ОДЕСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ім. І.І. Мечникова

на правах рукопису

КУЛІНСЬКИЙ
Володимир Леонідович

КАНОНІЧНИЙ ФОРМАЛІЗМ ОПИСУ КРИТИЧНИХ ЯВИЩ У ПРОСТИХ СИСТЕМАХ

01.04.02. - теоретична фізика

Автореферат
дисертації на здобуття вченого ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Одеса - 1995

Робота виконана на кафедрі теоретичної фізики Одеського державного унівеситету імені І.І.Мечникова.

Науковий керівник: Доктор фізико-математичних наук, професор МАЛОМУЖ Микола Петрович

Офіційні опоненти:

Доктор фізико-математичних наук, професор ЧАЛИЙ Олександр Васильович

Доктор фізико-математичних наук, професор ШВЕЦЬ Валерій Тимофійович

Провідна організація - Інститут фізики конденсованих систем АН України (м. Львів)

Захист дисертації відбудеться "19" січня 1996 року о 14 годині на засіданні спеціалізованої ради К 05.01.10 при Одеському державному університеті у 22 аудиторії фізичного ф-ту Пастера 42

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Одеського університету (вул.Преображенська 24)

Автореферат розіслано 19 грудня 1995 р.

Вчений секретар
спеціалізованої ради
доктор физ.-мат. наук Затовський О.В.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Опис фазових перетворень залишається однією з найважливіших задач теоретичної фізики, яка має як велике наукове так і практичне значення. Існування різних типів фазових переходів у реальних системах висуває на перший план необхідність створення теоретичної основи опису таких явищ, за допомогою якої вдалося б впорядкувати існуючу різноманітність фазових перетворень.

Метод ренормгрупи (РГ) у теорії критичних явищ, запропонований Вільсоном, дозволив детально простежити механізм утворення масштабної симетрії критичних флуктуацій. Доповнений конструктивною процедурою ε-розкладу, він являє собою ефективний метод отримання критичних индексів, а також інших універсальних характеристик у вигляді асимптотичних розкладів у рамках того чи иншого варіанту теорії збурень. Важним висновком, який випливає з ренормгрупового підходу, є обгрунтування гіпотези універсальності критичної поведінки.

Експериментальні дані підтверджують висновок про існування класів універсальності та свідчать про добру відповідність теоретично обчисленних та експериментально отриманих значень критичних індексів і універсальних відношень амплітуд. Разом з цим особливості міжчастинкової взаємодії у різних рідинах вносять свою специфіку у такі явища як асиметрія кривої співіснування, вплив водневих зв'язків та додатків електроліту на форму замкнутих кривих фазової рівноваги бінарних розчинів та інш.. У ще більшій мірі індивидуальні особливості проявляються у критичній поведінці систем з так званими взаємодіючими параметрами порядка до яких можна віднести: ртуть, лужні метали, бінарні аміачні розчини металів та розплави рідкоземельних елементів.

Значний прогрес у кількісному опису розглянутих питань досягнено у роботах Юхновського та його школи. Беззаперечною перевагою підходу Юхновського є принципова можливість побудови ефективного гамільтоніану системи, виходячи з мікроскопічної картини взаємодії. Тут, однак, ключову роль має вибір базисної густини міри.

Рішення більшості перелічених проблем є можливим з позицій так званого канонічного формалізму. Він уявляє собою синтез ідей і методів масштабно інваріантної теорії флуктуацій, теорії катастроф і статистичної теорії кондесованого стану речовини. У рамках канонічного формалізму можливо : коректне введення параметра порядку, означення канонічного оператора РГ перетворення, послідовне пояснення ефекту асиметрії кривої співіснування, виявлення механізму комбінування універсальних властивостей критичних флуктуацій і індивидуальних особливостей різних систем.

Мета роботи - систематичний розвиток канонічного формалізму опису критичних флуктуацій поблизу критичних точок систем, які належать до класу універсальності тривимірної моделі Ізінга та простих рідин.

