

## КРИТИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА КУБИЧЕСКИХ И ТЕТРАГОНАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛОВ С МНОГОКОМПОНЕНТНЫМИ ПАРАМЕТРАМИ ПОРЯДКА

© К.Б.Варнашев, А.И.Соколов

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет,  
197376 Санкт-Петербург, Россия  
(Поступила в Редакцию 29 мая 1996 г.)

В рамках двухпетлевого приближения перенормированной теории возмущений изучено критическое поведение трехмерной модели, описывающей антиферромагнитные и структурные фазовые переходы в кубических и тетрагональных кристаллах с  $2N$ -компонентными параметрами порядка ( $N > 1$ ). Найденные ренормгрупповые разложения пересуммированы методом Паде-Бореля и установлено, что в трехмерном фазовом пространстве эффективных констант связи существует устойчивая фиксированная точка, что согласуется с предсказанием, полученным ранее в рамках  $\epsilon$ -разложения. Для физических интересных случаев  $N = 2$  и  $N = 3$ , однако, отвечающие этой точке критические индексы оказались численно близкими не к индексам  $O(2N)$ -симметричных систем, а к существенно отличающимся от них индексам трехмерной XY-модели. Проведен сравнительный анализ результатов, даваемых техникой  $\epsilon$ -разложения и методом ренормгруппы в трехмерном пространстве, и показано, что последний обеспечивает значительно более высокую точность численных оценок.

Ренормгрупповой (РГ) подход в трехмерном пространстве оказался удивительно эффективным при изучении критического поведения простых  $O(n)$ -симметричных моделей. Вычисления многопетлевых разложений для РГ функций и их пересуммирование привели к оценкам критических индексов, которые сегодня считаются наиболее точными (каноническими) [1,2]. Этот подход позволил также построить надежную количественную теорию критического поведения некоторых анизотропных и примесных систем, имеющих две константы связи в гамильтонианах Ландау. К их числу относятся кубическая модель [3-5], слабонеупорядоченная модель Изинга [5-7] и так называемая  $tn$ -модель [8].

В то же время существуют модели, флуктуационные гамильтонианы которых содержат три и более независимых констант взаимодействия. Они описывают фазовые переходы в многочисленных конкретных системах и активно изучаются как в рамках  $\epsilon$ -разложения, так и методом теоретико-полевой РГ в трехмерном пространстве (см., например, [9-15]). Обычно в анизотропных системах с несколькими константами связи критические флуктуации разрушают непрерывные фазовые переходы, превращая их в переходы первого рода. Этот хорошо известный

факт, однако, не имеет статуса теоремы. Напротив, можно построить модели со сколь угодно большим числом зарядов, чьи уравнения РГ имеют устойчивую особую точку [16], т. е. наличие трех и более констант связи в гамильтониане Ландау еще не означает, что непрерывные фазовые переходы в системе запрещены. И все же многозарядные модели, обладающие устойчивыми особыми точками уравнений РГ, крайне редки. Одну из них, описывающую некоторые антиферромагнитные фазовые переходы, а также структурный переход в кристалле  $\text{NbO}_2$ , мы изучим в настоящей работе.

Ранее эта модель уже исследовалась в рамках  $\varepsilon$ -разложения в одно и двухпетлевом приближениях [9,17]. Известно, однако, что в случае систем с нетривиальной симметрией этот метод, по крайней мере в низших порядках по  $\varepsilon$ , может приводить к неудовлетворительным количественным, а зачастую и к неверным качественным результатам [14,15,18]. Поэтому ниже мы применим технику РГ в трехмерном пространстве, которая при использовании адекватных пересуммировочных процедур дает вполне надежные численные оценки уже в двухпетлевом приближении. Как будет показано, получаемые этим способом значения критических индексов довольно сильно отличаются от тех, которые можно извлечь из имеющихся  $\varepsilon$ -разложений [9,17].

## 1. Флуктуационный гамильтониан и уравнения РГ

Итак, флуктуационный гамильтониан рассматриваемой модели имеет вид

$$H = \int d^d x \left[ \frac{1}{2} \left( m_0^2 \varphi_\alpha \varphi_\alpha + \nabla \varphi_\alpha \nabla \varphi_\alpha \right) + \frac{u_0}{4!} (\varphi_\alpha \varphi_\alpha)^2 + \frac{v_0}{4!} \varphi_\alpha^4 + \frac{2z_0}{4!} \varphi_{2\beta-1}^2 \varphi_{2\beta}^2 \right], \quad (1)$$

где  $\varphi_\alpha$  — вещественное векторное поле флуктуаций параметра порядка,  $\alpha = 1, 2, \dots, 2N$ ,  $\beta = 1, 2, \dots, N$ , а «голая» масса  $m_0^2$  пропорциональна  $T - T_c^{(0)}$ , где  $T_c^{(0)}$  — температура фазового перехода в приближении среднего поля. Поле  $\varphi_\alpha$  можно представлять себе как объект, состоящий из двух (четной и нечетной) компонент, каждая из которых сама является  $N$ -мерным вектором. В случае, когда  $u \equiv 0$ , система (1) представляет собой очевидное обобщение анизотропной XY-модели [19] на случай  $N$  пар связанных скалярных полей, а при  $z \equiv 0$  (1) превращается в гамильтониан хорошо известной кубической модели.

