

# КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ СО СВОБОДНОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ

*С. В. Белим\**

*Омский государственный университет  
644 077, Омск, Россия*

Поступила в редакцию 19 апреля 2006 г.

Осуществлено теоретико-полевое описание поведения однородных и неупорядоченных систем со свободной границей в двухпетлевом приближении непосредственно в трехмерном пространстве. Выявлено влияние свободной границы на режим объемного критического поведения. Показано, что в случае обычного перехода ограниченность системы слабо влияет на режим объемного критического поведения, тогда как при специальном переходе такое влияние более заметно. Проведено описание поверхностных критических явлений для однородных и неупорядоченных систем, получены критические индексы в двухпетлевом приближении. Показано, что влияние примесей при специальном фазовом переходе несущественно, тогда как при обычном более значительно. Проведено сравнение полученных критических индексов с результатами компьютерного моделирования.

PACS: 68.35.Rh, 05.70.Jk, 11.10.Gh, 64.60.Fr

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Любые системы, изучаемые экспериментально, неизбежно имеют свободные поверхности, влияние которых обычно не учитывается при описании критических явлений. Однако процессы упорядочивания на свободной поверхности могут протекать при температуре, отличной от температуры, характерной для объемных процессов упорядочивания, что приводит к изменению режима критического поведения.

Существует область температур, в которой поверхностные эффекты играют определяющую роль и характеризуются своим набором критических индексов.

Впервые проблема влияния ограниченности системы на критические явления была рассмотрена феноменологически Кагановым и Омеланчуком [1] и в рамках микроскопического подхода Миллсом [2], а также Волфрамом и др. [3]. Точное решение для двумерной полуплоскости в рамках модели Изинга было получено МакКоем и Ву [4] путем обобщения работы Онзагера [5] и показало, что феноменологическая теория верна лишь качественно. Для трех-

мерных систем Биндером и Хохенбергом в работе [6] в рамках теории среднего поля показано, что выделенное направление, обусловленное существованием свободной поверхности, приводит к необходимости отдельного описания критических явлений на поверхности и в объеме системы. В работе [6] рассмотрены два типа критического поведения, которые могут наблюдаться в полуограниченных системах и связаны с тем, что упорядочивание спинов на поверхности происходит раньше, чем в объеме (поверхностный переход). В этой же работе выявлена возможность существования мультикритической точки, в которой происходят оба типа фазовых переходов (поверхностный и объемный). Также в этой работе Биндером и Хохенбергом получены критические индексы с использованием ренормгруппового подхода в рамках высокотемпературного разложения. Значения критических индексов полуограниченных систем со скалярным параметром порядка в рамках  $\epsilon$ -разложения в однопетлевом приближении были получены Любенским и Рубиным [7] и дали для поверхностного критического индекса радиуса корреляции значение  $\nu = 1/2 + \epsilon/12$ , а для продольного и перпендикулярного критических индексов корреляционной функции соответственно  $\eta_{\parallel} = 2 - \epsilon/3$  и  $\eta_{\perp} = 1 - \epsilon/6$ . В работе этих же авто-

\*E-mail: belim@univer.omsk.su

ров [8] показано, что для полуограниченных систем с  $n$ -мерным параметром порядка все поверхностные критические индексы выражаются через объемные критические индексы и поверхностный индекс  $\tilde{\eta} = (1/2)\varepsilon(n+2)/(n+8)$ . Мультикритическая точка, возникающая при одновременном объемном и поверхностном фазовых переходах, была исследована в работах [9, 10] в рамках  $\varepsilon$ -разложения в двухпетлевом приближении.

Описание поверхностного и объемного фазовых переходов в полуограниченной системе с  $n$ -мерным параметром порядка непосредственно в трехмерном пространстве в рамках двухпетлевого приближения было проведено в работе [11]. Вычисленные в данной работе критические индексы оказались в лучшем согласии с полученными ранее результатами моделирования методом Монте-Карло [12–14]. Так, для индекса кроссовера компьютерное моделирование дало значение около 0.5, расчеты непосредственно при  $D = 3$  дали примерно 0.54, тогда как  $\varepsilon$ -разложение приводит к результату около 0.68.

Ренормгрупповой подход к описанию слабонеупорядоченных спиновых систем, проведенный в работах [15–17] непосредственно для трехмерных систем, позволил получить значения статических критических индексов неограниченных систем в четырехпетлевом приближении. Исследование влияния свободной границы на критическое поведение неупорядоченных систем впервые было проведено в работе [18] в рамках  $\varepsilon$ -разложения. Аналогичные расчеты непосредственно в трехмерном пространстве в двухпетлевом приближении были проведены в работах [19–21]. Однако в последних работах допущена ошибка при проведении репличной процедуры, что привело к асимптотическим рядам для примесных систем, не согласующимся с аналогичными рядами для однородных систем.

Во всех упомянутых выше работах предполагалось, что присутствие плоской свободной поверхности слабо влияет на объемное критическое поведение и при расчете поверхностных критических индексов для фиксированных точек ренормгруппового преобразования можно использовать значения, полученные для неограниченных систем. Однако это утверждение требует проверки и оценки влияния свободной границы на объемное критическое поведение.

Целью данной статьи является исследование в двухпетлевом приближении непосредственно в трехмерном пространстве влияния плоской свободной границы на объемное критическое поведение при различных типах фазовых переходов как в однород-

ных, так и в неупорядоченных системах, а также расчет с учетом полученных поправок поверхностных критических индексов для обычного и специального фазовых переходов в однородных и неупорядоченных системах со свободной границей.

## 2. ГАМИЛЬТониАН СИСТЕМЫ

Пусть  $S = S(\mathbf{x})$  — флуктуации скалярного параметра порядка в полупространстве

$$V = R_+^D = \{\mathbf{x} = (\mathbf{r}, z) | \mathbf{r} \in R^{D-1}, z \geq 0\}.$$

Рассматриваемая система ограничена плоскостью  $z = 0$ , которую в дальнейшем будем обозначать  $\partial V$ . Гамильтониан такой модели может быть записан в следующем виде:

$$H_0 = \frac{1}{2} \int_V d^D x (\tau_0 + \nabla^2) S^2(x) + \frac{1}{2} \int_V d^D x \Delta \tau(x) S^2(x) + u_0 \int_V d^D x S^4(x) + \frac{c_0}{2} \int_{\partial V} d^D x S^2(x), \quad (1)$$

где  $u_0$  — положительная константа,  $\tau_0 \sim |T - T_c|/T_c$ ,  $T_c$  — температура объемного фазового перехода,  $c_0 \sim |T - T_s|/T_s$ ,  $T_s$  — температура поверхностного фазового перехода,  $\Delta \tau(x)$  — случайное поле примесей типа случайной температуры.

Перейдем к фурье-образам по координатам  $\mathbf{r}$ :

$$H_0 = \int_0^\infty dz \left\{ \frac{1}{2} \int d^{D-1} q (\tau_0 + q^2) S_q S_{-q} + \frac{1}{2} \int d^{D-1} q \Delta \tau_q S_q S_{-q} + u_0 \int d^{D-1} q_1 d^{D-1} q_2 d^{D-1} q_3 S_{q_1} S_{q_2} S_{q_3} S_{-q_1 - q_2 - q_3} \right\} + \frac{c_0}{2} \int d^{D-1} q S_q S_{-q} \Big|_{z=0}. \quad (2)$$

При малой концентрации примесей распределение случайного поля  $\Delta \tau_q$  можно считать гауссовым и задать функцией

$$P[\Delta \tau] = A \exp \left[ -\frac{1}{2\delta_0} \int \Delta \tau_q^2 d^{D-1} q dz \right], \quad (3)$$

где  $A$  — нормировочная константа, а  $\delta_0$  — положительная константа, пропорциональная концентрации замороженных дефектов структуры.

Применяя репличную процедуру для усреднения по случайным полям, задаваемым замороженными дефектами структуры, получим эффективный гамильтониан системы

$$H_R = \int_0^\infty dz \left\{ \frac{1}{2} \int d^{D-1} q (\tau_0 + q^2) \sum_{a=1}^m S_q^a S_{-q}^a - \frac{\delta_0}{2} \times \right. \\ \times \sum_{a,b=1}^m \int d^{D-1} q_1 d^{D-1} q_2 d^{D-1} q_3 S_{q_1}^a S_{q_2}^a S_{q_3}^b S_{-q_1-q_2-q_3}^b + \\ \left. + u_0 \sum_{a=1}^m \int d^{D-1} q_1 d^{D-1} q_2 d^{D-1} q_3 S_{q_1}^a \times \right. \\ \left. \times S_{q_2}^a S_{q_3}^a S_{-q_1-q_2-q_3}^a \right\} + q \frac{c_0}{2} \int d^{D-1} q S_q S_{-q} \Big|_{z=0}.$$

Свойства исходной системы могут быть получены в пределе числа реплик (образов)  $m \rightarrow 0$ .

