

АНОТАЦІЯ

Гончар Ю.-І.-М.Н. Особливості скейлінгу при фазових переходах вище критичної вимірності та описі денатурації ДНК.— Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 — Фізика та астрономія. — Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів, 2023.

Дисертація присвячена вивченню принципів скейлінгу та універсальності в критичних явищах, які є фундаментальними концепціями в багатьох ділянках науки. В теорії критичних явищ гіпотеза скейлінгу стверджує, що термодинамічні потенціали є узагальненими однорідними функціями відповідних змінних поблизу критичної точки, а універсальність означає, що поведінка системи не залежить від деталей і мікроскопічної структури системи. Незважаючи на те, що ці ідеї виявилися ефективними для вирішення різноманітних завдань, їх застосування та розуміння залишається неповним. Ця дисертація досліджує явища скейлінгу вище верхньої критичної вимірності та заглиблюється в масштабування складних полімерних мереж.

При дослідженні скейлінгу над верхньою критичною вимірністю основна увага приділяється скінченновимірному скейлінгу з вільними граничними умовами. Звичайні методи недостатньо точні, що перешкоджає всебічному розумінню скейлінгової поведінки в різних явищах. Крім того, це дослідження стосується масштабування кополімерних мереж, зокрема в рамках моделі Поланди-Шераги, що описує термічну денатурацію ДНК. Для опису розщеплення ланцюга ДНК використовуються нові показники для кополімерних мереж. Структура дисертації наступна: чотири основні розділи (огляд літератури, комп'ютерне моделювання п'ятивимірної моделі Ізінга, аналіз Фур'є мод намагнічення та аналіз нулів Лі Янга, а також комплексне дослідження скейлінгових показників полімерних мереж), заключний розділ з ключовими висновками.

У другому розділі ми підтверджуємо запропонований скейлінг для п'ятивимірної моделі Ізінга з вільними граничними умовами при псевдокритичній температурі. Ми використали алгоритм Вольфа для моделювання $d = 5$ моделі Ізінга з вільними граничними умовами, щоб отримати скейлінгову картину таких величин, як намагнічення, ізотермічна сприйнятливість, енергія та теплоємність при нульовому магнітному полі та критичній, а також псевдокритичній температурах вище за верхню критичну вимірність $d_c = 4$. У дослідженні моделі Ізінга над верхньою критичною вимірністю за допомогою комп'ютерного моделювання, головний акцент поставлено на скінченновимірному скейлінгу. Коли розмір ґратки малий, вплив поверхні стає надто сильним, що ускладнює спостереження за очікуваними змінами при псевдокритичній температурі T_L . По суті, чим менша система, тим більше ці поверхневі ефекти перешкоджають скейлінгу, і чим вищу вимірність ми розглядаємо, тим менші розміри ґраток можна обчислити. Ми помітили, що для намагнічення виключення найменших розмірів ґратки допомогло обмежити поверхневі ефекти та точніше спостерігати за скейлінговою поведінкою. Однак, для сприйнятливості усі наші розміри ґраток доводиться вважати «малими». Це означає, що покращення розуміння скейлінгу намагнічення при нехтуванні ґратками малого розміру не застосовне універсально до всіх величин. Хоча у магнітному секторі загалом спостерігаються узгоджені результати, підтверджуючи G-скейлінг (тривіальна фіксована точка Гауса, де всі поля прийняті за нуль) при критичній температурі T_c та Q-скейлінг (спеціальний скейлінг, у якому кореляції перевищують розмір системи, і введено новий показник φ , який виправляє співвідношення гіперскейлінгу) при псевдокритичній температурі T_L для намагніченості, у енергетичному секторі скінченновимірний скейлінг не можна приписати жодному із відомих скейлінгових режимів.

У третьому розділі застосовано нові підходи, зокрема дослідження Фур'є мод намагнічення, а також аналіз нулів статистичної суми (нулів Л-Янга) в комплексній площині, що підвищують точність спостережуваного скейлінгу.

Хоча для періодичних граничних умов лише нульова мода намагнічення має внесок у скейлінг, для вільних граничних умов усі непарні моди впливають на скінченновимірний скейлінг, а всі парні моди зануляються. Ми показуємо, що Фур'є моди намагнічення повторюють поведінку намагнічення, спостережану в розділі 2, і підтверджуємо Q-скейлінг, але не покращуємо кардинально скейлінгову картину. Аналіз на основі скінченновимірного скейлінгу нулів статистичної суми в комплексній площині призводить до поведінки першого нуля Лі-Янга як функції розміру системи L : $h_1 \sim L^{-3.16 \pm 0.48}$ при T_c , що вказує на G-масштабування ($h_1 \sim L^{-3}$), а $h_1 \sim L^{-3.75}$ на T_L , що вказує на Q-скейлінг. Крім того, при дослідженні ізотермічної сприйнятливості в термінах нулів Лі-Янга з вищою точністю ліпше спостерігається скейлінгова поведінка у псевдокритичній точці T_L . Зауважимо, що цей скейлінг є набагато ближчим до Q-скейлінг, ніж до G-скейлінгу. Це вказує на те, що скейлінгова поведінка при вільних граничних умовах проявляється у спосіб, який більше узгоджується з Q-скейлінгом, ніж із попередніми суперечливими висновками в літературі, що дає цінну інформацію про динаміку цієї властивості.

