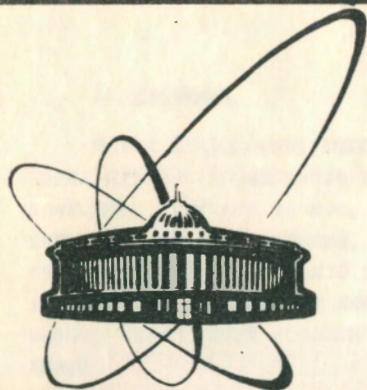


90-73



e  
+

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

Б 874

P17-90-73

Й.Г.Бранков

КОНЕЧНОРАЗМЕРНЫЕ ЭФФЕКТЫ В МЕТОДЕ  
АППРОКСИМИРУЮЩЕГО ГАМИЛЬТониАНА

Направлено в журнал "Physica A"

1990

## 1. Введение

Метод аппроксимирующего гамильтониана, получивший своё математически строгое обоснование и развитие прежде всего в работах /1,2/, позволяет получить точное, в смысле вычисления предельных плотностей термодинамических функций, решение некоторых классов модельных систем статистической механики с дальнедействием. Суть метода состоит в следующем /3,4/. Некоторым классам модельных гамильтонианов  $\mathcal{H}_{N,V}$ , важное место среди которых занимают гамильтонианы так называемых моделей среднего поля, удается сопоставить гамильтонианы с более простой структурой  $\mathcal{H}_{N,V}^v(c)$ , которые зависят от некоторого конечного набора вариационных параметров  $c = \{c_1, \dots, c_n\}$ . Для системы из конечного числа частиц  $N$ , находящихся в конечном объеме  $V$ , вариационный гамильтониан  $\mathcal{H}_{N,V}^v(c)$  порождает канонический ансамбль Гиббса с соответствующей ему вариационной плотностью свободной энергии  $f_{N,V}^v(c)$ . (Здесь мы вводим терминологическое различие между вариационным и аппроксимирующим гамильтонианами, см. ниже, а также между порождаемыми ими ансамблями Гиббса). С помощью специально развитой мажорационной техники доказывается, что при определенном выборе  $c = \bar{c}_{N,V}$  вариационных параметров разность плотности свободной энергии для модельной системы  $f_{N,V}^v$  и плотности вариационной энергии  $f_{N,V}^v(\bar{c}_{N,V})$  стремится к нулю в термодинамическом пределе  $N \rightarrow \infty$ ,  $V \rightarrow \infty$ ,  $N/V = \text{const}$ . Так как последовательность  $f_{N,V}^a = f_{N,V}^v(\bar{c}_{N,V})$  сходится к предельной плотности свободной энергии исходной модели в случаях, когда термодинамический предел для последней существует, то функцию  $f_{N,V}^a = f_{N,V}^v(\bar{c}_{N,V})$  параметров ансамбля Гиббса называют аппроксимирующей свободной энергией, а соответствующий гамильтониан  $\mathcal{H}_{N,V}^v(\bar{c}_{N,V})$  — аппроксимирующим гамильтонианом.

Целью настоящей работы является исследование вопроса о том, дает ли метод аппроксимирующего гамильтониана правильное описание не только предельных термодинамических функций, но и эффектов конечного размера в системах, находящихся в окрестности критической точки или вблизи линии фазовых переходов первого рода. В целях сопоставления с точными результатами для функций конечноразмерного подобию исходной модели мы проведем рассмотрение на примере сферической модели Хусими-Темперли /5-7/, которая является точно решаемой (в термодинамическом смысле) методом аппроксимирующего гамильтониана и конечноразмерные эффекты в которой были изучены в работе /8/.

2. Сферическая модель Хусими - Темперли как предел модели со степенным потенциалом взаимодействия

Джойс<sup>/9,10/</sup> впервые рассмотрел термодинамическое критическое поведение средней сферической модели<sup>/11/</sup> с потенциалом взаимодействия

$J_\sigma(r)$ , спадающим на больших расстояниях  $r$  по степенному закону  $J_\sigma(r) \sim r^{-d-\sigma}$ , где  $d$  - размерность пространства,  $\sigma > 0$  - параметр. Статистическая сумма модели для гиперкубической области  $\Lambda = \{1, \dots, L\}^d$  решетки  $\mathbb{Z}^d$  с периодическими граничными условиями зависит только от Фурье-образа

$$\hat{J}_\sigma(\underline{q}) = \sum_{\underline{\ell} \in \Lambda} \hat{J}_\Lambda^{(\sigma)}(\underline{\ell}) \exp(-i\underline{\ell} \cdot \underline{q}), \quad (2.1)$$

$$\underline{q} = 2\pi \underline{n}/L, \quad \underline{n} \in \{-(L-1)/2, \dots, (L-1)/2\}^d,$$

эффективного потенциала взаимодействия

$$\hat{J}_\Lambda^{(\sigma)}(\underline{\ell}) = \sum_{\underline{t} \in \mathbb{Z}^d} J_\sigma(|\underline{\ell} - L\underline{t}|). \quad (2.2)$$

Эффективный потенциал (2.2) учитывает взаимодействие спинов  $\sigma_i \in \mathbb{R}^1$ ,  $i \in \Lambda$ , не только между собой,  $i, j \in \Lambda$ , но и с повторяющимися образами системы. Поэтому он является периодической функцией компонент вектора  $\underline{\ell}$  с периодом  $L$ . Как в окрестности критической точки, так и вблизи линии фазового перехода первого рода существенной является длинноволновая асимптотика Фурье-образа:

$$\hat{J}_\sigma(\underline{q}) \approx \hat{J}(\underline{0}) (1 - \rho_\sigma |\underline{q}|^{\min\{\sigma, 2\}}), \quad |\underline{q}| \rightarrow 0. \quad (2.3)$$

Нижняя критическая размерность этой модели  $d_\ell = \sigma$ , а верхняя  $d_u = 2\sigma$ . Джойсом было найдено<sup>/9,10/</sup>, что критические индексы, определенные при  $t = (T - T_c)/T_c \rightarrow 0^+$ , зависят от параметра взаимодействия  $\sigma$ , например, при  $0 < \sigma \leq 2$  и  $d_\ell < d < d_u$ :

$$\alpha_s = -\frac{2\sigma - d}{d - \sigma}, \quad \beta = \frac{1}{2}, \quad \gamma = \frac{\sigma}{d - \sigma}, \quad \nu = \frac{1}{d - \sigma}, \quad \eta = 2 - \sigma. \quad (2.4)$$

В области среднего поля,  $d > d_u = 2\sigma$ , где гиперскейлинг нарушен<sup>/12/</sup>, критические индексы принимают значения (см. также<sup>/13/</sup>)

$$\alpha_s = -\frac{d - 2\sigma}{\sigma}, \quad \beta = \frac{1}{2}, \quad \gamma = 1, \quad \nu = \frac{1}{\sigma}, \quad \eta = 2 - \sigma. \quad (2.5)$$

Конечномерные эффекты в средней сферической модели с даль-

действием ( $0 < \sigma < 2$ ) исследованы весьма подробно в работах /14-17/. В соответствии с гипотезой конечноразмерного подобия /18/ при размерностях  $d \in (\sigma, 2\sigma)$  "сингулярная часть" плотности свободной энергии Гиббса в окрестности критической точки  $T = T_c$ ,  $H = 0$  имеет вид /19/

$$(k_B T)^{-1} f_{L, \text{sing}}(t, h) \approx L^{-d} Y(C_1 t L^{1/\nu}, C_2 h L^{\Delta/\nu}), \quad (2.6)$$

где  $Y(\dots)$  - некоторая универсальная функция,  $h = H/k_B T$ ,  $H$  - внешнее магнитное поле,  $C_1$  и  $C_2$  - зависящие от модели коэффициенты.

