

ЛУЧШИЕ РЕЦЕПТЫ

D 76

— 7 —

12-22-1962 - 100% G. 2

— 2 —

— 1 —

**БЪЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ
ИНСТИТУТ ПО МЕХАНИКА**

**ЛАБОРАТОРИЯ ПО СТАТИСТИЧЕСКА
МЕХАНИКА И ТЕРМОДИНАМИКА**

МАГДИ ИСМАИЛ АМИН ИСМАИЛ

**МОДЕЛИРАНЕ ВЛИЯНИЕТО НА
ГРАНИЧНИТЕ УСЛОВИЯ ВЪРХУ
КРИТИЧНИ ЯВЛЕНИЯ**

ДИСЕРТАЦИЯ

ЗА ПОЛУЧАВАНЕ НА ОБРАЗОВАТЕЛНАТА И НАУЧНА СТЕПЕН

ДОКТОР

ПО НАУЧНАТА СПЕЦИАЛНОСТ 01.01.13 "МАТЕМАТИЧЕСКО
МОДЕЛИРАНЕ И ПРИЛОЖЕНИЕ НА МАТЕМАТИКАТА"

НАУЧЕН РЪКОВОДИТЕЛ:

**СТ.Н.С. И СТ. ДФН ЙОРДАН ГЕОРГИЕВ
БРАНКОВ**

СОФИЯ, 1998 г

СЪДЪРЖАНИЯ

Глава 1. Увод	1
1. Фазови преходи и крайноразмерно подобие.....	1
2. Повърхнинни фазови преходи.....	5
3. Класически спинови системи	7
4. Теоретико-вероятностна интерпретация на фазовите преходи.....	13
5. Цел и структура на дисертацията.....	16
Глава 2. Среден сферичен модел: Нови повърхнинни критични показатели	21
1. Увод.....	21
2. Моделът.....	25
3. Крайноразмерно подобие за гранични условия на Нойман-Нойман.....	32
4. Крайноразмерно подобие за гранични условия на Нойман-Дирихле	36
5. Критични полеви показатели на слой при гранични условия на Нойман-Дирихле	42
6. Дискусия.....	46
Глава 3. Модифициран среден сферичен модел: Нови повърхнинни критични показатели	49
1. Увод.....	49

2. Моделът	52
3. Критично поведение на локалните възприемчивости.....	58
4. Дискусия.....	65
Глава 4. Относно ефектите на разцепване в сферичния модел	68
1. Увод.....	68
2. Средно сферично условие.....	72
3. Ефекти на разцепване при профила на намагнитване.....	77
4. Средноквадратична стойност на спина в слой	88
5. Дискусия.....	89
Глава 5. Нови ефекти при профила на намагнитване в стъпаловидно поле	93
1. Увод	93
2. Средно сферично условие.....	96
3. Анализ на профила на намагнитване.....	100
4. Дискусия.....	104
Основни резултати.....	110
Литература.....	112

Глава 1

Увод

1. Фазови преходи и крайноразмерно подобие

Както е известно, една от основните задачи на равновесната статистическа механика се състои в това, по зададен хамилтониан на изследваната система от взаимодействуващи частици да се определят нейните наблюдавани характеристики: термодинамичните и корелационни функции. Най-голям интерес представлява теоретичното предсказване на поведението на системата в околност на точка на фазов преход, където термодинамичните функции проявяват аномални зависимости от термодинамичните параметри. Теорията на фазовите преходи и свързаното с тях критично поведение е поле за резултатно взаимодействие между теорията и експеримента, точните и приближените методи, математиката и физиката, статистическата механика и теорията на полето (за по-общ преглед виж, например [1] - [4]). Традиционното, математически строго описане на фазовите преходи изхожда от изучаването на теоретичната граница на безкрайно голяма система, тъй като само в тази граница съществуват подмножества (точки, линии, повърхности) в пространството на термодинамичните параметри на системата, където свободната енергия,

или някоя друга термодинамична величина, е неаналитична функция на някои от параметрите си. Най-известният пример е преходът между парамагнитно и феромагнитно поведение в метално желязо при охлаждане до температура под определена 'критична' стойност T_c . Преходът към термодинамичната граница води до съществено опростяване на теоретичното описание. Така например различните статистически ансамбли на Гибс, съответствуващи на различни физически условия на контакт на разглежданата система с обкръжението, като правило стават термодинамично еквивалентни. При достатъчно общи условия за регуляреност на потенциала на взаимодействие между частиците, плътностите на термодинамичните функции престават да зависят и от формата на пространствената област заемана от системата.

От друга страна, реалните експерименти се провеждат с физически системи, които съдържат краен брой частици и заемат крайна област от пространството. Ето защо на описващите ги статистикомеханични функции по принцип са присъщи определени крайноразмерни ефекти. При определени условия, обикновено в непосредствена околност на точка на фазов преход, тези ефекти могат съществено да се отразят върху поведението на макроскопичната система. В частност те се проявяват като ефекти на заглаждане и отместване на термодинамичните сингулярности. Заглаждането и отместването на сингулярностите в термодинамичните функции е наблюдавано експериментално в случая на някои специални геометрии на образеца: течен хелий в пори и тънки слоеве [5], малки магнитни частници [6], тънки слоеве на бинари течности или течни кристали и други. Такива експерименти са ценно средство за изследване ефектите на размерността в кондензираната материя. Течният хелий близо до

свръхфлуиден ("ламбда") преход се смята за най-удобния обект за проверка на хипотезите за крайноразмерно подобие, поради лесната достигимост на много малки размери (например, в тънки слоеве с дебелина от 25 \AA до 53 \AA) и поради извънредно високата точност с която могат да бъдат направени измерванията на топлинния капацитет. Чувствителността на крайноразмерните ефекти към формата на областта заемана от системата и граничните условия показва, че тяхното адекватно описание излиза извън рамките на традиционната статистическа термодинамика. Изучаването на крайноразмерните ефекти, обусловени от едромащабни колективни явления, е предмет на съвременната теория на крайноразмерното подобие. Пъrvите количествени резултати за ефектите на заглаждане и отместване на термодинамичните сингулярности в крайни системи близо до критичната точка са получени на примера на най-простите точно решими решетъчни модели.

Теорията на крайноразмерното подобие е един от най-надеждните методи за оценка на критичното поведение на много нерешени модели в статистическата механика. В тези случаи е необходимо екстраполиране към термодинамичната граница на данните, получени чрез статистическо симулиране или точни пресмятания за малки системи. Основите на феноменологичната теория на крайноразмерното подобие, в околност на точка на фазов преход от втори род, са положени от Фишер [1] през 1970, и Фишер и Барбър [7]. Съгласно хипотезата на Фишер, ефектите от крайния размер за система заемаща пространствена област с формата на куб с ребро $L \gg 1$ (в единици за дължина характеризиращи междучастичните разстояния) се определят от отношението на корелационната дължина ξ_∞ на

съответната безкрайна система към линейния размер L . В случай на близкодействие и периодични гранични условия, ако $\xi_\infty \ll L$ системата практически има поведението на безкрайна такава, като поправките към плътностите на термодинамичните функции са експоненциално малки величини $O[\exp(-L/\xi_\infty)]$. Ако при устремяване (отгоре) на температурата T към критичната стойност T_c , корелационната дължина има характерната сингулярност от вида $\xi_\infty \propto t^{-\nu}$, където $t = (T - T_c)/T_c$, а $\nu > 0$ е критичният показател на корелационната дължина, то ефектите от крайния размер стават съществени при $\xi_\infty \propto L$, т.е. когато $t \propto L^{-1/\nu}$. Съгласно общата хипотеза, поведението на всяка сингулярна в термодинамичната граница физическа величина $A_\infty(t)$ се управлява от променливата

$$L/\xi_\infty(t) \propto Lt^\nu. \quad (1.1)$$

Ако $A_\infty(t)$ се характеризира с критичен показател a , т.е. $A_\infty(t) \propto t^a$ при $t \rightarrow 0^+$, то поведението на съответната величина $A_L(t)$ за крайната система, в околност на критичната точка на съответната безкрайна система, се описва със закона за крайноразмерно подобие:

$$A_L \cong L^{-a/\nu} X_A(C_1 t L^{1/\nu}), \quad (1.2)$$

където C_1 е зависещ от модела параметър, а $X_A(x)$ е универсална функция, регулярна в точката $x = 0$ и притежаваща при $x \rightarrow \infty$ асимптотиката

$$X_A(x) \propto x^a, \quad x \rightarrow \infty. \quad (1.3)$$

Тук няма да се спирате върху многобройните общи и частни резултати на съвременната теория на крайноразмерното подобие, получени главно през последните две десетилетия, тъй като те са подробно отразени в обзорите на Барбър [8], Биндер [9], Карди [10], и Привман [11].

2. Повърхнинни фазови преходи

В случаите, когато повърхността допринася малко към свойствата на обема, има смисъл всички екстензивни величини в системата, като например свободната енергия, да се разделят на обемен член, който е пропорционален на обема, и повърхнинен член, който е пропорционален на площа на повърхността. Така както критичното поведение на обемната свободна енергия може да бъде описано в термини на критични показатели и концепции за мащабно подобие (скейлинг), подобно описание може да бъде въведено и за повърхнинната свободна енергия. Критичното поведение на повърхността е усложнено от две обстоятелства: 1) от геометричния ефект на "отсъстващите съседи", и 2) от това, че микроскопичните взаимодействия в близост до повърхността могат да имат стойности, които са твърде различни от тези в обема. Това води до нарушаване на трансляционната инвариантност и изотропията, които се изпълняват асимптотично в обемния критичен режим. В резултат, термодинамичната средна стойност на една локална наблюдана е различна в близост до повърхността и дълбоко в обема; т.е. в магнетик локалното намагнитване m_1 на повърхността се различава от обемното намагнитване m_b . Корелационните функции, включващи локални динамични променливи (спинове) на повърхността, също могат да бъдат силно променени. Тези промени правят необходимо въвеждането на нови показатели, описващи локалното критично поведение. Разграничаването между "повърхнинни показатели" (като α_s) и "локални показатели" (като β_1) не дава пълната картина, тъй като съществуват например поне две различни "локални" възприемчивости на повърхността: първата, χ_1 , е отклика на повърхнинен спин на хомогенно поле действащо върху цялата система,

а втората, $\chi_{1,1}$, е отклика на поле, което действа само върху повърхността. Такива величини, като локално намагнитване или локална възприемчивост на повърхността, могат да бъдат изследвани с подходящи експерименти. В един магнит например "повърхнинното намагнитване" m_s и "повърхнинната възприемчивост" χ_s могат да бъдат изследвани чрез измерването на тънки магнитни слоеве (филми) с различна дебелина. Локалните величини, като m_1 , χ_1 и $\chi_{1,1}$, са достъпни за измерване с помощта на локални сонди, такива като дифракция на нискоенергетични електрони (LEED) [12], ядрен магнитен резонанс (NMR), Мъосбауеров ефект [13]-[15], и разсейване на неutronи под малък ъгъл [16]-[20]. Съществуването на такива локални сонди дава възможност за екпериментално изследване на повърхнинни ефекти при критично поведение в чист вид, т.е. без наслагването на ефекти от крайния размер на образеца. Например в един антиферомагнит може да се използва LEED за регистрация на свръхструктурните брегови отражения, чито интензивности са свързани с m_1 , докато интензивността на дифузното магнитно разсейване близо до бреговите положения е свързана с $\chi_{1,1}$. В един феромагнит подобни величини могат да бъдат получени използвайки спиново-поляризирана нискоенергетична елктронна дифракция (SPEED). Съвременните експерименти използващи SPEED ясно показват, че локалното спонтанно намагнитване m_1 на повърхност на никел има поведението $m_1 \sim |T - T_c^b|^{\beta_1}$ близо до обемната критична температура T_c^b , със степенен показател $\beta_1 \approx 0.8$ [21, 22], който е съществено различен от обемния, $\beta \approx 0.36$.

Интересно е да се отбележи, че повърхността може да се подрежа преди обема, при по-високи температури, дори може да има друг тип подреждане, например антиферомагнитно подреждане на повърхността

на феромагнитен материал. По този начин границите могат да представляват интересни примери за нискоразмерно (с размерност $d-1$) подреждане. Докато все още няма експериментални доказателства за това, че подобно двумерно подреждане наистина съществува при магнетиците, известни са множество емпирични наблюдения на структурен фазов преход на границите ("реконструиране на границата"); за съжаление подобни явления все още не са добре изучени от теоретична гледна точка.

Данните за фазово разслояване в бинарни течни филми потвърждават предсказанията на теорията на крайноразмерното подобие, но същевременно разкриват гранични ефекти, които все още не са напълно разбрани. Измерванията на кривата на съвместно съществуване в тънки слоеве от 2,6- лутидин и вода, с дебелина $0,46\mu m \leq l \leq 14\mu m$, показват особен преход от тримерно към двумерно Изингово поведение [23]. Тези експерименти в действителност измерват разликата Δn в индекса на пречупване между две съвместно съществуващи фази, където Δn е пропорционално на параметъра на подреждане. Резултатите дават задоволително потвърждение на теорията на крайноразмерното подобие. Установено е също, че амплитудата на отместване на критичната точка е изключително чувствителна към граничните условия [24]. Това се съгласува с теорията на Фишер - Наканиши за критичността в тънки слоеве, въпреки че съществуващите данни не могат да бъдат анализирани в термините на повърхнинни полета.

3. Класически спинови системи

В класическата статистическа механика състоянието ω на система от N частици е точка във фазовото пространство Ω , която се разглежда като случайна величина. В случай на система с хамилтониан $H(\omega)$, която се

намира в топлинно равновесие с термостат при абсолютна температура T , вероятностната мярка $d\mu(\omega)$ се дава от каноничното разпределение на Гибс

$$d\mu(\omega) = Z^{-1}(\beta) \exp[-\beta H(\omega)] d\omega. \quad (3.1)$$

Тук $d\omega$ е мярката на Лиувил върху фазовото пространство Ω , $\beta = (k_B T)^{-1}$, където k_B е константата на Болцман,

$$Z(\beta) = \int_{\Omega} \exp[-\beta H(\omega)] d\omega \quad (3.2)$$

е статистическата сума на системата. В мярката (3.1) приносът от кинетичната енергия на системата се отделя като множител от приноса на потенциалната енергия. Последният определя така наречения конфигурационен каноничен ансамбъл. Решетъчните системи представляват силно идеализиран, но нетривиален модел на кристал. Конфигурациите на тези системи имат вида $\{\sigma_j, j \in \Lambda\}$, където динамичната променлива σ_j описва състоянието на подсистемата разположена във възела j на една крайна област Λ от безкрайната пространствена решетка \mathbb{Z}^d . В най-простия случай $\sigma_j \in \mathbb{R}$ за всяко $j \in \Lambda$, а Λ е крайно подмножество на целочислената решетка \mathbb{Z}^d в d -мерното евклидово пространство. Следвайки традицията, случайната величина σ_j ще наричаме спин във възела j . Различните спинови модели се характеризират както със свойствата, или явния вид, на конфигурационната енергия, така и с различните модели на σ_j като случайна величина. Нека dx е лебеговата мярка на \mathbb{R} , а априорното съвместно вероятностно разпределение на $\{\sigma_j, j \in \Lambda\}$, т.е. вероятностното разпределение при отсъствие на конфигурационно взаимодействие, нека се задава с вероятностната мярка $d\rho_{\Lambda}(\{x_j, j \in \Lambda\})$ върху \mathbb{R}^N , където $N = |\Lambda|$ е броят на възлите в областта Λ . Явният вид на $d\rho_{\Lambda}$ за някои от най-разпространените класически спинови модели е както следва (за простота, някои нормировъчни константи

са изпуснати) .

1. Модел на Изинг

$$d\rho_{\Lambda}^I = \prod_{j \in \Lambda} \delta(x_j^2 - 1) dx_j. \quad (3.3)$$

2. Гаусов модел

$$d\rho_{\Lambda}^G = \prod_{j \in \Lambda} \exp[-s_j x_j^2] dx_j, \quad s_j > 0. \quad (3.4)$$

3. Сферичен модел на Бърлин-Кац [25]

$$d\rho_{\Lambda}^S = \delta(\sum_{j \in \Lambda} x_j^2 - |\Lambda|) \prod_{j \in \Lambda} dx_j. \quad (3.5)$$

4. Среден сферичен модел [26]

$$d\rho_{\Lambda}^{ms} = \prod_{j \in \Lambda} \exp[-s_j x_j^2] dx_j, \quad (3.6)$$

където в стандартния случай сферичното поле s_j е еднакво за всички възли, $s_j = s, j \in \Lambda$, и удовлетворява средното сферично условие (виж по-долу) .

От приведените изрази за $d\rho_{\Lambda}$ се вижда, че във всички случаи, освен в сферичния модел на Бърлин-Кац, невзаимодействащите спинове са независими случаини величини. В случая на модел на Изинг те приемат с еднаква вероятност само две стойности, -1 и $+1$. В случая на гаусовия и средния сферичен модел невзаимодействащите спинове са нормално разпределени случаини величини с нулево математическо очакване и дисперсия $(2s)^{-1/2}$; разликата между двата модела е, че в гаусовия модел сферичното поле s е фиксирана константа, докато в средния сферичен модел то е функция на термодинамичните параметри, която се задава неявно чрез сферичното условие. В сферичния модел на Бърлин-Кац спиновете не са независими случаини величини: те могат да се разглеждат като компоненти на един случаен вектор в $|\Lambda|$ -мерното пространство, краят на който е равномерно разпределен върху повърхността на сфера с радиус $|\Lambda|^{1/2}$.

Енергията на спиновата конфигурация $\sigma_\Lambda = \{\sigma_j, j \in \Lambda\}$ в една крайна област Λ обикновено се дефинира като сума от приносите на едночастичните енергии $-H_j\sigma_j$ на спиновете $\sigma_j, j \in \Lambda$ във външното магнитно поле $H_\Lambda = \{H_j, j \in \Lambda\}$ и двучастичните енергии на взаимодействие $-J_{i,j}\sigma_i\sigma_j$, където потенциалът на взаимодействие $J_{i,j}$ зависи от разстоянието между възлите i и j . В най-простия нетривиален случай взаимодействват само спиновете, които са най-близки съседи на кубичната решетка \mathbb{Z}^d , т.е. $J_{i,j} = J \neq 0$, ако разстоянието между i и j е равно на единица, и $J_{i,j} = 0$ във всички останали случаи. Конфигурационната енергия в областта Λ зависи и от граничните условия, които се задават като в допълнението $\Lambda^c = \mathbb{Z}^d \setminus \Lambda$ се фиксира спиновата конфигурация $\sigma_{\Lambda^c} = \{\sigma_j, j \in \Lambda^c\}$. Така получаваме израза за пълната енергия

$$\mathcal{H}_\Lambda(\sigma_\Lambda | \sigma_{\Lambda^c}; \{J_{i,j}\}, H_\Lambda) = - \sum_{i,j \in \Lambda} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i \in \Lambda, j \in \Lambda^c} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j - \sum_{j \in \Lambda} H_j \sigma_j. \quad (3.7)$$

Съвместното вероятностно разпределение на случайните величини (спиновете) $\{\sigma_j, j \in \Lambda\}$ в каноничния ансамбъл на Гибс се дава от мярката

$$d\mu(x_\Lambda) = Z_\Lambda^{-1} \exp[-\beta \mathcal{H}_\Lambda(x_\Lambda | \dots)] d\rho_\Lambda(x_\Lambda), \quad (3.8)$$

където $x_\Lambda = \{x_j, j \in \Lambda\}$ и

$$Z_\Lambda = \int_{\mathbb{R}^N} \exp[-\beta \mathcal{H}_\Lambda(x_\Lambda | \dots)] d\rho_\Lambda(x_\Lambda) \quad (3.9)$$

е конфигурационната статистическа сума. Очевидно, за всяка крайна област Λ вероятностното разпределение (3.8) е добре дефинирано; то зависи от граничните условия (виж по-долу), безразмерният потенциал на взаимодействие $K_{i,j} = \beta J_{i,j}$ и конфигурацията $h_\Lambda = \{\beta H_j, j \in \Lambda\}$ на безразмерното външно магнитно поле.

В нашето изследване ние ще се ограничим с тримерния среден сферичен модел с феромагнитни взаимодействия между най-близките съседни спинове, разположени върху прста кубична решетка със геометрия на безкраен слой от типа $L \times \infty^2$. Във всеки възел на решетката $\vec{r} = (r_1, r_2, r_3) \in \mathbb{Z}^3$, има случайна (спинова) величина $\sigma(\vec{r}) \in \mathbb{R}$. Границните условия на Нойман-Нойман или Нойман-Дирихле ще бъдат наложени върху повърхнините ограничаващи слоя с дебелина L . Под гранични условия на Дирихле за решетъчна спинова система ние разбираме тук случая, когато взаимодействието на системата с "обкръжаващия свят" се моделира чрез фиксиране към нулева стойност на спиновата конфигурация извън системата

$$\sigma(0, r_2, r_3) = \sigma(L + 1, r_2, r_3) = 0, \quad (3.10)$$

за всички $r_2, r_3 \in \mathbb{Z}$.

При гранични условия на Нойман това взаимодействие се моделира чрез полагането на обкръжаващите спинове да бъдат равни на своите най-близки съседи вътре в системата

$$\sigma(0, r_2, r_3) = \sigma(1, r_2, r_3), \quad \sigma(L + 1, r_2, r_3) = \sigma(L, r_2, r_3). \quad (3.11)$$

При гранични условия на Нойман-Дирихле,

$$\sigma(0, r_2, r_3) = \sigma(1, r_2, r_3), \quad \sigma(L + 1, r_2, r_3) = 0. \quad (3.12)$$

Очевидно терминологията използвана по-горе се оправдава от аналогията с континуалната граница.

По нататък ще се ограничим със случая на феромагнитно взаимодействие ($J > 0$) между най-близките съседни спинове и зависимостта от граничните условия ще означаваме с горен индекс τ , $\tau = p$ (периодични), $\tau = a$ (Дирихле), $\tau = b$ (Нойман), и $\tau = c$ (Нойман-Дирихле). Ние ще отбележим, че сферичният модел (3.5) и средният сферичен модел (3.6) могат да се разглеждат като една система в

два ансамбъла на Гибс: микроканоничен и голям каноничен ансамбъл по отношение на наблюдаващата $\sum_{i \in \Lambda} \sigma_i^2$. Въпреки че са термодинамично еквивалентни [26, 27], тези модели имат различен набор от гранични състояния на Гибс [28].

В случая на средния сферичен модел, плътността на съвместното вероятностно разпределение на случайните величини $\{\sigma_i, i \in \Lambda\}$ по отношение на лебеговата мярка на \mathbb{R}^N има следния вид

$$P_{\Lambda}^{(\tau)}(x_{\Lambda}|K, h, s) = [Z_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h, s)]^{-1} \exp \left[-\beta \mathcal{H}_{\Lambda}^{(\tau)}(x_{\Lambda}) - s \sum_{i \in \Lambda} x_i^2 \right], \quad (3.13)$$

където $K = \beta J$, $h = \beta H$ и

$$Z_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h, s) = \int_{\mathbb{R}^N} \exp \left[-\beta \mathcal{H}_{\Lambda}^{(\tau)}(x_{\Lambda}) - s \sum_{i \in \Lambda} x_i^2 \right] dx_1 \dots dx_N. \quad (3.14)$$

За разглеждането от нас хамилтониан $Z_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h, s) < \infty$ за всяко K и h , при достатъчно голямо s . Условието за термодинамична еквивалентност между моделите (3.5) и (3.6) води до следното уравнение за сферичното поле s ,

$$-\frac{\partial}{\partial s} \ln Z_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h, s) = N, \quad (3.15)$$

което, разбира се, е еквивалентно на

$$N^{-1} \langle \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i^2 \rangle_{\Lambda}^{(\tau)} = 1, \quad (3.16)$$

където $\langle \cdot \rangle_{\Lambda}^{(\tau)}$ е математическото очакване спрямо разпределението (3.13), $N = |\Lambda|$ е броят на възлите в Λ . Термодинамичният потенциал (нормиран на една частица) в гаусовия модел се определя като

$$a_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h, s) = -\frac{1}{\beta N} \ln Z_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h, s). \quad (3.17)$$

Свободната енергия (нормирана на една частица) в средния сферичен модел $f_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h, s)$ се дефинира чрез трансформацията на Лежандър [29]

$$\beta f_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h) = \sup_s [\beta a_{\Lambda}(K, h, s) - s]. \quad (3.18)$$

Ясно е, че за всяка крайна област Λ супремумът се достига в точка $s = s_{\Lambda}(K, h)$, удовлетворяваща уравнението (3.15).

4. Теоретико-вероятностна интерпретация на фазовите преходи

Изучаването на системи от безкрайно много случаини величини, асоциирани с възлите на многомерни регулярни решетки и зависещи една от друга в съответствие с пространственото си разположение, е предмет на теорията на граничните гибсови мерки. Последните представляват фундаментален интерес, тъй като описват равновесените състояния на системата в термодинамичната граница. Тези гранични вероятностни разпределения могат да бъдат получени посредством граничен преход в разпределенията за краен обем. За начало на този нов и бързо развиващ се дял от теорията на вероятностите се счита краят на 1960-те години, когато в работите на Добрушин [30]-[33], Ланфорд и Рюел [34] се въвеждат основните понятия на теорията. В частност, един от най-интересните резултати се оказва фактът, че граничната гибсова мяра за даден тип решетка и дадено междучастично взаимодействие може да бъде неединствена. Физически това означава, че системата може да приема различни равновесни състояния при един и същи термодинамични параметри. Следователно, явлението неединственост на граничната гибсова мяра може да се интерпретира като фазов преход. По тази причина основен проблем на теорията става изучаването на структурата на множеството от всички гранични гибсови мерки. Без да изброяваме получените до сега общи и частни резултати, ще посочим, че голяма част от тях е отразена в [35].

Критичното поведение на статистическо-механичните системи може да се описва адекватно във вероятностни термини. Подходящ критерий за критичност, който е свързан с класическите теореми в теорията на вероятностите, като централната и нецентралната гранични теореми, е предложен в статиите [36]-[41]. Вероятностно описание на

критичното поведение на система от случайни величини $\{\sigma_i \in \mathbb{R}, i = 1, 2, \dots, n\}$ може да се даде чрез граничното (при $n \rightarrow \infty$) разпределение на "колективни" или "блокови" случайни величини от вида [41, 43]

$$S_n = B_n^{-1} \left\{ \sum_{i=1}^n \sigma_i - E\left(\sum_{i=1}^n \sigma_i\right) \right\}. \quad (4.1)$$

Тук $E(\dots)$ означава математическото очакване, а B_n е нормираща константа такава, че $B_n \rightarrow \infty$ когато $n \rightarrow \infty$. Ако случайните величини $\{\sigma_i\}$ са независими с крайна дисперсия, то съгласно централната гранична теорема разпределението на S_n с $B_n \sim n^{1/2}$ ще клони слабо при $n \rightarrow \infty$ към нормалното (гаусово) разпределение. В случая, когато $\{\sigma_i\}$ са независими но имат безкрайна дисперсия, при подходящи допълнителни условия върху "опашките" на разпределението на σ_i , съществува устойчиво гранично разпределение със степенен показател a , когато $B_n \sim n^a$, $a \in (\frac{1}{2}, 1)$, т.е. валидна е нецентралната гранична теорема.

Друг интересен случай, разглеждан в класическата теория на вероятностите е когато разпределението на $\{\sigma_i, i = 1, \dots, n\}$ зависи от n , т.е. когато имаме триъгълна редица (схема) от независими случайни величини $\{\sigma_i^{(n)} \in \mathbb{R}, i = 1, 2, \dots, n; n = 1, 2, \dots\}$, тогава граничното разпределение (ако то съществува) на сумата $B_n^{-1} \sum_i^n \sigma_i^{(n)}$ принадлежи на класата на безкрайно делимите разпределения. Горните факти са стандартни резултати на теорията на вероятностите [42]. Възникава логично въпросът, какво става в случая на зависими случайни величини?

В случай на модел от типа на Изинг, ще следваме формулировките на Елис и Нюман [43]-[45]. За всяко $n = 1, 2, \dots$ разглеждаме триъгълна редица от зависими случайни величини $\{\sigma_i^{(n)}, i \in \Lambda_n\}$ със съвместно

вероятностно разпределение

$$dP_n(x_1, \dots, x_n; \rho) = Z_n^{-1} \exp \left(\sum_{i,j \in \Lambda_n} J_{i,j}^{(n)} x_i x_j \right) \prod_{i \in \Lambda_n} d\rho(x_i), \quad (4.2)$$

където Λ_n са крайни подмножества на \mathbf{z}^d , които клонят в подходящ смисъл към \mathbf{z}^d , когато $n \rightarrow \infty$, ρ е крайна мярка на \mathbb{R}^1 и

$$Z_n = \int_{\mathbb{R}^n} \exp \left(\sum_{i,j \in \Lambda_n} J_{i,j}^{(n)} x_i x_j \right) \prod_{i \in \Lambda_n} d\rho(x_i), \quad (4.3)$$

е статистическата сума на модела.

Тук всички термодинамични параметри са включени в ρ , т.е. ние разглеждаме вероятностна мярка ρ , която зависи от променливите K_1, \dots, K_q , $q \in \{2, 3, \dots\}$, и приемаме, че системата има критична точка при $K_j = K_{j,c}$, $j = 1, \dots, q$. Аналогично на обобщението на класически резултати на теория на вероятностите за случая на триъгълна редица от случайни величини, ние можем да изследваме асимптотичните разпределения на $S_n(\rho_n)$, дефинирани за случайните величини $\{\sigma_i^{(n)}(\rho_n)\}$, които имат съвместно вероятностно разпределение от вида (4.2) с ρ_n вместо ρ . Разпределението, което възниква когато ρ_n клони (при $n \rightarrow \infty$) към критична точка, т.е. критичната мярка $\rho = \rho(K_{1,c}, \dots, K_{q,c})$, е изследвано в [44, 45], при условията

$$J_{i,j}^{(n)} = 1/2n, \quad \int_{\mathbb{R}} \exp(x^2/2) d\rho < \infty, \quad \int_{\mathbb{R}} d\rho = 1. \quad (4.4)$$

Резултатите показват, че за някои модели възникват критични показатели ν_1, \dots, ν_q и q константи на подобие b_1, \dots, b_q , такива, че сумите

$$n^{-a} \sum_{i=1}^n \sigma_i^{(n)}(K_{1,c} + b_1 n^{-1/\nu_1}, \dots, K_{q,c} + b_q n^{-1/\nu_q}) \quad (4.5)$$

имат добре дефинирано асимптотично поведение в границата $n \rightarrow \infty$. Стойностите на степенните показатели a и ν_j , $j = 1, \dots, q$, при които граничното (при $\Lambda_n \rightarrow \mathbf{z}^d$) вероятностно разпределение на (4.5) е неизродено, се изразяват чрез термодинамичните критични индекси. Моментите на това гранично разпределение са гладки

функции на амплитудите b_1, \dots, b_q , а след въвеждането на определени, зависещи от модела кофициенти C_1, \dots, C_q , стават и универсални функции на $x_i = C_i b_i$, $i = 1, \dots, q$. Тези универсални функции са еднакви за всички системи от дадения термодинамичен критичен клас, които се разглеждат при еднакви гранични условия; те съвпадат със съответните производни от универсалната функция на крайноразмерно подобие за плътността на свободната енергия по термодинамичния параметър, който е спрегнат на разглежданата блочна термодинамична променлива. По такъв начин амплитудите b_1, \dots, b_q играят двойствена роля: от една страна те определят пътя, по който мярката dP_n се стреми при $n \rightarrow \infty$ към граничната критична мярка dP_∞ , а от друга страна тези амплитуди параметризират областта на крайноразмерното подобие и в това свое качество се появяват като променливи, от които зависят функциите на крайноразмерно подобие.

Въз основа на редица строги резултати, получени за прости модели на системи от взаимодействащи (зависими) случаини величини, се очертава следната теоретико-вероятностна класификация на термодинамичните фази:

валидност на закона за големите числа \longleftrightarrow чистота на фазата

валидност на централната гранична теорема \longleftrightarrow некритичност на фазата

валидност на нецентралната гранична теорема \longleftrightarrow критичност на фазата

5. Цел и структура на дисертацията

Целта на настоящата дисертация е да се моделира влиянието на краен размер и различни гранични условия върху статистическите и термодинамични свойства на класически решетъчни системи в околност

на критична точка. За обект на изследване е избран точно решимия среден сферичен модел с геометрия на безкрайен слой с дебелина L . Изследването се съсредоточава върху изучаване на свойствата на модела от гледна точка на теорията на крайноразмерното подобие и теорията на повърхнинните фазови преходи (глави 2, 3); изследване на някои нови ефекти, като разцепване на профила на намагнитване при гранични условия на Дирихле и стъпаловидно (+-) външно поле (глава 4); влияние на граничните условия при различни температурни и полеви режими (глава 5).

