

A-21-2
A-27-7

K-8-156

Alina Ciach

MECHANIKA STATYSTYCZNA WARSTWY POWIERZCHNIOWEJ

Praca doktorska wykonana w Zakładzie
Fizykochemii Roztworów Nieelektrolitów
Instytutu Chemii Fizycznej
Polskiej Akademii Nauk
pod kierunkiem Prof.dr hab.JANA STECKIEGO

Warszawa 1985

h. N. Kar

Biblioteka Instytutu Chemii Fizycznej PAN

F-B.250/86



70000000008609



B. 250/86

Promotorowi

Panu Profesorowi dr hab. Janowi Steckiemu
składam serdeczne podziękowanie za wskazanie
tematu pracy , opiekę naukową i cenne
wskazówki wykorzystane przy wykonywaniu
pracy.

CEL PRACY

Celem pracy było uzyskanie metodami analitycznymi ścisłych rozwiązań dla jedno- i dwupunktowych funkcji korelacyjnych w modelach sieciowych fluktuującej warstwy powierzchniowej i badanie fizycznych własności tych rozwiązań.

SPIS TREŚCI

	Strona
Cel pracy	1
Wstęp	5
Rozdział I Zestawienie podstawowych definicji i wzorów	10
1 Zespoły statystyczne kanoniczny i wielki kanoniczny	10
2 Napięcie powierzchniowe	12
3 Efektywne napięcie powierzchniowe	13
4 Jedno- i dwupunktowe funkcje korelacyjne	14
Rozdział II Teoria funkcjonałów gęstości	19
1 Ścisłe związki pomiędzy napięciem powierzchniowym , funkcjami korelacyjnymi i polem w warstwie powierzchniowej	19
2 Teoria van der Waalsa i Fiska-Widoma warstwy powierzchniowej	20
Rozdział III Teoria fal kapilarnych	24
Rozdział IV Model gazu sieciowego i model SOS	29
1 Definicja modelu gazu sieciowego	29
2 Warunki brzegowe	30
3 Pojęcie krótkich i długich konturów	32
4 Model SOS	33
Rozdział V Przestrzenna separacja faz w modelach gazu sieciowego i SOS ; przegląd literatury	35
1 Współistnienie i przestrzenny rozdział faz	35
2 Napięcie powierzchniowe w modelach sieciowych	37
2.1 Model gazu sieciowego	37
2.2 Jawna postać napięcia powierzchniowego w modelu gazu siecio- wego	38
2.3 Napięcie powierzchniowe w modelu SOS	40
3 Profil gęstości w modelach sieciowych	41
3.1 Profil gęstości a fluktuacje powierzchni	41

3.2	Profil gęstości w układzie o skończonych rozmiarach	42
3.3	Profil gęstości w obecności zewnętrznego pola	43
4	Goły profil gęstości	44
5	Funkcje korelacyjne w modelach sieciowych warstwy powierzchniowej	49
Rozdział VI	Profil gęstości w jednowymiarowym modelu gazu sieciowego z ustaloną liczbą cząstek	54
1	Wstęp	54
2	Wyrażenia formalne dla skończonego układu	55
3	Wyniki numeryczne dla skończonego układu	62
4	Analiza asymptotyczna profilu gęstości i funkcji korelacyjnej h przy długości układu $M \rightarrow \infty$	66
4.1	Gęstość i funkcja korelacyjna h w przypadku wysokotemperaturowym, $T > T^*(M)$	69
4.2	Gęstość i funkcja korelacyjna h w przypadku niskotemperaturowym, $T < T^*(M)$	76
5	Sens fizyczny temperatury $T^*(M)$	85
6	Wnioski dotyczące profilu gęstości przy ustalonej liczbie cząstek	89
Rozdział VII	Jedno- i dwupunktowe funkcje korelacyjne w modelu SCS warstwy powierzchniowej w układzie o skończonych rozmiarach w nieobecności zewnętrznego pola	90
1	Wstęp	90
2	Funkcje p_1 i p_2	91
2.1	Macierz przejścia T	91
2.2	Jawna postać p_1 i p_2 w przypadku A / $M=\text{const}$ / układu o skończonej wysokości M i szerokości $L \rightarrow \infty$	96
2.3	Jawna postać p_1 i p_2 w przypadku B / $L=\text{const}$ / układu o skończo-	

	nej szerokości L i wysokości $M \rightarrow \infty$	97
3	Profil gęstości	101
3.1	Przejście fazowe szorstkości	102
4	Funkcja korelacyjna H	104
4.1	Przypadek A / $M=\text{const}/$	104
4.2	Przypadek B / $L=\text{const}/$	109
5	Definicje nowych funkcji korelacyjnych warunkowych	111
6	Jawna postać funkcji F_{cond} w modelu SOS	113
7	Jawna postać funkcji H_{cond} w modelu SOS	115
8	Jawna postać funkcji korelacyjnych odwrotnych Q_{cond} i C_{cond}	115
9	Jawna postać funkcji korelacyjnej C	119
10	Nowa postać formuły Zwanziga-Triezenberga dla efektywnego napięcia powierzchniowego	121
	Rozdział VIII Podsumowanie	123
	Zestawienie najważniejszych wyników pracy	127
	Literatura	130
	Dodatek A	
	Dodatek B	
	Dodatek C	
	Dodatek D	

WSTĘP

Jednoskładnikowy układ przy temperaturze T niższej od temperatury krytycznej T_c znajduje się w stanie dwufazowym. W obecności zewnętrznego pola g fazy są przestrzennie rozdzielone. Obszar niejednorodny, oddzielający czyste fazy, nazywany jest warstwą lub powierzchnią rozdziału faz, albo krótko powierzchnią.

Przedmiotem teorii powierzchni jest termodynamiczny i statystyczny opis układu złożonego z rozdzielonych przestrzennie faz oraz badanie rozkładu materii w tym układzie. Mikroskopowe wyrażenia dla wielkości charakteryzujących powierzchnię otrzymywane są w ramach równowagowej mechaniki statystycznej. W równowadze termodynamicznej cały układ, złożony ze współistniejących, rozdzielonych przestrzennie faz opisywany jest zespołem kanonicznym, jeżeli następuje wymiana ciepła z otoczeniem o temperaturze T i wielkim kanonicznym, gdy prócz ciepła wymieniane są cząstki z otoczeniem o zadanym potencjale chemicznym. /Rowlinson i Widom (1982), Evans (1979) /

Termodynamiczne własności układu dwufazowego różnią się od własności układu jednofazowego. Potencjały termodynamiczne zawierają dodatkowe wyrazy proporcjonalne do pola powierzchni A , dzielące układ na obszary o objętościach V_1 i V_2 zajmowane przez pierwszą i drugą fazę. Związek pomiędzy parametrami ekstensywnymi całego układu i faz jednorodnych o objętościach V_1 i V_2 ma postać:

$$X = X_1 + X_2 + X_s = x_1 V_1 + x_2 V_2 + x_s A$$

X jest parametrem ekstensywnym całego układu a X_1 i X_2 parametrami czystych faz. x_s , definiowane powyższym wzorem, jest gęstością powierzchniową wielkości X i na ogół zależy od wyboru powierzchni. Powierzchnia o takim położeniu, że

liczba cząstek $N = N_1 + N_2$, czyli $N_s = 0$, nazywana jest powierzchnią rozdziału Gibbsa / Rowlinson i Widom (1982) / .

W układzie dwufazowym wyrażenia na różniczkę energii swobodnej F i potencjału $\Omega = F - \mu n$ mają postać:

$$dF = -S dT - p dV + \sigma da + \mu dn$$

$$d\Omega = -S dT - p dV + \sigma dA + n d\mu$$

przy standardowej notacji. σ nosi nazwę napięcia powierzchniowego i jest podstawową wielkością termodynamiczną związaną z powierzchnią rozdziału faz.

Rozkład materii w warstwie powierzchniowej opisywany jest przez średnią gęstość w danym punkcie przestrzeni $\rho(\underline{r})$ i przez fluktuacje gęstości, które przedstawia funkcja korelacyjna gęstość-gęstość oznaczana przez $H(\underline{r}_1, \underline{r}_2)$ i funkcja korelacyjna wprost $C(\underline{r}_1, \underline{r}_2)$. Ponadto, w teorii powierzchni wprowadza się funkcje $p_1(\underline{r})$, $F(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = p_2(\underline{r}_1, \underline{r}_2) - p_1(\underline{r}_1) p_1(\underline{r}_2)$ i $Q = P^{-1}$, gdzie p_1 i p_2 stanowią prawdopodobieństwo i prawdopodobieństwo łączne znajdowania się powierzchni w zadanych położeniach. Definicje funkcji korelacyjnych jedno- i dwupunktowych przedstawione są w rozdziale I.

Rozkład materii w warstwie powierzchniowej najwygodniej jest badać w układzie, w którym fazy objętościowe są jednorodne, gdyż wówczas wszystkie niejednorodności związane są z warstwą powierzchniową. Niejednorodności w układzie jednofazowym będą małe w układzie o dużych rozmiarach, w którym wpływ brzegów na wnętrze jest nieistotny i przy dostatecznie słabym polu zewnętrznym. W teoriach powierzchni z reguły przyjmowane jest założenie, że układ ma rozmiary dążące do nieskończoności a pole zewnętrzne $g \rightarrow 0$.

W teorii funkcjonałów gęstości / rozdział II / wyprowadzono ścisłe związki

pomiędzy wielkościami związanymi z powierzchnią , w postaci równań różniczkowo-całkowych. Ich przegląd i odnośniki do prac oryginalnych znajdują się w monografii Rowlinsona i Widoma (1982) i w artykule przeglądowym Evansa (1979) . Prace te omawiam pobieżnie , ponieważ nie mają bezpośredniego związku z rozprawą .

W rozdziale II , §2 oraz w rozdziałach III i \bar{V} omawiane są prace, w których otrzymano jawną postać jedno- i dwupunktowych funkcji korelacyjnych w ramach dwóch różnych przybliżeń : w teorii van der Waalsa (1894) i w teorii fal kapilarnych / Buff , Lovett i Stillinger (1965) / oraz ściśle dla dwuwymiarowych modeli sieciowych.

W teorii van der Waalsa , opartej na teorii funkcjonałów gęstości , równowagowy profil gęstości jest monotoniczną funkcją , której gradient jest bardzo duży na obszarze rzędu ξ_c , stanowiącym warstwę powierzchniową , a poza tym obszarem bliski zera. ξ_c jest objętościową długością korelacji / rozdział II §2/

Oparta na teorii fluktuacji teoria fal kapilarnych prowadzi do wniosków sprzecznych z teorią van der Waalsa. Szerokość warstwy powierzchniowej W jest w tej teorii funkcją pola powierzchni A i pola zewnętrznego g , przy czym $W \rightarrow \infty$ dla $A \rightarrow \infty$ i $g \rightarrow 0$. Zasięg funkcji korelacyjnej H w kierunku równoległym do powierzchni także dąży do nieskończoności przy $A \rightarrow \infty$ i $g \rightarrow 0$ /rozdział III /.

Ścisłe wyniki otrzymane dla modeli sieciowych są ilościowo zgodne z przewidywaniami teorii fal kapilarnych i tym samym sprzeczne z teorią van der Waalsa / rozdział \bar{V} / . W teorii van der Waalsa z założenia powierzchnia Gibbsa nie fluktuuje. Zgodnie z proponowanym przez kilku autorów punktem widzenia , w teorii tego typu wyznaczany jest tzw. goły profil i wewnętrzna szerokość powierzchni. W niskich temperaturach fluktuacje powierzchni opisywane przez teorię fal kapilarnych dominują nad fluktuacjami gęstości związanymi ze ściśliwością faz objętościowych i prowadzą do uśredniania gołego profilu po różnych położeniach powierzchni. W efekcie powstaje funkcja zgodna z przewidywaniami teorii fal kapilarnych . Poglądy te omawiane są w §4 rozdziału \bar{V} . W modelach sieciowych

goły profil powstaje w wyniku usunięcia fluktuacji gęstości związanych z fluktuacjami położenia powierzchni. Jest on jakościowo zgodny z przewidywaniami teorii van der Waalsa / rozdział \bar{V} §4 /

Wewnętrzne korelacje w warstwie powierzchniowej badane były w kilku pracach, które omawiam w §5 rozdziału \bar{V} . Wyniki sugerują, że korelacje te mają duży zasięg w kierunku równoległym do powierzchni.

W rozdziałach VI i VII przedstawiam własne wyniki.

W rozdziale VI przedstawione są rachunki prowadzące do ścisłej postaci gołego profilu gęstości w przypadku, gdy fluktuacje powierzchni zostały usunięte na skutek ustalenia liczby cząstek w jednowymiarowym modelu gazu sieciowego. W modelu tym układ o długości M jest w stanie dwufazowym poniżej temperatury quasi-krytycznej $T'(M)$ wyznaczonej w §4 rozdziału VI. Przeprowadzona jest analiza asymptotyczna dla $M \rightarrow \infty$. Wyniki porównane są z odpowiednimi wynikami uzyskanymi w zespole wielkim kanonicznym, a także z wynikami literaturowymi dotyczącymi gołego profilu gęstości.

Rozdział VII poświęcony jest szczegółowej analizie dwuwymiarowego modelu SCS w układzie o skończonych rozmiarach przy zerowym polu zewnętrznym. Badane są dwa przypadki graniczne: A ($M=\text{const}$) i B ($L=\text{const}, h_1=0$). W przypadku A ($M=\text{const}$) wysokość układu M jest skończona, natomiast szerokość $L \rightarrow \infty$. W przypadku B ($L=\text{const}, h_1=0$) wysokość $M \rightarrow \infty$, szerokość L jest skończona a powierzchnia jest przypięta do brzegu układu na wysokości $h_1=0$. W obu przypadkach wyznaczona została jawna postać funkcji p_1 , ρ , P i Π , i przeprowadzone porównanie z wynikami literaturowymi /§1-4/.

W §5 przedstawione są formalne definicje nowych funkcji korelacyjnych, nazwanych funkcjami korelacyjnymi warunkowymi i oznaczanych przez P_{cond} , Q_{cond} , H_{cond} i C_{cond} . Funkcje te wiążą się z prawdopodobieństwem warunkowym tak, jak zwykle funkcje P , Q , H i C z prawdopodobieństwem łącznym przechodzenia powierzchni przez zadane położenia. Taka definicja odpowiada "przypięciu" powierzchni w

ustalonym punkcie i umożliwia badanie jej wewnętrznych własności. W §5-8 rozdziału VII wyznaczane są jawne postaci funkcji P_{cond} , H_{cond} , C_{cond} i C_{cond} w modelu SOS. W §9 wyznaczona jest funkcja C w skali makroskopowej przy szerokości powierzchni $W \rightarrow \infty$. Nowa postać wyrażenia Y-T-Z na napięcie powierzchniowe / rozdział II §1 / w której występuje funkcja C_{cond} przedstawiona jest w § 10.

Rozdział VIII zawiera podsumowanie i dyskusję wyników literaturowych oraz uzyskanych w niniejszej pracy.

W rozdziale IX znajduje się spis najważniejszych wyników pracy.

ROZDZIAŁ I

ZESTAWIENIE PODSTAWOWYCH DEFINICJI I WZORÓW

W rozdziale tym przedstawione będą statystyczno-mechaniczne definicje wielkości stosowanych dalej do opisu powierzchni rozdziału faz. Rozpatrywane będą układy znajdujące się w równowadze z otoczeniem o temperaturze T.

§1 . Zespoły statystyczne kanoniczny i wielki kanoniczny. ⁹

Prawdopodobieństwo znajdowania się układu w stanie mikroskopowym ω dane jest wzorem:

$$P(\omega) = \frac{1}{Q} e^{-\beta H^{\text{tot}}(\omega)} \quad 1.1$$

gdzie $\beta = (kT)^{-1}$, k jest stałą Boltzmana. Dla układu złożonego z N cząstek zakładamy następującą postać hamiltonianu H^{tot} :

$$H^{\text{tot}}(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \dots, \underline{r}_N, p_1, p_2, \dots, p_N) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + H_N(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \dots, \underline{r}_N) \quad 1.2a$$

gdzie

$$H_N(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \dots, \underline{r}_N) = \sum_{i > j} V(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N u_{\text{ext}}(\underline{r}_i) \quad 1.2b$$

m oznacza masę cząstki, $V(r_{ij})$ jest potencjałem oddziaływań dla pary i, j, r_{ij} jest odległością między cząstkami i, j a u_{ext} jest potencjałem zewnętrznym.

gęstość prawdopodobieństwa znajdowania się cząstek w położeniach $\underline{r}_1, \underline{r}_2, \dots, \underline{r}_N$ w układzie z ustaloną liczbą cząstek N , opisywanym przez zespół kanoniczny ma postać:

$$\rho_c(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \dots, \underline{r}_N) = \left(\frac{Z_N}{N!} \right)^{-1} \exp[-\beta H_N(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \dots, \underline{r}_N)] \quad 1.3a$$

Z_N jest konfiguracyjną sumą statystyczną :

$$Z_N = \int d\underline{r}_1 \int d\underline{r}_2 \dots \int d\underline{r}_N e^{-\beta H_N} \quad 1.3b$$

Związek Z_N z sumą statystyczną Q_N , gdzie

$$Q_N = (NI)^{-1} \int d\underline{r}_1 \dots \int d\underline{r}_N \int d\underline{p}_1 \dots \int d\underline{p}_N e^{-\beta H^{\text{tot}}} \quad 1.4$$

jest następujący:

$$Q_N = \frac{Z_N}{N!} \left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2} \right)^{dN/2} \quad 1.5$$

\hbar oznacza stałą Plancka dzieloną przez 2π .

W układzie otwartym opisywanym przez zespół wielki kanoniczny prawdopodobieństwo znajdowania się w układzie N cząstek w otoczeniach $d\underline{r}_1, d\underline{r}_2, \dots, d\underline{r}_N$ punktów $\underline{r}_1, \underline{r}_2, \dots, \underline{r}_N$ ma postać:

$$d\underline{r}_1 \dots d\underline{r}_N \int \rho_c(\underline{r}_1, \dots, \underline{r}_N; N) = e^{\beta \mu N} e^{-\beta H_N} \Xi^{-1} \cdot d\underline{r}_1 \dots d\underline{r}_N \quad 1.6a$$

gdzie wielka suma statystyczna dana jest wzorem:

$$\Xi = \sum_{N \geq 0} \frac{Z_N^N z^N}{N!} \quad 1.6b$$

μ jest potencjałem chemicznym. Lotność z jest dana wyrażeniem:

$$z = e^{\beta\mu} \left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2} \right)^{d/2} \quad 1.6c$$

Związek sum statystycznych z potencjałami termodynamicznymi jest następujący / np. Huang (1978) /:

$$F = -kT \log Q_N \quad 1.7a$$

$$\Omega = -kT \log \Xi \quad 1.7b$$

§ 2 . Napięcie powierzchniowe .

Termodynamiczna definicja napięcia powierzchniowego podana została we Wstępie. W układzie dwufazowym potencjały (1.7) zawierają człony proporcjonalne do pola powierzchni rozdziału faz. Napięcie powierzchniowe równe jest gęstości powierzchniowej potencjału Ω , lub gęstości powierzchniowej energii swobodnej F przy $N_g=0$. Mikroskopowe wyrażenie na napięcie powierzchniowe otrzymamy, znajdując Ξ w układzie składającym się z rozdzielonych przestrzennie faz (w obecności infinitezimalnego pola zewnętrznego) a następnie Ξ_0 w układzie jednofazowym (w obecności infinitezimalnego pola faworyzującego którąś z faz). Ma ono postać:

$$\sigma = kT \lim_{A \rightarrow \infty} A^{-1} \lim_{\substack{V/A \rightarrow \infty \\ A = \text{const}}} \log \frac{Z}{Z_0} \quad 1.8$$

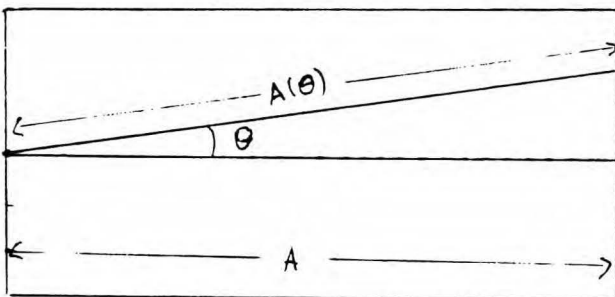
Przedstawione tu wyrażenie na napięcie powierzchniowe wykorzystywało wielu autorów do znalezienia jawnej postaci σ w modelu Isinga / rozdział \bar{V} /.

§ 3. Efektywne napięcie powierzchniowe.

W cieczach izotropowych napięcie powierzchniowe ma jednakową wartość dla powierzchni o różnych kierunkach. Modele sieciowe, którym poświęcona jest niniejsza praca nie są izotropowe i napięcie powierzchniowe zależy od kierunku powierzchni. Dla układów nieizotropowych wprowadzono pojęcie efektywnego napięcia powierzchniowego $\bar{\Gamma}$ / Fisher i wsp. (1982) /

$$\bar{\Gamma} = \lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{\Delta \Omega(\theta)}{\Delta A(\theta)} \quad 1.9$$

gdzie $\Delta \Omega(\theta)$ i $\Delta A(\theta)$ wyrażają przyrosty Ω i pola powierzchni A wywołane zmianą kierunku powierzchni przy stałych rozmiarach układu. /rys.1 /



rys. 1

Przyjmując, że $\theta = 0$ jest kierunkiem minimalnego napięcia powierzchniowego

otrzymamy:

$$\Delta A = A(\theta) - A \underset{\theta \rightarrow 0}{=} \frac{1}{2} \theta^2 A \quad 1.10a$$

$$\Delta \Omega = \Omega(\theta) - \Omega(0) \underset{\theta \rightarrow 0}{=} \left(\sigma(0) \frac{1}{2} \theta^2 + \frac{1}{2} \sigma''(0) \theta^2 \right) A \quad 1.10b$$

a stąd

$$\Gamma = \sigma(0) + \sigma''(0) \quad 1.11$$

Pojęcie efektywnego napięcia powierzchniowego wykorzystywane będzie w rozdziale III poświęconym teorii fal kapilarnych i w rozdziałach \bar{V} i VII poświęconym ścisłym wynikom otrzymanym w modelach sieciowych, zwłaszcza przy porównywaniu ścisłych wyników z przewidywaniami teorii fal kapilarnych.

§4. Jedno- i dwupunktowe funkcje korelacyjne.

Profil gęstości i funkcję korelacyjną gęstość-gęstość H wyznacza się w ramach mechaniki statystycznej za pomocą wzorów:

$$\rho(\underline{r}) = \langle \hat{\rho}(\underline{r}) \rangle \quad 1.12a$$

$$H(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = \langle \hat{\rho}(\underline{r}_1) \hat{\rho}(\underline{r}_2) \rangle - \langle \hat{\rho}(\underline{r}_1) \rangle \langle \hat{\rho}(\underline{r}_2) \rangle \quad 1.12b$$

Operator gęstości mikroskopowej dla układów ciągłych ma postać:

$$\hat{\rho}(\underline{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\underline{r} - \underline{r}_i) \quad 1.13$$

Definicja $\hat{\rho}(\underline{r})$ dla układów sieciowych podana jest w rozdziale IV . Symbol $\langle \dots \rangle$ oznacza średnią po zespole. Dla zespołu wielkiego kanonicznego

$$\langle A \rangle = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{z^N}{N!} \int d\underline{r}_1 \dots \int d\underline{r}_N A(\underline{r}_1, \dots, \underline{r}_N) e^{-\beta H_N} \Xi^{-1} \quad 1.14$$

Definicje funkcji $\rho(\underline{r})$ i $H(\underline{r}_1, \underline{r}_2)$ można przedstawić w równoważnej postaci / np. Evans (1979) /:

$$\rho(\underline{r}) = \frac{\delta \log \Xi}{\delta (-\beta u_{\text{ext}}(\underline{r}))} \quad 1.15a$$

$$H(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = \frac{\delta \rho(\underline{r}_1)}{\delta (-\beta u_{\text{ext}}(\underline{r}_2))} = \frac{\delta^2 \log \Xi}{\delta (-\beta u_{\text{ext}}(\underline{r}_1)) \delta (-\beta u_{\text{ext}}(\underline{r}_2))} \quad 1.15b$$

Funkcja odwrotna do H , $C = H^{-1}$ nazywana jest uogólnioną funkcją Ornsteina-Zernike i przedstawiana następująco / Evans (1979) /:

$$C(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = \frac{\delta (-\beta u_{\text{ext}}(\underline{r}_1))}{\delta \rho(\underline{r}_2)} \quad 1.15c$$

Oprócz przedstawionych wyżej funkcji korelacyjnych , rozważane są w literaturze również inne funkcje / np. Rowlinson i Widom (1982) , Evans (1979) /

Funkcja h definiowana jest w oparciu o konfiguracyjne funkcje rozkładu $\rho^{(n)}(r_1, \dots, r_n)$ gdzie

$$\rho^{(n)}(r_1, \dots, r_n) = \Lambda^{-1} \sum_{N \geq n} \frac{\Lambda^N}{(N-n)!} \int dr_{n+1} \dots \int dr_N e^{-\beta H_N(r_1, \dots, r_N)} \quad 1.16$$

następująco:

$$h(r_1, r_2) = \rho^{(2)}(r_1, r_2) - \rho^{(1)}(r_1) \rho^{(1)}(r_2) \quad 1.17$$

Związek pomiędzy H i h ma postać / np. Evans (1979) /

$$H(r_1, r_2) = \delta(r_1 - r_2) \rho(r_1) - \rho(r_1) \rho(r_2) h(r_1, r_2) \quad 1.18$$

Funkcja korelacyjna g definiowana jest wzorem:

$$g(r_1, r_2) = h(r_1, r_2) + 1 \quad 1.19$$

Funkcja korelacyjna wprost Ornsteina-Zernike spełnia równanie: / Lebowitz i Percus (1963) /

$$c = h + c * \rho * h \quad 1.20$$

gdzie $*$ oznacza splot. Związek pomiędzy c i C jest następujący / np. Evans (1979) /

$$C(r_1, r_2) = \frac{\delta(r_1 - r_2)}{\rho(r_1)} - c(r_1, r_2) \quad 1.21$$

W teorii powierzchni wprowadzone zostały dodatkowo następujące funkcje korela-

cyjne / Stecki (1984) /:

$$p(\underline{r}) = -\nabla \varphi(\underline{r}) \quad 1.22a$$

$$F(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = \nabla_1 \nabla_2 H(\underline{r}_1, \underline{r}_2) \quad 1.22b$$

$$Q(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = P^{-1}(\underline{r}_1, \underline{r}_2) \quad 1.22c$$

Symbol ∇_i oznacza gradient względem \underline{r}_i w modelach ciągłych. W dyskretnych modelach sieciowych ∇_i oznacza dokonanie operacji :

$$\nabla f(z) = f(z+1) - f(z) \quad 1.22d$$

względem zmiennej o numerze i , gdzie płaszczyzna powierzchni dana jest przez $z = 0$. Tak zdefiniowane funkcje są zlokalizowane w warstwie powierzchniowej, ponieważ gradienty są tu dużo większe niż w obszarze zajętym przez czyste fazy. Funkcja Q wiąże się z funkcją C następująco / Stecki (1984) /:

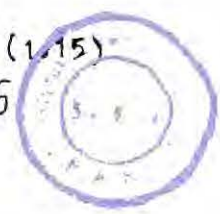
$$C(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = \nabla_1 \nabla_2 Q(\underline{r}_1, \underline{r}_2) \quad 1.23$$

Wprowadzenie $V_{ext}(\underline{R}, z)$, gdzie \underline{R} leży w płaszczyźnie powierzchni $z=0$, za pomocą wzoru:

$$V_{ext}(\underline{R}, z) = \int_{-M}^z dh u_{ext}(\underline{R}, h) \quad 1.24$$

umożliwia przedstawienie funkcji p , P , Q w postaci analogicznej do (1.15) / Stecki (1984) /:

B.250/86



$$P(z) = \frac{\delta \log \mathcal{Z}}{\delta (-\beta V_{\text{ext}}(z))} \quad 1.25a$$

$$F(z_1, z_2, \underline{A}, \underline{R}) = \frac{\delta P(z_1)}{\delta (-\beta V_{\text{ext}}(z_2))} \quad 1.25b$$

$$Q(z_1, z_2, \underline{A}, \underline{R}) = \frac{\delta (-\beta V_{\text{ext}}(z_1))}{\delta P(z_2)} \quad 1.25c$$

W rozdziale VI obliczona będzie jawna postać funkcji g i h w jednowymiarowym modelu gazu sieciowego w zespolu kanonicznym. Wszystkie pozostałe, wprowadzone wyżej funkcje korelacyjne wyznaczone będą w modelu SOS / rozdział VII / . Ponadto w §5 rozdziału VII przedstawiona będzie definicja nowych funkcji korelacyjnych, pozwalających na badanie wewnętrznych własności fluktuującej powierzchni.

ROZDZIAŁ II

TEORIA FUNKCJONAŁÓW GĘSTOŚCI

Z definicji potencjałów termodynamicznych (1.7) wynika, że są one funkcjonalami zewnętrznego pola $u_{\text{ext}}(\underline{r})$. Profil gęstości $\rho(\underline{r})$ jest jednoznacznym funkcjonalem pola $u_{\text{ext}}(\underline{r})$ / Evans (1979) / a więc jest to związek odwracalny. Wynika stąd, że potencjały termodynamiczne są funkcjonalami profilu gęstości.

§1. Ścisłe związki pomiędzy napięciem powierzchniowym, funkcjami korelacyjnymi i polem w warstwie powierzchniowej.

Zastosowanie teorii funkcjonałów gęstości do badania własności warstwy powierzchniowej prowadzi do wyznaczenia ścisłych związków pomiędzy funkcjami korelacyjnymi, napięciem powierzchniowym, polem zewnętrznym i potencjałem oddziaływań międzycząsteczkowych. Należy do nich wyrażenie Triezenberga i Zwanziga (1972) oraz Lovetta i wsp. (1973) na napięcie powierzchniowe. Triezenberg i Zwanzig (1972) rozważali fluktuacje gęstości wywołane zmianą kształtu powierzchni i wynikający z nich przyrost potencjału Ω . Zmiana kształtu powierzchni prowadzi również do wzrostu pola powierzchni ΔA . Granica ilorazu $\Delta\Omega/\Delta A$ przy deformacjach powierzchni dążących do zera stanowi efektywne napięcie powierzchniowe, równe napięciu powierzchniowemu w układzie izotropowym. Szczegółowe rachunki, przedstawione także w artykule przeglądowym Evansa (1979) prowadzą do wzoru:

$$2\beta\Gamma = - \int dz_1 \int dz_2 \frac{d\rho(z_1)}{dz_1} \frac{d\rho(z_2)}{dz_2} C_2(z_1, z_2) \quad 2.1$$

gdzie

$C_2(z_1, z_2)$ jest drugim momentem C

$$C_2(z_1, z_2) = \int d\underline{R} R^2 C(\underline{R}, z_1, z_2) \quad 2.2$$

Lovett i wsp. (1976) i Wertheim (1976) wyprowadzili związek:

$$m_g = \int dz_2 \frac{d \rho(z_2)}{dz_2} C_0(\underline{R}, z_1, z_2) \quad 2.3$$

gdzie zerowy moment C , C_0 dany jest wzorem:

$$C_0(z_1, z_2) = \int d\underline{R} C(\underline{R}, z_1, z_2) \quad 2.4$$

Związek (2.3) jest równoważny pierwszemu z równań hierarchii YBG / Evans (1979) /

Wyprowadzono także wiele innych związków ; przedstawione są one i omówione szczegółowo w monografii Rowlinsona i Widoma (1982) i artykule przeglądowym Evansa (1979) . Nie mają one bezpośredniego związku z rozprawą .

Funkcja C , wyznaczona ściśle w modelu SOS / rozdział VII / spełnia związki (2.1) i (2.3) przy $g = 0$. Nowa funkcja korelacyjna C_{cond} / rozdział VII/ spełnia związki wynikające z (2.1) i (2.3) ; ich postać wyprowadzona jest w § 10 rozdziału VII .

§ 2. Teoria van der Waalsa i Fiska-Widoma warstwy powierzchniowej.

Teoria van der Waalsa (1894) i Fiska i Widoma (1969) poświęcona jest przybliżonemu wyznaczeniu profilu gęstości w warstwie powierzchniowej i napięcia powierzchniowego w ramach teorii funkcjonałów gęstości. Energia swobodna jest funkcjonałem gęstości , mającym z założenia postać:

$$F[\rho(\underline{r})] = \int d\underline{r} f[\rho(\underline{r})] \quad 2.5a$$

gdzie f można rozwinąć w szereg Taylora wokół stanu jednorodnego $\rho_u = \text{const}$

$$f[\rho(\underline{r})] = f_0(\rho(\underline{r})) + f_2(\rho(\underline{r})) (\nabla \rho(\underline{r}))^2 + \dots \quad 2.5b$$

f_0 jest przedłużeniem analitycznym gęstości energii swobodnej na obszar gęstości $\rho_g < \rho(\underline{r}) < \rho_1$ dla których układ jednorodny jest niestabilny.