Из выражения (2.3) видно, что значение  $\sigma = 2$  соответствует случаю близкого действия. Не так очевиден другой предельный случай  $\sigma \rightarrow 0$ . В работе /9/ отмечается, что как предел  $\sigma \rightarrow 0$  при фиксированном  $d$ , так и предел  $d \rightarrow \infty$  при взаимодействии ближайших соседей приводит к одному и тому же поведению типа Вейсса - Брегга - Вильямса (или Хусими - Темперли, по принимаемый здесь терминологии). Доказательства этого утверждения, однако, не было дано.

В этой работе мы покажем, что гамильтониан сферической модели с периодическими граничными условиями и затравочным потенциалом взаимодействия вида

$$J^{(\sigma)}(r) = \sigma J_\sigma(r), \quad J_\sigma(r) \sim J_0 r^{-d-\sigma} \quad (r \rightarrow \infty), \quad (2.7)$$

эквивалентен в пределе  $\sigma \rightarrow 0$  гамильтониану сферической модели со свободными границами и с взаимодействием типа Хусими - Темперли:

$$\mathcal{H}_N^{\text{int}}(\{\sigma_i\}) = -\frac{J}{2N} \left( \sum_{i=1}^N \sigma_i \right)^2 \quad (J > 0, N = L^d). \quad (2.8)$$

Действительно, для эффективного потенциала взаимодействия (2.2) в случае затравочного потенциала вида (2.7) имеем при достаточно большом  $M > 0$

$$\begin{aligned} \tilde{J}_\Lambda^{(\sigma)}(\underline{\ell}) &\approx \sigma \sum_{\substack{\underline{t} \in \mathbb{Z}^d \\ |\underline{t}| \leq M}} J_\sigma(|\underline{\ell} - L\underline{t}|) + \sigma L^{-d-\sigma} J_0 \sum_{\substack{\underline{t} \in \mathbb{Z}^d \\ |\underline{t}| > M}} |\underline{\ell} - \underline{t}|^{-d-\sigma} = \\ &= \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2})} J_0 L^{-d} + O(\sigma \ln L). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Последнее равенство (2.9) следует из асимптотики дзета-функции Эпштейна (см., например, /20/):

$$\sum_{\underline{t} \in \mathbb{Z}^d} |\underline{t} - \underline{q}|^{-d-\sigma} = \frac{2\pi^{d/2}}{\sigma \Gamma(\frac{d}{2})} + C_d + o(\sigma) \quad (2.10)$$

( $C_d$  - некоторая константа), справедливой при любом  $\underline{q}$ , если в сумме  $\underline{t} \neq \underline{q}$ .

Заметим, что результат для фурье-образа (2.1) при взаимодействии (2.7) в пределе  $\sigma \rightarrow 0$ :

$$\lim_{\sigma \rightarrow 0} \hat{J}_\sigma(\underline{q}) = \hat{J}(\underline{0}) \delta_{\underline{q}, \underline{0}}, \quad \hat{J}(\underline{0}) = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2})} J_0, \quad (2.11)$$

можно формально получить из (2.3), если предположить справедливость длинноволновой асимптотики во всей зоне Бриллюэна и учесть, что  $\rho_\sigma \rightarrow 1$  при  $\sigma \rightarrow 0$ .

Очевидно, что при любой фиксированной размерности  $d > 0$  в пределе  $\sigma \rightarrow 0$  система входит в режим среднего поля,  $d > d_u = 2\sigma$ , когда в теории появляется так называемая опасная несущественная переменная /12/, которая нарушает соотношение гиперскейлинга  $d\nu = \gamma + 2\beta$  и модифицирует закон конечноразмерного подобия /21/.

### 3. Теория конечноразмерного подобия для моделей типа Хусими-Темперли

Стандартная формулировка теории конечноразмерного подобия /18/ не применима к моделям типа Хусими-Темперли, для которых понятия о пространственной размерности и корреляционной длине не имеют естественного определения. Заметим также, что обычное определение расходимости корреляционной длины бесконечной системы,  $\xi_\infty \sim t^{-\nu}$ ,  $t \rightarrow 0^+$ , теряет смысл в пределе  $\sigma \rightarrow 0$  при фиксированном  $d$ , так как тогда  $\nu = 1/\sigma \rightarrow \infty$ , см. (2.5). Для преодоления возникающих трудностей в работах /7, 22/ было предложено ввести понятие о числе скоррелированных частиц  $N_c$  ("число когерентности") и предположить, что в бесконечной системе эта величина расходится в критической точке с характерным показателем  $\nu^*$ :

$$N_{c,\infty} \sim |t|^{-\nu^*}, \quad t \rightarrow 0. \quad (3.1)$$

Далее, гипотеза конечноразмерного подобия модифицируется следующим образом. Пусть термодинамическая величина  $A_\infty(t)$  при нулевом магнитном поле имеет в критической точке  $t = 0$  сингулярное поведение вида  $A_\infty(t) \sim |t|^{\alpha_{MF}}$ ,  $t \rightarrow 0$ . Тогда существует регулярная функция  $F_a(x)$ ,  $x \geq 0$ , такая, что асимптотическое поведение величины  $A_N(t)$  в системе с большим, но конечным числом

частиц  $N$  в окрестности критической точки бесконечной системы имеет вид

$$A_N(t) \sim |t|^{a_{MF}} F_\alpha(N/N_c), \quad t \rightarrow 0. \quad (3.2)$$

Наконец, для определения показателя  $\nu^*$  было предложено сравнить поведение модели типа Хусими - Темперли из  $N$  частиц с поведением соответствующей модели с ближкодействием при  $d = d_u$ , считая размеры последней  $L = N^{1/d_u}$  в каждом измерении. При предположениях, что 1) конечноразмерное подобие для системы с ближкодействием справедливо и при  $d = d_u$ , 2) обе системы имеют одинаковые критические показатели, выводится соотношение  $\nu^* = \nu_{MF} d_u$ .

