ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

17-90-290

БРАНКОВ
Йордан Георгиев

УДК 531.19

ЭФФЕКТЫ КОНЕЧНЫХ РАЗМЕРОВ В МОДЕЛЯХ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ С ДАЛЬНОДЕЙСТВИЕМ

Специальность: 01.04.02 - теоретическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени доктора физико-математических наук

Дубна 1990

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований.

Официальные оппоненты:
доктор физико-математических наук
ведущий научный сотрудник — Р.З.БАРИЕВ

доктор физико-математических наук
профессор — Р.А.МИНЛОС

доктор физико-математических наук
ведущий научный сотрудник — А.С.ШУМОВСКИЙ

Ведущая организация -
Институт проблем передачи информации АН СССР, Москва

Автореферат разослан "___"_____________1990 г.

Защита диссертации состоится "___"__________1990 г. на заседании Специализированного совета Д 047.01.01 Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований, г. Дубна, Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Объединенного института ядерных исследований.

Ученый секретарь Совета
кандидат физико-математических наук — В.И.ЖУРАВЛЕВ

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Реальные физические системы имеют конечные размеры и содержат конечное число частиц. Поэтому статистико-механическим функциям, которые их описывают, присущи некоторые конечноразмерные эффекты. При определенных условиях - обычно в непосредственной окрестности точки фазового перехода - эти эффекты могут существенным образом сказаться на поведении макроскопической системы. Адекватное описание эффектов конечного размера выходит за рамки традиционной статистической термодинамики..

Основная идея эвристической теории конечноразмерного подобия была высказана М.Е.Фишером в 1970 году. Согласно гипотезе М.Е.Фишера, эффекты конечных размеров для системы в сосуде в форме куба с ребром $L \gg 1$ /в единицах некоторого характерного микроскопического масштаба/ определяются отношением корреляционной длины ξ_∞ соответствующей бесконечной системы к линейному размеру L. Если при стремлении температуры T к критическому значению T_c корреляционная длина имеет характерную расходимость вида $\xi_\infty(t) \sim |t|^{-\nu}$, где $t=(T-T_c)/T_c$ и $\nu > 0$ критический показатель, то эффекты конечного размера становятся существенными, когда $\xi_\infty(t) \sim L$, т.е. при $|t| \sim L^{-1/\nu}$. Таким образом теоретическое описание законов конечноразмерного подобия включает в себя изменение термодинамических параметров ансамбля Гиббса в окрестности точки фазового перехода одновременно с изменением конечных размеров статистико-механической системы при сохранении формы сосуда и граничных условий.

Модельные системы с дальнодействием представляют особый интерес для теории, так как в этом случае возникают проблемы, связанные с определением корреляционной длины для бесконечной системы. Это понятие, как мы видели, играет фундаментальную роль в теории конечноразмерного подобия. Рассмотрение эффектов конечного размера в системах с дальнодействием вызывает интерес и с точки зрения их теоретического обоснования методом ренормализационной группы. Известно, что предсказания этого метода основаны на определенных предположениях об аналитическом поведении функций подобия в окрестности неподвижной точки. С другой стороны, известны точно решаемые модели, которые показывают, что в системах с дальнодействием это поведение может модифицироваться.

В диссертации исследуются три основные типа модельных систем с дальнодействием:

1. Модельные системы со взаимодействием эквивалентных соседей, допускающие точное в термодинамическом пределе решение.

2. Средняя сферическая модель с двучастичным потенциалом взаимодействия $J_\sigma(r)$ ферромагнитного типа, убывающим на больших расстояниях r как $r^{-d-\sigma}$, где d - размерность пространства, $\sigma>0$ параметр. Форма образца в общем случае имеет вид цилиндра с гиперкубическим сечением $L^{d-d'}$, бесконечного в $d'\geqslant 0$ измерениях. Вдоль $d-d'$ измерений, по которым система конечна, накладываются периодические граничные условия.

3. Модельные системы со взаимодействием исключенного объема, порождающим дальнодействующие корреляции между частицами.

Особенность первого типа моделей заключается в отсутствии естественной пространственной структуры: системе можно приписать произвольную пространственную размерность d, а следовательно, и произвольный линейный размер L при заданном числе частиц $N=L^d$. Это обстоятельство приводит к определенным затруднениям при обосновании законов конечноразмерного подобия для такого типа систем методом ренормализационной группы.

В качестве основной модели с дальнодействием рассмотрена средняя сферическая модель, которая допускает точное решение при любой пространственной размерности. Если параметр σ спадания парного потенциала взаимодействия на больших расстояниях принимает значения $0<\sigma<2$, то двучастичная корреляционная функция в системе убывает с расстоянием не по экспоненциальному, а по степенному закону. Этот случай дальнодействия выдвигает на передний план проблему определения эффективной корреляционной длины, по отношению к которой можно сформулировать законы конечноразмерного подобия. Следует отметить, что при $d'=0$ предел $\sigma\to 0^+$ в этой модели приводит к взаимодействию эквивалентных соседей, а $\sigma\to 2^-$ соответствует взаимодействию ближайших соседей.

Наконец, основным представителем третьего типа моделей является модель димеров, плотно покрывающих узлы плоской квадратной решетки. Условия плотной упаковки и исключенного объема приводят к появлению димер-димерных корреляций, убывающих с расстоянием по степенному закону.

Целью работы является изучение эффектов конечного размера на термодинамические и корреляционные функции статистико-механических систем с дальнодействием, развитие строгих методов построения теории конечноразмерного подобия для таких систем.

Научная новизна и практическая ценность работы

Предложены новые методы для строгого исследования эффектов конечного размера в моделях статистической механики с дальнодействием.

Сформулированы новые гипотезы о виде законов конечноразмерного подобия в n-векторных моделях /при $n\gg 1$ / в среднеполевом критическом режиме и в режиме фазового перехода первого рода.

Впервые предложена стохастическая динамика для системы из плотно упакованных димеров на квадратной решетке и доказана ее эргодичность.

Методом Монте-Карло исследован необычный фазовый переход в модели взаимодействующих димеров на квадратной решетке, когда корреляции в неупорядоченной фазе убывают степенным образом, а не спадают экспоненциально, как это имеет место в известных моделях с близкодействием.

Впервые получен точный результат для избыточной поверхностной свободной энергии в двумерной модели биомембраны.

Практическая ценность результатов диссертации определяется, в основном, тем, что:

1. Необходимо количественное описание сглаживания и смещения сингулярностей в термодинамических функциях, которые доступны для экспериментального наблюдения при некоторых специальных геометриях образца: в тонких адсорбционных слоях, в системах из малых ферромагнитных частиц в диамагнитной матрице, в случае гелия в порах и др.

2. Теория конечноразмерных эффектов приложима для описания квантовых систем с критическим поведением при нулевой абсолютной температуре: в этом случае роль конечного размера играет обратная температура.

3. Теорию конечноразмерного подобия можно использовать в качестве надежного инструмента для определения критического поведения, путем экстраполяции свойств соответствующих конечных систем на термодинамический предел. Это в равной мере относится к результатам исследования конечных систем как методами Монте-Карло и молекулярной динамики, так и с помощью трансфер-матрицы.