W oryginalnej wersji van der Waalsa i Fiska-Widoma $f_2(\rho(\underline{r})) = \text{const}$.

Funkcjonał $F[\rho(\underline{r})]$ przyjmuje minimum dla równowagowego profilu gęstości przy $\rho(\underline{r})$ spełniających warunek stałej liczby cząstek o postaci:

$$\int dz \{ \rho(z) - [\rho_g \theta(z) + \rho_1 (1 - \theta(z))] \} = 0 \quad 2.6$$

(warunek ten jest równoważny założeniu, że powierzchnia Gibbsa dana jest równaniem $z=0$ i nie fluktuuje) i warunki brzegowe:

$$\rho(-\infty) = \rho_1, \quad \rho(\infty) = \rho_g \quad 2.7$$

Dla $f_2 = \text{const}$ rozwiązaniem zasady wariacyjnej

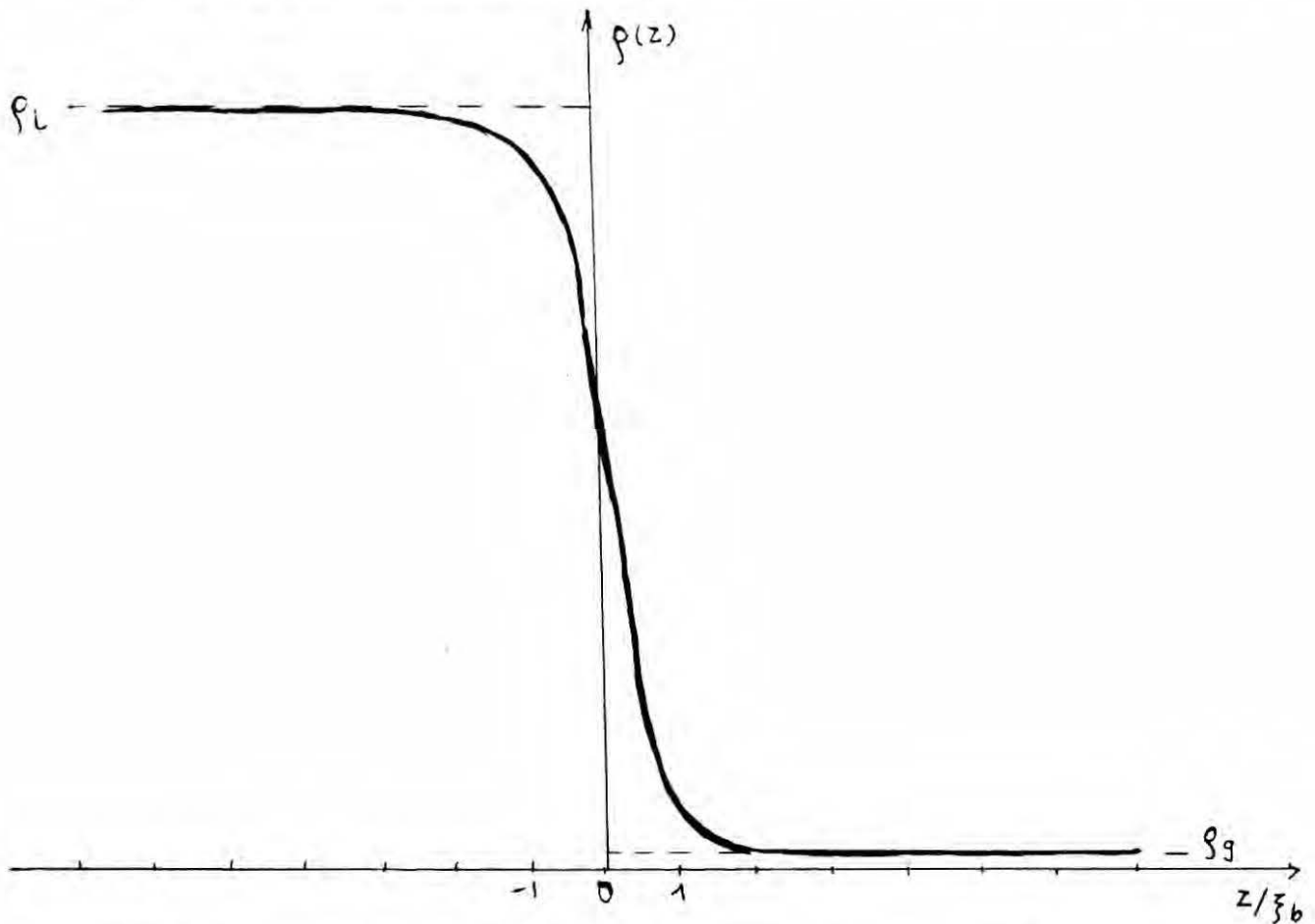
$$\delta F[\rho_{\text{eq}}(\underline{r})] = 0 \quad 2.8$$

jest funkcja o postaci:

$$\rho_{\text{eq}}(\underline{r}) = \frac{1}{2} [\rho_1 + \rho_g - (\rho_1 - \rho_g) \tanh(2z/\xi_b)] \quad 2.9$$

gdzie ξ_b jest objętościowym zasięgiem korelacji . Dla $f_2 = f_2(\rho(\mathbf{r}))$

$\rho_{eq} = \rho_{eq}(z/\xi_b)$ / Yang i wsp. (1976) / i jest funkcją o postaci takiej , jak przedstawiona na rys. 2



rys.2 . Równowagowy profil gęstości w teorii van der Waalsa *

W niskich temperaturach szerokość warstwy niejednorodnej $W \sim \xi_b$ jest rzędu średnicy atomu . Dla $T \rightarrow T_c$ $W \rightarrow \infty$ w ten sam sposób , co ξ_b .

Napięcie powierzchniowe w teorii Van der Waalsa ma postać:

$$\sigma = 2 \int dz f_2(\rho_{eq}(z)) \left[\frac{d\rho_{eq}(z)}{dz} \right]^2 \quad 2.10$$

$$\text{Dруги момент функции } C_2 = 4\beta f_2(\rho_{eq}(z)) \left[\frac{d\rho_{eq}(z)}{dz} \right]^2 \quad 2.11$$

W teorii van der Waalsa z założenia powierzchnia rozdziału faz nie fluktuuje. Fluktuacje gęstości związane są tylko ze ściśliwością faz objętościowych. Jeżeli w rzeczywistym układzie fluktuacje powierzchni są duże, to otrzymany w tej teorii profil gęstości nie może być porównywany z profilem wyznaczonym bezpośrednio z definicji (1.12). Teoria van der Waalse pozwala na obliczenie "gołego" profilu gęstości / Widom (1972) /.

ROZDZIAŁ III

TEORIA FAL KAPILARNYCH

Teoria fal kapilarnych, oparta na teorii fluktuacji, zaproponowana została przez Mandalstama (1914), Borna i von Karmana (1913) oraz Buffa, Lovetta i Stillingera (1965). W przeciwieństwie do teorii van der Waalsa / rozdział II §2 / w teorii fal kapilarnych uwzględniane są fluktuacje gęstości wynikające z przemieszczeń powierzchni Gibbsa i zaniedbywane fluktuacje związane ze ściśliwością faz objętościowych.

Przy zamrożonych fluktuacjach powierzchni z założenia istnieje pewien "goły" profil gęstości, spełniający warunki brzegowe $\rho_b(-\infty) = \rho_1$, $\rho_b(\infty) = \rho_g$, dla którego powierzchnia Gibbsa dana jest równaniem $z=0$. W wyniku wzbudzeń termicznych powstaną fluktuacje gęstości i położenie powierzchni Gibbsa stanie się funkcją $z_G(\underline{R})$, gdzie \underline{R} leży w płaszczyźnie $z=0$. Kolejnym założeniem teorii jest przyjęcie, że wewnętrzne własności powierzchni nie zmieniają się (fazy są nieściśliwe) i profil gęstości dla zdeformowanej powierzchni ma postać:

$$\rho(\underline{r}) = \rho_b(z - z_G(\underline{R})) \quad 3.1$$

z deformacją $z_G(\underline{R})$ związany jest wzrost energii, wynikający z działania napięcia powierzchniowego i grawitacyjnej energii potencjalnej:

$$\Delta E = \int d\underline{R} \sigma(\nabla z_G(\underline{R})) [1 + (\nabla z_G(\underline{R}))^2]^{1/2} - \sigma_0 A + m_E \int d\underline{r} z \Delta \rho(\underline{r}) \quad 3.2$$

Prawdopodobieństwo deformacji $z_G(\underline{R})$ dane jest przez czynnik Boltzmannowski $p \sim e^{-\beta \Delta E(z_G(\underline{R}))}$. Przy założeniach:

$$z_G(\underline{R}) \ll A^{1/2} \quad 3.3a$$

$$\nabla z_G \underline{R} \ll 1 \quad 3.3b$$

ΔE przyjmuje przybliżoną postać:

$$\Delta E = \frac{1}{2} \Gamma \int d\underline{R} (\nabla z_G \underline{R})^2 + \frac{1}{2} (\rho_1 - \rho_g) m_g \int [z_G(\underline{R})]^2 d\underline{R} \quad 3.4$$

gdzie Γ jest efektywnym napięciem powierzchniowym / rozdział I §3 / , zastępującym , zgodnie z Fisherem i wsp. (1982) napięcie powierzchniowe σ występujące w oryginalnej wersji Buffa i wsp. (1965) . Rozróżnienie między σ a Γ ma znaczenie przy porównywaniu teorii fal kapilarnych z wynikami otrzymanymi ściśle dla nieizotropowych modeli sieciowych / rozdział V i VII / .

Rozwinięcie $z_G(\underline{R})$ w szereg Fouriera

$$z_G(\underline{R}) = \dots \sum_{\underline{k}} a(\underline{k}) e^{-i\underline{k} \underline{R}} \quad 3.5$$

daje

$$\Delta E = \frac{\Gamma}{2A} \sum_{\underline{k} > 0} a(\underline{k}) a(-\underline{k}) (k^2 + \xi_c^{-2}) \quad 3.6$$

gdzie

$$\xi_c^2 = \frac{\Gamma}{(\rho_1 - \rho_g) m_g} \quad 3.7$$

Średnie kwadratowe przesunięcie powierzchni Gibbsa $\langle z_G^2 \rangle$ gdzie

$$z_G^2 = A^{-1} \int dR z_G(\underline{R}) = A^{-2} \sum_{\underline{k} > 0} u(\underline{k}) u(-\underline{k}) \quad 3.8a$$

dane jest wzorem:

$$\langle z_G^2 \rangle = \frac{1}{A\Gamma} \sum_{\underline{k} > 0} (k^2 + \xi_c^{-2})^{-1} \quad 3.8b$$

Jawna postać $\langle z_G^2 \rangle$ zależy od wymiaru przestrzeni. W przypadkach granicznych i/ $\Lambda \rightarrow \infty$, ii/ $g \rightarrow 0$ jest ona następująca / Buff i wsp. (1965), Evans (1979) /:

i/ $\Lambda \rightarrow \infty$

$$\langle z_G^2 \rangle = \begin{cases} - \frac{1}{4\pi\beta\Gamma} \log \xi & / \text{ dla } g \rightarrow 0 / \quad d=3 \quad 3.9a \\ \frac{1}{4\beta(m\epsilon\Delta\beta\Gamma)^{1/2}} & \quad d=2 \quad 3.9b \end{cases}$$

ii/ $g \rightarrow 0$

$$\langle z_G^2 \rangle = \begin{cases} (2\pi\beta\Gamma)^{-1} \log(L/\xi_b) & \quad d=3 \quad 3.10a \\ \frac{L}{4\beta\Gamma} & \quad d=2 \quad 3.10b \end{cases}$$

Profil gęstości i funkcja korelacyjna H obliczone w teorii fal kapilarnych są funkcjami o postaci: / Buff i wsp. (1965), Bedeaux i Weeks (1985) /

$$\rho(z) = \frac{1}{2} (\rho_1 + \rho_g) - (\rho_1 - \rho_g) \operatorname{erf}(z^*) \quad 3.11a$$

gdzie

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^x dz e^{-z^2} \quad 3.11b$$

$$z^* = z/\mathbb{W}, \quad \mathbb{W}^2 = 2 \langle z_G^2 \rangle \quad 3.11c$$

$$H(\Delta x, z_1, z_2) \underset{\Delta x \ll \xi_c}{=} (\rho(z_{\max}) - \rho_g) (\rho_1 - \rho(z_{\min})) \quad 3.12$$

$$H(\Delta x, z_1, z_2) \underset{\Delta x \rightarrow \infty}{\sim} e^{-\Delta x / \xi_c} \frac{d\rho(z_1^*)}{dz_1^*} \frac{d\rho(z_2^*)}{dz_2^*} \quad 3.13$$

Transformata Fouriera funkcji H , $\tilde{H}(k, z_1^*, z_2^*)$ dla $k \rightarrow 0$ ma postać:

$$\tilde{H}(k, z_1^*, z_2^*) \underset{k \rightarrow 0}{=} \frac{\rho'(z_1^*) \rho'(z_2^*)}{1 + k^2 \xi_c^2} \quad 3.14$$

Dla drugiego momentu funkcji C Bedeaux i Weeks (1984) otrzymują:

$$c_2(z_1^*, z_2^*) \sim \delta(z_1^* - z_2^*) \quad 3.15a$$

$$c_2(z_1, z_2) = 2\beta \Gamma \delta(z_1 - z_2) [(\rho_l - \rho_g) d\rho(z_1)/dz_1]^{-1} \quad 3.15b$$

W przeciwieństwie do teorii van der Waalsa, w której szerokość warstwy

powierzchniowej \mathbb{W} nie zależy od warunków zewnętrznych i jest rzędu ξ_b , teoria fal kapilarnych daje \mathbb{W} będące funkcją pola g i powierzchni A / patrz (3.9) i (3.10)/
Dla $g \rightarrow 0$ i $A \rightarrow \infty$ $\mathbb{W} \rightarrow \infty$. Profil gęstości i funkcja H w kierunku prostopadłym do powierzchni zależą od $z^* = z/\mathbb{W}$. W kierunku równoległym do powierzchni H jest funkcją zmiennej $\Delta x^* = \Delta x/\xi_c$, gdzie ξ_c dane przez (3.7) wiąże się z \mathbb{W} danym przez (3.11c) następująco:

$$\mathbb{W}^2 = \xi_c^2 2\beta\Gamma \quad 3.16$$

Przedstawione w rozdziale \underline{V} i \underline{VII} ścisłe wyniki otrzymane dla dwuwymiarowych modeli sieciowych w przypadku profilu gęstości są ilościowo zgodne z przewidywaniami teorii fal kapilarnych. Uzyskane w rozdziale \underline{VI} wyniki dotyczące funkcji H w modelu SOS również potwierdzają teorię fal kapilarnych. W przypadku funkcji C ścisłe wyniki / rozdział \underline{V} i \underline{VII} / zgodne są z postacią (3.15a) i sprzeczne z (3.15b).

ROZDZIAŁ IV

MODEL GAZU SIECIOWEGO I MODEL SOS

§1. Definicja modelu gazu sieciowego.

W modelu gazu sieciowego z definicji mikroskopowymi stanami układu są ciągi $(n_{\underline{i}})$, gdzie $n_{\underline{i}}$ jest mikroskopowym operatorem gęstości liczbowej o postaci:

$$n_{\underline{i}} = \begin{cases} 1 & \text{w położeniu } \underline{i} \text{ znajduje się cząstka} \\ 0 & \text{w położeniu } \underline{i} \text{ nie ma cząstki} \end{cases} \quad 4.1$$

Składowe wektora \underline{i} są liczbami całkowitymi. Hamiltonian przedstawianego modelu ma postać:

$$H[(n_{\underline{i}})] = -J \sum_{(\underline{i}, \underline{j})} n_{\underline{i}} n_{\underline{j}} + \sum_{\underline{i}} u_{\text{ext}}(\underline{i}) n_{\underline{i}} \quad 4.2$$

gdzie J jest stałą sprzężenia, symbol $\sum_{(\underline{i}, \underline{j})} \dots$ oznacza sumę po najbliższych sąsiadach a $u_{\text{ext}}(\underline{i})$ jest potencjałem zewnętrznego pola. Prawdopodobieństwo konfiguracji $(n_{\underline{i}})$ w zespole wielkim kanonicznym dane jest przez wyrażenie:

$$\varrho[(n_{\underline{i}})] = Z^{-1} \exp\left\{ \beta J \sum_{(\underline{i}, \underline{j})} n_{\underline{i}} n_{\underline{j}} - \sum_{\underline{i}} [\beta \mu - u_{\text{ext}}(\underline{i})] n_{\underline{i}} \right\} \quad 4.3$$

przy stosowaniu oznaczeń wprowadzonych w rozdziale II.

Ciągi $(n_{\underline{i}})$ można wzajemnie jednoznacznie odwzorować na konfiguracje spinów $1/2$, $s_{\underline{i}} = \frac{1}{2} \sigma_{\underline{i}}$, gdzie $\sigma_{\underline{i}} = \pm 1$, ponieważ:

$$\sigma_{\underline{i}} = 2 n_{\underline{i}} - 1 \quad 4.4$$

W modelu Isinga / n.p. Huang (1978)/ mikroskopowymi stanami są z definicji ciągi $(\sigma_{\underline{i}})$. Prawdopodobieństwo konfiguracji $(\sigma_{\underline{i}})$ w zespole kanonicznym dla modelu Isinga dane jest wzorem:

$$\mathcal{Z}[(\sigma_{\underline{i}})] = Z^{-1} \exp \left[\beta J \sum_{\underline{i}, \underline{j}} \sigma_{\underline{i}} \sigma_{\underline{j}} - \sum_{\underline{i}} u_{\text{ext}}(\underline{i}) \sigma_{\underline{i}} \right] \quad 4.5$$

W przypadku, gdy $\mathcal{Z} = 4J$ i $\mu = 4dJ$, gdzie d jest wymiarem przestrzeni, prawdopodobieństwo konfiguracji $(\sigma_{\underline{i}})$ dane powyższym wzorem jest równe prawdopodobieństwu konfiguracji $(n_{\underline{i}}) = ((\sigma_{\underline{i}} + 1)/2)$ danemu wzorem (4.3). Z uwagi na opisany izomorfizm modeli, w dalszym ciągu posługiwać będziemy się na ogół zmiennymi σ . Znając wielkości $\langle \sigma_{\underline{i}} \dots \sigma_{\underline{j}} \rangle$ wyznaczymy $\langle n_{\underline{i}} \dots n_{\underline{j}} \rangle$ wykorzystując związek (4.4).

§ 2. Warunki brzegowe.

W przypadku dwuwymiarowym węzły sieci numerowane są parą liczb (i, j) . Zakładać będziemy w dalszym ciągu, że

$$\begin{aligned} i &= 1, L \\ j &= -M, M \end{aligned} \quad 4.6$$

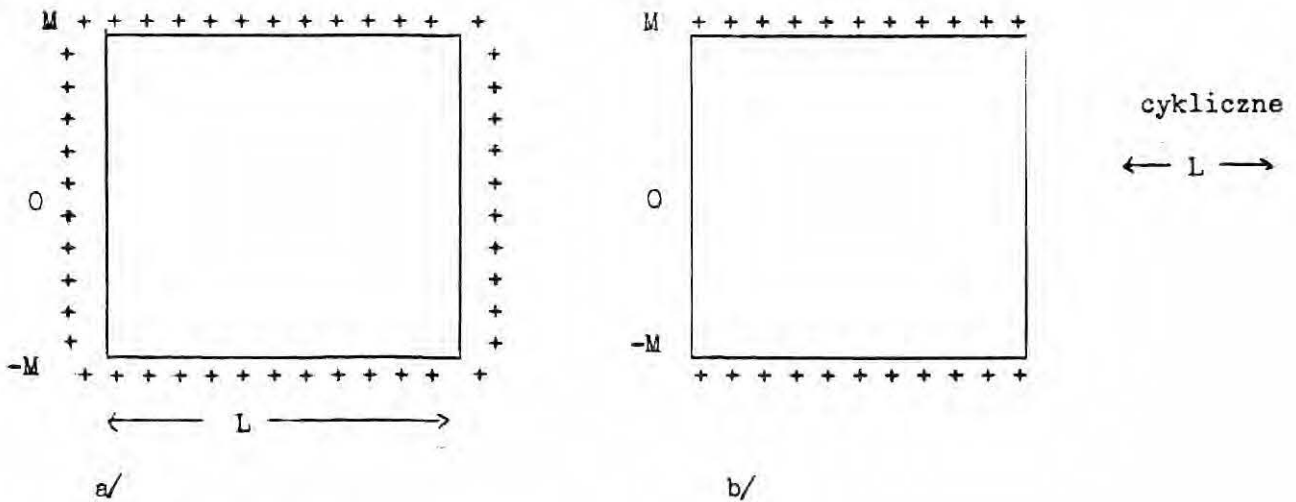
Rozważane będą następujące warunki brzegowe:

i/ cykliczne warunki brzegowe /c/ , $L+1 = 1$, $M+1 = -M$

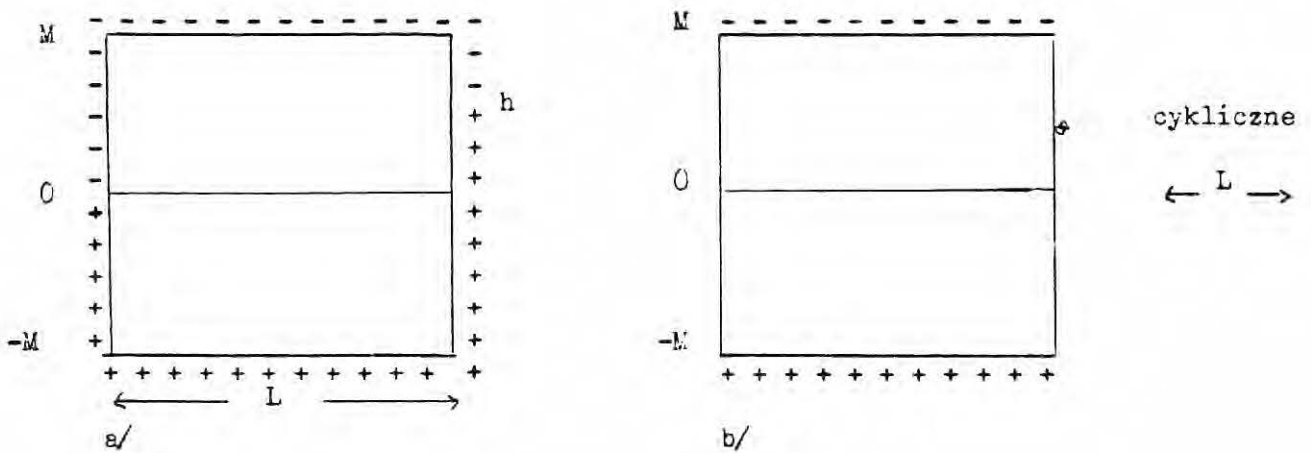
Przy tych warunkach brzegowych dwuwymiarowy układ ma kształt torusa.

ii/ dodatnie warunki brzegowe /+/ , $\sigma_{(i,j)} = 1$ dla i,j należących do brzegu układu . Analogicznie wprowadza się ujemne warunki brzegowe / rys.3 /

iii/ przeciwstawne warunki brzegowe /+/-/ , brzegowe spiny mają przeciwne zwroty na górnym i dolnym brzegu układu / rys.4 /



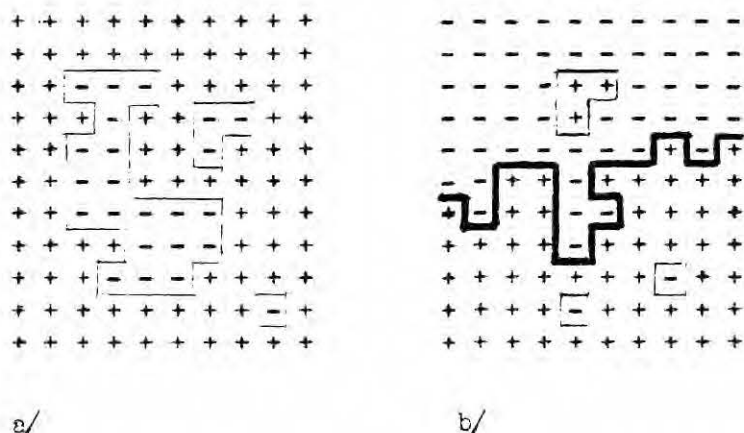
rys.3 Dodatnie warunki brzegowe.



rys.4 Przeciwstawne warunki brzegowe.

§3. Pojęcie krótkich i długich konturów.

Dla $d=2$ konfigurację (σ_i) jednoznacznie określają kontury, oddzielające obszary spinów $+1$ od obszarów spinów -1 / Krammers i Wannier (1941) i Feynmann (1980) /.
 Przy przeciwstawnych warunkach brzegowych wystąpią tzw. długie kontury , obiegające układ dokoła. W układzie o warunkach brzegowych przedstawionych na rys.4a pojawi się dokładnie jeden długi kontur o końcach $(0,0)$ i $(L+1,h)$, przy warunkach brzegowych przedstawionych na rys.4b wystąpi nieparzysta liczba długich konturów. Przy dodatnio / lub ujemnie / namagnesowanym brzegu długie kontury nie występują w przypadku przedstawionym na rys.3a , lub pojawi się parzysta liczba takich konturów w przypadku przedstawionym na rys.3b. Pozostałe kontury nazywane są krótkimi.



rys.5 Równoważne konfiguracje spinów i konturów . Długie kontury zaznaczone grubą linią.

- a/ dodatnio określone warunki brzegowe /+ /
- b/ przeciwstawne warunki brzegowe /+ - /

Prawdopodobieństwo konfiguracji , której odpowiada zbiór konturów o długości l można formalnie przedstawić wzorem:

$$p(l) = Z^{-1} \exp(-\beta J l) \exp[\beta J (2\Omega - l)] \quad 4.7$$

gdzie Ω jest liczbą węzłów , ponieważ długość konturów l jest równa liczbie par przeciwnie skierowanych spinów a 2Ω jest liczbą wszystkich par.

§4. Model SOS

W układzie o przeciwstawnych warunkach brzegowych (rys.4) można wyróżnić podzbiór konfiguracji składających się wyłącznie z jednego długiego konturu, przecinającego każdą kolumnę dokładnie raz . Konfiguracje te jednoznacznie opisuje ciąg (h_i) , gdzie h_i jest wysokością na jakiej długi kontur przecina kolumnę o numerze i . Długość konturu jest równa $L + \sum_i |h_i - h_{i+1}|$. Stąd , na podstawie (4.7) , prawdopodobieństwo konfiguracji (h_i) wyraża się wzorem:

$$p[(h_i)] = Z^{-1} \exp \left[-2\beta J \sum_i |h_i - h_{i+1}| \right] \quad 4.8$$

Tak określony model nosi nazwę modelu SOS / solid-on-solid / i wprowadzony został przez Temperleya (1952) . W dostatecznie niskich temperaturach konfiguracje z modelu Isinga o przeciwstawnych warunkach brzegowych / +- / (rys.4) , nie należące do przestrzeni konfiguracyjnej modelu SOS będą występować z prawdopodobieństwem bliskim zera , ponieważ czynnik $\exp(-2\beta J l)$ występujący we wzorze (4.7) bardzo szybko maleje z l dla $\beta \rightarrow \infty$. Model

SOS można więc uważać za niskotemperaturowe przybliżenie dla powierzchni rozdziału faz w modelu Isinga. Z drugiej strony model ten jest ściśle izomorficzny z modelem Isinga o różnych stałych sprzężenia J_{\parallel} w kierunku $(1,0)$ i J_{\perp} w kierunku $(0,1)$ w granicznym przypadku $J_{\perp} \rightarrow \infty$. Wynika to stąd, że dla $J_{\perp} \rightarrow \infty$ stosunek prawdopodobieństw występowania konfiguracji o całkowitej długości poziomych segmentów n i m jest proporcjonalny do $\exp [2\beta J_{\perp}(m-n)]$. W granicy jest on równy zero dla $n > m$. Minimalna liczba poziomych segmentów jest równa szerokości układu L i występuje w konfiguracjach, w których brak krótkich konturów, a jedyny długi kontur nie ma nawisów / przecina każdą kolumnę dokładnie raz /. Stąd w granicy $J_{\perp} \rightarrow \infty$ występują tylko konfiguracje należące do modelu SOS.

ROZDZIAŁ \bar{V}

PRZESTRZENNA SEPARACJA FAZ W MODELACH GAZU SIECICOWEGO I SOS ; PRZEGLĄD LITERATURY

§1. Współistnienie i przestrzenny rozdział faz.

Współistnienie faz może mieć miejsce w temperaturach niższych od temperatury krytycznej. W modelu Isinga istnieje niezerowa temperatura krytyczna dla $d \geq 3$. Dla $d=2$ jej wartość wyznaczyli Krammers i Wannier (1941) a następnie Onsager (1944). Miracle-Sole (1972), Messager i Miracle-Sole (1975), Abraham i Martin-Löf (1973) oraz Lebowitz (1977) wykazali, że poniżej temperatury krytycznej Onsagera, w której energia swobodna jest osobliwa, układ jest w stanie dwufazowym, przy czym stany czystej fazy, oznaczane przez $\langle \dots \rangle^+$ i $\langle \dots \rangle^-$ definiowane są następująco:

$$\langle \sigma \rangle^+ = -\langle \sigma \rangle^- = \frac{\partial f(\beta g)}{\partial (\beta g)} \Big|_{g=0^+} = m^* = \left[1 - \frac{1}{\sinh^4 2\beta J} \right]^{1/8} \quad 5.1$$

g jest jednorodnym polem zewnętrznym, f gęstością energii swobodnej w granicy termodynamicznej, m^* nazywane jest spontaniczną magnetyzacją / Onsager (1949), Yang (1952), Benettin i wsp. (1973) /

Martin-Löf (1972) i Abraham i Martin-Löf (1973) wykazali, że

$$\langle \sigma \rangle_{+/+} = -\langle \sigma \rangle_{-/-} = m^* \quad 5.2$$

gdzie $\langle \dots \rangle_{+/+}$ oznacza średnią przy dodatnich warunkach brzegowych /rys.3 / Wynika stąd, że warunki brzegowe dodatnie $+/+$ i ujemne $-/-$ wystarczają do utrzymania układu w stanie czystej fazy. Grają one rolę infinitezymalnego pola zewnętrznego faworyzującego fazę dodatnio $+m^*$ i ujemnie $-m^*$ namagnesowaną.

Problem przestrzennej separacji faz omawiają: Gallavotti i Martin-Löf (1972) Gallavotti (1972), Abraham i Reed (1974) i (1976), Abraham i Martin-Löf (1973). Autorzy ci rozważali układy z przeciwstawnymi warunkami brzegowymi $/+-/$, przedstawionymi na rys. 4, w zerowym polu zewnętrznym. Każdy ustalony długi kontur dzieli układ na dwa obszary: dolny z dodatnim warunkiem brzegowym $/+/$ i górny z ujemnym warunkiem brzegowym $/-/$ /rys.5/. Wnętrze tych obszarów, ze względu na (5.2) stanowią fazy $+m^*$ na dole i $-m^*$ na górze. Długi kontur można więc nazwać chwilową powierzchnią rozdziału faz. Pozostałe, krótkie kontury wpływają tylko na wartość spontanicznej magnetyzacji i nie mają związku z przestrzennym rozdziałem faz / Gallavotti i Martin-Löf (1972) /. Gallavotti (1972) studiował fluktuacje położenia długiego konturu i wykazał, że znajduje się on w odległości $\sim \sqrt{L}$ od dowolnego ustalonego punktu. W granicy termodynamicznej fluktuacje te prowadzą do translacyjnej niezmienniczości układu. Translacyjną niezmienniczość modelu Isinga z dowolnymi warunkami brzegowymi wykazali Aizenmann (1979) i Higuchi (1979). Opisane fakty prowadzą do wniosku, że w zerowym polu zewnętrznym warunki brzegowe $/+-/$ wywołują przestrzenny rozdział faz, ale fluktuacje długiego konturu prowadzą do delokalizacji powierzchni rozdziału faz w granicy termodynamicznej. Aby móc badać własności warstwy powierzchniowej należy wprowadzić objętościowe pole zewnętrzne, gdyż grające rolę infinitezimalnego pola warunki brzegowe nie wystarczają do lokalizacji powierzchni, albo badać układ o skończonych rozmiarach.