Заметим, что в контексте сферической модели, как следует из (2.4), величина

$$N_{c,\infty} \equiv \xi_\infty^{d_u} \sim t^{-2}, \quad t \rightarrow 0^+, \quad (3.3)$$

не зависит от значения  $\sigma \leq \frac{1}{2}d$ . Поэтому в пределе  $\sigma \rightarrow 0$  при любой размерности системы  $d > 0$  можно определить характерную "длину когерентности":

$$l_{c,\infty} := N_{c,\infty}^{1/d} \sim t^{-2/d}, \quad t \rightarrow 0^+, \quad (3.4)$$

отношение которой к линейному размеру системы  $L = N^{1/d}$  определяет собой масштабированную температурную переменную

$$x_1 \sim (L/l_{c,\infty})^{d/2} \sim t N^{1/2}. \quad (3.5)$$

Биндер и др. [21] обсудили возможные формы нарушения конечноразмерного подобия из-за появления опасной несущественной переменной при  $d > d_u$ . Предполагая аналитичность функции конечноразмерного подобия для корреляционной длины, они показали, что гипотеза конечноразмерного подобия для "сингулярной части" плотности свободной энергии (2.6) модифицируется при  $d > d_u$ , принимая вид

$$(k_B T)^{-1} f_{L,sing}(t, h) \approx L^{-d} Y(C_1 t L^{d/(\gamma+2\beta)}, C_2 h L^{d(\gamma+\beta)/(\gamma+2\beta)}). \quad (3.6)$$

Их заключение о том, что при  $d > d_u$  корреляционную длину в формулировке конечноразмерного подобия следует заменить на "термодинамическую длину"

$$l \sim t^{-(2\beta+\gamma)/d}, \quad t \rightarrow 0^+, \quad (3.7)$$

подтверждается и анализом вероятностного распределения для параметра порядка в модели Изинга при  $d = 5$  и  $T < T_c$  [23].

Подчеркнем, что для сферической модели со степенным потенциалом взаимодействия термодинамическая длина (3.7) в пределе  $\sigma \rightarrow 0$  совпадает с длиной когерентности (3.4) при любой пространственной размерности  $d$ , приписываемой системе.

Эффекты конечного размера в сферической модели Хусими - Темперли исследованы в работе [8] в двух разных ансамблях. В микроканоническом, по отношению к сферическому условию, ансамбле, определяющем сферическую модель Берлина - Каца [24], плотность совместного вероятного распределения случайных величин  $\sigma_i \in \mathbb{R}^1$ ,  $i = 1, \dots, N$ , по отношению к лебеговской мере на  $\mathbb{R}^N$  имеет вид

$$p_N^s(\{\sigma_i\} | K, h) = [Z_N^s(K, h)]^{-1} \delta\left(\sum_{i=1}^N \sigma_i^2 - N\right) \exp[-\mathcal{H}_N(\{\sigma_i\})/k_B T], \quad (3.8)$$

где  $K = J/k_B T$ . В случае сферической модели Хусими - Темперли

$$\mathcal{H}_N(\{\sigma_i\}) = \mathcal{H}_N^{int}(\{\sigma_i\}) - H \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (3.9)$$

представляет собой энергию конфигурации спинов  $\{\sigma_i = \chi_i, i = 1, \dots, N\}$ , взаимодействующих между собой в соответствии с гамильтонианом (2.8) и находящихся во внешнем поле  $H$ . Статистическая сумма  $Z_N^s(K, h)$  определяется из условия нормировки плотности (3.8) в  $\mathbb{R}^N$ :

$$Z_N^s(K, h) = \int_{\mathbb{R}^N} d\chi_1 \dots d\chi_N \delta\left(\sum_{i=1}^N \chi_i^2 - N\right) \exp\left\{\frac{K}{2N} \left(\sum_{i=1}^N \chi_i\right)^2 + h \sum_{i=1}^N \chi_i\right\}. \quad (3.10)$$

В термодинамически эквивалентном (т.е. эквивалентном на уровне термодинамических потенциалов) ансамбле средней сферической модели [11] плотность совместного вероятностного распределения спинов  $\sigma_i \in \mathbb{R}^1$ ,  $i = 1, \dots, N$  имеет вид

$$p_N^{ms}(\{\sigma_i\} | K, h) = [Q_N(K, h, s)]^{-1} \exp[-\mathcal{H}_N(\{\sigma_i\})/k_B T - s \sum_{i=1}^N \sigma_i^2], \quad (3.11)$$

где параметр  $s = s_N(K, h)$  определяется из среднего сферического условия

$$-\frac{\partial}{\partial s} \ln Q_N(K, h, s) = N. \quad (3.12)$$

Статистическая сумма  $Q(K, h, s)$  в (3.11) и (3.12) определяется из соответствующего условия нормировки плотности вероятности (3.11) в  $\mathbb{R}^N$ .

Было показано /8/, что в случае взаимодействия типа Хусими-Темперли (2.8) как сферическая, так и средняя сферическая модель удовлетворяют гипотезе (3.6) для сингулярной части плотности свободной энергии, причем масштабированные переменные в обоих случаях имеют вид

$$x_1 = t N^{1/2}, \quad x_2 = h N^{3/4}. \quad (3.13)$$

Универсальная функция  $Y(x_1, x_2)$  в правой части (3.6), однако, оказалась зависящей от ансамбля. Так, в случае сферического ансамбля (3.8) было получено

$$Y^s(x_1, x_2) = -\ln \int_{\mathbb{R}^1} dx \exp(x_2 x - \frac{1}{2} x_1 x^2 - \frac{1}{4} x^4), \quad (3.14)$$

а в случае среднего сферического ансамбля (3.11), (3.12)

$$Y^{ms}(x_1, x_2) = \frac{1}{2} \ln X - \frac{1}{4} (X - x_1)^2 - \frac{1}{2} x_2^2 X^{-1}, \quad (3.15)$$

где  $X = X(x_1, x_2)$  является решением уравнения

$$X^{-1} - X + x_2^2 X^{-2} = -x_1. \quad (3.16)$$

Метод аппроксимирующего гамильтониана приводит к еще одному термодинамически эквивалентному ансамблю для сферической модели Хусими - Темперли. Перейдем теперь к исследованию эффектов конечного размера в этом ансамбле.

#### 4. Эффекты конечного размера в аппроксимирующем ансамбле

Нетрудно<sup>\*</sup> убедиться в том, что метод аппроксимирующего гамильтониана /1-4/ применим к классической сферической модели Хусими-Темперли. Действительно, учитывая то, что разрешенные конфигурации в ансамбле Берлина - Каца лежат на поверхности сферы  $\sum \sigma_i^2 = N$ , и применяя действительное ортогональное преобразование переменных  $(x_1, \dots, x_N) \rightarrow (y_1, \dots, y_N)$ , в результате которого

$$\sum_{i=1}^N x_i^2 = \sum_{i=1}^N y_i^2, \quad \sum_{i=1}^N x_i = N^{1/2} y_1, \quad (4.1)$$



получим

$$\|N^{-1} \sum_{i=1}^N \sigma_i\|^2 := \sup_{\sum x_i^2 = N} (N^{-1} \sum_{i=1}^N x_i)^2 = \sup_{\sum y_i^2 = N} (N^{-1/2} y_1)^2 = 1. \quad (4.2)$$

Следовательно, с помощью мажорационной техники [1-4], основанной на неравенстве Боголюбова для свободных энергий, можно доказать, что если  $J \geq 0$ , то

$$0 \leq \inf_{c \in \mathbb{R}^1} f_N^V(K, h; c) - f_N^S(K, h) \leq O(N^{-1/2}) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0. \quad (4.3)$$

Здесь  $f_N^V(K, h; c)$  - вариационная плотность свободной энергии Гиббса, построенная для канонического ансамбля с гамильтонианом

$$\mathcal{H}_N^V(\{\sigma_i\}; c) = -(Jc + H) \sum_{i=1}^N \sigma_i + \frac{1}{2} JNc^2. \quad (4.4)$$

