

Описание критического поведения изинговского ферромагнетика в приближении модели ρ^6 с учетом конфлуентной поправки. II. Область ниже точки фазового перехода

И. В. Пылюк

*Институт физики конденсированных систем НАН Украины, Украина, 790011, г. Львов, ул. Свенцицкого, 1
E-mail: piv@icmp.lviv.ua*

Статья поступила в редакцию 15 декабря 1998 г., после переработки 9 июня 1999 г.

На основе шестерной плотности меры (модель ρ^6) описана схема расчета термодинамических характеристик трехмерной однокомпонентной спиновой системы в области температур ниже критической. Учитывается первая конфлуентная поправка. Вычислен микроскопический аналог свободной энергии Ландау. Для разных значений радиуса эффективного действия экспоненциально убывающего потенциала взаимодействия рассчитаны коэффициенты среднего спинового момента, основные критические амплитуды и амплитуды конфлуентной поправки теплоемкости и восприимчивости системы. Приведены графики температурных зависимостей энтропии и других термодинамических характеристик в окрестности T_c для различных значений указанного радиуса. Прослежено поведение в точке фазового перехода свободной энергии системы, среднего спинового момента, теплоемкости с ростом отношения радиуса действия потенциала к постоянной простой кубической решетки. Результаты проведенных расчетов, их сравнение с данными других авторов показывают, что модель ρ^6 по сравнению с моделью ρ^4 обеспечивает более адекватное количественное описание критического поведения трехмерного изинговского ферромагнетика.

На основі шестирної густини міри (модель ρ^6) описано схему розрахунку термодинамічних характеристик тривимірної однокомпонентної спінової системи в області температур нижчих від критичної. Враховується перша конфлуентна поправка. Обчислено мікроскопічний аналог вільної енергії Ландау. Для різних значень радіуса ефективної дії експоненціально спадного потенціалу взаємодії розраховано коефіцієнти середнього спінового моменту, основні критичні амплітуди та амплітуди конфлуентної поправки теплоємності і сприйнятливості системи. Приведено графіки температурних залежностей ентропії та інших термодинамічних характеристик поблизу T_c для різних значень вказаного радіуса. Простежено поведінку в точці фазового переходу вільної енергії системи, середнього спінового моменту, теплоємності із зростанням відношення радіуса дії потенціалу до сталої простої кубічної ґратки. Результати проведених розрахунків, їх порівняння з даними інших авторів показують, що модель ρ^6 в порівнянні з моделлю ρ^4 забезпечує більш адекватний кількісний опис критичної поведінки тривимірного ізінгівського феромагнетика.

PACS: 05.50.+q, 05.70.Ce, 64.60.Fr, 75.10.Nk

Введение

Настоящая работа посвящена теории фазовых переходов и критических явлений, которой в последнее время уделяется много внимания (см., например, [1–4]). Дальнейшее развитие получил подход к описанию фазовых переходов второго рода, основанный на методе коллективных переменных (КП) [5]. Объектом исследования является трехмерная модель Изинга на простой куби-

ческой решетке с экспоненциально убывающим потенциалом взаимодействия (см., например, [6]). Простая и удобная при математическом анализе модель Изинга широко применяется в теории фазовых переходов при исследовании свойств разнообразных магнитных и немагнитных систем (ферромагнетиков, антиферромагнетиков, сегнетоэлектриков, бинарных смесей, решеточной модели жидкости и др.).

Поведение трехмерного изинговского ферромагнетика в данной работе изучается при температурах $T < T_c$ (низкотемпературная область) в приближении высшего негауссова шестерного распределения мод колебаний спиновой плотности (модель ρ^6) [5]. В процессе расчета термодинамических характеристик указанной спиновой системы разработана методика учета первой конфлуентной поправки. Приведены графики зависимости этих характеристик от температуры и микроскопических параметров системы. Случай $T > T_c$ рассмотрен в [7]. Настоящая работа дополняет цикл работ [8–16], содержащих расчет методом коллективных переменных (КП) термодинамических функций трехмерной изинговской системы в низкотемпературной области, причем в [8] вычисления выполнены в рамках модели ρ^4 без учета конфлуентных поправок, в [9–14] — с учетом первой и второй конфлуентных поправок, а в [15,16] — в приближении модели ρ^6 без учета конфлуентных поправок.

Описанный в данной статье метод расчета термодинамических характеристик однокомпонентной спиновой системы может быть распространен на n -компонентную модель, применяемую при размерности спина $n = 2$ в качестве решеточной модели перехода бозе-жидкости в сверхтекучее состояние. Основные моменты такого обобщения на n -компонентный случай изложены в [5].

1. Схема расчета свободной энергии системы при $T < T_c$

Как и при $T > T_c$ [7], свободную энергию системы будем вычислять, разделяя вклады коротко- и длинноволновых мод колебаний спиновой плотности. Для нее при $T < T_c$ имеем

$$F = F_0 + F_{CR} + F_{IGR}, \quad (1)$$

где $F_0 = -kTN \ln 2$ соответствует свободной энергии N невзаимодействующих спинов, F_{CR} — вкладу в свободную энергию системы коротковолновых мод колебаний плотности спинового момента (область критического режима (КР)), а F_{IGR} — вкладу длинноволновых мод колебаний (область инверсного гауссова режима (ИГР)).

При расчете свободной энергии системы используются решения рекуррентных соотношений (РС) между коэффициентами эффективных шестерных распределений (см., например, [17]). В области КР справедливы решения РС ренорм-группового (РГ) типа. Инверсный гауссов режим, в отличие от предельного гауссова режима (ПГР) при $T > T_c$, описывается негауссовой плотностью

меры. Следует подчеркнуть, что в случае $T < T_c$ в системе возникает отличный от нуля параметр порядка. Он не вводится как независимая величина, а определяется в результате непосредственного расчета. Это возможно, поскольку среди множества КП содержится переменная ρ_0 , связанная с параметром порядка. Только в результате выделения свободной энергии упорядочения распределение принимает гауссов характер.

При вычислении статистической суммы модели Изинга фазовое пространство КП разбивается на слои с параметром деления s и используется соответствующее данному слою среднее значение фурье-образа потенциала взаимодействия (в данном случае среднее арифметическое) [5]. Коротко- и длинноволновые моды колебаний спиновой плотности при $T < T_c$ разделяет номер слоя μ_τ . Критический режим имеет место для слоев фазового пространства КП $n \leq \mu_\tau$, а ИГР — для $n > \mu_\tau$. Условием для определения μ_τ служит равенство [6,18]

$$\frac{r_{\mu_\tau+1} - r^{(0)}}{r^{(0)}} = \delta. \quad (2)$$

Здесь δ — постоянная величина ($\delta \leq 1$); $r_{\mu_\tau+1}$ определяется из решений РС; $r^{(0)}$ соответствует одной из координат фиксированной точки [17]. В численных расчетах будем полагать $\delta = 1$, что согласуется с таким же условием для δ , использованным нами при $T > T_c$ [7]. Аналогично случаю $T > T_c$ [7] находим выражение для μ_τ :

$$\mu_\tau = \mu_\tau^{(0)} - m_{\Delta_1} |\tau|^{\Delta_1}, \quad (3)$$

$$\mu_\tau^{(0)} = -\frac{\ln |\tau|}{\ln E_1} + \mu_0 - 1, \quad \mu_0 = m_c.$$

Величины m_{Δ_1} , Δ_1 , m_c совпадают с соответствующими величинами при $T > T_c$ (см. [7]); $\tau = (T - T_c)/T_c$; E_1 — наибольшее собственное значение матрицы линейного преобразования РГ.

Выражение для слоя μ_τ , определяющего точку выхода системы из участка КР при $T < T_c$, позволяет найти как F_{CR} , так и F_{IGR} . Рассмотрим эти расчеты схематически. Отметим, что вычисление термодинамических характеристик проводится с учетом слагаемого, пропорционального $|\tau|^{\Delta_1}$ и определяющего первую конфлуентную поправку.

