

М.П. КОЗЛОВСЬКИЙ, І.В. ПИЛЮК

Інститут фізики конденсованих систем НАН України
(Вул. Свенціцького, 1, Львів 79011; e-mail: piv@ictp.lviv.ua)

АНАЛІТИЧНИЙ ОПИС КРИТИЧНОЇ ПОВЕДІНКИ ТРИВИМІРНОГО ОДНОВІСНОГО МАГНЕТИКА В ЗОВНІШНЬОМУ ПОЛІ З ВИДІЛЕННЯМ СИСТЕМИ ВІДЛІКУ

УДК 538.9, 537.611.2

Роботу присвячено теоретичному вивченню критичної поведінки систем класу універсальності тривимірної моделі Ізинга. Тривимірна ізингоподібна система з експоненційно спадним потенціалом взаємодії досліджується в методі колективних змінних за наявності однорідного зовнішнього поля. Характерною особливістю розрахунку статистичної суми та вільної енергії одновісного магнетика є виділення системи відліку. Роль останньої відіграє гамільтоніан молекулярного поля. Метод опису критичної поведінки з виділеною системою відліку розвинуто на основі негаусового (четвірного) розподілу флуктуацій параметра порядку (моделі ρ^4).

Ключові слова: модель Ізинга, критична поведінка, система відліку, негаусові розподіли, вільна енергія.

1. Вступ

Об'єктом дослідження даної статті є поведінка тривимірних ізингоподібних систем в околі критичної точки.

При розрахунку статистичної суми моделі Ізинга, подібно до вивчення критичної поведінки флюїдних систем [1], виділяється система відліку. Остання є деякою ідеалізованою фізичною системою, яка описує найбільш загальні риси досліджуваної системи і є достатньо простою. Вона не претендує на повний опис явища, в той самий час допускає точний (або достатньо загальний) розв'язок. Для флюїдів прикладом такої системи є сукупність пружних кульок. Для моделі Ізинга в ролі системи відліку пропонується використати модельну систему з гамільтоніаном середнього поля. Ідея такого підходу була запропонована в монографії [2], де було отримано складне рівняння для самоузгодженого поля, з точністю до четвертого ві-

ріального коефіцієнта. Однак у критичній області в кожному із віріальних коефіцієнтів виникають розбіжні інтеграли, що є наслідком використання гаусового базисного розподілу.

Метою даної роботи є побудова методу опису критичної поведінки, де гамільтоніан самоузгодженого поля використовується в ролі системи відліку, а розрахунок статистичної суми виконується з використанням негаусових розподілів флуктуацій параметра порядку.

Розвинутий у статті мікроскопічний опис критичної поведінки ізингоподібних систем може бути застосований для побудови теорії критичних явищ у різноманітних тривимірних системах. Теоретичний опис критичної поведінки реальних систем на певному етапі розрахунку зводиться до опису фазового переходу в деякій моделі [3]. Розвиток методу розрахунку основних термодинамічних та структурних характеристик одної із базових моделей фазового переходу – тривимірної моделі Ізинга – відкриває шлях до опису складніших фізичних си-

стем. Тому максимально повний розв'язок тривимірної ізингоподібної системи є ключем до опису критичної поведінки багатьох фізичних об'єктів.

Запропонована у даній роботі методика досліджень може знайти використання, зокрема, при вивченні кристалів з сильно анізотропними взаємодіями, магнітні моменти молекул яких можна вважати направленими тільки "вверх" або "вниз" (наприклад, FeCl_2 , FeCO_3) [4]. Прикладами ізингових (анізотропних) феромагнетиків також служать деякі рідкоземельні гідроксики $\text{R}(\text{OH})_3$ (такі як $\text{Tb}(\text{OH})_3$, $\text{Dy}(\text{OH})_3$, $\text{Ho}(\text{OH})_3$) та рідкоземельні літєві фториди LiRF_4 (LiTbF_4 , LiHoF_4) [5]. Прикладами ізингових антиферомагнетиків є рідкоземельні ортоалюмінати DyAlO_3 , TbAlO_3 , рідкоземельні алюмінати-гранати $\text{Dy}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$, $\text{Tb}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$. Модель Ізинга і реальні магнітні матеріали забезпечують зручну можливість взаємовигідної взаємодії теорії та експерименту [6].

2. Система відліку

Розрахуємо статистичну суму системи із гамільтоніаном

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \Phi(r_{ij}) \sigma_i \sigma_j - \mathcal{H} \sum_1 \sigma_1. \quad (1)$$

Тут $\sigma_i = \pm 1$ – спінова змінна, $\Phi(r_{ij}) = A \exp(-r_{ij}/b)$ – експоненційно спадний потенціал взаємодії, де A, b – сталі, r_{ij} – відстань між частинками. Підсумовування в (1) ведеться за вузлами простої кубічної ґратки з періодом c , \mathcal{H} – зовнішнє поле. Завдання полягає в розрахунку статистичної суми

$$Z = \text{Sp} e^{-\beta H} \quad (2)$$

та вільної енергії

$$F(T, \mathcal{H}) = -kT \ln Z(T, \mathcal{H}). \quad (3)$$

Тут $\beta = (kT)^{-1}$ – обернена температура. Розрахунок (2) будемо здійснювати в просторі колективних змінних (КЗ), побудованих на операторах

$$\hat{\rho}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_1 \sigma_1 e^{-i\mathbf{k}\mathbf{l}}, \quad \hat{\rho}_0 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_1 \sigma_1,$$

$$(\hat{\rho}_0)^2 = \frac{1}{N} \left(\sum_1 \sigma_1 \right)^2,$$

368

де N – число частинок у системі. Запишемо вираз (2) в представленні КЗ:

$$Z = \text{Sp} \left\{ \int (d\rho)^N e^{\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \beta \Phi(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + h \sum_1 \sigma_1} \times \prod_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \delta(\rho_{\mathbf{k}} - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}) \right\}. \quad (4)$$