Наукова новизна. В дисертаційній роботі на основі канонічного формалізму опису критичних явищ проведено аналіз критичної поведінки простих рідин та бінарних розчинів, зокрема з водневими зв'язками. Розглянуто особливості кривої співіснування ртуті, лужних металів та бінарних розплавів в яких бінодаль системи спрягається з лінією переходу провідник - ізолятор. Визначено канонічний параметр порядку і спряжені йому канонічні "температура" і "зовнішне поле". У зв'язку з цим вперше:

- побудовано ефективний гамільтоніан системи. Розроблені аналітичні методи обчислення його коефіцієнтів за допомогою яких встановлюється їх залежність від характеристик потенціалу міжчастинкової взаємодії;
- ретельно розглянуто роль слабофлуктуючих змінних стану системи в простих рідинах та багатокомпонентних розчинах у побудові канонічної форми термодинамічного потенціалу та ефективного гамільтоніану системи;
- дано означення канонічного оператора ренормгрупи. Отримані диференціальні рівняння типу рівнянь Гелл-Манна - Лоу для коефіцієнтів канонічної форми . Проведено аналіз негаусової нерухомої точки РГ перетворення. Обчислено критичний індекс кореляційної довжини у ε^2- наближенні;
- запропоновано узагальнення канонічного перетворення для врахування квазилокальних членів, отримані відповідні значення

критичних індексів радіуса кореляції та аномальної розмірності;
- на основі канонічного формалізму аналізується комбінування загальних особливостей флуктуацій та індивідуальних властивостей конкретних систем . Отримана оцінка універсального внеску до амплітуди сингулярності прямолінійного диаметру;
- встановлено вплив критичних флуктуацій густини на положення та ширину області переходу провідник - ізолятор. Показано, що зростання флуктуацій густини приводить до поширення області переходу провідник - ізолятор та ефекту злиття критичної точки із точкою спряження лінії переходу провідник - ізолятор і бінодалі системи;
- на основі модельного гамільтоніану для бінарного розчина з водневими зв'язками демонструється залежність степеню сплюснутості замкнутої кривої співіснування поблизу верхньої та нижньої критичних точок від густини водневих зв'язків. Отримані явни вирази для температури критичних точок розшарування, коефіцієнтів канонічного перетворення, канонічної форми у виді розкладів по параметрам водневого зв'язку.

Практична цінність. Виконані в дисертації теоретичні дослідження розширюють область застосування методів теорії катастроф у теорії критичних явищ. Канонічний формалізм є основою нового підходу до побудови рівняння стану системи як в околі, так і далеко від критичної точки, та розвинення послідовного алгоритма обробки експериментальних даних.

На захист виносяться такі положення

1. Метод побудови ефективного гамільтоніану системи у флуктуаційній області. Аналіз залежностей коефіцієнтів канонічного перетворення параметра порядка та канонічної форми гамільтоніана системи від характеристик міжчастинкової взаємодії.
2. Алгоритм регуляризації якобіану переходу до колективних змінних у моделі Ізінга з системою відліку невзаємодіючих спінів.
3. Аналіз впливу слабофлуктуючих змінних стану на явні вирази для коефіцієнтів канонічної форми термодинамічного потенціалу в

області застосування термодинамічної теорії флуктуацій.

4. Диференціальні рівняння для коефіцієнтів канонічної форми та аналіз негаусової нерухомої точки РГ перетворення, яка відповідає критичній поведінці системи.
5. Врахування ефектів нелокальності шляхом узагальнення вигляду канонічного перетворення, яке включає квазілокальні внески.
6. Природа асиметрії бінодалі в простих рідинах. Вплив водневих зв'язків на форму замкнутої кривої розшарування бінарних розчинів поблизу критичних точок.
7. Аналіз впливу критичних флуктуацій густини на положення та ширину області переходу провідник - ізолятор в залежності від відносного положення критичної точки і точки спряження бінодалі та лінії переходу провідник - ізолятор.