При  $N = 2$  гамильтониан (1) описывает структурный фазовый переход в кристалле  $\text{NbO}_2$  и антиферромагнитные переходы в  $\text{TbAu}_2$  и  $\text{DyCu}_2$ ; последним отвечает предел  $v = z$ . Другой физически интересный случай  $N = 3$  соответствует антиферромагнитному фазовому переходу в кристалле  $\text{K}_2\text{IrCl}_6$  и, при  $v = z$ , переходам в кристаллах неодима и  $\text{TbD}_2$  [10]. Детальный анализ этих систем, с точки зрения теории Ландау, можно найти в статьях [9,20], там же содержатся ссылки на экспериментальные работы.

Следует отметить, что флуктуационный гамильтониан (1) допускает не единственную форму записи (см., например, [9,20]). Мы остановились на представлении (1) потому, что оно оказывается весьма удобным как при вычислениях, так и при сравнении результатов с их

аналогами, полученными ранее для более простых (одно- и двухзвездных) моделей. Кроме того, оно наглядно отражает специфические свойства симметрии, присущие данной задаче.

Известно, что характер критических асимптотик и структура диаграмм состояний во флуктуационной области определяются видом уравнений РГ для безразмерных констант связи  $u$ ,  $v$  и  $z$ . Для того чтобы вычислить  $\beta$ -функции и критические индексы (аномальные размерности), на перенормированные обратные функции Грина  $\Gamma_R^{(2)}$  и вершины  $\Gamma_R^{(4)}$ , изображаемые суммами соответствующих диаграмм Фейнмана, необходимо наложить нормировочные условия. В рамках массивной теории при нормировке на нулевых внешних импульсах эти условия имеют вид

$$\Gamma_R^{(2)}(0; m^2, u, v, z) = m^2,$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial p^2} \Gamma_R^{(2)}(p; m^2, u, v, z) \right|_{p^2=0} = 1,$$

$$\Gamma_{UR}^{(4)}(0; m^2, u, v, z) = mu,$$

$$\Gamma_{VR}^{(4)}(0; m^2, u, v, z) = mv,$$

$$\Gamma_{ZR}^{(4)}(0; m^2, u, v, z) = mz, \quad (2)$$

где через  $m$ ,  $u$ ,  $v$  и  $z$  обозначены перенормированная масса (обратный радиус корреляции) и безразмерные инвариантные заряды соответственно. Кроме того, для нахождения индекса восприимчивости  $\gamma$  систему (2) следует дополнить условием нормировки на корреляционную функцию  $\Gamma_R^{(1,2)}$  со вставкой  $\varphi^2$

$$\left. \Gamma_R^{(1,2)}(p, q; m^2, u, v, z) \right|_{p=q=0} = 1. \quad (3)$$

Вершинная функция без внешних хвостов  $\Gamma_R^{(1,2)}$ , содержащая составной оператор  $\varphi^2$ , связана с производной обратной восприимчивости по  $\tau$  тождеством Уорда

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \Gamma^{(2)}(p) = \Gamma^{(1,2)}(p, 0), \quad (4)$$

где  $\tau = (T - T_c)/T_c$ .

Итак, исходя из условий (2) и (3), нетрудно найти разложения для  $\beta$ -функций и критических индексов как функций инвариантных заря-

дов. В двухпетлевом приближении они имеют вид

$$\left. \begin{aligned} \beta_u &= u - u^2 - \frac{1}{N+4} (3uv + uz) + \\ &+ \frac{1}{27(N+4)^2} \left[ 2(41N+95)u^3 + 300u^2v + 100u^2z + 69uv^2 + 23uz^2 \right], \\ \beta_v &= v - \frac{1}{N+4} \left( \frac{9}{2}v^2 + 6uv + \frac{1}{2}z^2 \right) + \frac{1}{27(N+4)^2} \left[ 2(23N+185)u^2v + \right. \\ &+ 624uv^2 + 46uvz + 54uz^2 + 231v^3 + 23vz^2 + 18z^3 \left. \right], \\ \beta_z &= z - \frac{1}{N+4} (2uz + 3vz + 2z^2) + \frac{1}{27(N+4)^2} \left[ 2(23N+185)u^2z + \right. \\ &+ 462uvz + 262uz^2 + 69v^2z + 162vz^2 + 41z^3 \left. \right], \end{aligned} \right\} (5)$$

$$\eta = \frac{4}{27(N+4)^2} \left[ (N+1)u^2 + 3uv + uz + \frac{3}{2}v^2 + \frac{1}{2}z^2 \right], \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \gamma^{-1} &= 1 - \frac{1}{2(N+4)} \left[ (N+1)u + \frac{3}{2}v + \frac{1}{2}z \right] + \\ &+ \frac{1}{2(N+4)^2} \left[ (N+1)u^2 + 3uv + uz + \frac{3}{2}v^2 + \frac{1}{2}z^2 \right]. \end{aligned} \quad (7)$$

В выражениях (5) нормировка зарядов выбрана так, чтобы коэффициент при  $u^2$  в  $\beta_u$  был равен единице.