2. Термодинамические функции системы, соответствующие области критического режима

Подобно случаю $T > T_c$ расчет вклада в свободную энергию системы области КР F_{CR} осуществляется с помощью суммирования парциальных свободных энергий по слоям фазового пространства КП. Используя (3) и явно выделяя при расчете температуру, приходим к выражению

$$F_{CR} = -kTN' [\gamma_0^{(CR)} - \gamma_1|\tau| + \gamma_2|\tau|^2 - \gamma_3^{(CR)(0)-}|\tau|^{3\nu} - \gamma_3^{(CR)(1)-}|\tau|^{3\nu+\Delta_1}], \quad (4)$$

где $\nu = \ln s / \ln E_1$ — критический показатель корреляционной длины; N' и зависящие от микроскопических параметров системы $\gamma_0^{(CR)}$, γ_1 и γ_2 такие же, как и при $T > T_c$ [7,17]. Коэффициенты $\gamma_3^{(CR)(l)-}$ представим в форме, где выделен универсальный множитель $\bar{\gamma}_3^{(CR)(l)-}$, не зависящий от микроскопических параметров системы. К последним в нашем случае относятся параметры экспоненциально убывающего потенциала взаимодействия (радиус действия потенциала b , фурье-образ потенциала $\bar{\Phi}(0)$ при нулевом значении волнового вектора) и постоянная простой кубической решетки c . Имеем

$$\gamma_3^{(CR)(l)-} = c_v^3 c_{\Delta_1}^l \bar{\gamma}_3^{(CR)(l)-}, \quad l = 0, 1, \quad (5)$$

$$\bar{\gamma}_3^{(CR)(0)-} = \bar{\gamma}^-, \quad \bar{\gamma}_3^{(CR)(1)-} = \bar{\gamma}_{\Delta_1}^- - \Phi_0(\bar{\gamma}_{11}^- + 3\nu\bar{\gamma}^-).$$

Здесь

$$\bar{\gamma}^- = \frac{f_{CR}^{(0)}}{1-s^{-3}} - \frac{f_{CR}^{(1)}\Phi_0^{-1/2}f_0\delta}{1-E_1s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(7)}\Phi_0^{-1}(f_0\delta)^2}{1-E_1^2s^{-3}},$$

$$\bar{\gamma}_{\Delta_1}^- = \frac{f_{CR}^{(2)}\Phi_0^{-1}}{1-E_2s^{-3}} - \frac{f_{CR}^{(4)}\Phi_0^{-3/2}f_0\delta}{1-E_1E_2s^{-3}} + \frac{f_{CR}^{(8)}\Phi_0^{-2}(f_0\delta)^2}{1-E_1^2E_2s^{-3}}, \quad (6)$$

$$\bar{\gamma}_{11}^- = \frac{f_{CR}^{(1)}\Phi_0^{-1/2}f_0\delta}{1-E_1s^{-3}} - \frac{2f_{CR}^{(7)}\Phi_0^{-1}(f_0\delta)^2}{1-E_1^2s^{-3}}.$$

Неуниверсальные множители c_v , c_{Δ_1} , множитель Φ_0 , собственные значения E_l матрицы РГ преобразования, выражения для трех координат фиксированной точки и характеризующих их величин (в том числе и для f_0 , Φ_0), а также для $f_{CR}^{(i)}$,

зависящих от значений переменных в фиксированной точке, приведены в работе [17].

Дифференцируя выражение F_{CR} (4) по температуре, находим следующие выражения для энтропии S_{CR} , внутренней энергии U_{CR} и теплоемкости C_{CR} в области КР:

$$S_{CR} = kN' [s^{(CR)(0)} - c_0|\tau| + u_3^{(CR)(0)-}|\tau|^{1-\alpha} + u_3^{(CR)(1)-}|\tau|^{1-\alpha+\Delta_1}],$$

$$U_{CR} = kTN' [\gamma_1 - u_1|\tau| + u_3^{(CR)(0)-}|\tau|^{1-\alpha} + u_3^{(CR)(1)-}|\tau|^{1-\alpha+\Delta_1}], \quad (7)$$

$$C_{CR} = kN' [c_0 - c_3^{(CR)(0)-}|\tau|^{-\alpha} - c_3^{(CR)(1)-}|\tau|^{\Delta_1-\alpha}],$$

где $\alpha = 2 - 3\nu$ — критический показатель теплоемкости;

$$u_3^{(CR)(l)-} = c_v^3 c_{\Delta_1}^l \bar{u}_3^{(CR)(l)-}, \quad l = 0, 1;$$

$$\bar{u}_3^{(CR)(0)-} = 3\nu\bar{\gamma}_3^{(CR)(0)-};$$

$$\bar{u}_3^{(CR)(1)-} = (3\nu + \Delta_1)\bar{\gamma}_3^{(CR)(1)-};$$

$$c_3^{(CR)(l)-} = c_v^3 c_{\Delta_1}^l \bar{c}_3^{(CR)(l)-}; \quad (8)$$

$$\bar{c}_3^{(CR)(0)-} = 3\nu(3\nu - 1)\bar{\gamma}_3^{(CR)(0)-};$$

$$\bar{c}_3^{(CR)(1)-} = (3\nu + \Delta_1)(3\nu + \Delta_1 - 1)\bar{\gamma}_3^{(CR)(1)-}.$$

Остальные коэффициенты задаются соответствующими выражениями, полученными при рассмотрении температур выше T_c [7,17].

3. Термодинамические функции системы, соответствующие области инверсного гауссова режима

Для вклада в свободную энергию системы области ИГР

$$F_{IGR} = -kTN's^{-3(\mu_\tau+1)} \ln [\sqrt{2}Q(P_{\mu_\tau})] - kT \ln Z_{\mu_\tau+1} \quad (9)$$

запишем окончательный результат. Расчеты первого и второго слагаемых в (9), связанные с вычислениями

$$\sqrt{2} Q(P_{\mu_\tau}) = \left(\frac{4s^3 u_{\mu_\tau} s^{-4\mu_\tau}}{\pi^4 C(h_{\mu_\tau}, \alpha_{\mu_\tau})} \right)^{1/4} I_0(\eta_{\mu_\tau}, \xi_{\mu_\tau}) \quad (10)$$

и

$$Z_{\mu_\tau+1} = \int \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{k \leq B_{\mu_\tau+1}} d_{\mu_\tau+1}(k) \rho_k \rho_{-k} - \sum_{l=2}^3 \frac{a_{2l}^{(\mu_\tau+1)}}{(2l)! N_{\mu_\tau+1}^{l-1}} \sum_{k_1, \dots, k_{2l} \leq B_{\mu_\tau+1}} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_{2l}} \delta_{k_1 + \dots + k_{2l}} \right] (d\rho)^{N_{\mu_\tau+1}}, \quad (11)$$

подробно изложены в работе [18] (для модели ρ^4 см. [13]). Получаем

$$F_{IGR} = -kTN' [\gamma_{IGR}^{(0)} |\tau|^{3\nu} + \gamma_{IGR}^{(1)} |\tau|^{3\nu+\Delta_1}], \quad (12)$$

$$\gamma_{IGR}^{(l)} = \gamma_3^{(l)(\mu_\tau)} + \gamma_3^{(l)(\sigma)}, \quad l = 0, 1.$$

Слагаемое $\gamma_3^{(l)(\mu_\tau)}$ определяет свободную энергию после выхода из КР, $\gamma_3^{(l)(\sigma)}$ — свободную энергию упорядочения. Эти слагаемые вычисляются по формулам

$$\gamma_3^{(l)(\mu_\tau)} = \gamma_g^{(l)} + \gamma_p^{(l)}, \quad \gamma_g^{(l)} = c_v^3 c_{\Delta_1}^l \bar{\gamma}_g^{(l)}, \quad \gamma_p^{(l)} = c_v^3 c_{\Delta_1}^l \bar{\gamma}_p^{(l)}, \quad (13)$$

$$\gamma_3^{(l)(\sigma)} = c_v^3 c_{\Delta_1}^l \bar{\gamma}_3^{(l)(\sigma)}.$$

Выражения для не зависящих от микроскопических параметров величин $\bar{\gamma}_g^{(l)}$, $\bar{\gamma}_p^{(l)}$, $\bar{\gamma}_3^{(l)(\sigma)}$ приведены в [18].