Апробація роботи. Основні результати дисертації доповідалися і обговорювалися на Міжнародній конференції "Renormgroup-91" , Дубна, 3-6 вересня 1991 р., Всесоюзній конференції "Сучасні проблеми статистичної фізики", Харків, 14-17 травня 1991 р., Міжнародній конференції "Фізика в Україні", Київ, 22-27 червня 1993 р., другій Міжнародної конференці з рідкого стану Italy, Firenze, Sept. 18-22, 1993 р., 2-ої Міжнародної конференції "Сучасні фізико- математичні дослідження молодих науковців вузів України" 16-18 травня 1995 р.

Публікації За матеріалами дисертації опубліковано 4 роботи, перелік яких подано в кінці автореферату.

Структура та об'єм дисертації. Основна частина дисертації має об'ем 97 стор. і складається із вступу, трьох розділів і висновків. Список літератури, що цитується, вміщає 135 найменувань. Загальний об'ем дисертації 111 стор.

ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обгрунтовано актуальність теми, дається історичний огляд теорії фазових переходів та критично розглянуто основні існуючі теоретичні методи. Вказано мету роботи та коротко викладано її зміст.

В першому розділі представлено основи канонічного формалізму. Розглядається побудова канонічної форми для відхилень енергії E від її рівноважного значення та ефективного гамільтоніану в околі критичної точки. Процедура приведення до канонічної форми стикується з проблемою послідовного виділення слабофлутуючих і сильнофлуктуюючих змінних стану. Частина приросту енергії системи $\delta\mathcal{E}_M$, яка залежить тільки від слабофлуктуючих змінних приводиться до морсівської форми. Суттєво, при цьому, що перетворення слабофлуктуючих змінних не впливає на їх фізичну природу. Оскільки ці змінні є швидкорелаксуючими у порівнянні з сильнофлуктуючою змінною, по їх флуктуаціям проводиться усереднення термодинамічного потенціалу. Як наслідок, ту частину приросту енергії системи, яка залежить від сильнофлуктуючей змінної φ представлено у вигляді нескінченного ряду:

$$\langle \delta\mathcal{E}_S \rangle = \sum_{k=1}^{\infty} D_k \varphi^k, \qquad (1)$$

Вираз (1) за допомогою канонічного перетворення теорії катастроф:

$$\varphi \longrightarrow \psi : \varphi = \alpha_0 + \psi + \alpha_2\psi^2 + \alpha_3\psi^3 + \alpha_4\psi^4 + \dots \qquad (2)$$

приводиться до канонічного вигляду:

$$\delta\mathcal{E}_S(\psi) = a_1^c\,\psi + a_2^c\,\psi^2 + a_4^c\,\psi^4 \qquad (3)$$

який співпадає з формою Ландау для термодинамічного потенціала в околі критичної точки.

При переході у флуктуаційну область необхідно врахувати: 1) додаткове перенормування параметра порядку φ та коеффициентів a_i^c, $i = 1,2,4$; 2) ефекти нелокальності.

Другий крок буде тривіальним, якщо обмежитися тільки ефектами слабкої нелокальності. В цьому випадку до гамільтоніану системи необхідно додати

$$H_{q1}[\psi(r)] = \frac{b}{2}\int (\nabla\psi)^2\, dV \qquad (4)$$

Явний вигляд коефіцієнта b можна отримати з наближення хаотичних фаз або методу колективних змінних, де він дорівнює:

$$b = -\Delta_k \Phi(k)\big|_{k=0}$$

тут $\Phi(k)$ - фур'є образ дальнодіючої частини потенціалу взаємодії. Необхідність першого кроку обумовлена внесками, які виникають за рахунок якобіану $J(\psi)$ локального канонічного перетворення поля параметра порядку

$$\psi(x) = \Gamma_0 + \varphi(x) + \frac{1}{2}\Gamma_2\varphi(x)^2 + \frac{1}{3}\Gamma_3\varphi(x)^3 + \ldots \qquad (5)$$

призводить до появлення членів $\psi(x)^n$ вищих степенів ($n \geq 5$) у ефективному гамільтоніані системи, яки порушують вид канонічної форми (3). В наслідок цього до n-го алгебраичного рівняння