Перед тем как исследовать двухпетлевые уравнения РГ, приведем основные результаты, относящиеся в низшему, «паркетному» приближению. В этом приближении система уравнений РГ имеет 8 фиксированных точек

- 1)  $u_c = v_c = z_c = 0$ ,
- 2)  $u_c = 1, \quad v_c = z_c = 0$ ,
- 3)  $u_c = z_c = 0, \quad v_c = \frac{2(N+4)}{9}$ ,
- 4)  $u_c = \frac{N+4}{3N}, \quad v_c = \frac{2(N-2)(N+4)}{9N}, \quad z_c = 0$ ,
- 5)  $u_c = 0, \quad v_c = z_c = \frac{N+4}{5}$ ,
- 6)  $u_c = 0; \quad v_c = \frac{1}{3}z_c, \quad z_c = \frac{N+4}{3}$ ,
- 7)  $u_c = \frac{N+4}{3N}, \quad v_c = \frac{1}{3}z_c, \quad z_c = \frac{(N-2)(N+4)}{3N}$ ,
- 8)  $u_c = \frac{N+4}{5N-4}, \quad v_c = z_c = \frac{(N-2)(N+4)}{5N-4}$ . (8)

В физическом интересном случае  $N = 2$  координаты особых точек с номерами 2, 4, 7 и 8 совпадают, т. е. «гейзенберговская» фиксированная точка  $u_c = 1, v_c = z_c = 0$  оказывается четырехкратно вырожденной. Столь сильное вырождение «паркетных» решений не является чем-то исключительным и присуще многим сложным моделям (см., например, [10, 14]). Как мы увидим, это вырождение случайно и полностью снимается в двухпетлевом приближении. В другом физическом случае  $N = 3$  система (8) невырождена, и трехмерная фазовая диаграмма  $(u, v, z)$  содержит устойчивый узел. Это точка с номером 8. Кроме того, на плоскостях  $(u, v)$  и  $(v, z)$  также имеются особые точки, устойчивые в пределах этих плоскостей. В заключение отметим, что если вернуться к исходной нормировке зарядов, т. е. умножить их на коэффициент  $(N + 4)/3$ , и сделать линейное преобразование вида

$$u = 12u_3, \quad v = 12(2u_1 - u_3), \quad z = 12(u_2 - u_3), \quad (9)$$

то особые точки (8) перейдут в соответствующие решения, найденные ранее методом  $\varepsilon$ -разложения [10] (при  $\varepsilon = 1$ ). Это неудивительно, ибо в однопетлевом приближении уравнения РГ, полученные в рамках обоих подходов, должны совпадать.

## 2. Аппроксиманты, фиксированные точки и фазовые диаграммы

Обратимся теперь к двухпетлевым разложениям (5). Хорошо известно, что ряды теории возмущений по константам связи являются асимптотическими. Поэтому, чтобы извлечь из них физическую информацию, необходимо обработать эти ряды с помощью той или иной пересуммировочной процедуры. Мы используем для этой цели технику Паде–Бореля, которая очень хорошо зарекомендовала себя как в случае простых  $O(n)$ -симметричных систем [1, 21], так и при работе в двух- и трехзарядными моделями [3–8, 14, 15]. Поскольку в данной задаче мы имеем дело с рядами от трех переменных, преобразование Бореля для представляемых ими функций следует взять в обобщенном виде

$$f(u, v, z) = \sum_{ijk} c_{ijk} u^i v^j z^k = \int_0^{\infty} e^{-t} F(ut, vt, zt) dt, \quad (10)$$

где борелевский образ

$$F(x, y, w) = \sum_{ijk} \frac{c_{ijk}}{(i+j+k)!} x^i y^j w^k, \quad (11)$$

а коэффициенты  $c_{ijk}$  факториально растут при  $i, j, k \rightarrow \infty$ .

Чтобы вычислить интеграл в выражении (10), необходимо осуществить аналитическое продолжение борелевского образа. С этой целью строятся аппроксиманты Паде по переменной  $\lambda$  для так называемого разрешающего ряда [22]

$$\bar{F}(x, y, w; \lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \sum_{l=0}^n \sum_{m=0}^{n-l} \frac{c_{l,m,n-l-m} x^l y^m w^{n-l-m}}{n!}, \quad (12)$$

коэффициенты которого представляют собой полиномы  $n$ -й степени по  $u$ ,  $v$  и  $z$ . Аппроксиманты же Паде для борелевского образа имеют вид

$$F(x, y, w) = [L/M] \Big|_{\lambda=1}, \quad (13)$$

где

$$[L/M] = \frac{P_L(\lambda)}{Q_M(\lambda)}, \quad (14)$$

а  $P_L(\lambda)$  и  $Q_M(\lambda)$  — полиномы степени  $L$  и  $M$  с коэффициентами, зависящими от  $x$ ,  $y$  и  $w$ ; они определяются с помощью стандартных соотношений

$$Q_M(\lambda) \tilde{F}(x, y, w; \lambda) - P_L(\lambda) = O(\lambda^{L+M+1}),$$

$$Q_M(0) = 1. \quad (15)$$

Делая теперь замену переменных  $x = ut$ ,  $y = vt$  и  $w = zt$  в аппроксимантах Паде, получим окончательно для суммы ряда

$$f(u, v, z) = \int_0^{\infty} e^{-t} [L/M] \Big|_{\lambda=1} dt. \quad (16)$$

Имея двухпетлевые разложения, можно построить для РГ функций аппроксиманты вида  $[2/1]$ . В случае  $\beta$ -функций эти разложения не содержат нулевых слагаемых (констант), так что интеграл (16) принимает вид

$$\int_0^{\infty} t e^{-t} \frac{a_1 + a_2 t}{1 + b_1 t} dt. \quad (17)$$

Его вычисление дает

$$f(u, v, z) = (a_1 + a_2)b - a_2 b^2 + (a_1 - a_2 b)b^2 e^b \text{Ei}(-b), \quad (18)$$