Тут $h = \beta \mathcal{H}$, $\rho_{\mathbf{k}}$ – колективна змінна, означена в [2], $\Phi(\mathbf{k})$ – фур'є-образ потенціалу взаємодії, а під знаком добутку маємо дельта-функції. Підсумовування відбувається за хвильовими векторами, що належать до першої зони Бріллюена

$$\mathcal{B} \left\{ \mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) \mid k_i = -\frac{\pi}{c} + \frac{\pi}{c} \frac{n_i}{N_i}; \right. \\ \left. n_i = 1, 2, \dots, 2N_i, \quad i = x, y, z \right\}, \quad (5)$$

де величини N_i визначають загальне число частинок $N = N_x N_y N_z$.

Виділимо в (4) доданок $\frac{1}{2} \beta \Phi(0) \rho_0^2$ та замінимо його виразом

$$\frac{1}{2} \beta \Phi(0) \frac{1}{N} \left(\sum_1 \sigma_1 \right)^2.$$

Така операція справедлива, оскільки під знаком інтеграла в (4) присутня дельта-функція $\delta(\rho_0 - \hat{\rho}_0)$, яка дає змогу здійснювати взаємозаміну змінної ρ_0 та оператора $\hat{\rho}_0$. В результаті такої операції вираз (4) набуває вигляду

$$Z = \int (d\rho)^N e^{\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \beta \Phi(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}}} J_{RS}(\rho), \quad (6)$$

при цьому

$$J_{RS}(\rho) = \text{Sp} \left\{ e^{\frac{\beta \Phi(0)}{2N} \left(\sum_1 \sigma_1 \right)^2 + h \sum_1 \sigma_1} \prod_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \delta(\rho_{\mathbf{k}} - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}) \right\}. \quad (7)$$

Розрахуємо явний вигляд (7). Для цього скористаємося інтегральним представленням

$$\prod_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \delta(\rho_{\mathbf{k}} - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}) = \int (d\omega)^N \exp \left[2\pi i \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} (\rho_{\mathbf{k}} - \hat{\rho}_{\mathbf{k}}) \omega_{\mathbf{k}} \right], \quad (8)$$

де змінні $\omega_{\mathbf{k}}$ є спряженими до КЗ $\rho_{\mathbf{k}}$. Підставивши (8) в (7), знаходимо

$$J_{RS}(\rho) = \int (d\omega)^N e^{2\pi i \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}} \times$$

$$\times \text{Sp} \left\{ e^{\frac{\beta\Phi(0)}{2N} \left(\sum_1 \sigma_1 \right)^2 + h \sum_1 \sigma_1} e^{-2\pi i \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \omega_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}}} \right\}. \quad (9)$$

Покладемо у виразі (6) $\Phi(k) = 0$ при $k \neq 0$ і позначимо відповідну цій умові статистичну суму через Z_{RS} . Приходимо до відомого співвідношення для статистичної суми в наближенні молекулярного поля:

$$Z_{RS} = \text{Sp} \left\{ \exp \left[\frac{\beta\Phi(0)}{2N} \sum_{1,1'} \sigma_1 \sigma_{1'} + h \sum_1 \sigma_1 \right] \right\}. \quad (10)$$

Вільна енергія, що відповідає (10), набуває вигляду [4]

$$F = -kTN \left\{ \frac{1}{2} \ln \frac{4}{1 - M^2} \right\} + \frac{1}{2} \Phi(0) M^2. \quad (11)$$

Намагніченість на один вузол M в цьому наближенні задається виразом

$$M = \tanh [(\Phi(0)M + \mathcal{H})\beta], \quad (12)$$

який вперше було отримано в [7]. Легко бачити, що при $\mathcal{H} = 0$ маємо різні розв'язки для M при $T > T_{\text{СМ}}$ та $T < T_{\text{СМ}}$, де $T_{\text{СМ}}$ – температура фазового переходу в наближенні молекулярного поля $T_{\text{СМ}} = \Phi(0)/k$. Відмінний від нуля параметр порядку існує лише при $T < T_{\text{СМ}}$. Відповідно до (12) можна записати відоме співвідношення

$$\mathcal{H} = -\Phi(0)M + kT \operatorname{arctanh} M. \quad (13)$$

Повернемося до виразу (6), де виділена система відліку і не виконано жодних наближень. Скористаємося відомою тотожністю

$$e^{\frac{1}{2}\beta\Phi(0)\frac{1}{N}\left(\sum_1 \sigma_1\right)^2} = \left(\frac{N}{2\pi\beta\Phi(0)}\right)^{1/2} \times \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{N\varphi^2}{2\beta\Phi(0)} + \varphi \sum_1 \sigma_1\right) d\varphi, \quad (14)$$

яка має місце при $\Phi(0) > 0$. Тоді статистична сума системи зобразиться у вигляді

$$Z = \left(\frac{N}{2\pi\beta\Phi(0)}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi e^{-\frac{N\varphi^2}{2\beta\Phi(0)}} \int (d\rho)^N (d\omega)^N \times$$

$$\times \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} \beta\Phi(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} + 2\pi i \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}\right) \times \text{Sp} \left\{ e^{(h+\varphi) \sum_1 \sigma_1 - 2\pi i \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \omega_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N \sigma_l e^{-i\mathbf{k}l}} \right\}. \quad (15)$$