§2. Napięcie powierzchniowe w modelach sieciowych.

§§1. Model gazu sieciowego.

Zgodnie z omówionymi w poprzednim paragrafie pracami , w modelu gazu sieciowego / Isinga / przy warunkach brzegowych dodatnich / + / lub ujemnych / -/ /rys.3 / układ jest w stanie czystej fazy dodatnio / +m^{*}/ lub ujemnie / -m^{*}/ namagnesowanej. Przy przeciwstawnych warunkach brzegowych / +- / , /patrz rys.4/ układ jest w stanie dwufazowym i w skończonym układzie fazy są przestrzennie rozdzielone . W związku z tym potencjały termodynamiczne , w tym potencjał Ω w układach o przeciwstawnych warunkach brzegowych / +- / powinny zawierać dodatkowo człon powierzchniowy, związany z istnieniem powierzchni rozdziału faz. Oddziaływanie fazy +m^{*} z brzegiem /+/ jest takie , jak oddziaływanie fazy -m^{*} z brzegiem /-/ , dlatego wkłady do sumy stanów pochodzące od oddziaływania z brzegami układu są jednakowe w układach o warunkach brzegowych przedstawionych na rys.3a i 4a oraz w układach przedstawionych na rys.3b i 4.b . Różnica pomiędzy energią swobodną / potencjałem Ω w modelu gazu sieciowego / w wymienionych układach stanowi napięcie powierzchniowe mnożone przez pole powierzchni , które w układzie dwuwymiarowym jest równe szerokości układu L . Z definicji (1.7) i (1.8) otrzymujemy:

$$\beta \sigma = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \lim_{M \rightarrow \infty} \log \frac{Z_{/+ -/}}{Z_{/+ /}} \quad 5.3$$

gdzie $Z_{/+ /}$ jest sumą stanów / w modelu gazu sieciowego wielką sumą stanów / w układzie o dodatnich warunkach brzegowych /+/ , a $Z_{/+ -/}$ sumą stanów / wielką sumą stanów / w układzie o przeciwstawnych warunkach brzegowych /+-/ . Definicję napięcia powierzchniowego w powyższej postaci podają: Abraham i Martin-Löf (1973)

Camp i Fisher (1972), Abraham, Gallavotti i Martin-Löf (1973) i Abraham i Reed (1974) i (1976).

Gallavotti i Martin-Löf (1972) wykazali, że w układzie z ustaloną całkowitą magnetyzacją / w zespole kanonicznym w modelu gazu sieciowego / napięcie powierzchniowe nie zależy od wartości magnetyzacji i ma taką samą postać jak w układzie z fluktuującą magnetyzacją / w zespole wielkim kanonicznym w modelu gazu sieciowego /.

Model Isinga jest modelem sieciowym, co prowadzi do anizotropii przejawiającej się zależnością napięcia powierzchniowego od kierunku powierzchni. W układzie o warunkach brzegowych przedstawionych na rys.4b kierunek powierzchni wyznacza kąt θ , $\text{tg } \theta = h/L$, jaki tworzy wektor normalny do powierzchni z kierunkiem $(0,1)$. h jest wysokością, do jakiej spiny na lewym brzegu układu mają wartość $+1$, przy prawym brzegu obsadzonym do wysokości $h=0$ spinami $+1$. Powyżej h na lewym i powyżej zera na prawym brzegu spiny mają wartość -1 . Pole / długość / powierzchni wynosi $L(1 + \text{tg}^2 \theta)^{1/2}$, stąd $\sigma(\theta)$ ma postać:

$$\beta \sigma(\theta) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\cos \theta}{L} \lim_{M \rightarrow \infty} \log \frac{Z(h)}{Z_{/+}} \quad 5.4$$

gdzie $Z(h)$ jest sumą stanów układu o warunkach brzegowych przedstawionych na rys 4b, oznaczanych dalej przez $/+-,h/$

§§2. Jawna postać napięcia powierzchniowego w modelu gazu sieciowego.

Jawną postać napięcia powierzchniowego w modelu Isinga wyznaczył po raz pierwszy Onsager (1944) stosując podejście różniące się od przedstawionego wyżej. Rozważał on antyferromagnetyk, czyli układ ze stałą sprzężenia $J < 0$ przy cykli-

cznych warunkach brzegowych i parzystej liczbie rzędów oraz nieparzystej liczbie kolumn. W takim układzie idealne uporządkowanie w postaci przeciwnie skierowanych spinów w sąsiadujących kolumnach jest niemożliwe, istnieje para kolumn o jednakowo skierowanych spinach. Energia swobodna takiego układu jest wyższa od energii swobodnej układu o stałej sprzężenia $|J|$ o człon powierzchniowy τL . Ponieważ energia pary równoległych spinów sprzężonych stałą $J < 0$ jest równa energii pary antyrównoległych spinów sprzężonych stałą $|J|$, zdaniami Onsagera τ jest równe napięciu powierzchniowemu w układzie o stałej sprzężenia $|J|$.

Podobne podejście przedstawia Watson (1972). W układzie o stałej sprzężenia J we wszystkich kolumnach prócz jednej, w której stała sprzężenia jest równa J_0 energia swobodna ma postać:

$$F = f V + \tau(J_0) L + o(L) \quad 5.5$$

gdzie f jest objętościową gęstością energii swobodnej niezaburzonego układu tj. $J_0 = J$. Gdy $J_0 = -J$, rozumowanie analogiczne do rozumowania Onsagera (1944) prowadzi do wniosku, że $\tau(-J) = \sigma$.

Wszystkie przedstawione podejścia dają taką samą postać napięcia powierzchniowego przy $\theta=0$, mianowicie:

$$\sigma = kT (K_{\perp} - \log \coth K_{\parallel}) \quad 5.6$$

Jawna postać napięcia powierzchniowego dla powierzchni o kierunku θ została wyznaczona zgodnie z definicją (5.4) przez Abrahama i Reeda (1977)

$$\sigma(\theta) = [\gamma(\omega_c) + i \omega_c \operatorname{tg} \theta] \cos \theta \quad 5.7a$$

gizie

$$\cosh \gamma(\omega) = \cosh 2K \coth 2K - \cos \omega \quad 5.7b$$

$$\left. \frac{\partial \gamma(\omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=\omega_0} = -i \operatorname{tg} \theta \quad 5.7c$$

Efektywne napięcie powierzchniowe , definiowane wzorem (1.11) / Fisher i wsp. (1982) / ma postać:

$$\beta \Gamma = \sinh 2(K_{\perp} - K_{\parallel}^*) = \sinh(\sigma \beta) \quad 5.8$$

$$\exp 2K^* = \coth K$$

§§3. Napięcie powierzchniowe w modelu SOS .

W modelu SOS energia swobodna zawiera wyłącznie człon powierzchniowy. Uwzględniając energię płaskiego konturu $h_{\perp}=0$, równą $J_{\perp}L$, otrzymamy:

$$\sigma(\theta)L = -kT(\log Z + J_{\perp}L) \cos \theta \quad 5.9$$

Jawna postać Z dla powierzchni o kierunku θ jest wyznaczona w rozdziale VII , §1.3 , wzór(7.26a) , dla $h = L \operatorname{tg} \theta$. Prowadzi ona do następującej postaci zależnego od kąta napięcia powierzchniowego:

$$\sigma(\theta) = kT \left(1 + \operatorname{tg}^2 \theta \right)^{-1/2} \left(-\log \coth K + K_{\perp} + \sinh K \operatorname{tg}^2 \theta \right) \quad 5.10$$

Minimum napięcia powierzchniowego przypada dla $\theta = 0$.

Efektywne napięcie powierzchniowe , dane wzorem (1.11) ma w modelu SCS postać:

$$\rho \Gamma = 2 \sinh^2 K$$

5.11

Gdy K_{\perp} jest w modelu SCS skończone, to napięcie powierzchniowe dla $\theta=0$ ma postać dokładnie taką, jak w modelu gazu sieciowego. Jeżeli natomiast model SCS traktowany będzie jako granica modelu gazu sieciowego przy $J_{\perp} \rightarrow \infty$, to napięcie powierzchniowe będzie mieć wartość nieskończoną. Efektywne napięcie powierzchniowe, stanowiące przyrost potencjału Ω wywołany zmianą kształtu powierzchni, na przyrost pola powierzchni, przy stałych rozmiarach całego układu, nie zależy od stałej sprzężenia K_{\perp} i jest skończone dla $K_{\perp} \rightarrow \infty$. Przy porównywaniu ścisłych wyników otrzymanych dla modeli sieciowych z przewidywaniami teorii fal kapilarnych wykorzystywane będą postaci efektywnego napięcia powierzchniowego (5.6) i (5.11).

§3. Profil gęstości w modelach sieciowych.

§§1. Profil gęstości a fluktuacje powierzchni.

Z wymienionych na początku §1, dotyczącego rozdziału faz prac wynika, że dla $u_{\text{ext}}=0$ w dwuwymiarowym modelu Isinga przeciwstawne warunki brzegowe /+-/ / patrz rys.4 / wywołują rozdział faz, ale położenie powierzchni podlega fluktuacjom / Gallavotti (1972) / prowadzącym do translacyjnej niezmienniczości układu w granicy termodynamicznej / Aizenmann (1979) /. Przy rozważanych warunkach brzegowych w nieskończonym układzie przy $u_{\text{ext}}=0$ średnia magnetyzacja jest we wszystkich punktach należących do wnętrza układu równa zero. Średnia magnetyzacja / i związany z nią profil gęstości / jest funkcją położenia dla zlokalizowanej powierzchni. Lokalizacja powierzchni może mieć miejsce w nieskończonym układzie w obecności zewnętrznego pola, lub przy zerowym polu w układzie o skończonych rozmiarach.

W trzech wymiarach przy $u_{\text{ext}} = 0$ układ jest translacyjnie niezmienniczy dla $T > T_r$, $T_r \sim T_c$ ($j=2$), natomiast dla $T < T_r$ powierzchnia rozdziału faz staje się zlokalizowana / Dobrushin (1972) i van Beijeren (1975) /. W temperaturze T_r zachodzi przejście fazowe, zwane przejściem szorstkości. Przejście fazowe tego rodzaju można też zaobserwować w dwóch wymiarach w układzie półnieskończonym, przy zmienionym, w porównaniu z resztą układu, oddziaływaniu cząstek ze ścianą. / Abraham (1980), Burckhard (1981) Chui and Weeks (1981), Vallade and Lajzerowicz (1981), Kroll (1981) /. W przypadku powierzchni rozdziału faz przejście szorstkości ma miejsce w układzie o skończonej szerokości L . Ściśle biorąc jest to quasi-przejście fazowe, bo układ jest skończony. Opis tego efektu, wraz z rozwiązaniem, znajduje się w rozdziale VII.

§2. Profil gęstości w układzie o skończonych rozmiarach.

Jawną postać magnetyzacji w modelu Isinga warstwy powierzchniowej otrzymali Abraham i Reed (1974) i (1976). Badali oni układ o wysokości $M \rightarrow \infty$ i skończonej szerokości L przy przeciwstawnych warunkach brzegowych /+/-/ / rys.4b/, gdzie brzegowe spiny $\sigma_{(i,h)}$ mają wartość $+1$ dla $h < 0$ i -1 dla $h > 0$. Wynik jest następujący:

$$\langle \sigma(sL, pL^\delta) \rangle = \begin{cases} -m^* \operatorname{sgn} p & \delta > \frac{1}{2} \\ -m^* \operatorname{sgn} p \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{z^*} dt e^{-t^2}, \quad z^* = |p| \left[\frac{\beta \Gamma}{2s(1-s)} \right]^{1/2}, & \delta = \frac{1}{2} \\ 0 & \delta < \frac{1}{2} \end{cases}$$

5.12

Γ jest efektywnym napięciem powierzchniowym, mającym dla modelu gazu sieciowego postać (5.3)

W granicy $K_1 \rightarrow \infty$ odpowiadającej modelowi SOS powyższy wzór prowadzi do następującej postaci dla profilu gęstości: / Abraham i Reed (1976) /

$$\rho(L/2, z) = \rho_s(z^*) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{z^*}^{\infty} dt e^{-t^2} \quad 5.13a$$

gdzie

$$z^* = z (2\rho\Gamma/L)^{1/2} \quad 5.13b$$

a efektywne napięcie powierzchniowe Γ ma postać (5.11).

Szerokość warstwy powierzchniowej dla profilu gęstości (5.12) i (5.13) dana jest wzorem:

$$\bar{w} = (L/2\rho\Gamma)^{1/2} \quad 5.14$$

Do takich samych wyników prowadzą rachunki przeprowadzone w rozdziale VII poświęconym funkcjom korelacyjnym w modelu SOS .

Porównanie przedstawionych wyżej wzorów z przewidywaniami teorii fal kapilarnych / rozdział III , (3.10) i (3.11) / pozwala stwierdzić dokładną ilościową zgodność ścisłych rozwiązań z teorią fal kapilarnych .

§§§ . Profil gęstości w obecności zewnętrznego pola.

Jeżeli $u_{\text{ext}} \neq 0$, dwuwymiarowy model Isinga nie jest translacyjnie niezmienny / Abraham i Issigoni (1979) / . Analityczne rozwiązanie tego przypadku nie jest jednak znane. Dla modelu SOS w słabym jednorodnym polu grawitacyjnym g profil gęstości wyznaczyli analitycznie van Leeuwen i Hilhorst (1981) . Ma on postać:

$$\rho(z) = \rho_s(z^*) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{z^*}^{\infty} dt e^{-t^2} \quad 5.15a$$

$$z^* = z (2g \beta \Gamma)^{1/4} \quad 5.15b$$

Szerokość warstwy powierzchniowej W ma w tym wypadku wartość:

$$W = (2g \beta \Gamma)^{-1/4} \quad 5.16$$

o

I w tym przypadku wyznaczony ściśle profil gęstości ma postać dokładnie taką, jak w teorii fal kapilarnych / rozdział III , (3.9) i (3.11) / .

Profil gęstości podlega skalowaniu ; jednostką długości jest szerokość warstwy powierzchniowej W , która zależy od warunków zewnętrznych stabilizujących powierzchnię . Nie opisuje on wewnętrznej struktury powierzchni.

§4. Goły profil gęstości .

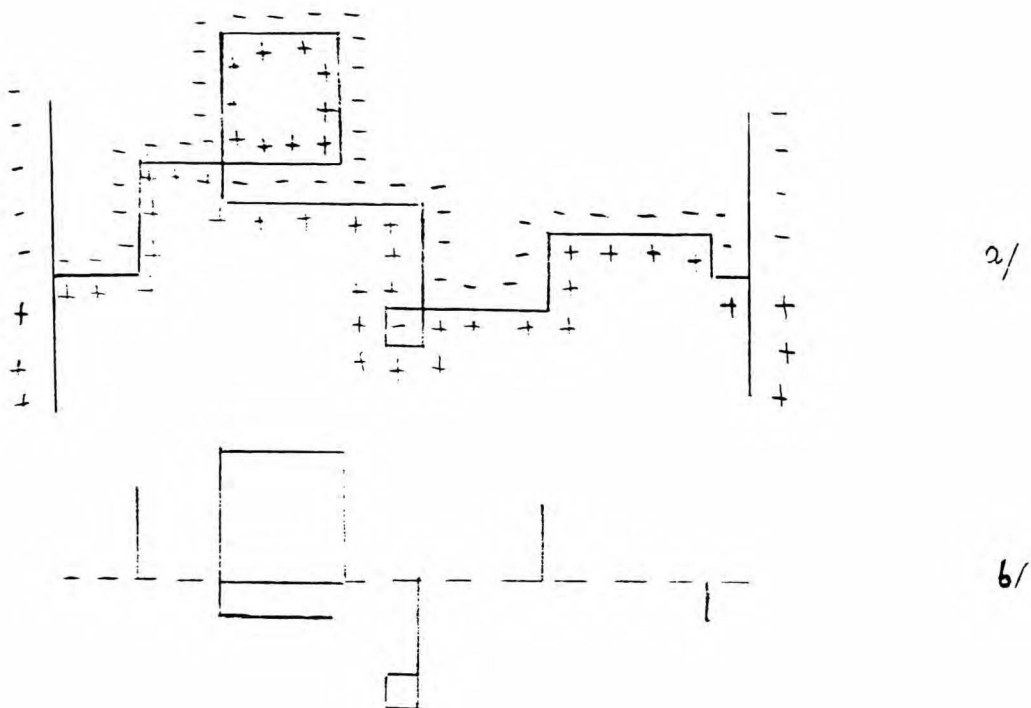
Profil gęstości obliczony ściśle w modelach sieciowych ma postać dokładnie zgodną z przewidywaniami teorii fal kapilarnych , w której uwzględniane są wyłącznie fluktuacje powierzchni. Z założenia w teorii fal kapilarnych istnieje pewien goły profil gęstości, opisujący wewnętrzne własności powierzchni , ale jego kształt nie ma wpływu na postać globalnego profilu gęstości. Wewnętrzna struktura warstwy powierzchniowej jest w skutek fluktuacji położeń powierzchni zupełnie zamazywana. Długozasięgowe fluktuacje powierzchni dominują w niskich temperaturach nad fluktuacjami gęstości charakterystycznymi dla fazy objętościowej , których zasięg ξ_b jest rzędu średnicy atomu.

Zgodnie z hipotezą Widoma (1972) warstwa powierzchniowa ma wewnętrzną strukturę , podobnie jak drgająca błona bębna , możliwą do zaobserwowania z układu odniesienia umieszczonego na fluktuującej powierzchni , opisywaną przez goły

profil gęstości. Skalą zmienności gołego profilu gęstości zdaniem Widoma powinna być objętościowa długość korelacji ξ_b , będąca naturalną mikroskopową skalą w układzie. Tak rozumiany goły profil gęstości, powstały przez eliminację fluktuacji powierzchni, otrzymywany jest w ramach teorii van der Waalsa i Fiska - Widoma (1969).

Próby wprowadzenia wewnętrznego profilu gęstości w modelach sieciowych podejmują Bricmont i wsp. (1982), Jasnow i Rudnick (1978) i Abraham (1981), (1982), i (1984) a i b

Bricmont i wsp. (1982) wiążą wewnętrzną strukturę powierzchni z deformacjami długiego konturu / rys. 6 /



rys.6 Długi kontur /a/ i odpowiadające mu deformacje /b/ .

autorzy ci dowodzą, że w niskich temperaturach brak jest korelacji między zdefiniowanymi przez nich wewnętrznymi strukturami fragmentów powierzchni odległych o $x \gg \xi_b$. Dzięki temu wewnętrzną strukturę można znaleźć badając fragment powierzchni o szerokości $L \sim \xi_b$ przy zamrożonym położeniu pozostałej części powierzchni.

Jawną postać lokalnego profilu gęstości, to znaczy profilu gęstości w układzie o szerokości $L \sim \xi_b$, wysokości $M \rightarrow \infty$ i brzegowych spinach $\tau_{(i,h)}$ równych $+1$ dla $h < 0$ i -1 dla $h > 0$, otrzymał Abraham (1981). Dla $h \gg \xi_b$

$$\langle \sigma_{(L/2,h)} \rangle = m^* (1 - e^{-2|h|/\xi_b}) \frac{h}{\xi_b^2} J(K) \quad 5.17a$$

$$\frac{1}{\xi_b} = \log(\coth K_{||}^* \tanh K_{\perp}) \quad 5.17b$$

$J(K)$ jest pewną funkcją K .

Opisana metoda wyznaczania lokalnego profilu gęstości odpowiada stłumieniu długozasięgowych fluktuacji powierzchni przez zamrożenie jej położenia poza wybranym wycinkiem o szerokości ξ_b .

Inną metodę odseparowania długozasięgowych fluktuacji powierzchni proponują Jasnow i Rudnick (1978) i Abraham (1982) i (1984) a i b. Gradient profilu gęstości, oznaczany przez $p(x,y)$ / rozdział I /, przedstawiają w postaci konwolucji:

$$p(x,y) = \sum_{y'} p_{cap}(x,y') p_{int}(x,y-y') \quad 5.18$$

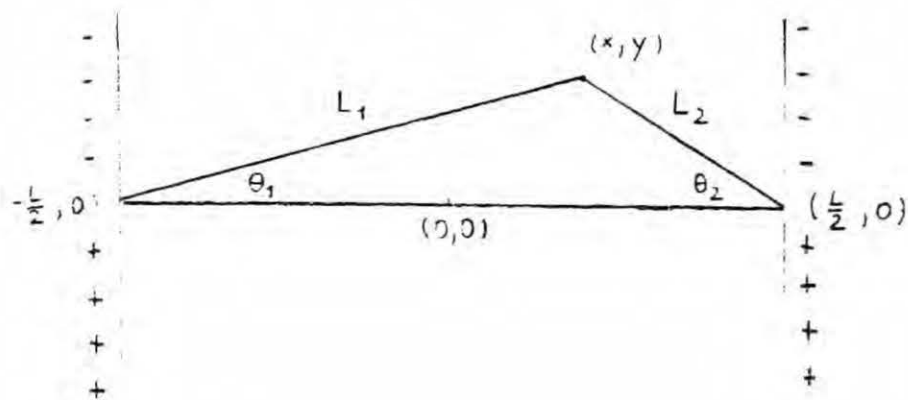
gdzie p_{int} jest gradientem gołego profilu gęstości a p_{cap} związane jest z fluktuacjami powierzchni. Jasnow i Rudnick (1978) przyjmują dla p_{cap} postać Gaussowską. Abraham (1982) i (1984) a i b przyjmuje dla p_{cap} postać zgodną z teorią fal kapilarnych:

$$p_{cap}(x,y) = \text{const } e^{-[\sigma(\theta_1) L_1 + \sigma(\theta_2) L_2] \beta} \quad 5.19$$

$\sigma(\theta)$ jest zależnym od kąta napięciem powierzchniowym a $L_{1,2}$ długościami odcinków powierzchni o kierunkach $\theta_{1,2}$ dla powierzchni o kształcie przedstawionym na rys.7. $p_{cap}(x,y)$ jest więc prawdopodobieństwem przyjęcia przez powierzchnię

kształtu przedstawionego na rys.7, gdy działa na nią zależne od kąta napięcie powierzchniowe $\epsilon(\theta)$, a jej wewnętrzne własności nie zmieniają się.

$$L_{1,2} = (1 + \epsilon^2 \theta_{1,2})^{1/2} \left(\frac{L}{2} \pm x \right) \quad 5.20$$



rys.7

Ponieważ (5.19) ma postać konwolucji, dla transformat Fouriera zachodzi:

$$\tilde{p}_{int}(x, \omega) = \frac{\tilde{p}(x, \omega)}{\tilde{p}_{cap}(x, \omega)} \quad 5.21$$

Ścisła postać $\tilde{p}(x, \omega)$ jest następująca / Abraham (1982), (1984) a, b /

$$\tilde{p}(x, \omega) = e^{x\gamma(0) - 1} A_x(\omega) \quad 5.22a$$

gdzie

$$A_x(\omega) = \cosh(x\gamma(\omega)) + \sinh(x\gamma(\omega)) \cos \delta^*(\omega) \quad 5.22b$$

$$\cosh(\chi(\omega)) = \cosh 2K_{\parallel}^* \cosh 2K_{\perp} - \sinh 2K_{\parallel}^* \sinh 2K_{\perp} \cos \omega \quad 5.22c$$

$$e^{i\phi(\omega)} = \left[\frac{(e^{i\omega} - A)(e^{-i\omega} - B)}{(e^{i\omega} - A)(e^{-i\omega} - B)} \right]^{1/2} \left(\frac{B}{A} \right)^{1/2} \quad 5.22d$$

$$A = \coth K_{\perp}^* \coth K_{\parallel}$$

$$B = \tanh K_{\perp}^* \coth K_{\parallel}$$

5.22e

/ w pracy: Abraham (1982) podana jest dla B postać $B = \coth K_{\perp}^* \tanh K_{\parallel}$ zapewne błędnie, gdyż w przeciwieństwie do B danego przez (5.22e) / Abraham (1981) i (1984) a i b / prowadzi ona do innej niż przedstawiona w tej pracy postaci \tilde{p} / Transformata Fouriera funkcji p_{cap} danej wzorem (5.19) ma postać / Abraham i Reed (1977), Abraham (1982), (1984) a i b /:

$$\tilde{p}_{cap}(x, \omega) = e^{-x(\chi(\omega) - \chi(0))} \quad 5.23$$

Dla funkcji wewnętrznej $p_{int}(\infty, h)$ Abraham (1982) otrzymuje:

$$p_{int}(\infty, h) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\omega e^{i\omega h} (1 + \cos \phi(\omega))^{-1} \quad 5.24a$$

postać asymptotyczna dla $h \rightarrow \infty$ jest następująca :

$$p_{int}(h) \sim e^{-h/\xi_b} h^{-3/2} \quad 5.24b$$

Odseparowanie fluktuacji powierzchni opisywanych przez teorię fal kapilarnych, tak samo jak zamrożenie powierzchni poza wybranym wycinkiem o szerokości $L \sim \xi_b$ daje goły profil gęstości zmieniający się w skali, której jednostką jest objętościowa długość korelacji / por. (5.24) i (5.17) / i niezależny od warunków zewnętrznych stabilizujących powierzchnię. Wyniki te są jakościowo zgodne z przewidywaniami teorii van der Waalsa, w której powierzchnia nie fluktuuje z założenia.

W granicy SOS / $K_{\perp} \rightarrow \infty$ / zachodzi:

$$A=B \quad / \text{por. 5.22e} /$$

$$\delta^*(\omega) = 0 \quad / \text{por. 5.22d} /$$

o

5.25

stąd

$$p_{(\infty, h)}^{\text{SOS}} = p_{\text{cap}}^{\text{SOS}}(\infty, h)$$

5.26a

czyli formalnie

$$p_{\text{int}}(h) = \delta^{Kr}(h)$$

5.26b

W modelu SOS $\xi_b=0$, to znaczy fazy są nieściśle i w związku z tym warstwa powierzchniowa nie ma wewnętrznej struktury, takiej jak w modelu gazu sieciowego.

§5. Funkcje korelacyjne w modelach sieciowych warstwy powierzchniowej.

Zgodnie z opisaną w rozdziale III teorią fal kapilarnych korelacje w warstwie powierzchniowej mają duży / makroskopowy / zasięg w kierunku równoległym do powierzchni. Podobne wyniki uzyskali Wertheim (1976), Weeks (1977) i Zittartz (1967). Najważniejsze rezultaty, dotyczące korelacji w warstwie

powierzchniowej opisane są w monografii Rowlinsona i Widoma (1982) i w artykule przeglądowym Evansa (1979). Nie będą one tu przedstawiane, ponieważ jawne wyrażenia dla funkcji korelacyjnych w modelu SCS / rozdział VII / będą wyprowadzone bez powoływania się na wyniki dotyczące powierzchni rozdziału faz w płynach. Obecny paragraf poświęcony jest przedstawieniu wyników otrzymanych dla funkcji korelacyjnych w modelach sieciowych warstwy powierzchniowej.

W modelu SOS funkcje korelacyjne H i C były wyznaczane przez Steckiego (1984) i Steckiego i Dudowicza (1985) / metodą macierzy przejścia / w obecności słabego pola grawitacyjnego ϵ . Funkcja C została również sparametryzowana. Ma ona postać:

$$C(\Delta x, z_1, z_2) = 0 \quad \Delta x \gg 2 \quad 5.27a$$

$$C(\Delta x, z_1, z_2) = W e^{-z^*} M_{\Delta x}(\Delta z) \quad \Delta x = 1, 0 \quad 5.27b$$

gdzie W jest szerokością warstwy niejednorodnej (5.16), z^* dane jest przez (5.15b),

$$z^* = (z_1^* + z_2^*) / 2 \quad 5.27c$$

a macierz M_i ma postać:

$$M_i = w_i + u_i^{-1} \quad 5.27d$$

gdzie w_i i u_i są macierzami trójdziagonalnymi, $w_i(x, y) = w_i(x-y) = \begin{cases} 0, & |x-y| > 1 \\ a, & |x-y| = 1 \\ b, & |x-y| = 0 \end{cases}$

Poza tym brak jest ścisłych rozwiązań dla funkcji H i C w modelach sieciowych warstwy powierzchniowej. Z porównania (5.27) z (3.15) wynika, że przewidywania teorii fal kapilarnych dla funkcji C nie są zgodne ze ścisłym wynikiem

otrzymanym dla modelu gazu sieciowego. W rozdziale VII przedstawione jest rozwiązanie dla funkcji C w modelu SOS przy polu $g=0$ i skończonych rozmiarach układu. Jego postać zgodna jest z przedstawionym wynikiem otrzymanym w modelu SOS przy $g=0$ dla nieskończonego układu (5.27) i z postacią (3.15a) uzyskaną w modelu fal kapilarnych dla C w makroskopowej skali $z^* = z/W$ / por. (5.15b) / oraz sprzeczna z (3.15b) przedstawiającą postać C w nieprzeskalowanych zmiennych z , otrzymaną zgodnie z teorią fal kapilarnych. W rozdziale VII wykazane jest przyjmowanie przez funkcję postaci (5.27) kształtu danego przez (3.15a) przy szerokości warstwy powierzchniowej $W \rightarrow \infty$, dla przeskalowanych zmiennych z^* .

Pozostałe wyniki dla funkcji dwupunktowych w modelach sieciowych warstwy powierzchniowej uzyskano dla prawdopodobieństwa przechodzenia powierzchni przez zadane położenia / Abraham (1981), (1982), (1984) a,b / i dla wewnętrznej funkcji korelacyjnej, definiowanej tak, jak goły profil gęstości, dany przez (5.13) / Abraham (1984)b /

We wspomnianej już pracy Abraham (1981) rozważa model gazu sieciowego z narzuconym ograniczeniem na długi kontur, który z założenia przecina kolumny o numerach nL , gdzie $L \sim \xi_b$, na wysokościach h_n . Rozkład prawdopodobieństwa $p[(h_n)]$ jest iloczynem funkcji $f(\Delta h_n)$, gdzie $\Delta h_n = h_{n+1} - h_n$. Dla $\Delta h_n \ll L \sim \xi_b$ f ma postać gaussowską,

$$f(h) = \text{const } e^{-\tau h^2/2L} \quad 5.28a$$

dla $h \gg L \sim \xi_b$ natomiast

$$f(h) = \text{const } e^{-|h|/L} \quad 5.28b$$

Dwupunktową funkcją obliczaną przez Abrahama (1981) w tak określonym modelu jest prawdopodobieństwo warunkowe przechodzenia powierzchni w kolumnie nL na wysokości h leżącej w przedziale $|h| \leq \xi_b$, o ile przechodzi ona przez punkt

(0,0) . Wynik jest następujący:

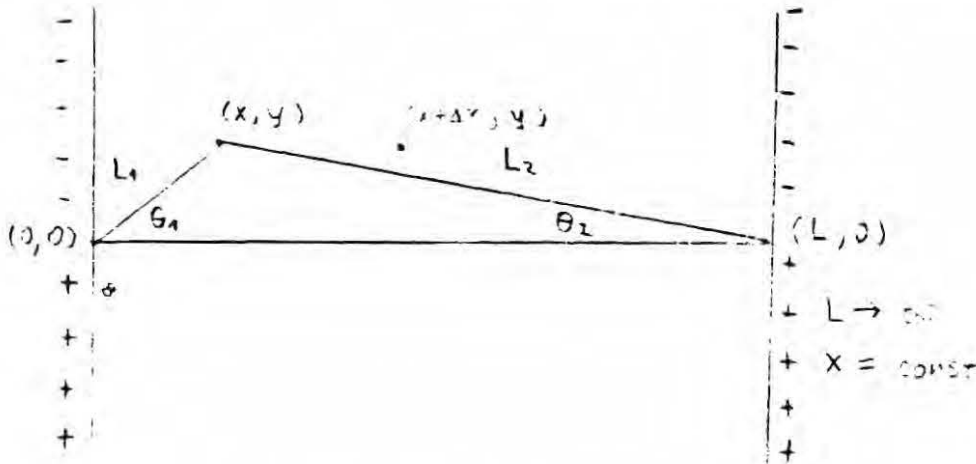
$$p_{\xi_b}(n) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^s dt e^{-t^2} \quad , \quad s = (\Gamma/nL)^{1/2} (4\sigma)^{-1} \quad 5.23a$$

dla $n \rightarrow \infty$ funkcja ta przyjmuje postać:

$$p_{\xi_b}(n) \sim n^{-1/2} \quad 5.29b$$

świadcząca o długozasięgowych korelacjach w kierunku równoległym do powierzchni. Zanik korelacji dla funkcji p jest inny niż zanik H w teorii fal kapilarnych / rozdział III / .