Дисертацията се състои от увод (Глава 1) и четири приносни глави. В Глава 2 е разгледан тримерният среден сферичен модел с L -слойна геометрия при гранични условия на Нойман-Нойман и Нойман-Дирихле. Повърхнинните полета h_1 и h_L се предполага, че действат върху повърхностите, ограничаващи системата. Нашите главни резултати за крайноразмерното поведение на плътността на свободната енергия в критичната област са дадени за гранични условия на Нойман-Нойман и Нойман-Дирихле. Хипотезата на Привман-Фишър за крайноразмерно подобие при свободната енергия е проверена и са получени експлицитно съответните функции за крайноразмерно подобие при гранични условия на Нойман-Нойман и Нойман-Дирихле. В случая на гранични условия на Нойман е намерено, че видът на крайноразмерното подобие за сингулярната (в термодинамичната граница) част на плътността на свободната енергия е

$$f_{L,sing}^{(b)}(K, h_1, h_L) \cong L^{-3} X(atL^{1/\nu}, bh_1L^{\Delta_1^{sb}/\nu}, bh_LL^{\Delta_1^{sb}/\nu}), \quad (5.1)$$

където $t := (K_{c,L}^{(b)} - K)$ е отместваната константа на взаимодействие, $\nu = 1$, метричният фактор е $b = K^{-1/2}$ и $\Delta_1^{sb} = 3/2$ е новият повърхнинен критичен показател; този показател съответства на специален (повърхнинно-обемен) фазов преход в модела. Ако полето е приложено върху слой,

който е на разстояние ρL^α , $\rho > 0$, $0 \leq \alpha < 1$, от границата на Дирихле, се появява семейство от критични показатели: техните стойности интерполират непрекъснато между екстремалните случаи $\Delta_1^0 = 1/2$ и $\Delta_1^{sp} = 3/2$. В този случай крайноразмерното подобие за сингулярната част на плътността на свободната енергия е

$$f_{L,sing}^{(c)}(K, h_l) \cong L^{-3} X(atL^{1/\nu}, bh_l L^{\Delta_1(\alpha)/\nu}). \quad (5.2)$$

Тук $\nu = 1$ е критичният показател на обемната корелационна дължина, и $\Delta_1(\alpha) = \frac{1}{2} + \alpha$ е семейство от критични показатели на слоя, зависещи от параметъра α ($0 \leq \alpha < 1$).

В Глава 3 е разгледан модифициран тримерен среден сферичен модел с L -слойна геометрия при гранични условия на Нойман-Нойман. В модела са включени две сферични полета: повърхнинно, с което фиксираме средно квадратичната стойност на спиновете на границите да е равна на някакво $\rho > 0$, и обемно, с което налагаме стандартното сферично условие. Ние се интересуваме главно от критичното поведение на локалните възприемчивости $\chi_{1,1}$,

$$\chi_{1,1}(T; \rho) = \lim_{L \rightarrow \infty} \left[-L \partial^2 f_L(T, h_1, h_L; \rho) / \partial h_1^2 \right]_{|h_1=h_L=0}, \quad (5.3)$$

и $\chi_{1,l}$ при l близо до средата на системата. Оказва се, че поведението на $\chi_{1,1}$ в околността на обемната критична точка T_c зависи съществено от ρ . Ние намираме, че известният резултат $\gamma_{1,1} = 1$ се получава, само ако $\rho = \rho_c := 2 - (12K_c)^{-1}$, където K_c е безразмерната критична константа на взаимодействие. Когато $\rho > \rho_c$, $\chi_{1,1}$ е експоненциално разходяща при $T \rightarrow T_c^+$. Когато $\rho < \rho_c$, тогава $\chi_{1,1}$ има сингулярност, характерна за сферичния модел с гранични условия на Дирихле, т.е $\gamma_{1,1} = -1$. За $\rho = 1$ ние намираме, че $\chi_{1,1}$ е крайна при обемната критична температура T_c , за разлика от насъкоро получената стойност $\gamma_{1,1} = 1$ в случай на само едно глобално сферично условие.

В Глава 4 ние изследваме ефектите на разцепване във феромагнитния среден сферичен модел със слоиста геометрия с крайна дебелина L , при гранични условия на Дирихле и в присъствието на стъпаловидно (+-) външно поле

$$h_s(r) = h_L \operatorname{sgn}[(L+1)/2 - r], \quad (5.4)$$

където амплитудата $h_L \rightarrow 0$ при $L \rightarrow \infty$.

Изследван е профилът на намагнитване при три различни температурни и полеви режима (високотемпературна обемна граница, критичен режим на крайоразмерно подобие и нискотемпературен режим в умерено поле). Нашият анализ включва изследване на решенията на средното сферично условие за сдвоени и разделени подсистеми при всеки от тези режими. При критичния режим на крайоразмерно подобие, профилът за сдвоени подсистеми се различава от профила за разделените такива. Разцепването се възстановява асимптотично само при напускане на безкрайно близката околност на критичната точка. При нискотемпературния умерено полеви режим, когато $K > K_c$ е фиксирано, $h_L = O(L^{-2})$, профилът на намагнитване е краен, не клони към нула и е точно разцепен. В общия случай, хипотезата за разцепване се нарушава, тъй като средноквадратичната дължина на спиновете при границата на Дирихле (Нойман) е различна от тази в централните слоеве на системата при стъпаловидно (хомогенно) поле.

В Глава 5, феромагнитният среден сферичен модел със слоиста геометрия с дебелина L и гранични условия на Нойман-Дирихле е изследван при наличието на стъпаловидно (+-) външно поле, което се променя на разстояние Lx ($0 < x < 1$) от границата на Нойман,

$$h(\vec{r}, x) = h_L \operatorname{sgn} \left(Lx + \frac{1}{2} - r_1 \right). \quad (5.5)$$

Амплитудата на полето h_L клони към нула в термодинамичната граница. Получени са и са изследвани точни изрази за профила на намагнитване при три различни температурни и полеви режима. Показно е, че в режима на крайноразмерно подобие има две специални стойности на x , означени с $x_{1,2}$, $0 < x_1 < x_2 < 1$, които зависят от премащабираните температурна и полева променливи и имат свойството, че намагнитването променя знака само когато $x_1 \leq x \leq x_2$. Намагнитването е навсякъде отрицателно, когато $0 \leq x < x_1$, и навсякъде положително, когато $x_2 < x \leq 1$. В нискотемпературния режим с умерно поле ние установяваме, че полево индуцираната критична точка \tilde{T}_c , намерена от Патрик [46] в случая на периодични гранични условия и стъпаловидно поле с $x = 1/2$, се появява при $x = 1/3$. Ние намираме, че при подходящ полеви режим под \tilde{T}_c профилът на намагнитване има замразена компонента, както в случая [46], и температурно зависим член, който отсъства в случая на периодични гранични условия.

Резултатите от дисертацията се съдържат в статиите [47], [48], които са излезли от печат, [49] приета за печат, и [50] изпратена за публикация.

Накрая изказвам благодарността си към моя научен ръководител ст.н.с. I ст. д-р Йордан Георгиев Бранков за постановката на темата, помощта и ползотворните дискусии, които ми е оказвал.

Благодарен съм и на н.с. I ст. д-р Даниел Данчев и н.с. I ст. д-р Нина Пашева, за вниманието и съдействието, което са ми оказвали по време на изработването на настоящата дисертация.

Глава 2

Среден сферичен модел: Нови повърхнинни критични показатели

1. Увод

Добре известно е, че в статистическо-механичните системи с повърхности, в зависимост от наложените гранични условия, като променени повърхнинни взаимодействия и магнитни полета приложени върху границите, могат да бъдат осъществени разнообразни повърхнинни фазови преходи (за общ преглед виж, напр. [51, 52, 53]). Ако променените повърхнинни взаимодействия са достатъчно големи, повърхността се подрежда при някаква температура T_s , по-висока от обемната критична температура T_c на съответната безкрайна система. Намаляването на температурата води до така наречения "необикновен" преход, при който обемът се подрежда при T_c , в присъствието на вече подредена повърхност. В обратния случай, когато увеличението на повърхнинните взаимодействия не е достатъчно за да компенсира ефекта на липсващите съседи върху повърхността (в най-разпространения случай на така наречените "свободни гранични условия"), критичното поведение на повърхността ще бъде управлявано от обема: това е обикновен фазов преход. Граничният на тези два типа случай се определя като "специален", или "повърхнинно-обемен", повърхнинен фазов преход. За да се

характеризира сингулярното поведение на различните повърхнинни величини, напр. намагнитването на повърхността, са дефинирани различни повърхнинни критични показатели за всеки клас от повърхнинните фазови преходи. Добре установен факт сега е, че за обикновения фазов преход съществува само един независим повърхнинен критичен показател (в допълнение към обемните критични показатели). При необикновения клас на универсалност на повърхността, всички повърхнинни показатели могат да бъдат изразени чрез обемните показатели. Специалният фазов преход, който е граничен и, следователно, е мултикритичен фазов преход, се характеризира чрез два нови независими критични показатели. В този случай се появява един допълнителен показател Φ , който описва как линията на повърхнинните фазови преходи се свързва с линията на необикновените преходи във фазовата диаграма.

В настоящата глава ние ще се интересуваме от крайноразмерното подобие в поведението на 3-мерна кубична решетъчна система със слойна геометрия от типа $L \times \infty^2$. Границите условия на Нойман-Нойман или Нойман-Дирихле ще бъдат наложени върху крайното измерение на системата. Предполага се, че повърхнинните полета h_1 и h_L действуват на границите на системата.

В литературата за решетъчни спинови системи двете понятия "свободни" и "фиксирани" гранични условия са използвани вместо граничните условия на Дирихле (виж [8], [29], [54], [55]). За граничните условия на Нойман се използва терминът "свободни" гранични условия [54, 55]. За да избегнем недоразумения, ние използваме тук съответната класическа терминология, която произлиза от непрекъснатите модели.

Средният сферичен модел се използва широко за проверка както на теорията на крайноразмерното подобие, така и на теорията на повърхнинните фазови преходи (виж напр. [51], [8], [11] и [56] за преглед). Въпреки това, ситуацията с повърхнинните показатели, особено тези на специалния фазов преход, не е изцяло изяснена. d -мерният модел с L на брой слоеве, с гранични условия на Дирихле, при наличието на външно хомогенно магнитно поле h и повърхнинно поле h_1 действуващо върху първия слой, е разгледан в [57]. За $d = 3$ е намерено, че сингуллярната част на плътността на свободната енергия на системата (нормирана на $k_B T$ и спин) има водеща асимптотика от вида

$$f_L(T, h, h_1) \cong L^{-d} X(a t L^{1/\nu}, b h L^{\Delta/\nu}, c h_1 L^{\Delta_1/\nu}). \quad (1.1)$$

Тук $\nu = 1$, $\Delta = 5/2$, $\Delta_1 = 1/2$ са показателите на подобие за $d = 3$, t е отместваната нормирана критична температура, $t = (T - T_c)/T_c + \varepsilon(L)$, където $\varepsilon(L)$ е отместването, което се подчинява на $\lim_{L \rightarrow \infty} \varepsilon(L) = 0$, и a, b, c са (неуниверсални) метрични фактори. Фактически функционалната зависимост, дадена с това уравнение, се очаква да бъде изпълнена за която и да е система, която претърпява обикновен фазов преход. Единственият независим нов повърхнинен критичен показател в този случай е $\Delta_1 = \Delta_1^\circ$.

Както е добре известно, безкрайният транслационно инвариантен сферичен модел е еквивалентен на границата $n \rightarrow \infty$ на подобна вектори спинове система от n -компонентни [58], [59], но сферичният модел със свободни повърхности (или по-общо, без транслационна инвариантност) не представлява такава граница [60]. Последното става ясно, ако се изследват повърхнинните фазови преходи за модела $O(n)$ в границата $n \rightarrow \infty$. В този случай получаваме [51] $\Delta_1 = 1/(d-2)$ (т.е. $\Delta_1 = 1$ за $d = 3$) за обикновените и $\Delta_1 = 2/(d-2)$ за специалните

фазови преходи. Опит за изясняване на ситуацията със специалните и необикновените фазови преходи в сферичния модел е правен в [61] и в [62], където е разгледан сферичният модел с гранични условия на Дирихле и усилени повърхнинни взаимодействия $K_s = K(1 + w)$ (K е обемната константа на взаимодействие и $w > 0$). Оказва се, че ако, както обикновено, е наложено само едно глобално средно сферично условие, моделът предсказва доста нефизично съществуването на необикновен фазов преход [61], когато $w > 1/(2d - 2)$ за $d \geq 3$ (в [61] са разгледани само целочислени размерности). Но, ако се въведе едно допълнително условие, за да се осигури подходящо поведение на повърхнинните спинове, получаваме [62], че за която и да е стойност на $w > 0$ не съществува никаква друга критична температура освен обемната, при условие, че $d \leq 3$. Това е в съгласие с резултатите за модела $O(n)$ в границата $n \rightarrow \infty$, когато $\Phi = (d - 3)/(d - 2)$. За критичния показател $\gamma_{1,1}$ на локалната повърхнинна възприемчивост

$$\chi_{1,1}(T) = \frac{1}{2} \lim_{L \rightarrow \infty} \left[-L \partial^2 f_L(T, h, h_1) / \partial h_1^2 \right]_{h=h_1=0} \quad (1.2)$$

е намерено, че е $\gamma_{1,1}^\circ = -1$ за сферичния модел при $d = 3$.

В настоящата глава ние ще покажем, че сингулярната част на плътността на свободната енергия в сферичния модел при гранични условия на Нойман-Нойман може да бъде представена във вида (1.1) с $\Delta_1 = \Delta_1^{\text{sb}} = 3/2$. Според общата теория на крайноразмерното подобие, това отговаря на очакваната форма на сингулярната част на свободната енергия за дадена краина система, претърпяваща специален фазов преход в случай, когато $\Phi = 0$ [56]. Съответната функция на подобие, X , зависи, разбира се, от граничните условия. Накрая, в случай на гранични условия на Нойман-Дирихле,

с повърхнинни полета h_1 и h_2 , съответно, ще бъде показано ($d = 3$) , че

$$f_L(T, h_1, h_L) \cong L^{-3} X(atL^{1/\nu}, c_1 h_1 L^{\Delta_1^{\text{sb}}/\nu}, c_L h_L L^{\Delta_1^{\text{o}}/\nu}). \quad (1.3)$$

Главата е структурирана по следния начин. В раздел 2 ние описваме модела и представяме подходящите начални изрази за средните сферични условия и за плътността на свободната енергия. Нашите главни резултати за крайноразмерното подобие на плътността на свободната енергия в критичната област са дадени в раздел 3 , за граничните условия на Нойман-Нойман, и в раздел 4, за граничните условия на Нойман-Дирихле. Интересният случай на локално поле, действуващо на l -тия слой в система с гранични условия на Нойман-Дирихле е разгледан в раздел 5. Показано е, че се появява непрекъснато семейство от критични показатели на слоя $\Delta_1(l)$, в зависимост от степента на L , с която се задава разстоянието до границата на Дирихле. Главата завършва с кратка дискусия, дадена в раздел 6.

2. Моделът

Ние разглеждаме среден сферичен модел с феромагнитни взаимодействия между най-близките съседи в прости кубични решетки. Във всеки възел на решетката $\vec{r} = (r_1, r_2, r_3) \in \mathbb{Z}^3$ съществува случайна (спинова) величина $\sigma(\vec{r}) \in \mathbb{R}$ и енергията на конфигурацията $\sigma_\Lambda = \{\sigma(\vec{r}), \vec{r} \in \Lambda\}$ в краяна област $\Lambda \subset \mathbb{Z}^3$, съдържаща $|\Lambda|$ на брой възли , се дава чрез квадратичната форма

$$\begin{aligned} \beta \mathcal{H}_\Lambda^{(\tau)}(\sigma_\Lambda | K, h_\Lambda; s) = & -K \sum_{\vec{r}, \vec{r}' \in \Lambda} Q_\Lambda(\vec{r} - \vec{r}') \sigma(\vec{r}) \sigma(\vec{r}') \\ & - K \sum_{\vec{r} \in \Lambda, \vec{r}' \in \Lambda^c} Q_\Lambda(\vec{r} - \vec{r}') \sigma(\vec{r}) \sigma(\vec{r}') + s \sum_{\vec{r} \in \Lambda} \sigma^2(\vec{r}) - \sum_{\vec{r} \in \Lambda} h(\vec{r}) \sigma(\vec{r}). \end{aligned} \quad (2.1)$$

Тук $\beta = 1/k_B T$ е реципрочната температура; $K = \beta J$ е безразмерната константа на взаимодействие; $h_\Lambda = \{h(\vec{r}), \vec{r} \in \Lambda\}$, като $h(\vec{r}) \in \mathbb{R}$ е външно магнитно поле; s е сферичното поле което трябва да бъде

определеното от средното сферично условие, виж уравнение (2.24) по-долу; $Q_\Lambda(\vec{r} - \vec{r}')$, където $\vec{r}, \vec{r}' \in \mathbb{Z}^3$, е матрицата на близост за безкрайната кубична решетка: $Q_\Lambda(\vec{r} - \vec{r}') = 1$, когато $|\vec{r} - \vec{r}'| = 1$, и $Q_\Lambda(\vec{r} - \vec{r}') = 0$ в другите случаи. Първата сума в дясната страна на (2.1) описва взаимодействието по двойки между спиновете в Λ , докато втората сума е граничният член, който зависи от граничните условия (обозначени с горния индекс τ): тя описва взаимодействието на спиновете в областта Λ с определена конфигурация $\{\sigma(\vec{r}), \vec{r} \in \Lambda^c\}$ в допълненето $\Lambda^c = \mathbb{Z}^3 \setminus \Lambda$. Ние приемаме Λ да бъде паралелепипед $\Lambda = \mathcal{L}_1 \times \mathcal{L}_2 \times \mathcal{L}_3$, като $\mathcal{L}_i = \{1, \dots, L_i\}$, и разглеждаме в ексиплицитен вид случая на слойна геометрия, който се получава в резултат на границата $L_2, L_3 \rightarrow \infty$ при крайни стойности на $L_1 = L$. В посока r_1 е достатъчно да се определят стойностите на $\sigma(0, r_2, r_3)$ и $\sigma(L + 1, r_2, r_3)$ за всички $(r_2, r_3) \in \mathcal{L}_2 \times \mathcal{L}_3$. Крайноразмерното подобие за средния сферичен модел в присъствието на повърхнинни полета досега е изучено [29], [57], [61], [62], при периодични, антипериодични и при

(a) Гранични условия на Дирихле :

$$\sigma(0, r_2, r_3) = \sigma(L + 1, r_2, r_3) = 0. \quad (2.2)$$

Тук ние разглеждаме следните нови случаи

(b) Гранични условия на Нойман :

$$\sigma(0, r_2, r_3) = \sigma(1, r_2, r_3), \quad \sigma(L + 1, r_2, r_3) = \sigma(L, r_2, r_3); \quad (2.3)$$

(c) Гранични условия на Нойман-Дирихле:

$$\sigma(0, r_2, r_3) = \sigma(1, r_2, r_3), \quad \sigma(L + 1, r_2, r_3) = 0. \quad (2.4)$$

Очевидно терминологията използвана по-горе се оправдава от аналогията с континуалната граница. Случаят на свободни повърхности в система със слойна геометрия (в границата $L_2, L_3 \rightarrow \infty$), разгледан в литературата [29], [57], [61], [62], отговаря на граничните условия

на Дирихле ($\tau_1 = a$). За да дефинираме изцяло крайната система, ние възприемаме периодични гранични условия (p) в направленията r_2 и r_3 , т.е. за всички $\vec{r} \in \Lambda$ и $m, n \in \mathbf{Z}$, ние полагаме

$$\sigma(r_1, r_2 + mL_2, r_3 + nL_3) = \sigma(r_1, r_2, r_3). \quad (2.5)$$

Удобно е конфигурационното пространство $\Omega_\Lambda = \mathbf{R}^{|\Lambda|}$ да се разгледа като Евклидово векторно пространство, където всяка конфигурация е представена от вектор-стълб σ_Λ с компоненти, означени според лексикографския ред на множеството $\{(r_1, r_2, r_3) \in \Lambda\}$. Да допуснем, че σ_Λ^\dagger е съответният транспониран вектор-ред и нека точката (\cdot) да определя матрично умножение. След това, за дадени гранични условия $\tau = (\tau_1, \tau_2, \tau_3)$, определени за всяка двойка противоположни страни на Λ чрез $\tau_i = p$ (за периодични условия), a (за условия на Дирихле), b (за условия на Нойман) или c (за условия на Нойман-Дирихле), изразът за енергията (2.1) има вида

$$\beta \mathcal{H}_\Lambda^{(\tau)}(\sigma_\Lambda | K, h_\Lambda; s) = -K \sigma_\Lambda^\dagger \cdot Q_\Lambda^{(\tau)} \cdot \sigma_\Lambda + s \sigma_\Lambda^\dagger \cdot \sigma_\Lambda - h_\Lambda^\dagger \cdot \sigma_\Lambda. \quad (2.6)$$

Тук матрицата на взаимодействие $Q_\Lambda^{(\tau)}$ с размери $|\Lambda| \times |\Lambda|$ може да бъде записана така

$$Q_\Lambda^{(\tau)} = (\Delta_1^{(\tau_1)} + 2E_1) \times (\Delta_2^{(\tau_2)} + 2E_2) \times (\Delta_3^{(\tau_3)} + 2E_3), \quad (2.7)$$

където \times означава външно произведение на съответните матрици, $\Delta_i^{(\tau_i)}$ е дискретен лапласиан $L_i \times L_i$ с гранични условия τ_i , и E_i е единична матрица $L_i \times L_i$. Едномерният дискретен лапласиан $\Delta^{(\tau)}$ на $\mathcal{L} = \{1, \dots, L\}$ се определя с действието си върху произволен вектор $f = \{f(1), \dots, f(L)\} \in \mathbf{R}^L$ както следва:

$$(\Delta^{(\tau)} f)(r) = f(r-1) - 2f(r) + f(r+1), \quad 2 \leq r \leq L-1, \quad (2.8)$$

и на границата $\partial\mathcal{L} = \{1, L\}$,

$$(\Delta^{(a)} f)(1) = -2f(1) + f(2), \quad (\Delta^{(a)} f)(L) = f(L-1) - 2f(L)$$

$$\begin{aligned}
(\Delta^{(b)} f)(1) &= -f(1) + f(2), & (\Delta^{(b)} f)(L) &= f(L-1) - f(L) \\
(\Delta^{(c)} f)(1) &= -f(1) + f(2), & (\Delta^{(c)} f)(L) &= f(L-1) - 2f(L) \\
(\Delta^{(p)} f)(1) &= f(L) - 2f(1) + f(2), & (\Delta^{(p)} f)(L) &= f(L-1) - 2f(L) + f(1)
\end{aligned} \quad (2.9)$$

Както е добре известно, пълният набор от ортонормирани собствени функции, $\{u_L^{(\tau)}(r, k), k = 1, \dots, L\}$, на едномерния дискретен лапласиан, определен чрез уравнения (2.8) и (2.9), се дава от

$$u_L^{(a)}(r, k) = [2/(L+1)]^{1/2} \sin[r\varphi_L^{(a)}(k)]; \quad (2.10)$$

$$u_L^{(b)}(r, k) = \begin{cases} L^{-1/2} & \text{за } k = 1 \\ (2/L)^{1/2} \cos[(r - \frac{1}{2})\varphi_L^{(b)}(k)] & \text{за } k = 2, \dots, L; \end{cases} \quad (2.11)$$

$$u_L^{(c)}(r, k) = 2/(2L+1)^{1/2} \cos[(r - \frac{1}{2})\varphi_L^{(c)}(k)]; \quad (2.12)$$

$$u_L^{(p)}(r, k) = L^{-1/2} \exp[-ir\varphi_L^{(p)}(k)], \quad (2.13)$$

където

$$\varphi_L^{(a)}(k) = \frac{\pi k}{L+1}, \quad \varphi_L^{(b)}(k) = \frac{\pi(k-1)}{L}, \quad \varphi_L^{(c)}(k) = \frac{\pi(2k-1)}{2L+1}, \quad \varphi_L^{(p)}(k) = \frac{2\pi k}{L}. \quad (2.14)$$

Съответните собствени стойности са

$$\lambda_L^{(\tau)}(k) = -2 + 2 \cos \varphi_L^{(\tau)}(k), \quad k = 1, \dots, L. \quad (2.15)$$

Собствените функции на матрицата на взаимодействия (2.7) имат вида

$$u_{\Lambda}^{(\tau)}(\vec{r}, \vec{k}) = u_{L_1}^{(\tau_1)}(r_1, k_1) u_{L_2}^{(\tau_2)}(r_2, k_2) u_{L_3}^{(\tau_3)}(r_3, k_3), \quad \vec{k} \in \Lambda, \quad (2.16)$$

и съответните собствени стойности са

$$\mu_{\Lambda}^{(\tau)}(\vec{k}) = 2 \sum_{\nu=1}^3 \cos \varphi_{L_{\nu}}^{(\tau_{\nu})}(k_{\nu}), \quad \vec{k} \in \Lambda. \quad (2.17)$$

За да се осигури положителност на всички собствени стойности $K\mu_{\Lambda}^{(\tau)}(\vec{k}) + s$, $\vec{k} \in \Lambda$, на квадратичната форма в $\beta\mathcal{H}_{\Lambda}^{(\tau)}(\sigma_{\Lambda}|K, h_{\Lambda}; s)$, виж уравнения (2.1), (2.6), сферичното поле s трябва да удовлетворява неравенството

$$s > K \max_{\vec{k} \in \Lambda} \mu_{\Lambda}^{(\tau)}(\vec{k}) := K\mu_{\Lambda}^{(\tau)}(\vec{k}_0). \quad (2.18)$$

С оглед на това условия, тук е удобно да се въведе едно изместено и нормирано сферично поле $\phi > 0$ чрез полагането $s = s(\phi)$, където

$$s(\phi) := K[\phi + \mu_{\Lambda}^{(\tau)}(\vec{k}_0)]. \quad (2.19)$$

Сега собствените стойности на енергията могат да бъдат написани във вида

$$s(\phi) - K\mu_{\Lambda}^{(\tau)}(\vec{k}) = K[\phi + \omega_{\Lambda}^{(\tau)}(\vec{k})], \quad (2.20)$$

където $\omega_{\Lambda}^{(\tau)}(\vec{k}) := \mu_{\Lambda}^{(\tau)}(\vec{k}_0) - \mu_{\Lambda}^{(\tau)}(\vec{k})$ е отместеният спектър.

Съвместното вероятностно разпределение на случайните променливи величини $\sigma_{\Lambda} = \{\sigma(\vec{r}), \vec{r} \in \Lambda\}$ зависи от граничните условия τ , от константата на взаимодействие K , от сферичното поле ϕ , и от външното поле $h_{\Lambda} = \{h(\vec{r}), \vec{r} \in \Lambda\}$; то се задава чрез мярката на Гибс

$$d\mu_{\Lambda}^{(\tau)}(\sigma_{\Lambda}|K, h_{\Lambda}; \phi) = [Z_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h_{\Lambda}; \phi)]^{-1} \exp[-\beta \mathcal{H}_{\Lambda}^{(\tau)}(\sigma_{\Lambda}|K, h_{\Lambda}; s(\phi))] \prod_{\vec{r} \in \Lambda} d\sigma(\vec{r}), \quad (2.21)$$

където $d\sigma(\vec{r})$ е лебеговата мярка върху \mathbb{R} и

$$Z_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h_{\Lambda}; \phi) = \int_{\mathbb{R}^{|\Lambda|}} \exp[-\beta \mathcal{H}_{\Lambda}^{(\tau)}(\sigma_{\Lambda}|K, h_{\Lambda}; s(\phi))] \prod_{\vec{r} \in \Lambda} d\sigma(\vec{r}) \quad (2.22)$$

е статистическата сума за модела на Гаус. Последната е крайна за всички $\phi > 0$ и равна на $+\infty$ за $\phi \leq 0$.

Плътността на свободната енергия на средния сферичен модел в ограничната област Λ се дефинира чрез трансформацията на Лежандър

$$\beta f_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h_{\Lambda}) := \sup_{\phi} \left\{ -|\Lambda|^{-1} \ln Z_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h_{\Lambda}; \phi) - s(\phi) \right\}. \quad (2.23)$$

Тук точната горна граница се достига върху решението $\phi = \phi_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h_{\Lambda})$ (за краткост ще се обозначи с $\phi_{\Lambda}^{(\tau)}$) на средното сферично условие

$$|\Lambda|^{-1} \sum_{\vec{r} \in \Lambda} \langle \sigma^2(\vec{r}) \rangle_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h_{\Lambda}; \phi) = 1, \quad (2.24)$$

където $\langle \dots \rangle_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h_{\Lambda}; \phi)$ означава математическото очакване по отношение на мярката (2.21).

Чрез пряка оценка на интегралите в статистическата сума (2.22), получаваме

$$\begin{aligned} \beta f_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h_{\Lambda}) &= \frac{1}{2} \ln(K/\pi) - K \mu_{\Lambda}^{(\tau)}(\vec{k}_0) \\ &+ \frac{1}{2} U_{\Lambda}^{(\tau)}(\phi_{\Lambda}^{(\tau)}) - \frac{1}{2} P_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h_{\Lambda}; \phi_{\Lambda}^{(\tau)}) - K \phi_{\Lambda}^{(\tau)}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Тук ние въвеждаме функцията

$$U_{\Lambda}^{(\tau)}(\phi) = |\Lambda|^{-1} \sum_{\vec{k} \in \Lambda} \ln[\phi + \omega_{\Lambda}^{(\tau)}(\vec{k})], \quad (2.26)$$

която описва приноса на спин-спиновото взаимодействие (ще се нарича "член на взаимодействието"), и функцията

$$P_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h_{\Lambda}; \phi) = (2K|\Lambda|)^{-1} \sum_{\vec{r} \in \Lambda} \frac{|\hat{h}_{\Lambda}^{(\tau)}(\vec{k})|^2}{\phi + \omega_{\Lambda}^{(\tau)}(\vec{k})}, \quad (2.27)$$

която представлява "полевия член". В (2.27) $\hat{h}_{\Lambda}^{(\tau)}(\vec{k})$ означава проекцията на конфигурацията на магнитното поле h_{Λ} върху собствените функции $\{\bar{u}_{\Lambda}^{(\tau)}(\vec{r}, \vec{k}); \vec{r} \in \Lambda\}$:

$$\hat{h}_{\Lambda}^{(\tau)}(\vec{k}) = \sum_{\vec{r} \in \Lambda} h(\vec{r}) \bar{u}_{\Lambda}^{(\tau)}(\vec{r}, \vec{k}). \quad (2.28)$$

Средното сферично условие (2.24) има вида

$$\frac{d}{d\phi} U_{\Lambda}^{(\tau)}(\phi) - \frac{\partial}{\partial \phi} P_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h_{\Lambda}; \phi) = 2K. \quad (2.29)$$

Сега ние полагаме $\tau_1 = \tau \in \{a, b, c\}$, $\tau_2 = \tau_3 = p$, отбеляваме, че за тези гранични условия $\vec{k}_0 = \{1, L_2, L_3\}$, и преминаваме към границата $L_2, L_3 \rightarrow \infty$ в израза (2.26) при фиксирано $L_1 = L$:

$$\begin{aligned} U_{L,3}^{(\tau)}(\phi) &:= \lim_{L_2, L_3 \rightarrow \infty} U_{\Lambda}^{(\tau,p,p)}(\phi) \\ &= \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L V_2[\phi + 2 \cos \varphi_L^{(\tau)}(1) - 2 \cos \varphi_L^{(\tau)}(k)], \end{aligned} \quad (2.30)$$

където

$$V_2(z) := (2\pi)^{-2} \int_0^{2\pi} d\theta_1 \int_0^{2\pi} d\theta_2 \ln \left[z + 2 \sum_{\nu=2}^3 (1 - \cos \theta_{\nu}) \right]. \quad (2.31)$$

Следващата ни стъпка е да се ограничим до разглеждането на хомогенни магнитни полета по направление на r_2 и r_3 при $h(\vec{r}) = h_{\text{surf}}(r_1)$, $\vec{r} \in \Lambda$, и в

същата граница ($L_2, L_3 \rightarrow \infty$) в (2.27) ние получаваме

$$\begin{aligned} P_L^{(\tau)}(K, h_{\text{surf}}; \phi) &:= \lim_{L_2, L_3 \rightarrow \infty} P_\Lambda^{(\tau, p, p)}(K, h_\Lambda; \phi) \\ &= \frac{1}{2KL} \sum_{k=1}^L \frac{[\hat{h}_{\text{surf}}^{(\tau)}(k)]^2}{\phi + 2 \cos \varphi_L^{(\tau)}(1) - 2 \cos \varphi_L^{(\tau)}(k)}, \end{aligned} \quad (2.32)$$

където

$$\hat{h}_{\text{surf}}^{(\tau)}(k) := \sum_{r=1}^L h_{\text{surf}}(r) u_L^{(\tau)}(r, k), \quad \tau \in \{a, b, c\}. \quad (2.33)$$

По този начин средното сферично условие (2.29) може да бъде написано във вида

$$W_{L,3}^{(\tau)}(\phi) - \frac{\partial}{\partial \phi} P_L^{(\tau)}(K, h_{\text{surf}}; \phi) = 2K, \quad (2.34)$$

където

$$W_{L,3}^{(\tau)}(\phi) := \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L W_2[\phi + 2 \cos \varphi_L^{(\tau)}(1) - 2 \cos \varphi_L^{(\tau)}(k)] \quad (2.35)$$

и

$$W_2(z) := \frac{d}{dz} V_2(z) = (2\pi)^{-2} \int_0^{2\pi} d\theta_1 \int_0^{2\pi} d\theta_2 \left[z + 2 \sum_{\nu=2}^3 (1 - \cos \theta_\nu) \right]^{-1}. \quad (2.36)$$

Отбележете, че след като сме оценили $W_{L,3}^{(\tau)}(\phi)$, съответният член на взаимодействието $U_{L,3}^{(\tau)}(\phi_L^{(\tau)})$ в сингулярната (в границата $L \rightarrow \infty$) част на плътността на свободната енергия, виж (2.25),

$$\beta f_{L,\text{sing}}^{(\tau)}(K, h_{\text{surf}}) = \frac{1}{2} U_{L,3}^{(\tau)}(\phi_L^{(\tau)}) - \frac{1}{2} P_L^{(\tau)}(K, h_{\text{surf}}; \phi_L^{(\tau)}) - K \phi_L^{(\tau)}, \quad (2.37)$$

може да бъде получен чрез интегрирането:

$$U_{L,3}^{(\tau)}(\phi_L^{(\tau)}) = U_{L,3}^{(\tau)}(\phi_0) + \int_{\phi_0}^{\phi_L^{(\tau)}} W_{L,3}^{(\tau)}(\phi). \quad (2.38)$$

Тук $\phi_L^{(\tau)} = \phi_L^{(\tau)}(K, h_{\text{surf}})$ е решението на уравнението (2.34), и $\phi_0 \geq 0$ е подходящо избрана константа.