Энтропию S_{IGR} , внутреннюю энергию U_{IGR} , теплоемкость C_{IGR} , соответствующие ИГР, запишем в виде

$$S_{IGR} = S_{\mu_\tau} + S_{\langle\sigma\rangle}, \quad U_{IGR} = U_{\mu_\tau} + U_{\langle\sigma\rangle}, \quad (14)$$

$$C_{IGR} = C_{\mu_\tau} + C_{\langle\sigma\rangle}.$$

Составляющие этих термодинамических характеристик удовлетворяют соотношениям

$$S_\eta = -kN' [u_3^{(0)(\eta)} |\tau|^{1-\alpha} + u_3^{(1)(\eta)} |\tau|^{1-\alpha+\Delta_1}],$$

$$U_\eta = -kTN' [u_3^{(0)(\eta)} |\tau|^{1-\alpha} + u_3^{(1)(\eta)} |\tau|^{1-\alpha+\Delta_1}],$$

$$C_\eta = kN' [c_3^{(0)(\eta)} |\tau|^{-\alpha} + c_3^{(1)(\eta)} |\tau|^{\Delta_1-\alpha}], \quad (15)$$

$$u_3^{(l)(\eta)} = c_v^3 c_{\Delta_1}^l \bar{u}_3^{(l)(\eta)}, \quad l = 0, 1,$$

$$\bar{u}_3^{(0)(\eta)} = 3\nu \bar{\gamma}_3^{(0)(\eta)}, \quad \bar{u}_3^{(1)(\eta)} = (3\nu + \Delta_1) \bar{\gamma}_3^{(1)(\eta)},$$

$$c_3^{(l)(\eta)} = c_v^3 c_{\Delta_1}^l \bar{c}_3^{(l)(\eta)}, \quad \bar{c}_3^{(0)(\eta)} = 3\nu(3\nu - 1) \bar{\gamma}_3^{(0)(\eta)},$$

$$\bar{c}_3^{(1)(\eta)} = (3\nu + \Delta_1)(3\nu + \Delta_1 - 1) \bar{\gamma}_3^{(1)(\eta)}.$$

Индекс η может принимать два значения: μ_τ и $\langle\sigma\rangle$. Здесь $\bar{\gamma}_3^{(l)(\mu_\tau)} = \bar{\gamma}_g^{(l)} + \bar{\gamma}_p^{(l)}$ ($l = 0, 1$), а $\bar{\gamma}_3^{(l)(\sigma)}$ — универсальные множители, входящие в $\gamma_3^{(l)(\sigma)}$ (см. (13)).

Таким образом, рассчитана свободная энергия в области ИГР. Исходя из выражения для F_{IGR} (12), вычислены другие термодинамические функции, соответствующие ИГР. Выражение (12) содержит свободную энергию упорядочения, которая находится в результате интегрирования по КП ρ_0 , среднее значение которой пропорционально параметру порядка — одной из существенных характеристик фазового перехода.

4. Параметр порядка трехмерной изинговской системы

Роль параметра порядка исследуемой системы играет средний спиновый момент. Он обусловлен наличием ниже температуры фазового перехода отличного от нуля значения $\bar{\rho}_0$, при котором имеет место экстремум подынтегрального выражения

$$Z_{\mu_\tau+1} = \exp(-\beta F'_{\mu_\tau+1}) \times$$

$$\times \int \exp \left[\beta \sqrt{N} \rho_0 h + \tilde{B} \rho_0^2 - \frac{G}{N} \rho_0^4 - \frac{D}{N^2} \rho_0^6 \right] d\rho_0, \quad (16)$$

где $\beta = 1/(kT)$ — обратная термодинамическая температура, h определяется введенным в рассмотрение значением постоянного внешнего поля \mathcal{H} ($h = \mu_B \mathcal{H}$, μ_B — магнетон Бора). Выражение для $-\beta F'_{\mu_\tau+1}$, соответствующее вкладу в свободную энергию системы от ρ_k , со значениями волновых векторов $k \rightarrow 0$, причем $k \neq 0$, а также коэффициенты

$$\tilde{B} = \tilde{B}^{(0)} |\tau|^{2\nu} \beta \tilde{\Phi}(0) (1 + \tilde{B}^{(1)} |\tau|^{\Delta_1}),$$

$$G = G^{(0)} |\tau|^\nu (\beta \tilde{\Phi}(0))^2 (1 + G^{(1)} |\tau|^{\Delta_1}), \quad (17)$$

$$D = D^{(0)} (\beta \tilde{\Phi}(0))^3 (1 + D^{(1)} |\tau|^{\Delta_1})$$

приведены в [18]. После выполнения в (16) замены переменной

$$\rho_0 = \sqrt{N} \rho \quad (18)$$

получаем

$$Z_{\mu_{\tau}+1} = \exp(-\beta F'_{\mu_{\tau}+1}) \sqrt{N} \int \exp(-NE_0(\rho)) d\rho, \quad (19)$$

и расчет параметра порядка состоит в нахождении точки экстремума $\bar{\rho}$ выражения

$$E_0(\rho) = D\rho^6 + G\rho^4 - \tilde{B}\rho^2 - \beta h\rho. \quad (20)$$

Величина $\bar{\rho}$ совпадает со средним значением ρ , отвечающим равновесному значению параметра порядка [5,15,16]. Выражение $E_0(\rho)$ определяет ту часть свободной энергии, которая связана с параметром порядка. Оно соответствует микроскопическому аналогу свободной энергии Ландау. Через $E_0(\bar{\rho})$ (совпадающее по форме с разложением свободной энергии в ряд по степеням параметра порядка) будет выражаться $Z_{\mu_{\tau}+1}$ после использования метода перевала для вычисления интеграла в (19) (см. [18]).

Выражение (20) получено путем последовательного исключения из рассмотрения «несущественных» переменных ρ_k с $k \neq 0$, что позволило вычислить коэффициенты $E_0(\rho)$ (см. табл. 1).

Таблица 1

Величины, определяющие коэффициенты в выражении для микроскопического аналога свободной энергии Ландау

b	$\tilde{B}^{(0)}$	$\tilde{B}^{(1)}$	$G^{(0)}$	$G^{(1)}$	$D^{(0)}$	$D^{(1)}$
$s = 2,0000$						
b_I	1,0106	-0,2733	0,0550	-0,8919	0,0009	-0,6952
b_{II}	0,9530	-0,3959	0,0857	-1,2918	0,0023	-0,9377
b_{III}	0,9305	-0,4420	0,1010	-1,4423	0,0033	-1,0470
c	0,7258	-0,8188	1,9382	-2,6720	1,5614	-1,9396
$2c$	0,7149	-0,8375	15,3880	-2,7330	99,9318	-1,9839
$s = 2,7349$						
b_I	0,9417	-0,4451	0,0690	-1,1718	0,0012	-0,8853
b_{II}	0,8888	-0,5124	0,1074	-1,3491	0,0031	-1,0193
b_{III}	0,8683	-0,5377	0,1267	-1,4157	0,0044	-1,0696
c	0,6865	-0,7445	2,4478	-1,9601	2,0825	-1,4809
$2c$	0,6768	-0,7550	19,4434	-1,9876	133,281	-1,5017
$s = 3,0000$						
b_I	0,9115	-0,4755	0,0732	-1,1967	0,0013	-0,9113
b_{II}	0,8610	-0,5321	0,1141	-1,3392	0,0033	-1,0199
b_{III}	0,8415	-0,5533	0,1346	-1,3926	0,0047	-1,0606
c	0,6697	-0,7261	2,6087	-1,8275	2,2185	-1,3918
$2c$	0,6605	-0,7348	20,7264	-1,8495	141,986	-1,4085

