ЖЭТФ, 2004, том 125, вып. 6, стр. 1349–1366

НИЖНИЕ И ВЕРХНИЕ ГРАНИЦЫ ДЛЯ КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ В ТРЕХМЕРНОЙ АНИЗОТРОПНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

М. А. Юрищев *

Институт проблем химической физики Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 4 декабря 2003 г.

Рассмотрена модель Изинга на простой кубической решетке с константой взаимодействия J вдоль одного пространственного направления и константами J' вдоль двух других направлений. С помощью трансферматричных методов расширенной феноменологической ренормгруппы [18, 19] получены двухсторонние оценки для критической температуры модели при $J'/J \leq 1$. Найденные границы монотонно сужаются с уменьшением параметра J'/J и дают оценки, которые улучшают имеющиеся в литературе данные по температуре фазового перехода анизотропной трехмерной решетки Изинга.

PACS: 05.50.+q, 05.70.Jk, 05.10.Cc, 75.40.Cx

1. ВВЕДЕНИЕ

Трехмерная модель Изинга, в отличие от двумерной, не решена точно. В настоящее время ее исследование проводят всевозможными приближенными методами. Неослабевающий интерес к данной модели связан с наличием в ней фазового перехода, свойства которого, благодаря феномену универсальности, позволяют одновременно описывать критическое поведение в широком круге веществ, включая легкоосные магнетики, бинарные сплавы, простые жидкости и их смеси, растворы полимеров, субъядерную материю и т. д. [1–3].

Исследование фазового перехода начинают с определения координат критической точки, при которой он происходит. В настоящее время наиболее качественные оценки температуры фазового перехода, T_c, в полностью изотропной трехмерной решетке Изинга получены с использованием высокотемпературных рядов [4], ренормгрупповыми методами Монте-Карло [5] и, самые лучшие, с помощью анализа в рамках теории конечноразмерного скейлинга данных монте-карловских моделирований на кубах $L \times L \times L$ [6, 7]:

$$K_c = 0.22165459(10),$$

т. е.

$$k_B T_c/J = 1/K_c = 4.5115240(21).$$

Таким образом, благодаря численным расчетам сейчас точно известны уже по крайней мере первые пять–шесть значащих цифр для критической температуры простой кубической решетки Изинга:

$$k_B T_c/J = 4.51152\ldots \tag{1}$$

Отметим, что для критической температуры в изотропной модели существуют строгие верхние оценки [8]. Но, увы, эти оценки слишком грубы по сравнению с численным результатом (1).

В случае анизотропной решетки Изинга для температуры фазового перехода найдена асимптотически точная формула [9]

$$\frac{k_B T_c}{J} = 2\left[\ln\left(\frac{J}{2J'}\right) - \ln\ln\left(\frac{J}{2J'}\right) + O(1)\right]^{-1}, \quad J'/J \to 0. \tag{2}$$

Это соотношение устанавливает закон логарифмически медленного убывания критической температуры с ростом анизотропии решетки. Однако в наиболее важной для приложений области $10^{-3} \leq J'/J \leq 1$ точность формулы (2) невелика (см. разд. 6).

*E-mail: yur@icp.ac.ru

Для пространственно-анизотропной модели Изинга имеются также численные оценки величины $k_B T_c/J$, полученные с использованием высокотемпературных рядов [10]. К сожалению, из-за конечного числа членов в таких рядах погрешности оценок нарастают с уменьшением отношения J'/J и в итоге сводят результаты на нет уже при $J'/J \leq 10^{-2}$.

Аналогичные трудности присущи всем другим подходам, в основе которых лежит применение полностью конечных подсистем. Так, моделирования методом Монте-Карло на параллелепипедах $L \times L \times pL$ не позволили авторам работы [11] продвинуться в расчетах величины $k_B T_c/J$ до значений $J'/J < 3 \cdot 10^{-3}$. При этом ошибки существенны, начиная с $J'/J < 10^{-1}$. Причина кроется прежде всего в недостаточной вытянутости параллелепипедов (у них $p \leq 6$).

Наоборот, методы, основанные на использовании подсистем, бесконечно протяженных вдоль направления с превалирующим взаимодействием, дают результаты тем точнее, чем сильнее анизотропия решетки. Так, например, уже простейшая аппроксимация исходной решетки набором линейных цепочек в молекулярном поле [12] (при этом доминирующие внутрицепочечные взаимодействия J учитываются точно, а слабые межцепочечные связи J' — приближенно, в рамках теории среднего поля) приводит к правильной асимптотической зависимости (2) для критической температуры. Успех обусловлен, разумеется, тем, что цепочечные кластеры отражают физическую ситуацию в пространственно-анизотропной системе.

Привлечение более совершенных, чем приближение молекулярного поля, методов, а также систематическое наращивание поперечных размеров бесконечно вытянутых подсистем ведет к повышению точности оценок критической температуры [13–17]. Эти результаты будут подробно обсуждены ниже.

В предлагаемой работе для расчета температуры фазового перехода анизотропной модели Изинга применены не так давно обнаруженные улучшенные варианты феноменологической ренормгруппы [18, 19]. Множественность вариантов позволяет отобрать среди них такие, которые дают не только верхние, но и нижние оценки. При реализации методов использованы цепочечные кластеры $L \times L \times \infty$ с поперечными размерами $L \leq 4$. Для фактического решения задач на собственные значения и собственные векторы соответствующих крупномасштабных полностью заполненных трансфер-матриц, достигающих размеров 65536×65536, проведена теоретико-групповая редукция, которая возможна в силу симметрии подсистем.

Оставшаяся часть статьи устроена следующим образом. В разд. 2 приведены уравнения расширенной феноменологической ренормгруппы. Разд. 3 содержит формулы, пригодные для прямого расчета на компьютере восприимчивостей и производной обратной корреляционной длины, которые входят в ренормгрупповые уравнения. В разд. 4 проведено тестирование развитых методов на примере точнорешаемой двумерной анизотропной решетки Изинга. Расчеты критической температуры для трехмерной модели Изинга представлены в разд. 5. В разд. 6 дано обсуждение результатов, полученных разными методами. Итоги выполненной работы подведены в разд. 7, там же намечены перспективы для дальнейших исследований. Наконец, в Приложение вынесены минимально необходимые сведения по теоретико-групповой редукции трансфер-матриц.

2. МЕТОДЫ РАСШИРЕННОЙ ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЙ РЕНОРМГРУППЫ И УРАВНЕНИЯ ДЛЯ T_c

В соответствии с теорией конечноразмерного скейлинга [20–22] (см. также обзоры [23, 24]) сингулярная часть плотности безразмерной свободной энергии f_s и обратная корреляционная длина κ вблизи точки фазового перехода удовлетворяют функциональным уравнениям

$$f_s(t, h, 1/L) = \ell^{-d} f_s(t\ell^{y_t}, h\ell^{y_h}, \ell/L), \qquad (3)$$

$$\kappa(t, h, 1/L) = \ell^{-1} \kappa(t\ell^{y_t}, h\ell^{y_h}, \ell/L). \qquad (4)$$

Здесь d — размерность пространства, $t = (T - T_c)/T_c$ — приведенная температура, h — нормированное внешнее магнитное поле, L — характерный линейный размер конечной или частично конечной системы, y_t и y_h — соответственно термальный и магнитный критические индексы, ℓ — параметр масштабного преобразования Каданова.

Соотношения (3) и (4) представляют собой обобщенные однородные уравнения [25]. Их решение с помощью стандартных подстановок для ℓ позволяет найти явные зависимости различных характеристик системы при подходе к критической точке $t = h = 1/L = 0$ по разным направлениям. Так, полагая $\ell = L$, из уравнения (4) получаем, что в точке фазового перехода бесконечной системы, $t = h = 0$, обратная корреляционная длина конечной подсистемы равна

$$\kappa_L(T_c) \equiv \kappa(0, 0, 1/L) = L^{-1} \kappa(0, 0, 1). \qquad (5)$$

Беря две подсистемы с размерами L и L', т. е. кластерную пару (L, L'), из (5) приходим к уравнению

$$L\kappa_L(T_c) = L'\kappa_{L'}(T_c), \tag{6}$$

которое в обычном методе феноменологической ренормгруппы [26–29] служит для оценок критической температуры.

Продифференцируем равенства (3) и (4) m раз по скейлинговому полю h:

$$f_s^{(m)}(t, h, 1/L) = \ell^{my_h - d} f_s^{(m)}(t\ell^{y_t}, h\ell^{y_h}, \ell/L), \tag{7}$$

$$\kappa^{(m)}(t, h, 1/L) = \ell^{my_h - 1}\kappa^{(m)}(t\ell^{y_t}, h\ell^{y_h}, \ell/L). \tag{8}$$

Из комбинаций этих соотношений можно составить новые уравнения для T_c, которые соответствуют расширенным версиям феноменологической ренормгруппы.

На тестовых примерах полностью изотропных решеточных моделей автором [18, 19] было установлено, что ренормгрупповое уравнение

$$L^{1-d}\kappa_L''/\chi_L\big|_{T_c} = (L')^{1-d}\kappa_{L'}''/\chi_{L'}\big|_{T_c} \tag{9}$$

приводит к нижним оценкам для критической температуры. С другой стороны, уравнение

$$L^{-d}\chi_L^{(4)}/\chi_L^2\big|_{T_c} = (L')^{-d}\chi_{L'}^{(4)}/\chi_{L'}^2\big|_{T_c}, \tag{10}$$

как и (6), дает верхние оценки. Однако при одних и тех же размерах подсистем точность оценок, полученных с помощью уравнения (10), лучше.

В равенствах (9) и (10)

$$\chi_L(T) \equiv \partial^2 f_L/\partial h^2\big|_{h=0} = f_s^{(2)}(t, 0, 1/L) \tag{11}$$

есть начальная линейная восприимчивость подсистемы,

$$\chi_L^{(4)}(T) \equiv \partial^4 f_L/\partial h^4\big|_{h=0} = f_s^{(4)}(t, 0, 1/L) \tag{12}$$

— начальная нелинейная восприимчивость и

$$\kappa_L''(T) \equiv \partial^2\kappa/\partial h^2\big|_{h=0} = \kappa^{(2)}(t, 0, 1/L). \tag{13}$$

В приведенных соотношениях f_L представляет собой полную свободную энергию в расчете на один узел подсистемы:

$$f_L = f_0 + f_s, \tag{14}$$

где f_0 — регулярная часть («фон») плотности свободной энергии системы с $L = \infty$.