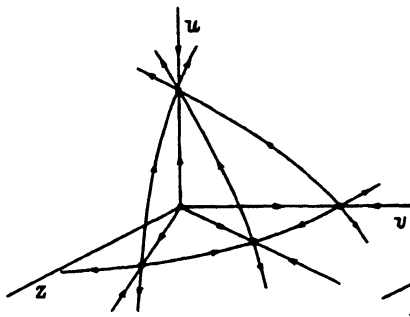
где  $\text{Ei}(x) = \int_{-\infty}^x e^t t^{-1} dt$  — интегральная показательная функция и  $b = b_1^{-1}$ .

Обрабатывая правые части уравнений (5) описанным выше методом, мы нашли координаты фиксированных точек РГ-уравнений в наиболее интересных случаях  $N = 2$  и  $3$ . Они представлены в таблице.

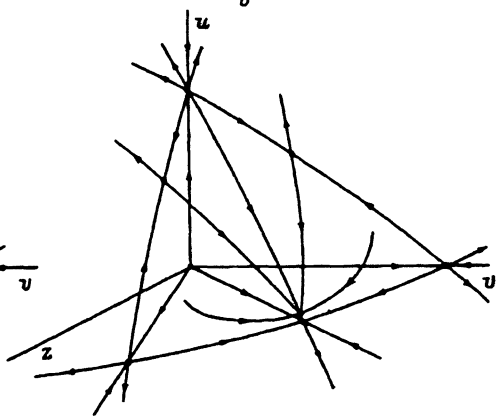
Координаты фиксированных точек уравнений РГ в двухпетлевом приближении с пересуммированными по технике Паде-Бореля правыми частями для случаев  $N = 2$  (верхние строки) и  $N = 3$  (нижние строки)

	Точки							
	1	2	3	4	5	6	7	8
$u_c$	0.0	1.4863	0.0	1.0166	0.0	0.0	1.0166	0.0332
	0.0	1.4262	0.0	0.6307	0.0	0.0	0.6307	0.0094
$v_c$	0.0	0.0	2.1289	0.8358	1.8700	1.0645	0.4178	1.8344
	0.0	0.0	2.4837	1.6855	2.1816	1.2419	0.8428	2.1716
$z_c$	0.0	0.0	0.0	0.0	1.8700	3.1934	1.2537	1.8344
	0.0	0.0	0.0	0.0	2.1816	3.7256	2.5283	2.1716

а



б



Трехмерный фазовый портрет системы РГ-уравнений для  $u, v$  и  $z$  в «паркетном» (а) и двухпетлевом (б) приближениях.

Как видно, учет двухпетлевых вкладов в  $\beta$ -функции существенным образом меняет положение особых точек, а также структуру фазовой диаграммы в целом. Это наглядно иллюстрирует рисунок, на котором изображены трехмерный фазовый портрет РГ-уравнений в паркетном приближении (а) и его двухпетлевой аналог (б). Особенно важна для нас судьба устойчивой в пространстве фиксированной точки — точки 8. В паркетном приближении при  $N = 2$  она совпадает с «гейзенберговской» точкой, тогда как в двухпетлевом приближении в процессе снятия вырождения точка 8 сдвигается в направлении «бозевской» ( $v = z$ ) фиксированной точки, причем подходит к последней очень близко. Как показывают расчеты, при увеличении  $N$  происходит дальнейшее сближение точек 8 и 5. Это означает, что с ростом  $N$  влияние изотропного инварианта на критическую термодинамику рассматриваемой модели становится пренебрежимо малым. Данный факт хорошо согласуется с предсказаниями  $(1/n)$ -разложения, в рамках которого можно показать, что при  $n \rightarrow \infty$  модели, содержащие кубический инвариант, факторизуются, вырождаясь в  $n$  невзаимодействующих моделей Изинга.

Присутствие устойчивого узла на трехмерной фазовой диаграмме уравнений РГ нашей модели крайне важно, поскольку это означает, что критические флуктуации не разрушают фазовые переходы второго рода, по крайней мере при не слишком сильной затравочной анизотропии. Устойчивая в пространстве фиксированная точка располагается на плоскости  $v = z$ , из чего следует, что вывод о наличии на фазовой диаграмме области непрерывных фазовых переходов во всяком случае относится к таким веществам как  $TbAu_2$ ,  $DyC_2$ ,  $TbD_2$  и  $Nd$ .