Численные данные в табл. 1 приведены для некоторых значений радиуса действия потенциала b и параметра РГ s . Как и в случае $T > T_c$ [7,17], в области малых значений волновых векторов при $b = b_I = c/(2\sqrt{3})$ параболическая аппроксимация фурье-образа экспоненциально убывающего потенциала взаимодействия отвечает аналогичной аппроксимации фурье-образа потенциала взаимодействия ближайших соседей, при $b = b_{II} = 0,3379c$ — первых и вторых соседей, при $b = b_{III} = 0,3584c$ — первых, вторых и третьих соседей. Значение $s = s^* = 2,7349$ соответствует равному нулю в фиксированной точке среднему значению коэффициента при второй степени переменной плотности меры n -го слоя (для модели ρ^4 соответствующее значение $s^* = 3,5862$). Таким образом, нет необходимости постулировать какую-либо зависимость коэффициентов выражения (20) от температуры (как это делается в разложении Ландау), поскольку аналитическая форма их зависимости от температуры и микроскопических параметров системы найдена в результате прямых расчетов. В отличие от теории Ландау зависимость этих коэффициентов от температуры является неаналитической (см. (17)).

Перейдем к непосредственному расчету среднего спинового момента. Точку $\bar{\rho}$ определяем из условия экстремума $\partial E_0(\rho)/\partial \rho = 0$ или

$$6D\bar{\rho}^5 + 4G\bar{\rho}^3 - 2\tilde{B}\bar{\rho} - \frac{h}{kT} = 0. \quad (21)$$

В случае $h = 0$ получаем биквадратное уравнение

$$6D\bar{\rho}^4 + 4G\bar{\rho}^2 - 2\tilde{B} = 0, \quad (22)$$

которое путем замены переменной

$$\bar{\rho}^2 = y \quad (23)$$

сводится к уравнению

$$6Dy^2 + 4Gy - 2\tilde{B} = 0. \quad (24)$$

Решая уравнение (24) и выделяя явно температуру, приходим к следующей формуле для среднего спинового момента $\langle \sigma \rangle = \bar{\rho} = \sqrt{y}$:

$$\langle \sigma \rangle = \langle \sigma \rangle^{(0)} |\tau|^\beta (1 + \langle \sigma \rangle^{(1)} |\tau|^{\Delta_1}). \quad (25)$$

Здесь $\beta = \nu/2$ — критический показатель среднего спинового момента; коэффициенты $\langle \sigma \rangle^{(l)}$ [18] приведены в табл. 2.

Кривые зависимости $\langle \sigma \rangle$ от τ для разных значений b показаны на рис. 1. Здесь и в дальнейшем графический материал приводится для параметра РГ $s = 3$.

Таблица 2

Коэффициенты в (25) для среднего спинового момента $\langle \sigma \rangle$ при некоторых значениях радиуса действия потенциала b и параметра РГ s

b	$\langle \sigma \rangle^{(0)}$	$\langle \sigma \rangle^{(1)}$
$s = 2,0000$		
b_I	2,7329	0,2499
b_{II}	2,0684	0,3619
b_{III}	1,8700	0,4040
c	0,3747	0,7485
$2c$	0,1321	0,7656
$s = 2,7349$		
b_I	2,3854	0,3034
b_{II}	1,8027	0,3493
b_{III}	1,6288	0,3666
c	0,3248	0,5076
$2c$	0,1145	0,5147
$s = 3,0000$		
b_I	2,2861	0,3046
b_{II}	1,7269	0,3409
b_{III}	1,5600	0,3545
c	0,3107	0,4651
$2c$	0,1095	0,4707

5. Термодинамические характеристики модели Изинга как функции температуры и микроскопических параметров системы

Найдем полные выражения для термодинамических функций изинговской системы при $T < T_c$ в приближении модели ρ^6 с учетом первой конфлентной поправки (случай $\mathcal{H} = 0$).

Полученные выше вклады в свободную энергию трехмерной модели Изинга областей КР и ИГР вблизи T_c позволяют записать ее полную свободную энергию (1) в виде

$$F = -kTN' [\gamma_0 - \gamma_1|\tau| + \gamma_2|\tau|^2 + \gamma_3^{(0)}|\tau|^{3\nu} + \gamma_3^{(1)}|\tau|^{3\nu+\Delta_1}] \quad (26)$$

Все коэффициенты в (26) являются функциями микроскопических параметров системы, т.е. радиуса действия потенциала b , фурье-образа потенциала $\tilde{\Phi}(0)$, постоянной решетки c . Коэффициенты $\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2$ находятся из выражений для соответствующих величин в высокотемпературной области (см. [7,17]). Их значения, в отличие от $\gamma_3^{(l)}$ ($l = 0, 1$), не зависят от того, выше или ниже температуры фазового перехода осуществляются расчеты. Коэффициенты $\gamma_3^{(l)}$ имеют вид произведения универсальной по отношению к микроскопическим параметрам величины $\bar{\gamma}_3^{(l)}$ и неуниверсального множителя $c_{\Delta_1}^{3\nu} c^l$, зависящего от них:

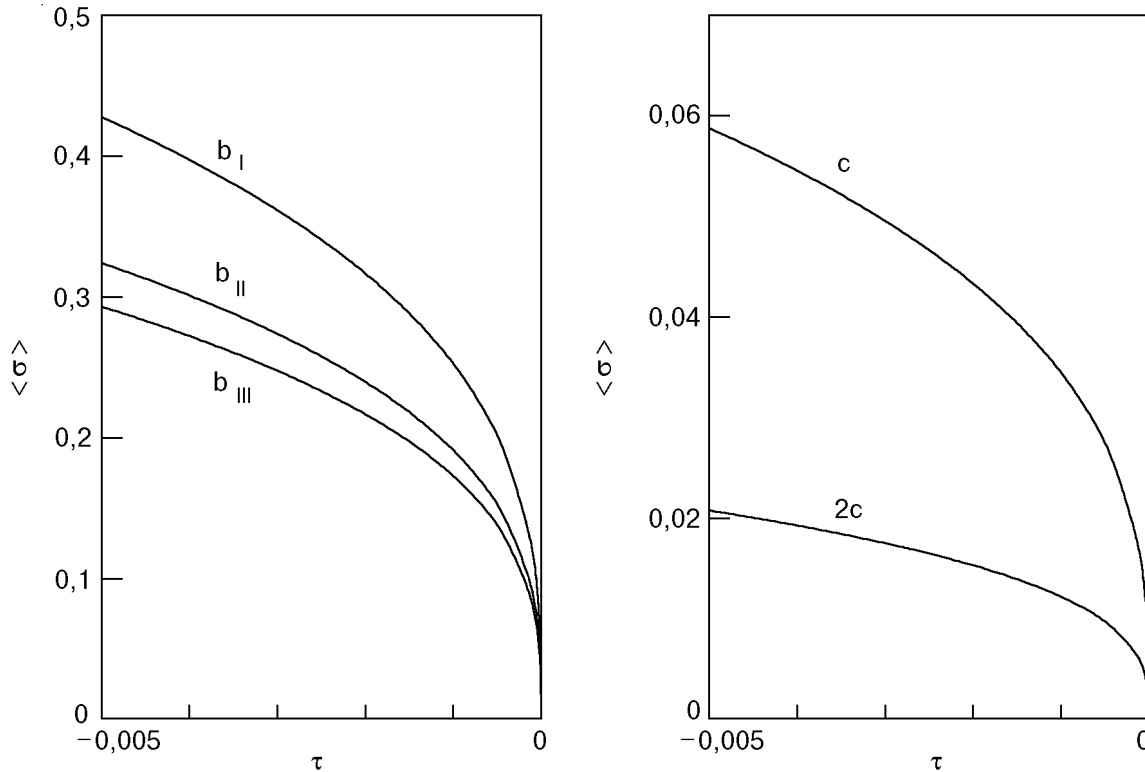


Рис. 1. Температурная зависимость среднего спинового момента в рамках модели ρ^6 для различных значений радиуса действия потенциала b : $b_I = c/(2\sqrt{3})$; $b_{II} = 0,3379c$; $b_{III} = 0,3584c$; c и $2c$.