$a_n\ (\Gamma_{n+1},\ \Gamma_n,\ldots,\Gamma_2) = 0 \qquad n = 5,6,\ldots$

де a_n - коефіциенти локальної частини гамільтониана H_l

$$H_l\,[\psi(r)] = \int dV \sum_{k=1}^{\infty} \frac{a_k}{k}\, \psi^k(r) \qquad (6)$$

входить коефіциент Γ з індексом n+1. Тому розвинуто ітераційний метод отримання коефіцентів Γ_k канонічного перетворення (5) і приведення локальної частини ефективного гамільтоніану (6) системи до канонічної форми:

$$H\,[\psi(r)] = \int dV \left[\, a_1^{c}\,\psi + \frac{1}{2}\, a_1^{c}\,\psi^2 + \frac{1}{4}\, a_4^{c}\,\psi^4 + \frac{1}{2}\, b\,(\nabla\psi)^2 \right] \qquad (7)$$

Слід зазначити, що у вказанному наближенні слабкої нелокальності (6) канонічна форма (7) для однокомпонентних рідин, багатокомпонентних розчинів та тривимірної моделі Ізінга співпадає з гамільтоніаном Гінзбурга-Ландау.

Дано означення канонічного оператору РГ $\hat{R}$ який зберігає форму ефективного гамільтоніану Гінзбурга-Ландау. Для цього вільсонівський оператор $\hat{W}$ осереднення по коротокхвильовим модам доповнюється оператором канонічного перетворення: $\hat{R} = \hat{O}\circ\hat{W}$. В результаті нескінченний ряд локальних внесків, який виникає внаслідок дії оператора $\hat{W}$, приводиться до канонічної форми на кожному кроці РГ перетворення. Показано, що коефіцієнти канонічної форми гамільтоніана системи задовольняють диференціальним рівнянням канонічної РГ:

$$\frac{d\ln r}{dt} = f_2^{\circ}(r,g) \qquad \frac{dg}{dt} = f_4^{\circ}(r,g) \qquad (8)$$

де $r = \frac{a_2^{\circ}}{2}$, $g = \frac{a_4^{\circ}}{4!}$, $t = \ln s$, s – параметр масштабного перетворення. Явні вирази для канонічних функцій $f_2^{\circ}(r,g)$ і $f_4^{\circ}(r,g)$ отримані за допомогою теорії збурень по константі взаємодії флуктуацій g і дорівнюють:

$$f_2^{\circ}(r,g) = 2 - 12\,K_d g + 120^2 K_d^{\,2} g + \left(-\frac{648}{\pi^2} K_d^2\, g^2\right) + o(g^2)$$

$$f_4^{\circ}(r,g) = \varepsilon g - 36\,K_d g^2 + 816\,K_d^2\, g^3 +$$
$$+\left(-\frac{1620}{\pi^2} K_d^2\, g^3 - 72\, r g^2 K_d\right) + o(g^3)$$

Координати нерухомої точки та критичні індекси отримуються стандартним чином. Показано, що критичний індекс ν кореляційної довжини є суммою двох внесків:

$$\nu_{c} = \nu_{W} + \Delta\nu_{c}$$

де

$\nu_W = \frac{1}{2} + \frac{\varepsilon}{12} + \frac{7}{162}\varepsilon^2 + o(\varepsilon^2)$ – вільсонівський внесок,

$\Delta\nu_c = \frac{1}{36}\left(1 + \frac{3}{4\pi^2}\right) + o(\varepsilon^2)$ – поправка, яка виникає за рахунок канонічного перетворення. Критичний індекс η аномальної розмірності у даному наближенні співпадає з відповідним у схемі Вільсона: $\eta_c = \eta_W = \varepsilon^2/54$. Порівняльні значення критичного індекса кореляційної довжини, обчислені за допомогою вільсонівської та канонічної РГ у двовимірному та тривимірному просторах наведено у таблиці:

	D = 2	D = 3
ν_e	0.95	0.65
ν_W	0.85	0.626

Запропоновано узагальнення канонічного перетворення (5) з метою врахування квазилокальних внесків типу $\varphi^n(\nabla\varphi)^2$, $n\geq2$, виникаючих після кожного кроку РГ перетворення. Приймається, що

$$\hat{C}\,[\psi(x)] = K(\psi(x),(\nabla\hat{\phi})\ ,\ldots) \qquad (9)$$

де

$$K(\psi(x),(\nabla\psi)^2,\ldots) = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{2n+1}\cdot G_{2n+1}\psi^{2n+1}(x) + \\ + (\nabla\psi)^2\sum_{n=1}^{\infty}G_{2n-1,2}\psi^{2n-1}(x) \qquad (10)$$

Відповідні канонічні функції $f_2^{\,c}$ та $f_4^{\,c}$ побудованого таким чином оператору канонічної РГ отримані в рамках теорії збурень по g і мають вигляд:

$$f_2^{\,c}\ (r,g)= 2 - 12\ K_d g + 120\ K_d^2\ g^2 + \left(-\ \frac{1242}{\pi^2}\ K_d^2\ g^2\ \right) + o(g^2)$$

$$f_4^{\,c}\ (r,g)= \varepsilon g - 36\ K_d g^2 + 816\ K_d^2\ g^3 + \\ + \left(-\ \frac{2808}{\pi^2}\ K_d^2\ g^3 - 72\ rg^2\ K_d\ \right) + o(g^3)$$

Розраховані на їх основі критичні індекси радіуса кореляції (ν_{ql}) та аномальної розмірності (η_{ql}) у ε^2- наближенні дорівнюють:

	D = 2	D = 3
ν_{ql}	0.97	0.66
η_{ql}	0.26	0.065
η_W	0.074	0.018

В другому розділі встановлено зв'язок коефіцієнтів ефективного гамільтоніану з характеристиками потенціалу міжчастинкової взаємодії. Розвинуто метод регуляризації якобіану переходу до колективних змінних в моделі Ізінга з системою відліку невзаємодіючих частинок. Під регуляризацією тут розуміється його представлення у вигляді ряду по коллективним змінним з ненульовим радіусом збіжності. Вихідна форма гамільтоніану системи у методі колективних змінних має вигляд:

$$H[\rho] = -\frac{1}{2}\sum \Phi(k)\,\rho_k\,\rho_{-k} - \ln J(\rho)\,, \quad \rho_k = \frac{1}{N^{1/2}}\sum \sigma_j \exp(-ikj)$$

де $\Phi(k)$ - фур'е-образ далекодіючей частини міжчастинкового потенціалу взаімодії, $\sigma_j = \pm 1$ - спінова змінна,

$$J(\rho) = \langle \prod_k{}' \delta(\rho_k - \hat{\rho}_k)\rangle_0 \tag{11}$$

- якобиан переходу, символ $\langle \ \ldots \ \rangle_0$ означае усереднення по системі відліку невзаемодіючих спінів. Сингулярний характер якобіану (11) у вузельному представленні

$$J(\rho_1) = \left[\,\delta(\rho_1+1) + \delta(\rho_1-1)\right] / 2, \tag{12}$$

призводить до значних труднощів. У зв'язку з використанням методів теорії катастроф, більш доцільним е використання $J(\rho)$ у вигляді:

$$J(\rho) = c\exp\Big(-\frac{1}{2}\sum \rho_k\,\rho_{-k} + \sum \frac{a_4}{4!N}\,\rho_{k_1}\rho_{k_2}\rho_{k_3}\,\delta(k_1+k_2+k_3) +$$

$$+\sum \frac{a_6}{6!N^2}\,\rho_{k_1}\rho_{k_2}\rho_{k_3}\rho_{k_4}\rho_{k_5}\rho_{k_6}\,\delta(k_1+k_2+k_3+k_4+k_5+k_6)\ldots\Big) \tag{13}$$

Для подальшого достатньо розглянути тільки внескі в якобіан, які обумовлени змінною $\hat{\rho}_0$. Остання е суммою великого числа випадкових величин. Тому коефіцієнти a_n можуть бути отримані за допомогою асимптотичніх оцінок для швидкісті збіжності густини ймовірності у центральній граничній теоремі. Декілька перших коефіцієнтів мають вигляд:

$a_4 = -2$, $a_6 = -24$, $a_8 = -720$, ...