Наличие свободной границы уже в однородных системах приводит к новым свойствам модели [11]. На фазовой диаграмме таких систем присутствуют неупорядоченная фаза (SD/BD), поверхностно-упорядоченная объемно-неупорядоченная фаза (SO/BD) и поверхностно-упорядоченная объемно-упорядоченная фаза (SO/BO). Линии на фазовой диаграмме, разделяющие данные фазы, определяют три вида фазовых переходов. Переход из SD/BD в SO/BD носит название поверхностного (surface) фазового перехода, из SO/BD в SO/BO — экстраординарного (extraordinary) фазового перехода, из SD/BD в SO/BO — обычного (ordinary) или объемного фазового перехода. Пересечение этих трех линий фазовых переходов образует мультикритическую точку, фазовый переход в которой получил название специального (special) фазового перехода. Вид фазового перехода однозначно определяется соотношением констант  $c_0$  и  $\tau_0$ . Так, в окрестности обычного фазового перехода выполняется условие  $\tau_0 \ll c_0^2 \ll \Lambda$ , где  $\Lambda$  — обратный параметр решетки, а  $c_0 > 0$ , поэтому в самой точке перехода будут выполняться соотношения  $\tau_0 \rightarrow 0$ ,  $c_0/\tau_0 \rightarrow \infty$ . В окрестности экстраординарного фазового перехода условия имеют вид  $\tau_0 \ll c_0^2 \ll \Lambda$ ,  $c_0 < 0$ , вдоль самой же линии фазового перехода  $\tau_0 \rightarrow 0$ ,  $c_0/\tau_0 \rightarrow -\infty$ . В окрестности поверхностного фазового перехода  $c_0 \ll \tau_0 \ll \Lambda$ ,  $\tau_0 > 0$ , откуда в точке фазового перехода  $c_0 \rightarrow 0$ ,  $c_0/\tau_0 \rightarrow \infty$ . Для специального фазового перехода  $c_0 \rightarrow 0$ ,  $\tau_0 \rightarrow 0$ , однако  $c_0/\tau_0 \rightarrow 0$ .

Как показано в работе [7], свободный пропагатор в рассматриваемом случае будет иметь вид

$$G(\mathbf{q}; z, z') = \frac{1}{2k_0} \left[ \exp(-k_0|z - z'|) - \frac{c_0 - k_0}{c_0 + k_0} \exp(-k_0(z + z')) \right], \quad (4)$$

где  $k_0 = \sqrt{q^2 + \tau_0}$ .

### 3. ОБЪЕМНЫЕ КРИТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ

Поведение системы в критической области определяется значениями эффективных зарядов в неподвижной точке ренормгруппового преобразования, которое в рассматриваемом случае будет иметь вид

$$S_q^{(0)} = Z^{1/2} S_q, \quad \tau_0 = b^2 \tau Z_\tau, \\ u_0 = b^{4-D} u Z_u, \quad \delta_0 = b^{4-D} \delta Z_\delta,$$

масштабный параметр  $b$  вводится для приведения величин к безразмерному виду.

Z-факторы определяются из требования регулярности перенормированных вершинных функций, выраженного в условиях нормировки:

$$Z \frac{\partial}{\partial k^2} \Gamma_{bulk}^{(2)}(k) \Big|_{k^2=0} = 1, \\ Z^2 \Gamma_{u,bulk}^{(4)} \Big|_{k^2=0} = b^{4-D} u, \\ Z^2 \Gamma_{\delta,bulk}^{(4)} \Big|_{k^2=0} = b^{4-D} \delta, \\ Z \Gamma_{t,bulk}^{(2,1)} \Big|_{k^a=0} = b^{2-D/2} \tau. \quad (5)$$

Здесь  $\Gamma_{u,bulk}^{(4)}$  и  $\Gamma_{\delta,bulk}^{(4)}$  — четырехточечные объемные вершинные функции,  $\Gamma_{bulk}^{(2)}$  — двухточечная объемная вершинная функция,  $\Gamma_{t,bulk}^{(2,1)}$  — двухточечная объемная вершинная функция со вставкой.

Представим свободный пропагатор в виде суммы двух слагаемых:  $G = G_b + G_s$ . Первое слагаемое

$$G_b(\mathbf{q}; z, z') = \frac{1}{2k_0} e^{-k_0|z-z'|} \quad (6)$$

зависит только от разности координат двух точек системы и после фурье-преобразования по координате  $z$  принимает вид

$$G_b = \frac{1}{\tau_0 + \mathbf{p}^2}, \quad (7)$$

где  $\mathbf{p} = (\mathbf{q}, p_z)$  — трехмерный вектор. Данное выражение совпадает с обычным пропагатором для неограниченных систем, поэтому в дальнейшем будем называть его объемным.

Второе слагаемое,

$$G_s(\mathbf{q}; z, z') = -\frac{1}{2k_0} \frac{c_0 - k_0}{c_0 + k_0} \exp(-k_0(z + z')), \quad (8)$$

существенно зависит от положения обеих точек и определяется поверхностным эффективным зарядом  $c_0$ , эту часть пропагатора будем называть поверхностной. Запишем предельные значения поверхностной части пропагатора в случае обычного фазового перехода  $c_0/\tau_0 \rightarrow \infty$ :

$$G_s^{ord}(\mathbf{q}; z, z') = -\frac{1}{2k_0} \exp(-k_0(z + z')) \quad (9)$$

и в случае специального фазового перехода  $c_0/\tau_0 \rightarrow 0$ :

$$G_s^{spec}(\mathbf{q}; z, z') = \frac{1}{2k_0} \exp(-k_0(z + z')). \quad (10)$$

В связи с тем, что система ограничена только с одной стороны, режим критического поведения будет определяться основным объемом среды, находящимся достаточно далеко от свободной поверхности [6]. При рассмотрении точек, удаленных от свободной поверхности системы, можно перейти к пределу  $z, z' \rightarrow \infty$ . В рассматриваемом предельном случае  $G_b \gg G_s$ , поэтому во всех предыдущих работах, посвященных критическому поведению полуграниченных систем, пренебрегали малыми поправками к объемному критическому поведению, возникающими вследствие наличия свободной поверхности. Тем не менее определение этих поправок является важной задачей, в силу того что любые экспериментально изучаемые системы ограничены.

Запишем уравнение Каллана–Симанзика для объемных вершинных функций:

$$\left[ b \frac{\partial}{\partial b} + \beta_u \frac{\partial}{\partial u} + \beta_\delta \frac{\partial}{\partial \delta} - \gamma_\varphi \frac{m}{2} b \frac{\partial \ln Z_\varphi}{\partial b} - \gamma_\tau \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \right] \times \Gamma_{bulk}^{(m)}(q; \tau, u, \delta, b) = 0. \quad (11)$$

В этом уравнении введены функции

$$\begin{aligned} \beta_u &= b \frac{\partial u}{\partial b}, & \beta_\delta &= b \frac{\partial \delta}{\partial b}, \\ \gamma_\tau &= b \frac{\partial \tau}{\partial b}, & \gamma_\varphi &= b \frac{\partial S_q}{\partial b}, \end{aligned} \quad (12)$$

определяющие поведение системы в критической области.

На рис. 1 приведены фейнмановские диаграммы только для вершинных функций однородной системы, они необходимы для расчета соответствующих интегралов. Фейнмановские диаграммы с учетом примесных вершин не приводят к новым интегралам. При изображении диаграмм линии, соответствующие объемной части пропагатора, обозначены

буквой « $b$ », линии, соответствующие поверхностной части пропагатора, обозначены буквой « $s$ ».