Abraham (1982) i (1984)a i b oblicza też $p(x,y)$, stanowiącą prawdopodobieństwo przechodzenia powierzchni przez punkt (x,y) gdy jednocześnie ,w skutek wyboru warunków brzegowych / rys.8 / przechodzi ona przez $(0,0)$.



rys.8

Jawna postać $p(x,y)$ dana jest wzorem (5.22) . W granicy SOS / $K_{\perp} \rightarrow \infty$ / zachodzą związki (5.26) i funkcja p przyjmuje postać (5.23)

Dla $K_{\perp} \rightarrow \infty$ (5.22c) przyjmuje postać:

$$e^{\chi(\omega)} = \frac{e^{2K_{\perp}}}{\sinh K_{\parallel}} (\cosh 2K_{\parallel} - \cos \omega) + O(e^{-2K_{\perp}}) \quad 5.30$$

a stąd:

$$\tilde{p}(x, \omega) = \left[\frac{\cosh 2K - 1}{\cosh 2k - \cos \omega} \right]^x \quad 5.31a$$

dla $x \rightarrow \infty$ (5.31a) przyjmuje postać / rozdział VII /

$$p(x, y) \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} x^{-1/2} \quad 5.31b$$

Wprowadzana w rozdziale VII funkcja P_{cond} w układzie o szerokości $L \rightarrow \infty$ pokrywa się z funkcją p Abrahama ; wykazane to będzie w rozdziale VII , gdzie znajduje się też wyprowadzenie dla (5.31b). Postać asymptotyczna p pokrywa się z postacią (5.29b) dla funkcji p_b zdefiniowanej nieco inaczej / Abraham (1981) / .

Wewnętrzna funkcja korelacyjna h_{int} definiowana wzorem / Abraham (1984) b /

$$\langle \sigma(x, y) \sigma(\Delta x + x, y) \rangle = \sum_y h_{\text{int}}(\Delta x, y | x) p_{\text{cap}}(x, y - y' | \infty) \quad 5.32$$

gdzie p_{cap} jest prawdopodobieństwem przyjęcia przez powierzchnię kształtu przedstawionego na rys.3 przy zależnym od kąta napięciu powierzchniowym $\sigma(\theta)$ / patrz (5.19) / . Rozwiązaniem (5.32) jest funkcja / Abraham (1984) b / przy $x \rightarrow \infty$

$$h_{\text{int}}(\Delta x, y) = m_{\text{int}}^*(y) \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\omega e^{-\Delta x (\gamma(\omega) - \gamma(0))} \quad 5.33a$$

zanikająca dla $\Delta x \rightarrow \infty$ zgodnie z (5.31b) . $m_{\text{int}}^*(y) = p_{\text{int}}(y)$ / por. (5.24)

Wszystkie przedstawione wyżej dwupunktowe funkcje korelacyjne mają taką samą postać asymptotyczną (5.31b) przy odległości w kierunku równoległym do powierzchni $\Delta x \rightarrow \infty$ i świadczą o dużym zasięgu korelacji w warstwie powierzchniowej .

ROZDZIAŁ VI

PROFIL GĘSTOŚCI W JEDNOWYMIAROWYM MODELU GAZU SIECIOWEGO / ISINGA /
Z USTALONĄ LICZBĄ CZĄSTEK / MAGNETYZACJĄ /

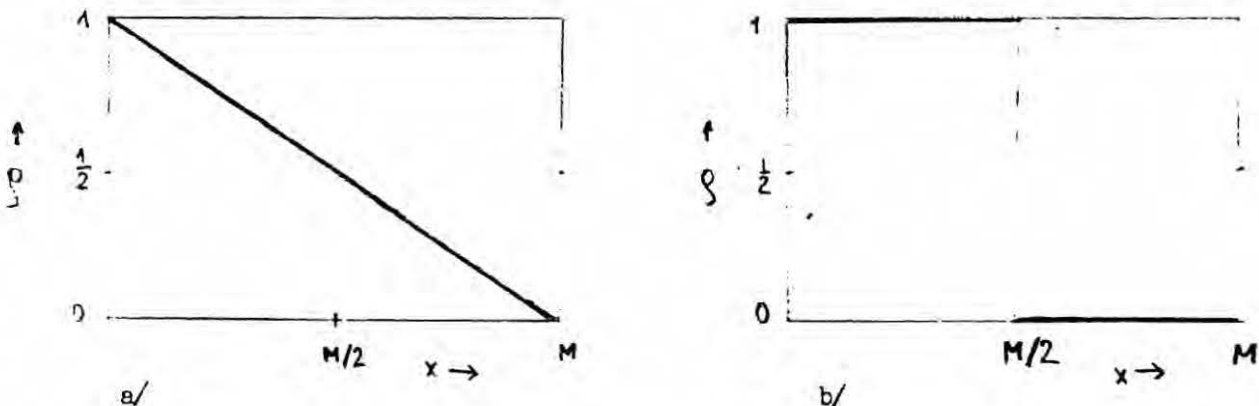
§1. Wstęp

Rozdział ten poświęcony jest wyznaczeniu profilu gęstości w jednowymiarowym modelu gazu sieciowego w zespole kanonicznym dla układu o skończonych rozmiarach przy przeciwstawnych warunkach brzegowych $\sigma_0=1$, $\sigma_{M+1}=-1$, oznaczanych przez / +/- . Ponadto obliczana będzie funkcja korelacyjna h / rozdział I / w układzie o cyklicznych warunkach brzegowych $\sigma_{M+1} = \sigma_1$ w zespole kanonicznym.

W granicy termodynamicznej temperatura krytyczna jednowymiarowego gazu sieciowego jest równa zero , jednak w układzie o przeciwstawnych warunkach brzegowych / +/- / zachodzi nierówność:

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \lim_{T \rightarrow 0} \langle \sigma_x^c \rangle \neq \lim_{M \rightarrow 0} \lim_{T \rightarrow \infty} \langle \sigma_x^{g.c.} \rangle \quad 6.1$$

wynikająca z degeneracji stanu podstawowego ze względu na liczbę cząstek w zespole wielkim kanonicznym . Odpowiednie profile gęstości mają postać przedstawioną na rys. 9



rys.9 Profil gęstości w temperaturze T = 0 K . a/ zespół wielki kanoniczny
b/ zespół kanoniczny . <http://rcin.org.pl>

w związku z powyższą nierównością zachowanie asymptotyczne dla $T \rightarrow 0$ i $M \rightarrow \infty$ magnetyzacji zależy od sposobu osiągnięcia granic. W paragrafie 3 tego rozdziału będzie wykazane, że w skończonym układzie istnieje skończona temperatura quasi-krytyczna $T^*(M)$. Dla $T < T^*(M)$ układ ma cechy układu dwufazowego i profil gęstości przedstawia rozkład materii pomiędzy współistniejącymi fazami.

W układzie jednowymiarowym zjawisko fal kapilarnych nie istnieje. Fluktuacje powierzchni związane są z fluktuacjami liczby cząstek. Ustalenie liczby cząstek doprowadzi do lokalizacji powierzchni i utożsamienia profilu gęstości z gołym profilem gęstości / rozdział V §4 / .

Znajomość funkcji korelacyjnej h w układzie z cyklicznymi warunkami brzegowymi /c/ ułatwi interpretację wniosków otrzymanych dla profilu gęstości i pozwoli zinterpretować temperaturę $T^*(M)$, w której następuje zmiana zachowania asymptotycznego przy $M \rightarrow \infty$ dla ρ i h jako temperaturę quasi-krytyczną. Ornstein i Zernike (1914) i Lebowitz i Percus (1961) dowiedli bowiem, że w układzie o słabych niejednorodnościach funkcja h ma postać:

$$h(r_{12}) \xrightarrow{r_{12} \rightarrow \infty} -\frac{n\chi kT}{N} + o(N^{-1}) \quad 6.2$$

gdzie liczba cząstek jest stała i równa N , n jest średnią gęstością a χ podatnością. Jeżeli układ jest w stanie jednofazowym i pole zewnętrzne jest słabe, to powyższy związek jest spełniony. Jeżeli (6.2) nie jest spełnione, a pole zewnętrzne jest słabe / znika /, można sądzić że układ nie jest w stanie jednofazowym.

§2. Wyrażenia formalne dla skończonego układu.

Z definicji i związku (4.4) mamy:

$$\langle n_x \rangle = \frac{\langle \sigma_x \rangle + 1}{2} \quad 6.3a$$

$$h(x) = g(x) - 1 = \frac{\langle n_1 n_{1+x} \rangle}{\langle n_1 \rangle \langle n_{1+x} \rangle} \quad 6.3b$$

$$h(x) = \langle \sigma_1 \sigma_{1+x} \rangle \quad 6.3c$$

Zakładamy, że liczba węzłów, oznaczona przez M jest liczbą parzystą.

Niech liczba cząstek N będzie stała i równa

$$N = M/2 \quad 6.4$$

Oznacza to, że w modelu Isinga dopuszczone są jedynie konfiguracje spełniające warunek:

$$\sum_{i=1}^M \sigma_i = 0 \quad 6.5$$

Rozkłady prawdopodobieństwa w zespole kanonicznym dla układów z cyklicznymi warunkami brzegowymi $\sigma_{M+1} = \sigma_1$, oznaczanymi przez /c/ i przeciwstawnymi warunkami brzegowymi $\sigma_0 = 1$, $\sigma_{M+1} = -1$, oznaczanymi przez +/- mają postać:

$$\text{/c/ : } \mathcal{Z}_c [(\sigma_i)] = z_c^{-1} \delta^{Kr} \left(\sum_{i=1}^M \sigma_i \right) \exp \left(K \sum_{i=1}^M \sigma_i \sigma_{i+1} \right) \quad 6.6a$$

$$\text{+/-/ : } \mathcal{Z}_{+/-} [(\sigma_i)] = z_{+/-}^{-1} \delta^{Kr} \left(\sum_{i=1}^M \sigma_i \right) \exp \left[K(\sigma_1 - \sigma_M) + \sum_{i=1}^M \sigma_i \sigma_{i+1} \right]$$

Poszukiwane wielkości dane są wzorami:

$$\langle \sigma_1 \sigma_{1+x} \rangle_c = \sum_{\sigma_i} \sigma_1 \sigma_{1+x} \rho_c [(\sigma_i)] \quad 6.7a$$

$$\langle \sigma_x \rangle_{+-} = \sum_{\sigma_i} \sigma_x \rho_{+-} [(\sigma_i)] \quad 6.7b$$

Badane układy wykazują symetrie względem transformacji:

$$/c/ : \quad x \rightarrow M-x \quad 6.8a$$

$$/+-/ : \quad x \rightarrow M+1-x \quad 6.8b$$

Rozważmy bowiem wzajemnie jednoznaczne odwzorowania w zbiorach konfiguracji układów z cyklicznymi /c/ i przeciwstawnymi /+-/ warunkami brzegowymi dane wzorami:

$$/c/ : \quad \sigma'_{1+x} = \sigma_{1+M-x} \quad x = 0, \dots \quad 6.9a$$

$$/+-/ : \quad \sigma'_x = -\sigma_{1+M-x} \quad x = 0, \dots, M+1 \quad 6.9b$$

Z definicji (6.7) i (6.6), uwzględniając powyższe, mamy:

$$\langle \sigma_1 \sigma_{1+x} \rangle_c = Z_c^{-1} \sum_{\sigma'_i} \sigma'_1 \sigma'_{1+x} \exp \left(K \sum_{i=1}^M \sigma'_{i+2-i} \sigma'_{M+1-i} \right) \quad 6.10a$$

$$\langle -\sigma_{M+1-x} \rangle_{+-} = Z_{+-}^{-1} \sum_{\sigma'_i} \sigma'_x \exp \left[K(\sigma'_1 - \sigma'_M + \sum_{i=1}^{M-1} \sigma'_{M+1-i} \sigma'_{M-i}) \right] \quad 6.10b$$

Porównując (6.7) i (6.10) otrzymamy:

$$\langle \sigma_1 \sigma_{1+M-x} \rangle_c = \langle \sigma_1 \sigma_{1+x} \rangle_c \quad 6.11a$$

$$\langle \sigma_{M+1-x} \rangle_{+-} = -\langle \sigma_x \rangle_{+-} \quad 6.11b$$

Wobec powyższych symetrii w dalszym ciągu ograniczymy się do przypadku $x \leq M/2$.

Występującą we wzorach (6.6) funkcję δ^{Kr} przedstawimy w postaci:

$$\delta^{Kr}(a) = (2\pi)^{-1} \int_0^{2\pi} dk e^{ika} \quad 6.12$$

Wówczas

$$Z_c = (2\pi)^{-1} \int_0^{2\pi} dk \text{Tr} T_k^M \quad 6.13a$$

$$\langle \sigma_1 \sigma_{1+x} \rangle_c = (2\pi z_c)^{-1} \int_0^{2\pi} dk \sum_{\sigma_1, \sigma_{1+x}} \sigma_1 \sigma_{1+x} T_k^x(\sigma_1, \sigma_{1+x}) T_k^{M-x}(\sigma_{1+x}, \sigma_1) \quad 6.13b$$

$$z_{+-} = (2\pi)^{-1} \int_0^{2\pi} dk \sum_{\sigma_1, \sigma_M} e^{\sigma_1(K+ik/2)} T_k^{M-1}(\sigma_1, \sigma_M) e^{\sigma_M(-K+ik/2)} \quad 6.13c$$

$$\langle \sigma_x \rangle_{+-} = \left(\int_0^{2\pi} dk \sum_{\sigma_1, \sigma_x, \sigma_M} e^{\sigma_1(K+ik/2)} T_k^{x-1}(\sigma_1, \sigma_x) \sigma_x T_k^{M-x}(\sigma_x, \sigma_M) e^{\sigma_M(-K+ik/2)} \right) / z_{+-} \quad 6.13d$$

gdzie $T_k(\sigma_1, \sigma_2)$ jest macierzą przejścia definiowaną wzorem:

$$T_k(\sigma_1, \sigma_2) = \exp [K \sigma_1 \sigma_2 + ik/2(\sigma_1 + \sigma_2)] \quad 6.14$$

*

Postać T_k^x wyznaczona została metodą diagonalizacji macierzy T_k . Odpowiednie rachunki znajdują się w dodatku A. Prowadzą one do wyników:

$$T_k^x(-1, -1) = T_k^x(1, 1)^x = \left[\frac{1}{2} R_x(k) - i \sin(k) W_x(k) \right] e^{Kx} \quad 6.15a$$

$$T_k^x(-1, 1) = T_k^x(1, -1) = e^{-2K} W_x(k) e^{Kx} \quad 6.15b$$

gdzie $*$ oznacza sprzężenie zespolone ,

$$R_x(k) = f_1^x(k) + f_2^x(k) \quad 6.16a$$

$$w_x(k) = \frac{f_1^x(k) - f_2^x(k)}{f_1^x(k) + f_2^x(k)} \quad 6.16b$$

$$f_{1,2}(k) = \cos k \pm (\cos^2 k - b)^{1/2} \quad 6.17$$

$$b = 1 - e^{-4K} \quad 6.18$$

Ponieważ $\text{Tr } T_k^M = R_M(k) e^{KM}$, (6.13a) przyjmie postać:

$$Z_c = (2\pi)^{-1} \int_0^{2\pi} dk R_M(k) e^{KM} \quad 6.19$$

Sumując po wszystkich wartościach σ_1 i σ_{1+x} we wzorze (6.13b)^o , wykorzystując symetrię macierzy T_k i definicję śladu , otrzymamy:

$$\langle \sigma_1 \sigma_{1+x} \rangle_c = (2\pi Z_c)^{-1} \int_0^{2\pi} dk [\text{Tr } T_k^M - 4 T_k^x(1,-1) T_k^{M-x}(1,-1)] \quad 6.20$$

Z powyższego , z (6.19) i z (6.15)

$$\langle \sigma_1 \sigma_{1+x} \rangle_c = 1 - 4 e^{-4K} \frac{\int_0^{2\pi} dk w_x(k) w_{M-x}(k)}{\int_0^{2\pi} dk R_M(k)} \quad 6.21$$

Sumując po σ_1, σ_M w wyrażeniu (6.13c) na Z_{+-} , wykorzystując (6.15) i (6.16) otrzymamy :

$$Z_{+-} = (2\pi)^{-1} \int_0^{2\pi} dk [\cos k R_{M-1}(k) + 2 (\cos^2 k - \frac{b}{2}) w_{M-1}(k)] \quad 6.22$$

W przypadku magnetyzacji (6.13d) sumowanie po $\sigma_1, \sigma_x, \sigma_M$ i wykorzystanie (6.15) oraz faktu, że część urojona funkcji podcałkowej jest nieparzysta, a więc całka znika, prowadzi do wzoru:

$$\langle \sigma_x \rangle_{+-} = (2\pi Z_{+-})^{-1} \int_0^{2\pi} dk e^{2K(M-1) \frac{x}{b}} w_{M-2x+1}(k) \quad 6.23$$

&

Dla występujących we wzorach (6.19), (6.21), (6.22), (6.23) funkcji podcałkowych wprowadzamy oznaczenia:

$$G(k) = 4 e^{-4K} w_x(k) w_{M-x}(k) \quad 6.24a$$

$$R(k) = R_M(k) \quad 6.24b$$

$$Z(k) = \cos(k) R_{M-1}(k) + 2 (\cos^2 k - \frac{b}{2}) w_{M-1}(k) \quad 6.24c$$

Funkcje te są parzyste , stąd $\int_0^{2\pi} dk F(k) = 2 \int_0^{\pi} dk F(k)$ gdzie $F = G, R$ lub Z . Ponadto , jak widać z (6.17) $f_1(\pi-k) = -f_2(k)$ a M jest z założenia liczbą parzystą. Z (6.24) i (6.26) wynika , że $\int_0^{\pi} dk F(k) = 2 \int_0^{\pi/2} dk F(k)$. Podsumowując , otrzymujemy następującą ostateczną postać dla magnetyzacji / profilu gęstości / i funkcji korelacyjnej h :

$$\langle \sigma_x \rangle_{+-} = b \frac{\int_0^{\pi/2} dk W_{M+1-2x}(k)}{\int_0^{\pi/2} dk Z(k)} \quad 6.25a$$

$$\langle \sigma_1 \sigma_{1+x} \rangle_c = 1 - \frac{\int_0^{\pi/2} dk G(k)}{\int_0^{\pi/2} dk R(k)} \quad 6.25b$$

§3 Wyniki numeryczne dla skończonego układu.

Całki występujące we wzorach (6.25) obliczone były numerycznie dla $M=60$ i dla kilku wartości K . Odpowiednie profile gęstości i funkcje korelacyjne g przedstawione są na rys.10 i 11 . Dla porównania wykreślone są profile gęstości i funkcja g w zespole wielkim kanonicznym . Postać $g^{\mathcal{E}\cdot\mathcal{C}\cdot}(x)$ znana jest z literatury / n.p. Percus (1972) / , natomiast profil gęstości przy przeciwnych warunkach brzegowych $/+-/$ wyznaczony jest w dodatku B.

Z wykresów przedstawionych na rys. 10 i 11 widać , że wyniki otrzymane w różnych zespołach różnią się dla $K = 2.2$. Profil gęstości dla $K = 2.2$ w zespole kanonicznym przypomina profil gęstości w układzie dwufazowym z przestrzenie rozseparowanymi fazami , przy obszarze niejednorodnym o szerokości rzędu stałej

sieci . Aby porównać ścisły wynik dla h w układzie zamkniętym / zespół kanoniczny/ z postacią Ornsteina i Zernike (1914) / por. (6.2) / obliczymy ściśłość χ w jednowymiarowym modelu gazu sieciowego , wykorzystując twierdzenie fluktuacyjne:

$$\chi = \sum_{x=0}^{M-1} h(x) \quad 6.26$$

Na podstawie (6.3c) , wykorzystując znaną z literatury postać $\langle \sigma_1 \sigma_{1+x} \rangle$ c mamy:

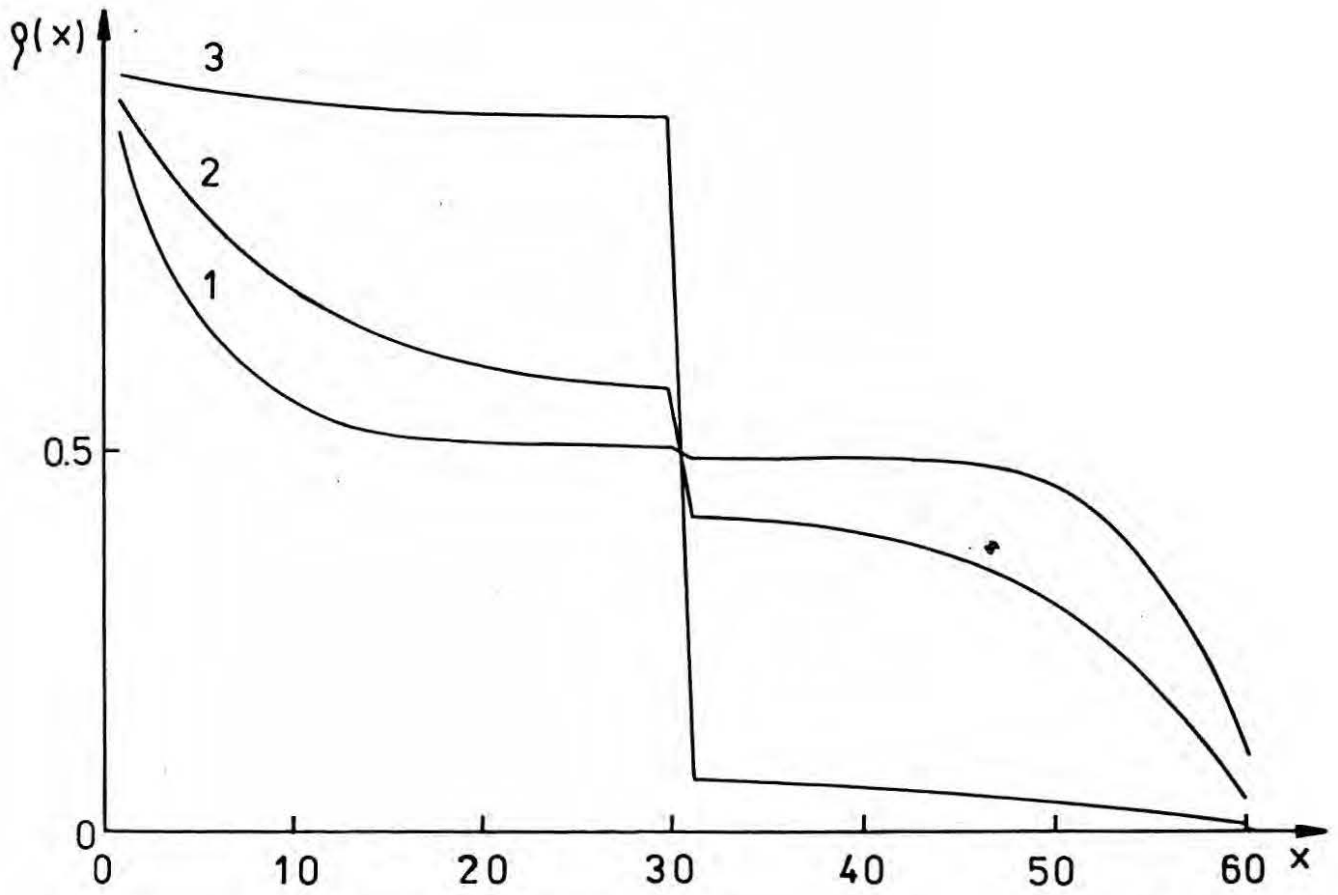
$$h(x) = \frac{\tanh K + \tanh \frac{M-x}{M} K}{1 + \tanh K} \quad 6.27$$

Sumując szeregi geometryczne otrzymane przez wstawienie (6.27) do (6.26) otrzymujemy:

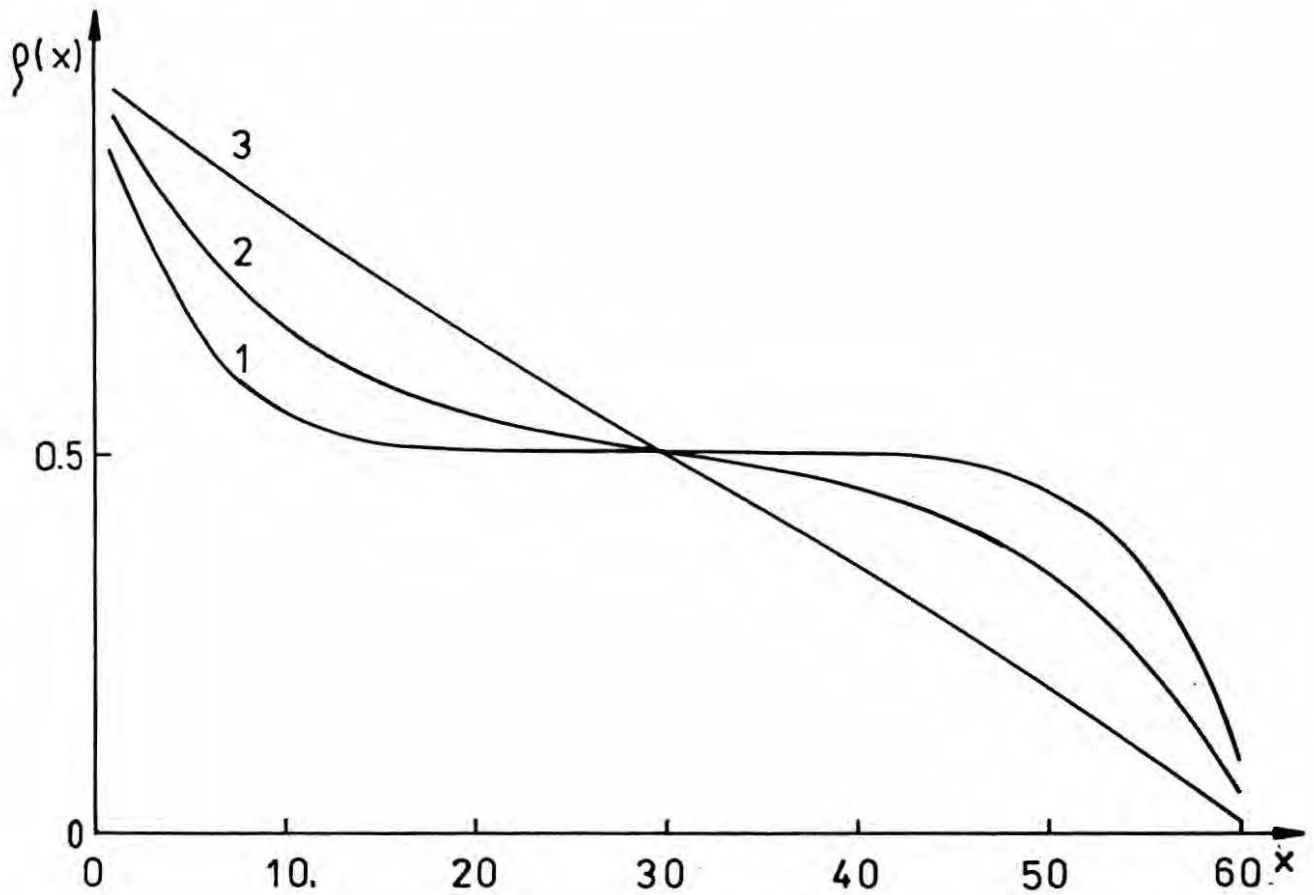
$$\chi = \beta e^{2K} \frac{1 - \tanh \frac{M}{M} K}{1 + \tanh K} \xrightarrow{M \rightarrow \infty} \beta e^{2K} \quad 6.28$$

Wartości liczbowe różnicy $\xi(M/2) - \xi^{g.c.}(M/2)$ otrzymane ze ścisłych wyników i w ramach przybliżenia (6.2) dla $M=60$ i $K=0.88137$, 2.2 są następujące:

K	$\xi(M/2) - \xi^{g.c.}(M/2)$	$- e^{2K} M^{-1}$
0.88137	- 0.116	- 0.097
2.2	- 1.747	- 1.357

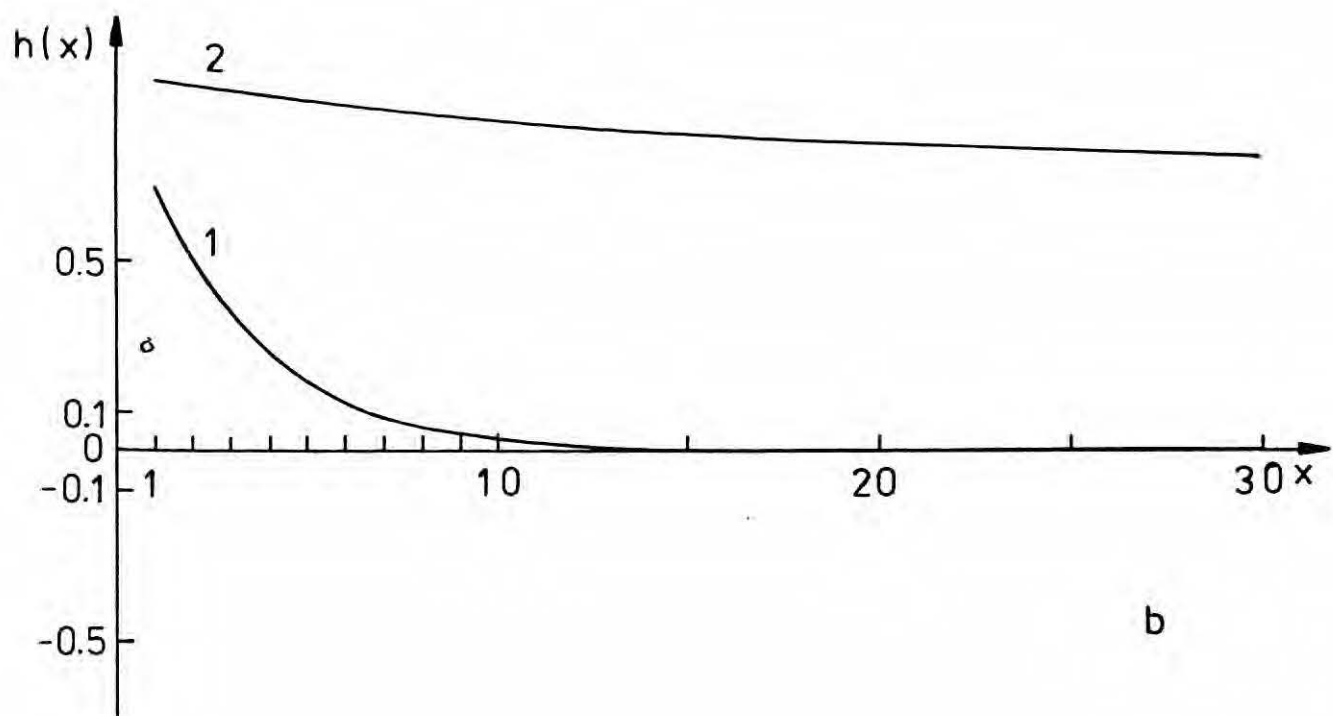
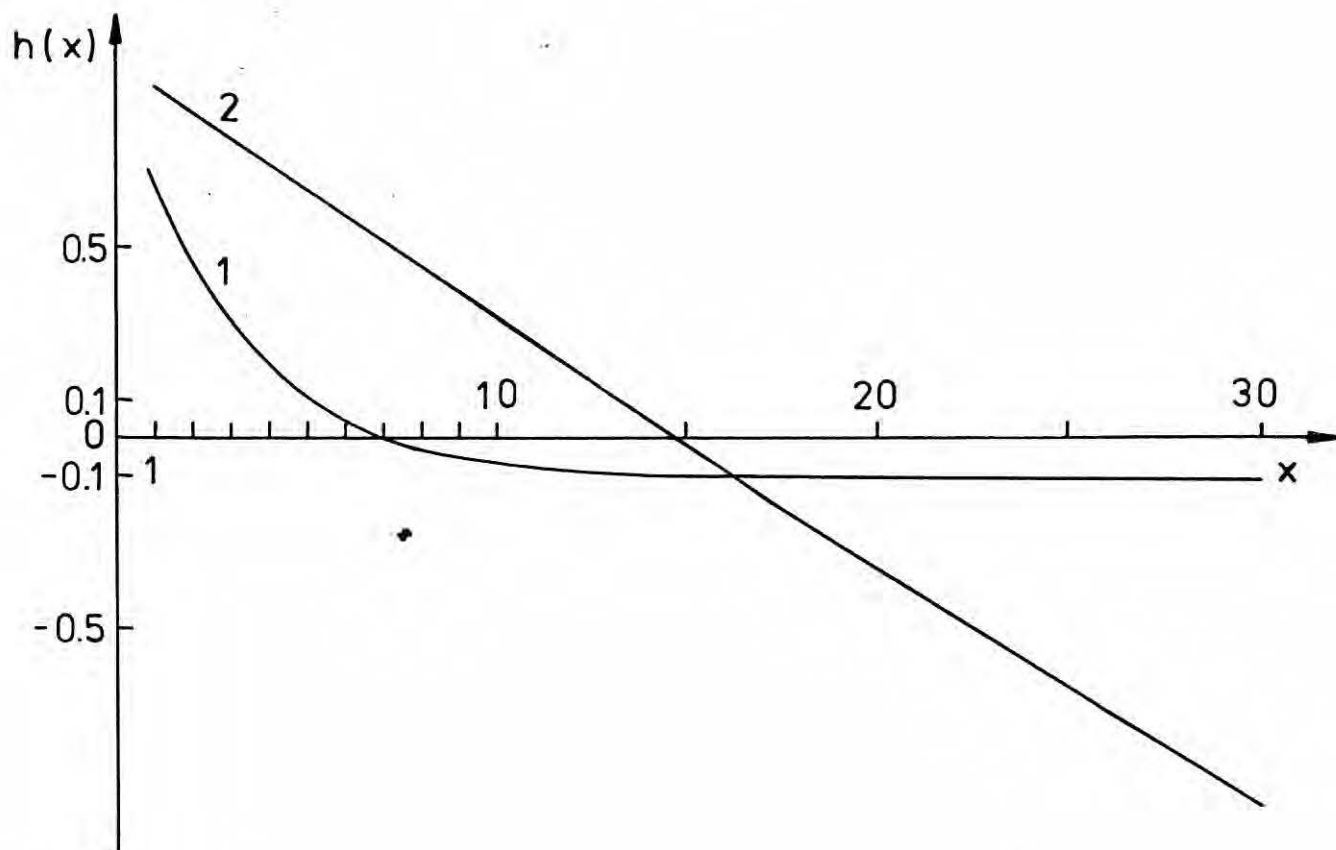


a



b

rys.10 Profil gęstości dla stałych sprzężenia K równych: 1/ $K=1.1$, 2/ $K=1.47$ 3/ $K=2.2$. a. zespół kanoniczny, b. zespół wielki kanoniczny.



rys.11 Funkcja korelacyjna h dla stałych sprzężenia K równych: 1/ $K=0.88$
 2/ $K=2.2$. a. zespół kanoniczny, b. zespół wielki kanoniczny.
 Długość układu $M = 60$

Dla $K > 2$ przy $M=60$ przybliżenie (6.2) przestaje obowiązywać. Postać profilu gęstości i funkcji h świadczy o tym, że układ nie jest w stanie jednofazowym; warstwa powierzchniowa jest bardzo wąska, a więc powierzchnia rozdziału faz jest zlokalizowana, w przeciwieństwie do układu wymieniającego cząstki z otoczeniem / zespół wielki kanoniczny /. Wartość temperatury, poniżej której układ ma własności układu dwufazowego wyznaczona będzie w następnym paragrafie.