Серьозною проблемою у використанні колективних змінних, зокрема $J(\rho)$ у формі нескінченного ряду (13), є необхідність оперування з короткохвильовими внесками (з великими по модулю **k**). Через це в дисертації зопропоновано альтернативний метод знаходження коефіцієнтів ефективного гамільтоніану, виходячи з рівняння стану, яке добре описує поведінку системи далеко від критичної точки. Зокрема, використовуючи рівняння стану Кюрі - Вейсса:

$$\beta h = -\beta\Phi(0)m + \operatorname{arth} m \ , \ m = \varphi$$

показано, що перші коефіцієнти отримані таким чином повністю співпадають. У випадку простих рідин коефіцієнти ефективного гамільтоніану системи визначались на основі модельних рівняннь стану, які добре описують поведінку системи далеко від критичної точки. Зокрема було використано модифіковане рівняння ван дер Ваальсу :

$$P = P_0 - n^2 a + n^3 c$$

де

$$P_0 = nk_B T(1 + \eta + \eta^2 + \eta^3)/(1-\eta)^3$$

- твердосферний внесок у тиск, у наближенні Карнахана-Старлинга, $\eta = \pi n\sigma^3/6$ - безрозмірна густина системи , σ - диаметр твердих сфер. Коефіцієнти a, b і c пов'язанні з потенціалом міжчастинкової взаємодії співвідношеннями:

$$a = -2\pi\sigma^3 \int_{\sigma}^{\infty} \Phi(r)\, r^2\, dr \ , \ b = \frac{2\pi\sigma^3}{3}$$

$$c = \frac{16\pi^3}{3}\, \sigma^3 \int_{\sigma}^{2\sigma} \Phi(r)\, r^2 \left[1 - \frac{3}{4}\frac{r}{\sigma} + \frac{1}{16}\left(\frac{r}{\sigma}\right)^3\right] dr$$

Тим самим повністю встановлюється залежність коефіцієнтів канонічної форми від характеристик міжчастинкового потенціалу. У наближенні канонічного середнього полю критична точка задається системою:

$$a_1^c\,(T,P) = 0 \qquad a_2^c\,(T,P) = 0 \qquad (14)$$

Для потенціалу:

$$\Phi(r\,;\,m,n) = \varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^m - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^n\right]$$

система (14) призводить до слідуючих числових значеннь координат критичної точки (T,P) і амплітуди r_o радіуса кореляції $\xi \doteq r_o|\tau|^{-\nu}$

		потенціал 6 - 12	потенціал 6 - 9	потенціал 6 - ∞
T_o,K	Ar	174.0	208.4	74.7
	Xe	327.1	414.0	140.5
P_o,бар	Ar	47.7	55.5	21.3
	Xe	53.5	62.4	23.6
$r_o\cdot10^8$см	Ar	1.6	1.2	3.0
	Xe	1.9	1.5	3.6
$T_o^{(can)}$ K	Ar	158.6	190.5	
	Xe	298.2	358.2.	
$P_o^{(can)}$ бар	Ar	54.0	59.9	
	Xe	60.8	67.4	
$r_o^{(can)}\times10^8$см	Ar	1.3	1.0	
	Xe	1.6	1.2	

Для порівняння наведемо експериментальні значення перелічених величин у випадку аргона и ксенона:

Ar : T_c = 150.66 K, P_c = 48.5 бар , r_o= $1.8\cdot10^{-8}$см

Xe : T_c = 289.8 K, P_c = 58.4 бар , r_o= $2.1\cdot10^{-8}$ см.