Явный вид этой функции можно найти при любом конечном  $N > 2$ :

$$\begin{aligned} (k_B T)^{-1} f_N^V(K, h; c) &= \\ &= -\frac{1}{N} \int_{\mathbb{R}^N} dx_1 \dots dx_N \delta\left(\sum_{i=1}^N x_i^2 - N\right) \exp\left[(Kc + h) \sum_{i=1}^N x_i - \frac{1}{2} KNc^2\right] = \\ &= \frac{1}{2} Kc^2 + \frac{N-2}{2N} \ln \frac{Kc+h}{2\pi} - \frac{1}{N} \ln I_{\frac{N-2}{2}}[N(Kc+h)] - \frac{1}{N} \ln \pi, \end{aligned} \quad (4.5)$$

где  $I_\nu(x)$  - модифицированная функция Бесселя. Нетрудно проверить, что точная нижняя грань по  $c \in \mathbb{R}^1$  достигается на замкнутом интервале  $|c| \leq 1$  в точке  $c = \tilde{c}_N(K, h)$ , удовлетворяющей уравнению само-согласования

$$c = I_{\frac{N}{2}}[N(Kc+h)] / I_{\frac{N-2}{2}}[N(Kc+h)]. \quad (4.6)$$

При  $N \gg 1$ , используя равномерное асимптотическое разложение функции  $I_\nu(\nu z)$  при  $\nu \rightarrow \infty$  [25], для плотности свободной энергии (4.5) при фиксированных термодинамических параметрах  $K$  и  $h$  получаем

$$\begin{aligned} (k_B T)^{-1} f_\infty^V(K, h; c) &= \frac{1}{2} Kc^2 + \frac{1}{2} \ln(1 + [1 + 4(Kc+h)^2]^{1/2}) - \\ &- \frac{1}{2} [1 + 4(Kc+h)^2]^{1/2} + N^{-1} \left\{ \frac{1}{4} \ln[1 + 4(Kc+h)^2] - \right. \\ &\left. - \ln(1 + [1 + 4(Kc+h)^2]^{1/2}) \right\} + const + O(N^{-2}). \end{aligned} \quad (4.7)$$

Аналогично для уравнения самосогласования (4.6) при  $N \gg 1$  получаем

$$c = 2(Kc+h) (1 + [1 + 4(Kc+h)^2]^{1/2})^{-1} \{ 1 +$$

$$+ N^{-1} \{ [1 + 4(Kc + h)^2]^{1/2} - 1 \} [1 + 4(Kc + h)^2]^{-1} + \mathcal{O}(N^{-2}) \}. \quad (4.8)$$

С другой стороны, для плотности свободной энергии сферической модели Хусими - Темперли при конечном  $N$  имеет место точное интегральное представление

$$(k_B T)^{-1} f_N^S(K, h) = -N^{-1} \ln \left\{ (KN/2\pi)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dc \exp[-N(k_B T)^{-1} f_N^V(K, h; c)] \right\}. \quad (4.9)$$

В силу того, что при  $J \geq 0$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \inf_{c \in \mathbb{R}^1} f_N^V(K, h; c) = \inf_{c \in \mathbb{R}^1} \lim_{N \rightarrow \infty} f_N^V(K, h; c) = f_\infty^S(K, h), \quad (4.10)$$

функция

$$f_N^a(K, h) := \inf_{c \in \mathbb{R}^1} f_N^V(K, h; c) = f_N^V(K, h; \bar{c}_N(K, h)) \quad (4.11)$$

была названа /1-4/ аппроксимирующей свободной энергией (при конечном  $N$ ). Канонический ансамбль с гамильтонианом (4.4) при  $c = \bar{c}_N(K, h)$  будем называть аппроксимирующим ансамблем.

Рассмотрим сначала конечномерные эффекты в плотности аппроксимирующей свободной энергии (4.11) в критической области. Учитывая, что в рассматриваемом случае масштабированные переменные имеют вид (3.13), и то, что решение уравнения самосогласования  $\bar{c}_N(K, h) = \mathcal{O}(N^{-1/4})$  в этой области, из выражения (4.7) получим

$$(k_B T)^{-1} f_N^V(1 - x_1 N^{-1/2}, x_2 N^{-3/4}; a N^{-1/4}) = \frac{1}{N} \left( \frac{1}{4} a^4 + \frac{1}{2} x_1 a^2 - x_2 a \right) + const + \mathcal{O}(N^{-3/2}). \quad (4.12)$$

Следовательно, аппроксимирующую свободную энергию (4.11) в критической области  $x_1 = \mathcal{O}(1)$ ,  $x_2 = \mathcal{O}(1)$  можно представить в виде, формально предсказываемом гипотезой конечномерного подобия (3.6):

$$(k_B T)^{-1} f_{N, \text{sing}}^a(1 - x_1 N^{-1/2}, x_2 N^{-3/4}) \simeq N^{-1} \Upsilon^a(x_1, x_2), \quad (4.13)$$

где

$$\Upsilon^a(x_1, x_2) = \min_a \left\{ \frac{1}{4} a^4 + \frac{1}{2} x_1 a^2 - x_2 a \right\}. \quad (4.14)$$

Заметим, что выше критической температуры, когда  $X_1 > 0$ ,  $Y^a(X_1, X_2)$  является гладкой функцией переменных  $X_1, X_2$  и гипотеза конечноразмерного подобия полностью удовлетворяется, хотя аппроксимирующая функция подобия отличается от точной, см. (3.14). Принципиальное расхождение с теорией проявляется, однако, при  $X_1 \leq 0$  ввиду неаналитической зависимости функции  $Y^a(X_1, X_2)$  от полевой переменной  $X_2$  в точке  $X_2 = 0$ . Действительно, при  $X_2 \rightarrow 0$  из (4.14) получаем

$$Y^a(X_1, X_2) \Big|_{X_2 \rightarrow 0} \simeq \begin{cases} -\frac{3}{4} |X_2|^{4/3}, & X_1 = 0, \\ -\frac{1}{4} X_1^2 - |X_1|^{1/2} |X_2|, & X_1 < 0. \end{cases} \quad (4.15)$$

Рассмотрим теперь окрестность линии фазовых переходов первого рода по полю,  $1 < K \leq \infty$ ,  $h = 0$ . В этом случае температурная переменная  $K > 1$  является несущественной переменной и теория конечноразмерного подобия /26/ предсказывает существование универсальной зависимости от перемасштабированной полевой переменной

$$y_v = N h m_o(K), \quad (4.16)$$

где  $m_o(K)$  - спонтанная намагниченность. Теперь для "сингулярной части" плотности свободной энергии имеем

$$(k_B T)^{-1} f_{N, \text{sing}}(K, h) \simeq N^{-1} W(y_v), \quad (4.17)$$

а для намагниченности на один спин

$$m_N(K, h) \simeq -m_o(K) W'(y_v), \quad (4.18)$$

где  $W'(\cdot)$  - производная функции  $W(\cdot)$ .