Виконуючи операцію Sp , знаходимо шукане представлення для статистичної суми в представленні КЗ з виділеною системою відліку:

$$Z = \left(\frac{N}{2\pi\beta\Phi(0)}\right)^{1/2} 2^N \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi e^{-\frac{N\varphi^2}{2\beta\Phi(0)}} \times \int (d\rho)^N (d\omega)^N e^{\frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} \beta\Phi(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - 2\pi i \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}} J_{\text{СМ}}(\omega). \quad (16)$$

Тут введено позначення

$$J_{\text{СМ}}(\omega) = \exp \left[\sum_1 \ln \cosh(\varphi + h - 2\pi i \omega_1) \right], \quad (17)$$

де

$$\omega_1 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \omega_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}l}. \quad (18)$$

Вираз (17) можна подати у формі кумулянтного розкладу

$$J_{\text{СМ}}(\omega) = \exp \left(\sum_{n \geq 0} D(\omega) \right). \quad (19)$$

Тут

$$D_n(\omega) = \frac{(-2\pi i)^n}{n!} \frac{\mathcal{M}_n(h, \varphi)}{N^{n/2-1}} \times \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}}} \omega_{\mathbf{k}_1} \dots \omega_{\mathbf{k}_n} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n}, \quad (20)$$

а $\delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n}$ – символ Кронекера. Для кумулянтів $\mathcal{M}_n(h, \varphi)$ маємо вирази

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_0 &= \ln \cosh(\varphi + h), & \mathcal{M}_1 &= \tanh(\varphi + h), \\ \mathcal{M}_2 &= 1 - \mathcal{M}_1^2, & \mathcal{M}_3 &= -2\mathcal{M}_1\mathcal{M}_2, \\ \mathcal{M}_4 &= -2\mathcal{M}_2 + 4\mathcal{M}_1^2\mathcal{M}_2, & & \\ \mathcal{M}_5 &= 16\mathcal{M}_1\mathcal{M}_2^2 - 8\mathcal{M}_1^3\mathcal{M}_2, & & \\ \mathcal{M}_6 &= 16\mathcal{M}_2^2 - 88\mathcal{M}_1^2\mathcal{M}_2^2 + 16\mathcal{M}_1^4\mathcal{M}_2, & \dots & \end{aligned} \quad (21)$$

Вираз (16), де $J_{\text{СМ}}$ задане в (19)–(21), є основою для подальших розрахунків. Кумулянти \mathcal{M}_n із (21) залежать від величини зовнішнього поля \mathcal{H} та деякого внутрішнього поля φ .

Для з'ясування природи поля φ покладемо $\beta\Phi(k) = 0$ для всіх $k \neq 0$, що має місце при нехтуванні внесками багаточастинкових взаємодій. Тоді з використанням (16) та

$$J_{CM}(\omega) = J_{CM}(0) = e^{N \ln \cosh(h+\varphi)} \quad (22)$$

знаходимо відповідний вираз для статистичної суми:

$$Z_0 = \left(\frac{N}{2\pi\beta\Phi(0)} \right)^{1/2} 2^N \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{N\varphi^2}{2\beta\Phi(0)} + N \ln \cosh(h+\varphi)} d\varphi. \quad (23)$$

Скориставшись із методу перевалу, отримаємо вільну енергію

$$F_0 = -kTN \left[-\frac{\bar{\varphi}^2}{2\beta\Phi(0)} + \ln \cosh(h + \bar{\varphi}) \right], \quad (24)$$

де величина $\bar{\varphi}$ визначається із рівняння

$$\bar{\varphi} = \beta\Phi(0) \tanh(h + \bar{\varphi}). \quad (25)$$

Порівнюючи (25) із (12), знаходимо

$$\bar{\varphi} = \beta\Phi(0)M. \quad (26)$$

Таким чином, середнє значення внутрішнього поля $\bar{\varphi}$ пов'язане із параметром порядку. Однак, на відміну від "введення" внутрішнього поля в методі молекулярного поля, даний підхід приводить до виразу (23), який передбачає процедуру інтегрування за всіма можливими полями φ з певною функцією розподілу.

У загальному випадку величина $\beta\Phi(k)$ є відмінною від нуля і саме це веде до впливу багаточастинкових взаємодій на формування фізичних величин поблизу точки фазового переходу другого роду. Для статистичної суми маємо представлення (16), де величина $J_{CM}(\omega)$ задана виразом (19), в якому присутні як парні, так і непарні кумулянти, які, в свою чергу, є функціями зовнішнього h та внутрішнього φ полів.

3. Часткові представлення статистичної суми з виділеною системою відліку

Функціональне представлення статистичної суми (16) є достатньо складним з точки зору подальшого інтегрування за змінною φ та визначення

залежності від зовнішнього поля h , оскільки кожна з цих величин входить до складу кумулянтів $\mathcal{M}_n(h, \varphi)$. Тому повернемося до виразу (15) і подамо його у вигляді

$$Z = \left(\frac{N}{2\pi\beta\Phi(0)} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi e^{-\frac{N\varphi^2}{2\beta\Phi(0)}} \int (d\rho)^N (d\omega)^N \times e^{\frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} \beta\Phi(k) \rho_k \rho_{-k}} e^{h\sqrt{N}\rho_0 + 2\pi i \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}} \times \text{Sp} \left\{ e^{\varphi \sum_l \sigma_l} \exp \left(-2\pi i \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \omega_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N \sigma_l e^{-i\mathbf{k}l} \right) \right\}. \quad (27)$$