От математическа гледна точка, задачата се състои в намирането на автомоделни асимптотика на сумите в уравнения (2.32) и (2.35), при приближаване към критичната точка, $K \rightarrow K_c$ и $\hat{h}_{\text{surf}}(r) \rightarrow 0$, когато $\phi \rightarrow 0$ едновременно с $L \rightarrow \infty$.

Уравненията (2.32) – (2.38) представляват началните изрази за нашия по-нататъшен анализ на крайноразмерното подобие.

3. Крайноразмерно подобие за гранични условия на Нойман-Нойман

В този раздел ние изучаваме крайноразмерното подобие за средното сферично условие и плътността на свободната енергия при гранични условия на Нойман-Нойман. Ние разглеждаме външните полета h_1 и h_L които действуват на повърхностите, които ограничават системата, така:

$$h_{\text{surf}}(r_1) = h_1 \delta_{r_1,1} + h_L \delta_{r_1,L}. \quad (3.1)$$

За проекцията (2.33) на граничните полета върху k -тия собствен вектор (2.11) ние получаваме

$$\hat{h}_{\text{surf}}^{(b)}(k) = \begin{cases} L^{-1/2}(h_1 + h_L) & \text{за } k = 1 \\ (2/L)^{1/2}[h_1 - (-1)^k h_L] \cos \frac{1}{2}\varphi_L^{(b)}(k) & \text{за } k = 2, \dots, L. \end{cases} \quad (3.2)$$

От (2.32) и (3.2), приемайки, че L е четно число, ние намираме, че полевият член има вида

$$\begin{aligned} P_L^{(b)}(K, h_1, h_L; \phi) = & \\ & \frac{(h_1 + h_L)^2}{2KL^2} \left[\frac{1}{\phi} - \frac{L}{4} + \frac{1}{2} + \left(1 + \frac{\phi}{4}\right) \sum_{k=1}^{L/2-1} \left(1 + \frac{\phi}{2} - \cos \frac{2k\pi}{L}\right)^{-1} \right] + \\ & \frac{(h_1 - h_L)^2}{2KL^2} \left[-\frac{L}{4} + \left(1 + \frac{\phi}{4}\right) \sum_{k=1}^{L/2} \left(1 + \frac{\phi}{2} - \cos \frac{(2k-1)\pi}{L}\right)^{-1} \right]. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Тъй като $\phi > 0$, ние полагаме $1 + \phi/2 = \cosh x$, и разглеждаме първо сумата

$$S_1(x) = \sum_{k=1}^{L/2-1} \left(\cosh x - \cos \frac{2k\pi}{L} \right)^{-1}. \quad (3.4)$$

Чрез използване на тъждеството [65]

$$\sum_{k=1}^{n-1} \ln \left(2 \cosh x - 2 \cos \frac{k\pi}{n} \right) = \ln(\sinh nx) - \ln(\sinh x), \quad (3.5)$$

и диференцирайки по x , при $n = L/2$ ние получаваме, че

$$S_1(x) = \frac{L \coth(Lx/2)}{2 \sinh x} - \frac{\cosh x}{\sinh^2 x}. \quad (3.6)$$

По същия начин ние разглеждаме сумата

$$S_2(x) = \sum_{k=1}^{L/2} \left(\cosh x - \cos \frac{(2k-1)\pi}{L} \right)^{-1}, \quad (3.7)$$

която може да бъде получена чрез диференциране на тъждеството [65]

$$\sum_{k=1}^n \ln \left(2 \cosh x - 2 \cos \frac{(2k-1)\pi}{2n} \right) = \ln(2 \cosh nx), \quad (3.8)$$

и полагайки $n = L/2$, намираме:

$$S_2(x) = \frac{L \tanh(Lx/2)}{2 \sinh x}. \quad (3.9)$$

От уравненията (3.3), (3.6) и (3.9), ние получаваме точния израз

$$\begin{aligned} P_L^{(b)}(K, h_1, h_L; \phi) &= \frac{(h_1 + h_L)^2}{4KL} \left[\phi^{-1/2} (1 + \phi/4)^{1/2} \coth(Lx/2) - 1/2 \right] + \\ &\quad \frac{(h_1 - h_L)^2}{4KL} \left[\phi^{-1/2} (1 + \phi/4)^{1/2} \tanh(Lx/2) - 1/2 \right]. \end{aligned} \quad (3.10)$$

и оттук, в границата

$$\phi \rightarrow 0, \quad L \rightarrow \infty, \quad \text{така, че } \phi^{1/2}L = O(1), \quad (3.11)$$

като вземем под внимание, че $x = \phi^{1/2}[1 + O(\phi)]$, ние получаваме асимптотичния вид на полевия член

$$\begin{aligned} P_L^{(b)}(K, h_1, h_L; \phi) &\simeq -\frac{1}{4KL}(h_1^2 + h_L^2) + \\ &\quad \frac{1}{4KL\phi^{1/2}} \left[(h_1 + h_L)^2 \coth\left(\frac{1}{2}L\phi^{1/2}\right) + (h_1 - h_L)^2 \tanh\left(\frac{1}{2}L\phi^{1/2}\right) \right], \end{aligned} \quad (3.12)$$

който има поправки на порядъка $O(\phi) = O(L^{-2})$.

Следващата стъпка е оценяване на члена на взаимодействието в средното сферично условие чрез използване на подобрена версия на метода, развит от Барбър и Фишър [29]. Следвайки [29], ние полагаме

$$W_2(z) := -(1/4\pi) \ln z + (5/4\pi) \ln 2 + Q_2(z), \quad (3.13)$$

където $Q_2(z)$, определено от горното уравнение, има асимптотичното поведение при $z \rightarrow 0$

$$Q_2(z) = O(z \ln z), \quad Q'_2(z) := dQ_2/dz = O(\ln z). \quad (3.14)$$

Тогава членът на взаимодействието в уравнение (2.34) има вида

$$W_{L,3}^{(b)}(\phi) := \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L W_2 \left(\phi + 2 - 2 \cos \phi_L^{(b)}(k) \right) \\ = g_1^{(b)}(\phi) + g_2^{(b)}(\phi) + (5/4\pi) \ln 2, \quad (3.15)$$

където

$$g_1^{(b)}(\phi) = -\frac{1}{4\pi L} \sum_{k=0}^{L-1} \ln \left(2 \cosh x - 2 \cos \frac{\pi k}{L} \right) \quad (3.16)$$

и

$$g_2^{(b)}(\phi) = \frac{1}{L} \sum_{k=0}^{L-1} Q_2 \left(\phi + 4 \sin^2 \frac{\pi k}{2L} \right). \quad (3.17)$$

От (3.5) при $n = L$ получаваме

$$g_1^{(b)}(\phi) = -\frac{1}{4\pi L} [\ln \phi + \ln(\sinh Lx) - \ln(\sinh x)]. \quad (3.18)$$

В границата (3.11) горният израз дава

$$g_1^{(b)}(\phi) = \frac{\ln L}{4\pi L} - \frac{1}{4\pi L} \ln [L\phi^{1/2} \sinh(L\phi^{1/2})] + O(L^{-3}). \quad (3.19)$$

Тъй като $Q_2(\phi + 4 \sin^2 \frac{\pi k}{2L})$ е периодична функция на k , с период $2L$, ние записваме $g_2^{(b)}(\phi)$ във вида

$$g_2^{(b)}(\phi) = \frac{1}{2L} \sum_{k=0}^{2L-1} Q_2 \left(\phi + 4 \sin^2 \frac{\pi k}{2L} \right) + \frac{1}{2L} [Q_2(\phi) - Q_2(\phi + 4)]. \quad (3.20)$$

Чрез използване на формулата на Поасон за сумата (3.20), горният израз може да бъде написан като

$$g_2^{(b)}(\phi) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi Q_2(\phi + 4 \sin^2 \theta) d\theta + \frac{1}{2L} [Q_2(\phi) - Q_2(\phi + 4)] + \\ \frac{2}{\pi} \sum_{q=1}^{\infty} \int_0^\pi Q_2(\phi + 4 \sin^2 \theta) \cos(2Lq\theta) d\theta. \quad (3.21)$$

Интегрирането по части, с помощта на (3.14), ни дава, че последният член в уравнението (3.21) е от порядъка $O(L^{-2})$. Така че

$$g_2^{(b)}(\phi) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi W_2(\phi + 4 \sin^2 \theta) d\theta + \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\pi \ln(\phi + 4 \sin^2 \theta) d\theta + \\ \frac{1}{2L} [Q_2(\phi) - Q_2(\phi + 4)] - (5/4\pi) \ln 2 + O(L^{-2}) \\ = W_3(\phi) + (1/4\pi) \ln [1 + \phi/2 + \phi^{1/2}(1 + \phi/4)^{1/2}] + \\ \frac{1}{2L} [Q_2(\phi) - Q_2(\phi + 4)] - (5/4\pi) \ln 2 + O(L^{-2}), \quad (3.22)$$

където

$$W_3(z) := \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_1 d\theta_2 d\theta_3}{z + 2 \sum_{\nu=1}^3 (1 - \cos \theta_\nu)} \quad (3.23)$$

е тримерен интеграл на Уотсън.

Когато $\phi \rightarrow 0$, с оглед на (3.14) и асимптотичното развитие на $W_3(\phi)$, виж [29], изразът (3.22) се опростява до

$$\begin{aligned} g_2^{(b)}(\phi) &= 2K_c - (5/4\pi) \ln 2 - \\ &\quad \frac{1}{2L} [W_2(4) - (3/4\pi) \ln 2 + O(\phi \ln \phi)] + O(\phi) + O(L^{-2}), \end{aligned} \quad (3.24)$$

където $K_c = \frac{1}{2}W_3(0)$ е обемната критична константа на взаимодействие.

От уравненията (3.15), (3.19) и (3.24), в границата (3.11) ние получаваме следния асимптотичен вид на члена на взаимодействието

$$\begin{aligned} W_{L,3}^{(b)}(\phi) &= 2K_c + \frac{\ln L}{4\pi L} - \\ &\quad \frac{1}{L} \left[\frac{1}{4\pi} \ln [L\phi^{1/2} \sinh(L\phi^{1/2})] - \frac{3 \ln 2}{8\pi} + \frac{1}{2}W_2(4) \right] + O(L^{-2}). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Оттук, чрез намиране на производната на (3.12) по ϕ и пренебрегвайки поправките $O(L^{-2})$, средното сферично условие (2.34) получава вид изразяващ крайноразмерното подобие

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi} \ln(y \sinh y) - \frac{(\eta_1 + \eta_L)^2}{16y^2} \left[\frac{2}{y} \coth \frac{y}{2} + \frac{1}{\sinh^2 \frac{y}{2}} \right] - \\ \frac{(\eta_1 - \eta_L)^2}{16y^2} \left[\frac{2}{y} \tanh \frac{y}{2} - \frac{1}{\cosh^2 \frac{y}{2}} \right] = 2\zeta. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Тук ние сме въвели пренормираното сферично поле

$$y = \phi^{1/2}L = O(1), \quad (3.27)$$

и променливите на подобие

$$\zeta = (K_{c,L}^{(b)} - K)L, \quad \eta_1 = K^{-1/2}h_1 L^{3/2}, \quad \eta_L = K^{-1/2}h_L L^{3/2}, \quad (3.28)$$

където $K_{c,L}^{(b)}$ е отмествената критична константа на взаимодействие,

$$K_{c,L}^{(b)} = K_c + \frac{1}{8\pi L} [\ln L + \frac{3}{2} \ln 2 - 2\pi W_2(4)]. \quad (3.29)$$

Плътността на свободната енергия при граничните условия на Нойман–Нойман може да бъде намерена от уравненията (2.25), (3.12), и (3.25) :

$$\begin{aligned} \beta f_L^{(b)}(K, h_1, h_L) = & \frac{1}{2} \ln(K/\pi) - 6K + \frac{1}{2} U_L^{(b)}(0) - \\ & L^{-3} \left\{ \frac{1}{4\pi} \int_0^{y_L^{(b)}} x \ln(\sinh x) dx + \frac{1}{8\pi} (y_L^{(b)})^2 (\ln y_L^{(b)} - \frac{1}{2}) + \right. \\ & \left. \frac{1}{8y_L^{(b)}} \left[(\eta_1 + \eta_L)^2 \coth \frac{1}{2} y_L^{(b)} + (\eta_1 - \eta_L)^2 \tanh \frac{1}{2} y_L^{(b)} \right] + \frac{1}{2} (y_L^{(b)})^2 \zeta \right\} + O(L^{-4}). \quad (3.30) \end{aligned}$$

Тук $y_L^{(b)} = y_L^{(b)}(\zeta, \eta_1, \eta_L)$ е решението на средното сферично условие (3.26) в околност на критичната точка, дефинирана от

$$\zeta = O(1), \quad \eta_1 = O(1), \quad \eta_L = O(1). \quad (3.31)$$

По този начин, уравнение (3.30) показва, че крайноразмерното подобие на сингулярната (в термодинамичната граница) част на плътността на свободната енергия, за тримерния L -слоен сферичен модел при гранични условия на Нойман–Нойман, има следния вид

$$f_{L, sing}^{(b)}(K, h_1, h_L) \cong L^{-3} X(at L^{1/\nu}, bh_1 L^{\Delta_1^{sb}/\nu}, bh_L L^{\Delta_1^{sb}/\nu}), \quad (3.32)$$

където $t := (K_{c,L}^{(b)} - K)$ е отместената константа на взаимодействие, $\nu = 1$ е стандартният критичен показател, а $\Delta_1^{sb} = 3/2$ е новата стойност на повърхниния критичен показател за границата на Нойман, и метричният фактор е $b = K^{-1/2}$.

4. Крайноразмерно подобие за гранични условия на Нойман–Дирихле

В случай на гранични условия на Нойман–Дирихле, проекцията на граничните полета (3.1) върху k -тия собствен вектор (2.12) се дава с

$$\hat{h}_{surf}^{(c)}(k) = \frac{2}{\sqrt{2L+1}} [h_1 \sin L\varphi_L^{(c)}(k) + h_L \sin \varphi_L^{(c)}(k)]. \quad (4.1)$$

Съответният член на полето (2.32) в плътността на свободната енергия може да бъде записан във вида

$$P_L^{(c)}(K, h_1, h_L; \phi) = \frac{1}{2KL(2L+1)} \{ h_1^2 [C_L(\phi, 0) + C_L(\phi, 1)] + 2h_1 h_L [C_L(\phi, L-1) - C_L(\phi, L+1)] + h_L^2 [C_L(\phi, 0) - C_L(\phi, 2)] \}, \quad (4.2)$$

където

$$C_L(\phi, q) = \sum_{k=1}^L \frac{\cos q \varphi_L^{(c)}(k)}{\phi/2 + \cos \varphi_L^{(c)}(1) - \cos \varphi_L^{(c)}(k)}. \quad (4.3)$$

Сумирането в дясната страна на (4.3) може да бъде извършено точно чрез използването на методите предложени от Патрик [63]. Полученият като резултат аналитичен израз зависи от факта, дали $\phi/2 + \cos \varphi_L^{(c)}(1)$ е по-голямо, или по-малко от 1.

Случай 1. Когато $\phi/2 + \cos \varphi_L^{(c)}(1) > 1$ ние полагаме

$$\phi/2 + \cos \varphi_L^{(c)}(1) = \cosh x \quad (4.4)$$

и за което и да цяло число $q \in \{0, \dots, 2L\}$ получаваме

$$C_L(\phi, q) = (L + \frac{1}{2}) \frac{\sinh(L - q + \frac{1}{2})x}{\sinh x \cosh(L + \frac{1}{2})x} - \frac{(-1)^q}{2(1 + \cosh x)}. \quad (4.5)$$

В този случай полевият член (4.2) става

$$P_L^{(c)}(K, h_1, h_L; \phi) = \frac{1}{2KL \cosh(L + \frac{1}{2})x} [h_1^2 \sinh Lx \cosh \frac{1}{2}x / \sinh x + 2h_1 h_L \cosh \frac{1}{2}x + h_L^2 \cosh(L - \frac{1}{2})x]. \quad (4.6)$$

В границата

$$\phi \rightarrow 0, \quad L \rightarrow \infty, \quad \text{така, че} \quad y := \phi^{1/2} L = O(1), \quad (4.7)$$

уравнението (4.4) дава следния резултат за всяко фиксирано $y > \pi/2$

$$x = (y^2 - \pi^2/4)^{1/2} L^{-1} + O(L^{-2}). \quad (4.8)$$

Ето защо, асимптотичното поведение на (4.6) е

$$P_L^{(c)}(K, h_1, h_L; \phi) = \frac{h_L^2}{2KL} + \frac{1}{2KL^3} [h_1^2 L^3 Y_1(y) + 2h_1 h_L L^2 Y_2(y) + h_L^2 L Y_3(y)] [1 + O(L^{-1})], \quad (4.9)$$

където

$$\begin{aligned} Y_1(y) &= \frac{\tanh(y^2 - \pi^2/4)^{1/2}}{(y^2 - \pi^2/4)^{1/2}} \\ Y_2(y) &= \frac{1}{\cosh(y^2 - \pi^2/4)^{1/2}} \\ Y_3(y) &= -(y^2 - \pi^2/4)^{1/2} \tanh(y^2 - \pi^2/4)^{1/2}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Оттук следва, чрез диференциране по ϕ , че полевият член в средното сферично условие (2.34) има следния водещ асимптотичен вид

$$-\frac{\partial}{\partial \phi} P_L^{(c)}(K, h_1, h_L; \phi) \simeq -\frac{1}{4KLy} [h_1^2 L^3 Y'_1(y) + 2h_1 h_L L^2 Y'_2(y) + h_L^2 L Y'_3(y)], \quad (4.11)$$

където $Y'_i(y) = dY_i(y)/dy$, $i = 1, 2, 3$.

Членът на взаимодействието в средното сферично условие може да бъде оценен чрез използване на същия метод, както в раздел 3. Първо, чрез използване на (3.13) и (4.4), ние записваме члена на взаимодействието във вида

$$\begin{aligned} W_{L,3}^{(c)}(\phi) &:= \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L W_2 \left(\phi + 2 \cos \varphi_L^{(c)}(1) - 2 \cos \varphi_L^{(c)}(k) \right) = \\ g_1^{(c)}(\phi) + g_2^{(c)}(\phi) + (5/4\pi) \ln 2, \end{aligned} \quad (4.12)$$

където

$$g_1^{(c)}(\phi) = -\frac{1}{4\pi L} \sum_{k=1}^L \ln [2 \cosh x - 2 \cos \varphi_L^{(c)}(k)], \quad (4.13)$$

и

$$g_2^{(c)}(\phi) = \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L Q_2 [2 \cosh x - 2 \cos \varphi_L^{(c)}(k)]. \quad (4.14)$$

Чрез използване на тъждеството [65]

$$\prod_{k=0}^{L-1} 2 \left(\cosh x - \cos \frac{\pi(2k+1)}{2L+1} \right) = \frac{\cosh(L+\frac{1}{2})x}{\cosh \frac{1}{2}x}, \quad (4.15)$$

ние получаваме

$$g_1^{(c)}(\phi) = -\frac{1}{4\pi L} \ln \left[\frac{\cosh(L+\frac{1}{2})x}{\cosh \frac{1}{2}x} \right]. \quad (4.16)$$

В границата (4.7) горният израз има асимптотичния вид

$$g_1^{(c)}(\phi) = -\frac{1}{4\pi L} \ln[\cosh(y^2 - \pi^2/4)^{1/2}] + O(L^{-2}). \quad (4.17)$$

Тъй като $Q_2[2 \cosh x - 2 \cos \varphi_L^{(c)}(k)]$ е периодична по отношение на k , с период $2L + 1$, ние записваме $g_2^{(c)}(\phi)$ във вида

$$g_2^{(c)}(\phi) = \frac{1}{2L} \sum_{k=0}^{2L} Q_2 \left(2 \cosh x - 2 \cos \frac{(2k+1)\pi}{2L+1} \right) - \frac{1}{2L} Q_2(2 \cosh x + 2). \quad (4.18)$$

Чрез използване на формулата на Поасон за сумата в (4.18), ние можем да напишем горния израз във вида

$$\begin{aligned} g_2^{(c)}(\phi) &= \left(1 + \frac{1}{2L}\right) \frac{1}{\pi} \int_0^\pi Q_2(2 \cosh x - 2 \cos 2\theta) d\theta \frac{1}{2L} - \frac{1}{2L} Q_2(2 \cosh x + 2) + \\ &\quad \left(1 + \frac{1}{2L}\right) \sum_{q=1}^{\infty} \frac{2}{\pi} \int_0^\pi Q_2(2 \cosh x - 2 \cos 2\theta) \cos[2q(2L+1)\theta] d\theta. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Интегрирането по части, с помощта на (3.13), отново дава, че последният член в уравнението (4.19) е от порядък $O(L^{-2})$. Тогава, в границата (4.7) имаме

$$2 \cosh x - 2 \cos 2\theta = 4 \sin^2 \theta + (y^2 - \pi^2/4)L^{-2} + O(L^{-3}), \quad (4.20)$$

и оттук получаваме

$$g_2^{(c)}(\phi) = 2K_c - \frac{5}{4\pi} \ln 2 + \frac{1}{L} \left[K_c - \frac{\ln 2}{4\pi} - \frac{1}{2} W_2(4) \right] + O(L^{-2}). \quad (4.21)$$

Ето защо, след като съберем (4.12), (4.17) и (4.21), ние получаваме следния асимптотичен вид на члена на взаимодействието

$$W_{L,3}^{(c)}(\phi) = 2K_{c,L}^{(c)} - \frac{1}{4\pi L} \ln[\cosh(y^2 - \pi^2/4)^{1/2}] + O(L^{-2}), \quad (4.22)$$

където

$$K_{c,L}^{(c)} = K_c + \frac{1}{2L} \left[K_c - \frac{1}{2} W_2(4) - \frac{\ln 2}{4\pi} \right] \quad (4.23)$$

е отместваната критична константа на взаимодействие.

Накрая, чрез комбиниране на (4.11) и (4.22), и пренебрегване на поправките $O(L^{-2})$, средното сферично условие (2.34) приема следния вид на крайноразмерно подобие

$$\frac{1}{4\pi} \ln[\cosh(y^2 - \pi^2/4)^{1/2}] + \frac{1}{4y} [\eta_1^2 Y_1'(y) + 2\eta_1 \eta_L Y_2'(y) + \eta_L^2 Y_3'(y)] = 2\zeta, \quad (4.24)$$

с преизнормирани променливи, дадени чрез

$$\zeta = (K_{c,L}^{(c)} - K)L, \quad \eta_1 = K^{-1/2}h_1 L^{3/2}, \quad \eta_L = K^{-1/2}h_L L^{1/2}. \quad (4.25)$$

Плътността на свободната енергия за граничните условия на Нойман-Дирихле в границата (4.7) може да бъде намерена от (2.25), (4.9) и (4.22). Чрез избиране на интеграционната константа $\phi_0 = 2 - 2 \cos \varphi_L^{(c)}(1)$, и полагането $y_0 := \phi_0^{1/2}L = \pi/2 + O(L^{-1})$, получаваме

$$\begin{aligned} \beta f_L^{(c)}(K, h_1, h_2) &= \frac{1}{2} \ln(K/\pi) - [4 + 2 \cos \varphi_L^{(c)}(1)]K + \frac{1}{2} U_L^{(c)}(\phi_0) - \frac{h_L^2}{4KL} - \frac{1}{L^2} K_{c,L}^{(c)} y_0^2 - \\ &L^{-3} \left\{ \frac{1}{4\pi} \int_{\pi/2}^{y_L^{(c)}} x \ln[\cosh(x^2 - \pi^2/4)^{1/2}] dx - (y_L^{(c)})^2 \zeta + \right. \\ &\left. \frac{1}{4} [\eta_1^2 Y_1(y_L^{(c)}) + 2\eta_1 \eta_L Y_2(y_L^{(c)}) + \eta_L^2 Y_3(y_L^{(c)})] \right\} + O(L^{-4}). \end{aligned} \quad (4.26)$$

Тук $y_L^{(c)} = y_L^{(c)}(\zeta, \eta_1, \eta_L)$ е решението на средното сферично условие (4.24) в околност на критичната точка, дефинирана от

$$\zeta = O(1), \quad \eta_1 = O(1), \quad \eta_L = O(1). \quad (4.27)$$

Случай 2. Когато $\phi/2 + \cos \varphi_L^{(c)}(1) < 1$ ние полагаме

$$\phi/2 + \cos \varphi_L^{(c)}(1) = \cos x \quad (4.28)$$

и за всяко цяло число $q \in \{0, \dots, 2L\}$ получаваме

$$C_L(\phi, q) = (L + \frac{1}{2}) \frac{\sin(L - q + \frac{1}{2})x}{\sin x \cos(L + \frac{1}{2})x} - \frac{(-1)^q}{2(1 + \cos x)}. \quad (4.29)$$

В този случай полевият член (4.2) в плътността на свободната енергия се дава от уравнението (4.6), в което хиперболичните функции са заместени със съответните тригонометрични функции. Сега уравнението (4.28) дава в границата (4.7), за всяко фиксирано $0 \leq y < \pi/2$,

$$x = (\pi^2/4 - y^2)^{1/2} L^{-1} + O(L^{-2}). \quad (4.30)$$

Ето защо, асимптотичното поведение на полевия член (4.2) се дава от уравнението (4.9) с функциите

$$Y_1(y) = \frac{\tan(\pi^2/4 - y^2)^{1/2}}{(\pi^2/4 - y^2)^{1/2}}$$

$$\begin{aligned} Y_2(y) &= \frac{1}{\cos(\pi^2/4 - y^2)^{1/2}} \\ Y_3(y) &= (\pi^2/4 - y^2)^{1/2} \tan(\pi^2/4 - y^2)^{1/2}. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Явно, последните са аналитично продължение на функциите (4.10) в областта $0 \leq y^2 \leq \pi^2/4$. Оттук следва, чрез диференциране по ϕ , че полевият член в средното сферично условие (2.34) има водещия асимптотичен вид (4.11), при $Y_i(y), i = 1, 2, 3$, дефинирани в (4.31).

Членът на взаимодействието в средното сферично условие може да бъде получен по същия начин както в Случай 1. Така, използвайки тъждеството [65]

$$\prod_{k=0}^{L-1} 2 \left(\cos x - \cos \frac{\pi(2k+1)}{2L+1} \right) = \frac{\cos(L + \frac{1}{2})x}{\cos \frac{1}{2}x}, \quad (4.32)$$

ние получаваме в границата (4.7)

$$g_1^{(c)}(\phi) = -\frac{1}{4\pi L} \ln[\cos(\pi^2/4 - y^2)^{1/2}] + O(L^{-2}). \quad (4.33)$$

За $g_2^{(c)}(\phi)$ получаваме уравненията (4.18) – (4.20) с $\cosh x$ заместен с $\cos x$. В границата (4.7) резултатът (4.21) остава верен. Ето защо от уравненията (4.12), (4.21) и (4.33) ние намираме, че членът на взаимодействието приема асимптотичния вид

$$W_{L,3}^{(c)}(\phi) = 2K_{c,L}^{(c)} - \frac{1}{4\pi L} \ln[\cos(\pi^2/4 - y^2)^{1/2}] + O(L^{-2}), \quad (4.34)$$

където $K_{c,L}^{(c)}$ е дадено чрез (4.23).

Оттук следва, че чрез комбиниране на (4.11) с $Y_i(y), i = 1, 2, 3$, дефинирани в (4.31), и (4.34), пренебрегвайки поправките $O(L^{-2})$, средното сферично условие (2.34) приема вида на крайномерно подобие

$$\frac{1}{4\pi} \ln[\cos(\pi^2/4 - y^2)^{1/2}] + \frac{1}{4y} [\eta_1^2 Y'_1(y) + 2\eta_1 \eta_L Y'_2(y) + \eta_L^2 Y'_3(y)] = 2\zeta, \quad (4.35)$$

с пренормирани променливи величини, дадени от (4.25).

Плътността на свободната енергия за граничните условия на Нойман-Дирихле в границата (4.7) може да бъде намерена от уравненията (2.25), (4.9), (4.31) и интеграла на (4.34) по y ,

в границите от $y_L^{(c)}$ до y_0 , със същия избор на интеграционната константа $\phi_0 = 2 - 2 \cos \varphi_L^c(1)$ и $y_0 := \phi_0^{1/2} L = \pi/2 + O(L^{-1})$. По този начин получаваме

$$\begin{aligned} \beta f_L^{(c)}(K, h_1, h_L) &= \frac{1}{2} \ln(K/\pi) - [4 + 2 \cos \varphi_L^c(1)]K + \frac{1}{2} U_L^{(c)}(\phi_0) - \frac{h_L^2}{4KL} - \frac{1}{L^2} K_{c,L}^{(c)} y_0^2 - \\ &L^{-3} \left\{ -\frac{1}{4\pi} \int_{y_L^{(c)}}^{\pi/2} x \ln[\cos(\pi^2/4 - x^2)^{1/2}] dx - (y_L^{(c)})^2 \zeta + \right. \\ &\left. \frac{1}{4} [\eta_1^2 Y_1(y_L^{(c)}) + 2\eta_1 \eta_L Y_2(y_L^{(c)}) + \eta_L^2 Y_3(y_L^{(c)})] \right\} + O(L^{-4}). \end{aligned} \quad (4.36)$$

Тук $y_L^{(c)} = y_L^{(c)}(\zeta, \eta_1, \eta_L)$ е решението на средното сферично условие (4.35) в околност на критичната точка, дефинира от (4.27). Явно е, че уравнението (4.36) е аналитично продължение на уравнението (4.26) от областта $y_L^{(c)} > \pi/2$ в областта $0 \leq y_L^{(c)} < \pi/2$.

По този начин уравненията (4.26) и (4.36) показват, че видът на крайоразмерно подобие на сингулярната част на плътността на свободната енергия при граничните условия на Нойман-Дирихле е

$$f_{L,sing}^{(c)}(K, h_1, h_L) \cong L^{-3} X(atL^{1/\nu}, bh_1 L^{\Delta_1^{sb}/\nu}, bh_L L^{\Delta_1^o/\nu}). \quad (4.37)$$

Тук $t := (K_{c,L}^{(c)} - K)$ е отместваната константа на взаимодействие, $\nu = 1$, $\Delta_1^{sb} = 3/2$, $\Delta_1^o = 1/2$ са критичните показатели, и метричният фактор е $b = K^{-1/2}$. Оттук се вижда, че всяка от границите запазва своя характерен критичен показател.

5. Критични полеви показатели на слой при гранични условия на Нойман-Дирихле

В светлината на резултатите от предишния раздел можем естествено да предположим, че критичният показател $\Delta_1(l)$ за магнитно поле, което действува само върху l -тия слой, $1 \leq l \leq L$, би трябвало да интерполира между двете екстремни стойности: $\Delta_1^{sb} = 3/2$ на границата

на Нойман ($l = 1$) и $\Delta_1^o = 1/2$ на границата на Дирихле ($l = L$). В този раздел ние доказваме, че случаят наистина е такъв, при условие, че вземем предвид следния важен факт: ние установяваме, че ефективният показател $\Delta_1(l)$ зависи не от самото l , а от показателя, който дава зависимостта на l от крайния размер L .