§4. Analiza asymptotyczna profilu gęstości i funkcji korelacyjnej h przy długości układu $M \rightarrow \infty$.

Zachowanie profilu gęstości i funkcji h w dużym układzie zbadamy, przeprowadzając analizę asymptotyczną przy $M \rightarrow \infty$ występujących we wzorach (6.25) całek. Pozwoli to rozstrzygnąć dla jakich temperatur układ ma cechy układu dwufazowego. Z rys. 10 wynika, że zadowalającą jakościowo informację o kształcie profilu gęstości uzyskamy, znajdując rozwiązanie dla $x = M/2$. W tym wypadku (6.25a) przybiera postać:

$$\langle \sigma_{M/2} \rangle_{+-} = 2b^{M/2} \left[4 \int_0^{\pi/2} dk Z(k) \right]^{-1} \quad 6.29$$

Z wyboru warunków brzegowych i numeracji węzłów sieci wynika, że

$$\langle \sigma_{M/2} \rangle_{+-} > 0 \quad 6.30$$

Analizę asymptotyczną wspomnianych całek rozpoczniemy od zbadania funkcji podcałkowych. Jawną postać funkcji Z , R , G przedstawimy następująco:

$$Z(k) = \begin{cases} f_1(k) \left[\cos k + \frac{\cos^2 k - \frac{b}{2}}{2(\cos k - b)} \right]^{1/2} + f_2(k) \left[\cos k - \frac{\cos^2 k - \frac{b}{2}}{2(\cos k - b)} \right]^{1/2} & k \leq k_1 \\ \frac{1}{2b} \left\{ \cos k \cos[(M-1)\varphi] + \frac{\cos^2 k - \frac{b}{2}}{2(\cos k - b)} \sin[(M-1)\varphi] \right\} & k > k_1 \end{cases} \quad \begin{matrix} 6.31a \\ 6.31b \end{matrix}$$

$$G(k) = \begin{cases} \frac{e^{-4K}}{2 \cos k - b} \left\{ f_1(k) + f_2(k) - b \left[f_1(k) + f_2(k) \right] \right\} & k \leq k_1 \\ \frac{e^{-4K} b^{M/2}}{2(b - \cos k)} \left\{ \cos[(M-2x)\varphi] - \cos(M\varphi) \right\} & k > k_1 \end{cases} \quad \begin{matrix} 6.32a \\ 6.32b \end{matrix}$$

$$R(k) = \begin{cases} f_1(k) + f_2(k) & k \leq k_1 \\ \frac{1}{2b} \cos(M\varphi) & k > k_1 \end{cases} \quad \begin{matrix} 6.33a \\ 6.33b \end{matrix}$$

guzie

$$\cos^2 k_1 = b \tag{6.34}$$

b dane jest wzorem (6.18) ,

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{(b - \cos^2 k)^{1/2}}{\cos k} \tag{6.35}$$

o

Pierwsze pochodne funkcji Z , R , G , jak pokazuje elementarny rachunek, znikają w punkcie k=0 , a dla 0 < k < k₁ są ujemne. Stąd wniosek , że funkcje te maleją monotonicznie od maksymalnej wartości przyjmowanej w k=0. Dla k > k₁ jak widać z (6.31)-(6.33) funkcje te oscylują , przy czym amplituda nie rośnie. Rozważmy stosunek wartości funkcji Z , R i G w punkcie k = k₁ do wartości tych funkcji w punkcie k = 0 :

$$\frac{Z(k_1)}{Z(0)} = \frac{\operatorname{tanh}^{M/2} K \cdot \frac{2(M+1) e^{-2K}}{(1 + e^{-2K}) (1 - \operatorname{tanh}^{M+1} K)}}{\operatorname{tanh}^{M/2} K} \tag{6.36a}$$

$$\frac{R(k_1)}{R(0)} = \frac{\operatorname{tanh}^{M/2} K \cdot \frac{2}{1 + \operatorname{tanh} K}}{\operatorname{tanh}^{M/2} K} \tag{6.36b}$$

$$\frac{G(k_1)}{G(0)} = \frac{\operatorname{tanh}^{M/2} K \cdot e^{-4K} \cdot \frac{M^2 - (M - 2x)^2}{(1 - e^{-4K}) (1 + \operatorname{tanh} K - \operatorname{tanh}^x K - \operatorname{tanh}^{M-x} K)}}{\operatorname{tanh}^{M/2} K} \tag{6.36c}$$

Wprowadzamy parametr δ wzorem:

$$e^{2K} = M^{\delta} \quad 6.37$$

W obszarze asymptotycznym $M \rightarrow \infty$ postać stosunków (6.36) jest jednakowa dla wszystkich funkcji :

$$\frac{F(k_1)}{F(0)} = \begin{cases} O(M^{-I}) & I \text{ jest dowolną liczbą} & \delta < 1 \\ O(1) & \circ & \delta > 1 \end{cases} \quad 6.38$$

gdzie F oznacza dowolną funkcję spośród G , Z i R . Temperaturę odpowiadającą $\delta = 1$ oznaczmy przez T^* . Z (6.37) mamy:

$$T^*(M) = 2J (k \log M)^{-1} \quad 6.39$$

Przypadki $T > T^*$ ($\delta < 1$) i $T < T^*$ ($\delta > 1$) analizować będziemy osobno.

§§1. Gęstość i funkcja korelacyjna h w przypadku wysokotemperaturowym $T > T^*$.

⊕

Poszukiwane całki przedstawiamy w postaci sumy:

$$\int_0^{\pi/2} dk F(k) = \int_0^{k_1} dk F(k) + \int_{k_1}^{\pi/2} dk F(k) \quad 6.40$$

Dla $k > k_1$ wartości funkcji Z , R i G nie przekraczają wartości tych funkcji w punkcie $k=k_1$. Stąd i z (6.38) wynika, że

$$\int_{k_1}^{\pi/2} dk F(k) = O(M^{-I}) \int_0^{k_1} dk F(k) \quad 6.41$$

dla dowolnego I, a więc decydujący wkład do poszukiwanych całek pochodzi z przedziału $(0, k_1)$. Przedstawimy pozostałą całkę w postaci:

$$\int_0^{k_1} dk F(k) = \int_0^{k_0} dk F(k) + \int_{k_0}^{k_1} dk F(k) \quad 6.42$$

o

gdzie $k_0 \ll e^{-2K}$. Funkcje Z, R i G można przedstawić w równoważnej do (6.31)-(6.33) postaci:

$$F(k) = f_1(k) \left\{ w_1(k) + w_2(k) \left[\frac{f_1(k)}{f_2(k)} \right]^M \right\} \quad 6.43$$

Funkcje w_i są określone przez wzory (6.31) - (6.33). Rozwinięcie funkcji $f_1(k)$ wokół zera:

o

$$f_1(k) = f_1(0) \left[1 - \frac{e^{2K}}{2} k^2 + O(k^4 e^{6K}) \right] \quad 6.44$$

prowadzi do następującej postaci dla stosunku wartości $F(k_0)$ do wartości F w punkcie $k=0$ dla $F = Z, R$ lub G :

$$\frac{F(k_0)}{F(0)} = \left[1 - \frac{e^{2K}}{2} k_0^2 + O(k_0^4 e^{6K}) \right]^M \cdot O(1) \quad 6.45$$

Przyjmując $k_0 = M^{-\alpha}$, otrzymujemy:

$$\frac{F(k_0)}{F(0)} = \begin{cases} O(M^{-1}) & \text{I dowolne} & \alpha < \frac{1+\delta}{2} \\ O(1) & & \alpha > \frac{1+\delta}{2} \end{cases} \quad 6.46$$

Stąd i z faktu, że funkcje R , Z i G maleją monotonicznie na badanym przedziale wynika, że całki na przedziale (k_0, k_1) są zaniedbywalnie małe dla $k_0 = M^{-(1+\delta)/2}$. Decydujący wkład do poszukiwanych całek pochodzi z przedziału $(0, M^{-(1+\delta)/2})$. Rozwinięcie $f_2(k)$ wokół zera ma postać:

$$f_2(k) = f_2(0) \left[1 + \frac{e^{2K}}{2} k^2 + O(k^4 e^{6K}) \right] \quad 6.47$$

stąd i z (6.44) mamy:

$$\begin{bmatrix} \frac{f_2(k)}{f_1(k)} \end{bmatrix}^M = \begin{bmatrix} \frac{f_2(0)}{f_1(0)} \end{bmatrix}^M \left[1 + \frac{e^{2K}}{2} k^2 + O(k^4 e^{6K}) \right]^M \quad 6.48$$

Dla $k \leq k_0 = M^{-(1+\delta)/2}$ mamy $e^{2K} k^2 \leq M^{-1}$. Ponadto z postaci f_i (6.17) wynika, że

$$\frac{f_2(0)}{f_1(0)} = 1 - 2M^{-\delta} + O(M^{-2\delta}) \quad 6.49$$

Stąd

$$\left[\begin{array}{c} f_2(k_0) \\ f_1(k_0) \end{array} \right]^M = O(M^{-I}) \quad I \text{ dowolne}, \quad \delta < 1 \quad 6.50$$

Z powyższego i z (6.43) wynika, że dla $k \in (0, k_0)$ badane funkcje mają postać:

$$F(k) \underset{M \rightarrow \infty}{=} \frac{w(k)}{F} e^{-M h(k)} \quad 6.51$$

gdzie

$$h(k) = \log [f_1(k)] \quad 6.52$$

natomiast funkcje w_F dane są wzorami:

$$w_F(k) = \begin{cases} \cos k + (\cos^2 k - \frac{b}{2}) (\cos^2 k - b)^{-1/2} & F=Z \\ 1 & F=R \\ \frac{e^{-4K}}{2 \cos k - b} \left\{ 1 - \left[\frac{f_2(k)}{f_1(k)} \right]^x \right\} & F=G \end{cases} \quad 6.53$$

dla $x \leq M/2$

Zachowanie asymptotyczne całek z funkcji postaci (6.51) zbadamy stosując metodę Laplace'a, zgodnie z którą

$$\int_0^\infty dk F(k) \underset{M \rightarrow \infty}{=} \sum_{n=0}^{\infty} d_n M^{-1/2-n} e^{-M h(0)} \quad 6.54$$

Dla $n = 0, 1$ współczynniki d_n w powyższym szeregu asymptotycznym mają, przy znikających pochodnych nieparzystych rzędów w punkcie $k = 0$, postać / de Bruijn (1961) / :

$$d_0 = h_2 w(0) \quad 6.55a$$

$$d_1 = h_2^3 w'''(0)/4 + \frac{15}{3 \cdot 4!} \cdot h_2^7 w(0) h^{IV}(0) \quad 6.55b$$

gdzie

$$h_2 = (2\pi / h''(0))^{1/2} \quad 6.56$$

w rozważanym przypadku mamy:

$$h''(0) = e^{2K} \quad 6.57a$$

$$h^{IV}(0) = e^{2K} (1 - 3e^{4K}) \quad 6.57b$$

$$w_Z(0) = 1 + \cosh 2K \quad 6.57c$$

$$w_G(0) = 1 - \tanh^x K \quad 6.57d$$

$$w_G'''(0) = 2e^{4K} [1 - \tanh^x K (xe^{-2K} + 1)] \quad 6.57e$$

Gęstość / magnetyzacja / w punkcie $x = M/2$

Ograniczając się do przybliżenia zerowego rzędu otrzymamy:

$$\int_0^{\pi/2} dk Z(k) \underset{M \rightarrow \infty}{=} \int_0^{k_0} dk Z(k) = \frac{1}{2} f_1(0) d_0 M^{-1/2} + O(M^{-3/2}) \quad 6.58$$

w tym przypadku

$$d_0 = \sqrt{2\pi} e^{-K} (1 + \cosh 2K) \quad 6.59$$

więc , ponieważ $f_1(0) = 1 + e^{-2K}$

$$\int_0^{\pi/2} dk Z(k) \underset{M \rightarrow \infty}{=} M^{-1/2} \frac{\sqrt{2\pi}}{4} e^K (1 + e^{-2K})^{M+1} \quad 6.60$$

Stąd magnetyzacja w punkcie $x = M/2$ ma postać:

$$\langle \sigma_{M/2} \rangle_{+-} = \tanh \frac{M/2}{K} \frac{e^{-K} \sqrt{2\pi M}}{1 + e^{-2K}} \quad 6.61$$

Przedstawiony w dodatku B rachunek pokazuje , że w zespole wielkim kanonicznym

$$\langle \sigma_{M/2} \rangle_{+-}^{g.c.} = \frac{2 \tanh \frac{M/2}{K} e^{-2K}}{(1 + e^{-2K}) (1 - \tanh \frac{M+1}{K})} \quad 6.62$$

Porównując (6.61) i (6.62) widzimy , że w rozpatrywanym przedziale temperatur $T > T'(M)$ magnetyzacja w punkcie $x = M/2$ dąży do zera dla $M \rightarrow \infty$, jednak wolniej niż w zespole wielkim kanonicznym .

Funkcja korelacyjna h

W przypadku funkcji korelacyjnej występujące we wzorze (6.25b) całki wyznaczmy z dokładnością do wyrazów pierwszego rzędu w rozwinięciu na szereg asymptotyczny Laplace'a (6.54) ; prowadzi to do następującej postaci:

$$\langle \sigma_1 \sigma_{1+x} \rangle_c = 1 - G_0 R_0^{-1} - (G_1 - G_0 R_1 R_0^{-1}) R_0^{-1} M^{-1} + O(M^{-2}) \tag{6.63}$$

gdzie G_0, G_1 i R_0, R_1 oznaczają dwa pierwsze współczynniki d_0 i d_1 w rozwinięciu (6.54) dla całek z funkcji G i R . Wstawiając do wzorów (6.55) odpowiednie wielkości dane przez (6.56) i (6.57) otrzymamy jawne postaci G_0, G_1, R_0, R_1 . Podstawiając je do wzoru (6.63) i uwzględniając symetrię układu z cyklicznymi warunkami brzegowymi /c/ ze względu na $x \rightarrow M-x$ / przeprowadzona analiza była ograniczona do przypadku $x \leq M/2$ / otrzymamy:

$$\langle \sigma_1 \sigma_{1+x} \rangle_c = \tanh K + \tanh \frac{M-x}{K} - \frac{e}{M} + \frac{\tanh K (x+e)^{2K} + \tanh K (M-x+e)^{2K}}{M} \tag{6.64}$$

Dwa pierwsze wyrazy równe są funkcji korelacyjnej h w zespole wielkim kanonicznym dla $M \rightarrow \infty$ / patrz (6.27)/ . Trzeci wyraz , na podstawie (6.28) i (6.2) stanowi poprawkę Ornsteina-Zernike (1914) i Lebowitza-Percusa (1961) . Ostatni, czwarty wyraz , podobnie jak znana z literatury poprawka jest rzędu M^{-1} , ale zależy od odległości między punktami i maleje eksponencjalnie dla $x \rightarrow \infty$.

§2. Gęstość i funkcja korelacyjna h w przypadku niskotemperaturowym $T < T'$.

Dla $\delta > 1$, jak wynika z (6.38) całki na przedziałach $(0, k_1)$ i $(k_1, \pi/2)$ są tego samego rzędu i obie muszą być brane pod uwagę. W przypadku funkcji korelacyjnej ograniczymy się do $x = M/2$. Wówczas

$$G(k) = \frac{e^{-4K}}{\cos^2 k - b} \left[f_1^{M/2}(k) - f_2^{M/2}(k) \right]^2 \quad 6.65$$

Biorąc pod uwagę (6.38), całkę na przedziale $(0, k_1)$ przybliżamy przez

$$\int_0^{k_1} dk F(k) \underset{M \rightarrow \infty}{=} F(0) M^{-\delta} \quad 6.66$$

gdzie z definicji k_1 / patrz (6.34) / i parametru δ oraz parametru b (6.37) i (6.18), dla $M \rightarrow \infty$ mamy:

$$k_1 \underset{M \rightarrow \infty}{=} M^{-\delta} \quad 6.67$$

Daje to dla $F = Z, G$ lub R oszacowania:

$$\int_0^{k_1} dk Z(k) = M^{1-\delta} + o(M^{2(1-\delta)}) \quad 6.68a$$

$$\int_0^{k_1} dk G(k) = M^{2-3\delta} + o(M^{2-3\delta}) \quad 6.68b$$

$$\int_0^{k_1} dk R(k) = \left[2 + M^{2(1-\delta)} + o(M^{2(1-\delta)}) \right] M^{-\delta} \quad 6.68c$$

W przedziale $(M^{-\delta}, \pi/2)$ wprowadzamy nową zmienną całkowania φ zdefiniowaną wzorem (6.35) i otrzymujemy:

$$\int_{M^{-\delta}}^{\pi/2} dk Z(k) = b^{(M+1)/2} \int_0^{\pi/2} d\varphi \frac{\sin[(M+1)\varphi]}{\cos \varphi (M^{-2\delta} + \operatorname{tg}^2 \varphi)^{1/2}} \quad 6.69a$$

$$\int_{M^{-\delta}}^{\pi/2} dk G(k) = 2b^{(M-1)/2} \int_0^{\pi/2} d\varphi \frac{1 - \cos(M\varphi)}{\cos \varphi \sin \varphi (M^{-2\delta} + \operatorname{tg}^2 \varphi)^{1/2}} \quad 6.69b$$

$$\int_{M^{-\delta}}^{\pi/2} dk R(k) = 2b^{(M+1)/2} \int_0^{\pi/2} d\varphi \frac{\operatorname{tg} \varphi \cos(M\varphi)}{(M^{-2\delta} + \operatorname{tg}^2 \varphi)^{1/2}} \quad 6.69c$$

Każda z funkcji \bar{G} , \bar{R} i \bar{Z} ma postać:

$$\bar{F}(\varphi) = p(\varphi) (M^{-2\delta} + \operatorname{tg}^2 \varphi)^{-1/2} \quad 6.70$$

Przedstawimy całkę z rozpatrywanych funkcji w postaci sumy:

$$\int_0^{\pi/2} d\varphi \bar{F}(\varphi) = M^{\delta} \int_0^M d\varphi p(\varphi) (1 + \operatorname{tg}^2 \varphi M^{2\delta})^{-1/2} + \int_{M^{-\delta}}^{\pi/2} d\varphi p(\varphi) \operatorname{ctg} \varphi (1 + \operatorname{ctg}^2 \varphi M^{-2\delta})^{-1/2} \quad 6.71$$

Dla $M \rightarrow \infty$ $M^{-\delta} \rightarrow 0$, stąd dla $\varphi \leq M^{-\delta}$ mamy przybliżenie

$$\operatorname{tg} \varphi \underset{M \rightarrow \infty}{=} \varphi + o(\varphi^3) \quad 6.72$$

Natomiast na przedziale $(M^{-\delta}, \pi/2)$

$$\operatorname{ctg} \varphi \underset{M \rightarrow \infty}{=} \varphi^{-1} + o(\varphi) \quad 6.73$$

Stosując powyższe przybliżenia otrzymujemy rozwinięcia:

$$(1 + \operatorname{tg}^2 \varphi M^{2\delta})^{-1/2} \underset{\substack{M \rightarrow \infty \\ \varphi \leq M^{-\delta}}}{=} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{2^n n!} (\varphi M^{\delta})^{2n} \quad 6.74a$$

$$(1 + \operatorname{ctg}^2 \varphi M^{-2\delta})^{-1/2} \underset{\substack{M \rightarrow \infty \\ \varphi > M^{-\delta}}}{=} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{2^n n!} [(\varphi^{-1} + o(\varphi)) M^{-\delta}]^{2n} \quad 6.74b$$

gdzie $(2n-1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2n-1)$

Gęstość / magnetyzacja / w punkcie $x = M/2$

Aby wyznaczyć gęstość / magnetyzację / daną wzorem (6.29) musimy znać całkę z funkcji Z . Całkę na przedziale $(0, k_1)$ daje wzór (6.63a). Pozostaje do obliczenia całka na przedziale $(k_1, \pi/2)$, przedstawiona wzorem (6.69a). W tym wypadku funkcja $p(\varphi)$ / por. (6.70) / ma postać:

$$p(\varphi) = \sin [(M+1)\varphi] \cos^{-1} \varphi \quad 6.75$$

Uwaga: ile $\delta > 1$, dla $\varphi \in (0, M)$ mamy:

$$M\varphi \leq M M^{-\delta}, \quad M M^{-\delta} \xrightarrow{M \rightarrow \infty} 0 \quad 6.76$$

i można stosować przybliżenie:

$$\tilde{z}(\varphi) \underset{M \rightarrow \infty}{=} \tilde{z}(\varphi) + o(\varphi^3) \quad 6.77$$

o

Uwzględniając rozwinięcie (6.74a) i całkując otrzymany szereg wyraz po wyrazie uzyskamy:

$$\int_0^{M^{-\delta}} d\varphi \tilde{z}(\varphi) = \left\{ \begin{array}{l} M^{1-\delta} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{2^{n+1} (n+1)!} + o(M^{1-\delta}) \quad \delta > 1 \\ \sum_{n=0}^{\infty} a_n M^{2(1-\delta)n} \quad \delta \rightarrow 1^+ \end{array} \right. \quad 6.78$$

o

W drugim przypadku wykorzystany jest fakt, że

$$M \int_0^{M^{-\delta}} d\varphi \sin(M\varphi) \varphi^{2n} = \frac{M^{2(1-\delta)}}{2(n+1)} \left[1 - \frac{M^{2(1-\delta)}}{2(n+2)} + \dots \right] \quad 6.79$$

Na przedziale $(M, \pi/2)$ obowiązuje rozwinięcie (6.74b), z którego wynika:

$$\int_{M^{-\delta}}^{\pi/2} d\varphi \tilde{Z}(\varphi) = \int_{M^{-\delta}}^{\pi/2} d\varphi \frac{\sin(M\varphi)}{\varphi} + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{2^n n!} \frac{M^{1-2n\delta}}{2n} \int_{M^{-\delta}}^{\pi/2} d\varphi \frac{\cos[(M+1)\varphi]}{\varphi^{2n}} + O(M^{-2\delta}) \quad 6.80$$

Ponieważ zachodzą równości:

$$M^{-2n\delta} \int_{M^{-\delta}}^{\pi/2} d\varphi \frac{\cos[(M+1)\varphi]}{\varphi^{2n}} = \frac{M^{-\delta}}{2n-1} - \frac{M^{-2-3\delta}}{2(2n-3)} - \left\{ \begin{array}{l} O(M^{4-5\delta}), \quad n=0 \\ M^{1-2\delta} \int_{M^{-\delta}}^{\pi/2} d\varphi \frac{\sin[(M+1)\varphi]}{\varphi}, \quad n=1 \\ \frac{2(1-n)\delta}{(2n-1)(2n-2)} \int_{M^{-\delta}}^{\pi/2} d\varphi \frac{\cos(M+1)\varphi}{\varphi^{2n-2}}, \quad n > 1 \end{array} \right. \quad 6.81$$

oraz

$$\int_{M^{-\delta}}^{\pi/2} d\varphi \frac{\sin[(M+1)\varphi]}{\varphi} = \lim_{M \rightarrow \infty} \int_0^{\infty} dx \frac{\sin x}{x} - \int_0^{M^{1-\delta}} dx \frac{\sin x}{x} = \frac{\pi}{2} - M^{1-\delta} \quad 6.82$$

otrzymujemy:

$$\int_{M^{-\delta}}^{\pi/2} d\varphi \tilde{Z}(\varphi) = \frac{\pi}{2} M^{1-\delta} + M^{1-\delta} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-3)!!}{2^n 2^n n!} + \sum_{m=2}^{\infty} a_m M^{m(1-\delta)} \quad 6.83$$

Zsumowanie całek (6.68a), (6.78) i (6.83) daje:

$$\int_0^{\pi/2} dk Z(k) = \frac{\pi}{2} + M^{1-\delta} \left[\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-3)!!}{2^n n! 2^n} + \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{2^{n+1} (n+1)!} \right] =$$

$$\frac{\pi}{2} - \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{2^n n! 2^n} M^{1-\delta} \quad 6.84$$

Występujący w tym wzorze szereg można zsumować / dodatek C / , co daje

$$\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{2^n n! n} = -2 [\log(\sqrt{2} + 1) - \log 2] \quad 6.85$$

Stąd i z (6.29) otrzymujemy:

$$\langle \sigma_{M/2} \rangle_{+-} = \begin{cases} 1 - 0.24 M^{1-\delta} + O(M^{2(1-\delta)}) & \delta > 1 \quad 6.86a \\ 1 + \sum_{m=2}^{\infty} a_m M^{m(1-\delta)} & \delta \rightarrow 1^+ \quad 6.86b \end{cases}$$

W przeciwieństwie do przypadku $T > T'$, magnetyzacja w punkcie $x=M/2$ jest dla $T < T'$ / o ile $M^{1-\delta} \ll 1$ / rzędu jednościci . Jej wartość zależy zarówno od temperatury / poprzez δ / , jak i od rozmiaru układu .

Funkcja korelacyjna $h(M/2)$

Asymptotyczną postać wzoru (6.25b) dla $M \rightarrow \infty$ i $\delta > 1$ znajdziemy obliczając całki z funkcji G i R (6.69b,c) , postępując podobnie , jak w przypadku magnetyzacji .

Funkcja $p(\varphi)$ definiowana przez (6.70) ma dla $\tilde{G}(\varphi)$ postać:

$$p(\varphi) = 2 \frac{1 - \cos(M\varphi)}{\sin\varphi \cos\varphi} \tag{6.87}$$

Dla $\varphi < M^{-\delta}$ mamy $\cos\varphi \approx 1$, $\sin\varphi \approx \varphi$, ponadto

$$1 - \cos(M\varphi) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(M\varphi)^{2k} (-1)^{k+1}}{(2k)!} \tag{6.88}$$

Z powyższego i z rozwinięcia (6.74a) otrzymujemy:

$$\int_0^{M^{-\delta}} d\varphi \tilde{G}(\varphi) = 2 \int_0^{M^{-\delta}} d\varphi \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^{k+n+1} \frac{(2n-1)!!}{2^n n! (2k)!} (M\varphi)^{2k} (M\delta\varphi)^{2n-1} = O(M^{2-3\delta}) \tag{6.89}$$

Na przedziale $(M^{-\delta}, \pi/2)$, z rozwinięcia (6.52b) dla $p(\varphi)$ danego przez (6.87)

otrzymujemy:

$$\int_{M^{-\delta}}^{\pi/2} d\varphi \bar{G}(\varphi) = 2 \int_{M^{-\delta}}^{\pi/2} d\varphi \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{2^n n!} (M^\delta \varphi)^{-2(n+1)} (1 - \cos(M\varphi)) \quad 6.90$$

Wykorzystując (6.81) dla całki typu $\int_{M^{-\delta}}^{\pi/2} d\varphi \cos(M\varphi) \varphi^{-n}$ otrzymamy:

$$\int_{M^{-\delta}}^{\pi/2} d\varphi \bar{G}(\varphi) = 2 \left[\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{2^n n! (2n+1)} M^{-\delta} - \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{2^n n! (2n+1)} M^{-\delta} \right. \\ \left. - M^{-\delta} + M^{1-2\delta} \int_0^{\infty} dx \frac{\sin x}{x} \right] + O(M^{2-3\delta}) \quad 6.91$$

Stąd, z (6.89) i z (6.63b) otrzymujemy:

$$\int_0^{\pi/2} dk G(k) = \pi M^{1-2\delta} + O(M^{2-3\delta}) \quad 6.92$$

W ten sam sposób wyznaczona będzie całka z funkcji $\bar{R}(\varphi)$. Funkcja $p(\varphi)$ / por. (6.70) / ma postać:

$$p(\varphi) = 2 \operatorname{tg} \varphi \cos(M\varphi) \quad 6.93$$

Dla $\varphi < M^{-\delta}$ możemy stosować przybliżenia:
<http://rcin.org.pl>

$$\tan \varphi \approx \varphi \tag{6.94a}$$

$$\cos(M\varphi) \approx 1 - \frac{M^2 \varphi^2}{2} \tag{6.94b}$$

które, wraz z rozwinięciem (6.74a) dają:

$$\int_0^{M^{-\delta}} d\varphi \tilde{R}(\varphi) = -2 M^{-\delta} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-3)!!}{2^n n!} + O(M^{2-3\delta}) \tag{6.95}$$

Na przedziale $(M^{-\delta}, \pi/2)$ z rozwinięcia (6.74b) otrzymujemy:

$$\int_{M^{-\delta}}^{\pi/2} d\varphi \tilde{R}(\varphi) = \int_{M^{-\delta}}^{\pi/2} d\varphi 2 \cos(M\varphi) \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{2^n n!} (M^\delta \varphi)^{-2n} \tag{6.96}$$

Sumując całki (6.63c), (6.95) i otrzymaną z (6.96), przy wykorzystaniu (5.81) całkę postaci:

$$\int_{M^{-\delta}}^{\pi/2} d\varphi \tilde{R}(\varphi) = -2 M^{-\delta} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-3)!!}{2^n n!} M^{-\delta} + M^{1-2\delta} \frac{\pi}{2} + O(M^{2-3\delta}) \tag{6.97}$$

otrzymamy:

$$\int_0^{\pi/2} dk R(k) = \frac{\pi}{2} M^{1-2\delta} + O(M^{2-3\delta}) \tag{6.98}$$

Wstawiając otrzymane całki z funkcji G (6.92) i z funkcji R (6.97) do wzoru

(6.25b) na funkcję h otrzymamy:

$$h(M/2) = \begin{matrix} 1-\delta \\ \delta > 1 \end{matrix} -1 + O(M^{-\delta}) \quad 6.99a$$

W zespole wielkim kanonicznym w badanym przedziale temperatur ściśle wyrażenie na h (6.27) przyjmuje postać :

$$\text{g.c.} \quad h(M/2) = \begin{matrix} 1-\delta \\ \delta > 1 \end{matrix} 1 + O(M^{-\delta}) \quad 6.99b$$

Jak widać ze wzorów (6.99) funkcja korelacyjna h / a także g / ma postać całkowicie sprzeczną z postacią (6.2) i zgodną z nią postacią (6.64) strzymaną dla temperatur $T > T^*$, a więc jest niezgodna z przewidywaniami Ornsteina i Zernike (1914) dla układu jednofazowego w słabym polu / §1 niniejszego rozdziału / .