Полагая в (4.7)  $h = (m_o N)^{-1} y_v$ , где  $m_o(K) = 1 - K^{-1}$ , с учетом уравнения самосогласования (4.8) при  $K > 1$  для плотности аппроксимирующей свободной энергии в окрестности линии фазовых переходов первого рода получим

$$(k_B T)^{-1} f_N^a(K, h) \simeq (k_B T)^{-1} f_N^a(K, 0) - N^{-1} |y_v|. \quad (4.19)$$

Таким образом, функция конечноразмерного подобия

$$W^a(y_v) = -|y_v| \quad (4.20)$$

снова является неаналитической функцией полевой переменной  $y_v$  в точке  $y_v = 0$ . В частности, для намагниченности в конечной аппроксимирующей системе из (4.20) следует

$$m_N^a(K, h) \simeq \operatorname{sgn}(h) m_0(K). \quad (4.21)$$

С другой стороны, подстановка в соотношении (4.9) разложения  $(k_B T)^{-1} f_N^v(K, y_v/m_0 N; c) = (k_B T)^{-1} f_N^v(K, 0; c) - N^{-1} \{ (y_v/2m_0 Kc) [(1+4K^2 c^2)^{1/2} - 1] + \ln [1 + (1+4K^2 c^2)^{1/2}] - \frac{1}{4} \ln(1+4K^2 c^2) \} + O(N^{-2})$  (4.22)

и оценка асимптотики интеграла Лапласа приводят к известным /8/ выражениям для функций конечноразмерного подобия сферической модели Хусими - Темперли в окрестности фазового перехода первого рода:

$$W^s(y_v) = -\ln(ch y_v), \quad (4.23)$$

$$m_N^s(K, h) \simeq m_0(K) \operatorname{th} y_v. \quad (4.24)$$

Заметим, что в конечной по всем пространственным измерениям системе выражения (4.23), (4.24) справедливы также для сферической модели Берлина - Каца со взаимодействием ближайших соседей /27/.

Причину столь парадоксального поведения аппроксимирующего ансамбля, заключающегося в неаналитичности термодинамических функций при конечном числе частиц, следует искать в неправомерном отождествлении функции  $f_N^a(K, h)$ , см. (4.II), с плотностью термодинамического потенциала некоторой конечной аппроксимирующей системы в каноническом ансамбле. Действительно, как отмечалось в работе /22/,  $f_N^v(K, h; c)$ , скорее всего, представляет собой функционал Гинзбурга - Ландау без градиентного члена, т.е. соответствует случаю одного однородного параметра порядка. Этот функционал не является выпуклой функцией  $c \in \mathbb{R}^1$  при  $T < T_c$  ( $K > 1$ ), и поэтому точка  $c = \bar{c}_N(K, h)$ , в которой достигается точная нижняя грань, см. (4.II), меняется скачком при прохождении  $h$  через нуль. Связь функционала  $f_N^v(K, h; c)$  с термодинамическими функциями ансамбля с

фиксированным параметром порядка мы рассмотрим в следующем разделе.

### 5. Модифицированный аппроксимирующий ансамбль

Плотность совместного вероятностного распределения спинов  $\sigma_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ , в сферической модели с фиксированным значением  $m$  параметра порядка (намагниченности на один спин) по определению равна

$$p_N^m(\{\sigma_i = x_i\} | m) := [\Gamma_N(m)]^{-1} \delta\left(\sum_{i=1}^N x_i^2 - N\right) \delta\left(\sum_{i=1}^N x_i - mN\right). \quad (5.1)$$

Статистическая сумма  $\Gamma_N(m)$  в этом ансамбле имеет явный вид

$$\Gamma_N(m) = \begin{cases} (\pi N)^{-1/2} \pi^{N/2} [\Gamma(\frac{N-1}{2})]^{-1} [N(1-m^2)]^{(N-3)/2}, & |m| \leq 1, \\ 0, & |m| \geq 1. \end{cases} \quad (5.2)$$

Заметим, что это определение отличается несущественной нормировочной константой от принятого в работе /6/. Так как при фиксированной намагниченности фиксирована и энергия модели Хусими - Темперли (2.8), (2,9), то плотность термодинамического потенциала в этом ансамбле является энтропия на один спин:

$$\begin{aligned} k_B^{-1} S_N(m) &:= N^{-1} \ln \Gamma_N^s(m) = \\ &= \frac{N-3}{2N} \ln(1-m^2) + \frac{1}{2} \ln(2\pi e) - \frac{1}{N} \ln(2^{3/2} \pi N). \end{aligned} \quad (5.3)$$

Легко видеть, что статистическую сумму (3.10) для сферической модели в каноническом ансамбле Гиббса можно представить в виде

$$Z_N^s(K, h) = N \int_{-1}^1 dm e^{-h m N} \exp\{-N(k_B T)^{-1} [\epsilon(m) - T S_N(m)]\}, \quad (5.4)$$

где

$$\epsilon(m) = -\frac{1}{2} J m^2 \quad (5.5)$$

- плотность энергии взаимодействия при заданном значении  $m$  параметра порядка.

С другой стороны, для статистической суммы  $Z_N^v(K, h; c)$  в каноническом ансамбле с вариационным гамильтонианом (4.4) имеет место представление

$$\begin{aligned}
 Z_N^v(K, h; c) &= \\
 &= N \int_{-1}^1 dm e^{-h m N} \exp\{-N(k_B T)^{-1} [\epsilon(m) - T s_N(m)]\} \exp[-\frac{1}{2} K N (m-c)^2].
 \end{aligned}
 \tag{5.6}$$

Анализируя это выражение, мы приходим к выводу, что при больших  $N$  существенный вклад в вариационную свободную энергию дают только конфигурации с удельной намагниченностью  $m$  из  $\mathcal{O}(N^{-1/2})$ -окрестности значения  $m = \bar{m}_\infty(Kc+h)$ , где

$$\bar{m}_\infty(Kc+h) := 2(Kc+h) \{ [1 + 4(Kc+h)^2]^{1/2} + 1 \}^{-1}.
 \tag{5.7}$$

Учитывая уравнение самосогласования (4.8) в пределе  $N \rightarrow \infty$ , мы получаем, что существенный вклад в аппроксимирующую плотность свободной энергии дают только конфигурации с удельной намагниченностью  $m$  из  $\mathcal{O}(N^{-1/2})$ -окрестности ее предельного среднеполевого значения  $c = \bar{c}_\infty(K, h)$ . Так как при  $K > 1$  функция  $Z_N^v(K, 0; c)$  имеет два глобальных максимума по  $c$  в точках  $c = \pm |\bar{c}_\infty(K, 0)|$ , то при прохождении магнитного поля  $h$  через точку  $h = 0$  значение  $\bar{c}_\infty(K, h)$  меняется скачком от  $-m_0(K)$  до  $m_0(K)$ . В результате в плотность аппроксимирующей свободной энергии вклад дают только конфигурации из соответствующей окрестности точки  $m = \bar{c}_\infty(K, h)$ , что является причиной появления неаналитической зависимости от внешнего поля  $h$ , см. (4.19), даже при конечном числе частиц в системе. В точной же статистической сумме (5.4) при  $T < T_c$  и полях  $H \sim N^{-1}$  существенный вклад дают окрестности обеих точек  $m = \pm m_0(K)$  одновременно. При этом вес каждого вклада, соответствующего в термодинамическом пределе одной из двух чистых фаз, является аналитической функцией переменной  $y_v$ , см. (4.16), что обеспечивает аналитичность функции конечноразмерного подобия для свободной энергии (4.23). В частности, плотность намагниченности (4.24) конечной системы изменяется непрерывным образом от значения  $-m_0(K)$  до значения  $m_0(K)$  при изменении полевой переменной  $y_v$  от  $-\infty$  до  $\infty$ . Заметим, что такая же качественная картина поведения канонического ансамбля Гиббса для конечной ферромагнитной модели Изинга при фазовом переходе первого рода характерна и в случае близкого действия <sup>26/</sup>.