Чтобы получить возможность решать уравнения (9) и (10), нужно их дополнить еще выражениями для восприимчивостей и второй производной обратной корреляционной длины по внешнему полю в точке $h = 0$. Этому посвящен следующий раздел.

3. РАСЧЕТ НАЧАЛЬНЫХ ВОСПРИИМЧИВОСТЕЙ χ_L И $\chi_L^{(4)}$ И ПРОИЗВОДНОЙ κ_L''

Гамильтониан пространственно-анизотропной модели Изинга представим в виде

$$\mathcal{H} = -J\sum_{\langle i,j\rangle} S_iS_j - J'\sum_{[i,j]} S_iS_j - H\sum_i S_i, \tag{15}$$

где спиновые переменные S_i локализованы в узлах решетки и принимают значения $+1$ или -1, H — магнитное поле. Суммирования $\langle i,j\rangle$ и $[i,j]$ идут по парам ближайших соседей вдоль пространственных направлений с константами взаимодействия соответственно J и J'.

Для расчета термодинамических характеристик подсистем на решетках $L^{d-1}\times\infty$, бесконечно протяженных в J-направлении, введем трансфер-матрицу V с элементами

$$\langle S_1, \ldots, S_n|V|S_1', \ldots, S_n'\rangle = \exp\left[K\sum_{i=1}^{n} S_iS_i' + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{2}K'\sum_{[i,j]}(S_iS_j + S_i'S_j') + \frac{1}{2}h\sum_{i=1}^{n}(S_i + S_i')\right]. \tag{16}$$

Здесь $n = L^{d-1}$ — число цепочек в подсистеме, $K = J/k_BT$, $K' = J'/k_BT$, $h = H/k_BT$, а S_i и S_i' — теперь спиновые переменные в узлах соседних поперечных слоев решетки $L^{d-1}\times\infty$. Для исключения нежелательных поверхностных явлений будем рассматривать подсистемы с периодическими граничными условиями в их поперечных направлениях. Трансфер-матрица V является вещественной, симметричной, полностью заполненной матрицей, все элементы которой положительны.

Отметим, что трансфер-матрицу с элементами (16) можно записать в виде

$$V = U^{1/2}V_0U^{1/2}, \tag{17}$$

где $V_0 = V\big|_{h=0}$ — трансфер-матрица, соответствующая модели в нулевом внешнем поле. В равенстве (17)

$$U = e^{hM} = 1 + Mh + \frac{1}{2}M^2h^2 + \ldots \tag{18}$$

есть диагональная матрица, в которой оператор магнитного момента слоя равен

$$M = \sigma_1 + \sigma_2 + \ldots + \sigma_n, \tag{19}$$

где

$$\sigma_i = 1 \times 1 \times \ldots \times \sigma^z \times \ldots \times 1, \qquad (20)$$

причем в этом произведении из n сомножителей матрица Паули σ^z стоит на i-м месте среди единичных матриц второго порядка.

Как известно (см. [26–29] и имеющиеся там ссылки на более ранние работы), безразмерная плотность свободной энергии связана с наибольшим собственным значением Λ_1 трансфер-матрицы соотношением

$$f_L = L^{1-d} \ln \Lambda_1, \qquad (21)$$

а обратная корреляционная длина в продольном направлении системы $L^{d-1} \times \infty$ равна

$$\kappa_L = \ln(\Lambda_1/|\Lambda_2|), \qquad (22)$$

где Λ_2 — второе по величине наибольшее собственное значение трансфер-матрицы V. Аналогичные формулы имеют место и для модели в отсутствие внешнего поля с заменой $\Lambda_i \to \lambda_i$, где λ_i — собственные значения трансфер-матрицы V_0. Таким образом, для определения критической температуры в рамках стандартной теории феноменологической ренормгруппы (т. е. по уравнению (6)) необходимо решать лишь частичную задачу на собственные значения матрицы V_0.

Трансфер-матрица (V или V_0) представляет собой конечную матрицу (размером $N \times N$, где $N = 2^n$) с положительными элементами. Поэтому в силу теоремы Перрона [30] ее наибольшее собственное значение не вырождено (и положительно).

В модели Изинга второе по величине наибольшее собственное значение λ_2 также не вырождено. Это следует, например, из того, что в q-позиционной модели Поттса второе старшее собственное значение $(q-1)$-кратно вырождено (см., например, [31, с. 441]), а модели Изинга отвечает $q = 2$.

Чтобы получить точные формулы для восприимчивостей χ_L и $\chi_L^{(4)}$ и второй производной κ_L'' в нулевом внешнем поле, используем теорию возмущений (для невырожденных уровней λ_1 и λ_2). С этой целью разложим полную (т. е. с учетом внешнего поля) трансфер-матрицу V в ряд по степеням h до членов четвертого порядка включительно:

$$V = V_0 + hV_1 + h^2V_2 + h^3V_3 + h^4V_4 + O(h^5). \qquad (23)$$

В этом равенстве выражения для матриц V_s следуют из (16). Их можно представить также в виде

$$V_1 = \frac{1}{2}(MV_0 + V_0M), \qquad (24)$$

$$V_2 = \frac{1}{2!\,2^2}(M^2V_0 + 2MV_0M + V_0M^2) \qquad (25)$$

и т. д. В дальнейшем при использовании трансформационных свойств полезно помнить, что в матрицы V_s с четным номером s входят члены, содержащие четное число операторов M, а с нечетным s — нечетное их число.

Пусть Ψ_i — собственные векторы невозмущенной трансфер-матрицы V_0, которые соответствуют ее собственным значениям $\lambda_1 < |\lambda_2| < \ldots$ По теории возмущений с учетом поправок второго порядка имеем

$$\Lambda_1 = \lambda_1 + \left[(V_2)_{11} + {\sum_k}' \frac{(V_1)_{1k}^2}{\lambda_1 - \lambda_k}\right] h^2 + O(h^4), \qquad (26)$$

где $(V_s)_{ij} = \Psi_i^+ V_s \Psi_j$. Штрих у знака суммы означает пропуск сингулярных слагаемых (здесь с $k = 1$). Тогда, руководствуясь определением (11) и принимая во внимание выражения (21) и (26), получаем точную формулу для начальной линейной восприимчивости:

$$\chi_L = \frac{2}{L^{d-1}\lambda_1}\left[(V_2)_{11} + {\sum_k}' \frac{(V_1)_{1k}^2}{\lambda_1 - \lambda_k}\right]. \qquad (27)$$

Собирая все члены четвертого порядка ряда теории возмущений для Λ_1, аналогичным образом находим выражение

$$\begin{aligned}
\chi_L^{(4)} = \frac{24}{L^{d-1}\lambda_1} \Bigg\{ & (V_4)_{11} + {\sum_k}' \frac{(V_2)_{1k}^2}{\lambda_1 - \lambda_k} + \\
& + 2{\sum_k}' \frac{(V_1)_{1k}(V_3)_{1k}}{\lambda_1 - \lambda_k} + 2{\sum_{k,l}}' \frac{(V_1)_{1k}(V_1)_{kl}(V_2)_{l1}}{(\lambda_1 - \lambda_k)(\lambda_1 - \lambda_l)} + \\
& + {\sum_{k,l}}' \frac{(V_1)_{1k}(V_2)_{kl}(V_1)_{l1}}{(\lambda_1 - \lambda_k)(\lambda_1 - \lambda_l)} - (V_2)_{11}{\sum_k}' \frac{(V_1)_{1k}^2}{(\lambda_1 - \lambda_k)^2} + \\
& + {\sum_{k,l,m}}' \frac{(V_1)_{1k}(V_1)_{kl}(V_1)_{lm}(V_1)_{m1}}{(\lambda_1 - \lambda_k)(\lambda_1 - \lambda_l)(\lambda_1 - \lambda_m)} - \\
& - {\sum_{k,l}}' \frac{(V_1)_{1k}^2 (V_2)_{l1}^2}{(\lambda_1 - \lambda_k)^2(\lambda_1 - \lambda_l)} - \\
& - \frac{1}{2\lambda_1}\left[(V_2)_{11} + {\sum_k}' \frac{(V_1)_{1k}^2}{\lambda_1 - \lambda_k}\right]^2 \Bigg\}. \qquad (28)
\end{aligned}$$

Наконец, развивая теорию возмущений для поправок как для λ_1, так и для λ_2, приходим к формуле для второй производной обратной корреляционной длины в нулевом внешнем поле:

$$\kappa_L'' = 2\left\{\frac{1}{\lambda_1}\left[(V_2)_{11} + {\sum_k}' \frac{(V_1)_{1k}^2}{\lambda_1 - \lambda_k}\right] - \right.$$
$$\left. - \frac{1}{\lambda_2}\left[(V_2)_{22} + {\sum_k}' \frac{(V_1)_{2k}^2}{\lambda_2 - \lambda_k}\right]\right\}. \qquad (29)$$

Таким образом, для определения критической температуры в рамках расширенной феноменологической ренормгруппы (уравнения (9) и (10)) необходимо решать полную задачу на собственные значения и собственные векторы трансфер-матрицы V_0 или ее субблоков. Это, конечно, усложняет расчет. Однако, с другой стороны, поскольку теперь в уравнения (9) и (10) заложено больше информации о системе, вполне естественно ожидать и более высокой точности оценок по сравнению со стандартной феноменологической ренормгруппой.

Формулы (27)–(29) были нами запрограммированы на языке Си. При этом полную задачу на собственные значения и собственные векторы небольших трансфер-матриц V_0 мы решали методом их прямой численной диагонализации с использованием библиотечных функций tred2 и tqli [32].