В диаграммах  $J_0^{(0)}$ ,  $J_1^{(0)}$  и  $G_0^{(0)}$  присутствуют только «объемные» линии, поэтому они совпадают с соответствующими интегралами неограниченных систем.

$$J_0^{(0)} = \pi^2, \quad J_1^{(0)} = \frac{2\pi^4}{3}, \quad G_0^{(0)} = \frac{2\pi^4}{27}. \quad (13)$$

Для всех остальных интегралов приведены абсолютные значения, так как для обычного и специального переходов они различаются только знаком:

$$\begin{aligned} J_0^{(1)} &= \frac{1}{(2\pi)^{D-1}} \times \\ &\times \int_0^\infty \int_0^\infty \int d^{D-1} q dz_1 dz_2 G_b(q; z_1, z_2) \times \\ &\times G_s(q; z_1, z_2) = \frac{5\pi}{16}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} J_0^{(2)} &= \frac{1}{(2\pi)^{D-1}} \times \\ &\times \int_0^\infty \int_0^\infty \int d^{D-1} q dz_1 dz_2 G_s(q; z_1, z_2) \times \\ &\times G_s(q; z_1, z_2) = \frac{\pi}{16}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} J_1^{(1)} &= \frac{1}{(2\pi)^{D-1}} \times \\ &\times \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \int d^{D-1} q d^{D-1} p dz_1 dz_2 dz_3 \times \\ &\times G_b(q; z_1, z_2) G_s(-q; z_1, z_3) G_b(p; z_2, z_3) \times \\ &\times G_b(q-p; z_2, z_3) = 1.421210, \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} J_1^{(2)} &= \frac{1}{(2\pi)^{2D-2}} \times \\ &\times \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \int d^{D-1} q d^{D-1} p dz_1 dz_2 dz_3 \times \\ &\times G_b(q; z_1, z_2) G_b(-q; z_1, z_3) G_b(p; z_2, z_3) \times \\ &\times G_s(q-p; z_2, z_3) = 0.760073, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} J_1^{(3)} &= \frac{1}{(2\pi)^{2D-2}} \times \\ &\times \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \int d^{D-1} q d^{D-1} p dz_1 dz_2 dz_3 \times \\ &\times G_b(q; z_1, z_2) G_b(-q; z_1, z_3) \times \\ &\times G_s(p; z_2, z_3) G_s(q-p; z_2, z_3) = 0.295748, \end{aligned}$$

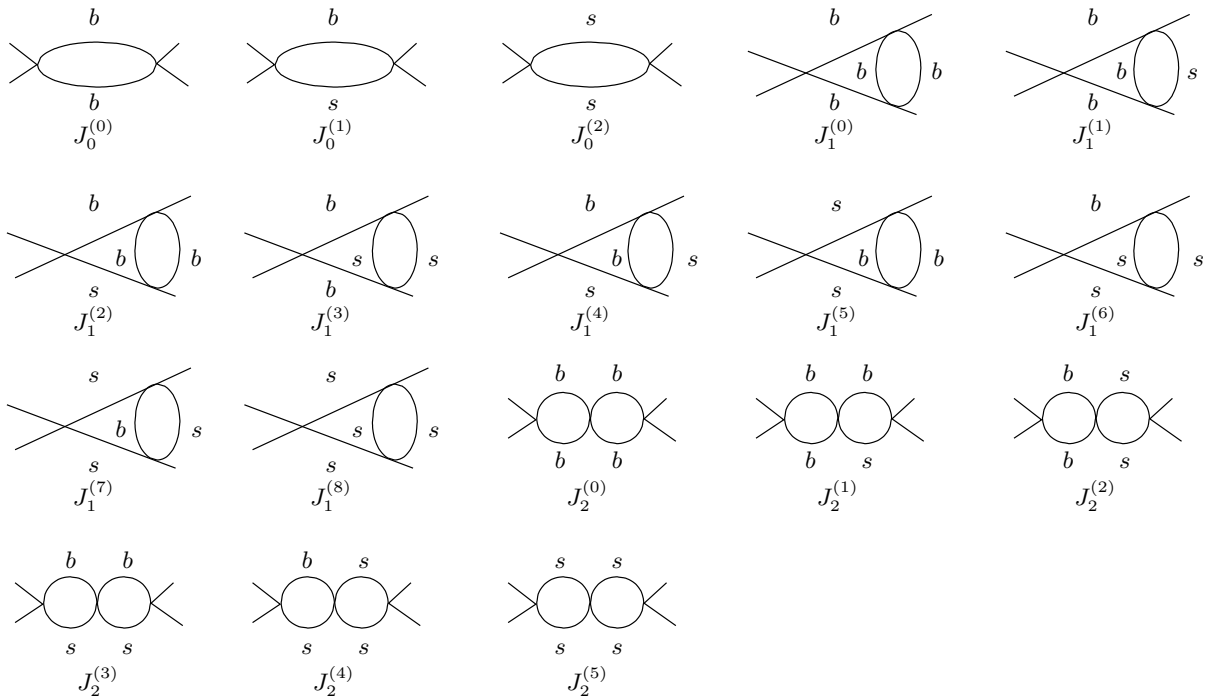


Рис. 1. Фейнмановские диаграммы для вершинной функции  $\Gamma_u^{(4)}$

$$J_1^{(4)} = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \int \int d^{D-1}q d^{D-1}p dz_1 dz_2 dz_3 \times \\ \times G_b(q; z_1, z_2) G_s(-q; z_1, z_3) G_b(p; z_2, z_3) \times \\ \times G_s(q-p; z_2, z_3) = 0.349384,$$

$$J_1^{(5)} = \frac{1}{(2\pi)^{2D-2}} \times \\ \times \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \int \int d^{D-1}q d^{D-1}p dz_1 dz_2 dz_3 \times \\ \times G_b(q; z_1, z_2) G_s(-q; z_1, z_3) G_s(p; z_2, z_3) \times \\ \times G_s(q-p; z_2, z_3) = 0.174535,$$

$$J_1^{(6)} = \frac{1}{(2\pi)^{2D-2}} \times \\ \times \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \int \int d^{D-1}q d^{D-1}p dz_1 dz_2 dz_3 \times \\ \times G_s(q; z_1, z_2) G_s(-q; z_1, z_3) G_s(p; z_2, z_3) \times \\ \times G_b(q-p; z_2, z_3) = 0.177920,$$

$$J_1^{(7)} = \frac{1}{(2\pi)^{2D-2}} \times \\ \times \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \int \int d^{D-1}q d^{D-1}p dz_1 dz_2 dz_3 \times \\ \times G_s(q; z_1, z_2) G_s(-q; z_1, z_3) G_s(p; z_2, z_3) \times \\ \times G_s(q-p; z_2, z_3) = 0.112210,$$

$$G_0^{(1)} = -\frac{1}{(2\pi)^{2D-2}} \times \\ \times \frac{\partial}{\partial k^2} \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \int \int d^{D-1}q d^{D-1}p dz_1 dz_2 dz_3 \times \\ \times G_b(q+k; z_1, z_2) \times \\ \times G_b(p; z_1, z_2) G_s(p+q; z_1, z_2) \Big|_{k^2=0} = 0.333481,$$

$$G_0^{(2)} = -\frac{1}{(2\pi)^{2D-2}} \times \\ \times \frac{\partial}{\partial k^2} \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \int \int d^{D-1}q d^{D-1}p dz_1 dz_2 dz_3 \times \\ \times G_b(q+k; z_1, z_2) \times \\ \times G_s(p; z_1, z_2) G_s(p+q; z_1, z_2) \Big|_{k^2=0} = 0.160209,$$

$$G_0^{(3)} = -\frac{1}{(2\pi)^{2D-2}} \times \\ \times \frac{\partial}{\partial k^2} \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \int \int d^{D-1}q d^{D-1}p dz_1 dz_2 dz_3 \times \\ \times G_s(q+k; z_1, z_2) \times \\ \times G_s(p; z_1, z_2) G_s(p+q; z_1, z_2) \Big|_{k^2=0} = 0.822467,$$

$$J_0^{ord} = J_0^{(0)} - 2J_0^{(1)} + J_0^{(2)},$$

$$J_0^{spec} = J_0^{(0)} + 2J_0^{(1)} + J_0^{(2)},$$

$$\begin{aligned}
 G_0^{ord} &= G_0^{(0)} - 3G_0^{(1)} + 3G_0^{(2)} - G_0^{(3)}, \\
 G_0^{spec} &= G_0^{(0)} + 3G_0^{(1)} + 3G_0^{(2)} + G_0^{(3)}, \\
 J_1^{ord} &= J_1^{(0)} - 2J_1^{(1)} - 2J_1^{(2)} + J_1^{(3)} + \\
 &+ 4J_1^{(4)} - 2J_1^{(5)} - 2J_1^{(6)} + J_1^{(7)}, \\
 J_1^{spec} &= J_1^{(0)} + 2J_1^{(1)} + 2J_1^{(2)} + J_1^{(3)} + \\
 &+ 4J_1^{(4)} + 2J_1^{(5)} + 2J_1^{(6)} + J_1^{(7)}, \\
 J_1^{ord} / (J_0^{ord})^2 &= 0.676982, \\
 J_1^{spec} / (J_0^{spec})^2 &= 0.747187, \\
 G_0^{ord} / (J_0^{ord})^2 &= 0.065781, \\
 G_0^{spec} / (J_0^{spec})^2 &= 0.089463.
 \end{aligned}$$