Для защиты выдвигаются следующие основные результаты, полученные в диссертации:

1. Предложен новый метод изучения структуры предельных гиббсовских случайных полей, основанный на исследовании корреляционных или характеристических функций при выключении внешних полей, нарушающих симметрию гамильтониана, одновременно с переходом к термодинамическому пределу.

2. Предложен новый метод вычисления функций конечноразмерного подобия, основанный на построении автомодельных вероятностных распределений для блочных динамических переменных при устремлении термодинамических параметров к их критическим значениям одновременно с переходом к термодинамическому пределу.

3. Предложен новый метод Монте-Карло для системы из плотно упакованных взаимодействующих димеров. Доказана эргодичность марковской цепи, генерирующей конфигурации на квадратной решетке со свободными границами.

4. Предложена новая аналитическая техника, основанная на интегральных преобразованиях с функциями Миттаг-Леффлера, позволяющая исследовать асимптотическое поведение термодинамических и корреляционных функций в конечных n-векторных моделях при $n \gg 1$. С ее помощью впервые получена конечноразмерная асимптотика для парной корреляционной функции средней сферической модели со степенным дальнодействием и произвольной цилиндрической геометрией образца.

5. Построена теория конечноразмерного подобия для моделей статистической механики с дальнодействием, основанная на понятии об эффективной корреляционной длине.

6. Впервые доказано, что средняя сферическая модель выходит из класса конформной инвариантности гауссовской модели при любом дальнодействующем потенциале взаимодействия.

7. Построена теория конечноразмерного подобия для моделей статистической механики со взаимодействием эквивалентных соседей, основанная на понятии о числе скоррелированных частиц.

8. Построена теория конечноразмерного подобия для моделей статистической механики со взаимодействием эквивалентных соседей, основанная на изучении автомодельных решений дифференциального уравнения в частных производных для параметра порядка.

9. Впервые получено точное решение для димерной задачи на квадратной решетке с линейным дефектом.

10. Методом Монте-Карло исследован фазовый переход в двумерной решеточной модели взаимодействующих димеров, характеризуемой степенным спаданием корреляций в высокотемпературной фазе. На основе конечноразмерного анализа результатов для удельной теплоемкости получены оценки для критических показателей и обнаружено нарушение соотношения гиперскейлинга.

Апробация работы

Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на семинарах Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований, Отдела статистической механики Математического института им. В.А.Стеклова АН СССР, Лаборатории уравнений состояния Института теоретической и прикладной механики СО АН СССР /Новосибирск/, Института механики и биомеханики /София/ и Института математики /София/ Болгарской академии наук, а также на I и II Семинарах по математическим проблемам статистической механики /Дубна, 1988 и 1989/, I Национальном конгрессе болгарских физиков /София, 1983/, VI Национальном конгрессе по теоретической и прикладной механике /Варна, 1989/, XXI Международной конференции стран-членов СЭВ по физике и технике низких температур /Варна, 1983/, IV и V Международном симпозиуме по избранным проблемам статистической механики /Дубна, 1987 и 1989/, IV Международной летней школе по теории вероятностей и математической статистике /Варна, 1988/, Международной школе по численным методам Монте-Карло и параллельным алгоритмам /НРБ, Приморско, 1989/.

Публикации

По материалам диссертации опубликованы 20 статей, 1 обзор и 1 монография.

Объем работы

Диссертация состоит из предисловия, введения, трех частей, разделенных на 16 глав, раздела "основные результаты" и списка литературы. Полный объем работы составляет 320 страниц и включает 10 рисунков и список литературы из 275 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В предисловии изложена суть законов конечноразмерного подобия и дано обоснование актуальности и важности рассматриваемых в диссертации проблем.

Во введении кратко прослежено развитие теории конечноразмерного подобия. Особое внимание уделено вопросам обоснования гипотез конечноразмерного подобия методом ренормализационной группы, в разных ее вариантах. Отмечено, что для класса решеточных димерных моделей на квадратной решетке пока неизвестно как применять идеи ренормализационной группы.

Первая часть посвящена изучению моделей со взаимодействием эквивалентных соседей. Она состоит из шести глав.

В первой главе определен класс моделей со взаимодействием эквивалентных соседей, который характеризуется гамильтонианом вида

$$\mathcal{H}_N(\{\sigma_i\}_{i=1}^N) = -\frac{J}{2N}\sum_{i,j=1}^N \sigma_i\sigma_j - H\sum_{i=1}^N \sigma_i . \qquad /1/$$

Здесь $J \geqslant 0$ константа взаимодействия, $H \in \mathbb{R}^1$ внешнее магнитное поле, N число частиц в системе, σ_i, $i=1,\dots,N$, - динамические переменные, плотность совместного вероятностного распределения которых задается конечной гиббсовской перестройкой μ свободной меры μ_0 с помощью гамильтониана /1/:

$$\mu(dx_1,\dots,dx_N|K,h,\rho) = [Z_N(K,h,\rho)]^{-1}\times$$
$$\times \exp\left\{\frac{K}{2N}\Big(\sum_{i=1}^N x_i\Big)^2 + h\sum_{i=1}^N x_i\right\}\mu_0(dx_1,\dots,dx_N|\rho) . \qquad /2/$$

Здесь $Z_N(K,h,\rho)$ - статистическая сумма, которая определяется условием нормировки вероятностной меры /2/ на $\mathbb{R}^N$, $K = J/k_BT$ - безразмерный параметр взаимодействия, k_B - константа Больцмана, $h = H/k_BT$ - безразмерное внешнее поле. Выбор свободной меры μ_0 определяет конкретную модель со взаимодействием эквивалентных соседей. Например, если

$$\mu_0(dx_1,\dots,dx_N|\rho) = \prod_{i=1}^N \rho(dx_i) , \qquad /3/$$

то при

$$\rho(dx) = \rho^I(dx) \equiv \tfrac{1}{2}[\delta(x-1)+\delta(x+1)]\,dx \qquad /4/$$

получаем модель Хусими-Темперли-Изинга, при

$$\rho(dx) = \rho^{ms}(dx|s) = \sqrt{\frac{s}{\pi}}\, e^{-sx^2}dx , \qquad /5/$$

где параметр $s>0$ фиксирован - гауссовскую модель, а если параметр s в /5/ определяется из так называемого среднего сферического условия

$$\int_{\mathbb{R}^N}\Big(N^{-1}\sum_{i=1}^N x_i^2\Big)\mu(dx_1,\dots,dx_N|K,h,\rho^{ms}) = r , \qquad /6/$$

получаем среднюю сферическую модель типа Хусими-Темперли /со средним радиусом $\sqrt{r}>0$ /. Сферической модели Берлина-Каца /радиуса $\sqrt{r}$ /. со взаимодействием эквивалентных соседей соответствует свободная мера вида

$$\mu_0^s(dx_1,\dots,dx_N|r) \sim \delta\Big(\sum_{i=1}^N x_i^2 - rN\Big)\prod_{i=1}^N dx_i , \qquad /7/$$

где dx - мера Лебега на $\mathbb{R}^1$.