4. ЭВРИСТИЧЕСКИЙ ПРИМЕР: ДВУМЕРНАЯ РЕШЕТКА ИЗИНГА

Прежде чем переходить к трехмерной модели Изинга, для которой мы хотим получить новые результаты, проведем испытание уравнений (9) и (10) на двумерном аналоге этой модели, а именно — на точнорешаемой квадратной решетке с анизотропными взаимодействиями.

Критическая температура в анизотропной двумерной модели Изинга удовлетворяет трансцендентному уравнению [33]

$$\operatorname{sh}\frac{2J}{k_BT_c}\operatorname{sh}\frac{2J'}{k_BT_c} = 1. \qquad (30)$$

В частности, в пределе полностью изотропных связей $J' = J$ имеем

$$\frac{k_BT_c}{J} = \frac{2}{\ln\left(1+\sqrt{2}\right)} = 2.269185\ldots \qquad (31)$$

Для слабоанизотропной решетки изменения критической температуры, в соответствии с (30), подчинены линейному закону

$$\frac{T_c(J'/J)}{T_c(1)} \approx 1 - \frac{1}{2}\left(1 - \frac{J'}{J}\right), \quad J' \to J. \qquad (32)$$

Обратно, с случае сильноанизотропных взаимодействий решение уравнения (30) методом итераций приводит к асимптотически точному выражению [34]

$$\frac{k_BT_c}{J} \approx \frac{2}{\ln(2J/J')}, \quad \frac{J'}{J} \to 0. \qquad (33)$$

В промежуточной области значений параметра J'/J критические температуры могут быть найдены путем численного решения уравнения (30).

В табл. 1 представлены оценки критических температур $T_<^{(L,L')}$ и $T_>^{(L,L')}$, полученные из решения уравнений соответственно (9) и (10) при выборе кластерных пар (L, L') с $L' = L \pm 1$. При расчетах были использованы полоски $L \times \infty$ с периодическими граничными условиями в поперечном направлении. Полоски имели ширины $L = 2$–5 и поэтому размеры трансфер-матриц не превосходили 32×32. Такие небольшие размеры позволяли решать полную задачу на собственные значения и собственные векторы матриц V_0 путем их прямой численной диагонализации. Затем по формулам из разд. 3 мы рассчитывали $\chi_L(T)$, $\chi_L^{(4)}(T)$ и $\kappa_L''(T)$. При численном нахождении корней трансцендентных уравнений (9) и (10) был применен метод половинного деления (метод бисекции). Для того чтобы можно было проводить сравнения, в табл. 1 даны также точные величины критической температуры (столбец «точно»), следующие из уравнения (30).

Из табл. 1 видно, что ренормгрупповое уравнение (9) приводит всюду к нижним оценкам, которые по этой причине мы маркируем индексом «$<$». Точность оценок возрастает с увеличением размеров кластеров (ширин полосок). Кроме того, как следует из табл. 1, при фиксированных поперечных размерах кластеров точность оценок возрастает и с повышением анизотропии решетки. Этого вполне естественно следовало ожидать и из физических соображений, поскольку с уменьшением параметра J'/J геометрия полосок все лучше и лучше воспроизводит квазиодномерный характер связей в модели.

Уравнение (10), наоборот, дает всюду верхние оценки $T_>^{(L,L-1)}$ (что показывает соответствующий нижний индекс в обозначениях температуры). Из сравнения данных в табл. 1 видно, что точность этих оценок также равномерно нарастает как с увеличением ширин полосок в кластерной паре, так и с повышением анизотропии взаимодействий.

Имеющаяся аналогия между двумерной и трехмерной моделями позволяет надеяться, что уравнения (9) и (10) сохранят свойства равномерной сходимости сверху и снизу также и в случае трехмерной анизотропной решетки Изинга, для которой точное решение отсутствует.

Таблица 1. Нижние и верхние оценки, а также точные значения критической температуры двумерной анизотропной модели Изинга (в единицах $k_B = J = 1$)

J'/J	$T_<^{(2,3)}$	$T_<^{(3,4)}$	$T_<^{(4,5)}$	Точно	$T_>^{(5,4)}$	$T_>^{(4,3)}$	$T_>^{(3,2)}$
1.0	2.1088	2.2147	2.2409	2.26919	2.2898	2.3126	2.3478
0.5	1.5660	1.6134	1.6266	1.64102	1.6484	1.6587	1.6894
0.1	0.8788	0.8962	0.9011	0.90588	0.9076	0.9097	0.9180
0.05	0.7219	0.7345	0.7380	0.74131	0.7425	0.7439	0.7492
0.01	0.4988	0.5054	0.5072	0.50893	0.5095	0.5102	0.5128
0.005	0.4375	0.4427	0.4441	0.44546	0.4459	0.4465	0.4485
0.001	0.3378	0.3409	0.3418	0.34266	0.3429	0.3433	0.3445

5. ТРЕХМЕРНАЯ МОДЕЛЬ ИЗИНГА

Перейдем теперь к изложению основных расчетов работы. Они связаны с решением уравнений (9) и (10) в трех измерениях.

С математической точки зрения, соотношения (9) и (10) представляют собой трансцендентные уравнения. Для их численного решения требуется итерационная процедура. (В трех измерениях мы по-прежнему использовали метод половинного деления.) При этом на каждом шаге итераций необходимо решать еще две задачи: находить собственные значения и собственные векторы трансфер-матрицы V_0 и затем по формулам (27)–(29) рассчитывать восприимчивости и κ_L''. Решение полной спектральной задачи для плотнозаполненной матрицы размером $N \times N$ требует, как известно [35], $O(N^3)$ операций (программа tred2 включает три вложенных цикла длины N каждый). Расчет величин χ_L, κ_L'' и особенно $\chi_L^{(4)}$ также отягощен вложенными циклами, выполнение которых приводит к еще большим затратам машинного времени, чем даже спектральная задача (наша программа для расчета нелинейной восприимчивости $\chi_L^{(4)}$ включала пять 3-циклов длины N для каждого внутреннего цикла).

В качестве подсистем в трехмерном пространстве у нас выступают параллелепипеды $L \times L \times \infty$. Порядки трансфер-матриц для них возрастают по закону $N = 2^{L^2}$ (в отличие от значительно более щадящего роста $N = 2^L$ в двух измерениях). Следовательно, при стороне параллелепипеда $L = 2$ трансфер-матрица имеет размеры 16×16, при $L = 3$ — 512×512, а при $L = 4$ — уже 65536×65536.

5.1. Квазидиагонализованные трансфер-матрицы и редуцированные формулы для $\chi_L(T)$, $\chi_L^{(4)}(T)$ и $\kappa_L''(T)$

Чтобы решить задачу на собственные значения и собственные векторы крупномасштабных трансфер-матриц, приведем их сначала к блочно-диагональной форме, используя для этого симметрию подсистем Изинга. Замечательно, что квазидиагонализация одновременно облегчает решение и второй задачи, которая у нас связана с вложенными циклами при расчете величин по формулам (27)–(29), поскольку сокращает длины всех циклов до размерностей субблоков. Более того, как мы сейчас покажем, из всего количества субблоков квазидиагонализованной трансфер-матрицы V_0 нам будут нужны в действительности только два ее блока.

Гамильтониан модели Изинга на циклическом параллелепипеде $L \times L \times \infty$ в отсутствие внешнего поля и, как следствие, трансфер-матрица V_0 инвариантны относительно преобразований группы $\mathbf{Z}_2 \times (\mathbf{T}_L \wedge \mathbf{C}_{4v})$. В этой записи $\mathbf{Z}_2$ означает группу глобальных инверсий спинов, $\mathbf{T}_L$ — группу трансляций в поперечных направлениях параллелепипеда $L \times L \times \infty$ и $\mathbf{C}_{4v}$ — точечную группу, состоящую из вращений параллелепипеда вокруг оси, вдоль которой он бесконечно вытянут, и отражений в плоскостях, проходящих через эту ось; знаки «$\times$» и «$\wedge$» — символы соответственно прямого и полупрямого умножений.

После квазидиагонализации наибольшее собственное значение трансфер-матрицы (как V, так и V_0) всегда лежит в субблоке единичного (полностью симметричного) неприводимого представления группы. Это вытекает из уже упомянутой теоремы Перрона, из непрерывной зависимости собственных значений от матричных элементов (и параметров модели), а также из того факта, что лишь у такого субблока все матричные элементы положительны.

Вопрос о местонахождении второго по величине собственного значения не имеет столь однозначного ответа. Оно может находиться, вообще говоря, в разных субблоках и даже переходить из блока в блок при изменении параметров модели (в этой связи см. [27, 36]). Однако, что касается моделей Изинга на квадратной или простой кубической решетках с взаимодействиями ближайших соседей, можно показать (во всяком случае, численно), что второе доминирующее собственное значение Λ_2 локализовано, как и Λ_1, в субблоке тождественного неприводимого представления подгруппы чисто пространственных преобразований модели (т. е. подгруппы $\mathbf{T}_L \wedge \mathbf{C}_{4v}$ в трехмерном случае). Если внешнего поля нет, то существует еще внутренняя симметрия $\mathbf{Z}_2$, и названный блок может быть разложен на прямую сумму двух новых субблоков. При этом старшее собственное значение λ_1 снова, разумеется, попадает в субблок, построенный на полностью симметричных базисных функциях теперь уже всей группы $\mathbf{Z}_2 \times (\mathbf{T}_L \wedge \mathbf{C}_{4v})$. Второе по величине собственное значение λ_2 окажется в другом субблоке, который построен на базисных функциях, симметричных относительно чисто пространственных преобразований группы и антисимметричных относительно преобразований, включающих спиновую инверсию.

