіл флуктуацій, бази-  
сний, 34
- Сегнетоелектрики, 10, 13, 17
- Середній спіновий момент,  
11, 14, 16, 238, 258,  
259, 267, 359, 424,  
433, 437, 438, 440,  
441, 447, 452, 455
- Симетрійні властивості, 41
- Спінова густина, 52, 393, 407,  
417, 424

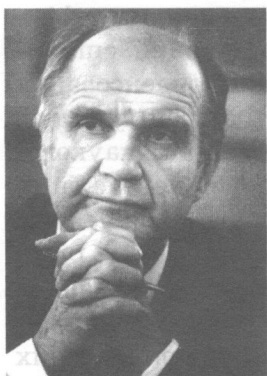
- Спінова модель, 34, 41, 202, 472
- Спінова система, 37, 42
- Спіновий момент, 10, 73, 112, 211, 231, 258, 386, 423
- Сприйнятливість, 11, 40, 225, 257, 267, 302, 304, 306, 308, 421–423, 443, 447, 452, 453
- Статистична механіка, 226
- Статистична сума, 14, 17, 30–34, 36, 39, 49, 55, 57, 64, 65, 69, 73, 75, 76, 78, 80, 90, 104, 106, 107, 109, 111, 112, 115, 117, 120, 122, 126, 130, 133–135, 137, 149, 150, 152, 177, 179, 187, 188, 226, 231, 254, 258, 270, 271, 276, 281, 282, 294, 303, 305, 307, 309, 312, 315–317, 320, 349, 351, 353, 360, 368, 370, 374, 378, 387, 390, 393, 394, 407, 408, 458, 463–465, 467, 486, 496, 499, 519
- Статистична сума, парціальна, 227
- Статистична фізика, 178
- Статистичний оператор, 54
- Теорія Ландау, 10, 165, 360, 464
- Теорія збурень, 9, 21, 25, 32, 104, 112, 174, 269, 277, 280, 315, 486
- Теорія критичних явищ, 20, 21
- Теорія магнетизму, 13
- Теорія середнього поля, 14, 19, 34, 41
- Теорія спінового скла, 18
- Теорія фазових переходів, 13, 14, 20, 25, 27, 41, 67, 203
- Теорія флуктуацій, 25
- Теплоємність, 11, 14–16, 21, 23, 33, 38, 40, 178, 187, 204, 207, 208, 211, 214, 215, 225, 242, 253, 254, 267, 268, 270, 297, 302, 386, 393, 405, 417,

- 418, 421–423, 427,  
436, 444, 447, 448,  
452
- Термодинамічний потенціал,  
13, 15
- Термодинамічні функції, 9–  
11, 15, 17, 20, 21, 26,  
32, 33, 36, 38, 130,  
162, 166, 176, 190,  
208, 210, 211, 214,  
225, 226, 229, 238,  
252, 267, 269, 270,  
285, 302, 315, 316,  
351, 390, 400, 405,  
417, 437, 444
- Умова самоузгодження, 263
- Фазовий перехід, 9–11, 16–  
20, 22, 25–27, 29, 32,  
36, 38, 47, 49, 75, 191,  
205, 211, 217, 218,  
221, 222, 225, 226,  
252, 253, 258, 268,  
269, 303, 315, 333,  
349, 353, 354, 375,  
385, 388, 391, 398,  
424, 437, 447, 459,  
463, 466
- Фазовий перехід, сегнетоеле-  
ктричний, 28
- Фазовий перехід, структур-  
ний, 28
- Фазовий простір, 17, 30, 37,  
41, 53, 69, 75, 114,  
117, 129, 135, 142,  
152, 220, 387, 427
- Феромагнетик, 15, 386, 424
- Флуктуації великомасшта-  
бні, 13
- Флуктуації довгохвильові,  
227, 231, 237, 239,  
258, 303, 394
- Флуктуації короткохвильові,  
239, 250, 268, 350,  
394
- Функції Бесселя, 485, 502,  
504
- Функції Макдональда, 110,  
138, 483
- Функція розподілу, 15, 41,  
312, 337, 352, 373,  
524
- Функція розподілу, бінарна,  
78

Фур'є-образ кореляційної  
функції, 303, 312

Фур'є-образ потенціалу, 30,  
45-49, 82, 89, 109,  
148, 150, 153, 194,  
204, 217, 219, 220,  
269, 270, 276, 286,  
291, 297, 302, 315,  
352, 374, 438, 443,  
458

Якобіан переходу, 56, 57, 60,  
61, 69, 75, 120, 127,  
149, 316, 351, 373,  
386