§5. Sens fizyczny temperatury T^*

W temperaturze T^* danej przez (6.39) następuje zmiana zachowania asymptotycznego przy $M \xrightarrow{*} \infty$ magnetyzacji i funkcji korelacyjnej h . Dla układu o długości $M \gg 1$, istnieją dwa różne przedziały temperatur , rozdzielone obszarem $(T^* - \Delta T , T^* + \Delta T)$ gdzie ΔT wyznaczone jest z warunku:

$$\frac{-11-\delta}{M} \ll 1 \quad 6.100$$

Z postaci magnetyzacji (6.61) dla $T > T^*$ i (6.86) dla $T < T^*$ oraz z postaci funkcji h (6.64) dla $T > T^*$ i (6.99a) dla $T < T^*$ wynika , że jeżeli warunek (6.100) dla ΔT jest spełniony , to

$$\langle \sigma_{M/2} \rangle_{+-} = \begin{cases} o(1) & T > T' + \Delta T & 6.101a \\ O(1) & T < T' - \Delta T & 6.101b \end{cases}$$

$$h(M/2) = \begin{cases} h^{g.c.} (M/2) + O(M^{-1}) & T > T' + \Delta T & 6.102a \\ -1 + O(M^{1-\delta}) & T < T' - \Delta T & 6.102b \end{cases}$$

Z warunku (6.100) i definicji parametru δ (6.37) otrzymujemy:

$$\Delta T = 2J (\log M)^{-2+\nu} \quad 6.103$$

gdzie ν jest dowolnie małe.

Dla $T > T' + \Delta T$ układ ma cechy układu jednofazowego, ponieważ:

i/ funkcja korelacyjna $h(x)$ ma postać (6.64), ściśle zgodną z przewidywaniami Ornsteina-Zernike (1914) i Lebowitza-Percusa (1961) dla układu jednofazowego.

ii/ z (6.101) wynika, że magnetyzacja jest bliska zera w całym układzie

/ patrz też wykresy/

Dla $T < T' - \Delta T$ układ ma cechy układu dwufazowego, ponieważ:

i/ funkcja korelacyjna $h(x)$ ma postać zupełnie inną niż w przypadku jednorodnym.

występuje dalekozasięgowe uporządkowanie

$$\langle \sigma_1 \sigma_{1+M/2} \rangle_c^{g.c.} = 1 \quad M \rightarrow \infty$$

$$\langle \sigma_1 \sigma_{1+M/2} \rangle_c = -1 \quad M \rightarrow \infty$$

Powyższe wzory świadczą o grupowaniu się cząstek / jednakowo skierowanych spinów/

w układzie zamkniętym / zespół kanoniczny / tworzy się pojedyncza kropla / dwa

przeciwie namagnesowane obszary, wewnątrz których spiny mają na ogół jednakowe zwroty/. Wartość spontanicznej magnetyzacji zależy od temperatury i rozmiaru układu.

ii/ magnetyzacja w punkcie $x = M/2$ ma skończoną wartość (6.101b). Przy warunku brzegowym $\sigma_0 = 1$, $\sigma_{M+1} = -1$ następuje przestrzenna separacja faz.

Obszar $(T' - \Delta T, T' + \Delta T)$ jest obszarem przejściowym pomiędzy obszarem jedno- i dwufazowym. Jest on odpowiednikiem punktu krytycznego dla układu o skończonych rozmiarach. Wprowadzimy obecnie parametr uporządkowania dla skończonego układu. Z rys.10 wynika, że

$$\langle \sigma_{M/2} \rangle_{+-} \sim \rho_1 - \rho_g \tag{6.104}$$

W granicy termodynamicznej prawa strona (6.104) stanowi parametr uporządkowania. W układzie skończonym $\langle \sigma_{M/2} \rangle_{+-}$ nie jest zerem w stanie jednofazowym. Warunki brzegowe $/+-/$ powodują, że brak jest całkowitej jednorodności. Podobnie w stanie jednofazowym w obecności pola zewnętrznego pojawiają się słabe niejednorodności. Parametr uporządkowania dla układu skończonego zdefiniujemy tak, by był on zerem w stanie jednofazowym:

$$\eta(T) := \langle \sigma_{M/2} \rangle_{+-}(T) - \langle \sigma_{M/2} \rangle_{+-}(T_u) \tag{6.105a}$$

gdzie

$$T_u = \begin{cases} T & T > T' + \Delta T \\ T' + \Delta T & T < T' + \Delta T \end{cases} \tag{6.105b}$$

Z definicji $\eta(T) = 0$ dla $T > T' + \Delta T$

Z punktu widzenia interpretacji fizycznej temperatury T' interesujące jest zachowanie parametru uporządkowania η przy przechodzeniu do stanu jednofazowego.

Wprowadzamy parametr t_s wzorem:

$$t_s = \frac{T - (T' + \Delta T)}{T'} \quad 6.106$$

i badamy przypadek $t_s \rightarrow 0^-$. Dla dostatecznie małych t_s $T > T'$ i dla $\langle \sigma_{M/2} \rangle_{+-}$ obowiązuje postać (6.61). Przyjmując $M \gg 1$ i $t_s \rightarrow 0^-$ otrzymamy:

$$\langle \sigma_{M/2} \rangle_{+-} \underset{\substack{M \gg 1 \\ t_s \rightarrow 0^-}}{=} \sqrt{2\pi} e^{1/2(\log M)^{\nu}} (1 - 2M^{-1} e^{-(\log M)^{\nu}})^{M/2} \cdot (1 - \log M e^{(\log M)^{\nu} t_s}) (1 + \frac{1}{2} \log M t_s) \quad 6.107$$

Ponieważ wyraz niezależny od t_s jest równy magnetyzacji w $T = T' + \Delta T$ / por. (6.61) / dla parametru uporządkowania η otrzymujemy:

$$\eta \sim t_s^{\beta} \quad , \quad \beta = 1 \quad 6.108$$

Ponieważ badany jest układ o skończonych rozmiarach, nie może istnieć temperatura krytyczna w takim sensie jak w granicy termodynamicznej, gdyż wszystkie badane wielkości są analityczne. Niemniej z przedstawionych wyżej argumentów wynika, że obszar $(T' - \Delta T, T' + \Delta T)$ ma fizyczne własności punktu krytycznego. Tak więc dla $T < T' - \Delta T$ układ jest w stanie dwufazowym i profil gęstości przedstawia rozkład materii pomiędzy współistniejącymi fazami, rozdzielonymi przestrzennie wskutek wyboru przeciwstawnych warunków brzegowych / +- / .

Przy $M \rightarrow \infty$ mamy $T' \rightarrow 0$, $\Delta T/T' \rightarrow 0$, oraz $\langle \sigma_{M/2} \rangle_{\pm}(T'+\Delta T) \rightarrow 0$ a więc nie ma sprzeczności ze znanymi wynikami i definicjami dotyczącymi układu nieskończonego.

§6. Wnioski dotyczące profilu gęstości przy ustalonej liczbie cząstek.

Stwierdziliśmy poprzednio, że poniżej temperatury $T = T' - \Delta T$, gdzie T' dane jest przez (6.39) a ΔT przez (6.103) układ jest w stanie dwufazowym. W przeciwieństwie do układu otwartego / zespół wielki kanoniczny /, w którym powierzchnia rozdziału faz jest zupełnie zdelokalizowana, w układzie zamkniętym / zespół kanoniczny / powierzchnia rozdziału faz jest zlokalizowana. Obszar niejednorodny jest bardzo wąski. Jego szerokość jest rzędu stałej sieci i słabo zależy od rozmiarów układu i temperatury / o ile jest ona niższa od $T' - \Delta T$ /. Poza wąskim obszarem niejednorodnym pozostała część układu, odpowiadająca fazom ciekłej / dodatnio namagnesowanej / i gazowej / ujemnie namagnesowanej / jest prawie jednorodna dostatecznie daleko od ścian układu. Usunięcie fluktuacji liczby cząstek, przy jednoczesnym braku zjawisk opisywanych przez teorię fal kapilarnych / rozdział III /, które w jednym wymiarze nie występują, powoduje zlokalizowanie powierzchni rozdziału faz w bardzo wąskim, niezależnym od rozmiarów całego układu, obszarze.

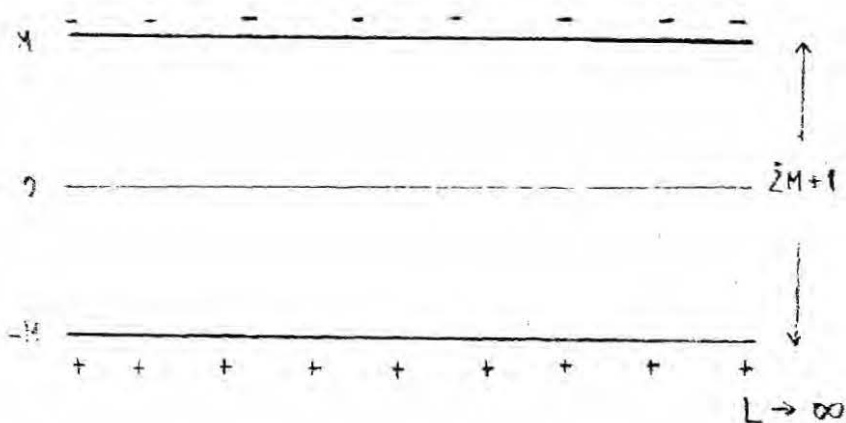
Wynik ten jest jakościowo zgodny z rezultatami otrzymanymi dla wewnętrznego profilu gęstości w ramach teorii van der Waalsa i ściśle dla modeli sieciowych / rozdziały II i V /, które dają szerokość warstwy powierzchniowej tego samego rzędu, to znaczy porównywalną ze średnicą atomu / teoria van der Waalsa / lub ze stałą sieci / modele sieciowe /, dla niskich temperatur. Ponadto, "goła" szerokość powierzchni nie zależy od warunków zewnętrznych / rozmiarów układu /, tak jak w wymienionych, znanych z literatury przypadkach.

ROZDZIAŁ VII

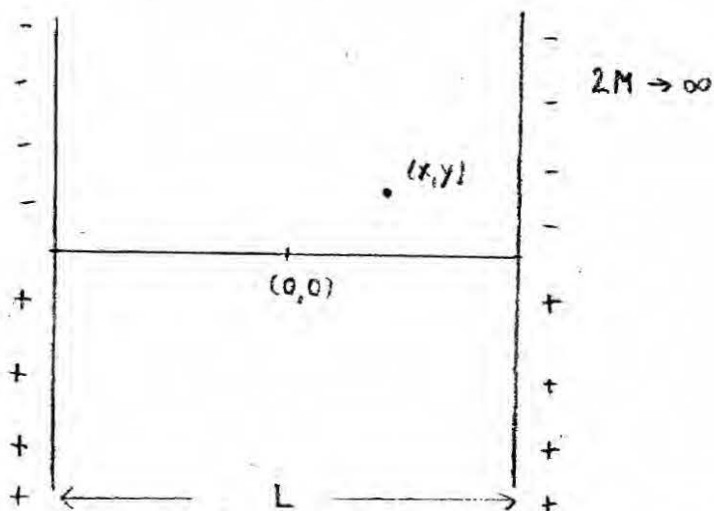
JEDNO- I DWUPUNKTOWE FUNKCJE KORELACYJNE W MODELU SOS WARSTWY POWIERZCHNIOWEJ
W UKŁADZIE O SKOŃCZONYCH ROZMIARACH W NIEOBECNOŚCI ZEWNĘTRZNEGO POLA .

§1 . Wstęp.

Przedmiotem tego rozdziału jest analityczne wyznaczenie jawnej postaci funkcji korelacyjnych jedno- i dwupunktowych w modelu SOS w nieobecności zewnętrznego pola. Badane będą dwa geometrycznie różne przypadki , w których powierzchnia jest zlokalizowana / rys.12 i 13 /



rys.12 . Przypadek A / $M = \text{const}$ / , $L \rightarrow \infty$



rys.13 . Przypadek B / $L = \text{const}$ / , $M \rightarrow \infty$, $h_1 = 0$

W obu przypadkach obliczone będą funkcje p , q , P i H / rozdział I /.

Ponadto zdefiniowane będą formalnie nowe funkcje korelacyjne, nazwane funkcjami warunkowymi i oznaczane przez P_{cond} , Q_{cond} , H_{cond} i C_{cond} . Jawna postać tych funkcji w modelu SOS obliczona będzie przy $L, M \rightarrow \infty$.

§2. Funkcje p_1 i p_2 .

§§1. Macierz przejścia T

Naturalnymi funkcjami w modelu SCS są funkcje $p_n(h_1, \dots, h_n)$, stanowiące rozkład prawdopodobieństwa przechodzenia długiego konturu na wysokościach h_1, \dots, h_n w kolumnach i_1, \dots, i_n . W niniejszej pracy ograniczać będziemy się do dwóch pierwszych funkcji, p_1 i p_2 . Funkcja P / rozdział I / dana jest wzorem:

$$P(h_1, h_2) = p_2(h_1, h_2) - p_1(h_1) p_1(h_2) \quad 7.1a$$

Dla $\rho_1 = 1$ i $\rho_g = 0$, co odpowiada modelowi SCS, powyższy związek pokrywa się ze związkiem:

$$(\rho_1 - \rho_g)^2 p_2(h_1, h_2) = P(h_1, h_2) + p_1(h_1) p_1(h_2) (\rho_1 - \rho_g)^2 \quad 7.1b$$

Związek p_1 i P z q i H jest dyskretną wersją związku (1.22). Funkcje p_1 i p_2 mają postać:

$$p_1(h_i) = Z \sum_{\substack{\{h_j\} \\ j \neq i}}^{-1} q^{|h_1-h_2|} q^{|h_2-h_3|} \dots q^{|h_{L-1}-h_L|} \quad 7.2a$$

$$p_2(h_1, h_{i+x}) = Z^{-1} \sum_{\substack{\{h_j\} \\ j \neq i, i+x}} q^{|h_1 - h_2|} \dots q^{|h_{L-1} - h_L|} \quad 7.2b$$

gdzie

$$q = e^{-2K} \quad 7.2c$$

Jeżeli wprowadzimy macierz przejścia T wzorem:

$$T(h_1, h_2) = q^{|h_1 - h_2|} \quad 7.3$$

przy q danym przez (7.2c), to poszukiwane wielkości w układach A i B wyrażać się będą przez elementy macierzowe T następująco:

$$Z_A = \text{Tr } T \quad 7.4a$$

$$p_1^A(h) = Z_A^{-1} \sum_{L} T(h, h) \quad 7.4b$$

$$p_2^A(h_1, h_{1+\Delta x}) = Z_A^{-1} \sum_{\Delta x} T(h_1, h_{1+\Delta x}) T(h_{1+\Delta x}, h_1) \quad 7.4c$$

$$Z_B = \sum_{L} T(0, 0) \quad 7.4d$$

$$p_1^B(h_n) = Z_B^{-1} \sum_n T(0, h_n) T(h_n, 0) \quad 7.4e$$

$$p_2^B(h_n, h_{n+\Delta x}) = Z_B^{-1} \sum_n \sum_{\Delta x} T(0, h_n) T(h_n, h_{n+\Delta x}) T(h_{n+\Delta x}, 0) \quad 7.4f$$

Ponadto, suma stanów w układzie o warunkach brzegowych przedstawionych na rys.4a, gdzie brzegowe spiny mają wartość -1 dla współrzędnej pionowej $h > 0$ na lewym i $h > z$ na prawym brzegu, a poniżej 0 i z mają wartość +1, oznaczana

przez $Z_B(z)$ ma postać:

$$Z_B(z) = T^L(0, z) \quad 7.4g$$

Macierz T^n znajdziemy, rozwiązując zagadnienie własne macierzy T . Wektory własne macierzy typu (7.3) spełniają dwustopniową rekurencję postaci / van Leeuwen i Hilhorst (1981) / :

$$\varphi_1^{(h+1)} + \varphi_1^{(h-1)} = [q + q^{-1} + (q - q^{-1}) \lambda_1^{-1}] \varphi_1^{(h)} \quad 7.5a$$

gdzie $\varphi_1^{(h)}$ oznacza h -tą składową 1-tego wektora własnego T a λ_1 odpowiadającą mu wartość własną. W skończonym układzie pojawia się warunek brzegowy:

$$\varphi_1^{(M+1)} = \varphi_1^{(-M-1)} = 0 \quad 7.5b$$

Ze względu na symetrię problemu / $h \rightarrow -h$ / rozwiązaniami równań (7.5) będą funkcje parzyste i nieparzyste. Postulujemy postać rozwiązania:

$$\varphi_1^{(h)} = c (x_1^h + x_1^{-h}) \quad 7.6$$

z (7.5a) otrzymujemy:

$$x + x^{-1} = q + q^{-1} + (q - q^{-1}) \lambda^{-1} \quad 7.7$$

a z warunku brzegowego (7.5b)

$$x_1^{2(M+1)} = \begin{cases} -1 & \text{dla parzystej funkcji (7.6)} \\ 1 & \text{dla nieparzystej funkcji (7.6)} \end{cases} \quad 7.8$$

stąd

$$x_1 = e^{i \alpha_0 l} \quad 7.9$$

gdzie

$$\alpha_0 = \frac{\pi}{2(M+1)} \quad 7.10$$

a l zmienia się od 1 do $2M+1$. Wartość własna dla q danego wzorem (7.2c) ma postać:

$$\lambda_1 = \frac{\sinh 2K}{\cosh 2K - \cos(\alpha_0 l)} \quad 7.11$$

Z warunku normalizacyjnego:

$$\sum_{h=-M}^M \varphi_1(h) \varphi_j(h) = \delta_{1j}^{Kr} \quad 7.12$$

otrzymujemy postać stałej normalizacyjnej c :

$$c^{-2} = \sum_{h=-M}^M [2 + (-1)^{l+1} (e^{2i\alpha_0 lh} + e^{-2i\alpha_0 lh})] = 4(M+1) \quad 7.13$$

Z (7.6), (7.9) i (7.13) otrzymujemy unormowane wektory własne o postaci:

$$\varphi_1(h) = \frac{1}{2\sqrt{L+1}} \left[e^{i\alpha_0 h} + (-1)^{L+1} e^{-i\alpha_0 h} \right] \quad 7.14$$

Wyrażając $T^x(h_1, h_2)$ przez wartości i wektory własne otrzymamy:

$$Z_A = \sum_m \lambda_m^L \quad 7.15a$$

$$p_1^A(h) = Z_A^{-1} \sum_m \varphi_m^*(h) \lambda_m^L \varphi_m(h) \quad 7.15b$$

$$p_2^A(h_1, h_1 + \Delta x) = Z_A^{-1} \sum_{m,k} \varphi_m^*(h_1) \lambda_m^{\Delta x} \varphi_m(h_1 + \Delta x) \varphi_k^*(h_1 + \Delta x) \lambda_k^{L-\Delta x} \varphi_k(h_1) \quad 7.15c$$

$$Z_B(h) = \sum_m \varphi_m^*(h) \lambda_m^L \varphi_m(0) \quad 7.15d$$

$$p_1^B(h_n) = Z_B^{-1} \sum_{m,k} \varphi_m^*(0) \lambda_m^{\Delta x} \varphi_m(h_n) \varphi_k^*(h_n) \lambda_k^{L-\Delta x} \varphi_k(0) \quad 7.15e$$

$$p_2^B(h_n, h_n + \Delta x) = Z_B^{-1} \sum_{m,k,l} \varphi_l^*(0) \lambda_l^n \varphi_l(h_n) \varphi_k^*(h_n) \lambda_k^{\Delta x} \varphi_k(h_n + \Delta x) \varphi_m^*(h_n + \Delta x) \lambda_m^{L-\Delta x-n} \varphi_m(0) \quad 7.15f$$

Jawną postać tych wzorów w przypadkach granicznych A / $M=\text{const}$ / i B / $L=\text{const}$ / / por. rys. 12 i 13 / wyznaczymy osobno.

§§2. Jawną postać p_1 i p_2 w przypadku $A / M = \text{const}$ / układu o skończonej wysokości M i szerokości $L \rightarrow \infty$.

Przy założeniu $M = \text{const}$ i $L \rightarrow \infty$, dla $x \ll L$ wzory (7.15a-c) mają postać:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\sum_{n=1}^{2M+1} a_n \lambda_n^L}{\sum_{n=1}^L \lambda_n^L} \quad \text{7.16}$$

Z postaci (7.11) wynika, że $\lambda_{n+1} < \lambda_n$. Ponieważ

$$(a_1 \lambda_1^L)^{-1} \sum_{n=2}^{2M+1} a_n \lambda_n^L \leq 2M \left(\frac{a_2}{a_1} \right) \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^L \xrightarrow{L \rightarrow \infty} 0 \quad \text{7.17}$$

pozostaje pierwszy wyraz, a_1 . Znajdując pierwszy wyraz dla (7.15b,c) otrzymamy:

$$p_1^A(h) \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{1}{M+1} \cos^2(\alpha_0 h) \quad \text{7.18a}$$

$$p_2^A(h_1, h_{1+\Delta x}) = \frac{1}{2(M+1)^2} \sum_{n=1}^{\Delta x} \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^{\Delta x} \left\{ \cos(\alpha_0 n \Delta h) + (-1)^{n+1} \cos[\alpha_0 n (h_1 + h_{1+\Delta x})] \right\} \cos(\alpha_0 h_1) \cos(\alpha_0 h_{1+\Delta x}) \quad /L \rightarrow \infty / \quad \text{7.18b}$$

Gdy $M \rightarrow \infty$, a $h_1, h_{1+\Delta x}$ pozostają ustalone, to znaczy gdy $\frac{h}{M} \rightarrow 0$, p_2

przybiera postać:

$$p_2(h_1, h_{1+\Delta x}) = (M+1)^{-1} \frac{(\cosh 2K - 1)^{|\Delta x|}}{\pi} \int_0^{\pi} dk \frac{\cos(k\Delta h)}{(\cosh 2K - \cos k)^{|\Delta x|}} \left[1 + O\left(\frac{h}{M}\right)^2 \right]$$

7.19

Przy tym wykorzystane zostały związki:

$$2^{M+1}^{-1} \sum_{n=1}^{2M+1} f(\alpha_0 n) \underset{M \rightarrow \infty}{=} \pi^{-1} \int_0^{\pi} dk f(k) + O(M^{-1}) \quad 7.20$$

$$\frac{\sum_{n=1}^{2M+1} (-1)^n g(\alpha_0 n)}{\sum_{n=1}^{2M+1} g(\alpha_0 n)} \underset{M \rightarrow \infty}{=} O(M^{-1}) \quad 7.21$$

§§3. Jawną postać p_1 i p_2 w przypadku $B / L = \text{const} /$ układu o skończonej szerokości L i wysokości $M \rightarrow \infty$.

Obecnie wyznaczmy jawną postać funkcji p w układzie o warunkach brzegowych przedstawionych na rys. 13, gdzie wysokość układu $M \rightarrow \infty$, natomiast jego szerokość L pozostaje skończona. Przy tym, z założenia, końce długiego konturu znajdują się na wysokości $h=0$ na lewym i prawym brzegu układu. Wyznaczona też będzie suma stanów $Z_B(h)$ w układzie o warunkach brzegowych różniących się od opisanych jedynie tym, że długi kontur przypięty jest do prawego brze-

gu na wysokości h .

Dla $L = \text{const}$ i $M \rightarrow \infty$ zachodzi:

$$\lim_{M \rightarrow \infty} 2^{(M+1)} \sum_{n=1}^{2M+1} [f(\alpha_{0n}) + (-1)^n g(\alpha_{0n})] = \pi^{-1} \int_0^{\pi} dk f(k) \quad 7.22$$

Uwzględniając ten związek, otrzymamy dla (7.4d-g) następujące postaci graniczne przy $M = \infty$:

$$Z_B^L(h) = \frac{\sinh 2K}{\pi} \int_0^{\pi} dk \frac{\cos(kh)}{(\cosh 2K - \cos k)} \quad 7.23a$$

$$p_1^B(h_n) = Z_B^{-1} \frac{\sinh 2K}{\pi^2} \int_0^{\pi} dk \int_0^{\pi} dw \frac{\cos(kh_n) \cos(wh_n)}{(\cosh 2K - \cos k)^n (\cosh 2K - \cos w)^{L-n}} \quad 7.23b$$

$$p_2^B(h_n, h_{n+\Delta x}) = Z_B^{-1} \frac{\sinh 2K}{\pi^2} \int_0^{\pi} dk \int_0^{\pi} dw \int_0^{\pi} ds \frac{\cos(kh_n) \cos(wh) \cos(sh_{n+\Delta x})}{(\cosh 2K - \cos k)^n (\cosh 2K - \cos w)^{|\Delta x|} (\cosh 2K - \cos s)^{L-\Delta x-n}} \quad 7.23c$$

Interesują nas własności układu z dala od jego brzegów $n=0$ i $n=L$, dlatego badane będą funkcje p w punktach o współrzędnych poziomych n mających postać:

$$n = \frac{L}{2} + o(L) \quad 7.24$$

Występujące we wzorach (7.23) całki mają postać / dodatek D / :

$$\int_0^{\pi} dk \cos(kh) \exp[-n \log(a - \cos k)] \underset{n \rightarrow \infty}{=} \frac{1}{2} \left(\frac{2(a-1)}{n} \right)^{1/2} (a-1)^{-n} \exp\left[-\frac{(a-1)h^2}{2n}\right]$$

7.25

W związku z tym postać asymptotyczna przy $L \rightarrow \infty$ wielkości danych przez (7.23) jest następująca :

$$Z_B(h) = \frac{\sinh K}{L} \coth K \exp\left[-\frac{\sinh^2 K}{L} h^2\right] \quad 7.26a$$

$$P_1^B(h_n) = \frac{2 \sinh K}{L} \exp\left[-4 \frac{\sinh^2 K}{L} h_n^2\right] [1 + o(L)] \quad 7.26b$$

$$P_2^B(h_n, h_{n+\Delta x}) = \frac{2 \sinh K}{L} \exp\left[-2 \frac{\sinh^2 K}{L} (h_n^2 + h_{n+\Delta x}^2)\right] [1 + o(\frac{\Delta x}{L})] \cdot$$

$$\frac{(\cosh 2K - 1)^{|\Delta x|}}{\pi} \int_0^{\pi} dk \frac{\cos(k\Delta h)}{(\cosh 2K - \cos k)^{|\Delta x|}} \quad 7.26c$$

dla n o postaci (7.24) i dla $\Delta x \ll L$. Dla $n \approx \frac{L}{2}$ funkcja p_1 nie zależy od n . Warunek $h_1 = h_L = 0$ odgrywa rolę przypięcia powierzchni, nie wpływając na

własności wnętrza układu , które pozostaje translacyjnie niezmiennicze w kierunku równoległym do powierzchni , w skali , której jednostka jest dużo mniejsza od L .

W obu przypadkach , skończonej wysokości M i skończonej szerokości L , skala zmienności funkcji p_1 zależy od M / przypadek A / i od L / przypadek B / tak , że

$$p_1(h) = p_s(h^*) \quad 7.27a$$

gdzie

$$h^* = \frac{h}{\bar{w}} \quad 7.27b$$

$$\bar{w} = 2(M+1)/\pi \quad / \text{ przypadek A , } M=\text{const} , L \rightarrow \infty / \quad 7.27c$$

$$\bar{w} = L^{1/2} (2 \sinh K)^{-1} \quad / \text{ przypadek B , } M \rightarrow \infty , L=\text{const} , h_1=h_L=0 / \quad 7.27d$$

Postać funkcji przeskalowanej $p_s(h^*)$ jest różna w obu przypadkach . W przypadku B , w którym warunki brzegowe są zgodne z założeniami teorii fal kapilarnych , postać p_1 jest zgodna z przewidywaniami tej teorii , a także z granicznym przypadkiem $K_L \rightarrow \infty$ rozwiązania Abraham i Reeda (1976) dla gazu sieciowego / rozdział III i V / , przy $p = -\nabla \zeta$. W przypadku A szerokość powierzchni \bar{w} jest porównywalna z szerokością całego układu . \bar{w} jest proporcjonalne do średniego kwadratowego przemieszczenia powierzchni $\langle z_G^2 \rangle^{1/2}$ / por. (3.11c) / Część "fal kapilarnych" / rozdział III / jest obcinana , co prowadzi do innej postaci dla $p_s(h^*)$.

Funkcja p_2 w obu przypadkach zawiera dwa człony. Jeden zależy od przeskalo-

wanych zmiennych z^* , drugi od nieprzeskalowanej różnicy wysokości Δz . Nieprzeskalowany człon ma identyczną postać w obu badanych przypadkach / por. (7.19) i (7.26c) /.

§3. Profil gęstości

Znajomość funkcji $p_1(h)$ pozwala na natychmiastowe wyznaczenie profilu gęstości, przy wykorzystaniu (1.22a). Otrzymamy:

Przypadek $f / M = \text{const}$, $L \rightarrow \infty$ / : skończona wysokość .

Na podstawie (7.18a)

$$\rho_s(z^*) = \frac{1}{2} - [z^* + \frac{1}{2} \sin(2z^*)] / \pi \quad 7.28a$$

$$z^* = \frac{\pi z}{2(M+1)} \quad 7.28b$$

Jak zauważono wyżej, szerokość warstwy powierzchniowej jest porównywalna z szerokością całego układu i profil gęstości ma postać różną od przewidywanej w teorii fal kapilarnych. Cechą wspólną jest zależność szerokości warstwy powierzchniowej od stabilizującej powierzchnię wielkości układu.

Przypadek $B / M \rightarrow \infty$, $L = \text{const}$, $h_1 = h_2 = 0$ / : skończona szerokość .

Na podstawie (7.26b) otrzymamy dla profilu gęstości postać przedstawioną wzorem (5.13), gdzie wykorzystana jest postać efektywnego napięcia powierzchniowego w modelu SOC (5.11). Ponieważ jest to układ o identycznych warunkach brzegowych, zgodności tej należało oczekiwać. Zauważmy jednak, że skala zmienności jest makroskopowa, o ile temperatura dla danego L nie jest zbyt niska.

§§1. Przejście fazowe szorstkości .

W analizowanym wyżej przypadku B skończonej szerokości układu L badane było asymptotyczne zachowanie funkcji p przy $L \rightarrow \infty$ i ustalonym $K /$ temperaturze $/$. Dla ustalonego δ , dużego L istnieją temperatury T , dla których otrzymane wyżej rozwiązanie nie jest słuszne. Wprowadzamy parametr δ wzorem:

$$e^{2K} = L^\delta \tag{7.29}$$

Dla $\delta > 1$, występujące we wzorach (7.23) całki mają postać :

$$I = \frac{(L/2)^{L/2}}{\pi} \int_0^\pi dk \cos(kh) (1 - 2 L^{-\delta} \cos k)^{-L/2} \tag{7.30}$$

która prowadzi do wyników:

$$p_1(k_{L/2}) = \begin{cases} \frac{I_h(1)}{I_0(2)} + O(L^{-1}) & \delta = 1 \\ I_h(k) + O(L^{2(1-\delta)k}) & \delta > 1 \end{cases} \tag{7.31a}$$

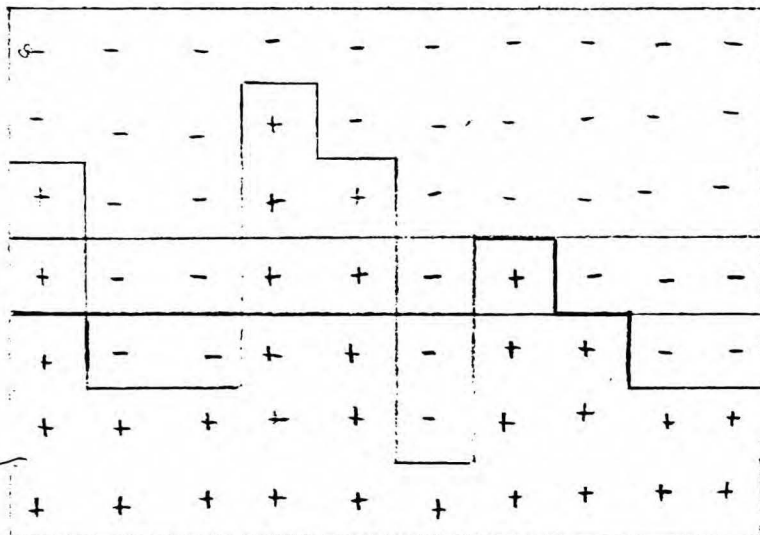
$$p_2(h_1, h_{1+\Delta x}) = \begin{cases} \frac{I_{h_1}(1) I_{\Delta h}(2\Delta x') I_{h_{1+\Delta x}}(1-2\Delta x')}{I_0(2)} & \Delta x' = \Delta x e^{-2K} \\ I_h(k) I_h(k') + O(\Delta x e^{-2K} (h+n)L^{n(1-\delta)}) & \Delta x \ll e^{2K} \end{cases} \tag{7.32a}$$

$I_H(n)$ jest zmodyfikowaną funkcją Bessela . Dla $\delta > 1$ $L = e^{\frac{\delta}{2K}} \gg L$ i obowiązuje dla p_2 postać (7.32b) , ponieważ $\Delta x < L \ll e^{\frac{\delta}{2K}}$.