С какой точностью найдены координаты фиксированных точек? Оценить ее можно, отталкиваясь от нескольких независимых критериев. Сравним для начала координаты точек 2 (гейзенберговской), 3 (изинговской) и 5 (бозевской) с соответствующими величинами, которые дает обработка шестипетлевых РГ разложений для  $O(n)$ -симметричной модели [1,2,21]; на сегодняшний день их можно счи-

тать наиболее точными. Так, в шестипетлевом приближении для  $n = 2N = 4$   $u_c = 1.369$ , а для  $n = 2N = 6$   $u_c = 1.336$  [21]. Из сопоставления этих чисел с теми, которые стоят во втором столбце таблицы, видно, что отклонение результатов, полученных в рамках нашего приближения от «точных», не превышает 9%. Для изинговской фиксированной точки шестипетлевой РГ анализ дает  $v_c = 1.416$ , для бозевской —  $v_c = z_c = 1.405$  [1,2]. Перед тем, как сравнивать эти числа с теми, которые стоят в третьем и пятом столбцах таблицы, необходимо учесть разницу нормировок зарядов  $u$ ,  $v$  и  $z$ ; коэффициенты при соответствующих квадратичных членах во втором и третьем уравнениях (5) не равны единице. Если теперь сделать очевидный пересчет, то легко убедиться, что полученные выше значения  $v_c$  и  $z_c$  отличаются от «точных» на 11–13%.

Аналогичное сопоставление, правда с несколько менее надежными — трехпетлевыми — результатами, можно провести и для точки 8. Дело в том, что при  $v = z$  модель (1) становится эквивалентной другой известной модели [15], описывающей фазовые переходы в геликоидальных магнетиках и слоистых фрустрированных антиферромагнетиках, но при условии обращения в нуль коэффициента при одном из ее инвариантов — «киральном». Как показал детальный РГ анализ этой модели, устойчивая особая точка, отвечающая точке 8 модели (1), имеет в трехпетлевом приближении координаты  $u_c = 0.1872$ ,  $v_c = 1.4914$  при  $N = 2$  и  $u_c = 0.0780$ ,  $v_c = 1.8845$  при  $N = 3$ . Отличие этих чисел от тех, которые приведены в таблице, составляет 20% для  $v_c$  и 0.15 для  $u_c$ , т. е. вполне ощутимо, но не слишком велико.

Выясним далее, насколько чувствительны результаты, даваемые используемой аппроксимационной схемой к линейной замене переменных. Если в уравнениях (5) преобразовать заряды в соответствии с (9), а затем, пересуммировав их правые части в новых переменных по Паде–Борелю, найти координаты восьмой (наиболее интересной) фиксированной точки, то при  $N = 2$  мы получим

$$u_1 = 0.0779, \quad u_2 = 0.1558, \quad u_3 = 0.0018. \quad (19)$$

Сделаем теперь преобразование, обратное к (9). Исходя из чисел (19), найдем координаты точки 8 в старых переменных, которые, естественно, будут несколько отличаться от приведенных в последнем столбце таблицы

$$u_c = 0.0216, \quad v_c = 1.8484, \quad z_c = 1.8484. \quad (20)$$

Эти отличия, однако, не превышают 0.02, что говорит о надежности используемого приближения.

И наконец, еще один критерий для оценки точности применяемых аппроксимаций можно сформулировать, если изучаемая система обладает некоторыми специфическими свойствами симметрии исходного гамильтониана [14,15]. Известно, что для некоторых многозарядных моделей существуют линейные преобразования полей, которые не затрагивают структуру гамильтониана, но меняют значения констант связи (см., например, [19,23]). Оказывается, что модель (1) обладает двумя такими специфическими свойствами симметрии. Первое из них проявляется, если каждую из  $N$  пар компонент поля  $\varphi_\alpha$  развернуть на  $45^\circ$



$$\begin{aligned}\varphi_{2\beta-1} &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{2\beta-1} + \varphi_{2\beta}), \\ \varphi_{2\beta} &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{2\beta-1} - \varphi_{2\beta}).\end{aligned}\quad (21)$$

Тогда, как нетрудно убедиться, гамильтониан (1) сохранит свою структуру, но константы связи трансформируются по правилу

$$u \rightarrow u, \quad v \rightarrow \frac{1}{2}(v + z), \quad z \rightarrow \frac{1}{2}(3v - z).\quad (22)$$

Второе преобразование, оставляющее структуру гамильтониана неизменной, существует только при  $N = 1$  и  $z \equiv 0$ . Оно имеет вид

$$\begin{aligned}\varphi_1 &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 + \varphi_2), \\ \varphi_2 &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 - \varphi_2),\end{aligned}\quad (23)$$

$$u \rightarrow u + \frac{3}{2}v, \quad v \rightarrow -v.\quad (24)$$

Как известно, вид РГ функций полностью определяется структурой гамильтониана, т. е. они не зависят от конкретных значений эффективных констант связи. Следовательно, уравнения РГ (5) должны быть инвариантными относительно преобразований (22) и (24) (для простой анизотропной XY-модели подобное свойство уравнений РГ было впервые замечено в [24]). Это значит, что при любых  $N$  в случае первой симметрии и при  $N = 1$  в случае второй функции  $\beta_u$ ,  $\beta_v$  и  $\beta_z$  должны удовлетворять определенным симметричным соотношениям. Они выглядят следующим образом:

$$\left. \begin{aligned}\beta_u(u, v, z) &= \beta_u\left(u, \frac{1}{2}(v + z), \frac{1}{2}(3v - z)\right), \\ \beta_v(u, v, z) + \beta_z(u, v, z) &= 2\beta_v\left(u, \frac{1}{2}(v + z), \frac{1}{2}(3v - z)\right), \\ 3\beta_v(u, v, z) - \beta_z(u, v, z) &= 2\beta_z\left(u, \frac{1}{2}(v + z), \frac{1}{2}(3v - z)\right),\end{aligned}\right\} \quad (25)$$