Итак, в квазидиагональной форме полной трансфер-матрицы V нам достаточно ограничиться субблоком, который соответствует тождественному неприводимому представлению подгруппы чисто пространственных преобразований. Разложение этого субблока по степеням h имеет вид, аналогичный (23). Перейдем в таком разложении субблока в базис, в котором представление группы $\mathbf{Z}_2$ будет полностью приведенным. Тогда с учетом свойств симметричности и антисимметричности матриц V_s с четным и нечетным номерами s относительно спиновой инверсии (эти свойства легко установить, например, из (19) и соотношений вида (24), (25)) обсуждаемый субблок имеет следующий вид:

$$V' = \left(\begin{array}{c|c} V_0^{(1)} & 0 \\ \hline 0 & V_0^{(2)} \end{array}\right) + h\left(\begin{array}{c|c} 0 & V_1^{(12)} \\ \hline V_1^{(21)} & 0 \end{array}\right) + h^2\left(\begin{array}{c|c} V_2^{(1)} & 0 \\ \hline 0 & V_2^{(2)} \end{array}\right) + h^3\left(\begin{array}{c|c} 0 & V_3^{(12)} \\ \hline V_3^{(21)} & 0 \end{array}\right) + h^4\left(\begin{array}{c|c} V_4^{(1)} & 0 \\ \hline 0 & V_4^{(2)} \end{array}\right) + O(h^5). \quad (34)$$

Упорядочение блоков в этой чередующейся диагонально-антидиагональной последовательности примем таким, чтобы субблок $V_0^{(1)}$ отвечал симметричному неприводимому представлению группы $\mathbf{Z}_2$, а $V_0^{(2)}$ — антисимметричному.

Пусть λ_k и ψ_k означают соответственно собственные значения и собственные векторы субблока $V_0^{(1)}$. Его размерность обозначим через N_1. Пусть далее ξ_k и φ_k — соответственно собственные значения и собственные векторы субблока $V_0^{(2)}$, порядок которого пусть равен N_2. Тогда из (27) для расчета линейной начальной восприимчивости получаем следующее выражение:

$$\chi_L(T) = \frac{2}{L^2\lambda_1}\left[\psi_1^+ V_2^{(1)}\psi_1 + \sum_{k=1}^{N_2}\frac{(\psi_1^+ V_1^{(12)}\varphi_k)^2}{\lambda_1 - \xi_k}\right]. \quad (35)$$

Аналогично взамен (28) приходим к рабочей формуле для расчета нелинейной восприимчивости:

$$\chi_L^{(4)}(T) = \frac{12}{L^2\lambda_1}\left[\frac{1}{\lambda_1}Q^2 - 2(Q_1+Q_2+Q_3+Q_4+Q_5-Q_6+Q_7-Q_8)\right], \quad (36)$$

где

$$
\begin{aligned}
&Q = \psi_1^+ V_2^{(1)} \psi_1 + \sum_{k=1}^{N_2} \frac{(\psi_1^+ V_1^{(12)} \varphi_k)^2}{\lambda_1 - \xi_k},\\
&Q_1 = \psi_1^+ V_4^{(1)} \psi_1, \quad Q_2 = \sum_{k=2}^{N_2} \frac{(\psi_1^+ V_2^{(1)} \psi_k)^2}{\lambda_1 - \lambda_k},\\
&Q_3 = 2\sum_{k=1}^{N_2} \frac{(\psi_1^+ V_1^{(12)} \varphi_k)(\psi_1^+ V_3^{(12)} \varphi_k)}{\lambda_1 - \xi_k},\\
&Q_4 = 2\sum_{k=1}^{N_2} \sum_{l=2}^{N_1} \frac{(\psi_1^+ V_1^{(12)} \varphi_k)(\varphi_k^+ V_1^{(21)} \psi_l)(\psi_l^+ V_2^{(1)} \psi_1)}{(\lambda_1 - \xi_k)(\lambda_1 - \lambda_l)},\\
&Q_5 = \sum_{k=1}^{N_2} \sum_{l=1}^{N_2} \frac{(\psi_1^+ V_1^{(12)} \varphi_k)(\varphi_k^+ V_2^{(2)} \varphi_l)(\varphi_l^+ V_1^{(21)} \psi_1)}{(\lambda_1 - \xi_k)(\lambda_1 - \xi_l)},\\
&Q_6 = \psi_1^+ V_2^{(1)} \psi_1 \sum_{k=1}^{N_2} \frac{(\psi_1^+ V_1^{(12)} \varphi_k)^2}{(\lambda_1 - \xi_k)^2},\\
&Q_7 = \sum_{k=1}^{N_2} \sum_{l=2}^{N_1} \sum_{m=1}^{N_2} \frac{(\psi_1^+ V_1^{(12)} \varphi_k)(\varphi_k^+ V_1^{(21)} \psi_l)(\psi_l^+ V_1^{(12)} \varphi_m)(\varphi_m^+ V_1^{(21)} \psi_1)}{(\lambda_1 - \xi_k)(\lambda_1 - \lambda_l)(\lambda_1 - \xi_m)},\\
&Q_8 = \sum_{k=1}^{N_2} \frac{(\psi_1^+ V_1^{(12)} \varphi_k)^2}{(\lambda_1 - \xi_k)^2} \sum_{l=1}^{N_2} \frac{(\psi_1^+ V_1^{(12)} \varphi_l)^2}{\lambda_1 - \xi_l}.
\end{aligned}
\tag{37}
$$

Как сказано выше, второе по старшинству собственное значение Λ_2 также локализовано в блоке V'. Учитывая структуру членов, входящих в этот блок, из (29) находим интересующее нас выражение для второй производной обратной корреляционной длины:

$$
\kappa_L''(T) = L^2 \chi_L(T) - \\
- \frac{2}{\xi_1} \left[\varphi_1^+ V_2^{(2)} \varphi_1 + \sum_{k=1}^{N_1} \frac{(\psi_k^+ V_1^{(12)} \varphi_1)^2}{\xi_1 - \lambda_k} \right], \tag{38}
$$

где функция $\chi_L(T)$ определена соотношением (35).

Чтобы использовать полученные формулы для χ_L, $\chi_L^{(4)}$, κ_L'', нужно прежде всего провести частичную квазидиагонализацию невозмущенных трансфер-матриц V_0 (выделить из них по два субблока) и перевести в новый базис члены возмущения V_1–V_4. Это наиболее трудоемкая техническая часть нашей работы. Ключевые детали использованной при этом технологии даны в Приложении.

В табл. 2 содержатся размеры субблоков, входящих в разложение (34). Величины N_1 и N_2 следуют из теоретико-группового анализа, который для параллелепипедов со сторонами $L = 2, 3, 4$ также можно найти в Приложении. Размерности субблоков при $L = 5, 6$ включены нами в табл. 2 для справок, вывод опущен.

5.2. Интервалы локализации критической точки и оценки критической температуры

Используя метод блок-диагонализации, нам удалось провести расчеты для подсистем $L \times L \times \infty$ с $L \le 4$, т.е. для трансфер-матриц с размерами вплоть до $2^{16} \times 2^{16}$. Результаты представлены в табл. 3.

Оценки $T_<^{(2,3)}$ и $T_<^{(3,4)}$ получены из решения уравнения (9) с кластерными парами соответственно $(2,3)$ и $(3,4)$, а $T_>^{(3,2)}$ и $T_>^{(4,3)}$ — из уравнения (10) с теми же парами подсистем. Анализируя данные табл. 3, видим, что в случае полностью изотропных взаимодействий ($J' = J$) высокоточное значение для критической температуры (1) лежит между $k_B T_<^{(3,4)}/J$ и $k_B T_>^{(4,3)}/J$. (Здесь мы восстанавливаем коэффициент k_B/J, который опускаем в таблицах во избежание их излишнего загромождения.) Следовательно, по крайней мере для этой строки табл. 3, температуры, снабженные значком «$<$», достоверно являются нижними оценками, а значком «$>$» — верхними.

Таблица 2. Размеры N_1 и N_2 для старших субблоков трансфер-матриц решеток Изинга $L \times L \times \infty$ с симметрией $\mathbf{Z}_2 \times (\mathbf{T}_L \wedge \mathbf{C}_{4v})$ при различных значениях L

	L				
	2	3	4	5	6
N_1	4	13	433	86056	119583470
N_2	2	13	372	86056	119539680

Далее из табл. 3 следует, что по мере уменьшения параметра J'/J значения в колонках $T_<^{(2,3)}$ и $T_<^{(3,4)}$, с одной стороны, и значения в колонках $T_>^{(4,3)}$ и $T_>^{(3,2)}$, с другой стороны, все ближе и ближе подходят друг к другу, при этом нигде не пересекаясь между собой. Опираясь на аналогию с двумерной моделью (разд. 4), естественно считать, что истинные величины критической температуры трехмерной анизотропной решетки Изинга заключены в пределах между значениями, стоящими в колонках $T_<^{(3,4)}$ и $T_>^{(4,3)}$. Это наилучшие нижние и верхние границы, которые мы смогли достигнуть в настоящей работе.

Из сказанного ясно, что среднее значение

$$T_c = (T_<^{(3,4)} + T_>^{(4,3)})/2 \tag{39}$$

служит наиболее качественной нашей оценкой для реальной критической температуры. При этом абсолютная ошибка заведомо не превосходит полуразность

$$\Delta T_c = (T_>^{(4,3)} - T_<^{(3,4)})/2. \tag{40}$$

Данные оценки вместе с их абсолютными ошибками собраны в последнем столбце табл. 3. С уменьшением параметра J'/J от 1 до 10^{-3} относительная ошибка обсуждаемых оценок критической температуры монотонно убывает от 0.7 % до 0.14 %. Это лучше аналогичных показателей для двумерной модели (в чем легко убедиться, обратившись к табл. 1).

Отметим, что, как и в плоской решетке, отклонения верхних и нижних границ критической температуры для трехмерной модели, видимо, примерно равны по величине. Поэтому погрешности, представленные в табл. 3 в последнем столбце, на самом деле еще меньше. Во всяком случае для полностью изотропной решетки, для которой критическая температура равна значению, полученному из (1), фактическая ошибка нашей оценки $k_BT_c/J = 4.512$ составляет не 0.7 %, а всего только 0.01 %. Это даже меньше, чем для оценки $k_BT_c/J = 4.53371$ [37] (см. также [38]), которую удалось получить из решения уравнения стандартной феноменологической ренормгруппы (6) с изотропной кластерной парой $(4,5)$.

Из данных, представленных в последнем столбце табл. 3, находим поведение критической температуры для квазиизотропной решетки:

$$\frac{T_c(J'/J)}{T_c(1)} \approx 1 - 0.075\left(1 - \frac{J'}{J}\right), \quad J' \to J. \tag{41}$$

Коэффициент наклона в точке $J' = J$ здесь, таким образом, почти на порядок меньше, чем в двумерной модели Изинга (см. равенство (32)).

6. СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ, ПОЛУЧЕННЫХ РАЗНЫМИ МЕТОДАМИ

Проведем сравнение найденных в предыдущем разделе границ для критической температуры трехмерной пространственно-анизотропной модели Изинга с оценками величины k_BT_c/J для той же модели, но полученными другими способами. Для удобства сравнения была составлена табл. 4. Строки в ней упорядочены так, чтобы точность данных в целом нарастала по мере приближения сверху и снизу к строке «Точно».

В приближении линейной цепочки (ПЛЦ), которое было рассмотрено в работе [12], трехмерную кубическую решетку Изинга представляют в виде системы одномерных цепочек, идущих вдоль направления доминирующего взаимодействия J. При этом, как уже говорилось, внутрицепочечные связи учитываются точно, а межцепочечные приближенно — в рамках теории молекулярного поля. В ПЛЦ критическая температура удовлетворяет уравнению

$$k_BT_c = zJ' \exp(2J/k_BT_c), \tag{42}$$

где z — число ближайших цепочек; $z = 2$ для двумерной решетки и $z = 4$ для трехмерной. Результаты численного решения уравнения (42) с $z = 4$ показаны в табл. 4 в строке «ПЛЦ».

Известно [39], что решение уравнения $xe^x = t$ методом итераций дает

$$x = \ln t + O(\ln\ln t),$$

$$x = \ln t - \ln\ln t + O(\ln\ln t/\ln t), \quad \ldots ,$$

причем возникающий для x ряд абсолютно и равномерно сходится при всех достаточно больших значениях t. Следовательно, когда $J'/J \to 0$, решение уравнения (42) есть

Таблица 3. Нижние и верхние границы для критической температуры трехмерной анизотропной модели Изинга, а также оценки T_c с погрешностями ΔT_c (в круглых скобках). В качестве T_c при каждом значении параметра J'/J взято среднее арифметическое границ наиболее узкого коридора $[T_<^{(3,4)}, T_>^{(4,3)}]$. Значения для температур даны в единицах $k_B = J = 1$

J'/J	$T_<^{(2,3)}$	$T_<^{(3,4)}$	$T_>^{(4,3)}$	$T_>^{(3,2)}$	T_c
1.0	4.413461	4.479658	4.544243	4.582331	4.512(32)
0.9	4.121298	4.178933	4.237039	4.275470	4.208(29)
0.8	3.823165	3.872973	3.924647	3.962271	3.899(26)
0.7	3.517969	3.560676	3.605985	3.641676	3.583(23)
0.6	3.204178	3.240483	3.279517	3.312201	3.260(20)
0.5	2.879539	2.910087	2.942957	2.971640	2.927(16)
0.4	2.540487	2.565829	2.592660	2.616479	2.579(13)
0.3	2.180792	2.201317	2.222236	2.240527	2.212(10)
0.2	1.787702	1.803508	1.818607	1.831006	1.8110(76)
0.1	1.325918	1.336496	1.345701	1.352289	1.3411(46)
0.09	1.272257	1.282236	1.290826	1.296859	1.2865(43)
0.08	1.216271	1.225625	1.233592	1.239075	1.2296(40)
0.07	1.157454	1.166154	1.173484	1.178424	1.1698(37)
0.06	1.095101	1.103112	1.109789	1.114190	1.1065(33)
0.05	1.028172	1.035449	1.041449	1.045316	1.0385(30)
0.04	0.955023	0.961509	0.966800	0.970133	0.9642(27)
0.03	0.872788	0.878403	0.882937	0.885728	0.8807(23)
0.02	0.775604	0.780225	0.783922	0.786148	0.7821(19)
0.01	0.647148	0.650541	0.653231	0.654821	0.6519(14)
0.009	0.630851	0.634096	0.636669	0.638185	0.6354(13)
0.008	0.613470	0.616560	0.619008	0.620449	0.6178(12)
0.007	0.594762	0.597689	0.600005	0.601367	0.5989(12)
0.006	0.574388	0.577140	0.579317	0.580595	0.5782(11)
0.005	0.551841	0.554405	0.556431	0.557619	0.5554(10)
0.004	0.526316	0.528672	0.530533	0.531622	0.52960(93)
0.003	0.496386	0.498507	0.500181	0.501160	0.49934(84)
0.002	0.459088	0.460929	0.462382	0.463231	0.46166(73)
0.001	0.405958	0.407430	0.408590	0.409267	0.40801(58)

$$\frac{k_B T_c}{J} \approx 2\left[\ln\left(\frac{2J}{zJ'}\right) - \ln\ln\left(\frac{2J}{zJ'}\right)\right]^{-1}. \qquad (43)$$

В трехмерном случае ($z = 4$) эта формула воспроизводит асимптотическую зависимость (2). Однако количественные значения, которые она дает, являются грубыми (самая верхняя строка в табл. 4).

Рассматривая табл. 4, видим, что следующим по точности за ПЛЦ идет расширенное цепочечное приближение (РЦП) [17]. В этом приближении в молекулярное поле погружен кластер, представляющий собой цепочку Изинга с боковыми отростками (наподобие ствола дерева с сучками на нем). Уравнение для критической температуры в обсуждаемом приближении имеет вид

$$\left[z\exp\left(\frac{2J}{k_B T_c}\right) - 2\right]\left[\exp\left(\frac{2J'}{k_B T_c}\right) - 1\right] = 2. \qquad (44)$$

Решая данное уравнение итерационным методом, находим, что при $J'/J \to 0$ в трехмерной решетке

Таблица 4. Оценки критической температуры трехмерной анизотропной решетки Изинга, полученные разными методами

	J'/J						
	1.0	0.5	0.1	0.05	0.01	0.005	0.001
(2)	–	–	1.7644	1.3619	0.7849	0.6498	0.4558
(45)	–	–	1.6215	1.2831	0.7740	0.6452	0.4552
ПЛЦ	5.6861	3.5264	1.5075	1.1458	0.6991	0.5907	0.4280
РЦП	4.9326	3.2061	1.4647	1.1277	0.6965	0.5896	0.4278
РПЛЦ	4.8815	3.1251	1.4009	1.0776	0.6694	0.5686	0.4155
РПБП	4.8106	3.0906	1.3918	1.0718	0.6669	0.5667	0.4144
(46)	–	–	1.3619	1.0534	0.6498	0.5508	0.4020
СФРГ	–	–	1.3473	1.0428	0.6540	0.5574	0.4089
ВГ	4.5442	2.9430	1.3457	1.0414	0.6532	0.5564	0.4086
Точно	4.51152 ...						
Ряды	4.5106	2.9286	1.343	1.041	0.65	–	–
НГ	4.4797	2.9101	1.3365	1.0354	0.6505	0.5544	0.4074

$$\frac{k_BT_c}{J} \approx 2\left\{\ln\left[\frac{J}{2J'}+\frac{1}{2}\ln\left(\frac{J}{2J'}+\frac{1}{2}\right)\right] - \right.$$
$$\left. - \ln\ln\left(\frac{J}{2J'}+\frac{1}{2}\right)\right\}^{-1}. \quad (45)$$

Как видно из табл. 4, это выражение улучшает результаты по сравнению с теми, которые обеспечивает формула (2).

В расширенном приближении линейной цепочки (РПЛЦ) [13, 14], как и в ПЛЦ, снова фигурирует простая одномерная цепочка Изинга в молекулярном поле. Однако теперь за счет привлечения вариационного принципа получаются оценки, точность которых превосходит даже полученные в РЦП, несмотря на использование более адекватного кластера в последнем случае. Ситуацию фиксируют численные данные в обсуждаемой табл. 4.

Действенным средством повышения точности служит, разумеется, увеличение числа цепочек в аппроксимирующих подсистемах, когда точно учитываются как внутрицепочечные, так и часть межцепочечных взаимодействий — все внутрикластерные связи. В табл. 4 сказанное демонстрируют расчеты в расширенном приближении Бете–Пайерлса (РПБП) [15] и расчеты в рамках стандартной феноменологической ренормгруппы (СФРГ) [16]. В первом случае в молекулярное поле помещен пятицепочечный кластер Изинга, состоящий из центральной и четырех ближайших соседних цепочек. Здесь точно рассматриваются не только внутрицепочечные связи, но также и все межцепочечные взаимодействия в первой координационной «сфере» (точнее — цилиндре). Во втором случае, СФРГ, расчет температур фазового перехода был проведен по уравнению (6) с парами $(1,2)$, $(2,3)$ и $(3,4)$ с последующей трехточечной экстраполяцией результатов на термодинамический предел $L=\infty$; экстраполяция оказалась тут возможной, но, правда, вследствие аномалий, возникающих из-за «кластера» $1\times1\times\infty$, лишь при достаточно выраженной анизотропии взаимодействий (см. [16]).

Все перечисленные подходы приводят к верхним оценкам критической температуры, и по точности они уступают нашим значениям $T_>^{(4,3)}$ (строка ВГ — верхняя граница — в табл. 4). Замыкает таблицу строка НГ, в которой стоят полученные нами значения $T_<^{(3,4)}$, соответствующие, как видим снова, нижним границам для критической температуры трехмерной модели Изинга.

Оценки, полученные из анализа высокотемпературных разложений [10] (строка «Ряды» в табл. 4), лежат в коридоре между НГ и ВГ. Исключение составляет лишь значение при $J'/J = 10^{-2}$, которое хоть и незначительно, но все-таки уже заметно $(0.65 < 0.6505)$ переступает нижнюю грань для критической температуры. Объяснение кроется, очевидно, в потере точности названных оценок, которая наступает по причине конечного числа членов (≤ 11) в имеющихся высокотемпературных рядах для анизотропных решеток.