$$\bar{\gamma}_3^{(l)-} = c_v^3 c_{\Delta_1}^l \bar{\gamma}_3^{(l)-}, \quad l = 0, 1, \quad (27)$$

$$\bar{\gamma}_3^{(l)-} = -\bar{\gamma}_3^{(CR)(l)-} + \bar{\gamma}_{IGR}^{(l)}, \quad \bar{\gamma}_{IGR}^{(l)} = \bar{\gamma}_g^{(l)} + \bar{\gamma}_p^{(l)} + \bar{\gamma}_3^{(l)(\sigma)}.$$

Численные значения коэффициентов $\bar{\gamma}_3^{(l)-}$ приведены в табл. 3.

Таблица 3

Величины $\bar{\gamma}_3^{(l)-}$ для некоторых значений 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

Исходя из выражения для свободной энергии F (26), можно найти другие термодинамические функции при $T < T_c$. Так, для энтропии S , внутренней энергии U и теплоемкости C системы справедливы выражения

$$S = kN' [s^{(0)} - c_0 |\tau| - u_3^{(0)} |\tau|^{1-\alpha} - u_3^{(1)} |\tau|^{1-\alpha+\Delta_1}],$$

$$U = kTN' [\gamma_1 - u_1 |\tau| - u_3^{(0)} |\tau|^{1-\alpha} - u_3^{(1)} |\tau|^{1-\alpha+\Delta_1}], \quad (28)$$

$$C = kN' [c_0 + c_3^{(0)} |\tau|^{-\alpha} + c_3^{(1)} |\tau|^{\Delta_1 - \alpha}],$$

где $s^{(0)}$, c_0 , u_1 совпадают с соответствующими величинами при $T > T_c$ [7,17], а структура остальных коэффициентов определяется соотношениями

$$u_3^{(l)-} = c_v^3 c_{\Delta_1}^l \bar{u}_3^{(l)-}, \quad l = 0, 1,$$

$$\bar{u}_3^{(0)-} = 3v \bar{\gamma}_3^{(0)-}, \quad \bar{u}_3^{(1)-} = (3v + \Delta_1) \bar{\gamma}_3^{(1)-}, \quad (29)$$

$$\bar{c}_3^{(l)-} = c_v^3 c_{\Delta_1}^l \bar{c}_3^{(l)-}, \quad \bar{c}_3^{(0)-} = 3v(3v - 1) \bar{\gamma}_3^{(0)-},$$

$$\bar{c}_3^{(1)-} = (3v + \Delta_1)(3v + \Delta_1 - 1) \bar{\gamma}_3^{(1)-}.$$

Представляя теплоемкость из (28) зависимостью, аналогичной случаю $T > T_c$,

$$\frac{C}{kN'} = \frac{A^-}{\alpha} |\tau|^{-\alpha} (1 + \alpha a_c^- |\tau|^{\Delta_1}) + B^-, \quad (30)$$

$$A^- = c_v^3 \alpha \bar{c}_3^{(0)-}, \quad a_c^- = \frac{c_{\Delta_1}}{\alpha} \frac{\bar{c}_3^{(1)-}}{\bar{c}_3^{(0)-}}, \quad B^- = c_0,$$

для отношений основных критических амплитуд и амплитуд поправок к скейлингу при температурах выше и ниже критической получаем

$$\frac{A^+}{A^-} = \frac{\bar{c}_3^{(0)+}}{\bar{c}_3^{(0)-}}, \quad \frac{a_c^+}{a_c^-} = \frac{\bar{c}_3^{(1)+}}{\bar{c}_3^{(1)-}} \frac{\bar{c}_3^{(0)-}}{\bar{c}_3^{(0)+}}. \quad (31)$$

Заметим, что B^- равно B^+ , рассчитанному при $T > T_c$. Амплитуды A^- , a_c^- приведены в табл. 4.

Таблица 4

Численные значения амплитуд A^- , a_c^- , Γ^- , a_χ^-

b	A^-	a_c^-	Γ^-	a_χ^-
$s = 2,0000$				
b_I	1,9734	7,2567	0,2133	0,1872
b_{II}	1,8071	10,5104	0,2262	0,2711
b_{III}	1,7436	11,7347	0,2317	0,3027
c	1,2012	21,7395	0,2970	0,5608
$2c$	1,1741	22,2353	0,3015	0,5736
$s = 2,7349$				
b_I	1,2026	8,1288	0,2341	0,3536
b_{II}	1,1027	9,3588	0,2480	0,4071
b_{III}	1,0648	9,8206	0,2539	0,4272
c	0,7486	13,5975	0,3211	0,5915
$2c$	0,7328	13,7882	0,3257	0,5998
$s = 3,0000$				
b_I	1,0331	7,9599	0,2437	0,3884
b_{II}	0,9484	8,9081	0,2580	0,4346
b_{III}	0,9164	9,2633	0,2640	0,4519
c	0,6506	12,1558	0,3318	0,5931
$2c$	0,6373	12,3022	0,3364	0,6002

Уравнение (21) дает возможность вычислить восприимчивость системы на одну частицу $\chi = \mu_B (\partial \langle \sigma \rangle / \partial \mathcal{H})$:

$$\chi = \Gamma^- |\tau|^{-\gamma} (1 + a_\chi^- |\tau|^{\Delta_1}) \frac{\mu_B^2}{\tilde{\Phi}(0)}. \quad (32)$$

Здесь $\gamma = 2v$ — критический показатель восприимчивости. Значения амплитуд Γ^- , a_χ^- [18] содержатся в табл. 4.

На основе результатов расчетов в случае $T > T_c$ [7] и настоящей работы можно получить графики температурных зависимостей энтропии S/kN , теплоемкости C/kN , восприимчивости χ (в единицах μ_B^2/A , $A = \tilde{\Phi}(0)/[8\pi(b/c)^3]$ — постоянная потенциала взаимодействия) вблизи T_c для различных значений радиуса действия потенциала b (см. рис. 2–4). Развитая методика расчета позволяет проследить эволюцию термодинамичес-