Теорию конечноразмерного подобия для систем со взаимодействием эквивалентных соседей можно построить как предельный случай соответствующей теории для систем с нормальной пространственной структурой. Так например, нами доказано, что гамильтониан сферической модели Хусими-Темперли для системы из конечного числа частиц является дальнодействующим пределом $\sigma \to 0^+$ для гамильтониана сферической модели со степенным законом убывания потенциала взаимодействия вида

$$J^{(\sigma)}(r) = \sigma J_\sigma(r) \sim \sigma r^{-d-\sigma} \quad (r\to\infty) , \qquad /8/$$

при наличии периодических граничных условий. Отсюда, с учетом того, что верхняя критическая размерность d_b для моделей с дальнодействующим потенциалом $J_\sigma(r) \sim r^{-d-\sigma}$ равна 2σ /нижняя критическая размерность равна $d_H = \sigma$ /, следуют важные выводы, что: а/ при любой фиксированной размерности $d>0$ в пределе $\sigma \to 0^+$ система входит в режим среднего поля, $d > d_b = 2\sigma$, когда в теории появляются так называемые "опасные несущественные переменные", которые нарушают соотношение гиперскейлинга $d\nu = 2-\alpha$ / α - критический показатель для теплоемкости/ и модифицируют законы конечноразмерного подобия; б/ область размерностей пространства $d \in (\sigma, 2\sigma)$, для которых флуктуации существенным образом сказываются на фазовый переход, сужается в точку $d = 0$ при $\sigma \to 0^+$; в/ обычное определение расходимости корреляционной длины бесконечной системы, $\xi_\infty(t) \sim t^{-\nu}$, $t \to 0^+$, теряет смысл, так как $\nu = 1/\sigma \to \infty$ при $\sigma \to 0^+$.

Нами введена новая характерная длина для системы конечного размера

$$\ell_L^{(d,\sigma)}(t,h) \equiv \left[\xi_L^{(d,\sigma)}(t,h)\right]^{1/\nu y_T^*}, \qquad /9/$$

где $\xi_L^{(d,\sigma)}(t,h)$ - эффективная корреляционная длина для системы с парным потенциалом /8/ при $0<\sigma<d/2$, $y_T^* = d/(\gamma+2\beta)$, γ - критический показатель для магнитной восприимчивости, β - критический показатель для параметра порядка. Для характерной длины /9/ получен закон конечноразмерного подобия вида

$$\ell_L^{(d,\sigma)}(t,h) \simeq N^{1/d}\, g_{d,\sigma}(N^{1/2}t, N^{3/4}h), \qquad /10/$$

где $g_{d,\sigma}(x_1, x_2)$ - некоторая универсальная функция переменных x_1, x_2. В термодинамическом пределе $L \to \infty$, при фиксированных $t \geqslant 0$ и h/t^Δ, из /10/ получаем ($\Delta = \beta+\gamma$)

$$\ell_\infty^{(d,\sigma)}(t,h) \simeq t^{-2/d}\, g_{d,\sigma}^*(h/t^\Delta), \qquad /11/$$

где $g_{d,\sigma}^*(\cdot)$ - некоторая универсальная функция термодинамического подобия в окрестности критической точки $t=0$, $h=0$. Теперь характерную длину для системы со взаимодействием эквивалентных соседей, как при конечном размере системы, так и в термодинамическом пределе, можно определить предельным переходом $\sigma \to 0^+$ в выражениях /10/ и /11/, соответственно. В последнем случае мы получим длину, эквивалентную термодинамической длине К.Биндера и др. /1985/. Интересно отметить, что в критической точке ведущая асимптотика характерной длины /9/ в пределе $\sigma = 0$ совпадает с геометрическим размером системы L. Введенное в работе Р.Боте, Р.Жюллиена и П.Пфюти /1982/ число скоррелированных частиц для бесконечной системы приобретает теперь смысл числа частиц в характерном объеме

$$V_{c,\infty}^{(d,0)}(t,h) = \left[\ell_\infty^{(d,0)}(t,h)\right]^d. \qquad /12/$$

<u>Во второй главе</u> изучены предельные гиббсовские состояния для модели Хусими-Темперли-Изинга. Для этой цели использована прямая связь между согласованным семейством конечномерных вероятностных распределений для спиновых конфигураций и системой предельных корреляционных функций, которые удается вычислить в явном виде с помощью метода квазисредних. Пусть $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ является конечным подмножеством из $|\Lambda|$ узлов d-мерной решетки $\mathbb{Z}^d$. Поскольку нас интересует описание всех предельных гиббсовских состояний в нулевом внешнем поле, $H = 0$, то мы рассматриваем все возможные термодинамические пределы для корреляционных функций при пространственно неоднородных конфигурациях поля $h^\Lambda(\Lambda) = \{H_i(\Lambda)/k_B T, i \in \Lambda\}$, таких, что

$$\max_{i\in\Lambda} h_i(\Lambda) \to 0, \quad \sum_{i\in\Lambda} |h_i(\Lambda)|^2 \to 0 \qquad (\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d). \qquad /13/$$

<u>Основная теорема.</u> Все предельные гиббсовские распределения $P(\cdot|K,0)$ модели /1/ трансляционно-инвариантны и: 1/ для $K \le K_c$ предельное гиббсовское распределение единственно; 2/ для $K > K_c$ они являются линейной выпуклой комбинацией двух эргодических компонент /чистых состояний/:

$$P(\cdot|K,0) = \lambda P(\cdot|K,0^+) + (1-\lambda)P(\cdot|K,0^-). \qquad /14/$$

Здесь крайние точки $P(\cdot|K,0^\pm)$ являются вероятностными распределениями, которые определяются с помощью системы корреляционных функций, вычисленных в смысле квазисредних Н.Н.Боголюбова /при $h \to 0^\pm$, соответственно, после совершения термодинамического предельного перехода/.

Все возможные термодинамические пределы для корреляционных функций можно получить, ограничиваясь только пространственно однородными полями $h(\Lambda) = h_0|\Lambda|^{-\alpha}$. При $\alpha = 1$ получаем смешанное состояние /14/ с коэффициентами λ, зависящими от параметра взаимодействия K и амплитуды поля h_0:

$$\lambda = \exp[h_0 m_0(K)]/2\,\mathrm{ch}[h_0 m_0(K)]. \qquad /15/$$

Здесь $m_0(K)$ - спонтанная намагниченность.

<u>В третьей главе</u> рассмотрены некоторые точно решаемые квантово-статистические обобщения моделей со взаимодействием типа эквивалентных соседей, в частности, модель сверхпроводника с ферромагнитными примесями и модель металла со структурной неустойчивостью типа удвоения периода.