В работе [11] вместо асимптотической формулы (2) для критической температуры анизотропной трехмерной модели Изинга было взято выражение

$$\frac{k_B T_c}{J} \approx 2\left[\ln\left(\frac{J}{J'}\right) - \ln\ln\left(\frac{J}{J'}\right)\right]^{-1}. \qquad (46)$$

Это эквивалентно замене в равенстве (43) параметра z на $z/2$, что в двумерном случае ($z = 2$) действительно приводит к асимптотически точному поведению по закону (33). Как утверждают авторы работы [11], асимптотическая зависимость (46) является точной в неожиданно широкой области изменения параметра J'/J. Если судить по рис. 14 из их работы [11], то точки, полученные методом Монте-Карло, хорошо ложатся на график функции (46), начиная с $J'/J = 0.3$ и ниже — вплоть до значения $J'/J = 3 \cdot 10^{-3}$, до которого ими были выполнены монтекарловские моделирования.

Наши расчеты позволяют прояснить вопрос об истинной точности модифицированной формулы (46). Из табл. 4 видим, что значения, которые дает выражение (46) при $J'/J = 0.1$ и 0.05, лежат выше установленного нами интервала для критических температур, а при $J'/J \leq 0.01$, наоборот, уходят за нижнюю границу. Следовательно, соотношение (46) в действительности следует рассматривать лишь как приближенную интерполяционную зависимость, в которой к тому же утеряно важное свойство монотонной сходимости.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ВЫВОДЫ

Основной результат работы состоит в том, что с помощью точных численных расчетов установлены пределы, в которых должна лежать истинная критическая температура трехмерного магнетика Изинга с пространственно-анизотропными взаимодействиями. Найденный коридор монотонно уменьшается с ростом анизотропии системы, и средние значения его границ (центральная линия вдоль коридора) приводят к оценкам температур фазового перехода, которые являются наилучшими на сегодняшний день для анизотропной модели.

Результаты достигнуты путем проведения крупномасштабных трансферматричных расчетов по двум нетрадиционным схемам феноменологического ренормирования статистических моделей. Одна из этих схем (по универсальной величине $Y = L^{1-d}\kappa''_L/\chi_L$) приводит к нижним оценкам критических точек. Другая же стратегия, закодированная в уравнении с $L^{1-2d}\chi_L^{(4)}/\chi_L^2$, ведет к верхним оценкам. Подтверждением таких заключений служат, с одной стороны, качественные сопоставления с аналогичными расчетами для точнорешаемой двумерной решетки Изинга. С другой стороны, вся совокупность проведенных сравнений с имеющимися количественными данными по трехмерной модели Изинга не оставляет сомнений в том, что мы действительно нашли верхние и нижние границы для критической температуры.

Полученный коридор для критических температур позволил четко установить, до каких значений J'/J расчеты величины $k_B T_c/J$ на основе высокотемпературных разложений [10] сохраняют свою силу. Достигнутое нами высокое разрешение для интервала локализации критических точек позволило также выяснить картину истинного поведения зависимости (46).

Найденная нами высокоточная связь критической температуры T_c с константами взаимодействия J и J' на практике может быть использована при количественной интерпретации экспериментальных данных по квазиодномерным магнетикам Изинга.

Дальнейшее повышение точности локализации критической точки можно достигнуть за счет увеличения размеров подсистем $L \times L \times \infty$ до $L = 5$. Появление третьей оценки открыло бы также возможность проводить трехточечные экстраполяции по размерам, что еще больше повысило бы точность результатов. (К сожалению, пара $(1, 2)$ в рассмотренных версиях расширенной феноменологической ренормгруппы неприемлема.) Согласно табл. 2, для кластера $5 \times 5 \times \infty$ нужно решать весь комплекс обсужденных ранее задач с матрицами-субблоками 86056×86056. В настоящее время осуществить такой проект если и можно, то лишь на самых лучших супер-ЭВМ. Во всяком случае авторы недавних публикаций [40, 41], проводя свои расчеты на суперкомпьютерном комплексе МВС-1000М в Межведомственном суперкомпьютерном центре [42], который на мировом уровне котируется сейчас в первой сотне [43], смогли продвинуть решение полной спектральной проблемы для матриц гамильтонианов лишь до размеров $2^{15} \times 2^{15}$.

Автор выражает глубокую благодарность Э. Б. Фельдману за поддержку в работе, а также признателен РФФИ за финансирование (грант № 03-02-16909).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Кратко опишем процедуру приведения невозмущенной трансфер-матрицы V_0 решетки Изинга $L \times L \times \infty$ к блочно-диагональному виду. Процедура основана на теории групп и включает три этапа: 1) теоретико-групповой анализ (позволяет заблаговременно узнать размеры субблоков); 2) построение базисных векторов неприводимых представлений (т. е. построение преобразования подобия, которое дает возможность привести трансфер-матрицу к блочно-диагональной форме); 3) фактическое вычисление матричных элементов субблоков. Несмотря на кажущуюся простоту, именно третий этап является наиболее трудоемким.

Группа $\mathbf{Z}_2 \times (\mathbf{T}_L \wedge \mathbf{C}_{4v})$ имеет порядок $g = 16L^2$. Ее порождающими элементами могут служить спиновая инверсия R, трансляции t_1 и t_2 на один шаг в двух поперечных направлениях циклически замкнутого параллелепипеда $L \times L \times \infty$, поворот C_4 на угол $\pi/2$ относительно продольной оси параллелепипеда и отражения в плоскостях симметрии σ_v и σ'_v, проходящих через эту ось. В исходном представлении, базис которого задан ортами

$$|S_{11}, S_{12}, \ldots, S_{LL}\rangle \equiv \left| \begin{array}{c} S_{11}\ S_{12}\ \ldots\ S_{1L} \\ S_{21}\ S_{22}\ \ldots\ S_{2L} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \\ S_{L1}\ S_{L2}\ \ldots\ S_{LL} \end{array} \right\rangle \quad (\text{П.1})$$

(спиновые переменные S_{ij} снабжаем теперь двойным индексом), генераторы группы определяем соотношениями

$$R|S_{11}, S_{12}, \ldots, S_{LL}\rangle = \\ = |-S_{11}, -S_{12}, \ldots, -S_{LL}\rangle, \quad (\text{П.2})$$

$$t_1 \left| \begin{array}{c} S_{11}\ S_{12}\ \ldots\ S_{1L} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \\ S_{L1}\ S_{L2}\ \ldots\ S_{LL} \end{array} \right\rangle = \left| \begin{array}{c} S_{1L}\ S_{11}\ \ldots\ S_{1,L-1} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \\ S_{LL}\ S_{L1}\ \ldots\ S_{L,L-1} \end{array} \right\rangle, \quad (\text{П.3})$$

$$t_2 \left| \begin{array}{c} S_{11}\ \ldots\ S_{1L} \\ S_{21}\ \ldots\ S_{2L} \\ \cdots\cdots\cdots \\ S_{L1}\ \ldots\ S_{LL} \end{array} \right\rangle = \left| \begin{array}{c} S_{21}\ \ldots\ S_{2L} \\ \cdots\cdots\cdots \\ S_{L1}\ \ldots\ S_{LL} \\ S_{11}\ \ldots\ S_{1L} \end{array} \right\rangle, \quad (\text{П.4})$$

$$C_4 \left| \begin{array}{c} S_{11}\ \ldots\ S_{1L} \\ \cdots\cdots\cdots \\ S_{L1}\ \ldots\ S_{LL} \end{array} \right\rangle = \left| \begin{array}{c} S_{1L}\ \ldots\ S_{LL} \\ \cdots\cdots\cdots \\ S_{11}\ \ldots\ S_{L1} \end{array} \right\rangle, \quad (\text{П.5})$$

$$\sigma_v \left| \begin{array}{c} S_{11}\ \ldots\ S_{1L} \\ S_{21}\ \ldots\ S_{2L} \\ \cdots\cdots\cdots \\ S_{L1}\ \ldots\ S_{LL} \end{array} \right\rangle = \left| \begin{array}{c} S_{L1}\ \ldots\ S_{LL} \\ S_{L-1,1}\ \ldots\ S_{L-1,L} \\ \cdots\cdots\cdots \\ S_{11}\ \ldots\ S_{1L} \end{array} \right\rangle, \quad (\text{П.6})$$

$$\sigma'_v \left| \begin{array}{c} S_{11}\ \ldots\ S_{1L} \\ \cdots\cdots\cdots \\ S_{L1}\ \ldots\ S_{LL} \end{array} \right\rangle = \left| \begin{array}{c} S_{LL}\ \ldots\ S_{1L} \\ \cdots\cdots\cdots \\ S_{L1}\ \ldots\ S_{11} \end{array} \right\rangle. \quad (\text{П.7})$$

Другие преобразования группы равны соответствующим комбинациям указанных выше операторов.

Умножая слева соотношения типа (П.2)–(П.7) на сопряженные векторы и принимая во внимание условие ортонормированности

$$\langle S_{11}, S_{12}, \ldots, S_{LL}|S'_{11}, S'_{12}, \ldots, S'_{LL}\rangle = \prod_{i,j=1}^{L} \delta_{S_{ij}S'_{ij}}, \quad (\text{П.8})$$

получаем матрицы исходного представления Γ группы $\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{T}_L \wedge \mathbf{C}_{4v}$. Состав представления Γ нам предстоит анализировать. Для этого нужны характеры (следы построенных матриц). Их мы вычисляем, пользуясь определениями (П.2)–(П.7), соотношением (П.8) и проводя суммирование по ± 1 для всех дважды повторяющихся индексов S:

$$\chi(E) = \langle S_{11}, S_{12}, \ldots, S_{LL}|S_{11}, S_{12}, \ldots, S_{LL}\rangle = \\ = \prod_{i,j=1}^{L} \delta_{S_{ij}S_{ij}} = 2^{L^2}, \quad (\text{П.9})$$

$$\chi(R) = \langle S_{11}, S_{12}, \ldots, S_{LL}|R|S_{11}, S_{12}, \ldots, S_{LL}\rangle = \\ = \prod_{i,j=1}^{L} \delta_{S_{ij},-S_{ij}} = 0 \quad (\text{П.10})$$

и т. д. Данная процедура была нами запрограммирована в целой арифметике, и компьютер давал значения характеров всех элементов группы.