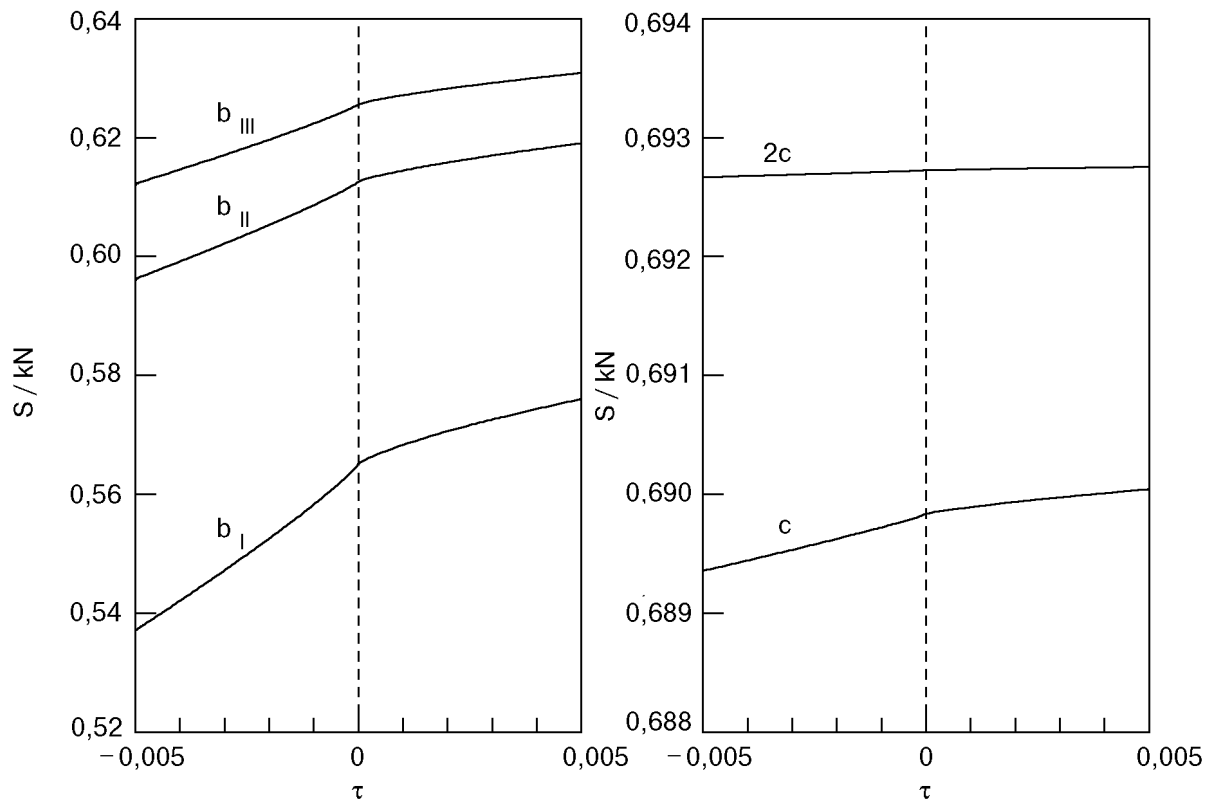


Рис. 2. Зависимость энтропии системы от τ . Обозначения те же, что и на рис. 1.

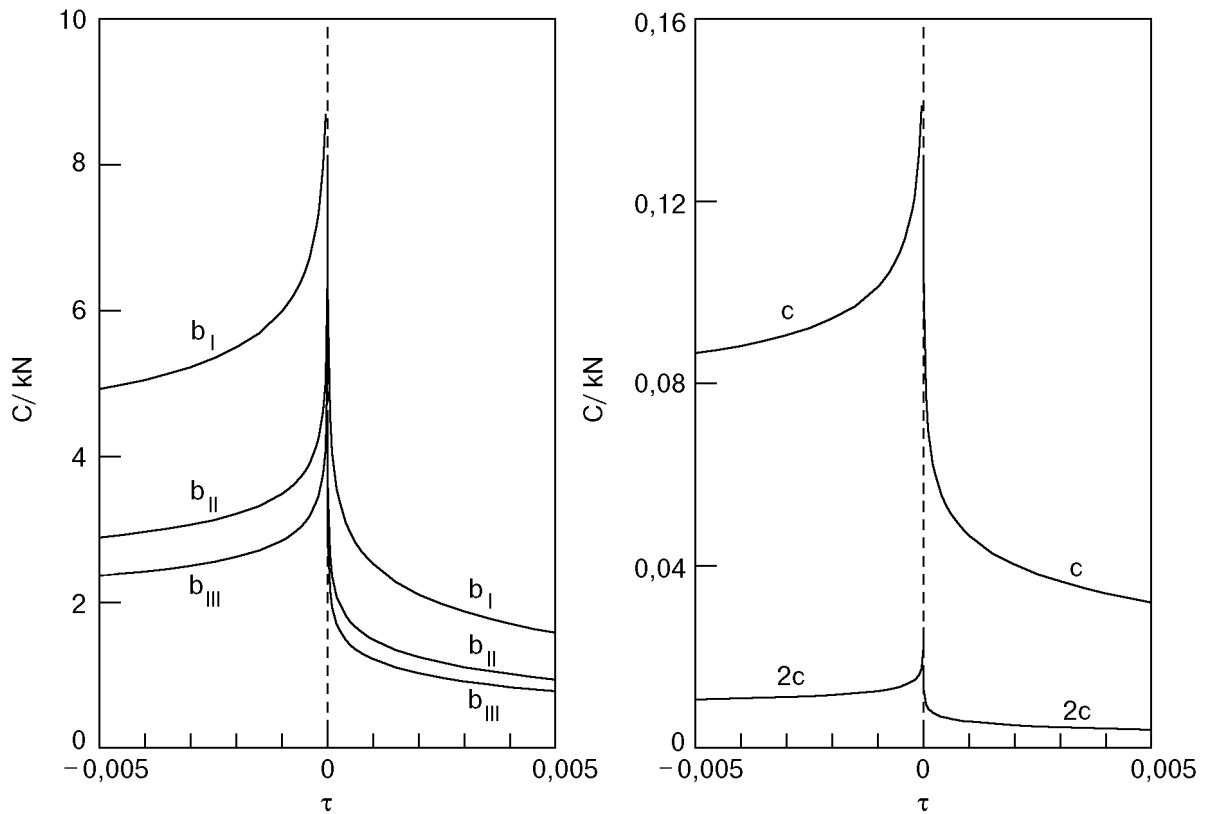


Рис. 3. Теплоемкость спиновой системы при разных значениях b . Обозначения те же, что и на рис. 1.

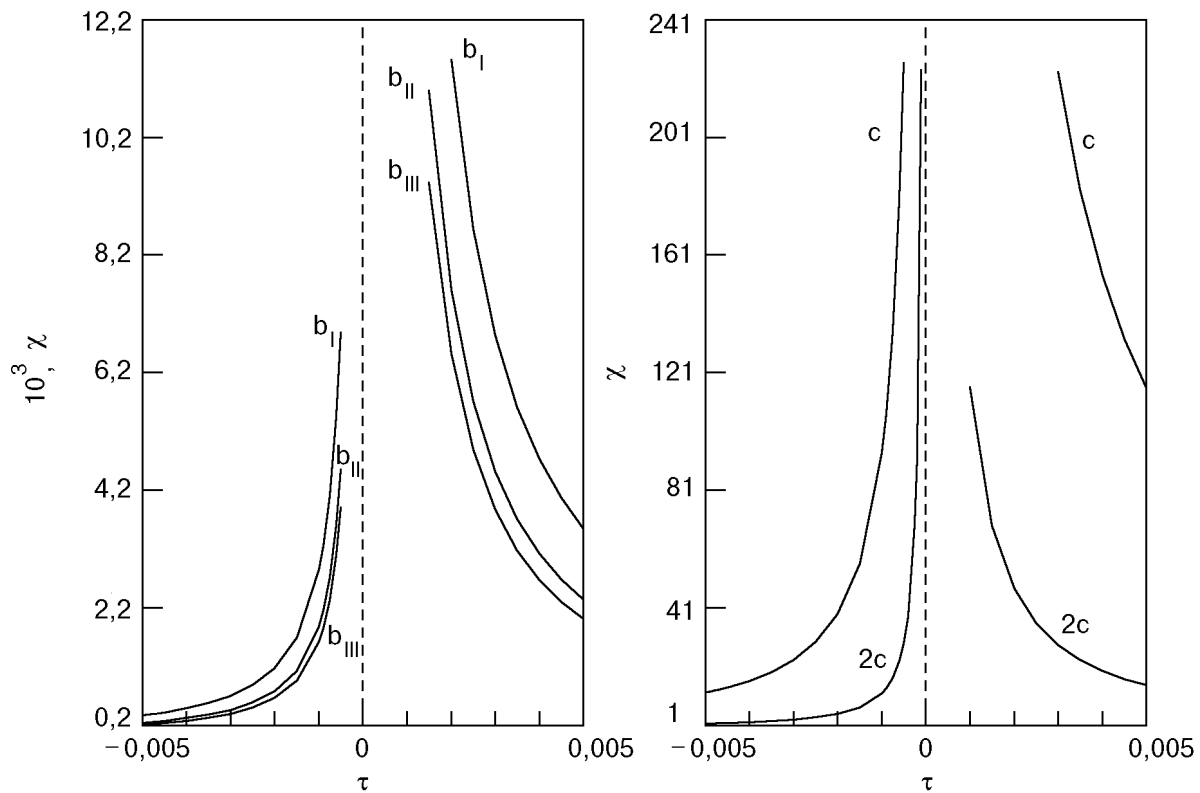


Рис. 4. Температурная зависимость восприимчивости системы для различных значений b . Обозначения те же, что и на рис. 1.