В четвертой главе изучены конечноразмерные эффекты в ансамбле Гиббса, соответствующем аппроксимирующему гамильтониану для модели из конечного числа частиц со взаимодействием эквивалентных соседей. Метод аппроксимирующего гамильтониана, получивший свое математически строгое обоснование и развитие прежде всего в работах Н.Н.Боголюбова /мл./, позволяет получить точное в смысле вычисления предельных плотностей термодинамических функций решение для рассматриваемого класса систем. Наше исследование мотивировано замечанием Э.Брезена /1982/ о том, что теория среднего поля, которая становится применимой при $d > d_\ell$, предсказывает резкий фазовый переход /наличие сингулярности в термодинамических функциях/ для любых размерностей системы, притом как для бесконечных, так и для конечных систем. Первую из отмеченных особенностей можно объяснить тем, что теория среднего поля является точной в термодинамическом пределе для моделей со взаимодействием эквивалентных соседей. Эти модели, в свою очередь, можно рассматривать как предельный случай систем с дальнодействующим потенциалом вида /8/ при $\sigma \to 0^+$, когда верхняя критическая размерность $d_\ell = 2\sigma$ становится ниже любой фиксированной размерности пространства $d > 0$. Нами найдено объяснение и второй особенности - появления сингулярностей в статистико-механических функциях конечных систем. На примере сферической модели Хусими-Темперли показано, что плотность аппроксимирующей свободной энергии для конечной системы имеет асимптотический /при $N \gg 1$ / вид

$$(k_B T)^{-1} f_N^a (1 - x_1 N^{-1/2}, x_2 N^{-3/4}) = N^{-1} X^a(x_1, x_2) + const + O(N^{-3/2}), \qquad /16/$$

где $x_1 = N^{1/2} t = O(1)$, $x_2 = N^{3/4} h = O(1)$,

$$X^a(x_1, x_2) = \min_{c \in \mathbb{R}^1} \left\{ \frac{1}{4} c^4 + \frac{1}{2} x_1 c^2 - x_2 c \right\}. \qquad /17/$$

Ведущий член в /16/ формально соответствует предсказанию теории конечноразмерного подобия, однако при $x_1 \le 0$ имеет сингулярное по x_2 поведение в точке $x_2 = 0$. Причина неаналитичности термодинамических функций при конечном числе частиц заключается в искусственном игнорировании множества существенных конфигураций, соответствующих /в термодинамическом пределе/ одной из чистых низкотемпературных фаз. Нами предложена модификация аппроксимирующего ансамбля, которая учитывает вклад от всех тех /локальных/ минимумов плотности вариационной свободной энергии, которые в термодинамическом пределе превращаются в глобальные минимумы максимального типа. Это позволяет получить точные функции конечноразмерного подобия в окрестности точки фазового перехода первого рода.

В пятой главе показано, что удельная намагниченность m_N для класса моделей с гамильтонианом вида /1/ и вероятностной мерой вида /2/ при любом числе частиц N удовлетворяет некоторому тождеству в частных производных. Если ввести формальные переменные "время" $t = K - K_c$ и "пространственная координата" $x = -h$, то $m_N(t,x)$ оказывается решением эволюционного уравнения Бюргерса

$$\frac{\partial}{\partial t} m + m \frac{\partial}{\partial x} m = \frac{1}{2N} \frac{\partial^2}{\partial x^2} m \qquad /18/$$

с диффузионным коэффициентом $1/2N$. На этой основе проведена аналогия между развитием фазового перехода первого рода по магнитному полю в термодинамическом пределе, при температурах ниже критической, и образованием ударной волны в момент времени $t = 0$, когда диффузионный член в /18/ равен нулю. В диссертации изучена связь между автомодельными решениями уравнения Бюргерса и конечноразмерным подобием в окрестности точки фазового перехода. Получено, что с уравнением Бюргерса /18/ совместимо однопараметрическое семейство законов конечноразмерного подобия для удельной намагниченности:

$$m_N(t, x) = N^{-p} w(N^{1-2p} t, N^{1-p} x), \quad 0 < p < \frac{1}{2}, \qquad /19/$$

где функция $w(x_1, x_2)$ является решением уравнения

$$\frac{\partial}{\partial x_1} w + w \frac{\partial}{\partial x_2} w = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} w. \qquad /20/$$

Из условия существования термодинамического предела для плотности намагниченности при любом фиксированном $t \neq 0$ следует, что

$$w(x_1 \to \pm\infty, x_2) \simeq |x_1|^\beta v_\mp (x_2 / |x_1|^{\beta+1}) \qquad /21/$$

и параметр p в /19/ определяется однозначным образом: $p = \beta/(1+2\beta)$.

В шестой главе установлена связь между теорией конечноразмерного подобия и автомодельными вероятностными распределениями для блочных спинов вида

$$\eta_N(\mu_N) = N^{-\alpha_m} \sum_{i=1}^{N} \sigma_i(\mu_N), \quad N = 1, 2, \ldots \qquad /22/$$

Здесь предполагается, что совместное вероятностное распределение для спиновых переменных σ_i, $i=1,\dots,N$, определяется мерой μ_N, которая зависит от термодинамических параметров $t_1,\dots,t_p$. При этом, одновременно с термодинамическим пределом $N\to\infty$, параметры $t_1,\dots,t_p$ устремляются к своим критическим значениям $t_1^c,\dots,t_p^c$, например

$$t_i = t_i^c + b_i N^{-q_i}, \quad q_i>0, \quad i=1,\dots,p. \qquad /23/$$

Действительно, рассмотрим случай системы взаимодействующих спинов $\{\sigma_i, i\in\Lambda\}$ в гиперкубической области $\Lambda\subset\mathbb{Z}^d$ конечного объема $|\Lambda| = L^d$. Предположим, что при $d\in(d_H, d_\ell)$ справедлива гипотеза конечноразмерного подобия В.Привмана и М.Е.Фишера /1984/. Тогда для сингулярной части плотности свободной энергии в окрестности критической точки имеем

$$(k_BT)^{-1} f_{L,sing}(t,h) \simeq L^{-d} X(C_1 t L^{1/\nu}, C_2 h L^{\Delta/\nu}), \qquad /24/$$

где C_1, C_2 - некоторые зависящие от модели коэффициенты, $X(\cdot,\cdot)$ - универсальная функция подобия. Дифференцируя /24/ по магнитному полю H, для удельной намагниченности получим

$$m_L(t,h) \simeq C_2 L^{-\beta/\nu} X_2'(C_1 t L^{1/\nu}, C_2 h L^{\Delta/\nu}), \qquad /25/$$

где $X_2'(\cdot,\cdot)$ обозначает производную функции $X(\cdot,\cdot)$ по второму аргументу. Здесь учтено, что $d\nu=\Delta+\beta$. С другой стороны, исходя из статистического определения $m_L(t,h)$ можем записать

$$m_L(t,h) = E_\Lambda [L^{-d}\sum_{i\in\Lambda}\sigma_i \,|t,h], \qquad /26/$$

где $E_\Lambda[\cdot|t,h]$ обозначает среднее значение в каноническом ансамбле с термодинамическими параметрами t и h. Сравнивая /25/ и /26/ получаем

$$E_\Lambda [C_2^{-1} L^{(\beta-d\nu)/\nu}\sum_{i\in\Lambda}\sigma_i \,|t,h] \simeq -X_2'(C_1 t L^{1/\nu}, C_2 h L^{\Delta/\nu}). \qquad /27/$$