Без учета поверхностных эффектов отношения интегралов равны

$$J_1 / (J_0)^2 = 2/3, \quad G / (J_0)^2 = 2/27. \quad (15)$$

Переопределяя эффективные вершины взаимодействия  $v_1 = uJ_0$ ,  $v_2 = \delta J_0$ , получаем выражения для  $\beta$ - и  $\gamma$ -функций в двухпетлевом приближении:

$$\begin{aligned}
 \beta_1 &= -(4 - D)v_1 \times \\
 &\times \left[ 1 - 36v_1 + 24v_2 + 1728 \left( 2\tilde{J}_1 - 1 - \frac{2}{9}\tilde{G} \right) v_1^2 - \right. \\
 &\left. - 2304 \left( 2\tilde{J}_1 - 1 - \frac{1}{6}\tilde{G} \right) v_1 v_2 + 672 \left( 2\tilde{J}_1 - 1 - \frac{2}{3}\tilde{G} \right) v_2^2 \right],
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \beta_2 &= -(4 - D)v_2 \times \\
 &\times \left[ 1 - 24v_1 + 8v_2 + 576 \left( 2\tilde{J}_1 - 1 - \frac{2}{3}\tilde{G} \right) v_1^2 - \right. \\
 &\left. - 1152 \left( 2\tilde{J}_1 - 1 - \frac{1}{3}\tilde{G} \right) v_1 v_2 + 352 \left( 2\tilde{J}_1 - 1 - \frac{1}{22}\tilde{G} \right) v_2^2 \right],
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \gamma_t &= (4 - D) \left[ -12v_1 + 4v_2 + 288 \left( 2\tilde{J}_1 - 1 - \frac{1}{3}\tilde{G} \right) v_1^2 - \right. \\
 &\left. - 192 \left( 2\tilde{J}_1 - 1 - \frac{2}{3}\tilde{G} \right) v_1 v_2 + 32 \left( 2\tilde{J}_1 - 1 - \frac{1}{2}\tilde{G} \right) v_2^2 \right],
 \end{aligned}$$

$$\gamma_\varphi = (4 - D)64\tilde{G}(3v_1^2 - 3v_1 v_2 + v_2^2),$$

$$\tilde{J}_1 = \frac{J_1}{J_0^2}, \quad \tilde{G} = \frac{G}{J_0^2}.$$

Полученные выражения для  $\beta$ -функций представляют собой асимптотические ряды и для извлечения из них нужной физической информации необходимо применить методы суммирования. В данной работе было использовано обобщенное на двухпараметрический случай преобразование Бореля–Леруа, дающее адекватные результаты в приме-

нении к рядам, возникающим в теории критических явлений [22]:

$$\begin{aligned}
 f(v_1, v_2) &= \sum_{i_1, i_2} c_{i_1, i_2} v_1^{i_1} v_2^{i_2} = \\
 &= \int_0^\infty e^{-t} t^b F(v_1 t, v_2 t) dt, \quad (16) \\
 F(v_1, v_2) &= \sum_{i_1, i_2} \frac{c_{i_1, i_2}}{(i_1 + i_2 + b)!} v_1^{i_1} v_2^{i_2}.
 \end{aligned}$$

Для аналитического продолжения борелевского образа функции вводится ряд по вспомогательной переменной  $\theta$ :

$$\tilde{F}(v_1, v_2, \theta) = \sum_{k=0}^\infty \theta^k \sum_{i_1, i_2} \frac{c_{i_1, i_2}}{k!} v_1^{i_1} v_2^{i_2} \delta_{i_1 + i_2, k}, \quad (17)$$

к которому применяется аппроксимация Паде [L/M] в точке  $\theta = 1$ . В двухпетлевом приближении для вычисления  $\beta$ -функций были использованы аппроксиманты [2/1] с варьированием параметра  $b$ . Как показано в работе [22], такое варьирование  $b$  позволяет выяснить, в каких пределах изменяется значение вершинных функций, и оценить погрешность полученных критических индексов.

Режим критического поведения полностью определяется устойчивыми неподвижными точками ренормгруппового преобразования, которые могут быть найдены из условия равенства нулю  $\beta$ -функций:

$$\beta_i(v_1^*, v_2^*) = 0 \quad (i = 1, 2). \quad (18)$$

Требование устойчивости фиксированной точки сводится к условию положительности собственных значений  $b_i$  матрицы

$$B_{i,j} = \frac{\partial \beta_i(v_1^*, v_2^*)}{\partial v_j} \quad (i, j = 1, 2). \quad (19)$$

Следует отметить, что процедура суммирования Паде–Леруа возможна не при любых значениях параметра  $b$ , что существенно снижает возможности использования метода. Это ограничение связано с появлением у аппроксимант полюсов вблизи решений системы уравнений (18), что приводит к невозможности определения положения фиксированных точек. В данной работе проводилось варьирование параметра  $b$  в интервале от 0 до значения, начиная с которого определение устойчивой фиксированной точки невозможно. На данном интервале выбирались 20 значений параметра  $b$ , для которых проводился поиск фиксированных точек. В качестве зна-

чения эффективных зарядов в фиксированной точке выбирались средние значения с некоторой погрешностью, определяемой разбросом значений при различных  $b$ .

Устойчивая неподвижная точка ренормгруппового преобразования для обычного фазового перехода однородных систем определяется значениями  $v_1^{ord*} = 0.048 \pm 0.002$ ,  $v_2^{ord*} = 0$ , а для специального перехода имеем  $v_1^{spec*} = 0.066 \pm 0.007$ ,  $v_2^{spec*} = 0$ . Аналогичные значения для примесных систем при обычном фазовом переходе равны  $v_1^{ord*} = 0.067 \pm 0.002$ ,  $v_2^{ord*} = 0.033 \pm 0.003$ , при специальном составляют  $v_1^{spec*} = 0.071 \pm 0.001$ ,  $v_2^{spec*} = 0.015 \pm 0.002$ . Для сравнения неподвижная точка ренормгруппового преобразования в двухпетлевом приближении для неограниченной однородной среды [27]  $v_1^* = 0.046 \pm 0.002$ ,  $v_2^* = 0$ , для среды с замороженными дефектами структуры [28]  $v_1^* = 0.067 \pm 0.002$ ,  $v_2^* = 0.035 \pm 0.003$ .

Индекс  $\nu$ , характеризующий рост радиуса корреляции в окрестности критической точки ( $R_c \sim |T - T_c|^{-\nu}$ ), находится на основе соотношения

$$\begin{aligned} \nu &= \frac{1}{2}(1 + \gamma_t)^{-1} = \\ &= \frac{1}{2} \left[ 1 + 6v_1 - v_2 - 144 \left( 2\tilde{J}_1 - 1 - \frac{1}{3}\tilde{G} - \frac{1}{4} \right) v_1^2 + \right. \\ &\quad \left. + 96 \left( 2\tilde{J}_1 - 1 - \frac{1}{2}\tilde{G} - \frac{1}{4} \right) v_1 v_2 - \right. \\ &\quad \left. - 16 \left( 2\tilde{J}_1 - 1 - \frac{1}{2}\tilde{G} - \frac{1}{4} \right) v_2^2 \right]. \end{aligned}$$

Подстановка значений эффективных зарядов фиксированной точки специального перехода приводит в случае однородных систем к значению  $\nu^{spec} = 0.654 \pm 0.006$ , в случае примесных систем равно  $\nu_{imp}^{spec} = 0.669 \pm 0.003$ . Для обычного перехода в однородных системах  $\nu^{ord} = 0.635 \pm 0.007$ , в примесных  $\nu_{imp}^{ord} = 0.684 \pm 0.002$ . Для сравнения приведем значение критических индексов системы без учета свободной границы для однородных систем  $\nu = 0.632 \pm 0.004$  и примесных систем  $\nu_{imp} = 0.685 \pm 0.003$ .

Индекс Фишера  $\eta$ , описывающий поведение корреляционной функции в окрестности критической точки в пространстве волновых векторов ( $G \sim k^{2+\eta}$ ), определяется на основе скейлинговой функции  $\gamma_\varphi$ :  $\eta = \gamma_\varphi(v_1^*, v_2^*)$ . При обычном фазовом переходе в однородных системах  $\eta^{ord} = 0.029 \pm 0.003$ , в примесных —  $\eta_{imp}^{ord} = 0.033 \pm 0.002$ , при специальном фазовом переходе в однородных системах  $\eta^{spec} = 0.068 \pm 0.008$ , в примесных —  $\eta_{imp}^{spec} = 0.069 \pm 0.004$ . Для сравнения

аналогичные значения индекса Фишера без учета поверхностных эффектов составляют для однородных систем  $\eta = 0.030 \pm 0.002$ , для примесных —  $\eta_{imp} = 0.035 \pm 0.001$ .