ких характеристик с ростом отношения радиуса действия потенциала b к постоянной решетки c . Такая эволюция свободной энергии системы F/N (в единицах A) в точке фазового перехода ($\tau = 0$), а также среднего спинового момента $\langle \sigma \rangle$ при $\tau = -10^{-3}$ и теплоемкости системы C/kN при $|\tau| = 10^{-3}$ изображена соответственно на рис. 5-7.

Таким образом, в рамках шестерной плотности меры (модель ρ^6) описано критическое поведение однокомпонентной спиновой системы. Модель ρ^6 по сравнению с четверным приближением (мо-

дель ρ^4) обеспечивает более адекватную количественную картину этого описания, о чем свидетельствуют результаты проведенных расчетов (см., например, [15,16]), а также температурные зависимости среднего спинового момента $\langle \sigma \rangle$ (рис. 8) и теплоемкости C/kN (рис. 9) трехмерной модели Изинга. Вычисления выполнены в отсутствие внешнего поля для случая простой кубической решетки и взаимодействия ближайших соседей. В настоящих расчетах полагалось $b = b_I = c/(2\sqrt{3})$. Приближение в рамках модели ρ^6 включает первую конфлуентную поправку, а модели ρ^4 —

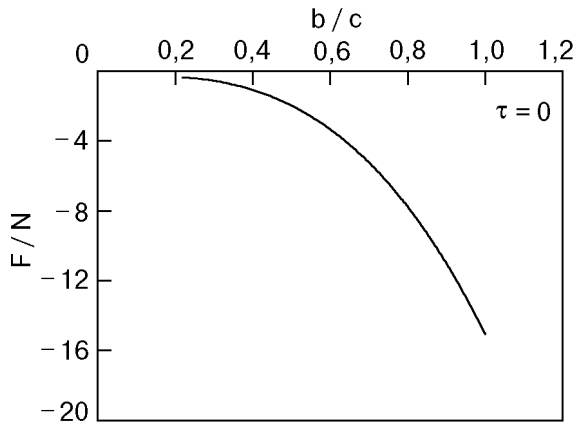


Рис. 5. Зависимость свободной энергии системы в точке фазового перехода ($\tau = 0$) от отношения радиуса действия экспоненциально убывающего потенциала взаимодействия b к постоянной простой кубической решетки c .

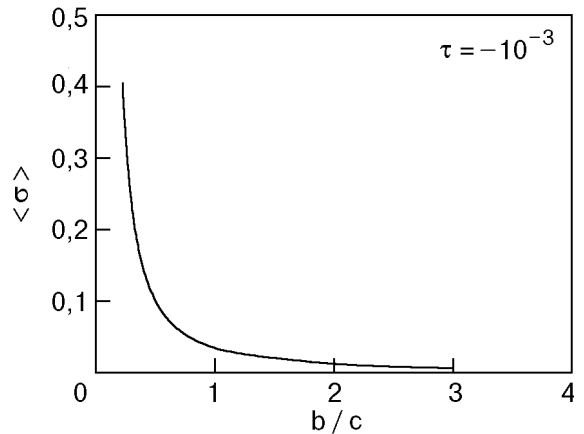


Рис. 6. Поведение среднего спинового момента с увеличением отношения b/c при $\tau = -10^{-3}$.

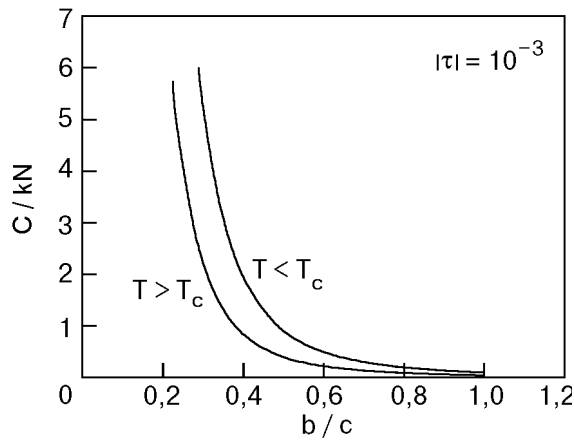


Рис. 7. Эволюция теплоемкости системы с ростом отношения b/c при $|\tau| = 10^{-3}$.

первую и вторую конфлюентные поправки (см. [11–14]). На рис. 8 зависимость $\langle b \rangle$ для среднего спинового момента соответствует модели ρ^4 , 2 — модели ρ^6 , 3 — данным работы [19], $\tau = |T - T_c|/T_c$. На рис. 9 высокотемпературная область представлена зависимостями $1, 2, 3$, а низкотемпературная область — $1', 2', 3'$. Линии 1 и $1'$ получены с использованием модели ρ^4 , 2 и $2'$ — модели ρ^6 , 3 и $3'$ — результатам работы [19]. Отметим, что авторы [19] выполнили новое численное исследование основных критических амплитуд восприимчивости, корреляционной длины, теплоемкости, спонтанной намагниченности трехмерной изинговской системы, универсальных отношений этих амплитуд.

Метод КП позволяет произвести приближенный расчет статистической суммы системы и в едином подходе получить универсальные (критические показатели) и неуниверсальные (выраже-

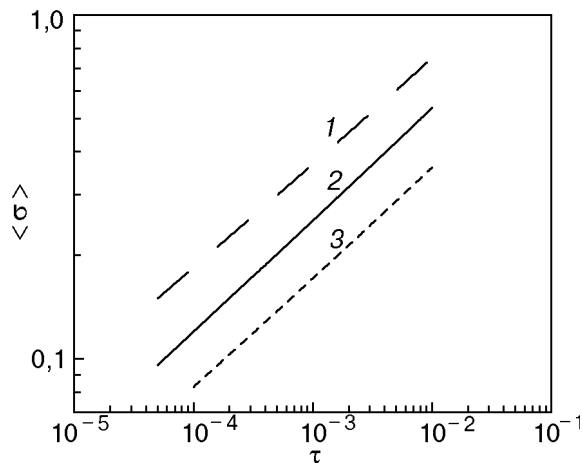


Рис. 8. Температурная зависимость параметра порядка трехмерной модели Изинга на простой кубической решетке: 1 — соответствует модели ρ^4 ; 2 — модели ρ^6 ; 3 — данным [19].