и

$$\begin{aligned}\beta_u(u, v, 0) + \frac{3}{2}\beta_v(u, v, 0) &= \beta_u\left(u + \frac{3}{2}v, -v, 0\right), \\ \beta_v(u, v, 0) &= -\beta_v\left(u + \frac{3}{2}v, -v, 0\right),\end{aligned}\quad (26)$$

Поскольку критические индексы являются наблюдаемыми величинами, они также должны быть инвариантными относительно указанных

преобразования). Следовательно, должны выполняться следующие равенства:

$$\begin{aligned}\eta(u, v, z) &= \eta\left(u, \frac{1}{2}(v+z), \frac{1}{2}(3v-z)\right), \\ \gamma^{-1}(u, v, z) &= \gamma^{-1}\left(u, \frac{1}{2}(v+z), \frac{1}{2}(3v-z)\right),\end{aligned}\quad (27)$$

при любых  $N$  и

$$\begin{aligned}\eta(u, v, 0) &= \eta\left(u + \frac{3}{2}v, -v, 0\right), \\ \gamma^{-1}(u, v, 0) &= \gamma^{-1}\left(u + \frac{3}{2}v, -v, 0\right),\end{aligned}\quad (26)$$

при  $N = 1$ . Нетрудно убедиться, что разложения (6), (7) действительно удовлетворяют приведенным соотношениям.

Поскольку описанные выше преобразования не влияют на вид уравнений РГ, они не должны изменять координат фиксированных точек; самое большее, что может происходить — это перестановка точек друг с другом. Чтобы проверить, в какой мере наши результаты удовлетворяют этому требованию, применим преобразование (22) к содержимому таблицы. Тогда точки 1, 2, 5 и 8 останутся на месте (тождественная перестановка), а точки 3, 6 и 4, 7 попарно поменяются местами, причем точность, с которой преобразуются друг в друга координаты этих точек, составляет величину порядка  $10^{-4}$ . С такой же точностью переходят друг в друга координаты особых точек и при преобразовании (24). Конечно, эту погрешность не следует принимать за оценку фактической точности, обеспечиваемой данной аппроксимационной схемой. Столь малая величина просто означает, что используемые нами аппроксиманты точно воспроизводят описанные симметричные свойства РГ разложений. Реальная же точность, достигнутая в рамках данного приближения при вычислении координат особых точек, составляет, как мы видели, величину порядка 10–20%. Для теории без малого параметра это совсем неплохо.

### 3. Критические индексы. Сравнение с результатами $\epsilon$ -разложения

Имея координаты особых точек уравнений РГ и разложения (6), (7), можно определить численные значения критических индексов. Поскольку коэффициенты в разложении индекса  $\eta$  быстро убывают, его значение мы находим прямой подстановкой в (6) координат особых точек; разложение же для  $\gamma^{-1}$  предварительно обрабатывается методом Паде–Бореля. Для устойчивой особой точки 8 эти процедуры дают

$$N = 2: \quad \gamma = 1.326, \quad \eta = 0.029, \quad \nu = 0.673, \quad \alpha = -0.018, \quad \beta = 0.346, \quad (29)$$

$$N = 3: \quad \gamma = 1.324, \quad \eta = 0.029, \quad \nu = 0.672, \quad \alpha = -0.015, \quad \beta = 0.346, \quad (30)$$

где значения индексов  $\nu$ ,  $\alpha$  и  $\beta$  рассчитаны с помощью известных скейлинговых соотношений. Как видно, обоим физически интересным случаям отвечают практически одни и те же критические индексы. Более

того, числа (29), (30) очень мало отличаются от индексов трехмерной XY-модели, для которой в двухпетлевом РГ приближении

$$\gamma = 1.322, \quad \eta = 0.029, \quad \nu = 0.671, \quad \alpha = -0.012, \quad \beta = 0.345. \quad (31)$$

Близость этих трех наборов индексов, конечно, не случайна. Причина ее кроется в уже отмечавшейся близости устойчивой особой точки 8 и бозевской точки 5 на фазовом портрете уравнений РГ. Какова, однако, точность полученных чисел? Как нетрудно убедиться, она значительно превосходит ту, которая была достигнута при определении координат особых точек. Действительно, обработка шестипетлевых РГ разложений для трехмерной XY-модели дает [1]:  $\gamma = 1.316$ ,  $\eta = 0.032$ ,  $\nu = 0.669$ ,  $\alpha = -0.007$ ,  $\beta = 0.346$ , так что отличия «точных» значений критических индексов от их двухпетлевых аналогов (31) лежат в пределах 0.006. Для фиксированной точки, эквивалентной точке 8, трехпетлевой РГ анализ приводит к оценкам [15]

$$N = 2: \quad \gamma = 1.336, \quad \eta = 0.026, \quad \nu = 0.677, \quad \alpha = -0.030, \quad \beta = 0.347, \quad (32)$$

$$N = 3: \quad \gamma = 1.329, \quad \eta = 0.026, \quad \nu = 0.673, \quad \alpha = -0.020, \quad \beta = 0.345. \quad (33)$$

В этом случае отличия полученных нами значений критических индексов от более точных не превосходят 0.012.