Для расчета кратностей a_μ, с которыми каждое неприводимое представление $\Gamma^{(\mu)}$ входит в анализируемое представление Γ, служит формула (см., например, [44])

$$a_\mu = \frac{1}{g} \sum_i g_i \chi_i \chi_i^{(\mu)*}, \quad (\text{П.11})$$

Таблица 5. Характеры исходного и двух неприводимых представлений группы симметрии трансфер-матрицы подсистемы Изинга $2 \times 2 \times \infty$

$\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{C}_{4v}$	E	C_2	$2C_4$	$2\sigma_v$	$2\sigma_v'$	R	RC_2	$2RC_4$	$2R\sigma_v$	$2R\sigma_v'$
$\Gamma^{(1)}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$\Gamma^{(2)}$	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1
Γ	16	4	2	4	8	0	4	2	4	0

Таблица 6. Характеры исходного представления Γ группы $\mathbf{T}_3 \wedge \mathbf{C}_{4v}$. Группа имеет девять классов сопряженных элементов

E	$6\sigma_v$	$6\sigma'$	$9C_2$	$4t_1$	$4t_1t_2$	$18C_4$	$12t_1\sigma_v$	$12t_1\sigma_v'$
512	64	64	32	8	8	8	4	4

Таблица 7. Характеры группы $\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{T}_4 \wedge \mathbf{C}_{4v}$

	I (1)	II (4)	III (12)	IV (27)	V (16)	VI (52)	VII (16)	VIII (27)	IX (52)	X (16)	XI (33)
$\Gamma^{(1)}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$\Gamma^{(2)}$	1	1	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1
Γ	2^{16}	2^{12}	2^{10}	2^8	2^6	2^4	2^2	2^8	2^4	2^2	0

Примечание. Чтобы уменьшить громоздкость табл. 7, 40 классов группы распределены по одиннадцати объединенным классам, образованным по признаку равенства характеров одновременно в трех представлениях: $\Gamma^{(1)}$, $\Gamma^{(2)}$ и Γ; в круглых скобках — общее число элементов в каждом таком объединенном классе. Состав объединенных классов: I$\{E\}$, II$\{4t_1\sigma_v\}$, III$\{4t_1t_2C_2,\ 8\sigma_v'\}$, IV$\{2t_1^2,\ t_1^2t_2^2,\ 4C_2,\ 8t_1C_2,\ 4\sigma_v,\ 4t_1^2\sigma_v,\ 4t_1^2t_2\sigma_v\}$, V$\{16t_1C_4\}$, VI$\{4t_1,\ 4t_1t_2,\ 4t_1^2t_2,\ 16C_4,\ 8t_1\sigma_v,\ 8t_1t_2\sigma_v,\ 8t_1^2\sigma_v'\}$, VII$\{16t_1\sigma_v'\}$, VIII$\{2Rt_1^2,\ 2Rt_1^2t_2^2,\ 4RC_2,\ 8Rt_1C_2,\ 4R\sigma_v,\ 4Rt_1^2\sigma_v,\ 4Rt_1^2t_2\}$, IX$\{4Rt_1, 4Rt_1t_2, 4Rt_1^2t_2, 16RC_4, 8Rt_1\sigma_v, 8Rt_1t_2\sigma_v, 8Rt_1^2\sigma_v'\}$, X$\{16Rt_1\sigma_v'\}$, XI$\{R, 4Rt_2\sigma_v, 4Rt_1t_2C_2, 8R\sigma_v', 16Rt_1C_4\}$.

где g_i — число элементов в i-м классе группы, χ_i — характер элемента из i-го класса в исходном представлении Γ группы и $\chi_i^{(\mu)}$ — характер элемента из класса i в μ-м неприводимом представлении; суммирование идет по всем классам i группы. Размерности субблоков одномерных неприводимых представлений как раз и равны этим кратностям.

В табл. 5 содержатся характеры группы симметрии $\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{C}_{4v}$, которой обладает кластер Изинга $2 \times 2 \times \infty$. (Для него трансляции в поперечных направлениях фактически отсутствуют; периодические граничные условия приводят лишь к удвоению констант межцепочечных взаимодействий.) Пользуясь этой таблицей, по формуле (П.11) находим состав исходного представления группы:

$$\Gamma = 4\Gamma^{(1)} + 2\Gamma^{(2)} + \ldots \qquad (\text{П.12})$$

Следовательно, в соответствии с теорией групп, после перехода с помощью преобразования подобия в полностью приведенное представление трансфер-матрица системы примет блочно-диагональную структуру, в которой субблоки $V_0^{(1)}$ и $V_0^{(2)}$ будут иметь размеры соответственно 4×4 и 2×2 ($N_1 = 4$ и $N_2 = 2$).

При $L = 3$ характеры представления Γ пространственной подгруппы $\mathbf{T}_3 \wedge \mathbf{C}_{4v}$ собраны в табл. 6. Нетрудно понять (или проверить, проведя вычисления), что из-за нечетности числа цепочек в системе и из-за того, что действие чисто пространственных преобразований группы ведет лишь к перемещениям по циклической сетке $L \times L$ спиновой конфигурации $S_{11}, S_{12}, \ldots, S_{LL}$, характеры элементов, включающих инверсию спинов R, равны нулю. Располагая набором характеров, находим состав представления Γ в случае $L = 3$:

$$\Gamma = 13(\Gamma^{(1)} + \Gamma^{(2)}) + \ldots \tag{П.13}$$

Таким образом, размеры интересующих нас субблоков равны $N_1 = N_2 = 13$. Следовательно, задачу на собственные значения и собственные векторы полностью заполненной матрицы 512×512 можно заменить аналогичными задачами для двух матриц всего только 13-го порядка. Достигаемая при этом экономия компьютерных ресурсов очевидна.

Характеры группы $\mathbf{Z}_2 \times \mathbf{T}_4 \wedge \mathbf{C}_{4v}$ содержит табл. 7. Беря данные из этой таблицы, по формуле (П.11) рассчитываем, сколько раз интересующие нас неприводимые представления входят в исходное представление, и получаем

$$\Gamma = 433\,\Gamma^{(1)} + 372\,\Gamma^{(2)} + \ldots \tag{П.14}$$

Поэтому, вместо того чтобы пытаться решить (на супер-ЭВМ) полную задачу на собственные значения и собственные векторы трансфер-матрицы 65536×65536, мы можем благодаря симметрии ограничиться решением подобных проблем для матриц с размерностями 433 и 372. Такие задачи вполне доступны на персональных компьютерах.

Продолжая процесс, определяем числа N_1 и N_2 для параллелепипедов Изинга со сторонами $L > 4$. Результаты проведенного нами теоретико-группового анализа для систем $5\times5\times\infty$ и $6\times6\times\infty$ можно найти в табл. 2.

Базисные векторы неприводимых представлений конструируем, проводя соответствующую симметризацию линейных комбинаций исходных ортов (П.1) или используя для этого более систематический способ — технику проекционных операторов [44]. Так, для цепочки $2 \times 2 \times \infty$ базисные векторы неприводимых представлений $\Gamma^{(1)}$ и $\Gamma^{(2)}$ имеют вид

$$\begin{gathered}
f_1^{(1,2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\begin{matrix}\cdot & \cdot\\ \cdot & \cdot\end{matrix}\right\rangle \pm \left|\begin{matrix}\times & \times\\ \times & \times\end{matrix}\right\rangle\right),\\
f_2^{(1,2)} = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left[\left|\begin{matrix}\cdot & \cdot\\ \cdot & \times\end{matrix}\right\rangle + \left|\begin{matrix}\cdot & \cdot\\ \times & \cdot\end{matrix}\right\rangle + \left|\begin{matrix}\cdot & \times\\ \cdot & \cdot\end{matrix}\right\rangle + \left|\begin{matrix}\times & \cdot\\ \cdot & \cdot\end{matrix}\right\rangle \pm \right.\\
\left. \pm\left(\left|\begin{matrix}\cdot & \times\\ \times & \times\end{matrix}\right\rangle + \left|\begin{matrix}\times & \cdot\\ \times & \times\end{matrix}\right\rangle + \left|\begin{matrix}\times & \times\\ \cdot & \times\end{matrix}\right\rangle + \left|\begin{matrix}\times & \times\\ \times & \cdot\end{matrix}\right\rangle\right)\right],\\
f_3^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\begin{matrix}\cdot & \cdot\\ \times & \times\end{matrix}\right\rangle + \left|\begin{matrix}\times & \times\\ \cdot & \cdot\end{matrix}\right\rangle\right), \quad f_4^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\begin{matrix}\cdot & \times\\ \cdot & \times\end{matrix}\right\rangle + \left|\begin{matrix}\times & \cdot\\ \times & \cdot\end{matrix}\right\rangle\right),\\
f_5^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\begin{matrix}\cdot & \times\\ \times & \cdot\end{matrix}\right\rangle + \left|\begin{matrix}\times & \cdot\\ \cdot & \times\end{matrix}\right\rangle\right).
\end{gathered} \tag{П.15}$$

Здесь для повышения наглядности числа $+1$ заменены на точки, а вместо -1 поставлены крестики. После того как базисные векторы найдены, проводим расчет наборов коэффициентов для матричных элементов $f_i^{(\mu)^+} V_s f_j^{(\nu)}$.