Следовательно, если положить в /27/ $t=(x_1/C_1)L^{-1/\nu}$, $h=(x_2/C_2)L^{-\Delta/\nu}$ и перейти к термодинамическому пределу получим, что среднее значение блочного спина

$$\lim_{L\to\infty} E_\Lambda [C_2^{-1} L^{(\beta-d\nu)/\nu}\sum_{i\in\Lambda}\sigma_i \,|\frac{x_1}{C_1}L^{-1/\nu}, \frac{x_2}{C_2}L^{-\Delta/\nu}] = -X_2'(x_1,x_2) \qquad /28/$$

Аналогичное рассмотрение для второй производной от выражения /24/ по магнитному полю H, имеющей смысл удельной магнитной восприимчивости, показывает, что предельная дисперсия блочного спина

$$\lim_{L\to\infty} D_\Lambda [C_2^{-1} L^{-(\gamma+d\nu)/2\nu}\sum_{i\in\Lambda}\sigma_i \,|\frac{x_1}{C_1}L^{-1/\nu}, \frac{x_2}{C_2}L^{-\Delta/\nu}] = -X_2'(x_1,x_2) \qquad /29/$$

является универсальной функцией амплитуд x_1 и x_2, не имеющей особенностей в точке $x_1=x_2=0$. В силу известных соотношений между критическими показателями

$$(d\nu-\beta)/\nu = (d\nu+\gamma)/2\nu = d\delta/(\delta+1), \qquad /30/$$

в /28/ и /29/ участвует один и тот же блочный спин со степенным показателем $\alpha_m=\delta/(\delta+1)$ нормировочного коэффициента $B_{|\Lambda|}\sim|\Lambda|^{\alpha_m}$, где $|\Lambda|=L^d$, см. /22/.

Аналогичным образом исследован и случай конечноразмерного подобия в окрестности точки фазового перехода первого рода.

Установлено, что сферическая и средняя сферическая модели, являясь термодинамически эквивалентными, имеют различные невырожденные предельные распределения для блочных спинов и, соответственно, различные функции конечноразмерного подобия как в окрестности критической точки, так и вблизи фазового перехода первого рода.

Вторая часть посвящена изучению средней сферической модели со степенным потенциалом взаимодействия $J_\sigma(r)\sim r^{-d-\sigma}$ при $r\to\infty$. Она состоит из шести глав.

В седьмой главе обсуждается теория конечноразмерного подобия для систем со степенным дальнодействием. На примере задачи об определении энергии основного состояния системы диполей на плоской ромбической решетке продемонстрирована зависимость результатов от радиуса обрезания взаимодействия и от угла ромбичности. Поэтому дальнейшее рассмотрение ограничивается случаем изотропного парного потенциала ферромагнитного типа.

В случае, когда область Λ имеет форму d-мерного параллелепипеда с ребрами L_k, $k=1,\dots,d$, при наличии периодических граничных условий статистическая сумма $Q_\Lambda(K;h,s)$ средней сферической модели

$$Q_\Lambda(K,h,s)=(2\pi)^{N/2}\exp\left(\frac{h^2N}{2s-K}\right)\prod_{\underset{\sim}{q}}[2s-\hat{J}(\underset{\sim}{q})/k_BT]^{-1/2} \qquad /31/$$

зависит от фурье-образа $\hat{J}(\underset{\sim}{q})$ потенциала эффективного взаимодействия

$$\hat{\mathfrak{J}}_\sigma(\underset{\sim}{q}) = \sum_{\underset{\sim}{\ell}\in\Lambda} \tilde{\mathfrak{J}}_\Lambda(\underset{\sim}{\ell}) e^{-i\underset{\sim}{q}\cdot\underset{\sim}{\ell}} \quad , \tilde{\mathfrak{J}}_\Lambda(\underset{\sim}{\ell}) = \sum_{\underset{\sim}{t}\in Z^d} \mathfrak{J}_\sigma\left(\left[\sum_{k=1}^{d}(\ell_k - L_k t_k)^2\right]^{1/2}\right), \qquad /32/$$

где, при нечетных целых числах L_k , $k = 1,\dots,d$,

$$q_k = 2\pi n_k / L_k \ , \ n_k \in \{-(L_k-1)/2, \dots, 0, \dots, (L_k-1)\} \ . \qquad /33/$$

В интересующих нас областях значений термодинамических параметров - окрестность критической точки или фазового перехода первого рода - решение $s = s_\Lambda(K,h)$ среднего сферического условия стремится сверху к значению $\frac{1}{2}K$, где $K = \hat{\mathfrak{J}}(0)/k_B T$, при $L_k \to \infty$, $k = 1,\dots,d$. Поэтому асимптотическое поведение статистической суммы /31/ определяется длинноволновой асимптотикой фурье-образа:

$$\hat{\mathfrak{J}}_\sigma(\underset{\sim}{q}) \simeq \hat{\mathfrak{J}}(0)\left[1 - \rho_\sigma |\underset{\sim}{q}|^{\min\{\sigma,2\}}\right] \quad (\rho_\sigma > 0) \ . \qquad /34/$$

Вводя параметр $\phi = 2s/K - 1$, для плотности свободной энергии средней сферической модели получаем выражение

$$(k_B T)^{-1} f_\Lambda(K,h) = \sup_\phi \left[(k_B T)^{-1} a_\Lambda(K,h,\phi) - \tfrac{1}{2}K(\phi+1)\right], \qquad /35/$$

где

$$a_\Lambda(K,h,\phi) \simeq \frac{1}{2}\ln\frac{\rho_\sigma K}{2\pi} - \frac{h^2}{2K\phi} + \frac{1}{2}\ln\frac{\phi}{\rho_\sigma} + \frac{1}{2|\Lambda|}\sum_{\underset{\sim}{q}} \ln\left[1 + \rho_\sigma |q|^\sigma/\phi\right]. \qquad /36/$$

Точная верхняя грань по ϕ в /35/ достигается на решении уравнения

$$\frac{1}{\phi|\Lambda|}\sum_{\underset{\sim}{q}} \frac{1}{1 + \rho_\sigma |q|^\sigma/\phi} \simeq K\left[1 - \left(\frac{h}{K\phi}\right)^2\right] \ . \qquad /37/$$

Приведем еще выражение для парной корреляционной функции в длинноволновом приближении:

$$G_\Lambda(\underset{\sim}{R}; K, h) \simeq \frac{1}{\phi K}\frac{1}{|\Lambda|}\sum_{\underset{\sim}{q}} \frac{e^{i\underset{\sim}{q}\cdot\underset{\sim}{R}}}{1 + \rho_\sigma |q|^\sigma/\phi} \ . \qquad /38/$$

Далее в этой главе проанализирован случай наличия опасной несущественной переменной / $\sigma < d/2$ / и на примере средней сферической модели получена модификация законов конечноразмерного подобия. Результаты обобщены в виде гипотезы для n-векторных моделей.