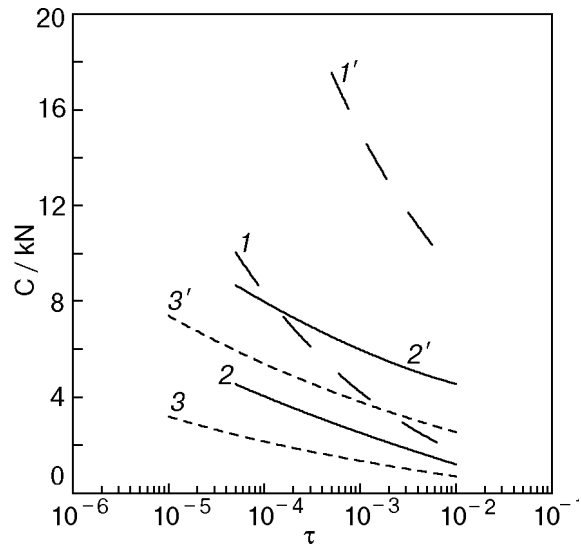


Рис. 9. Зависимость теплоемкости системы от $\tau = |T - T_c|/T_c$. Кривые $1, 2, 3$ соответствуют случаю $T > T_c$, $1', 2', 3'$ — случаю $T < T_c$, причем $1, 1'$ — модели ρ^4 , $2, 2'$ — модели ρ^6 , $3, 3'$ — результатам [19].

ния для основных критических амплитуд и амплитуд конфлюентных поправок термодинамических характеристик) величины. Результаты вычислений для трехмерной изинговской системы с использованием моделей ρ^4 и ρ^6 согласуются с данными других авторов. Так, например [16], критические показатели корреляционной длины $\nu = 0,637$, теплоемкости $\alpha = 0,088$, среднего спинового момента $\beta = 0,319$, восприимчивости $\gamma = 1,275$, показатель первой поправки к скейлингу $\Delta_1 = 0,525$ (модель ρ^6 , $s = s^*$), а также универсальные отношения критических амплитуд теплоемкости $A^+/A^- = 0,435$, восприимчивости $\Gamma^+/\Gamma^- = 6,967$ и их комбинации

$$\mathcal{P} = [1 - A^+/A^-]/\alpha = 3,054,$$

$$R_c^+ = A^+\Gamma^+/[s_0^3\langle\langle\sigma\rangle\rangle^2] = 0,098 \text{ (модель } \rho^4, s = s^*),$$

где $s_0 = \pi\sqrt{2}b/c$, $\langle\sigma\rangle^{(0)}$ — критическая амплитуда среднего спинового момента (см. (25)), находятся в согласии со значениями $\nu = 0,630$, $\alpha = 0,110$, $\beta = 0,325$, $\gamma = 1,241$, $\Delta_1 = 0,498$, $A^+/A^- = 0,465$, $\Gamma^+/\Gamma^- = 5,12$, $\mathcal{P} = 3,90$, $R_c^+ = 0,052$, полученными в рамках теоретико-полевого подхода [20–22], и со значениями $\nu = 0,638$, $\alpha = 0,125$, $\beta = 0,312$, $\gamma = 1,250$, $\Delta_1 = 0,50$, $A^+/A^- = 0,51$, $\Gamma^+/\Gamma^- = 5,07$, $R_c^+ = 0,059$, рассчитанными с помощью высокотемпературных разложений [23–27]. Существующие в настоящее время методы дают возможность вычислять универсальные величины с довольно высокой точностью. Преимущество рассматриваемого метода состоит в возможности получать и

исследовать выражения для термодинамических характеристик как функций микроскопических параметров системы.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Государственного фонда фундаментальных исследований Министерства науки Украины (проект № 2.4/173).

1. G. A. Baker, Jr., *Quantitative Theory of Critical Phenomena*, Academic Press, Inc., San Diego (1990).
2. J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, and M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena. An Introduction to the Renormalization Group*, Clarendon Press, Oxford (1992).
3. D. P. Landau, *Physica* **A205**, 41 (1994).
4. C. Domb, *The Critical Point. A Historical Introduction to the Modern Theory of Critical Phenomena*, Taylor and Francis Ltd., London (1996).
5. I. R. Yukhnovskii, *Phase Transitions of the Second Order. Collective Variables Method*, World Scientific Publ. Co. Pte. Ltd., Singapore (1987).
6. В. В. Духовый, М. П. Козловский, И. В. Пылюк, *ТМФ* **107**, 288 (1996).
7. И. В. Пылюк, *ФНТ* **25**, 1170 (1999).
8. М. П. Козловский, Я. Н. Ильницький, И. В. Пылюк, *Препринт ИТФ АН УССР*, ИТФ-85-107Р, Киев (1985).
9. М. П. Козловский, И. В. Пылюк, *Препринт ИТФ АН УССР*, ИТФ-89-42Р, Киев (1989).
10. I. R. Yukhnovskii, M. P. Kozlovskii, and I. V. Pylyuk, *Z. Naturforsch.* **46a**, 1 (1991).
11. И. В. Пылюк, *Препринт ИТФ АН УССР*, ИТФ-90-12Р, Киев (1990).
12. И. В. Пылюк, М. П. Козловский, *Изв. АН СССР. Сер. физич.* **55**, 597 (1991).
13. М. П. Козловский, И. В. Пылюк, И. Р. Юхновский, *ТМФ* **87**, 434 (1991).
14. M. P. Kozlovskii and I. V. Pylyuk, *Phys. Status Solidi* **B183**, 243 (1994).
15. М. П. Козловский, И. В. Пылюк, *Препринт ИТФ АН УССР*, ИТФ-90-81Р, Киев (1990).
16. M. P. Kozlovskii, I. V. Pylyuk, and V. V. Dukhovii, *Cond. Matt. Phys. (Lviv)* **11**, 17 (1997).
17. И. В. Пылюк, М. П. Козловский, *Препринт ИФКС НАН Украины*, ISMP-97-06U, Львов (1997).
18. И. В. Пылюк, М. П. Козловский, *Препринт ИФКС НАН Украины*, ISMP-97-07U, Львов (1997).
19. A. J. Liu and M. E. Fisher, *Physica* **A156**, 35 (1989).
20. J. C. Le Guillou and J. Zinn-Justin, *Phys. Rev.* **B21**, 3976 (1980).
21. C. Bagnuls, C. Bervillier, and E. Boccara, *Phys. Lett.* **A103**, 411 (1984).
22. M. Barmatz, P. C. Hohenberg, and A. Kornblit, *Phys. Rev.* **B12**, 1947 (1975).
23. D. S. Gaunt and M. F. Sykes, *J. Phys.* **A6**, 1517 (1973).
24. D. M. Saul, M. Wortis, and D. Jasnov, *Phys. Rev.* **B11**, 2571 (1975).
25. W. J. Camp and J. P. Van Dyke, *Phys. Rev.* **B11**, 2579 (1975).
26. A. Aharony and P. C. Hohenberg, *Phys. Rev.* **B13**, 3081 (1976).
27. W. J. Camp, D. M. Saul, J. P. Van Dyke, and M. Wortis, *Phys. Rev.* **B14**, 3990 (1976).

Description of the critical behavior of the Ising ferromagnet in ρ^6 model approximation taking into account the confluent correction. II. Region below the phase transition point

I. V. Pylyuk

The scheme for calculation of the 3D one-component spin system thermodynamic characteristics in the temperature region below the critical temperature on the basis of the sextic measure density (ρ^6 model) is described. The first confluent correction is taken into account. A microscopic analogue of the Landau free energy is calculated. The coefficients of the average spin moment, leading critical amplitudes and confluent correction amplitudes for the specific heat and susceptibility of the system are calculated for different values of the effective radius of the exponentially decreasing interaction potential. Plots of the temperature dependence of the entropy and other thermodynamic characteristics in the vicinity of T_c are given for different values of indicated radius. The behavior of the free energy of the system at the phase transition point, the average spin moment and specific heat is traced when the ratio of the potential effective radius to the simple cubic lattice constant increases. The results of our calculations and their comparison with other authors data show that the ρ^6 model provides a more adequate quantitative description of the 3D Ising ferromagnet critical behavior in comparison with the ρ^4 model.