Да разгледаме едно поле h_l , което действува върху l -тия слой, т.е. да положим

$$h_{\text{surf}} = h_l \delta_{l,r}. \quad (5.1)$$

Неговата проекция върху k -тия собствен вектор (2.12) се дава от

$$\hat{h}_{\text{surf}}^{(c)}(k) = \frac{2h_l}{(2L+1)^{1/2}} \cos\left(l - \frac{1}{2}\right) \varphi_L^{(c)}(k). \quad (5.2)$$

Оттук, полевият член (2.32) приема вида

$$P_L^{(c)}(K, h_l; \phi) = \frac{h_l^2}{2KL(2L+1)} [C_L(\phi, 0) + C_L(\phi, 2l-1)], \quad (5.3)$$

където $C_L(\phi, q)$ е дефинирано в уравнение (4.3).

Както и в предишния раздел, ние разглеждаме отделно двата случая в зависимост от стойността на $\phi/2 + \cos \varphi_L^{(c)}(1)$ сравнена с единица.

Случай 1. Когато $\phi/2 + \cos \varphi_L^{(c)}(1) > 1$, ние използваме полагането (4.4) и с помощта на (4.5) получаваме следния точен израз за полевия член,

$$P_L^{(c)}(K, h_l; \phi) = \frac{h_l^2}{2KL} \frac{\sinh(L-l+1)x \cosh(l-\frac{1}{2})x}{\sinh x \cosh(L+\frac{1}{2})x}. \quad (5.4)$$

Да предположим, че разстоянието l от границата на Нойман зависи от L като

$$l = \rho L^\alpha, \quad 0 \leq \alpha \leq 1. \quad (5.5)$$

Ако $\alpha = 1$ и $0 \leq \rho < 1$, с помощта в уравнение (4.8) ние получаваме в границата (4.7), че водещото асимптотично поведение на (5.4) е

$$P_L^{(c)}(K, h_l; \phi) \simeq \frac{h_l^2}{2KL} \frac{\sinh[(1-\rho)(y^2 - \pi^2/4)^{1/2}] \cosh[\rho(y^2 - \pi^2/4)^{1/2}]}{(y^2 - \pi^2/4)^{1/2} \cosh(y^2 - \pi^2/4)^{1/2}}. \quad (5.6)$$

Това означава, че при макроскопично разстояние $l = \rho L$, с $0 \leq \rho < 1$, променливата на крайноразмерно подобие за полето е

$$\eta_l = K^{-1/2} h_l L^{3/2}, \quad (5.7)$$

т.е. $\Delta_1(l) = 3/2$. От израза (5.4) става видно, че случаят, когато $0 \leq \alpha < 1$ в (5.5) е еквивалентен на полагането на $\rho = 0$ в (5.6).

Ситуацията може да се промени качествено, само когато l е асимптотично близко до границата на Дирихле ($l = L$). Наистина, нека да приемем, че

$$l = L - \rho L^\alpha, \quad 0 \leq \alpha < 1. \quad (5.8)$$

Тогава, в границата (4.7) получаваме при $\alpha > 0$

$$P_L^{(c)}(K, h_l; \phi) = \frac{h_l^2}{2K} [\rho L^{-(1-\alpha)} + L^{-1}] - \frac{h_l^2}{2K} L^{-2(1-\alpha)} \rho^2 (y^2 - \pi^2/4)^{1/2} \tanh(y^2 - \pi^2/4)^{1/2} + h_l^2 O(L^{-2}) + h_l^2 O(L^{-3+2\alpha}). \quad (5.9)$$

Тъй като първият член в дясната страна на горното уравнение не зависи от y и трябва да бъде приписан на регулярената част на плътността на свободната енергия, ние заключаваме, че подходящата променлива на крайноразмерно подобие за полето в този случай е

$$\eta_l = K^{-1/2} h_l L^{1/2+\alpha}, \quad (5.10)$$

т.е. съществува непрекъснато семейство от критични показатели на слоя $\Delta_1(\alpha) = 1/2 + \alpha$, зависещи от параметъра α в (5.8). В частност, критичният показател на слоя е еднакъв за всяко фиксирано разстояние от границата.

За пълнота, по-долу ние даваме експлицитния вид на крайноразмерно подобие за средното сферично условие и за плътността на свободната енергия в този нетривиален случай.

След като членът на взаимодействие е същият, като в раздел 4, чрез комбиниране на (4.22) и на производната от (5.9) по ϕ , ние получаваме

че средното сферично условие във водещия асимптотичен порядък има вида на крайноразмерно подобие,

$$\frac{1}{4\pi} \ln[\cosh(y^2 - \pi^2/4)^{1/2}] - \frac{\rho^2}{4} \eta_l^2 [Y_1(y) + Y_2^2(y)] = 2\zeta. \quad (5.11)$$

Също така, за сингулярната част на плътността на свободната енергия ние получаваме

$$\begin{aligned} \beta f_{L,sing}^{(c)}(K, h_l) \cong & -L^{-3} \left\{ \frac{1}{4\pi} \int_{\pi/2}^{y_L^{(c)}} x \ln[\cosh(x^2 - \pi^2/4)^{1/2}] dx - (y_L^{(c)})^2 \zeta + \frac{\rho^2}{4} \eta_l^2 Y_3(y) \right\} \\ & + O(L^{-4}) + O(L^{-3-2\alpha}). \end{aligned} \quad (5.12)$$

Тук $Y_i(y)$, $i = 1, 2, 3$, са дефинирани в (4.10), и ζ е дефинирано в (4.25); $y_L^{(c)} = y_L^{(c)}(\zeta, \eta)$ е решението на средното сферично условие (5.11) в околност на критичната точка, дефинирана чрез

$$\zeta = O(1), \quad \eta_l = O(1). \quad (5.13)$$

Случай 2. Когато $\phi/2 + \cos \varphi_L^{(c)}(1) < 1$, ние използваме полагането (4.28) и с помощта на (4.29) получаваме

$$P_L^{(c)}(K, h_l; \phi) = \frac{h_l^2}{2KL} \frac{\sin(L-l+1)x \cos(l-\frac{1}{2})x}{\sin x \cos(L+\frac{1}{2})x}. \quad (5.14)$$

При допускането (5.5), когато $\alpha = 1$, и $0 \leq \rho < 1$, получаваме в границата (4.7), че асимптотичното поведение на полевия член (5.14) е

$$P_L^{(c)}(K, h_l; \phi) \simeq \frac{h_l^2}{2K} \frac{\sin[(1-\rho)(\pi^2/4 - y^2)^{1/2}] \cos[\rho(\pi^2/4 - y^2)^{1/2}]}{(\pi^2/4 - y^2)^{1/2} \cos(\pi^2/4 - y^2)^{1/2}}. \quad (5.15)$$

Това означава, както в Случай 1, че $\Delta_1(l) = 3/2$.

При допускането (5.8), когато $0 < \alpha < 1$, ние намираме, че в границата (4.7)

$$\begin{aligned} P_L^{(c)}(K, h_l; \phi) = & \frac{h_l^2}{2K} [\rho L^{-(1-\alpha)} + L^{-1}] - \\ & \frac{h_l^2}{2K} L^{-2(1-\alpha)} \rho^2 (\pi^2/4 - y^2)^{1/2} \tan(\pi^2/4 - y^2)^{1/2} + h_l^2 O(L^{-2}). \end{aligned} \quad (5.16)$$

Оттук ние лесно извеждаме вида на крайноразмерно подобие за средното сферично условие,

$$\frac{1}{4\pi} \ln[\cos(\pi^2/4 - y^2)^{1/2}] - \frac{\rho^2}{4} \eta_l^2 [Y_1(y) + Y_2^2(y)] = 2\zeta, \quad (5.17)$$

и за сингулярната част на плътността на свободната енергия,

$$\beta f_L^{(c)}(K, h_l) = -L^{-3} \left\{ -\frac{1}{4\pi} \int_{y_L^{(c)}}^{\pi/2} x \ln[\cos(\pi^2/4 - x^2)^{1/2}] dx - (y_L^{(c)})^2 \zeta - \frac{\rho^2}{4} \eta_l^2 Y_3(y) \right\} + O(L^{-4}) + O(L^{-3-2\alpha}). \quad (5.18)$$

Тук $y_L^{(c)} = y_L^{(c)}(\zeta, \eta_l)$ е решението на средното сферично условие (5.17) в околност на критичната точка дефинирана от (5.13).

По този начин, за тримерния L -слоен среден сферичен модел уравненията (5.12) и (5.18) показват, че видът на крайноразмерно подобие за сингулярната част на плътността на свободната енергия при допускането (5.8) е

$$f_{L,sing}^{(c)}(K, h_l) \cong L^{-3} X(a t L^{1/\nu}, b h_l L^{\Delta_1(\alpha)/\nu}). \quad (5.19)$$

Тук $\nu = 1$ е критичният показател на обемната корелационна дължина и $\Delta_1(\alpha) = \frac{1}{2} + \alpha$ е семейство от критични показатели на слоя, зависещи от параметъра α в (5.8).

6. Дискусия

В настоящата глава е изследвано поведението на крайноразмерно подобие за тримерна система със слойна геометрия от типа $L \times \infty^2$, в рамките на средния сферичен модел с гранични условия на Нойман-Нойман и Нойман-Дирихле и повърхнинни полета h_1 и h_L действуващи на границите. Съответните главни резултати, дадени в явен вид с уравненията (3.30), (4.26), и (4.36), съответно, потвърждават хипотезата на Привман-Фишер за крайноразмерно подобие на сингулярната част на свободната енергия. Тези резултати съдържат познатия показатела $\Delta_1^o = 1/2$ за обикновения повърхнинен фазов преход на границата на Дирихле, и появята на нов критичен показател, $\Delta_1^{sb} = 3/2$, характеризиращ границата на Нойман. Ние предполагаме, че последният критичен показател отговаря на специалния (повърхнинно-

обемен) фазов преход в модела. Последното е в съгласие с общото очакване за крайноразмерното подобие на свободната енергия при този тип фазови преминавания; ако приемем също, че показателя $\Phi = 0$, както е при тримерните $O(n)$ модели [51].

Когато външното магнитно поле се прилага на l -тия слой, при гранични условия на Нойман-Дирихле, се появява семейство от l - зависими критични показатели $\Delta_1(l)$. Тези показатели се променят непрекъснато от $\Delta_1^0 = 3/2$ (при повърността на Нойман) до $\Delta_1^{sb} = 1/2$ (при повърността на Дирихле), виж раздел 5. Интересно е да се отбелжи, че $\Delta_1(\alpha)$ зависи фактически от показателя, която определя зависимостта на l от L . За всеки слой, който е на крайно разстояние от най-близката граница, $\Delta_1(\alpha)$ е същият, както на тази граница. Това напълно отговаря на ситуацията, наблюдавана в [57] за случай на гранични условия на Дирихле-Дирихле. Само когато $l = L - \rho L^\alpha$, с $0 < \alpha < 1$, показателят $\Delta_1(\alpha)$ зависи непрекъснато от α . Този резултат показва съществуването на семейство от критични показатели в границата $L \rightarrow \infty$.

От (1.2) and (3.30) непосредствено следва, че критичният показател $\gamma_{1,1}$ за локалната повърхнинна възприемчивост $\chi_{1,1}$ е $\gamma_{1,1} = 1$. Същият резултат е бил получен за сферичния модел с усилени повърхнинни взаимодействия при гранични условия на Дирихле-Дирихле [61]. В този случай обаче моделът доста нефизично предсказва, че повърността се подрежда при достатъчно големи повърхнинни взаимодействия, даже и за $d = 3$, при никаква температура над обемната критична температура. Ако ние подобрим модела чрез въвеждане на второ сферично условие за спиновете на границите, виж [62], това

вече не е така, т.е. единствената критична точка за $d \leq 3$ е обемната критична точка. Тогава, за $d = 3$ показателят $\gamma_{1,1}^o = -1$ отговаря на обикновения фазов преход [51, 57]. В нашето разглеждане повърхнинните и обемните взаимодействия са равни, но въпросът дали и как ще се промени поведението, когато се въведат допълнителни сферични условия върху спиновете на повърхностите, остава открит. Ние ще изследваме този проблем в следваща главата.

Глава 3

Модифициран среден сферичен модел: Нови повърхнинни критични показатели

1. Увод

Във втора глава беше получено, че критичният показател на локалната повърхнинна възприемчивост $\chi_{1,1}$ е $\gamma_{1,1}^{sb} = 1$. Известно е, че същият резултат е в сила за сферичния модел с усилени повърхнинни взаимодействия при гранични условия на Дирихле – Дирихле [61]. За съжаление, в този случай моделът съвсем нефизично предсказва, че повърхността се подрежа, в случай на достатъчно голямо усилване, при температура над обемната критична температура, даже и за $d = 3$. Това вече не е така, когато ние подобrim модела чрез въвеждане на второ сферично условие върху спиновете на границите [62], тъй като единствената критична точка, която остава при $d \leq 3$, е обемната. Тогава показателят $\gamma_{1,1}^o = -1$ отговаря на обикновен фазов преход [51, 57]. Случаят на равни обемни и повърхнинни взаимодействия беше разгледан в [47], но въпростът дали и как поведението на повърхността на системата с гранични условия на Нойман–Нойман ще се промени при допълнителни сферични условия върху спиновете на повърхностите остана открит. Една от целите на настоящата глава е да допринесе за изясняване на този въпрос. За тази цел ние разглеждаме критичното

поведение на локалната повърхнинна възприемчивост

$$\chi_{1,1}(T; \rho) = \lim_{L \rightarrow \infty} \left[-L \partial^2 f_L(T, h_1, h_L; \rho) / \partial h_1^2 \right]_{|h_1=h_L=0} \quad (1.1)$$

в случай, когато средноквадратичната стойност на спиновете на границите е фиксирана равна на някакво положително число ρ чрез допълнителни сферични условия. Дефинирианият по този начин модел ще се нарича модифициран сферичен модел. В уравнение (1.1) и по-нататък $f_L(T, h_1, h_L; \rho)$ означава плътността на свободната енергия (нормирана на $k_B T$ и на спин) на тримерна кубична решетъчна система със слойна геометрия от типа $L \times \infty^2$ при температура T . Граничните условия на Нойман-Нойман са наложени върху повърхнините ограничаващи слоя с дебелина L . Повърхнинните полета h_1 и h_L се предполага, че действат върху спиновете, които са до границите на системата. Тъй като ние се интересуваме от случая $h_1 = h_L$, наложено е само едно допълнително условие върху граничните спинове. Оказва се, че поведението на $\chi_{1,1}$ в околността на обемната критична точка T_c зависи съществено от ρ . Ще бъде показано, че само ако $\rho = \rho_c := 2 - (12K_c)^{-1} = 1.34053\dots$, ние получаваме разходимост със степенен показател $\gamma_{1,1} = \gamma_{1,1}^{\text{sb}} = 1$. Ако $\rho < \rho_c$, тогава $\chi_{1,1}$ има сингуларност, характерна за сферичния модел с гранични условия на Дирихле, т.е $\gamma_{1,1} = \gamma_{1,1}^{\circ} = -1$. Когато $\rho > \rho_c$, тогава $\chi_{1,1}$ е експоненциално разходяща се при $T \rightarrow T_c^+$, което напомня за поведението на двумерния модел $O(n)$ при $n > 2$, близо до $T = 0$. Пресмятането на средноквадратичната стойност ρ_s на спиновете на границата на Нойман в стандартния сферичен модел изяснява появата на критичната стойност $\rho = \rho_c$: оказва се, че $\rho_c = \rho_s$. Освен това, ние отбелязваме, че второто сферично поле, означено с v (виж уравнение (2.1) по-долу), може да се разглежда като свободен параметър. Ще бъде показано, че с промяната му ние интерполираме непрекъснато от гранични условия

на Нойман, през смесени условия, до гранични условия на Дирихле (за прецизно математическо дефиниране на граничните условия виж глава 2). Смесените гранични условия отговарят на ситуацията, когато спиновете около системата приемат стойности пропорционални (но не равни) на тези, които имат техните най-близки съседи вътре в системата. Обръщаме внимание на това, че при всяко v , само благодарение на симетрията, която възниква от идентичните гранични условия и полета ($h_1 = h_L$) на противоположните повърхности, системата моделира сама по себе си аналог на граница на Нойман в средните слоеве. Следователно, ако ние разгледаме локалната повърхнинна възприемчивост $\chi_{l,l}$ за l -тия слой, ние бихме очаквали да получим критичния степенен показател за границата на Нойман, $\gamma_{l,l} = 1$, при l около средата на система. Последното е очевидно вярно, даже ако системата иначе е с гранични условия на Дирихле. Накрая, ще бъде показано, че ако v е зададена функция на температурата, ние получаваме $\gamma_{1,1}^{\text{sb}} = 2$, което съответства на стойноста за $O(n)$ модел в границата $n \rightarrow \infty$.

Както вече отбелязахме, сферичният модел при непериодични гранични условия не е в същия повърхнинен клас на универсалност, като съответният модел $O(n)$ в границата $n \rightarrow \infty$, в противоположност на обемните класове на универсалност. Последното става явно, когато ние изследваме повърхнинни фазови преходи за модела $O(n)$ в границата $n \rightarrow \infty$. В този случай ние получаваме [51] $\Delta_1 = 1/(d - 2)$ (т.e. $\Delta_1 = 1$ за $d = 3$) за обикновените и $\Delta_1 = 2/(d - 2)$ (т.e. $\Delta_1 = 2$ за $d = 3$) за специалните фазови преходи. Предполага се, че съответната еквивалентност ще се възстанови, ако ние наложим сферични условия по начин, който осигурява една и съща средноквадратична стойност

на всеки спин в системата [60] (за съжаление такъв модел не допуска точно решение). Една от целите на настоящата работа е да проверим дали и до каква степен поведението на системата с две сферични полета ще бъде по-близко до модела $O(n)$ в границата $n \rightarrow \infty$, в сравнение със стандартния среден сферичен модел (само с едно сферично поле).

Този глава е структурирана както следва. В раздел 2 ние описваме модела и средните сферични условия, извеждаме изрази за плътността на свободната енергия и за локалната възприемчивост. Нашите основни резултати върху поведението на $\chi_{1,i}$ и $\chi_{l,i}$ като функции на T и ρ са дадени в раздел 3. Главата завършва с кратка дискусия, дадена в раздел 4.

2. Моделът

Ние разглеждаме тримерния среден сферичен модел с феромагнитни взаимодействия между най-близките съседни спинове, върху проста кубична решетка. Във всеки възел на решетката $\vec{r} = (r_1, r_2, r_3) \in \mathbb{Z}^3$, има случайна величина (спин) $\sigma(\vec{r}) \in \mathbb{R}$ и енергията на конфигурацията $\sigma_\Lambda = \{\sigma(\vec{r}), \vec{r} \in \Lambda\}$ в краяна област $\Lambda \subset \mathbb{Z}^3, \Lambda = L_1 \times L_2 \times L_3$, съдържаща $|\Lambda|$ възела, се дава с израза

$$\beta \mathcal{H}_\Lambda^{(\tau)}(\sigma_\Lambda | K, h_\Lambda; s) = -K \sigma_\Lambda^\dagger \cdot Q_\Lambda^{(\tau)} \cdot \sigma_\Lambda + s \sigma_\Lambda^\dagger \cdot \sigma_\Lambda + v \sigma_s^\dagger \cdot \sigma_s - h_\Lambda^\dagger \cdot \sigma_\Lambda. \quad (2.1)$$

Тук матрицата на взаимодействие $Q_\Lambda^{(\tau)}$, както във втора глава, може да се запише във вида

$$Q_\Lambda^{(\tau)} = (\Delta_1^{(\tau_1)} + 2E_1) \times (\Delta_2^{(\tau_2)} + 2E_2) \times (\Delta_3^{(\tau_3)} + 2E_3). \quad (2.2)$$

В уравнение (2.1) s и v са сферични полета (виж по-долу); $\sigma_s = \{\sigma(\vec{r}), \vec{r} \in S\}$, $S = \{(r_1, r_2, 1) \cup (r_1, r_2, L_3)\}$, $r_1 = 1, \dots, L_1$, $r_2 = 1, \dots, L_2$.

Плътността на свободната енергия на модифицирания среден сферичен модел в крайната област Λ се дава с трансформацията на Лежандър

$$\beta f_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h_{\Lambda}; \rho) := \sup_{s, v} \left\{ -|\Lambda|^{-1} \ln Z_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h_{\Lambda}; s, v) - s - \rho v |S| / |\Lambda| \right\}, \quad (2.3)$$

където $|S|$ е общият брой спинове на границите S и

$$Z_{\Lambda}^{(\tau)}(K, h_{\Lambda}; s, v) = \int_{\mathbb{R}^{|\Lambda|}} \exp \left[-\beta \mathcal{H}_{\Lambda}^{(\tau)}(\sigma_{\Lambda}|K, h_{\Lambda}; s, v) \right] \prod_{\vec{r} \in \Lambda} \sigma(\vec{r}) \quad (2.4)$$

е статистическата сума. Точната горна граница се достига върху решението на средните сферични условия

$$\langle \sigma_{\Lambda}^{\dagger} \cdot \sigma_{\Lambda} \rangle = |\Lambda| \quad (2.5)$$

и

$$\langle \sigma_s^{\dagger} \cdot \sigma_s \rangle = \rho |S|, \quad (2.6)$$

където $\langle \dots \rangle$ означава математическото очакване спрямо разпределението на Гибс с хамилтониан $\beta \mathcal{H}_{\Lambda}^{(\tau)}(\sigma_{\Lambda}|K, h_{\Lambda}; s)$. Нека означим с $-2 + 2 \cos \varphi_{L_i}^{\tau_i}(k_i)$, $k_i = 1, \dots, L_i$, $i = 1, 2, 3$, собствените стойности на матрицата $\Delta_i^{(\tau_i)}$. Нека по-нататък да предположим, че има периодични гранични условия в направленията на L_1 и L_2 и гранични условия на Нойман-Нойман по L_3 . Тогава, чрез директно оценяване на интегралите в статистическата сума (2.4) и преминаване към границата $L_1, L_2 \rightarrow \infty$ при фиксирано $L_3 = L$, ние получаваме за свободната енергия

$$\begin{aligned} \beta f_L^{(n)}(K, h_1, h_L; \rho) &= \frac{1}{2} \log \frac{K}{\pi} - 6K + \\ &\sup_{\phi, \omega} \left\{ \frac{1}{L} \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta_1 \int_0^{2\pi} d\theta_2 \sum_{k=1}^L \log [\phi + 2 \sum_{i=1}^2 (1 - \cos \theta_i)] + \right. \\ &2[1 - \cos \varphi_L^n(k; \omega)] - \frac{1}{4KL} \sum_{k=1}^L \frac{\left| h_L^{(n)}(k; \omega) \right|^2}{\phi + 2[1 - \cos \varphi_L^n(k; \omega)]} - \\ &\left. K \left(\phi + \frac{2}{L} \rho \omega \right) \right\}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Тук $-2 + 2 \cos \varphi_L^n(k; \omega)$, $k = 1, \dots, L$ са собствените стойности на матрицата

$$\Delta_L^{(n)}(\omega) = \Delta_L^{(n)} - \omega(\delta_{1,1} + \delta_{L,L}), \quad (2.8)$$

и

$$h_L^{(n)}(k; \omega) = h_1 u_L^n(1, k; \omega) + h_L u_L^n(L, k; \omega), \quad (2.9)$$

където $\{u_L^n(r, k; \omega), r = 1, \dots, L\}, k = 1, \dots, L$ са собствените вектори; горният индекс n означава граничните условия на Нойман-Нойман. В уравнения (2.7) – (2.9) са използвани следните дефиниции

$$\phi = s/K - 6, \quad (2.10)$$

и

$$\omega = v/K. \quad (2.11)$$

От изискването за съществуване на статистическата сума, ние получаваме условието

$$\phi + 2 \min_{k=1, \dots, L} [1 - \cos \varphi_L^n(k; \omega)] > 0. \quad (2.12)$$

Собствените стойности и собствените вектори на матрицата $\Delta_L^{(n)}(\omega)$ могат да се получат по начин, подобен на този използван в [62] и [64].

Резултатите са:

i) За дадено L и ω , когато $|1 - \omega| \neq 1$, числата $\varphi_L^n(k; \omega), k = 1, \dots, L$ са L на брой корени на уравненията

$$1 - \omega = \frac{\sin \left[\frac{1}{2}(L+1)\varphi \right]}{\sin \left[\frac{1}{2}(L-1)\varphi \right]} \quad (2.13)$$

и

$$1 - \omega = \frac{\cos \left[\frac{1}{2}(L+1)\varphi \right]}{\cos \left[\frac{1}{2}(L-1)\varphi \right]} \quad (2.14)$$

където $0 < \operatorname{Re}(\varphi) < \pi$ и $\operatorname{Im}(\varphi) > 0$. За конкретност и простота на означенията по-долу, без загуба на общност на крайните резултати, ние приемаме, че L е нечетно цяло число. Тогава е лесно да се види, че уравнение (2.13) притежава $(L-1)/2$ на брой решения с исканите свойства, докато уравнение (2.14) дава останалите $(L+1)/2$ на брой решения. От (2.13) и (2.14) ние получаваме (при фиксирани L и k)

$$\frac{d\varphi}{d\omega} = \frac{1}{L} \frac{2 \sin \varphi}{(1-\omega)^2 - 2(1-\omega) \cos \varphi + 1 + L^{-1}[1 - (1-\omega)^2]}. \quad (2.15)$$

По-нататък, ако $|1 - \omega| < 1$, всичките L корени са реални. В този случай има само един корен на уравнението (2.13) във всеки интервал $(2\pi k/(L-1), 2\pi(k+1)/(L-1))$, $k = 0, \dots, (L-3)/2$. Също така, уравнението (2.14) има само един корен във всеки интервал $(\pi(2k-1)/(L-1), \pi(2k+1)/(L-1))$, $k = 1, \dots, (L-3)/2$, и един корен във всеки от интервалите $(0, \pi/(L-1))$ и $(\pi - \pi/(L-1), \pi)$. Нека сега да разгледаме случая $|1 - \omega| > 1$. Тогава, ако $\omega < 0$, ние отново имаме само един корен на уравнението (2.13) във всеки интервал $(2\pi k/(L-1), 2\pi(k+1)/(L-1))$, $k = 1, \dots, (L-3)/2$, и аналогично, по един корен на уравнението (2.14) във всеки интервал $(\pi(2k-1)/(L-1), \pi(2k+1)/(L-1))$, $k = 1, \dots, (L-3)/2$, и един корен в $(\pi - \pi/(L-1), \pi)$, т.е. общо $L-2$ на брой корена в интервала $(0, \pi)$.

Останалите 2 корена се дават чрез

$$\varphi_0 = i \log(1 - \omega) \pm O((1 - \omega)^{-(L-1)}). \quad (2.16)$$

(Строго казано, корените са изродени само с точност до експоненциално малки поправки). В случай $\omega > 2$ ние отново имаме $L-2$ реални корена в интервала $(0, \pi)$ и останалите два корена се дават чрез $\varphi_0 = \pi + i \log(\omega - 1) \pm O((\omega - 1)^{-(L-1)})$.

ii) Компонентите на собствените вектори $\{u_L^n(r, k; \omega), r = 1, \dots, L\}$, $k = 1, \dots, L$ на матрицата $\Delta_L^{(n)}(\omega)$ се дават с израза ($|1 - \omega| \neq 1$)

$$u_L^n(r, k; \omega) = \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{\sin[r\varphi_L^n(k; \omega)] - (1 - \omega)\sin[(r - 1)\varphi_L^n(k; \omega)]}{\{(1 - \omega)^2 - 2(1 - \omega)\cos\varphi_L^n(k; \omega) + 1 + L^{-1}[1 - (1 - \omega)^2]\}^{1/2}}. \quad (2.17)$$

iii) За пълнота ние даваме също резултатите за добре известения случай $|1 - \omega| = 1$ (виж, например, [47], [64]). Тогава $\varphi_L^n(k; 0) = \pi(k-1)/L$, $\varphi_L^n(k; 2) = \pi k/L$, $k = 1, \dots, L$, и компонентите на собствените вектори са $u_L^n(r, k; 0) = \sqrt{(2 - \delta_{k,1})/L} \cos[(r - 1/2)\varphi_L^n(k; 0)]$ и $u_L^n(r, k; 2) = \sqrt{2/L} \sin[(r - 1/2)\varphi_L^n(k; 2)]$, съответно.

Накрая, ще напомним, че ние се интересуваме главно от поведението на локалната повърхнинна възприемчивост, за която получаваме от уравнения (1.1) и (2.7) следния израз

$$\chi_{1,1}(T; \rho) = \frac{1}{2K} \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^L \frac{|u_L^n(1, k; \omega)|^2}{\phi + 2[1 - \cos \varphi_L^n(k; \omega)]}. \quad (2.18)$$

Ако, вместо локалната възприемчивост на повърхността на система, ние се интересуваме от локалната възприемчивост на l -тия слой, $\chi_{l,l}(T; \rho)$, съответният резултат гласи

$$\chi_{l,l}(T; \rho) = \frac{1}{2K} \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^L \frac{|u_L^n(l, k; \omega)|^2}{\phi + 2[1 - \cos \varphi_L^n(k; \omega)]}. \quad (2.19)$$

Горният израз може да се получи по начин, аналогичен на получаването на $\chi_{1,1}$, чрез включване на локално магнитно поле h_l действащо върху спиновете на l -тия слой.

За да определим поведението на сферичните полета ϕ и ω , ние трябва да анализираме уравненията (2.5) и (2.6). От (2.3), (2.7), (2.10), (2.11) и (2.15) ние получаваме в експлицитен вид системата от уравнения

$$2K = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta_1 \int_0^{2\pi} d\theta_2 \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L \left\{ \phi + 2 \sum_{i=1}^2 (1 - \cos \theta_i) + 2[1 - \cos \varphi_L^n(k; \omega)] \right\}^{-1} \quad (2.20)$$

и

$$2K\rho = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta_1 \int_0^{2\pi} d\theta_2 \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L 2 \sin^2 \varphi_L^n(k; \omega) \times \\ \left\{ \phi + 2 \sum_{i=1}^2 (1 - \cos \theta_i) + 2[1 - \cos \varphi_L^n(k; \omega)] \right\}^{-1} \times \\ \left\{ (1 - \omega)^2 - 2(1 - \omega) \cos \varphi_L^n(k; \omega) + 1 + L^{-1}[1 - (1 - \omega)^2] \right\}^{-1}. \quad (2.21)$$

Тези уравнения определят точката, в която крайноразмерната плътност на свободната енергия (2.7), която е аналитична и строго вдълбната функция на ϕ и ω в областта, зададена с неравенство (2.12), достига своя глобален максимум. Очевидно, в термодинамичната граница плътността на свободната енергия не зависи от повърхнинното

сферично поле ω . Както е добре известно, за всички $K \geq K_c$ нейната точна горна граница по ϕ се залепва за крайната точка $\phi_0 = 0$ на интервала, в който обемната плътност на свободната енергия е крайна. Когато $K < K_c$, точната горна граница се достига в точка $\phi_0 = \phi_0(K) > 0$, която удовлетворява граничната форма на уравнение (2.20) [29],

$$2K = W_3(\phi_0), \quad (2.22)$$

където $W_d(\phi)$ е d -мерният интеграл на Уотсън, $W_d(0) = 2K_c$. Изобщо, решенията за ϕ и ω на уравнения (2.20) и (2.21) могат да се запишат във формата $\phi = \phi_0 + \Delta\phi, \omega = \omega_0 + \Delta\omega$, където $\Delta\phi$ и $\Delta\omega$ клонят към нула, когато $L \rightarrow \infty$, и ϕ_0 и ω_0 са решенията на съответните уравнения, когато е взета границата $L \rightarrow \infty$.

Уравнения (2.16) – (2.22) осигуряват базата за нашия понататъшен анализ. Преди да преминем към него, ще отбележим, че вместо да разглеждаме ω като променлива, която трябва да се определи от уравнения (2.20) и (2.21), ние можем да я разглеждаме като допълнителен свободен параметър. Тогава, от уравнение (2.8) е ясно, че $\omega = 0$ дава стандартния сферичен модел с гранични условия на Нойман-Нойман, докато $\omega = 1$ дава същия модел при гранични условия на Дирихле-Дирихле. Когато $0 < \omega < 1$ ние имаме смесен (или "междинен" [55]) тип гранични условия. Следователно, по този начин ние можем да възпроизведем вече известните резултати за свойствата на локалните възприемчивости. В допълнение, както ще видим по-късно, с избора ω да бъде дадена функция на температурата, ние можем да дефинираме ефективен сферичен модел с $\gamma_{1,1} = 2$, което отговаря на критичния степенен показател за повърхнинно-обемния фазов преход в $O(n)$ модел в границата $n \rightarrow \infty$.

3. Критично поведение на локалните възприемчивости

Тук изучаваме критичното поведение на локалните възприемчивости $\chi_{1,1}$ и $\chi_{l,l}$ за l близо до средата на системата.