Powyższe wzory świadczą o tym , że powierzchnia jest zlokalizowana i gładka dla $\delta > 1$. Funkcje p przy $\delta > 1$ różnią się jakościowo od odpowiednich funkcji przy $\delta < 1$. Dla $\delta > 1$ szerokość powierzchni staje się porównywalna ze stałą sieci , gdy tymczasem dla $\delta < 1$ jest ona rzędu $L^{1/2}$. Przedstawiony efekt przypomina przejście fazowe szorstkości / rozdział V §3 / . Ponieważ układ jest skończony i wszystkie wielkości są analityczne , efekt ten nie stanowi przejścia fazowego w zwykłym sensie / n.p. Huang (1978) / . Temperatura odpowiadająca parametrowi $\delta=1$, przy którym następuje zmiana zachowania asymptotycznego funkcji p ma wartość:

$$T_r = 2J (\log L)^{-1} \tag{7.33}$$

Znaleziona w poprzednim rozdziale temperatura quasi-krytyczna dla jednowymiarowego gazu sieciowego ma dokładnie taką samą postać / por. (6.39) / . Zauważmy , że pojedyncza pozioma warstwa w modelu SCS jest izomorficzna z jednowymiarowym modelem gazu sieciowego o stałej sprężenia K /rys.14 /



rys.14

Energia w wyciętej warstwie jest równa:

$$E^{SCS} = -2Kn \quad 7.34a$$

$$E^{s.sieć} = -Kn + K(L-n) = -2Kn + KL \quad 7.34b$$

gdzie n jest liczbą segmentów długiego konturu w wybranej warstwie. Z dokładnością do stałego wyrazu KL energie obliczone w obu modelach są równe, co wskazuje na ich izomorfizm. Równość temperatur T' i T_r świadczy o zachodzeniu quasi-przejścia szorstkości jednocześnie z quasi-przejściem fazowym w pojedynczej warstwie.

§4. Funkcja korelacyjna H

Funkcję H , definiowaną formalnie wzorem (1.12) wyznaczmy korzystając ze związku między H i P w jego dyskretnej wersji (1.22b) oraz z wyznaczonej w paragrafie 2 tego rozdziału jawnej postaci funkcji p_1 i p_2 .

§§1. Przypadek $A / M = \text{const}/$.

Z jawnej postaci p_1 i p_2 (7.18), korzystając z (7.1) i (1.22) otrzymamy:

$$H(\Delta x, z_1, z_2) = \frac{1}{2^{(M+1)}} \sum_{\substack{h_1 \geq z_1 \\ h_2 \geq z_2}}^M \cos(\alpha_0 h_1) \cos(\alpha_0 h_2) \sum_{n=1}^{2M+1} \left[\cos(n\alpha_0 \Delta x) + (-1)^{n+1} \cos[n\alpha_0 (h_1 + h_2)] \right] \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right) - \varphi(z_1) \varphi(z_2) \quad 7.35$$

Postać H zależy od wartości Δx . Rozpatrywane będą przypadki $\Delta x \ll M^2$ i $\Delta x = O(M^2)$

$$\Delta x \ll M^2$$

Funkcję $f(\rho) = \left[\frac{\lambda_1}{\lambda_1} \right]^{\Delta x} = \left[\frac{\cosh 2K - \cos \alpha_0}{\cosh 2K - \cos(\alpha_0 l)} \right]^{\Delta x}$ rozwijamy w

szereg Taylora względem $\rho = \cos(\alpha_0 l) - 1$ wokół zera:

$$f(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0) [2(\cos \alpha_0 l - 1)]^n}{n! 2^n} \quad 7.36$$

i korzystamy ze związku:

$$\sum_{l=1}^{2M+1} [2(\cos \alpha_0 l - 1)]^n \cos(\alpha_0 l k) g(l) = \Delta_2^n \sum_{l=1}^{2M+1} \cos(\alpha_0 l k) g(l) \quad 7.37$$

gdzie

$$\Delta_2 \tilde{g}(k) = \tilde{g}(k+1) + \tilde{g}(k-1) - 2\tilde{g}(k) \quad 7.38$$

Δ_2^n oznacza n-krotne działanie operacji Δ_2 . Otrzymamy:

$$H(\Delta x, z_1, z_2) = \sum_{\substack{h_1 \gg z_1 \\ h_2 \gg z_2}}^M \cos(\alpha_0 h_1) \cos(\alpha_0 h_2) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n! 2^n} \Delta_2^n \sum_{l=1}^{2M+1} \{ \cos(\alpha_0 l \Delta h) + (-1)^{1+l} \cos[\alpha_0 l(h_1 + h_2)] \} = f(z_1) f(z_2) \quad 7.39$$

Ponieważ:

$$\sum_{l=1}^{2M+1} \{ \cos(\alpha_0 l \Delta h) + (-1)^{l+1} \cos[\alpha_0 l (h_1 + h_2)] \} = 2(M+1) \delta^{Kr}(\Delta h) \quad 7.40$$

a ponadto

$$\left. \frac{df(p)}{dp} \right|_{p=0} = \frac{\Delta x}{2 \sinh^2 K} \quad 7.41$$

H przyjmuje postać:

$$H(\Delta x, z_1, z_2) = \frac{1}{2^{(M+1)^2}} \sum_{\substack{h_1 = z_1 \\ h_2 = z_2}}^M \cos(\alpha_0 h_1) \cos(\alpha_0 h_2) 2^{(M+1)} \left[\delta^{Kr}(\Delta h) + \frac{\Delta x}{4 \sinh K} \cdot \left(\delta^{Kr}(\Delta h+1) + \delta^{Kr}(\Delta h-1) - 2 \delta^{Kr}(\Delta h) \right) \right] - \varrho(z_1) \varrho(z_2) \quad 7.42$$

Dla $M \rightarrow \infty$ otrzymamy:

$$H(\Delta x, z_1, z_2) = \frac{1}{M+1} \sum_{h=\max(z_1, z_2)}^M \cos(\alpha_0 h) (1 - \Delta x^*) + O(\alpha_0^4 \Delta x^{*2}) - \varrho(z_1) \varrho(z_2) \quad 7.43$$

gdzie

$$\Delta x^* = \Delta x \xi_1^{*-1}, \quad \xi_1^* = 4 \sinh^2 K \alpha_0^{-2} \quad 7.44$$

związek szerokości warstwy niejednorodnej π i zasięgu korelacji ξ_1^* jest następujący /por. (7.27c) i (7.10)/

$$\xi_1^* \pi^{-2} = 2 \beta \Gamma \quad 7.45$$

gdzie efektywne napięcie powierzchniowe w modelu SCS dane jest wzorem (5.11)

Związek ten ma taką samą postać, jak odpowiedni związek otrzymany w teorii fal kapilarnych, przy powierzchni stabilizowanej zewnętrznym polem / por. (3.16)/

Na podstawie (7.18a) otrzymujemy:

$$\Pi(\Delta x, z_1, z_2) = H_S(\Delta x^*, z_1^*, z_2^*) \quad 7.46a$$

$$H_S(\Delta x^*, z_1^*, z_2^*) = \rho_S(\max(z_1^*, z_2^*)) (1 - \Delta x^*) - \rho_S(z_1^*) \rho_S(z_2^*) + O(\Delta x^{*2}) \quad 7.46b$$

$$\underline{\Delta x = O(M^2)}$$

Dla $\Delta x = \Delta x^* \sum_{l=1}^* \dots$, gdzie $\sum_{l=1}^*$ dane wzorem (7.44) jest jednocześnie równe $O(M^2)$, 7.47

mamy:

$$\left(\frac{\lambda_l}{\lambda_1}\right)^{\Delta x} = \left[\frac{a - \cos \alpha_0}{a - \cos(\alpha_0 l)} \right] \Delta x^* \beta 2^{\Gamma \alpha_0} \alpha_0^{-2} \quad 7.48$$

gdzie

$$a = \cosh 2K \quad 7.49$$

Dla $M \rightarrow \infty$ jest to bardzo szybko malejąca funkcja parametru l . Dla dużych l , $l \sim M$, wyrażenie to jest rzędu $O(M^{-l})$ przy dowolnym l . Dla $l \ll M$ (7.48) przybiera postać :

$$\left(\frac{\lambda_l}{\lambda_1}\right)^{\Delta x} = \left[1 - \frac{\alpha_0^2 (1 - l)}{2(a-1)} + O(l^4 \alpha_0^4) \right] \Delta x^* \beta 2^{\Gamma \alpha_0} \alpha_0^{-2} = e^{-(1-l)\Delta x^*} \quad \alpha_0 \rightarrow 0 \quad 7.50$$

Dla $\Delta x^* \rightarrow \infty$ z sumy po l w (7.35) istotny wkład pochodzi od dwóch pierwszych wyrazów, $l=1,2$. Odrzucając pozostałe wyrazy, dla $\Delta x^* \rightarrow \infty$ otrzymamy:

$$H(\Delta x, z_1, z_2) = \frac{1}{2(k+1)^2} \sum_{\substack{h_1=z_1 \\ h_2=z_2}}^M \sin(2\alpha_0 h_1) \sin(2\alpha_0 h_2) e^{-3\Delta x^*} \cos(\alpha_0 h_1) \cos(\alpha_0 h_2) + O(e^{-3\Delta x^*}) \quad (7.51)$$

Bezpośredni rachunek i porównanie z (7.13a) dają:

$$H_S(\Delta x^*, z_1^*, z_2^*) = \frac{1}{9\pi^2} p_{S,3/2}^*(z_1^*) p_{S,3/2}^*(z_2^*) e^{-3\Delta x^*} [1 + O(e^{-5\Delta x^*})] \quad (7.52)$$

W rozpatrywanym przypadku $A/M = \text{const}$ skończonej wysokości układu, funkcja H zależy od przeskalowanych zmiennych Δx^* i z^* / por. (7.44), (7.28) /.

Postać H_S jest jakościowo zgodna z postacią otrzymaną w teorii fal kapilarnych (3.13) dla $\Delta x^* \rightarrow \infty$ i dokładnie zgodna z przewidywaniami tej teorii dla $\Delta x \ll W^2$ / por. (7.46b) i (3.12) / . Przyczyną niezgodności (7.52) i (3.13) może być wspomniane poprzednio obcinanie części fal kapilarnych w układzie o skończonej wysokości .

Postać transformaty Fouriera funkcji H_S dla $k \rightarrow 0$ wyznaczymy na podstawie wzoru (7.52) . Posługiwanie się ścisłą postacią (7.35) prowadzi do takiej samej postaci dla transformaty Fouriera przy $k \rightarrow 0$, ale wymaga żmudnych rachunków.

Mamy:

$$\tilde{H}_S(k^*, z_1^*, z_2^*) = \int dx^* e^{ik^* x^*} e^{-2 x^{*2}} (9\pi^2)^{-1} p_{S,3/2}^*(z_1^*) p_{S,3/2}^*(z_2^*) \quad (7.53)$$

a stąd

$$\tilde{H}_S(k^*, z_1^*, z_2^*) = \frac{2 p_2^{3/2}(z_1^*) p_S^{3/2}(z_2^*)}{3(9 + k^{*2})} \quad 7.54a$$

gdzie

$$k^* = k \xi_1^* \quad 7.54b$$

Przy ξ_1^* zastąpionym przez ξ_c jest to postać podobna do otrzymanej w teorii fal kapilarnych / rozdział III, (3.14) / . W badanym tu przypadku powierzchnia była stabilizowana przez skończoną wysokość układu, a w teorii fal kapilarnych przez pole grawitacyjne. Pomimo różnicy w sposobie lokalizowania powierzchni, zachowanie funkcji korelacyjnej w przeskalowanych zmiennych Δx^* i z^* jest podobne.

§§2. Przypadek B / L=const /

W układzie o geometrii przedstawionej na rys.13, gdzie $M \rightarrow \infty$, $L=const$ i $h_1=h_L=0$ rozważane będą wyłącznie punkty odległe w kierunku poziomym o $\Delta x \ll L$ i leżące z dala od brzegów układu. Przy wyznaczaniu H korzystamy ponownie ze związku pomiędzy H i P (1.22) i z jawnej postaci funkcji p w przypadku B (7.26) Daje to nam:

$$H(\Delta x, z_1, z_2) = \frac{2 \sinh K}{L} \sum_{\substack{h_1=z_1 \\ h_2=z_2}}^{\infty} \exp \left[-2 \sinh K (h_1^2 + h_2^2) L^{-1} \right] \frac{(\cosh 2K - 1)}{\pi} \int_0^{\pi} dk \frac{\cos(k\Delta h)}{(\cosh 2K - \cos k)} \Delta x \quad 7.55.$$

Podobnie jak poprzednio rozwijamy funkcję $f(p) = \left[\frac{a-1}{a-\cos k} \right]^{\Delta x}$ względem $p = \cos k - 1$ wokół zera i korzystamy ze związków:

$$\int_0^{\pi} dk [2(\cos k - 1)]^n \cos(kx)g(k) = \Delta_2^n \int_0^{\pi} dk \cos(kx)g(k) \quad 7.56$$

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} dk \cos(kx) = \delta^{Kr}(x) \quad 7.57$$

Daje to dla H postać:

$$H(\Delta x, z_1, z_2) \approx \frac{2 \sinh K}{L} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\substack{h_1=z_1 \\ h_2=z_2}}^{\infty} \exp[-2 \sinh^2 K(h_1+h_2)L] \frac{f^{(n)}(0)}{n! 2^n} \Delta_2^n \delta^{Kr}(\Delta h) \quad 7.58$$

Uwzględnienie wyrazów z $n = 0, 1$ i wykorzystanie postaci pierwszej pochodnej funkcji $f(p)$ (7.41) i postaci profilu gęstości (5.13) prowadzi do wyniku:

$$H(\Delta x, z_1, z_2) = H_s(\Delta x^*, z_1^*, z_2^*) = \rho_s[\max(z_1^*, z_2^*)] (1 - \Delta x^*) - \rho_s(z_1^*) \rho_s(z_2^*) + O(\Delta x^{*2}) \quad 7.59$$

gdzie

$$\Delta x^* = \Delta x \sum_{\perp}^{*-1}, \quad \sum_{\perp}^* = L \quad 7.60$$

Związek szerokości powierzchni ∇ , danej w tym przypadku wzorem (7.27d) z zasięgiem korelacji w kierunku równoległym do powierzchni (7.60) ma postać (7.45). Postać H_s w funkcji przeskalowanych zmiennych Δx^* , z^* jest dokładnie taka, jak w przypadku powierzchni lokalizowanej przez skończoną wysokość M .

Przedstawione wyniki wskazują na uniwersalność funkcji H w warstwie powierzchniowej, gdy fluktuacje powierzchni są duże. Uniwersalność ta polega na

niezależności przeskalowanej funkcji $H_g(\Delta x, z_1^*, z_2^*)$ od sposobu lokalizacji powierzchni. Przez warunki zewnętrzne lokalizujące powierzchnię określone są makroskopowe skale zmienności Δx^* i z^* . Związek tych skal z zewnętrznymi warunkami podają wzory (7.44) i (7.23) dla układu o skończonej wysokości M , wzory (7.60) i (5.13b) dla układu o skończonej szerokości L i $h_1 = h_L = 0$ oraz wzory (3.12), (3.7) i (3.11) dla nieskończonego układu w polu grawitacyjnym g .

§5 Definicje nowych funkcji korelacyjnych warunkowych. ϕ

Jak wynika z poprzedniego paragrafu, funkcja H zależy od przeskalowanych odległości. Funkcja P natomiast zależy zarówno od przeskalowanych, jak i od nieprzeskalowanych zmiennych / por. (7.19) i (7.26c) /. Człon zależący od nieprzeskalowanych zmiennych jest jednakowy w obu badanych przypadkach A i B. Przy przechodzeniu do granicy termodynamicznej funkcja H_g pozostaje funkcją rzędu jedności, a funkcja $P \rightarrow 0$ w ten sam sposób, co funkcja p_1 .

W niniejszym paragrafie wprowadzimy nowe funkcje korelacyjne, w przeciwieństwie do P rzędu jedności w granicy termodynamicznej, ale jednocześnie zawierające informację o wewnętrznej strukturze powierzchni, znajdującą się w nieprzeskalowanym członie funkcji F . Funkcje te zostały nazwane funkcjami korelacyjnymi warunkowymi. Funkcja P_{cond} definiowana jest wzorem:

$$P_{\text{cond}}(\Delta x, z_1, z_2) = \frac{P(\Delta x, z_1, z_2)}{p(z_1)} = p(z_1)^{-1} \frac{\delta p(z_1)}{\delta [-\beta V_{\text{ext}}(z_2)]} \quad 7.61$$

funkcja odwrotna do P_{cond} , $Q_{\text{cond}} = P_{\text{cond}}^{-1}$ dana jest wzorem:

$$Q_{\text{cond}}(\Delta x, z_1, z_2) = p(z_2) Q(\Delta x, z_1, z_2) = p(z_2) \frac{\delta[-\beta V_{\text{ext}}(z_1)]}{\delta p(z_2)} \quad 7.61b$$

Z definicji (7.61) widać, że funkcja $F_{\text{cond}}(\Delta x, z_1, z_2)$ stanowi różnicę między prawdopodobieństwem warunkowym przechodzenia powierzchni przez położenie z_2 o ile przechodzi ona przez z_1 a prawdopodobieństwem przechodzenia powierzchni przez z_2 .

W oparciu o F_{cond} i Q_{cond} można wprowadzić funkcje H_{cond} i G_{cond} za pomocą związków analogicznych do (1.22b) i (1.23):

$$\nabla_1 \nabla_2 H_{\text{cond}}(\Delta x, z_1, z_2) = F_{\text{cond}}(\Delta x, z_1, z_2) \quad 7.62a$$

$$G_{\text{cond}}(\Delta x, z_1, z_2) = \nabla_1 \nabla_2 Q_{\text{cond}}(\Delta x, z_1, z_2) \quad 7.62b$$

Związek funkcji korelacyjnych warunkowych H_{cond} i G_{cond} ze zwykłymi funkcjami H i G ma postać / por. (7.62), (7.61) i (1.22), (1.23) /

$$G_{\text{cond}}(\Delta x, z_1, z_2) = -p(z_1) G(\Delta x, z_1, z_2) + \nabla p(z_1) p(z_1)^{-1} \sum_{h_1=z_1}^M G_{\text{cond}}(\Delta x, h_1, z_2) \quad 7.63a$$

$$H_{\text{cond}}(\Delta x, z_1, z_2) = \sum_{h_1=z_1}^M [p(h_1)]^{-1} [\nabla_1 H(h_1, \infty) - \nabla_1 H(h_1, z_2)] \quad 7.63b$$

Oprócz przedstawionych funkcji korelacyjnych warunkowych, które są niesymetryczne względem z_1 i z_2 , można wprowadzić zsymetryzowane funkcje oparte na P_{sym} , definiowanym następująco:

$$P_{\text{sym}}(\Delta x, z_1, z_2) = \frac{P(\Delta x, z_1, z_2)}{[p(z_1) p(z_2)]^{1/2}} \quad 7.64a$$

Funkcja $Q_{\text{sym}}(\Delta x, z_1, z_2)$ dana jest wzorem :

$$Q_{\text{sym}}(\Delta x, z_1, z_2) = [p(z_1) p(z_2)]^{1/2} Q(\Delta x, z_1, z_2) \quad 7.64b$$

Funkcje H_{sym} i C_{sym} wyprowadza się za pomocą związków analogicznych do (7.62)

W granicy nieskończonego układu i zerowego pola , $\mathbb{N} = \infty$, $\varrho = \text{const}$, w wyjściowej skali mikroskopowej $H = \text{const}$ a C nie istnieje , natomiast $P_{\text{cond}} = P_{\text{sym}}$ i $Q_{\text{cond}} = Q_{\text{sym}}$ są funkcjami różnic położenia , $\Delta z = |z_1 - z_2|$, $\Delta x = |x_1 - x_2|$. Definicje (7.62) dla funkcji $H_{\text{cond}} = H_{\text{sym}}$ i $C_{\text{cond}} = C_{\text{sym}}$ przybierają postać :

$$C_{\text{cond}}(\Delta x, \Delta z) = \nabla \nabla Q_{\text{cond}}(\Delta x, \Delta z) \quad 7.65a$$

$$\nabla \nabla H_{\text{cond}}(\Delta x, \Delta z) = P_{\text{cond}}(\Delta x, \Delta z) \quad 7.65b$$

Definicje funkcji korelacyjnych warunkowych nie są ograniczone wyłącznie do modelu SOS . W układach ciągłych definicje te mają taką samą postać , przy funkcjach p danych wzorami (1.22) , operacji ∇ zastąpionej przez gradient i sumowaniu zastąpionym przez całkowanie .

Jawna postać funkcji zdefiniowanych wyżej obliczona będzie dla modelu SOS w pozostałych paragrafach tego rozdziału.

§6. Jawna postać funkcji P_{cond} w modelu SCS.

Z definicji (7.51a) funkcji P_{cond} , jawnych postaci funkcji P i p w przypadkach A / $M = \text{const}$ / (7.19) i (7.18) i B / $L = \text{const}$ / (7.26) wynika , że

w granicy nieskończonego układu funkcja P_{cond} w obu przypadkach przybiera wspólną postać:

$$P_{\text{cond}}(\Delta x, z_1, z_2) = \frac{(\cosh 2K - 1)}{\pi} \int_0^{\pi} dk \frac{\cos(kah)}{(\cosh 2K - \cos k)} \quad 7.66$$

Z porównania z (5.31a) widać, że identyczną postać ma w granicy SOS obliczona przez Abrahama (1982), (1984) funkcja $p(x, y)$ stanowiąca prawdopodobieństwo przechodzenia długiego konturu przez punkt (x, y) w układzie o warunkach brzegowych przedstawionych na rys.8. Warunki brzegowe rozważane przez Abrahama są równoważne przypięciu powierzchni w położeniu $(0,0)$ i funkcja $p(x, y)$ przy tych warunkach brzegowych jest równa prawdopodobieństwu warunkowemu przechodzenia powierzchni przez (x,y) , o ile przechodzi ona przez $(0,0)$ w układzie o warunkach brzegowych przedstawionych na rys.7. Jeżeli rozmiary układu dążą do nieskończoności, to funkcja $p_1 \rightarrow 0$ i funkcja $p(x,y)$ Abrahama staje się równa funkcji $P_{\text{cond}}(x, y)$.

Funkcja P_{cond} zależy od nieprzeskalowanych zmiennych i istnieje w granicy termodynamicznej. Z rozwiązania Abrahama wynika, że w granicy SOS / por. (5.26) / postać P_{cond} pokrywa się dokładnie z prawdopodobieństwem deformacji powierzchni przedstawionej na rys.8 obliczonym w teorii kapilarnych przy napięciu powierzchniowym zależnym od kierunku powierzchni / (5.19), (5.20) /.

Postać asymptotyczna przy odległości w kierunku równoległym do powierzchni $\Delta x \rightarrow \infty$ jest dla P_{cond} następująca:

$$P_{\text{cond}}(\Delta x, \Delta h) = \frac{\sinh K}{\sqrt{\pi x}} \exp\left(-\sinh K \frac{\Delta h^2}{\Delta x}\right) \quad 7.67$$

Funkcja $P_{\text{cond}}(\Delta x, \Delta z)$ zanika dla dużych Δx jak $\Delta x^{-1/2}$ tak jak opisywane w rozdziale V podobnie definiowane funkcje korelacyjne.

§7. Jawna postać funkcji H_{cond} w modelu SCS.

W układzie translacyjnie niezmienniczym funkcja H_{cond} definiowana jest wzorem (7.65b). Na podstawie jawnego wyrażenia na P_{cond} (7.66), korzystając ze związku:

$$\nabla \nabla f(z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dk e^{ikz} \tilde{f}(k) 2(1 - \cos k) \quad 7.68$$

otrzymamy:

$$H_{\text{cond}}(\Delta x, \Delta z) = \frac{(\cosh 2K - 1)^{|\Delta x|}}{2\pi} \int_0^{2\pi} dk e^{ik\Delta z} [2(1 - \cos k)(\cosh 2K - \cos k)^{\Delta x}]^{-1} \quad 7.69$$

dla zerowego pola i nieskończonego układu. Transformata Fouriera funkcji H_{cond} w kierunku prostopadłym do powierzchni ma postać:

$$\tilde{H}_{\text{cond}}(\Delta x, k) = \left[\frac{\cosh 2K - 1}{\cosh 2K - \cos k} \right]^{|\Delta x|} [2(1 - \cos k)]^{-1} \xrightarrow{k \rightarrow 0} k^{-2} \quad 7.70$$

W kierunku prostopadłym do powierzchni funkcja H_{cond} ma nieskończony zasięg. Jej postać jest taka, jak postać transformaty Fouriera w kierunku równoległym do powierzchni w przypadku $\mathbb{N}=\infty$ / nieskończony układ i zerowe pole / funkcji H .

§8. Jawna postać funkcji korelacyjnych odwrotnych $\mathcal{C}_{\text{cond}}$ i $\mathcal{C}'_{\text{cond}}$ w modelu SCS.

Funkcję korelacyjną $\mathcal{C}_{\text{cond}}$ określa wzór:

$$\sum_{x_2, h_2} Q_{\text{cond}}(x_1 - x_2, h_1 - h_2) P_{\text{cond}}(x_2 - x_3, h_2 - h_3) = \overset{\text{Kr}}{\delta}(x_1 - x_3) \overset{\text{Kr}}{\delta}(h_1 - h_3) \quad 7.71$$

Fonieważ ma on postać konwolucji , dla transformat Fouriera zachodzi :

$$\sum_{x_2} \tilde{Q}_{\text{cond}}(x_1 - x_2, k) \tilde{P}_{\text{cond}}(x_2 - x_3, k) = \overset{\text{Kr}}{\delta}(x_1 - x_3) \quad 7.72$$

Transformata Fouriera funkcji P_{cond} , jak wynika z (7.66) ma postać :

$$\tilde{P}_{\text{cond}}(\Delta x, k) = s^{4x} \quad 7.73a$$

gdzie

$$s = \frac{\cosh 2K - 1}{\cosh 2K - \cos k} \quad 7.73b$$

z której wynika , że macierz $\tilde{Q}_{\text{cond}} = P_{\text{cond}}^{-1}$ jest macierzą trójdiagonalną / van Leeuwen i Hilhorst (1981) / , a więc jej równanie własne ma postać:

$$\tilde{Q}_{\text{cond}}(-1, k) \varphi(x-1) + \tilde{Q}_{\text{cond}}(0, k) \varphi(x) + \tilde{Q}_{\text{cond}}(1, k) \varphi(x+1) = \lambda^{-1} \varphi(x) \quad 7.74$$

gdzie $\varphi(x)$ jest x -tą składową wektora własnego \tilde{Q}_{cond} i P_{cond} , λ jest wartością własną P_{cond} . Z drugiej strony wektory własne P_{cond} spełniają rekurencję (7.5a) przy $q=s$ (7.73b) . Rozwiązanie równań (7.5a) i (7.74) ma postać:

$$Q_{\text{cond}}(\Delta x, k) = \begin{cases} 1 + (\cosh 2K - 1) \left[\frac{1}{\cos k - D} - \frac{1}{\cos k - 1} \right] & \Delta x = 0 \\ \frac{1}{2} (\cosh 2K - 1) \left[\frac{1}{\cos k - D} + \frac{1}{\cos k - 1} \right] & \Delta x = \pm 1 \\ 0 & \Delta x \geq 2 \end{cases}$$

gdzie

$$D = 2 \cosh 2K - 1$$

7.75

7.76

Funkcję $Q_{\text{cond}}(\Delta x, \Delta h)$ otrzymamy obliczając odpowiednie transformaty Fouriera.

Zachodzą równości:

$$\int_0^{2\pi} dk e^{ikh} (\cos k - a)^{-1} = - \frac{2\pi [a - (a^2 - 1)^{1/2}]^{|h|}}{(a^2 - 1)^{1/2}} \quad 7.77$$

$$\int_0^{2\pi} dk e^{ikh} (\cos k - 1)^{-1} = 2\pi |h| \quad 7.78$$

wykorzystanie ich pozwala znaleźć $Q_{\text{cond}}(\Delta x, \Delta h)$

$$Q_{\text{cond}}(\Delta x, \Delta h) = \begin{cases} \delta_{K\Delta h} - 2 \sinh^2 K \left[\frac{(D - Z)^{|\Delta h|}}{Z} + |\Delta h| \right] & \Delta x = 0 \\ - \sinh^2 K \left[\frac{(D - Z)^{|\Delta h|}}{Z} - |\Delta h| \right] & \Delta x = \pm 1 \\ 0 & \Delta x \geq 2 \end{cases} \quad 7.79a$$

$$Z = (D - 1)^{1/2}$$

7.79b

W układzie translacyjnie niezmienniczym funkcja C_{cond} definiowana jest wzorem (7.65a). Dwukrotne dokonanie operacji ∇ / (1.22d) / na funkcji C_{cond} danej wzorem (7.79) daje wynik :

$$C_{\text{cond}}(\Delta x, \Delta h) = \begin{cases} 2 \delta^{Kr}(\Delta h) - \delta^{Kr}(\Delta h+1) - \delta^{Kr}(\Delta h-1) + \frac{16 \sinh^4 K}{Z} (D-Z)^{|\Delta h|} & \Delta x=0 \\ -4 \sinh^2 K \delta^{Kr}(\Delta h) + \frac{32 \sinh^4 K}{Z} (D-Z)^{|\Delta h|} & \Delta x=\pm 1 \\ 0 & \Delta x \geq 2 \end{cases} \quad (7.80)$$

Momenty zerowy i drugi definiowane w dyskretnym przypadku przez :

$$C_0^{\text{cond}}(h) = \sum_x C_{\text{cond}}(x, h) \quad (7.81a)$$

$$C_2^{\text{cond}}(h) = \sum_x x^2 C_{\text{cond}}(x, h) \quad (7.81b)$$

istnieją i mają postać:

$$C_0^{\text{cond}}(\Delta h) = 2 - 8 \sinh^2 K \delta^{Kr}(\Delta h) - \delta^{Kr}(\Delta h+1) - \delta^{Kr}(\Delta h-1) + \frac{32 \sinh^4 K}{Z} (D-Z)^{|\Delta h|} \quad (7.82a)$$

$$C_2^{\text{cond}}(\Delta h) = 2 C_{\text{cond}}(1, \Delta h) \quad (7.82b)$$

Pojawiająca się tu nowa długość korelacji

$$\xi_{||} = [\log(D + Z)]^{-1} \quad 7.83$$

była zaobserwowana również przez Steckiego i Dudowicza (1985) w modelu SOS w obecności zewnętrznego pola g przy $g \rightarrow 0$. Długość ta jest inna niż ξ_b , jedynie w granicy $T \rightarrow 0$ / $K \rightarrow \infty$ / obie wielkości dążą do wspólnej wartości

$$\xi_{||}, \xi_b \xrightarrow{K \rightarrow \infty} \frac{1}{2K} \quad 7.84$$

Funkcje Q_{cond} i C_{cond} są obie krótkozasięgowe w kierunku równoległym do powierzchni, dla $\delta x \gg 2$ obie znikają. Tę samą własność ma funkcja C w modelu SOS w obecności zewnętrznego pola / Stecki (1984) /. W kierunku prostopadłym do powierzchni funkcja Q_{cond} rośnie jak $|\Delta h|$ dla dużych $|\Delta h|$, natomiast funkcja C_{cond} maleje eksponencjalnie, przy Δh zmieniającym się w mikroskopowej, niezależnej od warunków zewnętrznych skali, o jednostce $\xi_{||}$ (7.83).

Postać funkcji korelacyjnych warunkowych jest niezależna od sposobu lokalizacji powierzchni / jest identyczna w przypadkach A i B i niezależna od kolejności przechodzenia do granicy z szerokością L i wysokością M układu /. Skala zmienności tych funkcji także nie zależy od sposobu lokalizacji powierzchni, w przeciwieństwie do funkcji H i P , które zależą od odległości przeskalowanych w sposób wyznaczony przez zewnętrzne więzy lokalizujące powierzchnię.