В порівнянні з (15), експонента $\exp(h \sum_l \sigma_l)$ винесена в (27) з-під знака Sp, оскільки під інтегралом є множник $\delta(\rho_0 - \hat{\rho}_0)$, що дозволяє замінити оператор $\hat{\rho}_0$ на змінну ρ_0 . В результаті такої операції для статистичної суми отримуємо

$$Z = \left(\frac{N}{2\pi\beta\Phi(0)} \right)^{1/2} 2^N \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi e^{-\frac{N\varphi^2}{2\beta\Phi(0)}} \times \int (d\rho)^N (d\omega)^N e^{\frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} \beta\Phi(k) \rho_k \rho_{-k}} \times \exp \left(h\sqrt{N}\rho_0 + 2\pi i \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \right) J_{\varphi}(\omega), \quad (28)$$

де

$$J_{\varphi}(\omega) = \exp \left[\sum_{n \geq 0} \frac{(-2\pi i)^n}{n!} \frac{\mathcal{M}_n(\varphi)}{N^{n/2-1}} \times \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}}} \omega_{\mathbf{k}_1} \dots \omega_{\mathbf{k}_n} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n} \right]. \quad (29)$$

Кумулянти $\mathcal{M}_n(\varphi)$, на відміну від (21), залежать лише від внутрішнього поля φ , а залежність від зовнішнього поля присутня лише в доданку $h\sqrt{N}\rho_0$ показника експоненти підінтегрального виразу (28). Тут

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_0(\varphi) &= \ln \cosh \varphi, & \mathcal{M}_1(\varphi) &= \tanh \varphi \equiv x_{\varphi}, \\ \mathcal{M}_2(\varphi) &= 1 - x_{\varphi}^2 \equiv y_{\varphi}, & \mathcal{M}_3(\varphi) &= -2x_{\varphi}y_{\varphi}, \\ \mathcal{M}_4(\varphi) &= -2y_{\varphi} + 4x_{\varphi}^2y_{\varphi}, & & \\ \mathcal{M}_5(\varphi) &= 16x_{\varphi}y_{\varphi}^2 - 8x_{\varphi}^3y_{\varphi}, & & \\ \mathcal{M}_6(\varphi) &= 16y_{\varphi}^2 - 88x_{\varphi}^2y_{\varphi}^2 + 16x_{\varphi}^4y_{\varphi}, & \dots & \end{aligned} \quad (30)$$

Представлення (28) суттєво спрощує подальші розрахунки з точки зору встановлення залежності від зовнішнього поля, однак залежність кумулянтів від внутрішнього поля залишається.

Вираз (15) дає змогу записати також представлення для статистичної суми

$$Z = \left(\frac{N}{2\pi\beta\Phi(0)} \right)^{1/2} 2^N \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi e^{-\frac{N\varphi^2}{2\beta\Phi(0)}} \times \int (d\rho)^N (d\omega)^N e^{\frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} \beta\Phi(k)\rho_k \rho_{-k}} \times \exp \left(\varphi \sqrt{N} \rho_0 + 2\pi i \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \right) J_h(\omega), \quad (31)$$

де

$$J_h(\omega) = \exp \left[\sum_{n \geq 0} \frac{(-2\pi i)^n}{n!} \frac{M_n(h)}{N^{n/2-1}} \times \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}}} \omega_{\mathbf{k}_1} \dots \omega_{\mathbf{k}_n} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_n} \right]. \quad (32)$$

Кумулянти $M_n(h)$ мають вигляд (30), однак залежать від h , а не від φ .

Найбільш проста форма представлення статистичної суми із виділеною системою відліку задається формулою

$$Z = \left(\frac{N}{2\pi\beta\Phi(0)} \right)^{1/2} 2^N \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi e^{-\frac{N\varphi^2}{2\beta\Phi(0)}} \times \int (d\rho)^N (d\omega)^N e^{\frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} \beta\Phi(k)\rho_k \rho_{-k}} \times \exp \left[(\varphi + h) \sqrt{N} \rho_0 + 2\pi i \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \right] J(\omega), \quad (33)$$

де для якобіану переходу $J(\omega)$ маємо вираз

$$J(\omega) = \exp \left[\sum_{n \geq 1} \frac{(-2\pi i)^{2n}}{(2n)!} M_{2n} N^{1-n} \times \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{2n}} \omega_{\mathbf{k}_1} \dots \omega_{\mathbf{k}_{2n}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_{2n}} \right]. \quad (34)$$

Зауважимо, що всі непарні кумулянти в (33), а також кумулянт M_0 обертаються на нуль, а парні

кумулянти набувають таких конкретних числових значень [2]:

$$M_2 = 1, \quad M_4 = -2, \quad M_6 = 16, \quad \dots \quad (35)$$

Порівнюючи між собою отримані вище вирази, приходимо до важливого висновку. Функціональне представлення статистичної суми моделі Ізинга в зовнішньому полі при виділенні системи відліку (гамільтоніана молекулярного поля) може включати лише парні кумулянти, як це є в (33), або містити поряд з парними також і непарні кумулянти, як це має місце в (16), (28) та (31). Кожне із згаданих вище представлень є точним і може бути використане для проведення подальших розрахунків. Звичайно, що виконання конкретних обчислень вимагає обмеження скінченим числом доданків у показнику експоненти підінтегрального виразу. Для опису явищ поблизу точки фазового переходу другого роду слід брати до уваги всі доданки до четвертого степеня змінної включно [2]. Це дає змогу отримати якісну картину фазового переходу за наявності зовнішнього поля [8]. Врахування при розрахунках шостого степеня змінної дозволяє говорити про кількісні результати теорії [9]. Тому точність методу розрахунку необхідно пов'язувати лише з кількістю доданків (кумулянтів), які приймаються до уваги при проведенні розрахунку статистичної суми, а не з формою розподілу, який містить лише парні (чи непарні) степені змінної в показнику експоненти.