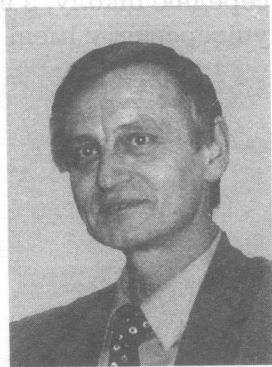
**Юхновський Ігор Рафаїлович**, академік НАН України, доктор фіз.-мат. наук, директор Інституту фізики конденсованих систем НАН України, голова Комітету Верховної Ради України з питань науки та освіти. Відомий український учений, автор шести монографій та понад 500 праць з теоретичної фізики, засновник Львівської наукової школи теоретичної фізики (серед його вихованців 13 докторів та понад 40 кандидатів фізико-математичних наук).

Розвинув метод колективних змінних, який нині успішно використовується для опису колективних ефектів у системах взаємодіючих частинок. У середині 1960-х років запропонував метод зміщень і колективних змінних для опису квантових систем взаємодіючих частинок. Статистичною теорією фазових переходів займається з 1970-х років. Основи методу, які він створив, заклали фундамент мікроскопічної теорії фазових переходів.

**Козловський Михайло Павлович**, доктор фіз.-мат. наук (з 1989 року), керівник відділу Інституту фізики конденсованих систем НАН України. У науковому доробку – понад 150 наукових праць.

Народився 1952 року на Волині в родині вчителів, навчався у Лобачівській середній школі, закінчив Львівський університет імені Івана Франка.

Спеціаліст у галузі теоретичної фізики, один з фундаторів нового підходу до опису фазових переходів у статистичній фізиці. Авторський метод опису критичної поведінки тривимірних систем успішно застосовується у дослідженні простих і багатокомпонентних статистичних систем та формує основи перспективного напрямку в сучасній теоретичній фізиці.





**Пилик Ігор Васильович**, кандидат фіз.-мат. наук, старший науковий співробітник Інституту фізики конденсованих систем НАН України. Фахівець у галузі статистичної фізики. Напрямок наукової діяльності – теорія фазових переходів та критичних явищ. Займається вивченням та описом на мікроскопічному рівні характерних ознак та особливостей фазового переходу другого роду, дослідженням критичної поведінки тривимірних ізінгоподібних систем (розрахунок універсальних та неуніверсальних величин, термодинаміки, аналіз залежності термодинамічних характеристик від мікроскопічних параметрів системи та ін.). Автор понад 50 наукових праць.

Член Українського фізичного товариства, Наукового товариства ім. Шевченка.

Народився 18 лютого 1957 р. на Львівщині (с. Гуменець Пустомитівського району). Закінчив із золотою медаллю Щирецьку середню школу, з відзнакою фізичний факультет Львівського університету імені Івана Франка.





## НАУКОВЕ ВИДАННЯ

*Ігор Рафаїлович Южновський,  
Михайло Павлович Козловський,  
Ігор Васильович Пиллюк*

**Мікроскопічна теорія фазових переходів у тривимірних системах.** – Львів: Євросвіт, 2001. – 592 с.: іл.  
ISBN 966-7343-26-X

Головний редактор *Галина Шопя*  
Художній редактор *Володимир Гавло*

УДК: 536.75, 538.9, 548:537.621, 538.955-405  
PACS: 05.50.+q, 05.70.Ce, 64.60.Fr, 75.10.Nk

Монографія присвячена методі прямого розрахунку основних характеристик тривимірних фізичних систем в інтервалі температур, що включає точку фазового переходу другого роду. Використовуючи явний вигляд гамільтоніану системи та якобіану переходу від вихідної системи індивідуальних координат частинок до нових (колективних) змінних, опис фазового переходу здійснюється з перших принципів.

Для тривимірної ізінгоподібної системи знайдені аналітичні вирази для критичної температури і термодинамічних функцій, встановлено їхній зв'язок з мікроскопічними параметрами системи.

Побудована теорія фазового переходу ґрунтується на використанні негаусових базисних мір і може бути застосована в широкому класі фізичних систем.

Здано до друку 07.02.2001. Підписано до друку 10.11.2001. Формат 60 × 84/16. Папір офсетний. Друк офсетний. Гарнітура Таймс. Умовн. друк. арк. 34,41. Умовн. фарбовідб. 34,91. Тираж 1000. Зам. 665-1.

СП “Євросвіт” 79005 м. Львів, а/с 6700

Надруковано з готових діапозитивів на Львівській державній  
книжковій фабриці “Атлас”  
79005 м. Львів, вул. Зелена, 20