Значения остальных критических индексов могут быть определены исходя из скейлинговых соотношений.

#### 4. СПЕЦИАЛЬНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД

Кроме обычных критических индексов, которые в дальнейшем будем называть объемными, система характеризуется поверхностными критическими индексами, задающими режим фазового перехода на ограничивающей плоскости.

Введем  $(N + M)$ -точечную корреляционную функцию

$$G^{(N,M)}(x, r) = \left\langle \prod_{i=1}^N S(\mathbf{x}_i) \prod_{j=1}^M S(\mathbf{r}_j, 0) \right\rangle \quad (20)$$

с  $N$  точками под поверхностью и  $M$  точками на поверхности среды,  $\langle \dots \rangle$  означает термодинамическое усреднение с больцмановским множителем  $\exp(-H[S])$ . Переходя к фурье-образам по координатам, параллельным свободной границе, получаем

$$\begin{aligned} G^{(N,M)}(\mathbf{p}, z) &= (2\pi)^{D-1} \delta \left[ \sum_{k=1}^{N+M} \mathbf{p}_k \right] = \\ &= \int G^{(N,M)}(x, r) \exp \left[ -i \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i \mathbf{x}_{i\parallel} - i \sum_{j=1}^M \mathbf{p}_{N+j} \mathbf{r}_j \right] \times \\ &\quad \times \left[ \prod_{i=1}^N d\mathbf{x}_{i\parallel} \right] \left[ \prod_{j=1}^M d\mathbf{r}_j \right]. \quad (21) \end{aligned}$$

Ренормгрупповые преобразования для величин на поверхности имеют вид

$$S_q^{(s)(0)} = Z_1^{1/2} S_q^{(s)}, \quad c_0 = b^2 c Z_{\parallel}, \quad (22)$$

где  $S_q^{(s)} = S(z)_q \Big|_{z=0}$ .

Для ренормировки корреляционной функции можно записать соотношение

$$\begin{aligned} G_{ren}^{(N,M)}(\tau, u, \delta, c) &= \\ &= Z^{-(N+M)/2} Z_1^{-M/2} G^{(N,M)}(\tau_0, u_0, \delta_0, c_0). \quad (23) \end{aligned}$$

Введем корреляционную функцию со вставками в виде

$$G^{(N,M;I,I_1)}(\tau_0, u_0, \delta_0, c_0) = \frac{\partial^I}{(\partial\tau_0)^I} \frac{\partial^{I_1}}{(\partial c_0)^{I_1}} G^{(N,M)}(\tau_0, u_0, \delta_0, c_0). \quad (24)$$

Запишем ренормгрупповые преобразования для корреляционной функции со вставками:

$$G_{ren}^{(N,M;I,I_1)}(\tau, u, \delta, c) = Z^{-(N+M)/2} Z_1^{-M/2} Z_\tau^I \times Z_{\parallel}^{I_1} G^{(N,M;I,I_1)}(\tau_0, u_0, \delta_0, c_0). \quad (25)$$

В низшем порядке разложение  $G^{(N,M)}(\tau_0, u_0, \delta_0, c_0)$  по степеням  $u_0$  имеет вид

$$G^{(N,M)}(p; \tau_0, u_0, \delta_0, c_0) = \frac{1}{c_0 + \sqrt{p^2 + \tau_0}} + O(u_0, \delta_0). \quad (26)$$

Как и для объемных вершинных функций, выберем условия нормировки таким образом, чтобы при нулевом внешнем импульсе  $p = 0$  поверхностная двухточечная корреляционная функция совпадала со своим нулевым приближением. Соответственно после подстановки  $\tau_0 \rightarrow \tau, c_0 \rightarrow c$  имеем

$$G_{ren}^{(0,2)}(p; \tau, u, \delta, c) \Big|_{p=0} = \frac{1}{\sqrt{\tau} + c}, \quad (27)$$

$$\frac{\partial}{\partial p^2} G_{ren}^{(0,2)}(p; \tau, u, \delta, c) \Big|_{p=0} = -\frac{1}{2\sqrt{\tau}(\sqrt{\tau} + c)^2}.$$

Для корреляционной функции со вставкой условие нормировки имеет вид

$$G^{(0,2;0,1)}(p; \tau, u, \delta, c) \Big|_{p=0} = \frac{1}{(c + \sqrt{\tau})^2}. \quad (28)$$

Поверхностные  $Z$ -факторы  $Z_1$  и  $Z_{\parallel}$  определяются из соотношений

$$Z_1 Z = -2\sqrt{\tau} (\sqrt{\tau} + c)^2 \frac{\partial}{\partial p^2} G^{(0,2)}(p; \tau_0(\tau, u, \delta), u_0(\tau, u, \delta), \delta_0(\tau, u, \delta), c_0(c, \tau, u)) \Big|_{p=0}, \quad (29)$$

$$Z_{\parallel} = -Z_1 Z (\sqrt{\tau} + c)^2 \frac{\partial}{\partial c_0} G^{(0,2)}(0; \tau_0(\tau, u, \delta), u_0(\tau, u, \delta), \delta_0(\tau, u, \delta), c_0) \Big|_{c_0=c_0(c, \tau, u)}.$$

В целях упрощения вычислений эти соотношения удобнее переписать в виде

$$(Z_1 Z)^{-1} = \lim_{p \rightarrow 0} \frac{\sqrt{\tau}}{p} \frac{\partial}{\partial p} \left[ G^{(0,2)}(p; \tau_0(\tau, u), u_0(\tau, u), c_0(c, \tau, u)) \right]^{-1}, \quad (30)$$

$$Z_{\parallel}^{-1} = Z_1 Z \frac{\partial}{\partial c_0} \left[ G^{(0,2)}(0; \tau_0(\tau, u, \delta), u_0(\tau, u, \delta), \delta_0(\tau, u, \delta), c_0) \right]^{-1} \Big|_{c_0=c_0(c, \tau, u, \delta)}.$$

Используем разложение корреляционной функции на свободную часть

$$\left[ G^{(0,2)}(p; \tau_0, 0, 0, c_0) \right]^{-1} = c_0 + k_0 \quad (31)$$

и флуктуационные поправки  $\sigma_0(p; \tau_0, u_0, \delta_0, c_0)$ :

$$\left[ G^{(0,2)}(p; \tau_0, u_0, \delta_0, c_0) \right]^{-1} = c_0 + k_0 - \sigma_0(p; \tau_0, u_0, \delta_0, c_0). \quad (32)$$

Для вычисления  $\sigma_0(p; u_0, \delta_0)$  запишем представление полного пропагатора между двумя точками на поверхности с помощью свободной энергии  $\Sigma(p; \tau_0, u_0)$ , определяющей флуктуационные поправки к двухточечной вершинной функции  $\Gamma_{\tau}^{(2)}$ :

$$G^{(0,2)}(p; \tau_0, u_0, \delta_0, c_0) = {}_s |G|_s + {}_s |GTG|_s, \quad (33)$$

$$T = \Sigma (1 - G\Sigma)^{-1}.$$

Значки  ${}_s |$  и  $|_s$  показывают, что левая и правая точки пропагатора локализованы на поверхности. После подстановки равенства (32) в (33) получаем

$$\sigma_0(p; \tau_0, u_0, \delta_0, c_0) = \frac{g_0 T g_0}{1 + {}_s |G|_s g_0 T g_0} = g_0 \Sigma g_0 + g_0 \Sigma G \Sigma g_0 - {}_s |G|_s (g_0 \Sigma g_0)^2 + O(\Sigma^3), \quad (34)$$

где

$$g_0(p; z) = (c_0 + k_0) G(p; z, 0) = e^{-k_0 z}, \quad (35)$$

$$k_0 = \sqrt{\tau_0 + p^2}.$$

Фейнмановские диаграммы для  $G^{(0,2)}$  без примесных вершин в двухпетлевом приближении представлены на рис. 2, аналитическое выражение имеет вид

$$\left[ G^{(0,2)}(p; \tau_0, 0, 0, c_0) \right]^{-1} = c_0 + k_0 - \sum_{i=1}^4 C_i(p) - \frac{C_1^2(p)}{c_0 + k_0}. \quad (36)$$