4. Наближення моделі ρ^4

Для подальших обчислень візьмемо за основу вираз (33), в якому обмежимося для $J(\omega)$ врахуванням доданків другого та четвертого степенів змінної $\omega_{\mathbf{k}}$. Тоді для статистичної суми системи будемо мати

$$Z = \left(\frac{N}{2\pi\beta\Phi(0)} \right)^{1/2} 2^N \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi e^{-\frac{N\varphi^2}{2\beta\Phi(0)}} \times \int (d\rho)^N (d\omega)^N e^{\frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} \beta\Phi(k)\rho_k \rho_{-k}} e^{(h+\varphi)\sqrt{N}\rho_0} \times \exp \left[2\pi i \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \omega_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} - \frac{(2\pi)^2}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \omega_{\mathbf{k}} \omega_{-\mathbf{k}} - \frac{(2\pi)^4}{12} \frac{1}{N} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}}} \omega_{\mathbf{k}_1} \dots \omega_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right]. \quad (36)$$

Виконаємо в (36) інтегрування за змінними $\omega_{\mathbf{k}}$. Використовуючи методику розрахунку із [10], отримуємо явний вигляд статистичної суми в наближенні моделі ρ^4 :

$$Z = \left(\frac{N}{2\pi\beta\Phi(0)} \right)^{1/2} 2^N e^{a_0 N} \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi e^{-\frac{N\varphi^2}{2\beta\Phi(0)}} \times \\ \times \int (d\rho)^N e^{\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \beta\Phi(\mathbf{k})\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}}} \times \\ \times \exp \left[(h + \varphi) \sqrt{N}\rho_0 - \frac{1}{2} a_2 \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}} \rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}} - \right. \\ \left. - \frac{1}{4!} \frac{a_4}{N} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right]. \quad (37)$$

Коефіцієнти a_{2l} обчислюються згідно з формулами

$$a_0 = \ln \left[(2\pi)^{-1/2} (3/2)^{1/4} e^{y^2/4} U(0, y) \right], \quad (38) \\ a_2 = (3/2)^{1/2} U(y), \quad a_4 = (3/2)\varphi(y),$$

де $U(y)$ та $\varphi(y)$ – комбінації функцій параболічного циліндра $U(a, y)$ [10], а аргумент набуває значення $y = (3/2)^{1/2}$. Тоді $a_0 = -1,0557$, $a_2 = 0,6449$, $a_4 = 0,1826$. Залежна від КЗ частина підінтегрального виразу за своїм функціональним виглядом подібна до аналогічного виразу роботи [8]. Є лише дві відмінності. Перша з них полягає в заміні безрозмірного поля h на величину

$$h_\varphi = h + \varphi. \quad (39)$$

Інша відмінність пов'язана із відсутністю в (37) доданка із $k = 0$. Це не є суттєвим з точки зору виконання поетапного розрахунку статистичної суми відповідно до методу Юхновського [2, 10]. Змінна ρ_0 задіяна в цьому процесі лише на заключному етапі розрахунку, тобто після точки виходу системи із критичного режиму флуктуацій. Тому відповідно до результатів роботи [8] для статистичної суми моделі із гамільтоніаном (1) маємо

$$Z = 2^N \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi e^{-\frac{N\varphi^2}{2\beta\Phi(0)}} e^{-\beta F_a - \beta F_{\text{CR}}^{(+)} - \beta F_{\text{TR}}} Z'(\varphi), \quad (40)$$

де аналітична частина вільної енергії F_a як функція відносної температури $\tau = (T - T_c)/T_c$ представляється у вигляді

$$F_a = -kTN(\gamma_0 + \gamma_1\tau + \gamma_2\tau^2) - \frac{1}{2}N\Phi(0)\bar{\Phi}. \quad (41)$$

Коефіцієнти γ_l та величина $\bar{\Phi}$ наведені в [8].

372

Для внеску до вільної енергії від критичного режиму флуктуацій одержуємо

$$F_{\text{CR}}^{(+)} = kTN_0\tilde{\gamma}^+ s^{-3(n_p+1)}. \quad (42)$$

Тут $N_0 = Ns_0^{-d}$, $d = 3$ – вимірність простору. Параметр s_0 визначає область значень хвильового вектора, де для фур'є-образу потенціалу $\Phi(k)$ справедлива параболічна апроксимація. Коефіцієнт $\tilde{\gamma}^+$ означений в [8], а s – параметр поділу фазового простору КЗ на шари. Для n_p маємо співвідношення

$$n_p + 1 = -\frac{\ln(\tilde{h}_\varphi + h_c)}{\ln E_1}, \quad (43)$$

де введені позначення

$$\tilde{h}_\varphi = s_0^{d/2}(h + |\varphi|)/h_0, \quad h_c = |\tilde{\tau}|^{p_0}, \quad (44)$$

причому

$$\tilde{\tau} = \tau(c_{1k}/f_0), \quad p_0 = \frac{\ln E_1}{\ln E_2}. \quad (45)$$

Тут E_1 та E_2 – більше та менше власні значення матриці лінійного перетворення ренормалізаційної групи. Величини c_{1k} та f_0 характеризують відповідно один із коефіцієнтів розв'язків рекурентних співвідношень та одну із координат фіксованої точки, а параметр h_0 задає умову нормування критичної амплітуди кореляційної довжини (при критичній температурі T_c).