Описанное выше поведение системы с большим, но конечным числом частиц в окрестности фазового перехода первого рода можно смодели-

ровать и в аппроксимирующем ансамбле. Для этого достаточно учесть в статистической сумме вклад от всех тех (локальных) минимумов плотности вариационной свободной энергии  $f_N^v(K, h; c)$ , которые в термодинамическом пределе ( $N \rightarrow \infty$ ) превращаются в глобальные минимумы максимального типа функции  $f_\infty^v(K, h; c)$ . Здесь для классификации минимумов мы используем терминологию Эллиса и Ньюмана [28]. Пусть в окрестности точки  $c = \bar{c}_{\alpha, \infty}(K, h)$  глобального минимума  $\alpha$  имеет место разложение

$$(k_B T)^{-1} f_\infty^v(K, h; c) = (k_B T)^{-1} f_\infty^v(K, h; \bar{c}_{\alpha, \infty}) + \frac{\lambda_\alpha}{(2k_\alpha)!} (c - \bar{c}_{\alpha, \infty})^{2k_\alpha} + o[(c - \bar{c}_{\alpha, \infty})^{2k_\alpha}]. \quad (5.8)$$

Число  $k_\alpha = k_\alpha(K, h)$  называется "типом", а  $\lambda_\alpha = \lambda_\alpha(K, h) > 0$  - "силой" минимума  $\alpha$ . Максимальный тип определяется как наибольшее из чисел  $\{k_\alpha\}$ . Итак, пусть  $\{\bar{c}_{\alpha, \infty}(K, h), \alpha = 1, \dots, M\}$  - множество всех точек, в которых предельная функция  $f_\infty^v(K, h; c)$  достигает глобального минимума максимального типа по  $c \in \mathbb{R}^1$  и пусть  $\{\bar{c}_{\alpha, N}(K, h), \alpha = 1, \dots, M\}$  - соответствующие минимумы  $f_N^v(K, h; c)$  при достаточно больших  $N$ , причем

$$\bar{c}_{\alpha, N}(K, h) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \bar{c}_{\alpha, \infty}(K, h), \quad \alpha = 1, \dots, M. \quad (5.9)$$

Заметим, что плотность совместного вероятностного распределения спинов  $\sigma_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ , в вариационном ансамбле:

$$p_N^v(\{\sigma_i = x_i\} | K, h; c) = [Z_N^v(K, h; c)]^{-1} \delta\left(\sum_{i=1}^N x_i^2 - N\right) \exp\left[-\mathcal{H}_N^v(\{x_i\}; c) / k_B T\right], \quad (5.10)$$

можно выразить через плотность (5.1):

$$p_N^v(\{\sigma_i = x_i\} | K, h, c) = \int_{-1}^1 dm \mathcal{L}_N(K, h, c | m) p_N^m(\{\sigma_i = x_i\} | m), \quad (5.11)$$

с помощью ядра перехода

$$\mathcal{L}_N(K, h, c | m) =$$

$$\begin{aligned}
&= [Z_N^v(K, h, c)]^{-1} \exp\{-N(k_B T)^{-1} [\epsilon(m) - hm - Ts_N(m) + \frac{1}{2} J(m-c)^2]\} \simeq \\
&\simeq \left(\frac{\lambda N}{2\pi}\right)^{1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2} \lambda N [m - \bar{m}_\infty(Kc+h)]^2\right\}.
\end{aligned} \tag{5.12}$$

Здесь

$$\lambda = [1 + \bar{m}_\infty^2(Kc+h)][1 - \bar{m}_\infty^2(Kc+h)]^{-2} \geq 1 \tag{5.13}$$

при всех значениях параметров  $K$  и  $h$ , в том числе и в критической точке. Из (5.11), (5.12) видно, что при  $K > 1$  плотность совместного вероятностного распределения спинов в стандартном аппроксимирующем ансамбле зависит явным образом от выбранного минимума  $\alpha$ :

$$\begin{aligned}
P_N^\alpha(\{\sigma_i = x_i\} | K, h, \alpha) &:= P_N^v(\{\sigma_i = x_i\} | K, h, \bar{c}_{\alpha, N}) = \\
&= \int_{-1}^1 dm \mathcal{L}_N(K, h, \bar{c}_{\alpha, N} | m) P_N^m(\{\sigma_i = x_i\} | m) \simeq \\
&\simeq \left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{1}{2} \lambda y^2} P_N^m(\{\sigma_i = x_i\} | \bar{c}_{\alpha, N} + y N^{-1/2}).
\end{aligned} \tag{5.14}$$

Модифицированный аппроксимирующий ансамбль определим следующим образом: учтем вклад в плотность совместного вероятностного распределения от всех минимумов  $\alpha = 1, \dots, M$ , положив

$$P_N^\alpha(\{\sigma_i = x_i\} | K, h) := \sum_{\alpha=1}^M \mu_\alpha(K, h) P_N^v(\{\sigma_i = x_i\} | K, h; \bar{c}_{\alpha, N}), \tag{5.15}$$

где

$$\mu_\alpha(K, h) = Z_N^v(K, h, \bar{c}_{\alpha, N}) / \bar{Z}_N^\alpha(K, h) \tag{5.16}$$

и

$$\bar{Z}_N^\alpha(K, h) = \sum_{\alpha=1}^M Z_N^v(K, h, \bar{c}_{\alpha, N}) \tag{5.17}$$

представляет собой статистическую сумму модифицированного аппроксимирующего ансамбля. Для соответствующей плотности свободной энергии конечной системы ( $N \gg 1$ ) получим

$$(k_B T)^{-1} \bar{f}_N^\alpha(K, h) = -N^{-1} \ln \left\{ \sum_{\alpha=1}^M \exp[-N(k_B T)^{-1} f_N^v(K, h; \bar{c}_{\alpha, N}(K, h))] \right\}. \tag{5.18}$$



Очевидно, если у функции  $f_N^v(K, h; c)$  существует единственный глобальный минимум максимального типа, то (5.18) сводится к предыдущему определению (4.11). Допустим, что для некоторых  $K$  при  $h = 0$  существует два или более глобальных минимума максимального типа. Поскольку для любого решения  $c = c_{\alpha, N}(K, h)$  уравнения самосогласования при конечном  $N$  справедливо соотношение

$$-\frac{d}{dh} f_N^v(K, h; c_{\alpha, N}(K, h)) = c_{\alpha, N}(K, h), \quad (5.19)$$

то при  $h \rightarrow 0$

$$(k_B T)^{-1} f_N^v(K, h; \bar{c}_{\alpha, N}(K, h)) \approx (k_B T)^{-1} f_N^v(K, 0; \bar{c}_{\alpha, N}(K, 0)) - h \bar{c}_{\alpha, N}(K, 0). \quad (5.20)$$

Тогда из (5.18) при  $h = y N^{-1}$  получаем

$$\begin{aligned} \bar{f}_N^a(K, y N^{-1}) &\approx \inf_c f_N^v(K, 0; c) - \\ &- N^{-1} \ln \left\{ \sum_{\alpha=1}^M \exp[y \bar{c}_{\alpha, \infty}(K, 0)] \right\}. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Так как для сферической модели Хусими - Темперли при  $K > 1$  и  $h = 0$  функция (4.7) в пределе  $N \rightarrow \infty$  имеет два глобальных минимума типа I и силы  $\lambda = 2K(K-1)(2K-1)^{-1}$  в точках  $c = \pm m_0(K)$ , то, полагая в (5.21)  $y = y_v / m_0(K)$ , для функции конечноразмерного подобия в окрестности фазового перехода первого рода воспроизведем точный результат (4.23).