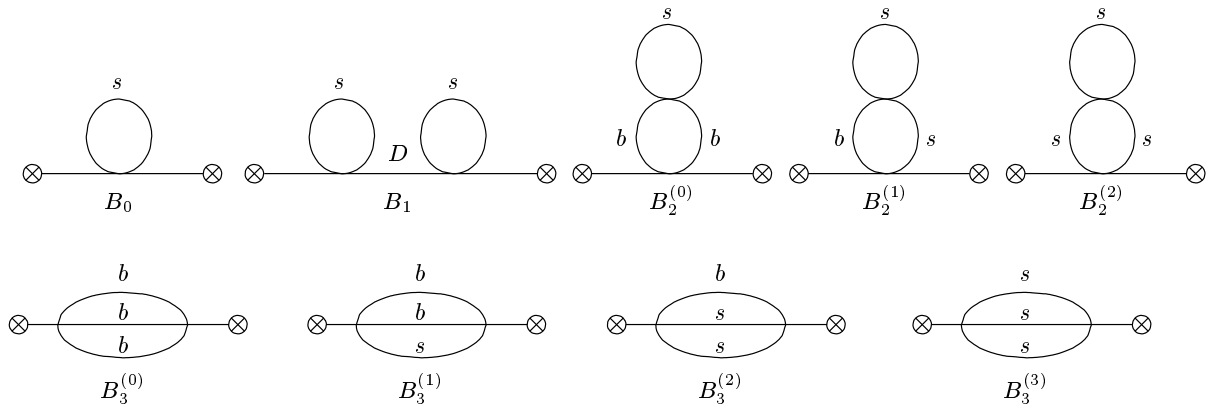


Рис. 2. Фейнмановские диаграммы для корреляционной функции  $G^{(0,2)}$  однородной системы

В этом выражении через  $C_i(p)$  обозначен вклад от диаграммы  $B_i$ , представленной на рис. 2. На этом рисунке линия с индексом «D» означает пропагатор

$$G_D(\mathbf{p}, z, z') = \frac{1}{k_0} [\exp(-k_0|z - z'|) - \exp(-k_0(z + z'))], \quad k_0 = \sqrt{1 + \mathbf{p}^2}. \quad (37)$$

Запишем поверхностную вершинную функцию в виде  $c_0 = c + \delta c$ , где введено смещение  $\delta c$ , собирающее в себе ультрафиолетовые расходимости, возникающие при рассмотрении поверхностных величин, аналогично свободной энергии для объемных величин. Подстановка выражения (32) в (38) дает

$$Z_1 Z [k_0 + c + \delta c - \sigma(p)] \Big|_{p=0} = \sqrt{\tau} + c, \quad (38)$$

откуда имеем

$$\delta c = \{ [Z_1 Z]^{-1} - 1 \} (\sqrt{\tau} + c) + \sigma(0). \quad (39)$$

Отсюда для корреляционной функции

$$G^{(0,2)} = \left[ k_0 - (\sqrt{\tau} + [Z_1 Z]^{-1} (\sqrt{\tau} + c)) - (\sigma(p, c + \delta c) - \sigma(0, c + \delta c)) \right]^{-1}. \quad (40)$$

Из этого выражения вытекает схема вычитаний для каждой диаграммы ее значения при  $p = 0$ . Это же утверждение верно и для поддиаграмм.

Рассматривая специальный фазовый переход, положим  $c = 0$  в выражении (39) и, разлагая  $\delta c$  по степеням эффективных зарядов, для поправки первого порядка получаем

$$\delta c^{(1)} = \{ [Z_1 Z]^{-1} \}^{(1)} \sqrt{\tau} + \sigma(0). \quad (41)$$

Используем полученную поправку для нахождения первых слагаемых разложения для  $\sigma(p, c + \delta c)$ :

$$\sigma(p, c + \delta c) \Big|_{c=0} = \sigma(p, 0) + \frac{\partial \sigma(p, c)}{\partial c} \Big|_{c=0} \delta c^{(1)}. \quad (42)$$

Дифференциальное уравнение ренормгруппы Калана–Симанзика в критической области будет иметь вид [11]

$$\left[ b \frac{\partial}{\partial b} + \beta_1 \frac{\partial}{\partial v_1} + \beta_2 \frac{\partial}{\partial v_2} + \frac{N + M}{2} \eta + \frac{M}{2} \eta_1^{sp} - (1 + \eta_c^{sp}) \tilde{c} \frac{\partial}{\partial \tilde{c}} \right] G_{ren,sp}^{(N,M)} = 0, \quad (43)$$

где

$$\tilde{c} = \frac{c}{\sqrt{\tau}}, \quad \eta_1 = \left( \beta_u \frac{\partial}{\partial u} + \beta_\delta \frac{\partial}{\partial \delta} \right) \ln Z_1, \quad (44)$$

$$\eta_{||} = \left( \beta_u \frac{\partial}{\partial u} + \beta_\delta \frac{\partial}{\partial \delta} \right) \ln Z_{||}.$$

Выражение для  $\eta_{||}^{(spec)} = \eta^{(spec)} + \eta_1^{(spec)}$  неупорядоченных систем в двухпетлевом приближении в случае специального перехода имеет вид

$$\eta_{||}^{(spec)} = -12 \bar{B}_0 v_1 + 12 \bar{B}_0 v_2 + 288 \left( \bar{B}_1 + \bar{B}_2 + \frac{2}{3} \bar{B}_3 - \frac{3}{2} \bar{B}_0 + \bar{B}_0 \bar{B}_0 - \frac{1}{2} \bar{B}_0^2 \right) v_1^2 + 288 \left( \bar{B}_1 + \bar{B}_2 + \frac{2}{3} \bar{B}_3 - \frac{2}{3} \bar{B}_0 + \bar{B}_0 \bar{B}_0 - \frac{1}{2} \bar{B}_0^2 \right) v_2^2 - 576 \left( \bar{B}_1 + \bar{B}_2 + \frac{2}{3} \bar{B}_3 + \bar{B}_0 \bar{B}_0 - \frac{1}{2} \bar{B}_0^2 \right) v_1 v_2. \quad (45)$$

Здесь, как и при описании объемных критических

явлений, введены эффективные заряды  $v_1$  и  $v_2$ , а также обозначения для интегралов

$$\begin{aligned} \overline{B}_0 &= \frac{1}{J_0} \frac{\partial}{\partial p^2} B_0 \Big|_{p^2=0}, & \overline{B}_i &= \frac{1}{J_0^2} \frac{\partial}{\partial p^2} B_i \Big|_{p^2=0}, \\ \overline{\overline{B}}_0 &= \frac{1}{J_0} \frac{\partial^2}{\partial p^2 \partial c_0} B_0 \Big|_{c_0=0, p=0} \quad (i = 1, 2, 3). \end{aligned} \quad (46)$$

Значения интегралов равны

$$\begin{aligned} \overline{B}_0 &= 0.5, & \overline{B}_1 + \overline{B}_2 &= 0.323414, \\ \overline{\overline{B}}_3 &= 0.817579, & \overline{\overline{B}}_0 &= -0.316936. \end{aligned} \quad (47)$$

Суммирование асимптотических выражений методом Бореля–Леруа и подстановка значений эффективных зарядов в фиксированных точках ренормгруппового преобразования приводят к следующим значениям поверхностных критических индексов: для корреляционных функций однородных систем  $\eta_{\parallel}^{(spec)} = -0.239 \pm 0.008$ , для примесных систем равны  $\eta_{\parallel imp}^{(spec)} = -0.279 \pm 0.009$ . Для сравнения аналогичные критические индексы без учета влияния свободной поверхности на объемное критическое поведение в случае однородных систем равны  $\eta_{\parallel}^{(spec)} = -0.189 \pm 0.001$ , в случае примесных систем составляют  $\eta_{\parallel imp}^{(spec)} = -0.234 \pm 0.005$ .