Внесок до вільної енергії від перехідної області (від негаусових до гаусових флуктуацій параметра порядку) задовольняє формулу (див. [8])

$$F_{\text{TR}} = -kTN_0 f_{n_p+1} s^{-3(n_p+1)}. \quad (46)$$

Для $Z'(\varphi)$ із (40) маємо

$$Z' = 2^{(N_{n_p+2}-1)/2} [Q(P_{n_p+1})]^{N_{n_p+2}} Z_{n_p+2}, \quad (47)$$

де

$$Z_{n_p+2} = \int (d\rho)^{N_{n_p+2}} \exp \left[h_\varphi \sqrt{N}\rho_0 - \frac{1}{2} \sum'_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{n_p+2}} d_{n_p+2}(\mathbf{k})\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}} - \frac{a_4^{(n_p+2)}}{4!} N_{n_p+2}^{-1} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_i \in \mathcal{B}_{n_p+2}}} \rho_{\mathbf{k}_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_4} \right]. \quad (48)$$

Штрих біля суми означає, що при $k = 0$ виконується рівність

$$d_{n_p+2}(0) = a_2^{(n_p+2)}. \quad (49)$$

При всіх $k \neq 0$ справедливим є вираз

$$d_{n_p+2}(k) = a_2^{(n_p+2)} - \beta\Phi(0)(1 - 2b^2k^2). \quad (50)$$

Використаємо позначення

$$\begin{aligned} r_{n_p+2} &= (a_2^{(n_p+2)} - \beta\Phi(0))s^{2(n_p+2)}, \\ u_{n_p+2} &= a_4^{(n_p+2)}s^{4(n_p+2)}, \end{aligned} \quad (51)$$

де величини

$$\begin{aligned} r_{n_p+2} &= \beta\Phi(0)f_0(-1 + E_2H_c), \\ u_{n_p+2} &= (\beta\Phi(0))^2\varphi_0(1 + \Phi_fE_2H_c) \end{aligned} \quad (52)$$

розраховані в [8]. Виконуючи в (48) заміну змінних

$$\rho_{\mathbf{k}} = \eta_{\mathbf{k}} + \sqrt{N}\sigma\delta_{\mathbf{k}},$$

будемо мати

$$\begin{aligned} Z_{n_p+2} &= e^{NE_0(\sigma, \varphi)} \int (d\eta)^{N_{n_p+2}} \times \\ &\times \exp \left[A_0\sqrt{N}\eta_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{n_p+2}} \bar{d}(k)\eta_{\mathbf{k}}\eta_{-\mathbf{k}} - \right. \\ &- \frac{\bar{b}}{6} \frac{1}{\sqrt{N_{n_p+2}}} \sum_{\mathbf{k}_i \in \mathcal{B}_{n_p+2}} \eta_{\mathbf{k}_1} \dots \eta_{\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_1+\dots+\mathbf{k}_3} - \\ &\left. - \frac{a_4^{(n_p+2)}}{24} \frac{1}{N_{n_p+2}} \sum_{\mathbf{k}_i \in \mathcal{B}_{n_p+2}} \eta_{\mathbf{k}_1} \dots \eta_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1+\dots+\mathbf{k}_4} \right]. \end{aligned} \quad (53)$$

Тут

$$\begin{aligned} E_0(\sigma, \varphi) &= (\varphi + h)\sigma - \frac{1}{2}\sigma^2a_2^{(n_p+2)} - \\ &- \frac{u_{n_p+2}}{24}s_0^3s^{-(n_p+2)}\sigma^4, \\ A_0 &= (\varphi + h) - \sigma a_2^{(n_p+2)} - \frac{u_{n_p+2}}{6}s_0^3s^{-(n_p+2)}\sigma^3, \\ \bar{b} &= u_{n_p+2}s_0^{3/2}s^{-5/2(n_p+2)}\sigma. \end{aligned} \quad (54)$$

Як і в [8], величину зміщення σ шукатимемо із умови

$$\frac{\partial E_0(\sigma, \varphi)}{\partial \sigma} \equiv A_0 = 0. \quad (55)$$

Легко бачити, що при великих значеннях n_p (область критичних флуктуацій) розв'язком (55) є

$$\sigma = \frac{\varphi + h}{a_2^{(n_p+2)}}. \quad (56)$$

Порівнюючи значення величини зміщення (56) із відповідним виразом роботи [8] (де не виділяється система відліку), знаходимо принципову відмінність. Остання пов'язана із відсутністю доданка $\beta\Phi(0)\rho_0^2$ в показнику експоненти у виразі (48).