Примечательно то, что коэффициенты  $\mu_\alpha(K, h)$ , см. (5.16), в линейной комбинации (5.15) конфигураций из окрестностей двух глобальных минимумов равны

$$\mu_\pm(K, y_v / m_0 N) = e^{\pm y_v / ch y_v}, \quad (5.22)$$

где " $\pm$ " соответствует  $\bar{c}_{\alpha, \infty}(K, 0) = \pm m_0(K)$ . Эти выражения совпадают с соответствующими коэффициентами в линейной комбинации чистых фаз, представляющей при  $T < T_c$  предельные гиббсовские состояния как для сферической модели с взаимодействием ближайших соседей, так и для модели Изинга - Хусими - Темперли /29/.

Подчеркнем, наконец, что определение (5.18) восстанавливает строгой выпуклость вниз аппроксимирующей свободной энергии Гельмгольца

$$(k_B T)^{-1} \bar{a}_N^a(K, m) := \sup_{h \in \mathbb{R}^1} \left\{ (k_B T)^{-1} \bar{f}_N^a(K, h) + h m \right\} \quad (5.23)$$

по намагниченности  $m$  при  $T < T_c$ . Действительно, теперь уравнение для определения магнитного поля  $h = y_V / m_0(K)N$  при фиксированной намагниченности  $m \in (-m_0, m_0)$  имеет единственное решение

$$h = (2m_0N)^{-1} \ln \frac{m_0 + m}{m_0 - m}, \quad (5.24)$$

которое приводит к выражению

$$(k_B T)^{-1} \bar{a}_N^\alpha(K, m) \simeq (k_B T)^{-1} f_N(K, 0) + (2N)^{-1} \left[ \left(1 - \frac{m}{m_0}\right) \ln \left(1 - \frac{m}{m_0}\right) + \left(1 + \frac{m}{m_0}\right) \ln \left(1 + \frac{m}{m_0}\right) \right]. \quad (5.25)$$

Как легко проверить,

$$(k_B T)^{-1} \frac{\partial^2}{\partial m^2} \bar{a}_N^\alpha(K, m) = \frac{1}{N} (m_0^2 - m^2)^{-1} > 0, \quad (5.26)$$

так что в термодинамическом пределе  $\bar{a}_N^\alpha(K, m)$  стремится к функции  $\bar{a}_\infty(K, m)$  с горизонтальным плоским участком при  $m \in [-m_0, m_0]$ .

## 6. Обсуждение результатов

Во-первых, мы показали, что спиновую модель из конечного числа частиц со взаимодействием типа Хусими - Темперли можно рассматривать как дальнедействующий предел модели в конечной гиперкубической области с периодическими граничными условиями и степенным законом спада взаимодействия на больших расстояниях. Это предельное соотношение позволяет естественным образом распространить законы конечноразмерного подобию на рассматриваемый класс моделей.

Во-вторых, на примере точно решаемой сферической модели Хусими-Темперли было показано, что традиционное определение  $1/1-4$  плотности аппроксимирующей свободной энергии для конечной системы приводит к неправильным конечноразмерным эффектам как в двухфазной области  $T < T_c$ ,  $H = O(N^{-1})$ , так и в окрестности критической точки,  $T = T_c + O(N^{-1/2})$ ,  $H = O(N^{-3/4})$ . Этот результат является следствием плохого определения плотности совместного вероятностного распределения спинов в аппроксимирующем ансамбле для конечной системы, при котором искусственно игнорируется множество существенных конфигураций, соответствующих (в термодинамическом пределе) одной из чистых низкотемпературных фаз. Подобное построение ограниченного вероятностного распределения характерно для известного подхода (см., например, [30]) к теории метастабильных состояний.

Далее, нами предложен модифицированный вариант, см. (5.15), аппроксимирующего ансамбля, в котором учитываются все существенные конфигурации при  $T < T_c$  и воспроизводятся точные функции конечно-размерного подобию для плотности свободной энергии и намагниченности в окрестности фазового перехода первого рода. Этот вариант можно обосновать при помощи точного интегрального соотношения (см. также (4.9))

$$Z_N^S(K, h) = \left( \frac{KN}{2\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dc Z_N^V(K, h; c) \quad (6.1)$$

между статистической суммой исходной модели,  $Z_N^S(K, h)$ , и вариационной статистической суммой  $Z_N^V(K, h; c)$ . Заметим, что соотношения типа (6.1) обычно не формулируются в качестве условия применимости метода аппроксимирующего гамильтониана [1-4], см. также подходы, развитые в [31, 32]. Независимо от этого метода ряд авторов, см., например, [29, 33-39], использовали интегральные тождества, эквивалентные тождеству (6.1) или его конечномерным обобщениям, для линеаризации гамильтониана взаимодействия типа Хусими - Темперли. После такой линеаризации легко вычислялась "вариационная" статистическая сумма  $Z_N^V(K, h; c)$ , и в результате получалось удобное для асимптотического анализа интегральное представление для статистической суммы исследуемой модели. Ясно, см. (5.6), что в вариационном ансамбле учитываются только нормальные флуктуации спинов в эффективном среднем поле, т.е. флуктуации величины  $O(N^{-1/2})$  в параметре порядка  $m_N$ . В термодинамическом пределе эти флуктуации становятся несущественными и плотность свободной энергии Гельмгольца  $\bar{a}_\infty(T, m)$ , определенная с помощью преобразования Лежандра (5.23), принимает вид

$$\bar{a}_\infty(T, m) = \begin{cases} \epsilon(m) - TS_\infty(m) & , |m| \geq m_0(T), \\ \epsilon(m_0) - TS_\infty(m_0) & , |m| \leq m_0(T). \end{cases} \quad (6.2)$$

Заметим, что некоторыми авторами (см., например, [33, 40, 41]) невыпуклая вниз по  $m$  при  $T < T_c$  функция

$$a_N(T, m) = \epsilon(m) - TS_N(m) \quad (6.3)$$

интерпретируется как плотность свободной энергии Гельмгольца для конечной системы в ансамбле с фиксированной удельной намагниченностью  $m$ . Так как предельная функция  $a_\infty(T, m)$  также является невыпуклой вниз по  $m$  при  $T < T_c$ , то отсюда делается вывод о термодинамической неэквивалентности ансамбля Гиббса, фиксированное

$h$ , и ансамбля Гельмгольца, фиксированное  $m$  (о нарушении термодинамической эквивалентности см. /42/). Следует заметить, однако, что со статистической точки зрения интерпретация функции (6.3) как плотности термодинамического потенциала Гельмгольца не является последовательной: при фиксированном значении  $N/m$  суммарного спина в моделях типа Хусими - Темперли фиксировано и значение  $NE(m)$  их энергии, вследствие чего вероятностное распределение (5.1) не зависит от температуры  $T$  и логарифм его нормировки (5.2) определяет энтропию  $NS_N(m)$  в микроканоническом ансамбле, а не свободную энергию  $Na_N(T, m)$  в ансамбле Гельмгольца. Если несмотря на это на основе феноменологических соображений примем выражение (6.3) в качестве плотности свободной энергии Гельмгольца, то причина термодинамической неэквивалентности двух ансамблей легко объяснима: в ансамбле Гиббса при  $T < T_c$  равновесное состояние является смешанным, а в ансамбле Гельмгольца оно построено как чистая фаза. Последняя является метастабильной или абсолютно нестабильной при  $T < T_c$  и  $m \in (-m_0, m_0)$ , в зависимости от знака второй производной функции  $a_N(T, m)$  по  $m$ .