У нас наборы состояли из целых чисел, вычислив которые один раз и записав их на диске, получаем в результате возможность легко проводить сборку матриц $V_0^{(1)}$, $V_0^{(2)}$, $V_1^{(12)}$, ..., $V_4^{(2)}$ при нужных значениях температуры T и параметров модели J и J'. Например, матричные элементы субблоков $V_0^{(1,2)}$ системы $3 \times 3 \times \infty$ равны

$$(V_0^{(1)})_{ij} = \frac{2}{\sqrt{n_i n_j}}\left[\sum_{s=1}^{5} |g_s^{(ij)}|\,\mathrm{ch}(K n_s^a)\right] \exp\left[\frac{K'(m_i^b + m_j^b)}{2}\right], \tag{П.16}$$

$$(V_0^{(2)})_{ij} = \frac{2}{\sqrt{n_i n_j}}\left[\sum_{s=1}^{5} g_s^{(ij)}\,\mathrm{sh}(K n_s^a)\right] \exp\left[\frac{K'(m_i^b + m_j^b)}{2}\right], \tag{П.17}$$

где $i, j = 1, 2, \ldots, 13$ и

$$n_i = \{2, 18, 36, 12, 36, 72, 72, 72, 18, 72, 18, 12, 72\}, \tag{П.18}$$

$$m_i^b = \{18, 10, 6, 6, 2, 2, -2, 2, 2, -2, -6, -6, -6\}, \tag{П.19}$$

$$n_s^a = \{9, 7, 5, 3, 1\}. \tag{П.20}$$

Поскольку матрицы $V_0^{(1)}$ и $V_0^{(2)}$ симметричны, коэффициенты $g_s^{(ij)}$ достаточно вычислить лишь, скажем, для верхней треугольной части этих матриц. Всего нужно знать 91 набор из пяти чисел каждый. Относительно индексов i, j упорядочим наборы по столбцам в виде одномерной последовательности: $i, j \to l = i + j(j-1)/2$. В такой нумерации для коэффициентов g имеем

1) 2 0 0 0 0, 2) 0 18 0 0 0, 3) 18 0 144 0 0, 4) 0 0 36 0 0,
5) 0 72 0 252 0, 6) 36 0 216 0 396, 7) 0 0 0 12 0, 8) 0 0 36 0 72,
9) 0 36 0 72 −108, 10) 12 0 0 −24 36, 11) 0 0 36 0 0,
12) 0 72 0 252 0, 13) 0 0 288 0 360, 14) 0 0 0 144 −72,
15) 36 0 216 0 396, 16) 0 0 0 72 0, 17) 0 0 216 0 432,
18) 0 144 0 576 −576, 19) 0 0 144 −144 144, 20) 0 72 0 720 −504,
21) 72 0 504 −648 1368, 22) 0 0 0 72 0, 23) 0 0 216 0 432,
24) 0 72 0 720 −504, 25) 0 0 72 −72 288, 26) 0 144 0 576 −576,
27) 0 0 576 −576 1440, 28) 72 0 504 −648 1368, 29) 0 0 0 0 72,
30) 0 0 0 288 −360, 31) 0 0 288 −432 576, 32) 0 72 −72 72 −216,
33) 0 0 144 −288 864, 34) 0 144 −432 1008 −1008,
35) 0 72 −216 936 −1368, 36) 72 −144 504 −936 936,
37) 0 0 0 0 18, 38) 0 0 0 72 −90, 39) 0 0 72 −108 144,
40) 0 0 −36 72 0, 41) 0 0 36 −72 216, 42) 0 72 −72 144 −360,
43) 0 0 −72 288 −288, 44) 0 −72 144 −144 288,
45) 18 0 0 −72 72, 46) 0 0 0 0 72, 47) 0 0 0 288 −360,
48) 0 0 216 −360 720, 49) 0 0 −72 216 −144,
50) 0 0 216 −360 720, 51) 0 144 −288 864 −1296,
52) 0 144 −288 864 −1296, 53) 0 −144 432 −720 1296,
54) 0 0 144 −288 216, 55) 72 −72 288 −864 1296, 56) 0 0 0 0 18,
57) 0 0 0 72 −90, 58) 0 0 36 −72 216, 59) 0 0 0 36 −72,
60) 0 0 72 −108 144, 61) 0 0 −72 288 −288,
62) 0 72 −72 144 −360, 63) 0 0 72 −216 360, 64) 0 −18 0 0 144,
65) 0 0 144 −288 216, 66) 18 0 0 −72 72, 67) 0 0 0 12 0,
68) 0 0 36 0 72, 69) 0 0 0 144 −72, 70) 0 0 0 0 72,
71) 0 36 0 72 −108, 72) 0 0 72 −72 288, 73) 0 0 144 −144 144,
74) 0 0 0 144 −288, 75) 0 0 0 36 −72, 76) 0 0 −72 216 −144,
77) 0 0 −36 72 0, 78) 12 0 0 −24 36, 79) 0 0 0 0 72,
80) 0 0 0 288 −360, 81) 0 0 144 −288 864, 82) 0 0 0 144 −288,
83) 0 0 288 −432 576, 84) 0 72 −216 936 −1368,
85) 0 144 −432 1008 −1008, 86) 0 0 288 −864 1440,
87) 0 0 72 −216 360, 88) 0 −144 432 −720 1296,
89) 0 −72 144 −144 288, 90) 0 72 −72 72 −216,
91) 72 −144 504 −936 936.

Коэффициенты $g_s^{(ij)}$ были вычислены с помощью специальной программы и хранились на винчестере в виде файла. Пользуясь наборами коэффициентов $\{n_i\}$, $\{m_i^b\}$, $\{n_s^a\}$ и $\{g_s^{(ij)}\}$, по формулам (П.16) и (П.17) собираем матричные элементы субблоков. Так, например,

$$\begin{aligned}
&(V_0^{(1)})_{11} = 2\,\mathrm{ch}(9K)\exp(18K'), \quad (V_0^{(1)})_{34} = 2\sqrt{3}\,[\mathrm{ch}(7K) + 2\,\mathrm{ch}(3K) + 3\,\mathrm{ch}\,K]\exp(6K'),\\
&\ldots\\
&(V_0^{(2)})_{13,13} = 2\,\{\mathrm{sh}(9K) - 2\,\mathrm{sh}(7K) + 7\,\mathrm{sh}(5K) - 13\,[\mathrm{sh}(3K) - \mathrm{sh}\,K]\}\exp(-6K').
\end{aligned} \qquad (\text{П.21})$$

Аналогично для системы $4\times4\times\infty$. Однако g-файлы теперь слишком огромны, чтобы пытаться их тут воспроизвести.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. З. Паташинский, В. Л. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов*, Наука, Москва (1982).
2. J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1997).
3. A. Pelissetto and E. Vicari, Phys. Rep. **368**, 549 (2002); E-print archives, cond-mat/0012164.
4. P. Butera and M. Comi, Phys. Rev. B **62**, 14837 (2000).
5. R. Gupta and P. Tamayo, Int. J. Mod. Phys. C **7**, 305 (1996).
6. M. Hasenbusch, K. Pinn, and S. Viniti, Phys. Rev. B **59**, 11471 (1999).
7. H. W. J. Blöte, L. N. Shchur, and A. L. Talapov, Int. J. Mod. Phys. C **10**, 1137 (1999).
8. J. O. Vigfusson, J. Phys. A **18**, 3417 (1985).
9. C.-Y. Weng, R. B. Griffiths, and M. E. Fisher, Phys. Rev. **162**, 475 (1967); M. E. Fisher, Phys. Rev. **162**, 480 (1967).
10. R. Navarro and L. J. de Jongh, Physica B **94**, 67 (1978).
11. T. Graim and D. P. Landau, Phys. Rev. B **24**, 5156 (1981).
12. J. W. Stout and R. C. Chisholm, J. Chem. Phys. **36**, 979 (1962).
13. J. R. Faleiro Ferreira and N. P. Silva, Phys. Stat. Sol. (b) **114**, 47 (1982).
14. J. R. Faleiro Ferreira, Phys. Stat. Sol. (b) **148**, 709 (1988).
15. M. A. Yurishchev, Phys. Stat. Sol. (b) **128**, 537 (1985).
16. M. Yurishchev and A. Sterlin, J. Phys.: Condens. Matter **3**, 2373 (1991).
17. Y. Muraoka and T. Idogaki, Phys. Stat. Sol. (b) **195**, 553 (1996).
18. M. A. Yurishchev, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **83–84**, 727 (2000).
19. М. А. Юрищев, ЖЭТФ **118**, 380 (2000).
20. M. E. Fisher, in *Critical Phenomena, Proc. 1970 E. Fermi Int. School of Physics*, ed. by M. S. Green, Academic Press, New York (1971), Vol. 51, p. 1 (русский перевод: *Устойчивость и фазовые переходы*, Мир, Москва (1973), с. 245).
21. M. E. Fisher and M. N. Barber, Phys. Rev. Lett. **28**, 1516 (1972).
22. M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **58**, 1142 (1974).
23. M. N. Barber, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, ed. by C. Domb and J. L. Lebowitz, Academic Press, London (1983), Vol. 8, p. 145.
24. V. Privman, in *Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*, ed. by V. Privman, World Scientific, Singapore (1990), p. 1.
25. Г. Стенли, *Фазовые переходы и критические явления*, Мир, Москва (1973).
26. M. P. Nightingale, Physica A **83**, 561 (1976).
27. M. P. Nightingale, Proc. Kon. Ned. Akad. Wet. B **82**, 235 (1979).
28. P. Nightingale, J. Appl. Phys. **53**, 7927 (1982).
29. M. P. Nightingale, in *Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*, ed. by V. Privman, World Scientific, Singapore (1990), p. 287.
30. Ф. Р. Гантмахер, *Теория матриц*, Наука, Москва (1988).
31. H. W. J. Blöte and M. P. Nightingale, Physica A **112**, 405 (1982).
32. W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1992).
33. L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).

34. D. J. Scalapino, Y. Imry, and P. Pincus, Phys. Rev. B **11**, 2042 (1975).

35. Б. Парлетт, *Симметричная проблема собственных значений. Численные методы*, Мир, Москва (1983).

36. T. Yokota, Phys. Rev. B **39**, 12312 (1989).

37. M. A. Novotny, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **20**, 122 (1991).

38. C. F. Baillie, R. Gupta, K. A. Hawick, and G. S. Pawley, Phys. Rev. B **45**, 10438 (1992).

39. Н. Г. де Брейн, *Асимптотические методы в анализе*, ИЛ, Москва (1961).

40. S. I. Doronin, E. B. Fel'dman, I. Ya. Guinzbourg, and I. I. Maximov, Chem. Phys. Lett. **341**, 144 (2001).

41. И. Я. Гинзбург, С. И. Доронин, И. И. Максимов, Математическое моделирование **14**, 3 (2002).

42. http://www.jscc.ru

43. http://www.top500.org

44. М. Хамермеш, *Теория групп и ее применение к физическим проблемам*, Мир, Москва (1966).