Остальные критические индексы могут быть найдены из скейлинговых соотношений [11]:

$$\begin{aligned} \eta_{\perp} &= 0.5(\eta + \eta_{\parallel}), & \beta_1 &= 0.5\nu(D - 2 + \eta_{\parallel}), \\ \gamma_{11} &= \nu(1 - \eta_{\parallel}), \\ \gamma_1 &= \nu(2 - \eta_{\perp}), & \delta_1 &= \frac{D + 2 - \eta}{D - 2 + \eta_{\parallel}}, \\ \delta_{11} &= \frac{D - \eta_{\parallel}}{D - 2 + \eta_{\parallel}}. \end{aligned} \quad (48)$$

Для однородных систем значения индексов равны

$$\begin{aligned} \eta_{\perp}^{spec} &= -0.09 \pm 0.01, & \beta_1^{spec} &= 0.249 \pm 0.009, \\ \gamma_{11}^{spec} &= 0.81 \pm 0.03, \\ \gamma_1^{spec} &= 1.37 \pm 0.05, & \delta_1^{spec} &= 6.5 \pm 0.8, \\ \delta_{11}^{spec} &= 4.3 \pm 0.1. \end{aligned} \quad (49)$$

Для примесных систем поверхностные критические индексы принимают значения

$$\begin{aligned} \eta_{\perp imp}^{spec} &= -0.105 \pm 0.007, \\ \beta_{1 imp}^{spec} &= 0.241 \pm 0.007, \\ \gamma_{11 imp}^{spec} &= 0.86 \pm 0.02, \\ \gamma_{1 imp}^{spec} &= 1.41 \pm 0.04, & \delta_{1 imp}^{spec} &= 6.8 \pm 0.4, \\ \delta_{11 imp}^{spec} &= 4.5 \pm 0.1. \end{aligned} \quad (50)$$

## 5. ОБЫЧНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД

Обычный фазовый переход требует рассмотрения свойств системы в пределе  $\tilde{c} = c/\sqrt{\tau} \rightarrow \infty$ . Однако исследование функции  $G^{(N,M)}$  в данном пределе весьма затруднено. Как показано в работах [23–26], ренормгрупповой анализ существенно упрощается в случае исследования функции

$$\widehat{G}^{(N,M)}(x, r) = \left\langle \prod_{i=1}^N S(\mathbf{x}_i) \prod_{j=1}^M \partial_n S(\mathbf{r}_j, 0) \right\rangle, \quad (51)$$

где  $\partial_n$  — производная по нормали к ограничивающей плоскости.

Введем обозначения для корреляционной функции  $\widehat{G}_{\infty}^{(N,M)} = \lim_{\tilde{c} \rightarrow \infty} \widehat{G}^{(N,M)}$ , функции флуктуационных поправок  $\sigma^{(D)}(p; \tau, u_0, \delta_0) = \sigma(p; \tau, u_0, \delta_0, \infty)$  и свободного пропагатора

$$G_D = \lim_{\tilde{c} \rightarrow \infty} G_0 = \frac{1}{2k_0} \times [\exp(-k_0|z - z'|) - \exp(-k_0(z + z'))]. \quad (52)$$

Аналогично случаю специального фазового перехода получаем

$$\widehat{G}_{\infty}^{(0,2)}(p; \tau_0, u_0, \delta_0) = -k + \sigma^{(D)}(p; \tau, u, \delta). \quad (53)$$

Здесь  $\sigma^{(D)}(p; \tau, u_0, \delta_0) = gT(G_D)g$ . Выражение для  $T(G)$  введено в формуле (33),

$$g(p; z') = e^{-kz'} = \frac{\partial}{\partial z} G_D(p; z, z') \Big|_{z=0}. \quad (54)$$

Введем поверхностный ренормализующий фактор  $Z_{1,\infty}(u, \delta)$ , который описывает ренормгрупповое преобразование производной по нормали к свободной поверхности от флуктуаций параметра порядка:

$$(\partial_n S)_{ren} = [Z_{1,\infty} Z]^{-1/2} \partial_n S. \quad (55)$$

Тогда ренормировка корреляционной функции имеет вид:

$$\begin{aligned} \widehat{G}_{\infty,ren}^{(N,M)}(\{\mathbf{p}\}; \{z_j\}; \tau, u, \delta) &= Z^{-(N+M)/2} Z_{1,\infty}^{-M/2} \times \\ &\times \left[ \widehat{G}_{\infty}^{(N,M)}(\{\mathbf{p}\}; \{z_j\}) - \delta_{N,0}^{M,2} \widehat{G}_{\infty}^{(0,2)}(0) \right]. \end{aligned} \quad (56)$$

Условия нормировки при этом имеют вид

$$\begin{aligned} \widehat{G}_{\infty,ren}^{(0,2)}(0; \tau, u, \delta) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial p^2} \widehat{G}_{\infty,ren}^{(0,2)}(p; \tau, u, \delta) \Big|_{p^2=0} &= -\frac{1}{2\sqrt{\tau}}. \end{aligned} \quad (57)$$

Поверхностный ренормализующий фактор  $Z_{1,\infty}(u, \delta)$  будет определяться из соотношения

$$Z_{1,\infty}(u, \delta)Z(u, \delta) = - \lim_{p \rightarrow 0} \frac{\sqrt{\tau}}{p} \frac{\partial}{\partial p} [\widehat{G}^{(0,2)}(p) - \widehat{G}^{(0,2)}(0)]. \quad (58)$$

Введем скейлинговую функцию

$$\eta_{1,\infty} = \beta_1 \frac{\partial \ln Z_{1,\infty}}{\partial v_1} + \beta_2 \frac{\partial \ln Z_{1,\infty}}{\partial v_2}. \quad (59)$$

Поверхностный критический индекс  $\eta_{\parallel}^{ord}$  для корреляционной функции параллельно свободной поверхности определяется из соотношения [25]

$$\eta_{\parallel}^{ord} = 2 + \eta_{1,\infty}(v_1^*, v_2^*) + \eta(v_1^*, v_2^*), \quad (60)$$

где  $(v_1^*, v_2^*)$  — фиксированная точка ренормгруппового преобразования.

В двухпетлевом приближении для скейлинговой функции получаем выражение

$$\begin{aligned} \eta_{1,\infty} &= 2 - 12\overline{B}_0 v_1 - 12\overline{B}_0 v_2 - \\ &- 288 \left( \overline{B}_1 + \overline{B}_2 + \frac{2}{3}\overline{B}_3 + \frac{3}{2}\overline{B}_0 - \frac{1}{2}\overline{B}_0^2 \right) v_1^2 - \\ &- 288 \left( \overline{B}_1 + \overline{B}_2 + \frac{2}{3}\overline{B}_3 + \frac{2}{3}\overline{B}_0 - \frac{1}{2}\overline{B}_0^2 \right) v_2^2 - \\ &- 576 \left( \overline{B}_1 + \overline{B}_2 + \frac{2}{3}\overline{B}_3 - \frac{1}{2}\overline{B}_0^2 \right) v_1 v_2, \\ \overline{B}_0^{ord} &= 0.410227, \quad \overline{B}_1^{ord} + \overline{B}_2^{ord} = 0, \\ \overline{B}_3^{ord} &= -0.630378. \end{aligned} \quad (61)$$

Подстановка значений эффективных зарядов в фиксированной точке приводит к значению критического индекса для однородных систем  $\eta_{\parallel}^{ord} = 1.51 \pm 0.04$ , для примесных систем  $\eta_{\parallel imp}^{ord} = 1.64 \pm 0.06$ . Остальные поверхностные критические индексы принимают значения

$$\begin{aligned} \eta_{\perp}^{ord} &= 0.77 \pm 0.02, \quad \beta_1^{ord} = 0.79 \pm 0.02, \\ \gamma_{11}^{ord} &= -0.32 \pm 0.01, \\ \gamma_1^{ord} &= 0.78 \pm 0.03, \quad \delta_1^{ord} = 1.98 \pm 0.06, \\ \delta_{11}^{ord} &= 0.60 \pm 0.02, \end{aligned} \quad (62)$$

$$\begin{aligned} \eta_{imp}^{ord} &= 0.84 \pm 0.03, \quad \beta_{imp}^{ord} = 0.91 \pm 0.04, \\ \gamma_{11 imp}^{ord} &= -0.44 \pm 0.04, \\ \gamma_{imp}^{ord} &= 0.80 \pm 0.03, \quad \delta_{imp}^{ord} = 1.88 \pm 0.05, \\ \delta_{11 imp}^{ord} &= 0.51 \pm 0.03. \end{aligned} \quad (63)$$

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенные расчеты показали наличие влияния свободной границы на объемное критическое поведение как однородных, так и неупорядоченных систем. Полученные критические индексы для однородных систем при обычном фазовом переходе ( $\nu^{ord} = 0.635 \pm 0.007$ ,  $\eta^{ord} = 0.029 \pm 0.003$ ) в пределах погрешности не отличаются от критических индексов систем без учета граничных эффектов ( $\nu = 0.632 \pm 0.004$ ,  $\eta = 0.030 \pm 0.002$ ). Отсюда следует, что при описании объемных критических явлений в окрестности точки обычного фазового перехода можно пренебрегать наличием свободной плоской границы.