Восьмая глава посвящена изучению предельных гиббсовских состояний для сферической и средней сферической моделей. Используется метод выключения однородного магнитного поля $h(\Lambda) = h_0 |\Lambda|^{-\alpha}$, $\alpha > 0$, одновременно с переходом к термодинамическому пределу $|\Lambda| \to \infty$. При $\alpha = 1$ и $K > K_c$ получено однопараметрическое обобщение, зависящее от амплитуды $h_0 \in \mathbb{R}^1$, вероятностного ядра $\mathcal{K}$ М.Каца и К.Дж.Томпсона /1977/, которое выражает предельные гиббсовские состояния $E^{ms}[\cdot|K,h,1]$ средней сферической модели радиуса $\dot{r}^{1/2} = 1$ через предельные гиббсовские состояния $E^s[\cdot|K,h,r']$ сферической модели радиуса $(r')^{1/2} > 0$:

$$E^{ms}[\cdot|K,0,1] = \int_{\mathbb{R}^1} \mathcal{K}(r'|K,0,1) E^s[\cdot|K,0,r']\,dr' \ . \qquad /39/$$

Для обобщенного ядра перехода в термодинамическом пределе получено:

а/ В высокотемпературной области $K < K_c$

$$\lim_{|\Lambda|\to\infty} \mathcal{K}_\Lambda(r'|K, h_0|\Lambda|^{-\alpha}, 1) = \delta(r'-1) \ . \qquad /40/$$

б/ В низкотемпературной области $K > K_c$

$$\lim_{|\Lambda|\to\infty} \mathcal{K}_\Lambda(r' > K^{-1}|K, h_0|\Lambda|^{-1}, 1) = \tfrac{1}{2}\left[2\pi(r'-K^{-1})a(K,h_0)\right]^{-1/2} \times$$
$$\times \left\{\exp\left[-\left(\sqrt{r'-K^{-1}} - h_0 a(K,h_0)\right)^2/2a(K,h_0)\right] + \right. \qquad /41/$$
$$\left. + \exp\left[-\left(\sqrt{r'-K^{-1}} + h_0 a(K,h_0)\right)^2/2a(K,h_0)\right]\right\} ,$$

где

$$a(K,h_0) = 2m_0^2(K)\left[(1 + 4m_0^2(K)h_0^2)^{1/2} + 1\right]^{-1} .$$

Имея явный вид ядра перехода $\mathcal{K}$ и вычисляя характеристические функции

$$\varphi_\Lambda(\{t_i, i\in A\}|K,h(\Lambda),r) = E_\Lambda\left[\exp\left(i\sum_{j\in A} t_j\sigma_j\right)\middle|K,h(\Lambda),r\right] \quad , A \subset \Lambda \ , \qquad /42/$$

для средней сферической модели, мы затем разрешаем интегральное уравнение /39/ относительно характеристических функций для сферической модели. Таким образом мы находим структуру предельных гиббсовских распределений $P^{s,ms}(\cdot|K,0,r)$ для сферической и средней сферической моделей радиуса $r^{1/2} > 0$.

В девятой главе предложена новая аналитическая техника, основанная на интегральных преобразованиях с функциями Миттаг-Леффлера, которая позволяет свести исследование асимптотики d-кратных сумм в выражениях /36/-/38/ к эффективной одномерной задаче. Основная идея состоит в замене тождеств

$$(1+s)^{-1}=\int_0^\infty dx\, e^{-sx} e^{-x}, \quad \ln(1+s)=\int_0^\infty dx\,(1-e^{-sx})\frac{e^{-x}}{x}, \qquad /43/$$

которые при $s=\rho_2|q|^2/\phi$ позволяют факторизовать указанные суммы в случае близкодействия / $\sigma=2$ /, на более общие тождества

$$(1+s^\alpha)^{-1}=\int_0^\infty dx\, e^{-sx} x^{\alpha-1} E_{\alpha,\alpha}(-x^\alpha), \qquad /44/$$

$$\ln(1+s^\alpha)=\int_0^\infty dx\,(1-e^{-sx})\frac{\alpha}{x}E_{\alpha,1}(-x^\alpha), \quad \alpha>0.$$

Здесь $E_{\alpha,\beta}(z)$ - функции типа Миттаг-Леффлера, которые определяются для любого $\alpha>0$ и любого комплексного $z\in\mathbb{C}$ абсолютно сходящимся рядом

$$E_{\alpha,\beta}(z)=\sum_{k=0}^\infty \frac{z^k}{\Gamma(\alpha k+\beta)} \qquad /45/$$

Общий случай цилиндрической геометрии вида $L^{d-d'}\times\infty^{d'}$ легко получается, если положить $L_1=\dots=L_{d-d'}=L$ и перейти к пределу $L_k\to\infty$, $k=d-d'+1,\dots,d$.

<u>В десятой главе</u> исследовано конечноразмерное подобие для уравнения состояния /37/, которое может быть записано либо как уравнение для удельной намагниченности,

$$m_L(K,h)\equiv-\frac{\partial}{\partial h}(k_BT)^{-1}f_L(K,h)=\frac{h}{K\phi_L(K,h)}, \qquad /46/$$

либо как уравнение для эффективной корреляционной длины

$$\xi_L(K,h)=[\tilde\phi_L(K,h)]^{-1/\sigma}, \qquad /47/$$

где $\tilde\phi=\phi/\rho_\sigma$. Определение /47/ для эффективной корреляционной длины следует из асимптотического вида парной корреляционной функции /38/ при $\phi\to0$ и $|\underset{\sim}{R}|\gg1$:

$$G_L(\underset{\sim}{R};K,h)\simeq\frac{D(T)}{|\underset{\sim}{R}|^{d-\sigma}}Z_1(\tilde\phi^{1/\sigma}\underset{\sim}{R},\tilde\phi^{1/\sigma}L), \qquad /48/$$

где $D(K)=(\rho_\sigma K)^{-1}$, $Z_1(\cdot,\cdot)$ - некоторая функция подобия, которая зависит от геометрии системы.

Получены представления для уравнения состояния с учетом эффектов конечного размера, которые обобщают соответствующие результаты С.Сингха и Р.К.Патриа /1985/ и М.Е.Фишера и В.Привмана /1986/.

Показано, что в высокотемпературной области / $T>T_c$ / поправки к эффективной корреляционной длине в случае дальнодействия являются степенными и имеют порядок величины $O(L^{-d-\sigma})$.

Продемонстрирована применимость ε-разложения для изучения эффектов конечного размера как в окрестности критических размерностей, $d=\sigma+\varepsilon$ и $d=2\sigma-\varepsilon$, так и в характерном конечноразмерном случае $d'=\sigma+\varepsilon$, где $\varepsilon\to0^+$.

Получены новые представления для конечноразмерного подобия для эффективной корреляционной длины и удельной намагниченности в области фазового перехода первого рода при $0\le d'<\sigma$, $0<\sigma\le2$:

$$\xi_L(K,h)\simeq L^{(d-d')/(\sigma-d')}Y_{d,d',\sigma}(C_1|\tilde t|,\dot x_2),$$

$$m_L(K,h)\simeq\tilde C_2\dot x_2[Y_{d,d',\sigma}(C_1|\tilde t|,\dot x_2)]^\sigma, \qquad /49/$$

где $\tilde t=1-K/K_c<0$, $C_1=\rho_\sigma K_c$, $\tilde C_2=(\rho_\sigma K)^{-1/2}$,

$$\dot x_2=\tilde C_2 h L^{\sigma(d-d')/(\sigma-d')}, \qquad /50/$$

а функция подобия $y=Y_{d,d',\sigma}(\cdot,\cdot)$ является решением уравнения

$$\dot x_2^2 y^{2\sigma}+2\pi\left[(4\pi)^{d'/2}\Gamma\left(\frac{d'}{2}\right)\sigma\sin\frac{d'\pi}{\sigma}\right]^{-1}y^{\sigma-d'}-C_1|\tilde t|=0. \qquad /51/$$

Установлено, что для полностью конечной системы, $d'=0$, функция конечноразмерного подобия для намагниченности не зависит от скорости убывания потенциала взаимодействия с расстоянием. Следует отметить, что переменная $\dot x_2$ в /49/-/51/ имеет смысл отношения магнитной энергии в корреляционном объеме $L^{d-d'}\xi_L^{d'}(K,h)$ к тепловой энергии на степень свободы.