В третьому розділі аналізується рівняння стану однокомпонентних рідин табінарних розчинів на основі канонічного формалізму. Канонічній формі (7) відповідає слідуючий вираз для сингулярної частини термодинамічного потенціалу:

$$F_{sing} \simeq a_2^{c\;2-\alpha} f_c(a_1^c / a_2^{c\;\beta+\gamma}) \qquad (15)$$

де a_1^c і a_2^c - канонічні "зовнішнє поле" і "температура", f_c - універсальна скейлінгова функція, обчислена за допомогою канонічної РГ. Формула (15) призводить до слідуючей асимптотики рівняння кривої співіснування:

$$\langle\psi\rangle_{bin} = \pm\,|a_2^*|^{\beta}\,\left(1 + b_2|a_2^*|^{\Delta} + \ldots\right)$$

де ψ - канонічний параметр порядку, $a_2^* = a_2^0|_{a^0=0}$, Δ - поправка Вегнера. Важною рисою кривої співіснування у канонічних змінних є її повна симетрія у координатах (ψ, a_2^*). Ситуація суттєво змінюється при поверненні до вихідних змінних $t = \frac{T - T_c}{T_c}$, $\varphi = \rho - \rho_c$, де ρ - густина системи у випадку простих рідин. Крива співіснування стає асиметричною і характерізується сингулярністю прямолінійного диаметру.

$$\frac{1}{2}(\langle\varphi\rangle^{+}_{bin} + \langle\varphi\rangle^{-}_{bin}) = -\Gamma_0(a_2^*) + \frac{1}{2}\Gamma_2|a_2^*|^{2\beta} + \frac{1}{2}l\Gamma_2|a_2^*|^{1-\alpha} + \dots \quad (16)$$

Тут коефіціент l є універсальним, а коефіціенти Γ_0, Γ_2 канонічного перетворення залежать від параметрів міжчастинкового потенціалу. Застосовуючи формулу (16) до кривої співіснування простих рідин отримана оцінка для l : $l \approx 10.0$.

Аналізується вплив водневих зв'язків на форму кривої розшарування бінарних розчинів. Для цього використовується модельний гамільтоніан бінарного розчину з водневим зв'язками квазі Ізінговського типу

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\langle i,j\rangle}\varepsilon_{ij}(1 - S_i S_j) - h\sum_{i=1}^{N} S_i$$

у якому

$$\varepsilon_{ij} = -(J_2 + J_1\delta_{\sigma_i,1}\ \delta_{\sigma_j,1}),\ J_2 < 0,\ J_1 > 0.$$

Спінові змінні $S_i = \pm 1$ - , описують склад системи: значенню $S_i = +1$ відповідає молекула сорту A і $S_i = -1$ - молекула сорту B ; змінна Поттса $\sigma_i = 1,2,\dots,q$ описує внутрішній стан молекули; символ $\langle\ ,\ \rangle$ означає сумування по найближчим сусідям, напруженність зовнішнього полю h пропорційна до різниці хімічних потенциалів компонент. На основі отриманих виразів для коефіцієнтів канонічного переворення параметра порядку та коефіцієнтів канонічної форми ефективного гамільтоніану системи демонструється вплив водневих зв'язків на степень сплюснутості кривої розшарування. Показано, що величина останньої є суттєво різною в околі верхньої та нижньої критичних точок.

Розглянуто особливості бінодалі ртуті, лужних металов та інш. систем, де лінія переходу провідник-ізолятор спрягається із бінодалью. Отримано оцінки для впливу критичних флуктуацій густини на відносне положення та ширину області переходу провідник-ізолятор. Показано, що зростання критичних флуктуацій густини при наближанні до критичної точки приводить до розширення області переходу провідник-ізолятор і тенденції злиття критичної точки та точки спряження лінії переходу провідник-ізолятор у випадку їх близкості.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ І ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі розвинуто канонічний формалізм опису критичних явищ у простих системах які належать класу універсальності тривимірної моделі Ізінга і простих рідин.

Основні результати роботи :

1) Розвинуто послідовну процедуру побудови канонічної форми термодинамічного потенціалу в околі критичної точки системи в області застосування термодинамічної теорії флуктуацій.

2) Запропоновано метод приведення ефективного гамільтониана системи до канонічної форми у флуктуаційній області.

3) Дано означення канонічного оператора ренормгрупи, який зберігає розмірність параметричного простору гамільтоніана.

4) Отримані дифференціальні рівняння типу рівняннь Гелл-Манна-Лоу, для коефіцієнтів канонической форми.