Рассмотрим теперь, какие предсказания дает  $\varepsilon$ -разложение. Для критических индексов  $\nu$  и  $\eta$ , отвечающих устойчивой особой точке, были получены выражения [9]

$$\nu = \frac{1}{2} + \frac{3(N-1)}{4(5N-4)}\varepsilon + \frac{(N-1)(20N^2 + 253N - 334)}{16(5N-4)^3}\varepsilon^2, \quad (34)$$

$$\eta = \frac{(N-1)(2N-1)}{4(5N-4)^2}\varepsilon^2. \quad (35)$$

Ряд для  $\nu$ , как нетрудно убедиться, является знакопостоянным, и поэтому обработка его по Паде или Паде–Борелю не ведет к приемлемым результатам (соответствующие аппроксиманты имеют полюса при вещественных положительных аргументах). Не спасает положения и обращение к разложениям для  $\nu^{-1}$ ,  $\gamma$  и  $\gamma^{-1}$ . С другой стороны, коэффициенты в разложении (34) довольно быстро убывают, вследствие чего непосредственная подстановка в приведенные формулы  $\varepsilon = 1$  не лишена смысла. Сделав эту подстановку, мы получим

$$N = 2: \quad \nu = 0.698, \quad \eta = 0.021, \quad \gamma = 1.381, \quad \alpha = -0.094, \quad \beta = 0.356, \quad (36)$$

$$N = 3: \quad \nu = 0.693, \quad \eta = 0.021, \quad \gamma = 1.372, \quad \alpha = -0.080, \quad \beta = 0.354. \quad (37)$$

Как видно, численные оценки для индексов восприимчивости и теплоемкости оказываются существенно отличными от значений, которые дает метод РГ в трехмерном пространстве. В то же время, числа (36) совпадают с теми, которые можно получить для  $O(2N)$ -симметричной модели при  $N = 2$  методом  $\varepsilon$ -разложения в двухпетлевом приближении. Это не удивительно, поскольку в рамках данного приближения сами аналитические выражения для индексов

$O(4)$ -симметричной (второй) и устойчивой (восьмой) фиксированных точек являются идентичными <sup>[17]</sup> (хотя в более высоких порядках по  $\varepsilon$  это вырождение, по-видимому, снимется).

Итак, какие из имеющихся наборов критических индексов следует считать более точными? Выше было показано, что трехмерные результаты и, в частности, числа (29), (30) являются вполне удовлетворительными с точки зрения нескольких независимых критериев. Этого, однако, нельзя сказать об оценках, даваемых  $\varepsilon$ -разложением. Действительно, числа (36) в рамках принятого приближения должны совпадать с критическими индексами трехмерной  $O(4)$ -симметричной модели. Для этой модели, как следует из шестипетлевых РГ расчетов <sup>[21]</sup>,

$$\gamma = 1.449, \quad \eta = 0.036, \quad \nu = 0.738, \quad \alpha = -0.213, \quad \beta = 0.382. \quad (38)$$

Видно, что значения индексов, даваемых  $\varepsilon$ -разложением во втором порядке, отличаются от «точных» на 0.04–0.06, а в случае индекса теплоемкости это отличие достигает 0.12.

Еще более тревожная ситуация возникает при попытке выяснить характер устойчивости особых точек уравнений РГ. Для этого, как известно, необходимо определить знаки собственных чисел соответствующей матрицы устойчивости. Сами собственные числа даются рядами по степеням  $\varepsilon$ . Для бозевской фиксированной точки, в частности, такие ряды имеют вид <sup>[17]</sup>

$$\begin{aligned} \lambda_u &= \frac{1}{5}\varepsilon - \frac{7}{25}\varepsilon^2, \\ \lambda_1 &= -\frac{1}{5}\varepsilon + \frac{1}{5}\varepsilon^2, \\ \lambda_2 &= -\varepsilon + \frac{3}{5}\varepsilon^2. \end{aligned} \quad (39)$$

Полагая теперь  $\varepsilon = 1$ , приходим к очевидному противоречию: с одной стороны, достоверно известно, что бозевская особая точка устойчива в плоскости  $(v, z)$ , а с другой — из выражений (39) никакого определенного вывода об устойчивости данной точки сделать нельзя, так как одно из собственных значений,  $\lambda_1$ , обращается в нуль. Более того, разрешить это противоречие, не выходя за рамки второго приближения по  $\varepsilon$ , невозможно, поскольку применение пересуммировочных процедур непосредственно к отрезкам рядов (39) бессмысленно в силу их малой длины. Столь же неблагоприятно обстоит дело и с рядом для  $\lambda_u$ , сумма которого меняет знак при учете члена второго порядка.