От уравнения (2.18) и (2.17) ние получаваме за повърхнинната възприемчивост

$$\chi_{1,1}(T; \rho) = \frac{1}{K} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L \frac{\sin^2 \varphi_L^n(k; \omega)}{\phi + 2[1 - \cos \varphi_L^n(k; \omega)]} \times \\ [1 - 2(1 - \omega) \cos \varphi_L^n(k; \omega) + (1 - \omega)^2 + [1 - (1 - \omega)^2]/L]^{-1}, \quad (3.1)$$

където границата $L \rightarrow \infty$ в (3.1) трябва да се вземе върху крайноразмерните рещения за ω и ϕ на уравнения (2.20) и (2.21). Ако $|1 - \omega| < 1$, от свойствата на $\varphi_L^n(k; \omega)$, $k = 1, \dots, L$, виж раздел 2, следва, че при $L \rightarrow \infty$ сумата в уравнение (3.1) клони към съответния добре дефиниран интеграл

$$\chi_{1,1}(T; \rho) = \frac{1}{K} \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{\sin^2 \varphi}{[\phi_0 + 2(1 - \cos \varphi)][1 - 2(1 - \omega_0) \cos \varphi + (1 - \omega_0)^2]} d\varphi. \quad (3.2)$$

Интегралът може да се сметне точно [65] със следния резултат

$$\chi_{1,1}(T; \rho) = \frac{1}{K} \frac{1}{\sqrt{\phi_0(4 + \phi_0) + \phi_0 + 2\omega_0}}. \quad (3.3)$$

Когато $|1 - \omega| > 1$ ние трябва да имаме предвид приноса на двата комплексни корена, който се оказва, че е от същия порядък, както приноса на останалите корени. Приносът на последните $L - 2$ корена отново се дава с интеграла в дясната страна на уравнение (3.2). Като проведем изчисленията, ние завършваме със същия аналитичен израз за $\chi_{1,1}(T; \rho)$, като дадения в уравнение (3.3).

Повърхнинното сферично поле ω_0 удовлетворява съответната гранична форма на сферичното условие (2.21) при фиксирано $\phi_0 = 0$ за $K \geq K_c$, и $\phi_0 = \phi_0(K)$ за $K < K_c$. Дясната страна на това уравнение може да се третира по начин, подобен на този при (3.1). Когато $|1 - \omega| <$

1, в съответствие със свойствата на корените $\varphi_L^n(k; \omega)$, $k = 1, \dots, L$, сумата в (2.21) е сходяща при $L \rightarrow \infty$ и преминава в добре дефиниран интеграл, който може да се сметне точно. Извършвайки процедурата, ние получаваме накрая

$$2K\rho = G_3(\phi_0, \omega_0), \quad (3.4)$$

където

$$G_d(\phi, \omega) = \frac{2}{\pi^d} \int_0^\pi d\theta_1 \cdots \int_0^\pi d\theta_{d-1} \left\{ \phi + 2\omega + 2 \sum_{i=1}^{d-1} (1 - \cos \theta_i) + \left[\phi + 2 \sum_{i=1}^{d-1} (1 - \cos \theta_i) \right]^{1/2} \left[\phi + 4 + 2 \sum_{i=1}^{d-1} (1 - \cos \theta_i) \right]^{1/2} \right\}^{-1}. \quad (3.5)$$

Когато $|1 - \omega| > 1$, ние трябва да разгледаме отделно приноса на двата комплексни корена. Приносът на останалите $L - 2$ реални корена отново води до добре дефиниран интеграл, който може да се сметне точно. Що се относя до $\chi_{1,1}(T; \rho)$, крайният резултат се дава от същия аналитичен израз, както в случая $|1 - \omega| < 1$, т.е. уравнение (3.4) е в действителност валидно за всички ω_0 (ограниченията върху ω_0 и ϕ_0 произлизат от сферичното условие (2.12) са изложени по-долу).

Нека означим с $G_3^+(\phi, \omega)$ клона на функцията $G_3(\phi, \omega)$ дефиниран за $\omega \geq 0$ и с $G_3^-(\phi, \omega)$ този дефиниран за $\omega < 0$. Тогава, с помощта на тъждествени трансформации се показва лесно, че

$$G_3^-(\phi, \omega) = (1 - \omega)^{-2} G_3^+ \left(\phi, \frac{|\omega|}{1 - \omega} \right) - \frac{\omega(2 - \omega)}{(1 - \omega)^2} W_2 \left(\phi - \frac{\omega^2}{1 - \omega} \right), \quad (3.6)$$

и

$$G_3^+(\phi, \omega) = (1 - \omega)^{-1} \left[2W_3(\phi) - \frac{1}{6} + \frac{1}{6}\phi W_3(\phi) \right] - \frac{\omega}{(1 - \omega)(2 - \omega)} \frac{2}{\pi^2} \int_0^\pi d\theta_1 \int_0^\pi d\theta_2 \left\{ \phi + 2 \sum_{i=1}^2 (1 - \cos \theta_i) + \left[\phi + 2 \sum_{i=1}^2 (1 - \cos \theta_i) \right]^{1/2} \left[\phi + 4 + 2 \sum_{i=1}^2 (1 - \cos \theta_i) \right]^{1/2} \right\}^{-1}. \quad (3.7)$$

Накрая, в границата $L \rightarrow \infty$ условията (2.12) за съществуване на статистическата сума дават дефиниционната област от стойности на

сферичните полета,

$$\phi_0 \geq \begin{cases} 0, & \text{ако } \omega_0 \geq 0 \\ \omega_0^2 / (1 - \omega_0), & \text{ако } \omega_0 \leq 0. \end{cases} \quad (3.8)$$

От уравнение (3.3) следва, че горните неравенства водят до $\chi_{1,1}(T; \rho) \geq 0$, както трябва да се очаква от общи физически съобразения.

Както е очевидно от уравнение (3.5), $G_3(\phi, \omega)$ е монотонно намаляваща функция на ω , която клони към нула отгоре при $\omega \rightarrow +\infty$. В съответствие с неравенствата (3.8), при $\phi = 0$ ние трябва да я разглеждаме в интервала $\omega \geq 0$, където тя е ограничена отгоре от стойността си при $\omega = 0$, виж уравнение (3.7),

$$G_3(0, 0) = 2K_c - 1/6 := 2K_c \rho_c. \quad (3.9)$$

От друга страна, ако $\phi > 0$, дефиниционната област на $G_3(\phi, \omega)$ се ограничава от (3.8) до интервала $\omega \geq \omega_1(\phi)$, където

$$\omega_1(\phi) = -(\phi + \phi^2/4)^{1/2} - \phi/2. \quad (3.10)$$

От представянето в (3.6) и от известното асимптотично поведение на $W_2(x)$ при $x \downarrow 0$,

$$W_2(x) = (4\pi)^{-1} \ln x^{-1} + O(1), \quad (3.11)$$

следва, че $G_3(\phi, \omega)$ е логаритмично разходяща към $+\infty$, когато $\omega \downarrow \omega_1(\phi)$.

Преди да преминем към анализа на горните уравнения, за да определим поведението на $\chi_{1,1}(T; \rho)$, нека първо да разгледаме по-простия случай, когато ω е свободен параметър. Тогава, за гранични условия на Нойман-Нойман ние имаме (виж уравнения (2.2) и (2.8)) $\omega = 0$, докато $\omega = 1$ за гранични условия на Дирихле-Дирихле. Така, от (3.3) и от добре известното поведение на ϕ_0 в близост до обемната критична температура $\phi_0 \simeq [8\pi(K_c - K)]^2$ [29], ние веднага получаваме предварително известните резултати за критичното поведение на локалната повърхнинна възприемчивост [47], [57]:

а) При гранични условия на Нойман–Нойман ($\omega = 0$; даденият по-горе резултат следва директно от уравнение (3.5) в [47] за $h_1 = h_L$)

$$\chi_{1,1}(T) = (2K)^{-1} \left\{ \phi_0/2 + [\phi_0(1 + \phi_0/4)]^{1/2} \right\}^{-1}, \quad (3.12)$$

т.е. $\gamma_{1,1} = 1$, и

б) При гранични условия на Дирихле–Дирихле ($\omega = 1$; виж уравнение (61) в [57])

$$\chi_{1,1}(T) = (2K)^{-1} \left\{ 1 + \phi_0/2 + [\phi_0(1 + \phi_0/4)]^{1/2} \right\}^{-1}, \quad (3.13)$$

т.е. $\gamma_{1,1} = -1$.

При $\omega \neq 0, 1$ ние имаме случая на така наречените смесени гранични условия [55]. Както е ясно от (3.3), $\chi_{1,1}$ е разходяща в $T = T_c$, когато и само когато $\omega = 0$, т.е. при гранични условия на Нойман–Нойман.

Нека сега да коментираме критичната стойност ρ_c на параметъра ρ , дефиниран в уравнение (3.9). С помощта на транслационната инвариантност, за средноквадратичната дължина на спиновете на границата на Нойман, в стандартния сферичен модел с едно глобално сферично поле ϕ , ние получаваме при нулево магнитно поле

$$\langle \sigma^2(r_1, r_2, 1) \rangle = \frac{1}{2KL_1L_2} \times \sum_{k_1, k_2, k_3=1}^L \frac{|u_L^n(1, k_3; 0)|^2}{\phi + 2 \sum_{i=1}^2 [1 - \cos(2\pi k_i/L_i)] + 2[1 - \cos(\pi(k_3 - 1)/L_3)]}. \quad (3.14)$$

В границата на безкрайен слой това уравнение дава ($L_3 = L$ се запазва крайно)

$$\lim_{L_1, L_2 \rightarrow \infty} \langle \sigma^2(r_1, r_2, 1) \rangle = \frac{1}{K} [W_3(\phi) - 1/12 + \phi W_3(\phi)/12 + W_2(\phi)/2L]. \quad (3.15)$$

Оттук следва, че в критичната точка $K = K_c$ на безкрайната система ($L = \infty$), като се има предвид обемното сферично условие при $\phi_0 = 0$, а именно $W_3(0) = 2K_c$, ние получаваме, че средноквадратната дължина ρ_s на спиновете на границата на Нойман в стандартния сферичен модел

е точно равна на критичната стойност ρ_c за повърхнинните спинове в модифицирания сферичен модел.

Накрая, ще отбележим, че като положим

$$\omega = -8\pi(K_c - K), \quad (3.16)$$

ние получаваме за разглежданата система със слоеста геометрия и гранични условия на Нойман-Нойман $\gamma_{1,1} = 2$, което отговаря на критичния показател за модела $O(n)$ в границата $n \rightarrow \infty$. В този случай $\gamma'_{1,1}$ съществува и $\gamma'_{1,1} = 1$. Очевидно, такъв избор на ω определя ефективен хамилтониан, който води до точно решим модел с критичните показатели изложени по-горе.

Сега преминаваме към анализа на поведението на $\chi_{1,1}(T; \rho)$, дадена с уравнение (3.3), където ω_0 се определя като функция на K и ρ от уравнение (3.4).

3.1. Критично поведение на локалната повърхнинна възприемчивост

Тук ние ограничаваме анализа до повърхнинните критичните режими, които се появяват при приближаване към обемната критична температура отгоре, т.е. когато $K = K_c + \Delta K$, където $\Delta K < 0$ и $|\Delta K| \rightarrow 0$. Тогава, както е добре известно, водещото асимптотично поведение на обемното сферично поле следва от асимптотичното развитие

$$W_3(\phi) = 2K_c - (4\pi)^{-1}\phi^{1/2} + O(\phi), \quad \phi \downarrow 0 \quad (3.17)$$

и гласи [57]

$$\phi \cong 64\pi^2|\Delta K|^2, \quad \Delta K \uparrow 0. \quad (3.18)$$

От израза (3.3) е ясно, че локалната повърхнинна възприемчивост може да прояви разходимост при два различни режима : (а) Когато $\omega_0 \downarrow 0$, и (б) когато $\omega_0 \downarrow \omega_1(\phi) \uparrow 0$. Както е ясно от уравнение (3.4) и по-горе споменатите свойства на функцията $G_3(\phi, \omega)$, първият

режим може да се редлизира, когато $K\rho \uparrow K_c\rho_c$, което, поради нашето допускане $\Delta K \uparrow 0$, изисква $\rho = \rho_c$. Вторият разходящ режим на локалната повърхнинна възприемчивост става при всяко фиксирано $\rho > \rho_c$. Подолу ние получаваме водещия порядък на асимптотичното решение за ω_0 във всеки от двата случая.

Случай (а) : $\rho = \rho_c$. За да получим асимптотичното развитие на $G_3(\phi, \omega)$, когато и двата аргумента $\phi \downarrow 0$ и $\omega \downarrow 0$, ние забелязваме, че интегралът в дясната страна на уравнението (3.7) е разходящ при $\phi = \omega = 0$ и разходимостта възниква от интегрирането по околността на точката $\theta_1 = \theta_2 = 0$. Следователно, водещото асимптотично поведение се дава от развитието в ред по малките аргументи на тригонометричните функции, което дава следното

$$G_3^+(\phi, \omega) = 2K_c\rho_c - (2\pi)^{-1}\phi^{1/2} + (\omega/2\pi)\ln(\phi^{1/2} + \omega) + O(\phi) + O(\omega). \quad (3.19)$$

Полагайки $\rho = \rho_c$, ние получаваме, че $\omega_0 \downarrow 0$ се подчинява на асимптотичното уравнение ($\Delta K \uparrow 0$)

$$-(\omega_0/2\pi)\ln(8\pi|\Delta K| + \omega_0) = |\Delta K|/(6K_c). \quad (3.20)$$

Решението, което клони към нула отгоре при $|\Delta K| \rightarrow 0$ е

$$\omega_0 \simeq -\frac{\pi|\Delta K|}{3K_c\ln(8\pi|\Delta K|)}. \quad (3.21)$$

Очевидно, този критичен режим води до $\gamma_{1,1} = 1$.

Случай (б) : $\rho > \rho_c$. Асимптотичното поведение на $G_3(\phi, \omega)$ при $\phi \downarrow 0$ и $\omega \uparrow 0$, така, че $\omega > \omega_1(\phi)$, се получава лесно от точното представяне (3.6) и от развитията (3.11) и (3.19) :

$$G_3^-(\phi, \omega) = 2K_c\rho_c - (2\pi)^{-1}\phi^{1/2} - (|\omega|/2\pi)\ln(\phi^{1/2} - |\omega|) + O(\phi) + O(\omega). \quad (3.22)$$

При фиксирано $\Delta\rho > 0$ уравнението за водещия порядък на повърхнинното сферично поле става

$$-(|\omega_0|/2\pi)\ln(8\pi|\Delta K| - |\omega_0|) = 2K_c\Delta\rho. \quad (3.23)$$

Приемайки $|\omega_0| = 8\pi|\Delta K| - x$, където $x = o(|\Delta K|)$, ние получаваме

$$\omega_0 \simeq -8\pi|\Delta K| + \exp\left(-\frac{K_c\Delta\rho}{2|\Delta K|}\right). \quad (3.24)$$

Следователно, в този критичен режим локалната повърхнинна възприемчивост е експоненциално разходяща при приближаване към обемната критична температура отгоре :

$$\chi_{1,1}(T; \rho) \simeq \frac{1}{2K} \exp\left(\frac{K_c\Delta\rho}{2|\Delta K|}\right). \quad (3.25)$$

Това поведение напомня за поведението на двумерна система близо до $T = 0$. Този факт, че повърхността е свързана с безкрайна тримерна система се отразява в заместването на $T = 0$ с обемната критична температура $T = T_c$.

Накрая, ако $\rho < \rho_c$ лесно е да се види, че (3.4) има крайно решение $\omega_0(\rho, K)$, където $0 < \omega_0 < 1$, когато $\Delta K \uparrow 0$. Последното всъщност следва от неравенствата

$$G_3(0, \phi) > W_3(\phi) > G_3(1, \phi). \quad (3.26)$$

Така, при $\rho = 1$ локалната повърхнинна възприемчивост $\chi_{1,1}(T_c; 1)$ е крайна.

3.2. Критично поведение на локалната възприемчивост около средата на системата

За локалната възприемчивост $\chi_{l,l}(T; \rho)$ от (2.17) и (2.19) ние получаваме в явен вид

$$\begin{aligned} \chi_{l,l}(T; \rho) = \frac{1}{K} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L & \frac{\{\sin[l\varphi_L^n(k; \omega)] - (1-\omega)\sin[(l-1)\varphi_L^n(k; \omega)]\}^2}{\phi + 2[1 - \cos\varphi_L^n(k; \omega)]} \times \\ & \left\{1 - 2(1-\omega)\cos\varphi_L^n(k; \omega) + (1-\omega)^2 + [1 - (1-\omega)^2]/L\right\}^{-1}. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Ние ще се интересуваме само от поведението на тази величина около средата на системата. Нека положим $l = (L+1)/2$. Тогава, от (3.27)

следва

$$\chi_{l,l}(T; \rho) = \frac{1}{K} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_k [\phi + 2[1 - \cos \varphi_L^n(k; \omega)]]^{-1} \times \\ \left\{ 1 - \frac{1 - (1 - \omega)^2}{L [1 - 2(1 - \omega) \cos \varphi_L^n(k; \omega) + (1 - \omega)^2] + 1 - (1 - \omega)^2} \right\}, \quad (3.28)$$

където сумирането е само по корените на уравнение (2.14). Имайки предвид свойствата на корените $\varphi_L^n(k; \omega)$, лесно се вижда, че в границата $L \rightarrow \infty$ това уравнение води до

$$\chi_{\infty,\infty}(T; \rho) = \frac{1}{2K} W_1(\phi_0) \quad (3.29)$$

за всяко ω . Ние напомняме сега, че разглеждайки ω като свободен параметър, при $\omega = 0$ ние имаме стандартния сферичен модел с гранични условия на Нойман-Нойман, а при $\omega = 1$ съответния модел с гранични условия на Дирихле-Дирихле. Горният резултат показва, че поведението на $\chi_{\infty,\infty}(T; \rho)$ в действителност не зависи от граничните условия. От температурната зависимост на ϕ_0 около обемната критична температура $\phi_0 \simeq [8\pi(K_c - K)]^2$ [29] и от асимптотичното развитие на $W_1(\phi)$ при малки стойности на аргумента [29],

$$W_1(\phi) = \frac{1}{2} \phi^{-1/2} + O(\phi^{1/2}), \quad (3.30)$$

ние получаваме $\gamma_{\infty,\infty} = 1$. Ясно е, че същото ще бъде вярно за всеки слой на крайно разстояние от средата на системата. Горният резултат е получен в [57] за сферичен модел при граничните условия на Дирихле-Дирихле (вж уравнение (82) в [57]). Тук ние просто показваме, че той не зависи от граничните условия, ако те са идентични и на двете граници.

4. Дискусия

В настоящата глава е разгледано критичното поведение на повърхноста в модифициран тримерен среден сферичен модел с L слоя, при

гранични условия на Нойман-Нойман. Стандартният сферичен модел е модифициран в смисъл, че в допълнение към обикновеното обемно сферично условие е въведено второ сферично поле, за да се фиксира средноквадратичната стойност на спиновете на границите равна на някакво $\rho > 0$. Ние се интересувахме главно от високотемпературното критично поведение на локалните възприемчивости $\chi_{1,1}$ и $\chi_{l,l}$ при l близо до средата на системата. Повърхнинната възприемчивост $\chi_{1,1}$ и локалната възприемчивост $\chi_{\infty,\infty}$ са точно оценени и съответните резултати са дадени с уравнения (3.3) и (3.29), съответно.

Показано е, че поведението на $\chi_{1,1}(T; \rho)$ зависи критично от ρ . При $\rho = 1$ ние намираме, че $\chi_{1,1}$ е крайна при обемната критична температура T_c , в противоположност на насконо получената стойност $\gamma_{1,1} = 1$ в случая на само едно глобално сферично условие. Резултатът $\gamma_{1,1} = 1$ се възстановява, само ако $\rho = \rho_c = 2 - (12K_c)^{-1}$, където K_c е безразмерната критична константа на взаимодействие. Когато $\rho > \rho_c$, локалната повърхнинна възприемчивост $\chi_{1,1}$ е експоненциално разходяща при $T \rightarrow T_c^+$, виж уравнение (3.25). Пресмятането на средноквадратичната стойност ρ_s на спиновете на границата на Нойман в стандартния сферичен модел изяснява появата на критичната стойност $\rho = \rho_c$: оказва се, че в обемната критична точка $\rho_c = \rho_s$, виж уравнение (3.15) при $K = K_c$, $\phi = 0$ и $L = \infty$. Както се очаква, поведението на локалната възприемчивост $\chi_{\infty,\infty}$ не зависи от граничните условия, ако те са еднакви и на двете граници. Само благодарение на симетрията, системата моделира сама по себе си аналог на границата на Нойман в средните слоеве, което води до $\gamma_{\infty,\infty} = 1$ (виж раздел 3.2 за подробности). Разглеждайки второто сферично поле като независим параметър, ние получаваме по еднообразен начин известните критични

свойства на локалната повърхнинна възприемчивост. Те следват директно от уравнение (3.3) при $\omega = 0$, за гранични условия на Ноиман-Нойман (виж (3.12)), и $\omega = 1$, за Дирихле-Дирихле. При $\omega \neq 0, 1$ уравнение (3.3) дава съответния резултат за смесени [54, 55] гранични условия. От тези резултати ние можем да заключим, че $\chi_{1,1}$ е разходяща при $T = T_c$ само при гранични условия на Ноиман-Нойман. Накрая, предложен е ефективен хамилтониан, който води до точно решим модел с $\gamma_{1,1} = 2$, стойността в границата $n \rightarrow \infty$ на съответния модел $O(n)$. Това е дадено с уравнение (2.1), където трябва да се положи $v = -8\pi(K_c - K)$, виж (3.16).

Представените по-горе резултати показват, че свойствата на модела са подобрени чрез въвеждане на второ сферично условие в смисъл, че те по несъмнен начин са по-близо до съответните свойства на модела $O(n)$ при $n \rightarrow \infty$. Изглежда е ясно, че за да получим "коректни" критични свойства на повърхността, ние трябва да наложим отделни сферични условия върху всеки слой, успореден на повърхността.

Глава 4

Относно ефектите на разцепване в сферичния модел

1. Увод

Ефектите на разцепване при профила на намагнитване в сферичния модел на Бърлин-Кац са открити от Ейбрахъм и Робърт [66]. Те са разгледали d -мерна система с отворени (Дирихле) гранични условия в едното измерение и периодични гранични условия в останалите $d - 1$ измерения. Броят L на $d - 1$ мерните тороидални слоеве, паралелни на границите на Дирихле, е бил приет да бъде нечетно цяло число; било е избрано стъпаловидно $(+-)$ външно магнитно поле $h(p)$, което действа еднакво върху всички спинове от p -тия слой, като за $p = -(L - 1)/2, \dots, -1$, то е отрицателно, за средния слой $p = 0$, има нулева стойност, и за $p = 1, \dots, (L - 1)/2$ е положително. В обемната граница $L \rightarrow \infty$, изразът за профила на намагнитване близо до средния слой,

$$\lim_{L \rightarrow \infty} m_L(K, h, p) = \operatorname{sgn}(p) m_\infty(K, h) [1 - \exp(-z|p|)], \quad (1.1)$$

е точно същият, както близо до границата на Дирихле (след като p се замести с разстоянието r от границата и $h(p)$ се замести с хомогенно поле със съответния знак). В уравнение (1.1)

$$m_\infty(K, h) = \frac{h}{2K\phi} \quad (1.2)$$

е обемното намагнитване, K е безразмерна константа на взаимодействие и $\phi = 4 \sinh^2(z/2)$ е решението на уравнението за седловидната точка. Отбележете, че близо до обемната критична точка $z = \xi^{-1} \simeq \phi^{1/2}$, където ξ е обемната корелационна дължина.

Сферичният модел при нехомогенни външни полета е бил също изследван в режим на крайноразмерно подобие, за по-общ преглед виж [8], при периодични, антипериодични, свободни, и фиксирани гранични условия [57], [46], и [67]. Ние предпочитаме да използваме тук, както в глава 2 и глава 3, класическата терминология за гранични условия, т.е. ние използваме термините Дирихле и Нойман вместо фиксиани (или отворени) и свободни, съответно. Намагнитването в средния сферичен модел с четен брой L на тороидалните слоеве, означени чрез координатата $r = 1, \dots, L$, е изследвано в [67] при стъпаловидно поле

$$h_s(r) = h_L \operatorname{sgn}[(L+1)/2 - r], \quad (1.3)$$

където амплитудата $h_L \rightarrow 0$ при $L \rightarrow \infty$. В режим на крайноразмерно подобие ефектите на разцепване в профила на намагнитване в направление перпендикулярно на слоевете са били намерени в случая на гранични условия на Дирихле-Дирихле. В този режим, когато $h_L = O(L^{-5/2})$ и $K - K_{c,L} = O(L^{-1})$, намагнитването има вида [67] (тук ние използваме малко по-различни означения)

$$m_L^{(a)}(K, h_s, L/2 + p) \cong \operatorname{sgn}(h_s) \frac{h_L L^2}{2K y_1^2} \left\{ 1 - \frac{\cosh[(1/4 - |p/L|)y_1]}{\cosh(y_1/4)} \right\}. \quad (1.4)$$

Тук $K_{c,L}$ е отместваната критична константа на взаимодействие, $y_1 = (\phi_L L^2 - \pi^2)^{1/2}$, където $\phi_L = O(L^{-2})$ е крайноразмерното решение на съответното средно сферично условие. Очевидно, всяко от крилата (положителното и отрицателното) на профила, даден с уравнение (1.4) върху машаб на разстояния $O(L)$, е симетрично спрямо заместването

на разстоянието $|p/L|$ от точката, в която намагнитването е равно на нула, с разстоянието от съответната граница на Дирихле .

Ако вземем например лявата половина на системата $-L/2 + 1 \leq p \leq 0$, изместим началото на координатата на слоя в нейната среда чрез полагането $p = p' - L/4$, и след това осъществим трансформациите $L \rightarrow 2L$ и $y_1 \rightarrow 2y_1$, то ще установим, че изразът (1.4) приема вида

$$m_L^{(a)}(K, h_s, L/2 + p') \cong \frac{h_L L^2}{2K y_1^2} \left\{ 1 - \frac{\cosh[(p'/L)y_1]}{\cosh(y_1/2)} \right\}. \quad (1.5)$$

Това е точно видът на крайноразмерно подобие на профила на намагнитване в система от L слоя, при хомогенно поле с амплитуда h_L и гранични условия на Дирихле-Дирихле.

Освен това, ако вземем най-левата четвъртина на системата, $-L/2 + 1 \leq p \leq -L/4$, номерираме слоевете започвайки от границата на Дирихле с $r = p + L/2$, и след това осъществим трансформациите $L \rightarrow 4L$ и $y_1 \rightarrow 4y_1$, ние ще установим, че изразът (1.4) приема вида

$$m_L^{(a)}(K, h_s, r) \cong \frac{h_L L^2}{2K y_1^2} \left\{ 1 - \frac{\cosh[(1-r/L)y_1]}{\cosh(y_1)} \right\}. \quad (1.6)$$

Както ще бъде показано по-долу, този профил има същата форма, както профилът за система с L слоя при гранични условия на Дирихле-Нойман и хомогенно поле h_u с амплитуда h_L :

$$m_L^{(c)}(K, h_u, r) \cong \frac{h_L L^2}{2K \tilde{y}_1^2} \left\{ 1 - \frac{\cosh[(1-r/L)\tilde{y}_1]}{\cosh(\tilde{y}_1)} \right\}, \quad (1.7)$$

където $\tilde{y}_1 = (\phi_L L^2 - \pi^2/4)^{1/2}$.

Тук е мястото да отбележим, че в критичния режим на крайноразмерно подобие намагнитването на слоя клони към нула като $L^{-1/2}$, виж (1.4) – (1.7). Следователно, като говорим за профилите на намагнитване в този режим, ние имаме предвид най-вече границата $L \rightarrow \infty$ на $L^{1/2} m_L^{(\tau)}(K, h, r)$, а не съответната граница на самото намагнитването $m_L^{(\tau)}(K, h, r)$. Както е отбелязъл Патрик [46], неклонящ към нула профил на намагнитването се появява при нискотемпературния режим с умерено

поле, когато $K > K_c$ е фиксирано и $h_L = O(L^{-2})$. По отношение на ефектите на разцепване този случай ще бъде разгледан тук за първи път.

Очевидно аргументите за разцепване, изложени по-горе, са непълни и може да играят само евристична роля. Преди всичко, не е ясно до каква степен разцепената система, снабдена с подходящи гранични условия, е статистически еквивалентна на първоначалната. Тук би трябвало да се позвем на насокоро получените свойства на крайноразмерно подобие в тримерния среден сферичен модел със геометрия от типа $L \times \infty^2$, гранични условия на Нойман-Дирихле и повърхнинни полета, действащи на границите [47]. Дали слоевете близо до средата на системата в стъпаловидно (+-) (съответно, хомогенно) поле и при гранични условия на Дирихле-Дирихле имат свойствата на границата на Дирихле (съответно, на Нойман)? Второ, в аргументите за разцепване, отнасящи се до режима на крайноразмерно подобие за намагнитването, беше използвана трансформацията $L \rightarrow 2kL$, $y_1 \rightarrow 2ky_1$ ($k = 1, 2$). Параметърът y_1 обаче зависи от константата на взаимодействие K , от амплитудата h_L на магнитното поле h_s , и от размера L на системата посредством решението ϕ_L на крайноразмерното средно сферично условие. Анализът на това условие тряба да се включи в решаването на проблема за разцепването.

Целата на тази глава е да даде отговор на следния въпрос: Статистически еквивалентен ли е средният сферичен модел с гранични условия на Дирихле-Дирихле и стъпаловидно (+-), съответно хомогенно, магнитно поле на модела, който е разцепен по централната равнина на системата и снабден с гранични условия на Дирихле,

съотвено на Нойман, върху новите повърхности? Ние ограничаваме нашето разглеждане до изследване на профила на намагнитване при три различни температурни режима (във високотемпературната обемна граница, критичен режим на крайноразмерно подобие и нискотемпературен режим с умерено поле) и на средноквадратичната дължина на спиновете в зададен слой във високотемпературната обемна граница. Както в глава 2, ние разглеждаме тримерния среден сферичен модел с феромагнитни взаимодействия между най-близките съседи в приста кубична решетка. Известно е, че средното сферично условие има вида

$$W_{L,3}^{(\tau)}(\phi) - \frac{\partial}{\partial \phi} P_L^{(\tau)}(K, h_L; \phi) = 2K, \quad (1.8)$$

където $W_{L,3}^{(\tau)}(\phi)$ се дава с уравнението (2.35) в глава 2,

$$W_{L,3}^{(\tau)}(\phi) := \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L W_2[\phi + 2 \cos \varphi_L^{(\tau)}(1) - 2 \cos \varphi_L^{(\tau)}(k)], \quad (1.9)$$

и

$$P_L^{(\tau)}(K, h_L, \phi) = \frac{1}{2KL} \sum_{k=1}^L \frac{|h_L^{(\tau)}(k)|^2}{\phi + 2 \cos \varphi_L^{(\tau)}(1) - 2 \cos \varphi_L^{(\tau)}(k)}. \quad (1.10)$$

Уравненията (1.8)–(1.10) дават началните изрази за нашия по-нататъшен анализ на средното сферично условие.

2. Средно сферично условие

Ние тук изследваме асимптотичното поведение на решението $\phi = \phi_L$ на уравнение (1.8) при наличие на стъпаловидно (+–) външно поле $h_s(r)$, виж (1.3), и на хомогенното поле $h_u(r) = h_L$, при гранични условия на Дирихле-Дирихле и Дирихле-Нойман. Крайният аналитичен израз зависи от това дали $\phi/2 + \cos \varphi_L^{(\tau)}(1)$ е по-голямо или по-малко от 1. Ние изследваме в явен вид случая, когато $\phi/2 + \cos \varphi_L^{(\tau)}(1) > 1$; обратният случай може да се получи чрез аналитично продължение, виж глава 2.