Підставляючи (56) у формулу для $E_0(\sigma, \varphi)$ із (54), отримуємо

$$E_0(\varphi) = \frac{1}{2} \frac{h_\varphi^2}{\bar{a}_2} - \frac{u_{n_p+2}s_0^3}{24\bar{a}_2^4} s^{-(n_p+2)} h_\varphi^4. \quad (57)$$

Тут введене позначення $\bar{a}_2 = a_2^{(n_p+2)}$. Коефіцієнт $\bar{d}(k)$ із виразу (53) при $k = 0$ задовольняє співвідношення

$$\bar{d}(0) = \bar{a}_2 + \frac{1}{2} u_{n_p+2}s_0^3s^{-(n_p+2)} \frac{h_\varphi^2}{\bar{a}_2^2}, \quad (58)$$

а при всіх $k \neq 0$ маємо

$$\begin{aligned} \bar{d}(k) &= r_{n_p+2}s^{-2(n_p+2)} + \frac{1}{2} u_{n_p+2}s_0^3s^{-(n_p+2)} \frac{h_\varphi^2}{\bar{a}_2^2} + \\ &+ 2\beta\Phi(0)b^2k^2. \end{aligned} \quad (59)$$

У випадку $T > T_c$ та малих значень поля коефіцієнт $r_{n_p+2} > 0$. Тому при обчисленні (53) можна використати гаусовий розподіл флуктуацій подібно до того, як це запропоновано в [8]. Результат обчислень внеску до вільної енергії від (47) зобразиться у вигляді

$$F'(\varphi) = -kTN \left[E_0(\varphi) + s_0^{-3}s^{-3}f_Gs^{-3(n_p+1)} \right], \quad (60)$$

де для f_G маємо вираз

$$\begin{aligned} f_G &= \frac{1}{2} \ln 2 - \frac{1}{4} \ln 3 + \ln s + \frac{1}{4} \ln u_{n_p+1} - \frac{1}{2} \ln r_R - \\ &- \frac{1}{2} \ln U(x_{n_p+1}) - \frac{3}{8} y_{n_p+1}^{-2} - \frac{1}{2} f_G''. \end{aligned} \quad (61)$$

Тут

$$\begin{aligned} r_R &= r_{n_p+2} + \frac{1}{2} \frac{u_{n_p+2}}{\bar{a}_2^2} s_0^3 s^{n_p+2} h_\varphi^2, \\ x_{n_p+1} &= d_{n_p+1}(B_{n_p+2}, B_{n_p+1}) \left(\frac{3}{a_4^{(n_p+1)}} \right)^{1/2}, \end{aligned}$$

$$y_{n_p+1} = s^{3/2} U(x_{n_p+1}) \left(\frac{3}{\varphi(x_{n_p+1})} \right)^{1/2},$$

$$d_{n_p+1}(B_{n_p+2}, B_{n_p+1}) = a_2^{(n_p+1)} - \beta \Phi(B_{n_p+2}, B_{n_p+1}). \quad (62)$$

Величина $\Phi(B_{n_p+2}, B_{n_p+1})$ є середнім значенням фур'є-образу потенціалу $\Phi(k)$ в діапазоні хвильових векторів $\mathbf{k} \in \mathcal{B}_{n_p+1} \setminus \mathcal{B}_{n_p+2}$. Для f_G'' знаходимо

$$f_G'' = \ln(1+a^2) - \frac{2}{3} + \frac{2}{a^2} - \frac{2}{a^3} \arctan a, \quad (63)$$

при цьому

$$a = \frac{\pi b}{s_0 c} \left(\frac{2\beta\Phi(0)}{r_R} \right)^{1/2}.$$

Приймаючи до уваги отримані вище вирази, записуємо статистичну суму моделі Ізинга з виділеною системою відліку:

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} d\varphi \exp \left[-\frac{\varphi^2 N}{2\beta\Phi(0)} - \beta F_a - \beta F_{CR}^{(+)} - \beta F_{TR} - \beta F'(\varphi) \right]. \quad (64)$$

Тут F_a описує аналітичну частину вільної енергії, яка не залежить від φ (див. (41)), $F_{CR}^{(+)}$ відповідає внеску від критичного режиму флуктуацій. Він задається формулою (42), де залежність від φ міститься у величині n_p із (43). Розрахунок (64) виконується методом перевалу. Рівняння на точку екстремуму $\bar{\varphi}$ підінтегрального виразу в (64) матиме вигляд

$$\left\{ \frac{\varphi + h}{\bar{a}_2} - \frac{\varphi}{\beta\Phi(0)} + \frac{\partial \gamma_s^{(+)}}{\partial \varphi} s^{-3(n_p+1)} - \frac{u_{n_p+2} s_0^3}{6\bar{a}_2^4} s^{-(n_p+2)} h_\varphi^3 - \ln s \frac{\partial n_p}{\partial \varphi} \times \right. \\ \left. \times \left[3\gamma_s^{(+)} s^{-3(n_p+1)} - \frac{u_{n_p+2} s_0^3}{24\bar{a}_2^4} s^{-(n_p+2)} h_\varphi^4 \right] \right\} \Big|_{\varphi=\bar{\varphi}} = 0. \quad (65)$$

В (65) враховані доданки, пропорційні до величини h_φ^4 , а $\gamma_s^{(+)} = s_0^{-3} (f_{n_p+1} - \bar{\gamma}^{(+)} + f_G/s^3)$.

Збираючи розраховані внески від усіх режимів флуктуацій, можемо тепер для температур $T > T_c$ записати повний вираз для вільної енергії системи:

$$F = F_a + F_s(\bar{\varphi}) + F_0^{(+)}. \quad (66)$$

Тут

$$F_s(\bar{\varphi}) = -kTN\gamma_s^{(+)} \left(\bar{h}_{\bar{\varphi}} + h_c \right)^{\frac{2d}{d+2}}, \quad (67)$$

а для $F_0^{(+)}$ маємо

$$F_0^{(+)} = -kTNE_0(\bar{\varphi}). \quad (68)$$

Значення величини $\bar{\varphi}$ отримується із (65). У випадку $\tau > \tau^*$ величина n_p є сталою (близькою до одиниці) і не залежить від h_φ , а отже, і від φ . Тому похідна від неї за φ обертається на нуль. Це ж стосується і величини $\gamma_s^{(+)}$. Рівняння (65) дає для $\bar{\varphi}$ результат теорії молекулярного поля. Для всіх $\tau < \tau^*$ отримуємо неаналітичну залежність $\bar{\varphi}$ від τ та h і відповідно до цього матимемо вираз для вільної енергії (66) в критичній області.