Tak więc funkcje te wykazują uniwersalność nie tylko ze względu na niezależność od sposobu lokalizacji powierzchni postać jak zwykle funkcje korelacyjne, ale także ze względu na niezależność od sposobu lokalizacji i skończone w granicy termodynamicznej skali zmienności. Z tego powodu można je uważać za funkcje opisujące wewnętrzne własności powierzchni.

§9. Jawna postać funkcji korelacyjnej C w modelu SOS.

Związek funkcji C z funkcją C_{cond} podaje wzór (7.63a). W przypadkach A i B <http://rcin.org.pl>

skończonej wysokości M i skończonej szerokości L dla gradientu funkcji p_1 , na podstawie (7.16a) i (7.26b) mamy:

$$\nabla p(h) = O(W^{-3}) \quad 7.85$$

gdzie W jest odpowiednią szerokością powierzchni (7.27). Do takiego samego wniosku prowadzą $p(h)$ wyznaczone przez Abrahama i Reeda (1976) i van Leeuwena i Milhorsta (1981) oraz przewidywania teorii fal kapilarnych / n.p. Bedeaux i Weeks (1985) / / por. rozdziały V i III / . Ponieważ z kolei $p \sim W^{-1}$ (7.63a) przybiera postać asymptotyczną dla $W \rightarrow \infty$:

$$C_{\text{cond}}(\Delta x, \Delta h) = -p(h_1) C(\Delta x, h_1, h_2) + O(W^{-2}) \sum_{h=h_1}^M C_{\text{cond}}(\Delta x, h, h_2) \quad 7.86$$

Przy $W \rightarrow \infty$ $p(h)$ nie zależy od h dla h skończonych / dla $\frac{h}{W} \rightarrow 0$ / . Ponieważ C_{cond} jest krótkozasięgowa i rzędu jedności , występująca w (7.86) suma jest rzędu jedności . Stąd w granicy $W \rightarrow \infty$

$$C_{\text{cond}}(\Delta x, \Delta z) = -W^{-1} p_S(z_1^*) C(\Delta x, z_1, z_2) \quad 7.87$$

gdzie $p_S(z^*)$ jest przeskalowaną funkcją p . Z powyższego wynika , że funkcja C jest rzędu szerokości układu W , a więc jest rozbieżna przy polu $g \rightarrow 0$ i przy rozmiarach całego układu dążących do nieskończoności . Znane z literatury rozwiązania dla C dają $C \sim W$, zgodnie z otrzymanym tu wynikiem / Bedeaux i Weeks (1984) , Stecki i Dudowicz (1985) / .

W skali makroskopowej , $z^* = z/W$, w której zmienia się funkcja $\Pi = C^{-1}$, dla drugiego momentu C_{cond} otrzymany / por.(7.31) , (7.80) /

$$C_2^{\text{cond}}(z_1^*, z_2^*) = \left[-\delta^{\text{Kr}}(Wz^*) + \frac{\sinh K}{(D+1)^{1/2}} \frac{|z^* W|}{(D-Z)} \right] 4 \sinh^2 K \quad 7.88$$

co , po uwzględnieniu (7.87) dla drugiego momentu C w granicy $W \rightarrow \infty$, po bezpośrednich przekształceniach daje:

$$C_2(z_1^*, z_2^*) = \delta(z_1^* - z_2^*) 2\beta\Gamma p_S^{-1}(z_1^*) \quad 7.89$$

Postać C_2 w skali makroskopowej zgodna jest z wynikami Bedeaux i Weeks'a (1984) Autorzy ci odtwarzają z postaci C w skali makroskopowej C w skali mikroskopowej , otrzymując deltę / por.(3.15b) / co jest sprzeczne ze ścisłym wynikiem przedstawionym wyżej . Z (7.89) widać , że wyrażenie Zwanziga-Triezenberga (2.1) na efektywne napięcie powierzchniowe jest automatycznie spełnione.

§10 . Nowa postać formuły Zwanziga-Triezenberga dla efektywnego napięcia powierzchniowego.

Zastąpienie drugiego momentu funkcji C przez drugi moment C_{cond} zgodnie z (7.87) w wyrażeniu (2.1) daje

$$2\beta\Gamma = - \sum_{z=-\infty}^{\infty} p(z) \sum_{\Delta z=-\infty}^{\infty} C_2^{\text{cond}}(\Delta z) = (\rho_1 - \rho_g) \sum_{\Delta z=-\infty}^{\infty} C_2^{\text{cond}}(\Delta z) \quad 7.90$$

w przypadku ciągłym sumy należy zastąpić całkami . Związek (2.3) przy C zastąpionej przez C_{cond} przybiera postać:

$$m_g = \sum_{z_2} p(z_2) C_0^{\text{cond}}(z_1 - z_2) \quad 7.92$$

Dla $g=0$, $\beta\Gamma$ danego przez (5.11), momentów C_{cond} danych przez (7.82), powyższe

związki są spełnione, co można sprawdzić bezpośrednim rachunkiem. Funkcja C_{cond} istnieje i jest skończona w granicy $W \rightarrow \infty$, w przeciwieństwie do C . W oryginalnej postaci wyrażenia Z-T (2.1) na napięcie powierzchniowe występuje iloczyn wielkości dążącej do zera / to znaczy $p(z)$ / i wielkości dążącej do nieskończoności / $C_2(z_1, z_2)$ / przy szerokości powierzchni $W \rightarrow \infty$, zgodnie z założeniami przyjmowanymi przy wyprowadzaniu (2.1) / rozdział II / . W wersji (7.90) wyrażenia Z-T występuje natomiast skończona funkcja C_{cond} i postać ta może być stosowana od razu w granicy termodynamicznej i przy zerowym polu ξ .

ROZDZIAŁ VIII

PODSUMOWANIE

Wyniki literaturowe i otrzymane w niniejszej pracy pozwalają na wyciągnięcie szeregu wniosków dotyczących funkcji korelacyjnych jedno- i dwupunktowych w warstwie powierzchniowej. Po pierwsze, przy szerokości warstwy powierzchniowej $\mathbb{W} \rightarrow \infty$, znane postaci funkcji korelacyjnych sugerują zachodzenie hipotezy skalowania,

Hipoteza skalowania w warstwie powierzchniowej.

Ścisłe wyniki Abrahama i Reeda (1976), van Leeuwena i Hilhorsta (1981) /rozdział V/ oraz otrzymane w niniejszej pracy / rozdział VII / świadczą o tym, że profil gęstości zmienia się w makroskopowej skali, którą wyznacza sposób lokalizacji powierzchni.

Podobnie, ścisłe wyniki otrzymane w modelu SCS dla H wskazują na skalowanie odległości / rozdział VII / . Funkcje zmieniające się w skali determinowanej przez sposób lokalizacji powierzchni otrzymywane są też w teorii fal kapilarnych w obecności pola g i przy skończonej szerokości / polu powierzchni w trzech wymiarach / układu .

Zgodnie z hipotezą skalowania opisywane funkcje mają postać:

$$\varphi(z) = \varphi_S(z^*) \quad \text{8.1a}$$

$$H(\Delta R, z_1, z_2) = H_S(\Delta R^*, z_1^*, z_2^*) \quad \text{8.1b}$$

gdzie \underline{R} leży w płaszczyźnie powierzchni $z = 0$, a przeskalowane odległości mają postać:

$$z^* = z / W \tag{8.2}$$

W jest szerokością warstwy powierzchniowej i zależy od sposobu lokalizacji powierzchni

$$W = 2(M+1) / \pi \tag{8.3a}$$

dla powierzchni zlokalizowanej przez skończoną wysokość układu M

$$W = L^{\sigma/2} / (2\beta\Gamma)^{1/2} \tag{8.3b}$$

dla powierzchni zlokalizowanej przez skończoną szerokość układu L i przypięcie na brzegu / $h_1=h_L=0$ /

$$W = (2\sigma\beta\Gamma)^{-1/4} \tag{8.3c}$$

dla powierzchni stabilizowanej polem grawitacyjnym g .

W kierunku równoległym do powierzchni

$$R^* = R / \xi_{\perp}^* \tag{8.4}$$

ξ_{\perp}^* jest zasięgiem korelacji w kierunku równoległym do powierzchni i tak jak szerokość warstwy powierzchniowej zależy od warunków zewnętrznych. We wszystkich znanych przypadkach, dla pola g / Weeks (1985)/ i dla skończonych rozmiarów układu / rozdział VII / pomiędzy W a ξ_{\perp}^* istnieje taki sam związek:

$$W^2 \xi_{\perp}^{*-1} = 2\beta\Gamma \tag{8.5}$$

Wyjąwszy przypadek skończonej wysokości układu, w którym szerokość warstwy powierzchniowej jest porównywalna z wysokością całego układu, jawna postać przeskalowanych funkcji jest jednakowa i zgodna z teorią fal kapilarnych

niezależnie od sposobu lokalizacji powierzchni . Funkcje te mają postać:

$$\rho_S(z^*) = \rho_E + (\rho_1 - \rho_E) \int_{z^*}^{\infty} dt e^{-t^2} \quad 8.6a$$

$$H_S(\Delta x^*, z_1^*, z_2^*) \underset{\Delta x^* \rightarrow \infty}{=} \rho_S(z_1^*) \rho_S(z_2^*) e^{-\Delta x^*} \quad 8.6b$$

$$H_S(\Delta x^*, z_1^*, z_2^*) \underset{\Delta x^* \rightarrow 0}{=} (\rho(z_{\max}^*) - \rho_1)(\rho_E - \rho(z_{\min}^*)) \quad 8.6c$$

$$C_2(\Delta z^*) = \delta(\Delta z^*) 2\beta \Gamma \rho_S^{-1}(z_1^*) \quad 8.6d$$

Dla $M = \text{const}$ pozostają słuszne wzory (8.6c,d) , natomiast (8.6a,b) zgadzają się ze ścisłymi postaciami (7.28) i (7.52) jakościowo.

W funkcji przeskalowanych zmiennych Δx^* , z^* jedno- i dwupunktowe funkcje korelacyjne mają wspólną postać przy różnych warunkach zewnętrznych lokalizujących powierzchnię. Są to więc funkcje uniwersalne , niezależne od pola i rozmiarów układu.

Wewnętrzne własności warstwy powierzchniowej

Zwykle funkcje korelacyjne są uniwersalnymi funkcjami przeskalowanych zmiennych , jednak nie stanowią wielkości wewnętrznych , ponieważ ich skale zmienności wyznaczone są przez sposób lokalizacji powierzchni. Do opisu gołej powierzchni, z odseparowanymi fluktuacjami położenia , wprowadzono nowe wielkości : goły profil gęstości / §4 rozdział V i rozdział VI / i funkcje korelacyjne warunkowe / rozdział VII / .

Goły profil gęstości powstaje przez usunięcie fluktuacji powierzchni. Różne sposoby eliminacji fluktuacji powierzchni dają jakościowo zgodne wyniki / rozdział V §4 i rozdział VI / . Goły profil gęstości jest funkcją zmieniającą się w skali niezależnej od warunków zewnętrznych . Wewnętrzna szerokość powierzchni , utożsamiana z obszarem , na którym gradient nagiego profilu jest duży , jest w niskich temperaturach rzędu kilku średnic atomu . Wyniki te są zgodne z przewidywaniami teorii van der Waalsa .

Wewnętrzne funkcje korelacyjne , definiowane w paragrafie 5 rozdziału VII są również funkcjami nie podlegającymi makroskopowemu skalowaniu .W obszarze asymptotycznym dużych rozmiarów i słabych pól mają one identyczną postać , niezależnie od warunków zewnętrznych . Istnieją w granicy nieskończonego układu i zerowego pola , z wyjątkiem rozbieżnej funkcji H_{cond} . Funkcja C_{cond} jest krótkozasięgowa w kierunkach prostopadłym i równoległym do powierzchni . W kierunku prostopadłym do powierzchni zanika w skali wyznaczonej przez nową długość korelacji , niezależną od warunków zewnętrznych i różną od objętościowej długości korelacji ξ_b , daną wzorem (7.83) . Zerowy i drugi moment C_{cond} istnieją .

ZESTAWIENIE NAJWAŻNIEJSZYCH WYNIKÓW PRACY

- I Rozwiązano ściśle jednowymiarowy gaz sieciowy w zespole kanonicznym, w tym:
- 1 Znalaziono funkcję korelacyjną h przy cyklicznych warunkach brzegowych (6.25b) i profil gęstości / magnetyzację w równoważnym modelu Isinga/ przy przeciwstawnych warunkach brzegowych (6.25a) w układzie o skończonej długości M .
 - 2 Przeprowadzono analizę asymptotyczną dla $M \rightarrow \infty$ wielkości wymienionych w p.1
 - i/ wyznaczono wartość temperatury quasi-krytycznej (6.39) oraz przedział temperatur, oddzielający dla danego M obszar jedno- od dwufazowego (6.103)
 - ii/ otrzymano postać asymptotyczną funkcji h w obszarze jednofazowym dla dowolnej odległości x ; przy $x \rightarrow \infty$ postać ta pokrywa się ściśle ze znaną z literatury funkcją h w układzie zamkniętym dla dużych x . Wynik przedstawiony jest wzorem (6.64)
 - iii/ w obszarze dwufazowym zbadano zachowanie asymptotyczne $h(M/2)$ przy $M \rightarrow \infty$ i otrzymano postać (6.99a)
 - i / wyznaczono gęstość /magnetyzację w punkcie $x = M/2$ w obszarze asymptotycznym $M \rightarrow \infty$ powyżej i poniżej temperatury quasi-krytycznej (6.61) i (6.95)
 - / znalaziono wykładnik krytyczny β (6.108)
 - 3 Stwierdzono, że ustalenie liczby cząstek w jednowymiarowym gazie sieciowym prowadzi do lokalizacji warstwy powierzchniowej w obszarze o szerokości porównywalnej ze stałą sieci dla temperatur niższych od temperatury quasi-krytycznej $T^*(M)$.
- II Przeprowadzono szczegółową analizę funkcji korelacyjnych jedno- i dwupunktowych w modelu SOS przy znikającym polu zewnętrznym.

1. Wyznaczono prawdopodobieństwo $p_1(h)$ i prawdopodobieństwo łączne $p_2(h_1, h_{1+\Delta x})$ przechodzenia powierzchni przez zadane położenia w układzie o skończonych rozmiarach. Zbadano przypadki graniczne:
 - i/ przypadek $A/M=\text{const}$ / nieskończona szerokość i ustalona wysokość M . Funkcje p_1 i p_2 dane są wzorami (7.18) i (7.19)
 - ii/ przypadek $B/L=\text{const}$ / nieskończona wysokość i ustalona szerokość L przy $h_1=h_L=0$. Funkcje p_1 i p_2 dane są wzorami (7.23) i (7.26)
2. Znalaziono profil gęstości i funkcję korelacyjną H w obu przypadkach A i B i otrzymano wyniki przedstawione wzorami (7.28), (7.46) i (7.52) w przypadku A i (5.13) i (7.59) w przypadku B. Stwierdzono, że funkcje te zależą od przeskalowanych odległości. Skale zmienności wyznaczone są przez rozmiary układu. W kierunku prostopadłym do powierzchni funkcja H zmienia się w tej samej skali, co profil gęstości. Jednostką długości w tym kierunku jest szerokość warstwy powierzchniowej W dana przez (7.27c) w przypadku A oraz przez (7.27d) w przypadku B. Zasięg korelacji w kierunku równoległym do powierzchni wiąże się z szerokością warstwy powierzchniowej zgodnie z (7.45) w obu przypadkach. Jak przewiduje teoria fal kapilarnych, związek ten ma taką samą postać w obecności pola zewnętrznego.
3. Zaobserwowano zachodzenie quasi-przejęcia fazowego szorstkości w układzie $B/L=\text{const}$. Temperatura przejścia dana jest wzorem (7.33). Poniżej tej temperatury funkcje p_1 i p_2 mają postać (7.31) i (7.32)
4. Wprowadzono nowe funkcje korelacyjne warunkowe, oparte na prawdopodobieństwie warunkowym przechodzenia powierzchni przez zadane położenia. Definicje tych funkcji dane są przez (7.61) i (7.62), a ich związek z funkcjami H i C dany jest wzorami (7.63).
5. Znalaziono jawną postać funkcji P_{cond} (7.65), Q_{cond} (7.79), H_{cond} (7.70) i C_{cond} (7.80) w granicznym przypadku nieskończonego układu. Dla C_{cond} przedstawiono postać dwóch pierwszych momentów (7.82).

6. Wyznaczono długość korelacji w kierunku prostopadłym do powierzchni, charakteryzującą zanik funkcji C_{cond} w tym kierunku (7.83). Długość ta nie zależy od rozmiarów układu i jest różna od objętościowego zasięgu korelacji.
7. Otrzymano jawną postać funkcji C w makroskopowej skali, której jednostką jest szerokość powierzchni W . Wynik, zgodny z przewidywaniami teorii fal kapilarnych przedstawia wzór (7.89).
8. Przedstawiono wyrażenie Zwanziga-Triezenberga na efektywne napięcie powierzchniowe w nowej postaci, zawierającej funkcję C_{cond} (7.90). W postaci tej występują wyłącznie wielkości skończone w granicy zerowego pola i nieskończonego układu. Stwierdzono, że dla wielkości obliczonych ściśle w modelu SCS związek (7.90) jest spełniony.

LITERATURA

- D.B.Abraham (1980) , Phys.Rev.Lett. 44 , 1165
- D.B.Abraham (1981) , Phys.Rev.Lett. 47 , 545
- D.B.Abraham (1982) , Phys.Rev.B 25 , 4922
- D.B.Abraham (1984) , Physica 124 A , 1
- D.B.Abraham (1984) , Phys.Rev.B 29 , 525
- D.B.Abraham , G.Gallavotti i A.Martin-Lof (1973),Physica 65 A , 73
- D.B.Abraham i M.E.Issigoni (1979), J.Phys.A 12,L125
- D.B.Abraham i M.E.Issigoni (1980), J.Phys.A 13 , L89
- D.B.Abraham i A.Martin-Lof (1973), Commun.math Phys. 32,245
- D.B.Abraham i P.Reed (1974) Phys.Rev.Lett. 33 , 377
- D.B.Abraham i P.Reed (1976) Commun. math. Phys. 49 ,35
- D.B.Abraham i P.Reed (1977) J.Phys. 10 A ,L121
- M.Aizenmann (1979) Phys.Rev.Lett 43 , 407
- D.Bedeaux i J.Weeks (1985) J.Chem.Phys. 82 , 972
- H.van Beijeren (1975) Commun.math.Phys. 40 , 1
- G.Bennettin, G.Gallavotti, G.Jona-Lasino i A.L.Stella (1973) Commun.math.Phys.
30 , 45
- J.Bricmont, J.L.Lebowitz i C.E.Pfister (1981) J.stat.Phys. 26 , 313
- N.G.de Bruijn (1961) "Asymptotic Methods in Analysis" / Amsterdam ,
North-Holland Publ. Co. /
- F.P.Buff, R.A.Lovett i F.H.Stillinger (1965) Phys.Rev.Lett. 15 , 621
- T.W.Burckhard (1981) J.Phys.A 14 , L63
- W.J.Camp i M.E.Fisher (1972) Phys.Rev.B 6 , 946
- S.T.Chui i J.D.Weeks (1981) Phys.Rev. B 23 , 2438
- A.Ciach (1985) J.stat.Phys. 40 , 593
- A.Ciach (1986) Phys.Rev.B, przyjęte do druku
- R.L.Dobrushin (1968) Teoriya Veroyatnostlii ill Primeneniya 12 , 201

- J.Dudowicz (1984) Acta Phys.Polonica A66 , 17
- J.Dudowicz i J.Stecki (1985) J.Phys. A w druku
- R.Evans (1979) Adv.Phys. 28 , 143
- R.P.Feynmann (1980) "Mechanika statystyczna" PWN , Warszawa
- M.P.A.Fisher, D.S.Fisher i J.D.Weeks (1982) Phys.Rev.Lett. 48 , 36
- S.Fisk, B.Widom (1969) J.Chem.Phys. 50 , 3219
- G.Gallavotti (1972) Commun.math.Phys. 27 , 103
- G.Gallavotti i Martin-Löf (1972) Commun.math.Phys. 25 ; 87
- Y.Higuchi (1973) Proceedings of Estergom conference on random fields
- K.Huang (1978) "Mechanika statystyczna" PWN , Warszawa
- D.Jasnow i J.Rudnick (1978) Phys.Rev.Lett. 41 , 698
- H.A.Kramers i G.H.Wannier (1941) Phys.Rev. 60 , 252, 263
- D.M.Kroll (1981) Z.Phys.B 41 , 345
- J.L.Lebowitz (1977) J.stat.Phys. 16 , 463
- J.L.Lebowitz i J.K.Percus (1961) Phys.Rev. 122 , 1675
- J.L.Lebowitz i J.K.Percus (1963) J.Math.Phys. 4 , 116
- J.M.J.van Leeuwen i H.J.Hilhorst (1981) Physica A 107 , 319
- R.A.Lovett , C.Y. Mou i F.P.Buff (1976) J.Chem.Phys. 65 , 570
- A.Mandalstam (1913) L.Ann.Phys. 41 , 109
- A.Martin-Löf (1972) Commun.math.Phys. 24 , 253
- A.Messenger i S.Miracle-Sole (1975) Commun.math.Phys. 42 , 137
- S.Miracle-Sole (1972) Phys.Rev.B 5 , 2555
- L.Onsager (1944) Phys.Rev. 65,117
- L.Onsager (1949) Nuovo Cimento /suppl./ 6 , 261
- L.S.Ornstein i F.Zernike (1914) Proc.Acad.Sci. Amsterdam 17 , 793
- J.K.Percus (1972) "Combinatorial Methods" Applied Math. Science 4
/ Springer Verlag /
- J.K.Percus (1984) J.Chem.Phys. 81 , 452

- J.S.Rowlinson i B.Widom (1982) "Molecular Theory of Capillarity"
/Oxford : Clarendon /
- J.Stecki (1984) Proc.R.Soc. A 394 , 279
- J.Stecki i J.Dudowicz (1984) J.Phys.A 11 , L497
- J.Stecki i J.Dudowicz (1985) J.Phys.A 13
- J.Stecki i J.Dudowicz (1985) w "Fluid Interfacial Phenomena" /ed. C.J.Croxtan/
- J.Stecki , A.Ciach i J.Dudowicz (1986) wysłane do Phys.Rev.Lett.
- H.N.V.Temperley (1952) Proc.Cambridge Phil.Soc. 48 , 683
- D.S.Triezenberg i R.Zwanzig (1972) Phys.Rev.Lett. 23 , 1183
- M.Vallade i J.Lajzerowicz (1981) J.Physique 42 , 1505
- J.D. van der Waals (1894) Zeit.Phys.Chem. 13 , 657
- P.G.Watson (1972) w "Phase Transitions and Critical Phenomena" Vol.2
/ed. C.Domb i M.S.Green , Academic Press, London /
- J.D.Weeks (1977) J.Chem.Phys. 127, A1441
- J.D.Weeks (1984) Phys.Rev.Lett. 52 , 2160
- M.S.Nertheim (1976) J.Chem.Phys. 65 , 2377
- E.Widom (1965) J.Chem.Phys. 43 , 3892
- B.Widom (1972) w"Phase Transitions and Critical Phenomena" Vol.2
/ ed. C.Domb i M.S.Green , Academic Press, London/
- C.N.Yang (1952) Phys.Rev. 85 , 808
- A.J.M.Yang , P.D.Fleming i J.H.Gibbs (1976) J.Chem.Phys. 64 , 3732
- J.Zittartz (1967) Phys.Rev. 154 , 529

DODATEK A

DIAGONALIZACJA MACIERZY PRZEJŚCIA T'_k

Macierz przejścia T'_k definiowaną wzorem (6.14) przedstawimy w postaci

$$T'_k = e^{-K} \mathbf{A} \quad \text{A1}$$

gdzie

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} A & 1 \\ 1 & A^* \end{bmatrix}, \quad A = e^{2K-ik} \quad \text{A2}$$

Dowolną potęgę macierzy \mathbf{A} znajdziemy za pomocą wzoru:

$$\mathbf{A}^n = \mathbf{U} \begin{bmatrix} \lambda_1^n & 0 \\ 0 & \lambda_2^n \end{bmatrix} \mathbf{U}^{-1} \quad \text{A3}$$

gdzie λ są wartościami własnymi, a \mathbf{U} macierzą przejścia z bazy własnej do wyjściowej. Wartości własne spełniają równanie własne postaci:

$$\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}) = 0 \quad \text{A4}$$

które daje:

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} (A + A^* \pm \sqrt{\Delta}) \quad \text{A5}$$

gdzie

$$\Delta = (A - A^*)^2 + 4 \quad \text{A6}$$

Wykorzystanie (A2) pozwala napisać λ w jawnej postaci:

$$\lambda_{1,2} = \frac{2K}{\dots} f_{1,2}$$

gdzie

$$e_{1,2} = \cos k \pm (\cos k - b)^{1/2}$$

A8 a

$$b = 1 - e^{-4K}$$

A8b

Wektory własne \mathbf{A} o postaci $\begin{bmatrix} 1 \\ a_i \end{bmatrix}$, $i=1,2$ spełniają równanie

$$\begin{bmatrix} A-\lambda & 1 \\ 1 & A-\lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ a \end{bmatrix} = 0$$

A9

którego rozwiązaniami są liczby

$$e_{1,2} = \frac{A - A \pm \sqrt{\Delta}}{2} = \left[i \sin k \pm (\cos k - b)^{1/2} \right] e^{2K}$$

A10

Macierze \mathbf{U} i \mathbf{U}^{-1} mają postać:

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ a_1 & a_2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{U}^{-1} = \frac{1}{a_1 - a_2} \begin{bmatrix} -a_2 & 1 \\ a_1 & -1 \end{bmatrix}$$

A11

Stąd i z (A3) otrzymujemy

$$T(1,1) = e^{Kx} \frac{a_1 f_2^x - a_2 f_1^x}{a_1 - a_2}$$

A12a

$$T(-1,-1) = e^{Kx} \frac{a_1 f_1^x - a_2 f_2^x}{a_1 - a_2}$$

A12b

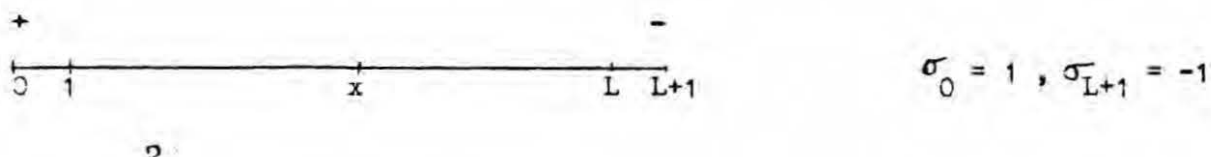
$$T^n(1, -1) = T^n(-1, 1) = e^{Kx} \frac{f_1^x - f_2^x}{a_1 - a_2} \quad A1 \leq c$$

Wykorzystując jawną postać a_i i f_i (A10) i (4.3) otrzymamy T^n w postaci przedstawionej wzorami (6.15)

DODATEK B

PROFIL GĘSTOŚCI W JEDNOWYMIAROWYM GAZIE SIECIOWYM PRZY PRZECIWSZTANNYCH WARUNKACH BRZEGOWYCH

W układzie o przeciwstawnych warunkach brzegowych, przedstawionym na rysunku



średnia gęstość w węzle x dana jest wzorem:

$$\langle \sigma_x \rangle_{+-} = Z_{+-}^{-1} \sum_{\sigma_1, \sigma_x, \sigma_L} e^{K\sigma_1} T(\sigma_1, \sigma_x)^{x-1} \sigma_x T(\sigma_x, \sigma_L)^{L-x} e^{-K\sigma_L} \quad B1$$

gdzie suma stanów Z_{+-} ma postać:

$$Z_{+-} = \sum_{\sigma_1, \sigma_L} e^{K\sigma_1} T(\sigma_1, \sigma_L)^{L-1} e^{-K\sigma_L} \quad B2$$

natomiast T jest macierzą przejścia

$$T(\sigma_1, \sigma_2) = e^{K\sigma_1 \sigma_2} \quad B3$$

Rozwiązanie prostego zagadnienia własnego dla T znajduje się n.p. w podręczniku: Huang(1973). Postać T^n jest następująca:

$$T^n = \begin{bmatrix} \binom{n}{\lambda_1 + \lambda_2} & \binom{n}{\lambda_1 - \lambda_2} \\ \binom{n}{\lambda_1 - \lambda_2} & \binom{n}{\lambda_1 + \lambda_2} \end{bmatrix} \quad \text{B4}$$

gdzie wartości własne λ są następujące

$$\lambda_1 = 2 \cosh K \quad \text{B5}$$

$$\lambda_2 = 2 \sinh K$$

Sumowanie po wszystkich wartościach $\sigma_1, \sigma_x, \sigma_L$ w (B1) i po σ, σ_L w (B2), wykorzystanie postaci T^n dla $n=x, L-x, L-1$ daje:

$$\langle \sigma_x \rangle = \frac{\sinh 2K \left(\lambda_2^{x-1} \lambda_1^{L-x} - \lambda_2^{L-x} \lambda_1^{x-1} \right)}{\lambda_1^{L-1} (1 + \cosh 2K) + \lambda_2^{L-1} (1 - \cosh 2K)} \quad \text{B6}$$

Ponieważ $\frac{\lambda_2}{\lambda_1} = \tanh K$, otrzymamy:

$$\langle \sigma_x \rangle = \frac{\tanh K^x - \tanh^{L-x+1} K}{1 - \tanh K} \quad \text{B7}$$

DOBATEK C

SUMOWANIE SZEREGU

$$\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{2^n n! n}$$

Przez $(2n-1)!!$ oznaczamy iloczyn $1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2n-1)$. Aby znaleźć sumę szeregu powyższej postaci zauważamy po pierwsze związek:

$$\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{2^n n! n} x^n = \int_0^x dt \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{2^n n!} x^{n-1} \quad (1)$$

Z drugiej strony zachodzi:

$$(1+x)^{-1/2} = 1 + x \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{2^n n!} x^{n-1} \quad (2)$$

Na podstawie powyższych równości otrzymujemy:

$$\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{2^n n! n} = \int_0^1 dt \frac{(t+1)^{-1/2} - 1}{t} \quad (3)$$

Występująca w powyższym wzorze całka może być łatwo obliczona. Wynik jest następujący:

$$\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{2^n n! n} = -2 [\log(\sqrt{2} + 1) - \log 2] \quad (4)$$

DODATEK D

POSTAĆ ASYMPTOTYCZNA PRZY $n \rightarrow \infty$ CAŁKI $\int_0^{\pi} dk \cos(kh) e^{-n \log(a-\cos k)}$

W przypadku $n \rightarrow \infty$ czynnik $e^{-n \log(a-\cos k)}$ jest bardzo szybko malejącą funkcją parametru k . Dlatego, ponieważ funkcja $\cos(kh)$ jest ograniczona, główny wkład do poszukiwanej całki pochodzi z małego otoczenia zera, w którym obowiązuje rozwinięcie:

$$n \log(a-\cos k) = n \log(a-1) + \frac{n k^2}{2(a-1)} + O(nk^4) \quad D1$$

o ile $k \ll n^{-1/4}$

W obszarze asymptotycznym $n \rightarrow \infty$ mamy więc:

$$\int_0^{\pi} dk \cos(kh) e^{-n \log(a-\cos k)} \underset{n \rightarrow \infty}{=} (a-1)^{-n} \int_0^{\epsilon} dk \cos(kh) e^{-n \frac{k^2}{2(a-1)}} (1 + O(nk^4))$$

$\epsilon \sim n^{-1/4}$

D2

Ponieważ całka:

$$\int_{\epsilon}^{\infty} dk \cos(kh) e^{-n \frac{k^2}{2(a-1)}} = O(n^{-I}) \quad \text{dla dowolnego } I, \text{ o ile } \epsilon \gg n^{-1/2}$$

możemy:

$$\int_0^{\pi} dk \frac{\cos(kh)}{(\epsilon - \cos k)^n} \underset{n \rightarrow \infty}{=} (a-1)^{-n} \int_0^{\infty} dk \cos(kh) e^{-n \frac{k^2}{2(a-1)}} [1 + O(nk^4)]$$

D3

Znajdując jawną postać stojącej po prawej stronie powyższej równości całki
otrzymamy:

$$\int_0^{\pi} dk \frac{\cos(kh)}{(a - \cos k)^n} =_{n \rightarrow \infty} (a-1)^{-n} \frac{1}{2} \left[\frac{2\pi(a-1)}{n} \right]^{1/2} \cdot \exp \left[- \frac{h^2 (a-1)}{2n} \right] [1 + O(n)^{-2}]$$

D4



B.250/86

Biblioteka Instytutu Chemii Fizycznej PAN

F-B.250/86



7000000008609