2.1. Границни условия на Дирихле-Дирихле

Когато $\phi/2 + \cos \varphi_L^{(a)}(1) > 1$, ние полагаме

$$\phi/2 + \cos \varphi_L^{(a)}(1) = \cosh z. \quad (2.1)$$

В случая на стъпаловидно поле, полевият член (1.10) може да се пресметне точно с помощта на техниката "сумиране по контура", виж [46], която дава

$$P_L^{(a)}(K, h_s; \phi) = \frac{h_L^2}{8K \sinh^2(z/2)} \left\{ \frac{L+2}{L+1} - \frac{4}{L \sinh(z)} \frac{\cosh[(L+1)z/2] - \cosh(z/2)}{\sinh[(L+1)z/2]} \right\} - \frac{h_L^2}{4K} \left\{ \frac{\coth[(L+1)z/2] - (L+1)^{-1} \coth(z/2)}{L \sinh(z)} \right\}. \quad (2.2)$$

В случая на хомогенно поле ние получаваме

$$P_L^{(a)}(K, h_u; \phi) = \frac{h_L^2}{8K \sinh^2(z/2)} \left\{ 1 - \frac{2 \tanh[(L+1)z/2]}{(L+1) \sinh(z)} \right\} - \frac{h_L^2}{4K} \frac{\tanh[(L+1)z/2]}{(L+1) \sinh(z)}. \quad (2.3)$$

В обемната граница, когато $L \rightarrow \infty$, $h_L = h$ и $\phi > 0$ е фиксирано, ние имаме

$$P_\infty^{(a)}(K, h_s; \phi) = P_\infty^{(a)}(K, h_u; \phi) = \frac{h^2}{2K\phi}. \quad (2.4)$$

В граничния случай на крайноразмерно подобие,

$$\phi \rightarrow 0, \quad L \rightarrow \infty, \quad \text{така, че} \quad y := \phi^{1/2}L = O(1), \quad (2.5)$$

уравнение (2.1) дава при фиксирано $y > \pi$

$$zL \cong (y^2 - \pi^2)^{1/2} \equiv y_1. \quad (2.6)$$

Следователно, асимптотичното поведение на водещия порядък в изразите (2.2) и (2.3) се дава с

$$P_L^{(a)}(K, h_s; \phi) \cong \frac{h_L^2 L^2}{2K y_1^2} [1 - Y(y_1)], \quad (2.7)$$

и

$$P_L^{(a)}(K, h_u; \phi) \cong \frac{h_L^2 L^2}{2K y_1^2} [1 - Y(2y_1)], \quad (2.8)$$

където

$$Y(z) = \frac{4 \tanh(z/4)}{z}. \quad (2.9)$$

Известно е, че членът на взаимодействие в средното сферично условие има вида [29]

$$W_{L,3}^{(a)}(\phi) = 2K_{c,L}^{(a)} - \frac{1}{4\pi L} \ln \left[\frac{\sinh(y_1)}{y_1} \right] + O(L^{-2}), \quad (2.10)$$

където

$$K_{c,L}^{(a)} = K_c + \frac{1}{2L} \left[2K_c - \frac{\ln L}{4\pi} - \frac{1}{2} W_2(4) - \frac{7 \ln 2}{8\pi} \right]. \quad (2.11)$$

е отместваната критична константа на взаимодействие.

Следователно, чрез комбиниране на (2.10) и производните на (2.7), (2.8) по ϕ , и след пренебрегване на поправките $O(L^{-2})$, средното сферично условие (1.8) приема асимптотичния вид

$$\frac{1}{4\pi} \ln \left[\frac{\sinh(y_1)}{y_1} \right] - \frac{h_L^2 L^5}{2K y_1^4} \left[1 - Y(y_1) + \frac{y_1}{2} Y'(y_1) \right] = 2(K_{c,L}^{(a)} - K)L, \quad (2.12)$$

за стъпаловидно поле, и

$$\frac{1}{4\pi} \ln \left[\frac{\sinh(y_1)}{y_1} \right] - \frac{h_L^2 L^5}{2K y_1^4} [1 - Y(2y_1) + y_1 Y'(2y_1)] = 2(K_{c,L}^{(a)} - K)L, \quad (2.13)$$

за хомогенно поле. Тук $Y'(z) = dY(z)/dz$.

Забележете, че изразено чрез променливите на подобие

$$v_1 = (K_{c,L}^{(a)} - K)L, \quad v_2 = K^{-1/2} h_L L^{5/2}, \quad (2.14)$$

решението $y_1 = y_1(v_1, v_2)$ на средното сферично условие (2.12), или (2.13), в близост до критичната точка, дефинирана с $v_1 = O(1)$ и $v_2 = O(1)$, дава вида на крайноразмерно подобие за сферичното поле

$$\phi_L = L^{-2} X^{(a)}(v_1, v_2). \quad (2.15)$$

От друга страна, в обемната граница (2.12) и (2.13) дават

$$\frac{\phi^{1/2}}{4\pi} - \frac{h^2}{2K\phi^2} = 2(K_c - K). \quad (2.16)$$

Това е водещата асимптотика при малки стойности на ϕ на обемното сферично условие, както за хомогенно, така и за стъпаловидно поле,

$$W_3(\phi) + \frac{h^2}{2K\phi^2} = 2K, \quad (2.17)$$

където $W_3(\phi)$ е тримерният интеграл на Уотсън.

2.2. Границни условия на Дирихле-Нойман

Разглеждайки случая $\phi/2 + \cos \varphi_L^{(c)}(1) > 1$, ние полагаме

$$\phi/2 + \cos \varphi_L^{(c)}(1) = \cosh z. \quad (2.18)$$

В случая на хомогенно поле, използвайки техниката "сумиране по контур" [46] за точно пресмятане на полевия член (1.10), ние получаваме

$$P_L^{(c)}(K, h_u; \phi) := \frac{h_L^2}{8K \sinh^2(z/2)} \left\{ \frac{2(L+1)}{2L+1} + \frac{1}{2L(2L+1) \cosh^2(z/2)} \right. \\ \left. - \frac{\tanh[(L+\frac{1}{2})z]}{L \sinh(z)} \right\} - \frac{h_L^2}{8K} \left\{ \frac{\tanh[(L+\frac{1}{2})z] - (2L+1)^{-1} \tanh(z/2)}{L \sinh(z)} \right\}. \quad (2.19)$$

В обемната граница резултатът не зависи от граничните условия, виж (2.4),

$$P_\infty^{(c)}(K, h_u; \phi) = \frac{h^2}{2K\phi}. \quad (2.20)$$

В граничния случай на крайноразмерно подобие (2.5), уравнение (2.18) дава при фиксирано $y > \pi/2$,

$$zL \cong (y^2 - \pi^2/4)^{1/2} \equiv \tilde{y}_1. \quad (2.21)$$

Тогава асимптотичното поведение на (2.19) се дава с

$$P_L^{(c)}(K, h_u; \phi) \cong \frac{h_L^2 L^2}{2K \tilde{y}_1^2} [1 - Y(4\tilde{y}_1)], \quad (2.22)$$

където функцията $Y(z)$ е дефинирана в (2.9).

Членът на взаимодействие в средното сферично условие е получен в [47],

$$W_{L,3}^{(c)}(\phi) = 2K_{c,L}^{(c)} - \frac{1}{4\pi L} \ln [\cosh(\tilde{y}_1)] + O(L^{-2}), \quad (2.23)$$

където

$$K_{c,L}^{(c)} = K_c + \frac{1}{2L} \left[K_c - \frac{1}{2} W_2(4) - \frac{\ln 2}{4\pi} \right] \quad (2.24)$$

е отмествената критична константа на взаимодействие.

Следователно, чрез комбиниране на (2.23) и производната на (2.22) по ϕ , и след пренебрегване на поправките $O(L^{-2})$, средното сферично условие (1.8) в случая на хомогенно поле има асимптотичния вид

$$\frac{1}{4\pi} \ln [\cosh(\tilde{y}_1)] - \frac{h_L^2 L^5}{2K \tilde{y}_1^4} [1 - Y(4\tilde{y}_1) + 2\tilde{y}_1 Y'(4\tilde{y}_1)] = 2(K_{c,L}^{(c)} - K)L. \quad (2.25)$$

Изразено чрез скейлинговите променливи

$$v_1 = (K_{c,L}^{(c)} - K)L, \quad v_2 = K^{-1/2} h_L L^{5/2}, \quad (2.26)$$

решението $\tilde{y}_1 = \tilde{y}_1(v_1, v_2)$ на средното сферично условие (2.25) в близост до критичната точка, дефинирана с $v_1 = O(1)$ и $v_2 = O(1)$, дава вида на крайноразмерното подобие за сферичното поле

$$\phi_L = L^{-2} X^{(c)}(v_1, v_2). \quad (2.27)$$

В обемната граница, средното сферично условие (2.25) отново има вида, както в уравнение (2.16).

Сега ние сме готови да изследваме ефектите на разцепване върху профила на намагнитване. За нашите цели е достатъчно да разгледаме следните два случая:

(1) *Разцепване на две подсистеми с противоположно намагнитване:*

Сдвоената версия представлява сферичен модел, състоящ се от L слоя при гранични условия на Дирихле-Дирихле и стъпаловидно магнитно поле. Поради симетрията на граничните условия и антисиметрията на външното поле, сферичното поле във всяка от подсистемите (сдвоени през централната равнина) удовлетворява средното сферично условие, тъждествено с първоначалното, (2.12). Разцепената

система представлява два независими сферични модела, всеки от които се състои от $L/2$ слоя, има гранични условия на Дирихле-Дирихле и е поставен в хомогенно външно поле. Сферичното поле при всеки от тези модели удовлетворява условието, което следва от (2.13) при заместването $L \rightarrow L/2$.

(2) *Разцепване на две подсистеми с едно и също намагнитване:* Сдвоената версия представлява модел, състоящ се от L слоя при гранични условия на Дирихле-Дирихле и хомогенно магнитно поле. Поради симетрията на граничните условия и на външното поле, сферичното поле във всяко от подсистемите (сдвоени през централната равнина) удовлетворява отново средното сферично условие, което е тъждествено с първоначалното, (2.13). Разцепената система представлява два независими сферични модела, всеки от които се състои от $L/2$ слоя, има гранични условия на Дирихле-Нойман и е поставен в хомогенно външно поле. Сферичното поле при всеки от тези модели удовлетворява условието, което следва от (2.25) при заместването $L \rightarrow L/2$.

3. Ефекти на разцепване при профила на намагнитване

Средният сферичен модел ни позволява да получим точния крайноразмерен израз за намагнитването в слои, $m_L^{(\tau)}(K, h; r_1)$, което се дефинира като

$$m_L^{(\tau)}(K, h; r_1) := \langle \sigma(\vec{r}) \rangle^{(\tau)} = K^{-1} \sum_{\vec{k} \in \Lambda} U_\Lambda^{(\tau)}(\vec{r}, \vec{k}) [\phi + \omega_\Lambda^{(\tau)}(\vec{k})]^{-1} \hat{h}_\Lambda^{(\tau)}(\vec{k}), \quad (3.1)$$

където $\langle \dots \rangle$ означава математическото очакване спрямо разпределението на Гибс с хамилтониана (2.1) във втора глава. В разглеждания случай $\tau = (\tau_1, p, p)$ дясната страна на (3.1) зависи само от координатата на слоя r_1 . Както в предишния раздел, крайният аналитичен израз зависи от стойността на $\phi/2 + \cos \varphi_L^{(\tau)}(1)$, сравнена с 1. Тук приемаме, че

$\phi/2 + \cos[\varphi_L^{(\tau)}(1)] = \cosh(z) > 1$ и като извършим сумирането, получаваме следните резултати ($r = 1, \dots, L$) .

(i) За гранични условия на Дирихле–Дирихле и стъпаловидно поле,

$$m_L^{(a)}(K, h_s, r) = \operatorname{sgn}(h_s) \frac{h_L}{8K \sinh^2(z/2)} \left\{ 1 - \frac{\cosh\{[(L+1)/2 - r]z\}}{\cosh(z/2)} \right. \\ \left. + \left[\frac{\cosh[(L+1)z/2]}{\cosh(z/2)} - 1 \right] \frac{\sinh\{|(L+1)/2 - r|z\}}{\sinh[(L+1)z/2]} \right\}. \quad (3.2)$$

(ii) За гранични условия на Дирихле–Дирихле и хомогенно поле,

$$m_L^{(a)}(K, h_u, r) = \frac{h_L}{8K \sinh^2(z/2)} \left\{ 1 - \frac{\cosh\{[(L+1)/2 - r]z\}}{\cosh[(L+1)z/2]} \right\}. \quad (3.3)$$

(iii) За гранични условия на Дирихле–Нойман и хомогенно поле,

$$m_L^{(c)}(K, h_u, r) = \frac{h_L}{8K \sinh^2(z/2)} \left\{ 1 - \frac{\cosh[(L+\frac{1}{2}) - r]z)}{\cosh[(L+\frac{1}{2})z]} \right\}. \quad (3.4)$$

Първо ще проверим, дали профилът на намагнитване в средния сферичен модел с гранични условия на Дирихле–Дирихле и стъпаловидно (+–) поле е еквивалентен на този в резцепената по централната равнина система, снабдена с гранични условия на Дирихле върху новите повърхности.

3.1. Разцепване на подсистеми с противоположно намагнитване

В обемната граница $L \rightarrow \infty$, при фиксирано $h_L = h$, $K < K_c$, така че $\phi_L \rightarrow \phi > 0$, изразът (3.2) за намагнитването в стъпаловидно поле дава за слоя $r = L/2 + j$, при фиксирано j ,

$$\lim_{L \rightarrow \infty} m_L^{(a)}(K, h_s, L/2 + j) = \operatorname{sgn}(h_s) m_\infty(K, h) \left[1 - \frac{\exp(-|j - \frac{1}{2}|z)}{\sqrt{1 + \phi/4}} \right]. \quad (3.5)$$

От друга страна, близо до лявата граница на Дирихле, където r е фиксирано, всичките три уравнения (3.2) – (3.4) дават

$$\lim_{L \rightarrow \infty} m_L^{(a)}(K, h_s, r) = \lim_{L \rightarrow \infty} m_L^{(\tau)}(K, h_u, r) = m_\infty(K, h) [1 - \exp(-rz)]. \quad (3.6)$$

В противоположност на изводите в [66], горните профили не са точно еднакви поради липсата на буферен слой с нулево намагнитване

между двете подсистеми. Забележете, че нашият избор на четен брой на слоевете L в първоначалната система се определя от изискването за точно разцепване на две тъждествени подсистеми. Като резултат, намагнитването в първия слой, виж (3.6) при $r = 1$,

$$\lim_{L \rightarrow \infty} m_L^{(a)}(K, h_u, 1) = \lim_{L \rightarrow \infty} m_L^{(a)}(K, h_s, 1) = m_\infty(K, h) \phi^{1/2} [(1 + \phi/4)^{1/2} - (\phi/4)^{1/2}], \quad (3.7)$$

който е в съседство с границата на Дирихле при $r = 0$, е по-високо от намагнитването в слоя от лявата страна на централната равнина, виж (3.5) при $j = 0$,

$$\lim_{L \rightarrow \infty} m_L^{(a)}(K, h_s, L/2) = m_\infty(K, h) \phi^{1/2} (4 + \phi)^{-1/2}, \quad (3.8)$$

който е в съседство със слоя с противоположно намагнитване при $j = 1$. От изразите (3.7) и (3.8) следва, че при приближаване към обемната критична точка отгоре, съответното относително намагнитване, нормирано на $m_\infty(K, h)$, клони към нула като $\xi^{-1} = z \simeq \phi^{1/2} \rightarrow 0$. За разстояния от границата на Дирихле или от централната равнина, дадени в машаба на разходящата се обемна корелационна дължина ξ , профилите (3.5) и (3.6) съвпадат с точност до поправки от порядък ξ^{-1} . Ние можем да заключим, че в обемната граница разцепването на профила на намагнитване не е точно; то е асимптотично вярно в близка околност на критичната точка.

Горните резултати мотивират нашето разглеждане на ефектите на разцепване в критичния режим на крайноразмерно подобие, когато $v_1 = O(1)$ и $v_2 = O(1)$. В случая на гранични условия на Дирихле-Дирихле, уравнение (2.6) дава $z \cong L^{-1}y_1$, и точните изрази (3.2) и (3.3) се свеждат до

$$m_L^{(a)}(K, h_s, r) \cong \operatorname{sgn}(h_s) \frac{h_L L^2}{2 K y_1^2} \left\{ 1 - \frac{\cosh \left[(1/4 - |\frac{1}{2} - r/L|) y_1 \right]}{\cosh(y_1/4)} \right\}, \quad (3.9)$$

$$m_L^{(a)}(K, h_u, r) \cong \frac{h_L L^2}{2K y_1^2} \left\{ 1 - \frac{\cosh[(\frac{1}{2} - r/L)y_1]}{\cosh(y_1/2)} \right\}. \quad (3.10)$$

Изразът (3.9) е получен преди това в [67]; той има същия вид, както уравнение (4.7) в [46] за профила на намагнитване в сферичния модел на Бърлин-Кац. За нашите цели е достатъчно да сравним лявата половина на профила на намагнитване в стъпаловидно поле (+-), даден с (3.9) за $r = 1, \dots, L/2$,

$$m_L^{(a)}(K, h_s, r) \cong \frac{h_L L^2}{2K y_1^2} \left\{ 1 - \frac{\cosh[(1/4 - r/L)y_1]}{\cosh(y_1/4)} \right\}, \quad (3.11)$$

където y_1 удовлетворява средното сферично условие (2.12), с намагнитването (3.10), преписано за система с размер $L/2$:

$$m_{L/2}^{(a)}(K, h_u, r) \cong \frac{h_{L/2} L^2}{2K(2\bar{y}_1)^2} \left\{ 1 - \frac{\cosh[(1/4 - r/L)2\bar{y}_1]}{\cosh(\bar{y}_1/2)} \right\}. \quad (3.12)$$

В горния израз $\bar{y}_1 = (\bar{y}^2 - \pi^2)^{1/2}$, където $\bar{y} = \phi_{L/2}^{1/2} L/2$, удовлетворява условието, която следва от (2.13) при заместването $L \rightarrow L/2$:

$$\frac{1}{2\pi} \ln \left[\frac{\sinh(\bar{y}_1)}{\bar{y}_1} \right] - \frac{h_{L/2}^2 L^5}{2K(2\bar{y}_1)^4} [1 - Y(2\bar{y}_1) + \bar{y}_1 Y'(2\bar{y}_1)] = 2(K_{c,L/2}^{(a)} - K)L. \quad (3.13)$$

Очевидно пространствената зависимост на намагнитването в сдвоената система, (3.11), и в разцепената система, (3.12), би била същата, ако y_1 беше равно на $2\bar{y}_1$ при подходящо избрани температурна и полева променливи в съответните системи. Обаче, тай като членът на спин-спиновото взаимодействие не се преобразува по подходящия начин,

$$\ln \left[\frac{\sinh(y_1)}{y_1} \right] \neq \frac{1}{2} \ln \left[\frac{\sinh(2\bar{y}_1)}{2\bar{y}_1} \right], \quad (3.14)$$

решението $y_1 = Z(v_1, v_2)$ на уравнение (2.12), разгледано като функция на променливите (2.14), се различава от решението за $2\bar{y}_1 = \bar{Z}(\bar{v}_1, \bar{v}_2)$ на уравнение (3.13), изразено чрез променливите

$$\bar{v}_1 = (K_{c,L/2}^{(a)} - K)L, \quad \bar{v}_2 = K^{-1/2} h_{L/2} L^{5/2}. \quad (3.15)$$

Интересно е да се отбележи, че неравенството (3.14) се превръща в асимптотично равенство във водещ порядък във високотемператураната

обемна граница $K < K_c$, $L \rightarrow \infty$, когато и двете $y_1, \bar{y}_1 \rightarrow \infty$. Тогава ние получаваме, че $y_1 \simeq 2\bar{y}_1$, което означава разцепване във водещия порядък на профила на намагнитване, сравнете (3.11) и (3.12).

Както е посочено от Патрик [46], има друг режим, при който полевият член преобладава над обменното взаимодействие (и неговите флукутуации), а именно, така нареченият нискотемпературен режим с умерено поле, когато $K > K_c$ е фиксирано и $h_L L^2 = O(1)$. Тъй като този случай изглежда подходящ за разцепване на намагнитването, ние преминаваме към неговото разглеждане.

Първо ще разглеждаме случая на гранични условия на Дирихле-Дирихле и стъпаловидно поле за система от L слоя. За да дадем пълна картина на нискотемпературния режим с умерено поле, ние започваме със забележката, че при $K > K_c$ и $h_L = O(L^{-2})$ водещата поправка към плътността на свободната енергия (виж уравнение (2.25) в глава 2) става следната

$$\beta f_L^{(a)}(K, h_s) \cong \text{const} + \frac{1}{L^2} \sup_{y \geq 0} \left[(K_c - K)(y^2 - \pi^2) - \frac{1}{2}\eta^2 g_s^{(a)}(y^2) \right], \quad (3.16)$$

Тук $y = \phi^{1/2}L$, въвели сме функцията

$$g_s^{(a)}(z) = \frac{1}{2(z - \pi^2)} [1 - Y(\sqrt{z - \pi^2})], \quad (3.17)$$

и скейлинговата променлива на магнитното поле е

$$\eta = K^{-1/2} h_L L^2. \quad (3.18)$$

Забележете, че $g_s^{(a)}(z)$ е непрекъсната, диференцируема функция на $z \geq 0$ със следните свойства:

$$\begin{aligned} 0 < g_s^{(a)}(z) &< g_s^{(a)}(0) = \frac{1}{2\pi^2}(4/\pi - 1), \quad z > 0, \\ g_s^{(a)}(\pi^2) &= 1/96, \quad g_s^{(a)}(z) \rightarrow 0^+ \quad \text{при} \quad z \rightarrow \infty, \end{aligned} \quad (3.19)$$

и

$$g_s'^{(a)}(0) = -\frac{1}{\pi^4}(1 - 3/\pi) < g_s'^{(a)}(z) < 0, \quad z > 0,$$

$$g_s^{(a)}(\pi^2) = -1/3840, \quad g_s^{(a)}(z) \rightarrow 0^- \quad \text{при} \quad z \rightarrow \infty, \quad (3.20)$$

където $g_s^{(a)}(z) = dg_s^{(a)}(z)/dz$. Следователно, ако

$$\eta^2 > \frac{2(K - K_c)}{-g_s^{(a)}(0)}, \quad (3.21)$$

тогава точната горна граница в (3.16) се достига при някакво $y = y^*$, $0 < y^* < \infty$, което е единственото решение на уравнението

$$-\frac{\eta^2}{2y_1^4} \left[1 - Y(y_1) + \frac{1}{2}y_1 Y'(y_1) \right] = 2(K_c - K). \quad (3.22)$$

Очевидно, това е видът във водещ порядък на средното сферично условие (2.12), когато $K > K_c$ и $h_L L^2 = O(1)$; то дава за сферичното поле $\phi_L = (y^*)^2 L^{-2}$ само когато е изпълнено условието (3.21).

Елементарният анализ показва, че в областта

$$\eta^2 > \frac{2(K - K_c)}{-g_s^{(a)}(\pi^2)}, \quad (3.23)$$

имаме $\pi < y^* < \infty$, и профилът на намагнитване се дава с уравнение (3.9) при $y_1 = [(y^*)^2 - \pi^2]^{1/2}$. В другата област,

$$\frac{2(K - K_c)}{-g_s^{(a)}(0)} < \eta^2 < \frac{2(K - K_c)}{-g_s^{(a)}(\pi^2)}, \quad (3.24)$$

ние имаме $0 < y^* < \pi$, и профилът на намагнитване се дава с уравнение (3.9) при $y_1 = i[\pi^2 - (y^*)^2]^{1/2}$. На граничната линия между тези две области, т.е. когато

$$\eta = \pm 16\sqrt{30}(K - K_c)^{1/2}, \quad (3.25)$$

имаме $y^* = \pi$, следователно $y_1 = 0$, и профилът на намагнитване се свежда до

$$m_L^{(a)}(K, h_s, r) = \frac{h_L L^2}{4K} \left(\frac{1}{2} - \frac{r}{L} \right) \left(\frac{1}{2} - \left| \frac{1}{2} - \frac{r}{L} \right| \right). \quad (3.26)$$

Това е същото уравнение, както уравнение (4.8) в [46] за най-стръмния профил на намагнитване в сферичния модел на Бърлин-Кац при периодични гранични условия и стъпаловидно (+-) поле.

От друга страна, ако $K > K_c$, то

$$\eta^2 \leq \frac{2(K - K_c)}{-g_s'^{(a)}(0)}, \quad (3.27)$$

точната горна граница в (3.16) се достига при $y = 0$ (в действителност, поправките от по-висок порядък водят до $y = O(L^{-1})$, виж [46]), така че $y_1 = i\pi$. Това е областта на "замразения" профил на намагнитване, виж уравнение (4.11) в [67],

$$m_L^{(a)}(K, h_s, r) \cong \operatorname{sgn}(h_s) \frac{h_L L^2}{2K\pi^2} [\cos(\pi r/L) + \sin(\pi r/L) - 1]. \quad (3.28)$$

Сега да разгледаме система с $L/2$ на брой слоя в нискотемпературния режим с умерено поле при гранични условия на Дирихле-Дирихле и хомогенно поле. В този случай водещата поправка към плътността на свободната енергия се дава от

$$\beta f_{L/2}^{(a)}(K, h_u) \cong \text{const} + \frac{4}{L^2} \sup_{\bar{y} \geq 0} [(K_c - K)(\bar{y}^2 - \pi^2) - \frac{1}{8}\bar{\eta}^2 g_u^{(a)}(\bar{y}^2)]. \quad (3.29)$$

Тук $\bar{y} = \phi_{L/2}^{1/2} L/2$, въвели сме функцията

$$g_u^{(a)}(z) = \frac{1}{8(z - \pi^2)} [1 - Y(2\sqrt{z - \pi^2})], \quad (3.30)$$

и променливата на подобие за магнитното поле

$$\bar{\eta} = K^{-1/2} h_{L/2} L^2. \quad (3.31)$$

Функцията $g_u^{(a)}(z)$, $z \geq 0$, е свързана с (аналитичното продължение на) дефинираната по-рано функция (3.17) чрез тъждеството $g_u^{(a)}(z) = g_s^{(a)}(4z - 3\pi^2)$. Тя има следните важни свойства, в допълнение към тези, които следват от (3.19), (3.20):

$$\begin{aligned} g_u^{(a)}(z) &> 0, \quad \text{за } z \geq 0, \quad g_u^{(a)}(z) \rightarrow \infty \text{ при } z \rightarrow 0^+, \\ g_u'^{(a)}(z) &< 0, \quad \text{за } z \geq 0, \quad g_u'^{(a)}(z) \rightarrow -\infty \text{ при } z \rightarrow 0^+. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Следователно, точната горна граница в (3.29) се достига винаги при някакво $\bar{y} = \bar{y}^*$, $0 < \bar{y}^* < \infty$, където \bar{y}^* се подчинява на уравнението

$$-\frac{\bar{\eta}^2}{2(2\bar{y}_1)^4} [1 - Y(2\bar{y}_1) + \bar{y}_1 Y'(2\bar{y}_1)] = 2(K_c - K), \quad (3.33)$$

което е водещата асимптотика на средното сферично условие (3.13), когато $K > K_c$ и $h_L L^2 = O(1)$. Отбележете, че ако

$$\bar{\eta}^2 > \frac{8(K - K_c)}{-g_u^{(a)}(3\pi^2/4)}, \quad (3.34)$$

което, поради равенството $g_u^{(a)}(3\pi^2/4) = 4g_s^{(a)}(0)$, е точно същото условие за $\bar{\eta}$ както е (3.21) за η , тогава $0 < y^*(K, \eta) < \infty$ и $\sqrt{3}\pi/2 < \bar{y}^*(K, \bar{\eta}) < \infty$. Освен това, в областта дефинирана в (3.34), $2\bar{y}_1^*$ удовлетворява същото уравнение както y_1^* , сравнете (3.33) и (3.22), стига само $\bar{\eta} = \eta$. Следователно, когато $K > K_c$ и η удовлетворяват неравенството (3.21), тогава при граничните условия на Дирихле-Дирихле положителното (отрицателното) крило на пофил на намагнитване, виж (3.11), за система с L слоеве в стъпаловидно поле с амплитуда $h_L = O(L^{-2})$ е тъждествено на това, виж (3.12), за система с $L/2$ слоеве в положително (отрицателно) хомогенно поле с амплитуда $h_{L/2} = h_L$.

Отбележете, че ако $K > K_c$, но $\bar{\eta}$ лежи в областта допълнителна на тази дефинирана с неравенство (3.34),

$$\bar{\eta}^2 \leq \frac{8(K - K_c)}{-g_u^{(a)}(3\pi^2/4)}, \quad (3.35)$$

тогава $0 < \bar{y}^* < \sqrt{3}\pi/2$ е отново решението на уравнение (3.33), и намагнитването на разцепената система с $L/2$ слоя в хомогенно поле се дава с (3.12) при $\bar{y}_1^* = i[\pi^2 - (\bar{y}^*)^2]^{1/2}$. Ясно е, че в областта (3.35) разцепването не се осъществява, тъй като $\eta = \bar{\eta}$ е в областта (3.27), където $y^* = 0$, следователно $y_1^* = i\pi$, и профилът на намагнитване на сдвоената система с L слоя в стъпаловидно поле (+-) е замразен според уравнение (3.28).

3.2. Разцепване на подсистеми с еднакво намагнитване

Ние вече показвахме, че в обемната граница профилът на намагнитване близо до границата на Дирихле, виж (3.6), е същият за сдвоената и

разцепената система. Остава да сравним профила близо до средата на система с L слоя в хомогенно поле и при гранични условия на Дирихле-Дирихле, виж (3.3), с профила близо до границата на Нойман на система с $L/2$ слоя в хомогенно поле и при гранични условия на Дирихле-Нойман:

$$m_{L/2}^{(c)}(K, h_u, r) = \frac{h_{L/2}}{8K \sinh^2(z/2)} \left\{ 1 - \frac{\cosh\{(L+1)/2 - r]z\}}{\cosh[(L+1)z/2]} \right\}. \quad (3.36)$$

Отбележете, че променливата z тук е дефинирана с уравнение (2.18), в което L е заместено с $L/2$. Очевидно за $r = L/2 - j$ и всяко фиксирано $j = 0, 1, \dots$, ние получаваме в обемната граница,

$$\lim_{L \rightarrow \infty} m_L^{(a)}(K, h_u, L/2 - j) = \lim_{L \rightarrow \infty} m_{L/2}^{(c)}(K, h_u, L/2 - j) = m_\infty(K, h). \quad (3.37)$$

Нетривиален профил на намагнитване се появява в машаба на размера на системата при критичния режим на краиноразмерно подобие, $v_1 = O(1)$ и $v_2 = O(1)$. В случая на система с $L/2$ слоя при гранични условия на Дирихле-Нойман, уравнение (2.21) след заместване на L с $L/2$ дава $z \cong 2L^{-1}\tilde{y}_1$ и точното уравнение (3.36) се свежда до

$$m_{L/2}^{(c)}(K, h_u, r) \cong \frac{h_{L/2}L^2}{2K(2\tilde{y}_1)^2} \left\{ 1 - \frac{\cosh\left[\left(\frac{1}{2} - r/L\right)2\tilde{y}_1\right]}{\cosh(\tilde{y}_1)} \right\}. \quad (3.38)$$

В горния израз \tilde{y}_1 удовлетворява условието, която следва от (2.25) при заместването на L с $L/2$:

$$\frac{1}{2\pi} \ln [\cosh(\tilde{y}_1)] - \frac{h_{L/2}^2 L^5}{2K(2\tilde{y}_1)^4} [1 - Y(4\tilde{y}_1) + 2\tilde{y}_1 Y'(4\tilde{y}_1)] = 2(K_{c,L/2}^{(c)} - K)L. \quad (3.39)$$

Очвидно профилът на намагнитване в сдвоената система, (3.10), и в разцепената система, (3.38), би бил точно същия, ако y_1 беше равно на $2\tilde{y}_1$ при подходящо избрани температурна и полева променливи. Обаче в този случай отново спин-спиновото взаимодействие не се преобразува по подходящ начин,

$$\ln [\cosh(\tilde{y}_1)] \neq \frac{1}{2} \ln \left[\frac{\sinh(2\tilde{y}_1)}{2\tilde{y}_1} \right], \quad (3.40)$$

и решението $y_1 = Z(v_1, v_2)$ на уравнение (2.13), разгледано като функция на променливите (2.14), се различава от решението за $2\tilde{y}_1 = \tilde{Z}(\tilde{v}_1, \tilde{v}_2)$ на

уравнението (3.39), изразено чрез променливите

$$\tilde{v}_1 = (K_{c,L/2}^{(c)} - K)L, \quad \tilde{v}_2 = K^{-1/2}h_{L/2}L^{5/2}. \quad (3.41)$$

Ние отново отбелязваме, че неравенство (3.40) се превръща в асимптотично равенство от гледна точка на водещия порядък във високотемпературната обемна граница $K < K_c$, $L \rightarrow \infty$, когато и двете $y_1, \tilde{y}_1 \rightarrow \infty$. Тогава ние получаваме, че $y_1 \simeq 2\tilde{y}_1$, което означава разцепване във водещия порядък на профила на намагнитване, сравнете (3.10) и (3.38).

Сега преминаваме към изследване на ефектите на разцепване в нискотемпературния режим с умерено поле, когато $K > K_c$ е фиксирано, $h_L L^2 = O(1)$. За сдвоената система с L слоя при гранични условия на Дирихле-Дирихле и хомогенно поле, водещата поправка към плътността на свободната енергия има вида:

$$\beta f_L^{(a)}(K, h_u) \cong \text{const} + \frac{1}{L^2} \sup_{y \geq 0} \left[(K_c - K)(y^2 - \pi^2) - 2\eta^2 g_u^{(a)}(y^2) \right], \quad (3.42)$$

където функцията $g_u^{(a)}(z)$, $z \geq 0$, е дефинирана в (3.30). Поради свойствата (3.32), точната горна граница в (3.42) се достига винаги при някакво $y = y^*$, $0 < y^* < \infty$, така че $y_1^* = [(y^*)^2 - \pi^2]^{1/2}$ се подчинява на уравнението

$$-\frac{\eta^2}{2y_1^4} [1 - Y(2y_1) + y_1 Y'(2y_1)] = 2(K_c - K), \quad (3.43)$$

което е видът във водещ порядък на средното сферично условие (2.13), когато $K > K_c$ и $h_L L^2 = O(1)$. Следователно профилът на намагнитване в сдвоената система се дава с уравнението (3.10) при $y_1 = [(y^*)^2 - \pi^2]^{1/2}$.