Очевидно, модели типа Хусими - Темпера, для которых граф взаимодействий является полным (все частицы являются эквивалентными соседями друг другу), не в состоянии описывать смешанные состояния в виде пространственно-разделенных чистых фаз. Поэтому если рассматривать теорию среднего поля в качестве приближения для реальных систем с близкодействием, то ясно, что она может привести к качественно правильным термодинамическим функциям в следующих случаях: а) в однофазной области; б) в многофазной области, если в рассматриваемом ансамбле Гиббса каждая чистая фаза может реализоваться в виде отдельной копии системы.

На то обстоятельство, что ансамбли Гиббса и Гельмгольца являются неэквивалентными по отношению к конечноразмерным свойствам системы в окрестности критической точки, было указано в работе /43/. Обсуждение этого вопроса выходит за рамки настоящей работы, так как для правильного учета критических флуктуаций в аппроксимирующей ансамбль необходимо включить континуум значений вариационного параметра  $c$  в окрестности точки  $c = 0$ , что эквивалентно возврату к точному интегральному представлению (6.1) для статистической суммы исходной модели.

Автор благодарен В.А. Загребнову и В.Б. Приезжаву за полезные обсуждения.

## Литература

1. N.N. Bogolubov (Jr). *Physica*, 32 (1966), 933.
2. Н.Н. Боголюбов (мл.). *Метод исследования модельных гамильтонианов*. М., Наука, 1974.
3. Н.Н. Боголюбов (мл.), И.Г. Бранков, В.А. Загребнов, А.М. Курбатов, Н.С. Тончев. *Метод аппроксимирующего гамильтониана в статистической физике*. София, БАН, 1981.
4. Н.Н. Боголюбов (мл.), И.Г. Бранков, В.А. Загребнов, А.М. Курбатов, Н.С. Тончев. *УМН*, 39 (1984), 3.
5. E.H. Lieb, C.J. Thompson, *J. Math. Phys.*, 10 (1969), 1403.
6. H. Silver, N.E. Frankel, B.W. Ninham. *J. Math. Phys.*, 13 (1972), 468.
7. R. Botet, R. Jullien, P. Pfeuty. *Phys. Rev. Lett.*, 49 (1982), 478.
8. J.G. Brankov, D.M. Danchev. *Physica*, A158 (1989), 842.
9. G.S. Joyce. *Phys. Rev.*, 146 (1966), 349.
10. G.S. Joyce. In: *Phase Transitions and Critical Phenomena* C. Domb and M.S. Green, eds. (Academic Press, New York, 1972) vol. 2, p. 375.
11. H.W. Lewis, G. H. Wannier. *Phys. Rev.*, 88 (1952), 682.
12. M.E. Fisher. In: *Critical Phenomena, Lecture Notes in Physics*, F.J. W. Hahne, ed. (Springer-Verlag, Berlin, 1983). vol 186, pp. 1-139.
13. M.E. Fisher, S. Ma, B.G. Nickel. *Phys. Rev. Lett.*, 29 (1972), 917.
14. M.E. Fisher, V. Privman. *Commun. Math. Phys.*, 103 (1986), 527.
15. J.G. Brankov, N.S. Tonchev. *J. Stat. Phys.*, 52 (1988), 143.
16. J.G. Brankov. *J. Stat. Phys.*, 56 (1989), 309.
17. J.G. Brankov, D.M. Danchev (to appear).
18. M.E. Fisher. In: *Critical Phenomena, Proc. Enrico Fermi Int. School of Physics*, M.S. Green, ed (Academic Press, New York, 1971) vol. 51, p. 1.
19. V. Privman, M.E. Fisher. *Phys. Rev.*, B30 (1984), 322.
20. M.L. Glasser, I.J. Zucker. *Theoret. Chem. Adv. Persp.*, 5 (1980), 67.
21. K. Binder, M. Nauenberg, V. Privman, A.P. Young. *Phys. Rev.*, B31 (1985), 1498.
22. R. Botet, R. Jullien. *Phys. Rev.*, B28 (1983), 3955.
23. K. Binder. *Ferroelectrics*, 73 (1987), 43.
24. T.H. Berlin, M. Kas. *Phys. Rev.*, 86 (1952), 821.
25. М. Абрамовиц, И. Стиган. *Справочник по специальным функциям*. М., Наука, 1979.

26. V. Privman, M.E. Fisher. *J. Stat. Phys.*, 33 (1983), 385.
27. J.G. Brankov, D.M. Danchev. *J. Phys.*, A20 (1987), 4901.
28. R.S. Ellis, C.M. Newman. *J. Stat. Phys.*, 19 (1978), 149.
29. И. Г. Бранков, В.А. Загребнов, Н.С. Тончев. *ТМФ*, 66 (1986), 109.
30. O. Penrose, J.L. Lebowitz. In: *Studies in Statistical Mechanics*, E.W. Montroll and J.L. Lebowitz, eds. (North Holland, Amsterdam, 1979 ) vol 7, p. 293.
31. L.W.J. Den Ouden, H.W. Capel, J.H.H. Perk. *Physica*, 85A (1976), 425.
32. M. Kardar. *Phys. Rev. Lett.*, 51 (1983), 523.
33. S. Katsura. *Progr. Theor. Phys.*, 13 (1955), 571.
34. M. Kac. *Phys. Fluids*, 2 (1959), 8.
35. G.A. Baker, Jr. *Phys. Rev.*, 122, 1961, 1477; 126 (1962), 2071.
36. B. Mühlischlegel, H. Zittartz. *Z. Physik*, 175 (1963), 553.
37. G.G. Emch, H.J.F. Khops. *J. Math. Phys.*, 11 (1970), 3008.
38. T. Niemeijer. *Physica*, 48 (1970), 467.
39. N. Angelescu, V.A. Zagrebнов. *J. Stat. Phys.*, 41 (1985), 323.
40. R.B. Griffiths. *Phys. Rev.*, 152 (1966), 240.
41. N. Angelescu, G. Nenciu, N.S. Tonchev. *Commun. JINR*, EI7-82-798, Dubna, 1982.
42. В.А. Загребнов, Вл. В. Папоян. *ТМФ*, 69 (1986), 420.
43. E. Eisenriegler, R. Tomaschitz. *Phys. Rev.*, B35 (1987), 4876.

Рукопись поступила в издательский отдел  
6 февраля 1990 года.