5. Висновки

Розроблено методику опису критичної поведінки тривимірного одновісного магнетика в зовнішньому полі, згідно з якою гамільтоніан самоузгодженого поля використовується як система відліку, а розрахунок статистичної суми здійснюється в наближенні четвірного розподілу флуктуацій параметра порядку. При цьому одержано і обговорено різні форми функціонального представлення статистичної суми з виділеною системою відліку. Кожна із таких форм є точною і може бути використана для здійснення подальших розрахунків. Вибір найбільш простої форми представлення статистичної суми з лише парними степенями змінної (до четвертого включно) дав змогу застосувати результати попередніх досліджень, які були отримані без виділення системи відліку. Виходячи із цієї найпростішої форми представлення, знайдено вільну енергію однокомпонентної спінової системи в критичній області.

Виконані дослідження поглиблюють знання про критичні властивості систем ізингового класу універсальності та служать також певним методологічним внеском у теоретичний опис критичних явищ.

Результати даної роботи, отримані для тривимірної ізингоподібної системи в зовнішньому полі, можуть виявитись корисними при описі критичних точок рідина–газ як однокомпонентного флюїду [11–13], так і бінарної флюїдної суміші (див., наприклад, [14]). Функціонал статистичної суми цих систем відповідає статистичній сумі моделі Ізинга в зовнішньому полі. Новим моментом при описі критичної точки рідина–газ в порівнянні з випадком моделі Ізинга є залежність великої статистичної суми від температури та хімічного потенціалу. Останній є рівнозначний включенню постійного зовнішнього поля в модель Ізинга.

1. И.Р. Юхновский, *Препринт Института теоретической физики, ИТФ-88-30Р* (ИТФ, Киев, 1988).
2. И.Р. Юхновский, *Фазовые переходы второго рода. Метод коллективных переменных* (Наукова думка, Киев, 1985).
3. I.R. Yuhnovskii, M.P. Kozlovskii, I.V. Pylyuk, *УФЖ* **57**, 83 (2012).
4. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике* (Мир, Москва, 1985).
5. А.К. Звездин, В.М. Матвеев, А.А. Мухин, А.И. Попов, *Редкоземельные ионы в магнитоупорядоченных кристаллах* (Наука, Москва, 1985).
6. W.P. Wolf, *Braz. J. Phys.* **30**, 794 (2000).
7. W.L. Bragg and E.J. Williams, *Proc. Roy. Soc. A* **145**, 699 (1934).
8. М.П. Козловський, *УФЖ. Огляди* **5**, 61 (2009).
9. I.R. Yuhnovskii, M.P. Kozlovskii, and I.V. Pylyuk, *Phys. Rev. B* **66**, 134410 (2002).
10. I.R. Yuhnovskii, M.P. Kozlovskii, I.V. Pylyuk, *Мікроскопічна теорія фазових переходів у тривимірних системах* (Євросвіт, Львів, 2001).
11. I.R. Yuhnovskii, *Physica A* **168**, 999 (1990).
12. I.R. Yuhnovskii, I.M. Idzyk, and V.O. Kolomiets, *J. Stat. Phys.* **80**, 405 (1995).
13. I.R. Yuhnovskii, *Condens. Matter Phys.* **17**, 43001 (2014).
14. M.P. Kozlovskii and O.V. Patsahan, *Condens. Matter Phys.* **3**, 607 (2000).

Одержано 24.12.14

М.П. Козловский, И.В. Пылюк

АНАЛИТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ ТРЕХМЕРНОГО ОДНООСНОГО МАГНЕТИКА ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ С ВЫДЕЛЕНИЕМ СИСТЕМЫ ОТСЧЕТА

Резюме

Работа посвящена теоретическому изучению критического поведения систем класса универсальности трехмерной модели Изинга. Трехмерная изингоподобная система с экспоненциально убывающим потенциалом взаимодействия исследуется в методе коллективных переменных в присутствии однородного внешнего поля. Характерной особенностью расчета статистической суммы и свободной энергии одноосного магнетика является выделение системы отсчета. Роль последней играет гамильтониан молекулярного поля. Метод описания критического поведения с выделенной системой отсчета развит на основе негауссова (четверного) распределения флуктуаций параметра порядка (модели ρ^4).

M.P. Kozlovskii, I.V. Pylyuk

ANALYTICAL DESCRIPTION OF THE CRITICAL BEHAVIOR OF A THREE-DIMENSIONAL UNIAXIAL MAGNET IN AN EXTERNAL FIELD BY SINGLING OUT A REFERENCE SYSTEM

Summary

The critical behavior of systems belonging to the universality class of the three-dimensional Ising model has been studied theoretically. A three-dimensional Ising-like system with exponentially decreasing interaction potential and in the presence of a homogeneous external field was considered in the framework of the collective variables method. A specific feature in the calculation of the partition function and the free energy of a uniaxial magnet consists in singling out a reference system. The role of the latter is played by the molecular-field Hamiltonian. A method to describe the critical behavior with the use of a singled out reference system is developed on the basis of a non-Gaussian (quartic) distribution of order-parameter fluctuations (the ρ^4 model).