Сега да разгледаме нискотемпературния режим с умерено поле за система с $L/2$ слоя при гранични условия на Дирихле-Нойман и хомогенно поле с амплитуда $h_{L/2} = O(L^{-2})$. В този случай водещата

поправка към плътността на свободната енергия има вида

$$\beta f_{L/2}^{(c)}(K, h_u) \cong \text{const} + \frac{4}{L^2} \sup_{y \geq 0} \left[(K_c - K)(y^2 - \pi^2/4) - \frac{1}{8} \bar{\eta}^2 g_u^{(c)}(y^2) \right], \quad (3.44)$$

където

$$g_u^{(c)}(z) = \frac{1}{8(z - \pi^2/4)} [1 - Y(4\sqrt{z - \pi^2/4})]. \quad (3.45)$$

Тъй като функцията дефинирана в (3.45) е свързана с $g_u^{(a)}(z)$ чрез тъждеството

$$g_u^{(c)}(z) = 4g_u^{(a)}(4z), \quad (3.46)$$

то тя има общите свойства (3.32). Следователно, точната горна граница в (3.44) винаги се достига при някакво $y = \tilde{y}^*$, $0 < \tilde{y}^* < \infty$, така че $\tilde{y}_1^* = [(\tilde{y}^*)^2 - \pi^2/4]^{1/2}$ се подчинява на уравнението

$$-\frac{\bar{\eta}^2}{2(2\tilde{y}_1)^4} [1 - Y(4\tilde{y}_1) + 2\tilde{y}_1 Y'(4\tilde{y}_1)] = 2(K_c - K), \quad (3.47)$$

което е видът във водещ порядък на уравнение (3.39), когато $K > K_c$ и $h_L L^2 = O(1)$. Чрез сравняване на това уравнение с уравнение (3.43) при $\bar{\eta} = \eta$ ние заключаваме, че $2\tilde{y}_1^*(K, \eta) = y_1^*(K, \eta)$, което означава тъждественост на профилите на намагнитване за сдвоената система, виж (3.10) при $y_1 = y_1^*$, и за разцепената система, виж (3.38) при $\tilde{y}_1 = \tilde{y}_1^*$. Освен това, поради равенството $g_u^{(c)}(\pi^2/4) = 16g_u^{(a)}(\pi^2)$, областта, където $y^* < \pi$ и $\tilde{y}^* < \pi/2$ е разделена от областта, където $y^* > \pi$ и $\tilde{y}^* > \pi/2$, с линията ($\eta = \bar{\eta}$)

$$\eta = \pm 4\sqrt{30}(K - K_c)^{1/2}. \quad (3.48)$$

На тази линия имаме $y_1^* = \tilde{y}_1^* = 0$, и профилите на намагнитване за сдвоената и разцепената система се свеждат до

$$m_L^{(a)}(K, h_u, r) = m_{L/2}^{(c)}(K, h_u, r) = \frac{h_L L^2}{4K} \frac{r}{L} \left(1 - \frac{r}{L} \right). \quad (3.49)$$

При заместването $L \rightarrow L/2$ в дясната страна на горното уравнение ние получаваме отново положителното крило на профила (3.26) в стъпаловидно (+-) поле.

4. Средноквадратична стойност на спина в слой

За да демонстрираме липсата на статистическа еквивалентност на сдвоената и разцепената система е достатъчно да разгледаме обемната граница на средноквадратичната стойностна спина в слой. Започваме с общия израз за последната величина в система с краен брой L слоеве,

$$d_L^{(\tau)}(K, h, r_1) := \langle \sigma^2(\vec{r}) \rangle^{(\tau)} = \frac{1}{2K\pi^2} \int_0^\pi d\theta_1 \int_0^\pi d\theta_2 \times \sum_{k=1}^L \frac{|u_L^{(\tau)}(r_1, k)|^2}{\phi + 2 \sum_{i=1}^2 (1 - \cos \theta_i) + 2[\cos \varphi_L^{(\tau)}(1) - \cos \varphi_L^{(\tau)}(k)] + [m_L^{(\tau)}(K, h, r_1)]^2}. \quad (4.1)$$

Чрез заместване на собствените вектори за система с гранични условия на Дирихле-Дирихле (виж уравнение (2.10) в втора глава) в (4.1) и преминаване към обемната граница, ние намираме, че средноквадратичната стойност на спиновете в средните слоеве на системата в стъпаловидно (+-) поле,

$$\lim_{L \rightarrow \infty} d_L^{(a)}(K, h_s, L/2) = \frac{1}{2K} W_3(\phi) + [m_\infty(K, h)]^2 \left(\frac{\phi}{\phi + 4} \right), \quad (4.2)$$

е различна от тази близо до границата на Дирихле на система в хомогенно поле,

$$\lim_{L \rightarrow \infty} d_L^{(a)}(K, h_u, 1) = \frac{1}{2K} G_3(\phi, 1) + [m_\infty(K, h)]^2 \phi \left(\sqrt{1 + \phi/4} - \sqrt{\phi/4} \right)^2. \quad (4.3)$$

Тук функцията

$$G_3(\phi, 1) = \frac{2}{\pi^2} \int_0^\pi d\theta_1 \int_0^\pi d\theta_2 \left\{ \phi + 2 + 2 \sum_{i=1}^2 (1 - \cos \theta_i) + \left[\phi + 2 \sum_{i=1}^2 (1 - \cos \theta_i) \right]^{1/2} \left[\phi + 4 + 2 \sum_{i=1}^2 (1 - \cos \theta_i) \right]^{1/2} \right\}^{-1} \quad (4.4)$$

е въведена в [48], и са взети предвид уравнения (3.5), (3.7) за съответното намагнитване. В частност, в критичната точка ние получаваме чрез числено интегриране

$$\lim_{L \rightarrow \infty} d_L^{(a)}(K_c, 0, 1) = G_3(0, 1)/2K_c = 0.8303\dots, \quad (4.5)$$

което означава, че спиновете близо до границата на Дирихле са покъси от тези в обема (които са с единична дължина).

По подобен начин, чрез заместване на собствените вектори за система с гранични условия на Дирихле-Нойман (виж уравнение (2.12) в втора глава) в (4.1) и преминаване към обемната граница, ние намираме, че средноквадратичната стойност на спиновете на границата на Нойман на система в хомогенно поле е

$$\lim_{L \rightarrow \infty} d_L^{(c)}(K, h_u, L) = \frac{1}{2K} G_3(\phi, 0) + [m_\infty(K, h)]^2, \quad (4.6)$$

където [48],

$$G_3(\phi, 0) = 2W_3(\phi) - \frac{1}{6} + \frac{1}{6}\phi W_3(\phi). \quad (4.7)$$

От горните уравнения следва, че в критичната точка средноквадратичната дължина на спиновете на границата на Нойман е по-голяма от тази на спиновете в обема,

$$\lim_{L \rightarrow \infty} d_L^{(c)}(K_c, 0, L) = 2 - (12K_c)^{-1} = 1.3405\dots \quad (4.8)$$

Ясно е, че няма разцепване на профила на средноквадратичната стойност на спиновете.

5. Дискусия

В настоящата глава бяха разгледани ефектите на разцепване във феромагнитния среден сферичен модел с геометрия на слой с крайна дебелина L . Ние разглеждахме експлицитно две ситуации. Първо, разцепване на система с гранични условия на Дирихле-Дирихле в стъпаловидно (+-) поле на две еквивалентни подсистеми, поставени в хомогенни полета с противоположни знаци. Границите условия на Дирихле бяха избрани, за да заместят липсващия контакт с подсистемата с противоположно намагнитване. Второ, разцепване на система с гранични условия на Дирихле-Дирихле в хомогенно поле на две еквивалентни подсистеми, поставени в хомогенни полета с

един и същи знак. В този случай граничните условия на Нойман бяха избрани, за да заместят липсващия контакт с подсистемата със същото намагнитване. Ефектите на разцепване на профила на намагнитване бяха разгледани при три различни температурни и полеви режима: (i) във високотемпературната обемна граница, (ii) в критичния режим на крайноразмерно подобие и (iii) в нискотемпературния режим с умерено поле. Нашият анализ включва изследване на решенията за средното сферично условие за сдвоената система и за разцепената система във всеки от тези режими.

Точните явни изрази за намагнитването на слоя при различните гранични условия и разглежданите тук полета, са дадени с уравненията (3.2), (3.3) и (3.4).

В случая на разцепване на две подсистеми с противоположно намагнитване ние получихме следните резултати. В обемната граница профилът на намагнитване не се разцепва точно, виж уравнения (3.5) и (3.6), поради липсата на буферен слой с нулево намагнитване между двете подсистеми. Разцепването става само асимптотично в мащаба на голяма обемна корелационна дължина близо до критичната точка. В критичния режим на крайноразмерно подобие намагнитването клони към нула като $L^{-1/2}$, когато $L \rightarrow \infty$, и ние разглеждаме профила на спиновата променлива умножена по $L^{1/2}$, а не самото намагнитване. Намерено е, че в общия случай профилът на сдвоената система, виж (3.11), се различава от профила на разцепената система, виж (3.12), поради факта, че съответните средни сферични условия съдържат несъвпадащи стойности на параметрите, $y_1 \neq 2\bar{y}_1$, като функция на температурната и полевата променливи. Разцепването се възстановява асимптотично само при напускане на безкрайно близката околност (при $L \rightarrow \infty$)

на критичната точка. В нискотемпературния режим с умерено поле, когато $K > K_c$ е фиксирано, $h_L = O(L^{-2})$, профилът на намагнитване е краен, неклонящ към нула и точно се разцепва при относително високи полета $h_L = h_{L/2}$ удовлетворяващи неравенството (3.21), или, еквивалентното му (3.34). В тази област съществува специална линия, дадена с уравнение (3.25), на която намагнитването има приста алгебрична зависимост от нормираната координата на слоя, виж (3.26). Разцепването изчезва при относително малки полета, удовлетворяващи неравенството (3.27). Това може да се обясни с факта, че в сдвоената система основното състояние няма принос нито в намагнитването, нито в члена на магнитното поле в свободната енергия, поради антисиметрията на стъпаловидното поле и симетрията на собствената функция на основното състояние. В резултат на това се появява областта на замразения профил на намагнитване (3.28). От друга страна, за разцепените подсистеми, всяка от които е в хомогенно поле, такава област не съществува.

В случая на разцепването на две подсистеми с еднакво намагнитване отбелнязваме следните резултати. В обемната граница намагнитването на всяко крайно разстояние от границата на Нойман е равно на обемното намагнитване, както и намагнитването близо до средата на система с гранични условия на Дирихле-Дирихле, виж уравнение (3.37). Очевидно в тази граница профилите, съществуващи на крайни разстояния от границите на Дирихле, не зависят от граничните условия на срещуположната страна. В критичния режим на крайоразмерно подобие профилът за сдвоената система, виж (3.10), отново се различава от профила на разцепената система, виж (3.38), поради факта, че съответните средни сферични условия

съдържат несъвпадащи стойности на параметрите, $y_1 \neq 2\tilde{y}_1$, като функция на температурната и полевата променливи. Както в предишния случай, разцепването се възстановява асимптотично само при напускане на безкрайно близката околност на критичната точка. При нискотемпературния режим с умерено поле, когато $K > K_c$ е фиксирано, $h_L = O(L^{-2})$, профилът на намагнитване е краен, неклонящ към нула и винаги точно се разцепва. По специалната линия, дадена с уравнение (3.48), се появява проста алгебрична зависимост на намагнитването от координатата на слоя, виж (3.49).

В заключение, **хипотезата за разцепване не се потвърждава**, тъй като средноквадратичната дължина на спиновете на границата на Дирихле (Нойман) е различна от тази в средните слоеве на системата в стъпаловидно (хомогенно) поле. Съответните стойности в обемната критична точка се дават с уравнения (4.5) и (4.8).

Глава 5

Нови ефекти при профила на намагнитване в стъпаловидно поле

1. Увод

Настоящата глава е мотивирана от общия интерес към свойствата на междуфазовата граница в различните спинови модели. Разделителните повърхности между областите с противоположна ориентация на средния спин могат да бъдат индуцирани чрез налагане на нехомогенни полета и/или подходящи гранични условия върху противоположните граници на система с геометрия на слой с крайна дебелина L . В сферичния модел, въведен от Бърлин и Кац, Ейбрахам и Робърт [66] са показвали, че междуфазовата граница е дифузна (т.е. нетривиален профил на намагнитване съществува само в макроскопичния мащаб L) при всички температури. Междуфазовата граница е създадена с помощта на обемно стъпаловидно (+-) поле, което си променя знака при централния слой в система с гранични условия на Дирихле- Дирихле в крайното измерение и периодична във всички останали $d-1$ измерения. Ангелеску и колектив [68] са доказали, че междуфазовата граница е дифузна и в случая на обобщения сферичен модел, в който глобалното сферично условие е заменено с набор от средни сферични условия за всеки слой. Моделът е разгледан при опростяващото допускане за взаимодействие от типа на Кац-Хелфанд [69] в слоя и профилът е индуциран чрез

противоположно насочени гранични полета, чиято абсолютна стойност се устремява към безкрайност в края на пресмятанията.

Случаят на нехомогенно поле, което клони към нула в термодинамичната граница при фиксирана температура, е разгледан подробно от Патрик [46], [63]. В [46] постановката на Ейбрахам и Робърт [66] е обобщена за амплитуди h_L на стъпаловидното поле, които клонят към нула като обратна степен на L , когато $L \rightarrow \infty$. Открита е нова, индуцирана от полето критична точка в нискотемпературния режим с умерено поле, когато $h_L = O(L^{-2})$. В новата критична точка водещата асимптотика на свободната енергия е аналитична, а следващата поправка има сингулярност. Профилът на намагнитване е изследван в различни мащаби на дължина и е установено, че при подходящ режим под новата критична температура съществува нетривиален в мащаба на L , замразен (температурно независим) профил. Статията [63] предлага систематичен подход за изследване влиянието на повърхнинните полета върху различни статистически свойства на сферичния модел.

Една от целите на настоящото изследване е да установи дали новата полево-индукрирана критична точка, намерена от Патрик [46], [63], се запазва при по-общи условия: (i) различни гранични условия на Нойман-Дирихле на срещуположните граници на слоя, и (ii) пертурбация във вид на стъпаловидно (+-) външно поле, което променя знака си в общо положение Lx ($0 \leq x \leq 1$) спрямо границата на Нойман. В нискотемпературния режим с умерено поле ние установяваме, че полево-индукрираната критична точка \tilde{T}_c , намерена от Патрик [46] в случая на периодични гранични условия и стъпаловидно поле с $x = 1/2$, се появява при $x = 1/3$. Ние намираме, че при подходящ полеви режим

под \tilde{T}_c профилът на намагнитване има както замразена компонента, подобно на случая [46], така и температурно зависим член, който отсъства в случая на периодични гранични условия. Освен това ние намираме някои нови ефекти, които се появяват в критичния режим на крайноразмерно подобие: оказва се, че съществуват две специални стойности на x , означени с x_1 и x_2 , които зависят от премащабираните температурна и полева променливи и имат свойството намагнитването да променя знака си, само когато $x_1 < x < x_2$. Намагнитването е навсякъде отрицателно, когато $0 \leq x < x_1$ и навсякъде положително, когато $x_2 < x \leq 1$.

Ние ограничаваме нашето разглеждане до изследване на профила на намагнитване в средния сферичен модел с геометрия на безкраен слой, както в глави 2 и 4. Тук ние изследваме този модел при гранични условия на Нойман-Дирихле и в присъствието на нехомогено външно поле, което зависи само от първата координатата и има стъпаловидната форма (L е четно число, Lx е цяло число, и $0 \leq x \leq 1$)

$$h(\vec{r}, x) = h_L \operatorname{sgn} \left(Lx + \frac{1}{2} - r_1 \right). \quad (1.1)$$

Средното сферично условие (виж уравнение (1.8) в глава 4) може да се запише във вида

$$W_{L,3}^{(c)}(\phi) - \frac{\partial}{\partial \phi} P_L^{(c)}(K, h_L, x; \phi) = 2K, \quad (1.2)$$

Тук спин-спиновият член $W_{L,3}^{(c)}(\phi)$ се дава с

$$W_{L,3}^{(c)}(\phi) := \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L W_2[\phi + 2 \cos \varphi_L^{(c)}(1) - 2 \cos \varphi_L^{(c)}(k)], \quad (1.3)$$

и $P_L^{(c)}(K, h_L, x; \phi)$ е полевият член, който има вида

$$\begin{aligned} P_L^{(c)}(K, h_L, x; \phi) &= \frac{h_L^2}{2KL(2L+1)} \\ &\times \sum_{k=1}^L \frac{\{2 \cos [((1-x)L + \frac{1}{2})\varphi_L^{(c)}(k)] - \cos [\varphi_L^{(c)}(k)/2]\}^2}{\{1 - \cos [\varphi_L^{(c)}(k)]\} \{\phi/2 + \cos[\varphi_L^{(c)}(1)] - \cos[\varphi_L^{(c)}(k)]\}}. \end{aligned} \quad (1.4)$$

2. Средно сферично условие

Тук ние изследваме асимптотичното поведение на решението $\phi = \phi_L$ на уравнение (1.2) в случая на стъпаловидно поле (1.1) с произволна стойност на параметъра $x \in [0, 1]$. Полевият член (1.4) е оценен точно с помощта на техниката на "сумиране по контура", виж [46]. Крайните аналитични изрази зависят от това дали $\phi/2 + \cos \varphi_L^{(c)}(1)$ е по-голямо или по-малко от единица. Ние даваме извода на резултатите, за случая $\phi/2 + \cos \varphi_L^{(c)}(1) > 1$; в противоположния случай резултатите се получават чрез аналитично продължение, виж глава 2.

При приемайки $\phi/2 + \cos \varphi_L^{(c)}(1) > 1$, ние полагаме

$$\phi/2 + \cos \varphi_L^{(c)}(1) = \cosh z. \quad (2.1)$$

Извършвайки сумирането в полевия член, ние получаваме

$$P_L^{(c)}(K, h_L, x; \phi) = \frac{h_L^2}{8K \sinh^2(z/2)} \left\{ \frac{2(L+1)}{2L+1} + \frac{1}{2L(2L+1) \cosh^2(z/2)} \right. \\ \left. - \frac{3 \sinh[(L+\frac{1}{2})z] - 2 \sinh[(1-2x)Lz + \frac{1}{2}z] - 4 \cosh(z/2) \sinh(xLz)}{L \sinh(z) \cosh[(L+\frac{1}{2})z]} \right\} \\ - \frac{h_L^2}{8K} \left\{ \frac{\tanh[(L+\frac{1}{2})z] - (2L+1)^{-1} \tanh(z/2)}{L \sinh(z)} \right\}. \quad (2.2)$$

Отбележете, че в обемната граница, при $L \rightarrow \infty$, $h_L = h$ и $\phi > 0$ фиксирано, горният израз се свежда до

$$P_\infty^{(c)}(K, h_L, x; \phi) = \frac{h^2}{2K\phi}, \quad (2.3)$$

независимо от $x \in [0, 1]$. Следователно обемното средно сферично условие е

$$W_3(\phi) + \frac{h^2}{2K\phi^2} = 2K \quad (2.4)$$

където $W_3(\phi)$ е тримерният интеграл на Уотсън.

Двата интересни режима, критичният режим на крайноразмерно подобие и нискотемпературният режим с умерено поле, изискват по-детайлно отделно разглеждане.

2.1. Критичен режим на крайноразмерно подобие

В критичния режим на крайноразмерно подобие, когато

$$\phi \rightarrow 0, \quad L \rightarrow \infty, \quad \text{че} \quad y := \phi^{1/2}L = O(1), \quad (2.5)$$

уравнение (2.1) дава за фиксирано $y > \pi/2$

$$zL \cong (y^2 - \pi^2/4)^{1/2} \equiv y_1. \quad (2.6)$$

Тогава асимптотичното поведение на израза (2.2) се дава с

$$P_L^{(c)}(K, h_L, x; \phi) \cong \frac{h_L^2 L^2}{2K y_1^2} [1 - Y(x, y_1)], \quad (2.7)$$

където

$$Y(x, y_1) = \frac{3 \sinh y_1 - 4 \sinh(xy_1) - 2 \sinh[(1-2x)y_1]}{y_1 \cosh y_1}. \quad (2.8)$$

Следователно, полевият член в средното сферично условие има следната водеща асимптотика

$$-\frac{\partial}{\partial \phi} P_L^{(c)}(K, h_L, x; \phi) \cong \frac{h_L^2 L^4}{2K y_1^4} \left[1 - Y(x, y_1) + \frac{1}{2} y_1 Y'(x, y_1) \right], \quad (2.9)$$

където $Y'(x, y_1) = dY(x, y_1)/dy_1$.

Членът на взаимодействието в средното сферично условие е получен в Глава 2 и има вида:

$$W_{L,3}^{(c)}(\phi) = 2K_{c,L}^{(c)} - \frac{1}{4\pi L} \ln [\cosh y_1] + O(L^{-2}), \quad (2.10)$$

където $K_{c,L}^{(c)}$ е отмествената критична константа на взаимодействие.

Като комбинираме (2.9) и (2.10) и пренебрегнем поправките $O(L^{-2})$, уравнение (1.2) приема следния вид на крайноразмерно подобие

$$\frac{1}{4\pi} \ln [\cosh y_1] - \frac{h_L^2 L^5}{2K y_1^4} \left[1 - Y(x, y_1) + \frac{1}{2} y_1 Y'(x, y_1) \right] = 2(K_{c,L}^{(c)} - K)L. \quad (2.11)$$

Изразено чрез променливите на подобие

$$v_1 = (K_{c,L}^{(c)} - K)L, \quad v_2 = K^{-1/2} h_L L^{5/2}, \quad (2.12)$$

решението $y_1 = y_1(x, v_1, v_2)$ на средното сферично условие (2.11) в околност на критичната точка, дефинирана с $v_1 = O(1)$ и $v_2 = O(1)$, дава следната асимптотична форма на сферичното поле,

$$\phi_L \simeq L^{-2} X^{(c)}(x, v_1, v_2). \quad (2.13)$$

Отбележете, че в обемната граница уравнение (2.11) дава

$$\frac{\phi^{1/2}}{4\pi} - \frac{h^2}{2K\phi^2} = 2(K_c - K), \quad (2.14)$$

което е водещата асимптотика при малки стойности на ϕ на обемното сферично условие (2.4).

2.2. Нискотемпературен режим с умерено поле

Тук ние изследваме средното сферично условие в така наречения нискотемпературен режим с умерено поле, когато $K > K_c$ и $h_L L^2 = O(1)$ (виж [46] и [49]). В този случай водещата поправка към плътността на свободната енергия е:

$$\beta f_L^{(c)}(K, h_L, x) \cong \text{const} + \frac{1}{L^2} \sup_{z \geq 0} \left[(K_c - K)(z - \pi^2/4) - \frac{1}{2}\eta^2 g^{(c)}(x, z) \right]. \quad (2.15)$$

Тук ние сме въвели функцията

$$g^{(c)}(x, z) = \frac{1}{2(z - \pi^2/4)} [1 - Y(x, \sqrt{z - \pi^2/4})], \quad (2.16)$$

и променливата на подобие за магнитното поле

$$\eta = K^{-1/2} h_L L^2. \quad (2.17)$$

Отбележете, че за всички $x \in [0, 1]$, $g^{(c)}(x, z)$ е положителна, непрекъсната функция на $z > 0$, която монотонно намалява с $z \geq 0$. Споменаваме, че тя има отстранима сингуларност при $z = \pi^2/4$, където

$$\begin{aligned} g^{(c)}(x, \pi^2/4) &= \frac{1}{6}[1 - 6x(1-x)^2] > 0, \\ g'^{(c)}(x, \pi^2/4) &= -\frac{1}{15} + \frac{1}{12}x(1-x)^2[5 + 2x - 3x^2] < 0. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Когато $z \rightarrow \infty$, лесно се вижда, че

$$g^{(c)}(x, z) \rightarrow 0 \text{ и } g'^{(c)}(x, z) \rightarrow 0 \text{ при } z \rightarrow \infty, \quad (2.19)$$

където $g'^{(c)}(x, z) = dg^{(c)}(x, z)/dz$. От друга страна, когато $z \rightarrow 0$ и $x \neq 1/3$,

$$g^{(c)}(x, z) \rightarrow \infty, \quad g'^{(c)}(x, z) \rightarrow -\infty \quad \text{при } z \rightarrow 0. \quad (2.20)$$

Следователно, ако $K > K_c$ и $x \neq 1/3$, точната горна граница в (2.15) се достига при някаква крайна стойност $z = z^*(K, \eta; x)$, която е единственото решение на уравнението

$$-\eta^2 g'^{(c)}(x, z) = 2(K - K_c). \quad (2.21)$$

Следователно, за сферичното поле получаваме $\phi_L = z^* L^{-2}$.

В специалния случай $x = 1/3$, и функцията $g^{(c)}(1/3, 0)$ и нейната производна са крайни при $z = 0$:

$$g^{(c)}(1/3, 0) = \frac{2}{\pi^2} \left(\frac{2\sqrt{3}}{\pi} - 1 \right) \text{ и } g'^{(c)}(1/3, 0) = -\frac{40}{3\pi^4} \left(1 - \frac{9\sqrt{3}}{5\pi} \right) \quad (2.22)$$

Следователно, когато

$$\eta^2 \leq \frac{2(K - K_c)}{-g'^{(c)}(1/3, 0)}, \quad (2.23)$$

точната горна граница в (2.15) се достига при $z = 0$, което означава $\phi = 0$. В действителност, ако вземем предвид поправките от по-висок порядък по L^{-1} , ще получим $\phi_L = O(L^{-3})$. Наистина, нека допуснем, че $\phi = O(L^{-3})$ и развием в ред решението на уравнение (2.1) при достатъчно големи L , когато $\phi/2 + \cos \varphi_L^{(c)}(1) < 1$, до членове от порядък $O(L^{-2})$:

$$z = i \left[\frac{\pi}{2L} - \frac{\phi L}{\pi} - \frac{\pi}{4L^2} + O(L^{-3}) \right]. \quad (2.24)$$

Тогава, чрез развитие в ред на точния израз (2.2) за полевия член при $x = 1/3$, получаваме

$$\begin{aligned} P_L^{(c)}(K, h_L, 1/3; \phi) &= \frac{h_L^2 L^2}{K} \left\{ \left(\frac{2}{\pi^2} + \frac{3}{\pi^2 L} \right) \left(\frac{2\sqrt{3}}{\pi} - 1 \right) + \frac{1}{12\phi L^4} \right. \\ &\quad \left. - \frac{40}{3\pi^4} \left(1 - \frac{9\sqrt{3}}{5\pi} \right) \phi L^2 + O(L^{-2}) \right\}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Следователно решението $\phi = \phi_L$ на средното сферично условие (1.2) приема водещия асимптотичен вид

$$\phi_L = -\frac{|\eta|}{2\sqrt{3} [2(K - K_c) + \eta^2 g'^{(c)}(1/3, 0)]^{1/2}} L^{-3}. \quad (2.26)$$

В допълнителната област

$$\eta^2 > \frac{2(K - K_c)}{-g'^{(c)}(1/3, 0)}, \quad (2.27)$$

точната горна граница в (2.15) се достига отново при някаква крайна стойност $z = z^*(K, \eta; 1/3)$, която се подчинява на уравнение (2.21) при $x = 1/3$. Това означава, че отново $\phi_L = z^* L^{-2}$.

3. Анализ на профила на намагнитване

Средният сферичен модел ни позволява да получим точните крайноразмерни изрази за профила на намагнитване. Ние тръгваме от общия израз (виж уравнение (3.1) в глава 4)

$$\langle \sigma(\vec{r}) \rangle = K^{-1} \sum_{\vec{k} \in \Lambda} U_{\Lambda}^{(c)}(\vec{r}, \vec{k}) [\phi + \omega_{\Lambda}^{(c)}(\vec{k})]^{-1} \hat{h}_{\Lambda}^{(c)}(\vec{k}). \quad (3.1)$$

В разглеждания случай на поле, зададено чрез (1.1), дясната страна на (3.1) зависи само от координатата r_1 . Чрез точно оценяване на средната стойност на спина получаваме резултата

$$\begin{aligned} \langle \sigma(\vec{r}) \rangle &= \frac{h_L}{2K(2L+1)} \\ &\times \sum_{k=1}^L \frac{\sin[(L+1-r_1)\varphi_L^{(c)}(k)] \{2\cos[((1-x)L+\frac{1}{2})\varphi_L^{(c)}(k)] - \cos[\varphi_L^{(c)}(k)/2]\}}{\sin[\varphi_L^{(c)}(k)/2] \{\phi/2 + \cos[\varphi_L^{(c)}(1)] - \cos[\varphi_L^{(c)}(k)]\}} \end{aligned} \quad (3.2)$$

Както в предишния раздел, крайният аналитичен израз зависи от стойността на $\phi/2 + \cos[\varphi_L^{(c)}(1)]$ сравнена с единица. Полагайки $\phi/2 + \cos[\varphi_L^{(c)}(1)] = \cosh(z) > 1$, сумирането в израза (3.2) дава:

$$\begin{aligned} \langle \sigma(\vec{r}) \rangle &= \frac{h_L \operatorname{sgn}(h)}{8K \sinh^2(z/2)} \left\{ 1 - \frac{\cosh[L + \frac{1}{2} - |r_1 - \frac{1}{2} - xL|]z}{\cosh(z/2) \cosh[(L + \frac{1}{2})z]} \right. \\ &- \left. \operatorname{sgn}(h) \frac{\cosh[(r_1 - (1-x)L - 1)z] - \cosh(z/2) \cosh[(r_1 - \frac{1}{2})z]}{\cosh(z/2) \cosh[(L + \frac{1}{2})z]} \right\}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Първо ще проверим, дали профилът на намагнитване се подчинява на някаква обобщена версия на крайноразмерното подобие, която се очаква да включва допълнителна зависимост от координатата r_1 чрез отношението $\rho = r_1/L$, $0 \leq \rho \leq 1$.

3.1. Критичен режим на крайноразмерно подобие

Чрез полагането $z = (y^2 - \pi^2/4)^{1/2}L^{-1} \equiv y_1 L^{-1}$ в (3.3), точният израз за премащабирания профил на намагнитване,

$$m_L(K, h_L, x; \rho) = \langle \sigma(\rho L, r_2, r_3) \rangle, \quad (3.4)$$

се опростява до

$$\begin{aligned} m_L(K, h_L, x; \rho) \cong & \operatorname{sgn}(h) \frac{h_L L^2}{2K y_1^2} \left\{ 1 - \frac{\cosh[(1 - |\rho - x|)y_1]}{\cosh(y_1)} \right. \\ & \left. - \operatorname{sgn}(h) \frac{\cosh[(x - 1 + \rho)y_1] - \cosh(\rho y_1)}{\cosh(y_1)} \right\}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

От уравнение (3.5) получаваме за $0 \leq \rho \leq x$

$$m_L(K, h_L, x; \rho) \cong \frac{h_L L^2}{2K y_1^2} \left\{ 1 - \left[\frac{2 \cosh[(1 - x)y_1] - 1}{\cosh(y_1)} \right] \cosh(\rho y_1) \right\}. \quad (3.6)$$

От горния израз е ясно, че в интервала $\rho \in (0, x)$, намагнитването става равно на нула в точката $\rho = \rho_0(x, y_1)$,

$$\rho_0(x, y_1) = \frac{1}{y_1} \cosh^{-1} \left[\frac{\cosh y_1}{2 \cosh[(1 - x)y_1] - 1} \right], \quad (3.7)$$

тогава и само тогава, когато $x_1(y_1) \leq x \leq 1/3$, където

$$x_1(y_1) = 1 - y_1^{-1} \cosh^{-1} \left[\frac{1}{2} (\cosh y_1 + 1) \right]. \quad (3.8)$$

Когато $0 \leq x < x_1(y_1)$, намагнитването е отрицателно навсякъде.

За $x \leq \rho \leq 1$ уравнението (3.5) може да се запише във вида

$$\begin{aligned} m_L(K, h_L, x; \rho) \cong & \frac{h_L L^2}{2K y_1^2} \sinh[(1 - \rho)y_1] \times \\ & \left\{ \frac{2 \sinh(xy_1) - \sinh y_1}{\cosh y_1} + \tanh[\frac{1}{2}(1 - \rho)y_1] \right\}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Ясно е, че в разглеждания интервал намагнитването е равно на нула не само на границата на Дирихле $\rho = 1$, но и във вътрешната точка $\rho = \rho_0(x, y)$ дадена с

$$\rho_0(x, y_1) = 1 - \frac{2}{y_1} \tanh^{-1} \left[\tanh y_1 - \frac{2 \sinh(xy_1)}{\cosh y_1} \right], \quad (3.10)$$

тогава и само тогава, когато $1/3 \leq x \leq x_2(y_1)$, където

$$x_2(y_1) = \frac{1}{y_1} \sinh^{-1} \left(\frac{1}{2} \sinh y_1 \right). \quad (3.11)$$

При тези условия ние можем да препишем уравнение (3.9) в следния ясен вид

$$m_L(K, h_L, x; \rho) \cong \frac{h_L L^2}{K y_1^2} \frac{\sinh \left[\frac{1}{2}(1-\rho)y_1 \right] \sinh \left[\frac{1}{2}(\rho_0(x, y_1) - \rho)y_1 \right]}{\cosh \left[\frac{1}{2}(1 - \rho_0(x, y_1))y_1 \right]}. \quad (3.12)$$

Когато $x_2(y_1) < x \leq 1$, намагнитването е положително навсякъде.