При специальном фазовом переходе в однородных системах, как и следовало ожидать, влияние свободной границы приводит к более заметному отличию объемных критических индексов ( $\nu^{spec} = 0.654 \pm 0.006$ ,  $\eta^{spec} = 0.068 \pm 0.008$ ) от критических индексов неограниченной системы. Однако, как видно из значений, различие в индексах начинается со второго знака после запятой, что на сегодняшний момент лежит в пределах погрешностей экспериментальных методов и не может быть обнаружено опытным путем.

Аналогичная картина наблюдается и для неупорядоченных систем. Объемные критические индексы системы со свободной границей совпадают с критическими индексами неограниченных систем при обычном фазовом переходе ( $\nu_{imp}^{ord} = 0.684 \pm 0.002$ ,  $\eta_{imp}^{ord} = 0.033 \pm 0.002$  — для обычного перехода,  $\nu_{imp} = 0.685 \pm 0.003$ ,  $\eta_{imp} = 0.035 \pm 0.001$  — для перехода в неограниченной системе). Для специального фазового перехода ( $\nu_{imp}^{spec} = 0.669 \pm 0.003$ ,  $\eta_{imp}^{spec} = 0.069 \pm 0.004$ ) различие в значениях критических индексов более заметное, однако так же, как и для однородных систем, находится в пределах погрешности эксперимента.

Как уже было сказано, различие в значениях объемных индексов настолько мало, что вряд ли может быть выявлено экспериментально, поэтому при расчете объемных критических индексов можно пренебрегать влиянием свободной границы. Однако на значение поверхностных критических индексов положение фиксированной точки ренормгруппового преобразования сказывается значительно сильнее и учет их смещения под влиянием свободной границы необходим.

В табл. 1 приведены значения поверхностных критических индексов, полученных в данной работе, а также поверхностные критические индексы, по-

**Таблица 1.** Поверхностные критические индексы для специального перехода в однородных системах

$\beta_1$	$\gamma_1$	
$0.249 \pm 0.09$	$1.37 \pm 0.05$	Данная работа
$0.257 \pm 0.006$	$1.29 \pm 0.07$	[11]
0.18(2)	1.41(14)	[29]
0.2375(15)	1.328(1)	[30]
0.22	—	[31]

лученные без учета сдвига фиксированных точек в работе [11], и результаты компьютерного моделирования методом Монте-Карло для специального фазового перехода. Как видно из таблицы, результаты, полученные в данной работе с учетом сдвига фиксированных точек ренормгруппового преобразования под действием свободной границы, отличаются от аналогичных результатов, полученных в предположении о невлиятии ограниченности системы на объемные критические явления. Однако с учетом погрешностей интервалы значений критических индексов достаточно существенно пересекаются. Сравнение же с результатами компьютерного моделирования методом Монте-Карло показывает, что значение индекса  $\beta_1$ , полученное в данной работе, находится в лучшем согласии с компьютерным экспериментом. Индекс  $\gamma_1$  находится в хорошем согласии с результатами компьютерного моделирования как с учетом влияния границы на объемные критические явления, так и без такового.

Сравнение поверхностных критических индексов специального фазового перехода для однородных и неупорядоченных систем показало, что с учетом погрешностей они практически совпадают. По-видимому, различия, которые все-таки были получены, являются следствием низкого порядка теории возмущений и будут уменьшаться с ростом количества слагаемых, учитываемых в разложении  $\beta$ - и  $\gamma$ -функций. Отсюда можно сделать вывод о слабом влиянии точечных замороженных дефектов структуры на поверхностные критические явления при специальном фазовом переходе, которое вряд ли может быть обнаружено экспериментально.

В табл. 2 приведены значения поверхностных критических индексов, полученных в данной работе, а также поверхностные критические индексы, полученные без учета сдвига фиксированных точек в работе [11], и результаты компьютерного моде-

**Таблица 2.** Поверхностные критические индексы для обычного перехода в однородных системах

$\beta_1$	$\gamma_1$	
$0.79 \pm 0.02$	$0.78 \pm 0.03$	Данная работа
$0.85 \pm 0.05$	$0.74 \pm 0.02$	[11]
0.78(2)	0.78(6)	[29]
0.807(4)	0.760(4)	[30]
0.79(2)	—	[32]
$0.80 \pm 0.01$	$0.78 \pm 0.05$	[33]

лирования методом Монте-Карло для обычного фазового перехода. Как видно из таблиц, результаты, полученные в данной работе с учетом сдвига фиксированных точек ренормгруппового преобразования под действием свободной границы, находятся в хорошем согласии со всеми результатами компьютерного моделирования методом Монте-Карло. Правда, следует отметить, что критические индексы обычного поверхностного перехода без учета сдвига фиксированных точек под действием свободной поверхности не согласуются только с результатами работы [29]. Так же, как и в случае специального фазового перехода, влияние свободной поверхности на положение фиксированных точек, по-видимому, не может быть обнаружено экспериментально. Однако, в отличие от специального перехода, при обычном фазовом переходе влияние примесей более значительно и, видимо, может быть выявлено в эксперименте.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 06-02-16018).

## ЛИТЕРАТУРА

1. М. И. Каганов, А. Н. Омеланчук, ЖЭТФ **61**, 1679 (1971).
2. D. L. Mills, Phys. Rev. B **3**, 3887 (1971).
3. T. Wolfram, R. E. De Wames, W. F. Hall, and P. W. Palmberg, Surf. Sci. **28**, 45 (1971).
4. B. M. McCoy and T. T. Wu, Phys. Rev. B **162**, 436 (1967).
5. L. Onsager, Phys. Rev. B **65**, 117 (1944).
6. K. Binder and P. C. Hohenberg, Phys. Rev. B **6**, 3461 (1972).

7. T. C. Lubensky and M. H. Rubin, *Phys. Rev. Lett.* **31**, 1469 (1973).
8. T. C. Lubensky and M. H. Rubin, *Phys. Rev. B* **11**, 4533 (1975).
9. H. W. Diehl and S. Dietrich, *Phys. Rev. B* **24**, 2878 (1981).
10. Y. Y. Goldschmidt and D. Jasnow, *Phys. Rev. B* **29**, 3990 (1984).
11. H. W. Diehl and M. Shpot, *Nucl. Phys. B* **528**, 595 (1998).
12. C. Ruge, S. Dunkelmann, and F. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2465 (1992).
13. C. Ruge, S. Dunkelmann, F. Wagner, and J. Wulff, *J. Stat. Phys.* **73**, 293 (1993).
14. R. Hegger and P. Grassberger, *J. Phys. A* **27**, 4069 (1994).
15. A. B. Harris, *J. Phys. C* **7**, 1671 (1974).
16. I. O. Mayer, A. I. Sokolov, and B. N. Shalaev, *Ferroelectrics* **95**, 93 (1989).
17. I. O. Mayer, *J. Phys. A* **22**, 2815 (1989).
18. K. Ohno and Y. Okabe, *Phys. Rev. B* **46**, 5917 (1992).
19. M. Shpot, Z. Usatenko, and Chin-Kun Hu, *Phys. Rev. E* **63**, 056102 (2001).
20. Z. Usatenko and Chin-Kun Hu, E-print archives, cond-mat/0105184.
21. Z. Usatenko and Chin-Kun Hu, *Phys. Rev. E* **68**, 066115 (2003).
22. E. В. Орлов, А. И. Соколов, *ФТТ* **42**, 2087 (2000).
23. H. W. Diehl and S. Dietrich, *Phys. Lett.* **80 A**, 408 (1980).
24. H. W. Diehl and S. Dietrich, *Z. Phys. B* **42**, 65 (1981).
25. H. W. Diehl, *Phase Transition and Critical Phenomena*, ed. by C. Domb and J. L. Lebowitz, Academic, London (1986), Vol. 10, p. 75.
26. H. W. Diehl, S. Dietrich, and E. Eisenriegler, *Phys. Rev. B* **27**, 2937 (1983).
27. G. Jug, *Phys. Rev. B* **27**, 609 (1983).
28. I. O. Mayer, *J. Phys. A* **22**, 2815 (1989).
29. D. P. Landau and K. Binder, *Phys. Rev. B* **41**, 4633 (1990).
30. C. Ruge and F. Wagner, *Phys. Rev. B* **52**, 4209 (1995).
31. M. Vandruscolo, M. Rovere, and A. Fasolino, *Europhys. Lett.* **20**, 547 (1992).
32. M. Kikuchi and Y. Okabe, *Progr. Theor. Phys.* **73**, 32 (1985).
33. M. Pleimling and W. Selke, *Eur. Phys. J. B* **1**, 385 (1998).