<u>В одиннадцатой главе</u> изучено конечноразмерное подобие для плотности свободной энергии. Одним из важнейших следствий гипотезы универсальности В.Привмана и М.Е.Фишера /1984/ является универсальность критической амплитуды для сингулярной части плотности свободной энер-

гии при размерностях пространства $d\in(d_H, d_\ell)$. С другой стороны, конформная теория предсказывает, что в случае двумерной цилиндрической геометрии $L\times\infty$,

$$L^2 f_{L,sing}^{(2,1,2)}(K_c,0)\simeq-\frac{\pi c}{6}, \qquad /52/$$

где c - центральный заряд алгебры Вирасоро. Этот результат дает возможность "измерить" величину c для данной модели. Заметим, что область универсального подобия $d\in(\sigma,2\sigma)$ при $d=2$ соответствует случаю дальнодействия с $\sigma\in(1,2)$. При $\sigma\to 2^-$ из уравнения состояния для средней сферической модели мы получаем $\xi_L(K_c,0)\simeq L/\pi(2-\sigma)$, что согласуется с предсказанием конформной теории, если учесть, что критический показатель $\eta=2-\sigma$. Для критической амплитуды плотности свободной энергии при достаточно малом $2-\sigma>0$ мы получаем

$$L^2 f_{L,sing}^{(2,1,\sigma)}(K_c,0)=-\frac{\pi}{6}\{1-5(2-\sigma)+\mathcal{O}[(2-\sigma)^2]\}, \qquad /53/$$

т.е. средняя сферическая модель с дальнодействием выходит из класса конформной универсальности гауссовской модели, для которого $c=1$.

<u>В двенадцатой главе</u> получено следующее общее представление для функции конечноразмерного подобия для парной корреляционной функции:

$$Z_1(\underset{\sim}{r},\ell)=\frac{\Gamma(\frac{d+1}{2})r^{d-\sigma}}{\pi^{(d+1)/2}}\sum_{\underset{\sim}{n}\in\mathbb{R}^{d-d'}}\frac{w_{d,\sigma}(\sqrt{(\ell\underset{\sim}{n}-\underset{\sim}{r}_\perp)^2+r_\parallel^2})}{[(\ell\underset{\sim}{n}-\underset{\sim}{r}_\perp)^2+r_\parallel^2]^{(d-\sigma)/2}}, \qquad /54/$$

где $\underset{\sim}{r}=\underset{\sim}{R}/\xi_L(K,h)$, $\ell=L/\xi_L(K,h)$ и $\underset{\sim}{R}_\perp=\{R_1,\dots,R_{d-d'}\}$, $\underset{\sim}{R}_\parallel=\{R_{d-d'+1},\dots,R_d\}$, кроме того введена функция

$$w_{d,\sigma}(x)=\int_0^\infty dt\,t^\sigma(1+t^2)^{-(d+1)/2}E_{\sigma,\sigma}(-t^\sigma x^\sigma). \qquad /55/$$

Более простые асимптотические выражения получены в некоторых предельных случаях. В частности, обобщена на случай дальнодействия теорема С.Сингха и Р.К.Патриа /1987/ о факторизации парной корреляционной функции в области фазового перехода первого рода при $R_\parallel\gg L$:

$$G_L^{(d,d',\sigma)}(\underset{\sim}{R};K,0)\simeq L^{-d+d'}\frac{D(K)}{R_\parallel^{d'-\sigma}}\frac{\Gamma(\frac{d'+1}{2})}{\pi^{(d'+1)/2}}w_{d',\sigma}(R_\parallel/\xi_L). \qquad /56/$$

<u>Третья часть</u> посвящена изучению эффектов конечного размера в моделях со сложным конфигурационным пространством. В таких моделях, например, в случае модели димеров /двуатомных молекул/, плотно упакованных на плоской квадратной решетке, степенные корреляции между частицами могут порождаться взаимодействием исключенного объема. Эта часть состоит из четырех глав.

<u>В тринадцатой главе</u> рассматриваются модель льда /шестивершинная модель/ и предложенная П.В.Кастелейном /1963/ модель димеров на гексагональной решетке с анизотропным распределением активностей ребер /$\mathcal{K}$-модель/. Изучается вопрос о влиянии ориентации решетки по отношению к границам системы на поправки от конечного размера. Постановка вопроса связана с тем, что статистические суммы для рассматриваемых систем на бесконечной полосе шириной L зависят от ориентации решетки: всегда можно указать конфигурацию модели, возможную при одной ориентации и невозможную при другой. Нами показано, что в соответствии с предсказанием теории конформной инвариантности, поправки порядка $\mathcal{O}(L^{-2})$ к плотности свободной энергии для естественной ориентации решетки /когда ее столбцы параллельны границам полосы/ и для повернутой на угол $\pi/4$ решетки совпадают. В случае $\mathcal{K}$-модели удалось обнаружить, что различие ориентаций сказывается на поправки порядка $\mathcal{O}(L^{-4})$. Рассматривались периодические граничные условия.

<u>В четырнадцатой главе</u> методом случайных блужданий получен точный результат для избыточной поверхностной свободной энергии σ в двумерной модели биомембраны, предложенной Дж.Ф.Нейглом /1973/. В однородном случае эта модель эквивалентна модели димеров на квадратной решетке с шахматным распределением активностей u и v вертикальных ребер и одинаковыми активностями z всех горизонтальных ребер. Добавление границы /линейного дефекта/ означает изменение активностей u и v на ξ и η в одной строке. Нами показано, что между статистической суммой такой модели и статистической суммой однородной модели димеров /$u=v$/ с таким же дефектом существует взаимооднозначное соответствие. Приведем результат при $u\geq v$:

$$\sigma=-|\Delta|\ln\frac{\xi}{u}-\frac{1}{2\pi}\int_{\pi|\Delta|}^{\pi(1-|\Delta|)}d\varphi\ln\left\{\frac{1}{2}\left(1+\frac{\xi\eta}{uv}\right)+\frac{1}{2}\left(1-\frac{\xi\eta}{uv}\right)\frac{z\sin\varphi}{\sqrt{uv+z^2\sin^2\varphi}}\right\}. \qquad /57/$$

Здесь параметр Δ выражается линейно через плотность полимеров ρ, $\Delta=\rho-\frac{1}{2}$, и зависит только от объемных активностей u, v и z.