Таким образом, метод  $\varepsilon$ -разложения дает в рассматриваемом случае результаты, характеризующиеся низкой точностью и внутренней противоречивостью. Результаты же РГ анализа в трехмерном пространстве, являются, как было показано, вполне надежными. В то же время, существенные различия численных оценок вряд ли вызваны принципиальными отличиями самих подходов. Скорее они являются следствием использования довольно грубого (двухпетлевого) приближения. Можно надеяться, что учет вкладов более высоких порядков приведет к сближению результатов, даваемых обоими методами, как

это происходит для  $O(n)$ -симметричных [<sup>25-27</sup>] и некоторых многозрядных [<sup>18</sup>] моделей. При этом, почти наверняка, существенным изменениям подвергнутся количественные предсказания  $\varepsilon$ -разложения, хотя окончательно выяснить это можно, лишь выполнив трех- или четырехпетлевой РГ анализ в трех и  $(4 - \varepsilon)$  измерениях.

Итак, мы показали, что поведение модели (1) характеризуется при  $N = 2$  и  $N = 3$  критическими индексами, которые численно очень близки к индексам трехмерной XY-модели. Отличия одних от других не превышают 0.01, т.е. настолько малы, что вряд ли могут быть обнаружены даже в высокопрецизионных экспериментах. Это значит, что в тех секторах диаграмм состояний, которые отвечают фазовым переходам второго рода, антиферромагнетики  $TbAu_2$ ,  $DyC_2$ ,  $TbD_2$ ,  $Nd$ ,  $K_2IrCl_6$ , а также кристалл  $NbO_2$  должны обнаруживать такие же термодинамические аномалии, как и обычные ферромагнетики типа «легкая плоскость» или сверхтекучий гелий-4.

В заключение один из нас (К.Б.В.) хотел бы поблагодарить С.А. Антоненко за предоставление образцов программ по численному решению систем нелинейных уравнений.

Работа выполнена при поддержке Фонда интеллектуального сотрудничества (Санкт-Петербург) в рамках Российской научно-технической программы «Фуллерены и атомные кластеры» (проект 94024).

#### Список литературы

- [1] G.A. Baker, Jr., B.G. Nickel, D.I. Meiron. *Phys. Rev.* **B17**, 3, 1365 (1978).
- [2] J.C. le Guillou, J. Zinn-Justin. *Phys. Rev.* **B21**, 9, 3976 (1980).
- [3] И.О. Майер, А.И. Соколов. *Изв. АН СССР. Сер. физ.* **51**, 12, 2103 (1987).
- [4] I.O. Mayer, A.I. Sokolov. *Ferroelectric Lett.* **9**, 4, 95 (1988).
- [5] I.O. Mayer, A.I. Sokolov, B.N. Shalayev. *Ferroelectrics*. **95**, 1-4, 93 (1989).
- [6] И.О. Майер, А.И. Соколов. *ФТТ* **26**, 11, 3454 (1984).
- [7] I.O. Mayer. *J. Phys. A: Math. Gen.* **22**, 14, 2815 (1989).
- [8] N.A. Shpot. *Phys. Lett.* **A142**, 8-9, 474 (1989).
- [9] D. Mukamel, S. Krinsky. *J. Phys.* **C8**, 22, L496 (1975).
- [10] D. Mukamel, S. Krinsky. *Phys. Rev.* **B13**, 11, 5078 (1976).
- [11] P. Bak, D. Mukamel. *Phys. Rev.* **B13**, 11, 5086 (1976).
- [12] С.А. Бразовский, И.Е. Дзялошинский, Б.Г. Кухаренко. *ЖЭТФ* **70**, 5, 2257 (1976).
- [13] E.J. Blagoeva, G. Busiello. L. de Cesare et al. *Phys. Rev.* **B42**, 10, 6124 (1990).
- [14] С.А. Антоненко, А.И. Соколов, Б.Н. Шалаев. *ФТТ* **33**, 5, 1447 (1991).
- [15] S.A. Antonenko, A.I. Sokolov. *Phys. Rev.* **B49**, 22, 15 901 (1994).
- [16] G. Grinstein, D. Mukamel. *J. Phys. A: Math. Gen.* **15**, 1, 233 (1982).
- [17] D. Mukamel. *Phys. Rev. Lett.* **34**, 8, 481 (1975).
- [18] S.A. Antonenko, A.I. Sokolov, K.B. Varnashev. *Phys. Lett.* **A208**, 1-2, 161 (1995).
- [19] K.G. Wilson, M.E. Fisher. *Phys. Rev. Lett.* **28**, 4, 240 (1972).
- [20] D. Mukamel, S. Krinsky. *Phys. Rev.* **B13**, 11, 5065 (1976).
- [21] S.A. Antonenko, A.I. Sokolov. *Phys. Rev.* **E51**, 3, 1894 (1995).
- [22] Дж. Бейкер, П. Грейвс-Моррис. *Аппроксимации Паде. Мир. М.* (1986).
- [23] H. Kawamura. *Phys. Rev.* **B38**, 7, 4916 (1988).
- [24] А.Л. Корженевский. *ЖЭТФ* **71**, 4 (10), 1434 (1976).
- [25] А.А. Владимиров, Д.И. Казаков, О.В. Тарасов. *ЖЭТФ* **77**, 3 (9), 1035 (1979).
- [26] K.G. Chetyrkin, S.G. Gorishny, S.A. Larin, F.V. Tkachev. *Phys. Lett.* **B132**, 4-6, 351 (1983).
- [27] S.G. Gorishny, S.A. Larin, F.V. Tkachev. *Phys. Lett.* **A101**, 3, 120 (1984).