5) Визначені значення координат нерукомої точки і критичних індексів з точністю до ε^{2}.

6) Розглянуто можливі узагальнення канонічного перетворення стосовно до поліноміальних форм які містять квазилокальні вклади.

7) Обговорюється наближення середнього поля у рамках канонічного формализму. Визначено зсув положення критичної точки у флуктуаційній області. Отримано числові значення критичної температури у моделі Ізінга, а також критична температура та тиск для рідких аргона и ксенона.

8) Запропоновано метод регуляризації якобіану переходу до колективних змінних, заснований на асимптотичних розкладах, за допомогою яких обгрунтовується центральная гранична теорема.
9) Вказано механізм комбінування індивидуальних властивостей системи і універсальних особливостей критичних флуктуацій. Показано, що універсальність критичної поведінки має місце тільки при оперуванні з канонічними змінними: канонічним параметром порядку та спряжених йому "температурою" і "зовнішнім полем".
10) Показано, що у канонічних змінних рівняння стану системи повністю симетричне. Асиметрия, що спостерігається є наслідком переходу до вихідних, лабораторних змінних.
11) На основі модельного гамільтониану для бінарних розчинів з водородними зв'язками вивчено вплив останніх на характеристики кривої розшарування поблизу верхньої та нижньої критичних точок.
12) Обговорюється асиметрія бінодалі ртуті та інших системах, зумовлена спряженням області переходу провідник-ізолятор і кривої співіснування. Показано, що збільшення критичних флуктуацій густини при наближенні до критичної точки приводить до розмиття області переходу провідник-ізолятор і тенденції їх злиття у випадку близкості точки спряження і критичної точки.

Результати дисертації опубліковані в таких основних роботах:

1. Kulinsky V.L. Malomuzh N.P. Veytsman B.A. Canonical formalism and Renormgroup. // Proc. Int. Confer. "RG-91" Dubna, USSR, September 3-6 , 1991 , P. 230-242.
2. Кулинский В.Л. Приведение затравочного гамильтониана простых систем вблизи критической точки к каноническій форме. // УФЖ. - 1993. - 38, No 3. - с. 454-459.
3. Кулинский В.Л. Канонический формализм описания критических флуктуаций в простых системах. // УФЖ. - 1993. - 38, No 12. - с 1872-1880.
4. Kulinsky V.L. Malomuzh N.P. Canonical formalism of the critical phenomena description. // Proc. Contr. Papers Int. Conf. " Physics in Ukraine" Kiev, 22-27 June, 1993.- P. 72-75.

Кулинский В.Л. Канонический формализм описания критических явлений в простых системах (рукопись).

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 - теоретическая физика. Одесский государственный университет им. И.И. Мечникова, Одесса 1995 г. Защищаются результаты, часть из которых опубликована в 4 научных работах. В диссертации развит общий метод построения эффективного гамильтониана системы в окрестности критических точек простых систем. Построен канонический оператор ренормгруппы, сохраняющий форму гамильтониана Гинзбурга-Ландау. Анализируется механизм проявления универсальных свойств критических флукуаций и индивидуальных черт системы.

V.L. Koulinskii Canonical formalism of the critical phenomena description in symple systems (manuscript).

The dissertation is adnanced for a degree of Candidate of Science (Physics and Mathematics) on the speciality 01.04.02 - theoretical physics, I.I. Mechnicov Odessa state university, Odessa 1995. The results partially published in four scientific works are defended. The general method of construction the effective Hamiltonian of the system in the vicinity of the critical points of symple systems is developed. The canonical renormgroup operator wich conserve Landau-Ginzburg Hamiltonian is defined. It is shown how the universal properties of the critical fluctuations combine with the individual features of the system.

Ключові слова: фазові перетворення, канонічний параметр порядку, канонічна форма ефективного гамільтоніану системи, ренормалізаційна група, асиметрія кривої співіснування.

Підписано до друку 7. I2. 95р. Обсяг I,I2 друк. арк.
Формат 60х84. Зам.I93. Тираж I00.

Друк УДАЗ Ім. О. С. Попова. Одеса, СтаропортофранкІвська, 6I.