В пятнадцатой главе нами предложен алгоритм Монте-Карло для системы из плотно упакованных димеров на квадратной решетке. Ранее известные алгоритмы не применимы к такой системе, так как из-за взаимодействия исключенного объема в ней нельзя изменить состояние какого-либо одного димера не затронув при этом его окружение. Нами доказано, что на квадратной решетке из M строк и N столбцов со свободными границами всегда можно построить случайное блуждание на множестве $\{C\}$ конфигураций системы путем случайного выбора пары димеров, расположенных на противоположных сторонах одного элементарного квадрата, и ее поворота на угол $\pi/2$, превращая горизонтальную пару в вертикальную и наоборот. Совершая эту процедуру многократно, мы получим марковскую цепь из димерных конфигураций. Предложенный метод является математически обоснованным, поскольку нами доказана неприводимость этой марковской цепи.

В шестнадцатой главе описанный выше алгоритм применен для исследования системы взаимодействующих димеров, для которой энергия $E(C)$ любой конфигурации C пропорциональна числу пар димеров $N(C)$, расположенных на противоположных сторонах элементарного квадрата, т.е. $E(C)=-JN(C)$, $J>0$. Здесь мы сталкиваемся с необычной ситуацией, когда корреляции вне точки фазового перехода убывают степенным образом с расстоянием, а не спадают экспоненциально, как это имеет место в известных моделях с близкодействующим потенциалом взаимодействия.

Анализ численных результатов для удельной теплоемкости $c_L(K)$ решетки $L\times L$ с L от 10 до 40 проводился в рамках гипотезы критического конечноразмерного подобия. Так как вид особенности удельной теплоемкости для бесконечной системы неизвестен, то рассматривались два варианта: степенной и логарифмической особенности при $t=K-K_c\to 0$ /$K=J/k_BT$/. Было обнаружено, что значение $c_L(K_L^{max})$ в точке максимума $K=K_L^{max}$ хорошо согласуется с гипотезой

$$c_L(K)=2a^2q_0\ln(aL^{1/\nu})+a^2X_0(atL^{1/\nu})+\sum_{k=0}^{2}L^{-k}\psi_k(t)+o(L^{-2}), \quad /58/$$

где $q_0>0$ и a - константы, $X(\cdot)$ - неизвестная функция подобия, $\psi_k(t)$, $k=0,1,2$, регулярные при $t=0$ функции. В отличии от предположения В.Привмана и Дж.Рудника /1986/ здесь мы допускаем нарушение гиперскейлинга. Результаты показывают, что K_L^{max} с ростом L стремится к предельному значению $K_c\simeq 1,77$. Закон убывания $K_L^{max}-K_c$ подбирался в виде $bL^{-1/\nu}$, где b - константа, причем наилучшее согласие получено при значениях $\nu = 0,33 \div 0,5$.

Результаты, вошедшие в диссертацию, опубликованы в следующих работах:

1. Боголюбов /мл./ Н.Н., Бранков Й.Г., Загребнов В.А., Курбатов А.М., Тончев Н.С. Метод аппроксимирующего гамильтониана в статистической физике /монография/. Изд-во Болг. акад. наук, София, 1981, 245 с.
2. Боголюбов /мл./ Н.Н., Бранков Й.Г., Загребнов В.А., Курбатов А.М., Тончев Н.С. Некоторые классы точно решаемых модельных задач квантовой статистической механики: Метод аппроксимирующего гамильтониана.- УМН, 1984, 39, вып. 6, 3-45.
3. Бранков Й.Г., Загребнов В.А., Тончев Н.С. Описание предельных гиббсовских состояний для модели Кюри-Вейсса-Изинга.- ТМФ, 1986, 66, № 1, 109-120.
4. Бранков Й.Г., Приезжев В.Б. Ротационные свойства поправок от конечного размера в двумерных решеточных моделях. Дубна, 1989, 8 с. /Сообщ. Объед. ин-та ядер. исслед.: Р17-89-505/.
5. Бранков Й.Г. Конечноразмерные эффекты в методе аппроксимирующего гамильтониана. Дубна, 1990, 21 с. /Препринт Объед. ин-та ядер. исслед.: Р17-90-73/.
6. Бранков Й.Г. Вывод конечноразмерного подобия для среднеполевых моделей из уравнения Бюргерса. Дубна, 1990, 16 с. /Препринт Объед. ин-та ядер. исслед.: Р17-90-243/.
7. Бранков Й.Г., Величков В.Б., Приезжев В.Б. Фазовый переход в модели димеров со взаимодействием. Дубна, 1990, 13 с. /Препринт Объед. ин-та ядер. исслед.: Р17-90-267/. Принято в J.Mol.Liquids.
8. Tonchev N.S., Brankov J.G. On the s-d model of coexistence of ferromagnetism and superconductivity.- Phys.stat.sol. (b), 1980, 102, N1, 179-187.
9. Brankov J.G., Tonchev N.S. Bicritical and tetracritical behaviour in a model with superconducting and ferromagnetic orderings.- Physica, 1981, 108A, N 2/3, 459-472.
10. Brankov J.G., Pesheva N.Ch. On the metal-insulator phase transition in two exactly solvable models.- Physica, 1983, 122A, N 1/2, 231-251.
11. Brankov J.G., Zagrebnov V.A. On the description of the phase transition in the Husimi-Temperley model.- J. Phys. A, 1983, A16, N 10, 2217-2224.
12. Brankov J.G., Pesheva N.Ch. On the mean-field theory of the metal-insulator phase transition.- Physica, 1985, 129A, N2, 423-437.

13. Brankov J.G., Danchev D.M. Ground state of an infinite two-dimensional system of dipoles on a lattice with arbitrary rhombicity angle.- Physica, 1986, 144A, N1, 128-139.
14. Brankov J.G., Danchev D.M. On the limit Gibbs states of the spherical model.- J. Phys., 1987, A20, N 14, 4901-4913.
15. Brankov J.G., Tonchev N.S. On the finite-size scaling equation for the spherical model.- J.Stat.Phys., 1988, 52, N1/2, 143-159.
16. Brankov J.G. Finite-size scaling for the mean spherical model with inverse power law interaction.- J.Stat.Phys., 1989, 56, N3/4, 309-330.
17. Brankov J.G., Danchev D.M. A probabilistic view on finite-size scaling in infinitely coordinated spherical models.- Physica A, 1989, A158, N3, 842-863.
18. Brankov J.G., Priezzhev V.B. Finite-size effects in a dimer model of crystallization.- Physica, 1989, A159, N3, 386-406.
19. Brankov J.G., Tonchev N.S. An investigation of finite-size scaling for systems with long-range interaction: The spherical model.- J. Stat. Phys., 1990, 59, N 5/6.
20. Brankov J.G., Tonchev N.S. On finite-size scaling in the presence of dangerous irrelevant variables.- J. Stat. Phys., 1990, 60, N 3/4.
21. Brankov J.G., Karamikhova R.A. A Monte Carlo study of a system of close-packed interacting dimers.- Physica, 1990, A162, N2, 298-315.
22. Brankov J.G., Priezzhev V.B. Excess surface free energy in a two-dimensional model of a biomembrane.- J. Phys., 1990,A23,

Рукопись поступила в издательский отдел
25 апреля 1990 года.