Поведението на $x_1(y_1)$ и $x_2(y_1)$, където $y_1 = (y^2 - \pi^2/4)^{1/2}$, като функция на $y = \phi^{1/2}L \in [0, \infty)$ е илюстрирано на фигура 1. Отбелязваме, че $x_1(y_1) \uparrow 1/3$ и $x_2(y_1) \downarrow 1/3$ когато $y \rightarrow 0$. Очевидно при напускане на режима на крайоразмерно подобие в посока към високотемпературната обемна граница, когато $y = \phi^{1/2}L \rightarrow \infty$, ние получаваме $x_1(y_1) \downarrow 0$ и $x_2(y_1) \uparrow 1$.

Формата на профила на намагнитване $m_L(K, h_L, x; \rho)$, $\rho \in [0, 1]$, е показана на фигура 2 за различна стойности на x и y . Очевидно е, че при преминаване към високотемпературната обемна граница, когато $y \rightarrow \infty$, намагнитването се стреми да следва по-строго стъпаловидното външно поле (което клони към нула в термодинамичната граница). За крайни стойности на y обаче има ясно изразено отклонение от профила на външното поле. Това може да се разбере като проява на по-кохерентно, доминирано от спин-спиновото взаимодействие поведение на спиновата система, когато крайоразмерната корелационна дължина става сравнима с дебелината на слоя L .

3.2. Високотемпературна обемна границата

Във високотемпературната обемна граница, когато $L \rightarrow \infty$, $h_L = h$ е фиксирано, $K < K_c$, ние имаме $\phi_L \rightarrow \phi_\infty > 0$, следователно, $y \rightarrow \infty$. Тогава уравненията (3.6) и (3.12) дават експоненциално бързо приближаване на намагнитването на един спин до обемната граница $\pm m_\infty(K, h)$, където

$$m_\infty(K, h) = \frac{|h|}{2K\phi_\infty}, \quad (3.13)$$

при условие, че ρ е фиксирано и $\rho \neq x$, $\rho < 1$. Близо до точката $\rho = x$ ние получаваме

$$\lim_{L \rightarrow \infty} m_L(K, h_L, x; \rho) \cong \operatorname{sgn}(\rho - x) m_\infty(K, h) \{1 - \exp(-|\rho - x|L/\xi_\infty)\}, \quad (3.14)$$

а близо до $\rho = 1$,

$$\lim_{L \rightarrow \infty} m_L(K, h_L, x; \rho) \cong -m_\infty(K, h) \{1 - \exp[-(1 - \rho)L/\xi_\infty]\}, \quad (3.15)$$

където $\xi_\infty = \phi_\infty^{-1/2}$ е обемната корелационна дължина.

3.3. Нискотемпературен режим с умерено поле

Ще отбележим, че в областта

$$\eta^2 > \frac{2(K - K_c)}{-g'^{(c)}(x, \pi^2/4)}, \quad (3.16)$$

имаме $\pi/2 < y^* < \infty$, и профилът на намагнитване се дава от уравненията (3.6) и (3.12) при $y_1 = [(y^*)^2 - \pi^2/4]^{1/2}$. В допълнителната област,

$$\eta^2 \leq \frac{2(K - K_c)}{-g'^{(c)}(x, \pi^2/4)}, \quad (3.17)$$

когато $x \neq 1/3$, ние получаваме $0 < y^* < \pi/2$, и профилът на намагнитване се дава с уравненията (3.6) и (3.12) при $y_1 = [\pi^2/4 - (y^*)^2]^{1/2}$. Граничната линия между тези две области се дава експлицитно с уравнението

$$\eta = \pm \frac{\sqrt{30}}{\sqrt{1 - \frac{5}{4}x(1-x)^2(5+2x-3x^2)}} (K - K_c)^{1/2}. \quad (3.18)$$

На тази линия имаме $y^* = \pi/2$, следователно $y_1 = 0$, и профилите на намагнитване (3.6) и (3.12), съответно, се свеждат до

$$m_L(K, h_L, x; \rho) \cong \frac{h_L L^2}{4K} [1 - \rho^2 - 2(1 - x)^2], \quad 0 \leq \rho \leq x, \quad (3.19)$$

и

$$m_L(K, h_L, x; \rho) \cong -\frac{h_L L^2}{4K} (1 - \rho) [1 + \rho - 4x], \quad x \leq \rho \leq 1. \quad (3.20)$$

Като заместим $x = 0$ или 1 в (3.18), получаваме уравнение (3.48) в Глава 4 за средното сферично условие на система с L слоя при гранични условия на Нойман-Дирихле и хомогенно поле.

При $x = 1/3$, в областта (2.23) получаваме $\phi = O(L^{-3})$, което се дава с уравнение (2.26), и явният израз за профила на намагнитване (3.3) е

$$\begin{aligned} m_L(K, h_L, 1/3; \rho) &\cong \frac{8}{\pi^2} \left(\frac{h}{4J} \right) \left[\frac{2}{\sqrt{3}} \cos\left(\frac{\pi\rho}{2}\right) - 1 \right] \\ &\quad - \left[m_0(K) - \frac{320}{3\pi^4} \left(1 - \frac{9\sqrt{3}}{5\pi}\right) \left(\frac{h}{4J}\right)^2 \right] \sqrt{2} \cos(\pi\rho/2), \end{aligned} \quad (3.21)$$

за $0 \leq \rho \leq 1/3$, и

$$\begin{aligned} m_L(K, h_L, 1/3; \rho) &\cong -\frac{8}{\pi^2} \left(\frac{h}{4J} \right) \left[\frac{2}{\sqrt{3}} \cos\left(\frac{\pi\rho}{2} - \frac{\pi}{3}\right) - 1 \right] \\ &\quad - \left[m_0(K) - \frac{320}{3\pi^4} \left(1 - \frac{9\sqrt{3}}{5\pi}\right) \left(\frac{h}{4J}\right)^2 \right] \sqrt{2} \cos(\pi\rho/2), \end{aligned} \quad (3.22)$$

за $1/3 \leq \rho \leq 1$, където $h = h_L L^2 / \beta$ е фиксирано, и $m_0(K) = (1 - K_c/K)^{1/2}$ е спонтанното намагнитване.

4. Дискусия

В настоящата глава разгледахме малко по-простия случай на средния сферичен модел в сравнение със сферичния модел на Бърлин-Кац, разгледан в [46]. В двата случая системата има геометрия на слой с дебелина L и спиновете се намират в стъпаловидно (+-) външно поле

с амплитуда h_L , която клони към нула (при $L \rightarrow \infty$). Ние обобщихме постановката в три аспекта: (i) Несиметрични гранични условия (на Нойман-Дирихле), вместо периодични такива [46], са наложени върху двете срещуположни граници на слоя; (ii) Стъпаловидното (+-) външно поле сменя знака си на произволно разстояние Lx ($0 \leq x \leq 1$) от границата на Нойман; (iii) Критичният режим на крайноразмерно подобие е изследван успоредно с нискотемпературния режим с умерено поле. Ние получихме точен израз за профила на намагнитване (виж уравнение (3.3)) и анализирахме поведението на неговия водещ порядък в различните температурни и полеви режим.

Ние установихме, че в критичния режим на крайноразмерно подобие, когато $v_1 = O(1)$ и $v_2 = O(1)$, поради асиметрията на граничните условия, профилът на намагнитване не следва близко външното поле, което променя знак на разстояние Lx ($0 < x < 1$) от границата на Нойман (виж уравнения (3.6) и (3.12)). Установихме, че съществуват две стойности на x , $0 < x_1 < x_2 < 1$, които зависят от премащабираните температурна и полева променливи (виж фигура 1), и имат свойството намагнитването да променя знака си само когато $x_1 < x < x_2$. Намагнитването е навсякъде отрицателно, когато $0 \leq x < x_1$ и навсякъде положително, когато $x_2 \leq x \leq 1$ (виж фигура 2). Когато $x_1 < x \leq 1/3$, точката на нулево намагнитване $\rho = \rho_0(x, y_1)$ се отмества към границата на Нойман (виж уравнение (3.7)), а когато $1/3 \leq x < x_2$ тя се отмества към границата на Дирихле (виж уравнение (3.10)).

В нискотемпературния режим с умерено поле, когато $K > K_c$ и $\eta := K^{-1/2} h_L L^2 = O(1)$, профилът на намагнитване има ненулева граница при $L \rightarrow \infty$. В противоположност на случая с периодични гранични

условия [46], профилът "замръзва" и има алгебрична зависимост от макроскопичното разстояние ρ , (виж уравнения (3.19) и (3.20)) само на линията (3.18) в полуравнината на параметрите $K > K_c$, $\eta \in (-\infty, +\infty)$. На тази специална линия зависимостта на профила от ρ , дадена чрез хиперболични функции в областта (3.16), се променя в зависимост чрез тригонометрични функции в допълнителната област (3.17), при условие, че $x \neq 1/3$.

Точката $x = 1/3$ съответства на точката $x = 1/2$ в случая на симетрични гранични условия. Тя се характеризира с това, че приносът на водещия порядък на собствената функция на основното състояние в полевия член (1.4),

$$P_L^{(c)}(K, h_L, x; \phi) \cong \frac{4h_L^2[1 - 2\sin(\pi x/2)]^2}{\pi^2 K \phi}, \quad (4.1)$$

е равен на нула. Обаче анулирането не е във всички порядъци по L^{-1} и полевият член $P_L^{(c)}(K, h_L, 1/3; \phi)$ остава сингулярен при $\phi = 0$, което се вижда от уравнение (2.25). Като следствие, когато $x = 1/3$ и параметрите са в областта, която е дадена с неравенството (2.23), асимптотичното поведение на сферично поле се променя от $\phi_L = O(L^{-2})$ до $\phi_L = O(L^{-3})$, (виж уравнение (2.26)). Граничната линия между тези две области може да тълкува като нова, индуцирана от полето критична температура, $\tilde{T} = \tilde{\beta}^{-1}$, която се дава с израза

$$\tilde{\beta}_c = \frac{\beta_c}{1 - 8|g'^{(c)}(1/3, 0)|(\frac{h}{4J})^2}. \quad (4.2)$$

В подходящ полеви режим под \tilde{T}_c , профилът на намагнитване има замразена компонента, както в случая в [46], и температурно зависим член (виж уравнения (3.21) и (3.22)), който липсва в случая на периодични гранични условия [50].

В противоположност на това, полевият член при периодични гранични условия и антисиметрично външно поле с $x = 1/2$ не съдържа принос на основното състояние и поради това е регулярен в точката

$\phi = 0$ (виж [67]),

$$P_L^{(p)}(K, h_L, 1/2; \phi) \cong \frac{h_L^2 L^2}{K} \left(\frac{1}{96} - \frac{1}{3840} \phi L^2 \right). \quad (4.3)$$

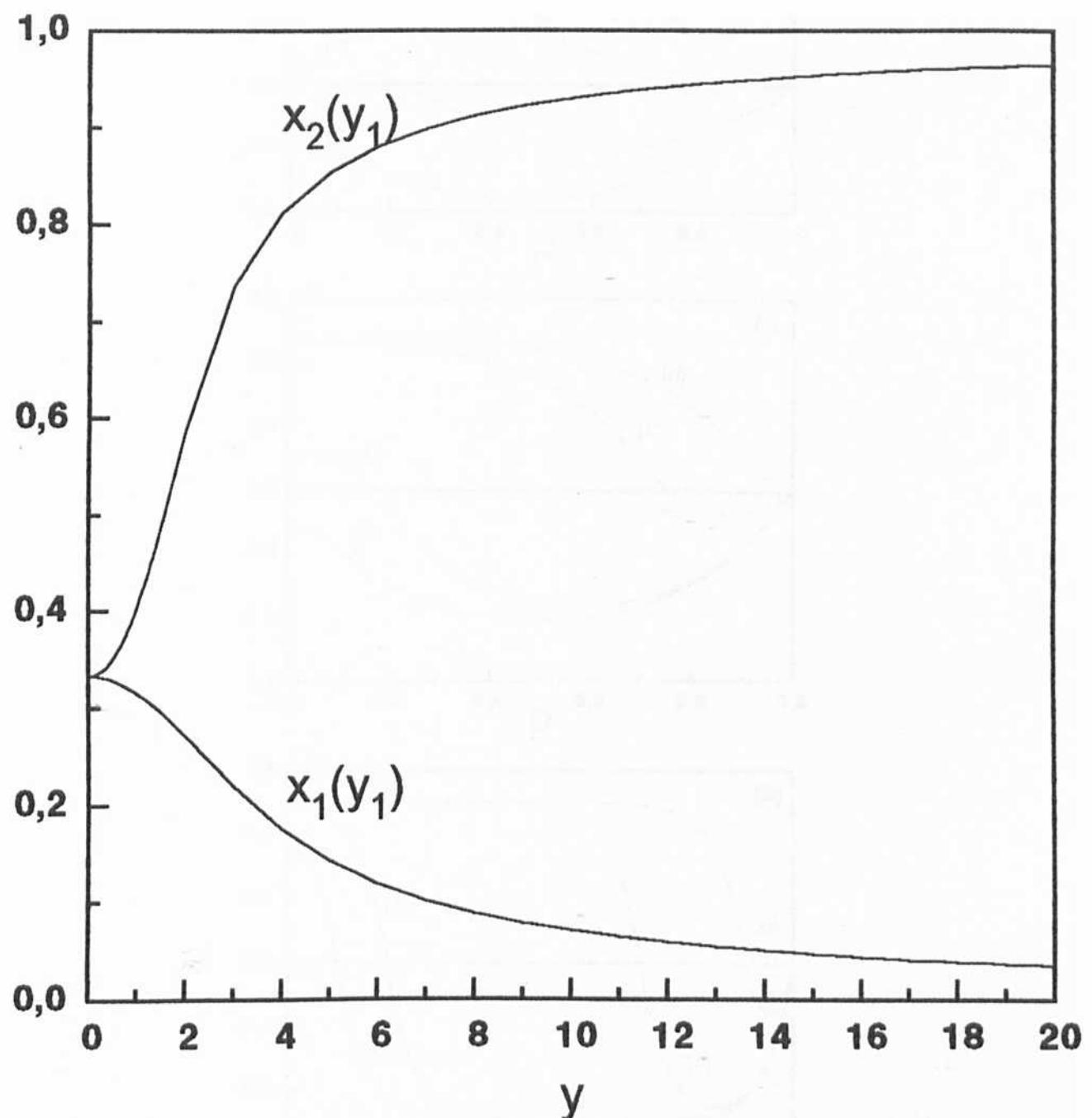
Следователно, в режима с умерено поле решението $\phi = \phi_L$ на средното сферично условие има асимптотичния вид (във водещия порядък)

$$\phi_L = \frac{1}{2(K - K_c) - \frac{1}{3840} \eta^2} L^{-3}, \quad (4.4)$$

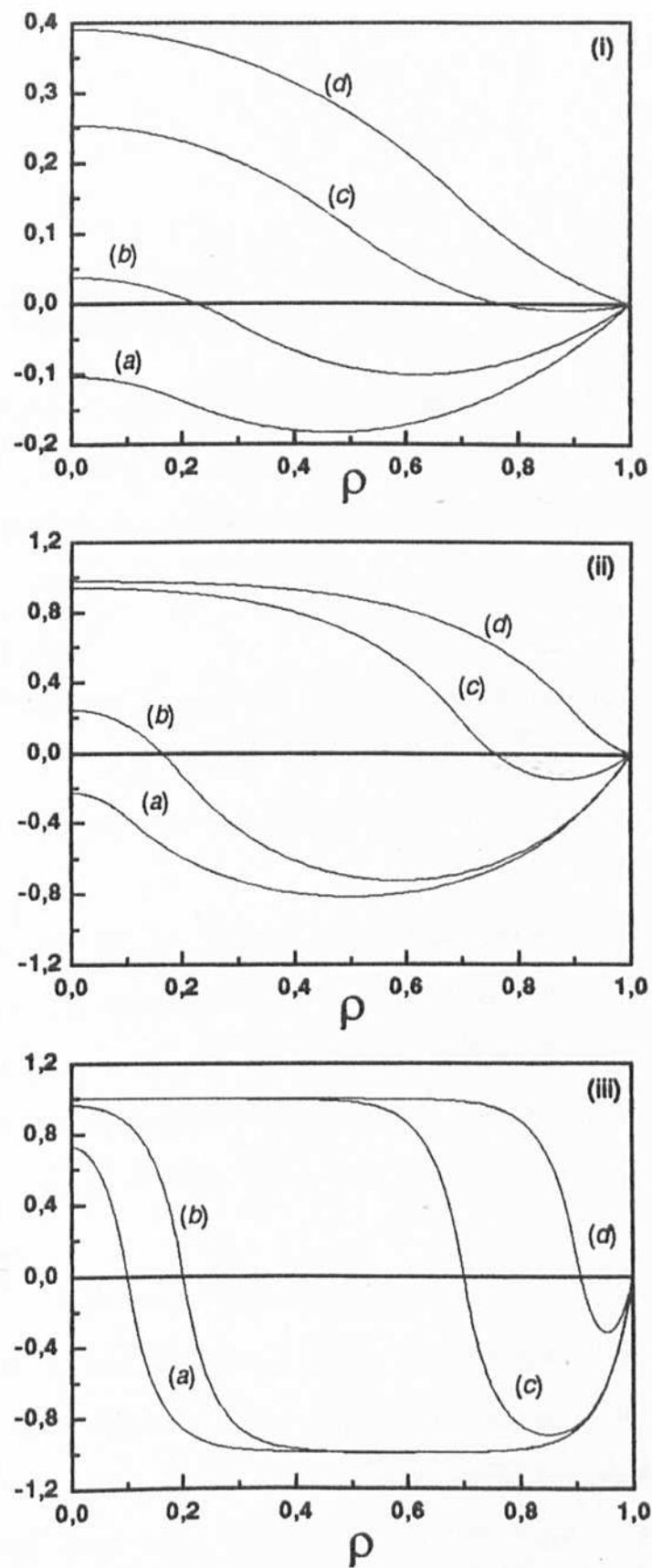
под критичната температура на Патрик [46]

$$\tilde{\beta}_c = \frac{\beta_c}{1 - \frac{1}{480} \left(\frac{h}{4J}\right)^2}. \quad (4.5)$$

Получените тук резултати могат лесно да се обобщят, за да се получат в явен вид разпределенията на вероятностите за единичните (или на слоевете) спинови променливи, както и за нормираните блокови спинови променливи, като се следват работите [46], [63].



Фигура 1. Поведението на $x_1(y_1)$ и $x_2(y_1)$, виж (3.8) и (3.11).



Фигура 2. Профилът на намагнитване, виж (3.6) и (3.12) при

- (i) $y=2$ и (a) $x=0,2$ (b) $x=0,3$ (c) $x=0,5$ (d) $x=0,7$
- (ii) $y=5$ и (a) $x=0,1$ (b) $x=0,2$ (c) $x=0,7$ (d) $x=0,9$
- (iii) $y=20$ и (a) $x=0,1$ (b) $x=0,2$ (c) $x=0,7$ (d) $x=0,9$

ОСНОВНИ РЕЗУЛТАТИ

1. Намерен е нов повърхнинен критичен показател $\Delta_1^{\text{sb}} = 3/2$ в случая на гранични условия на Нойман, когато външните полета h_1 и h_L действуват на повърхностите ограничаващи системата. Този показател съответства на специален (повърхнинно-обемен) фазов переход в модела.

Когато външното магнитно поле се прилага на l -тия слой, където $l = L - \rho L^\alpha$, $0 \leq \alpha < 1$, при гранични условия на Нойман-Дирихле се появява семейство от α -зависими критични показатели $\Delta_1(\alpha) = \frac{1}{2} + \alpha$.

2. Намерено е, че сферичният модел при непериодични гранични условия не е от същия клас на универсалност на повърхнинния фазов переход, като съответният $O(n)$ модел в границата $n \rightarrow \infty$, за разлика от обемните класове на универсалност. Например, $\Delta_1^{\circ} = 1$ и $\Delta_1^{\text{sb}} = 2$ за $O(\infty)$ модел, но $\Delta_1^{\circ} = 1/2$ и $\Delta_1^{\text{sb}} = 3/2$ за сферичния модел.

3. При наличието на две сферични полета в модела, е показано, че поведението на локалната повърхнинна възприемчивост $\chi_{1,1}(T; \rho)$ зависи критично от ρ . При $\rho = 1$ ние намираме, че $\chi_{1,1}$ е крайна при обемната критична температура T_c , за разлика от известната стойност $\gamma_{1,1} = 1$ в случая на само едно обемно сферично поле. Резултатът $\gamma_{1,1} = 1$ се получава, само ако $\rho = \rho_c = 2 - (12K_c)^{-1}$. Когато $\rho > \rho_c$, $\chi_{1,1}$ е експоненциално разходяща при $T \rightarrow T_c^+$.

4. Разглеждайки повърхнинното сферично поле като подходящо подбран параметър, ние получаваме точно решим модел с повърхнинен критичен показател $\gamma_{1,1} = 2$, какъвто има изотропния n -компонентен модел в границата $n \rightarrow \infty$.

5. Намерено е, че във високотемпературната обемна граница разцепването на профила на намагнитване става само асимптотично, в мащаба на разходящата се корелационна дължина. При нискотемпературния режим с умерено поле, профилът на намагнитване е краен, неклонящ към нула и точно се разцепва. Доказано е, че **хипотезата за разцепване се нарушава** от факта, че средноквадратичната дължина на спиновете на границата на Дирихле (Нойман) е различна от тази в средните слоеве на системата намираща се в стъпаловидно (хомогенно) поле.

6. При наличието на стъпаловидно (+-) външно поле, което променя знак на разстояние Lx ($0 < x < 1$) от границата на Нойман, в случай на гранични условия на Нойман-Дирихле е установено, че:

1) В критичния режим на крайноразмерно подобие съществуват две стойности на x , $0 < x_1 < x_2 < 1$, които зависят от мащабираните температурна и полева променливи и имат свойството намагнитването да променя знака си само когато $x_1 < x < x_2$. Намагнитването е навсякъде отрицателно, когато $0 \leq x < x_1$ и навсякъде положително, когато $x_2 < x \leq 1$.

2) В нискотемпературния режим с умерено поле при $x = 1/3$, е намерена нова, индуцирана от полето, критична температура.

Литература

- [1] Fisher M.F. 1970, *Theory of critical point singularities*, in: *Critical Phenomena*, Green M.S., ed., Proc. Enrico Fermi Int. School of Physics, Vol. 51, p. 1-99, (Academic Press, New York).
- [2] Stanley H.E. 1971, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Oxford University Press, Oxford.
- [3] Domb C. 1985, *Critical Phenomena: a brief historical survey*, *Contemp. Phys.* **26** 49-72.
- [4] Huang K. 1987. *Statistical Mechanics*, Wiley, New York.
- [5] Nissen, J. A., Chui, T.C. P. and Lipa, J. A. 1993 *The Specific Heat of Confined Helium near the Lambda Point*, *J. Low Temp. Phys.* **92**, 353-366.
- [6] Tng, Z. X., Sorensen, C. M., Klabunde, K. J. and Hadjipanayis, G. C. 1991 *Size-Dependent Curie Temperature in Nanoscale MnFe₂O₄ Particles*, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3602-3605.
- [7] Fisher M.F. and Barber M.N. 1972, *Scaling theory for finite-size effects in the critical region*. *Phys. Rev. Lett.* **28** 1516-1519.
- [8] Barber M.N. 1983 in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 8, C. Domb and J. L. Lebowitz, eds. (Academic Press, London), pp. 145-266.
- [9] Binder K. 1987 *Finite size effects on phase transitions*, *Ferroelectrics* **73** 43.
- [10] Cardy J.L. 1988 in *Finite-Size Scaling. Current Physics-Sources and Comments*, Vol. 2 (North-Holland, Amesterdam).
- [11] Privman V. 1990, *Finite Size Scaling and Numerical Simulations of Statistical systems*, Privman V., ed. (World Scientific, Singapore).
- [12] Pamberg, P. W., De Wames, R. E. and Vredevoe, L. A. 1968 *Phys. Rev. Lett* **21**, 682.
- [13] Zinn, W. 1971 *Czech. J. Phys. B* **21**, 391.
- [14] Galeezki, G. and Hirsch, A. A. 1976 *J. Mag. Mag. Mater* **3**, 309.
- [15] Ochi, A., Watanabe, K., Kiyama, M., Shinjo, T., Bando, Y. and Takada, T. 1981 *J. Phys. Soc. Japan* **50**, 2777.
- [16] Felcher, G. P. 1981 *Phys. Rev. B* **24**, 1595.
- [17] Mazur, P. and Mills, D. L. 1982 *Phys. Rev. B* **26**, 5175.

- [18] Dietrich, S. and Wagner, H. 1983 *Phys. Rev. Lett.* **51**, 1469.
- [19] Dietrich, S. and Wagner, H. 1984 *Z. Phys. B* **56**, 207.
- [20] Dietrich, S. and Wagner, H. 1985 *Z. Phys. B* **59**, 35.
- [21] Alvarado, S., Campadna, M. and Hopster, H. 1982a *Phys. Rev. Lett.* **48**, 51.
- [22] Alvarado, S. F., Campadna, M., Ciccacci, F. and Hopster, H. 1982b *J. Appl. Phys.* **53**, 7920.
- [23] Scheibner, B. A., Meadows, M. R., Mockler, R. C. and O'Sullivan, W. J. 1979 *Critical Phenomena in Fluid Films: Scaling Crossover and Law of Corresponding States*, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 590-592.
- [24] Meadows, M. R., Scheibner, B. A., Mockler, R. C. and O'Sullivan, W. J. 1979 *Critical Phenomena in Fluid Films: Critical-Temperature-Shift, Crossover-Temperature, and Coexistence-Curve-Amplitude Exponents, and a Fluid-Boundary Interaction*, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 592-595.
- [25] Berlin T.H. and Kac M. 1952, *The spherical model of a ferromagnetic*, *Phys. Rev.* **86** 821-835..
- [26] Lewis H.W. and Wannier G.H. 1952, *Spherical model of a ferromagnetic*, *Phys. Rev.* **88** 682-683.
- [27] Joyce G.S. 1972, *Critical Properties of the Spherical Model*, in: *Phase transitions and critical Phenomena*, Domb C. and Green M.S., eds., Vol. 2, pp. 375-442, Academic, London.
- [28] Brankov J.G. and Danchev D.M. 1987, *On the limit Gibbs states of the spherical model*, *J. Phys. A* **20** 4901-4913.
- [29] Barber M.N. and Fisher M.E. 1973 *Critical Phenomena in Systems of Finite Thickness I. The Spherical Model*, *Annals of Physics* **77** 1-78.
- [30] Dobrushin R.L. 1968, *The description of random fields by means of conditional probabilities and conditions of its regularity*, *Theor. Prob. Appl.* **13** 197-224.
- [31] Dobrushin R.L. 1968, *Gibbsian random fields for lattice systems with pairwise interactions*, *Funct. Anal. Appl.* **2** 292-301.
- [32] Dobrushin R.L. 1968, *The problem of uniqueness of a Gibbs random fields and the problem of phase transition*, *Funct. Anal. Appl.* **2** 302-312.
- [33] Dobrushin R.L. 1968, *Gibbsian random fields. The general case*, *Funct. Anal.*

Appl. **3** 22-28.

- [34] Lanford O.E. and Ruelle D. 1969, *Observables at infinity and states with short range correlations in statistical mechanics*, *Commun. Math. Phys.* **13** 194-215.
- [35] Georgii H.-O. 1988, *Gibbs Measures and Phase Transitions*, De Gruyter Studies in Mathematics Vol. **9** (Walter de Gruyter, Berlin and New York).
- [36] Gallavotti G. and Martin Lof 1975 *Nuovo Cim. B* **25** 425.
- [37] Gallavotti G. and Knops H.J.F. 1974 *Commun. Math. Phys.* **36** 171.
- [38] Cassandro M. and Gallavotti G. 1975 *Nuovo Cim. B* **25** 691.
- [39] Jona-Lasinio G. 1975 *Nuovo Cim. B* **26** 99.
- [40] Jona-Lasinio G. 1976 in: *New Developments in Quantum Field Theory and Statistical Mechanics*, Levy M. and Mitter P., eds. (Plenum. New York and London), p. 419.
- [41] Cassandro M. and Jona-Lasinio G. 1978 *Critical point behaviour and probability theory*, *Adv. Phys.* **27** 913-941.
- [42] Feller W. 1966 *An Introduction to Probability Theory and its Applications*, Vol. II (Wiley. New York).
- [43] Ellis R.S. and Neuman C.M. *Fluctuations in Curie-Weiss exemplis*, in: *Lecture Notes in Physics*, Dell'Antonio G., Doplicher S. and Jona-Lasinio G., eds., Vol. 80, pp. 313-324.
- [44] Ellis R.S. and Neuman C.M. 1978 *Limit Theorems for Sums of Dependent Random Variables Occuring in Statistical Mechanics*, *Z.Wahrsch. Theorie* **44** 117-139.
- [45] Ellis R.S., Neuman C.M. and Rosen J.S. 1980 *Limit Theorems for Sums of Dependent Random Variables Occuring in Statistical Mechanics*, *Z.Wahrsch. Theorie* **51** 153-169.
- [46] Patrick A.E 1993 *On Phase Separation in the Spherical Model of a Ferromagnetic: Quasiaverage Approach*, *J.Stat.Phys.* **72** 665.
- [47] Danchev D M, Brankov J G and Amin M E 1997 *New surface critical exponents in the spherical model*, *J. Phys. A* **30** 1387-1402.
- [48] Danchev D M, Brankov J G and Amin M E 1997 *Surface critical exponents for a three-dimensional modified spherical model*, *J. Phys. A* **30** 5645-5656.

- [49] Amin M.E. 1997 *On the decoupling effects in the spherical model*, *Physica A* (под печат).
- [50] Amin M.E. and Brankov J.G. 1997 *New effects in the magnetization profile of the spherical model in a step-like field*, ... в *J. Phys. A*. (под печат)
- [51] Binder K 1983 in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 8, C. Domb and J. L. Lebowitz, eds. (Academic Press, London), pp. 1-143.
- [52] Diehl H W 1986 in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 10, C. Domb and J. L. Lebowitz, eds. (Academic Press, London), p. 76
- [53] Dietrich S 1990 *CRITICAL PHENOMENA AT INTERFACES*, *Physica A* **168** 160-171.
- [54] Gelfand M P and Fisher M E 1988 *Int. J. Thermophys.* **9** 713-727.
- [55] Gelfand M P and Fisher M E 1990 *Physica A* **166** 1-74.
- [56] Krech M 1994 *The Casimir Effect in Critical Systems* (World Scientific, Singapore).
- [57] Barber M.N. 1974 *Critical Behavior of a Spherical Model with a Free Surface*, *J. Stat. Phys.* **10** 59-88.
- [58] Stanley H.E. 1968 *Phys. Rev.* **176** 718.
- [59] Kac M and Thompson C J 1971 *Phys. Norveg.* **5** 163.
- [60] Knops H J F 1973 *Infinite spin dimensionality limit for nontranslationally invariant interactions*, *J. Math. Phys.* **14** 1918-1920.
- [61] Barber M N, Jasnow D, Singh S and Weiner R A 1974 *Critical behaviour of the spherical model with enhanced surface exchange*, *J. Phys. C* **7** 3491-3504.
- [62] Singh S, Jasnow D and Barber M N 1975 *Critical behaviour of the spherical model with enhanced surface exchange: two spherical model*, *J. Phys. C* **8** 3408-3414.
- [63] Patrick A E 1994 *The influence of External Boundary Conditions on the Spherical Model of a Ferromagnetic.I. Magnetization profiles*, *J. Stat. Phys.* **75** 253-295.
- [64] Zuk J A 1992 *Eigenvalue problem for tridiagonal matrices arising in the scattering-theory analysis of the disordered conductors*, *Can. J. Phys.* **70** 257-267.
- [65] Gradshteyn I S and Ryzhik I H 1973 in *Table of Integrals, Series, and Products* (Academic Press, New York).

- [66] Abraham D.B. and Robert M.A. 1980 *Phase separation in the spherical model*, *J. Phys. A* **13** 2229-2245.
- [67] Brankov J.G. and Tonchev N.S. 1994 *Finite-size scaling in the presence of an inhomogeneous external field: An analytical-model treatment*, *Phys. Rev. B* **50** 2970-2977.
- [68] Angelescu N., Bundaru M. and Costache G. 1981 *On phase separation in the generalized spherical model*, *J. Phys. A* **14** L533-L536.
- [69] Kac M and Helfand E 1963 *J. Math. Phys.* **4** 1078.
- [70] Danchev D.M. 1993 *J. Stat. Phys.* **73** 267.