У четвертому розділі ми розглянули показники скейлінгу складної кополімерної мережі, яка виникає при термічній денатурації ДНК в межах моделі Поланда-Шераги. Ми отримали нові скейлінгові співвідношення для показника замикання петлі s , який контролює порядок фазового переходу з упорядкованої до неупорядкованої фази з урахуванням можливої неоднорідності між денатурованою петлею та зв'язаними ланцюгами. У дисертації досягнуто найвищої на сьогодні точності під час обчислення показників скейлінгу для полімерних мереж, обчислення їх значень у тривимірному та двовимірному випадках, а також врахування впливу середовища та неоднорідності. Вплив можливої неоднорідності в показниках скейлінгу денатурованих ланцюгів ДНК на показник закриття петлі s проявляється через взаємодію двох факторів. З одного боку, кількість конфігурацій денатурованої петлі більша для петлі випадкових блукань (random walks, RW) і менша для блукань із самоуніканням (self-avoiding

walks, SAW). З іншого боку, кількість конфігурацій петлі обмежена бічними ланцюгами. Розрахунки, представлені в цьому розділі, дають надійний спосіб судити про значення показників c для різних умов неоднорідності, а отже і про порядок фазового переходу термічної денатурації ДНК. Наш аналіз ґрунтується на польовій теорії кополімерних мереж. Завдяки співвідношенням скейлінгу, ми зв'язуємо показники замикання петлі c зі скейлінговими показниками $\eta_{f_1 f_2}$, які визначають ентропійні властивості кополімерних зірок, створених взаємно взаємодіючими наборами f_1 SAW і f_2 RW. Використовуючи потужну техніку пересумовування, ми досліджуємо асимптотичні розклади для цих показників і оцінюємо їх при вимірності простору $d = 3$. Ми показуємо, що ефекти неоднорідності істотно впливають на силу переходу першого роду (показник c зростає в порівнянні зі звичайним однорідним випадком, коли всі ланцюги є SAW). Ми підтримуємо результати цього спостереження точними результатами для $d = 2$. Крім того, ми показуємо, що таке загострення різкості фазового переходу стає ще суттєвішим у так званому зайнятому середовищі з далекосяжними корельованими неоднорідностями.

У підсумку, це дослідження покращує наше розуміння явища скейлінгу і дає цінні висновки, які модуть бути застосовані до широкого класу наукових проблем. Результатами цієї роботи є три статті, дві з яких опубліковані, одна прийнята до друку, три препринти та одинадцять тез конференцій.

Ключові слова: скейлінг, універсальність, критичні явища, фазові переходи, модель Ізінга, модель Поланда-Шераги, критичні показники, моделювання Монте-Карло, нулі Лі-Янга, асимптотичні ряди.

ABSTRACT

Honchar Y.I.M.N. Scaling properties of phase transitions above the upper critical dimension and in the description of DNA denaturation. — Qualifying scientific work on the rights of the manuscript.

Thesis for the Degree of Doctor of Philosophy on the speciality 104 — Physics and Astronomy. — Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2023.

The thesis is devoted to the study of scaling and universality in critical phenomena that constitute foundational concepts in various scientific domains. In the theory of critical phenomena scaling hypothesis states that thermodynamic potentials are generalized homogeneous functions of their respective variables in vicinity of critical point, while universality in criticality means that the system's behaviour does not depend on the details and microscopic structure of the system. Despite their proven efficacy in diverse applications, the application and understanding of these fundamental concepts remain incomplete. In particular, this dissertation explores scaling phenomena above the upper critical dimension and delves into the scaling of complex polymer networks.

In investigating scaling above the upper critical dimension, a focus is placed on finite-size scaling for systems with free boundary conditions. Conventional methods fall short in accuracy, hindering a comprehensive understanding of phenomena in physics and beyond. Additionally, this research addresses the scaling of copolymer networks, in particular within the Polanda-Scheraga model describing the thermal denaturation of DNA. Novel exponents for copolymer networks are employed to describe DNA chain unzipping. The thesis structure encompasses four chapters: a literature review, numerical simulations of the five-dimensional Ising model, Fourier analysis of magnetization modes and Lee Yang zeros analysis, and a comprehensive examination of scaling parameters in polymer networks. The concluding chapter consolidates key findings.

In the second chapter, the study validates proposed scaling for the five-

dimensional Ising model with free boundary conditions at the pseudocritical temperature. We used Wolff algorithm to simulate $d = 5$ Ising model with free boundary conditions to get a scaling picture of the quantities like magnetisation, isothermal susceptibility, energy, and heat capacity at zero magnetic field and critical as well as pseudocritical temperatures above the upper critical dimension $d_c = 4$. In studying the Ising model above its critical dimension with numerical simulations, we focused on the finite-size scaling. When the lattice size is small, the impact of the boundaries becomes too significant, making it difficult to see the expected changes at the pseudocritical temperature T_L . Essentially, the smaller the system, the more these boundary effects overshadow the scaling picture, and the larger dimensionality we consider, the smaller lattice sizes are possible to compute. We noticed that for magnetisation, excluding the smallest lattice sizes helped to suppress the boundary effects and observe the scaling behaviour more accurately. However, for susceptibility, all our lattice sizes can only be considered "small". This means that the improvement in understanding magnetisation scaling doesn't apply universally to all properties. Though, magnetic sector, in general showed consistent results proving G-scaling (Gaussian trivial fixed point, where all fields are set to zero) at the critical temperature T_c , and Q-scaling (special scaling, where correlations exceed system size, and a new exponent ν is introduced to fix the hyperscaling) at the pseudocritical temperature T_L for magnetisation, unlike the thermal sector, where the finite-size scaling could not be fit into any of the scaling regimes.

In the third chapter, innovative approaches involving study of magnetisation Fourier modes as well as analysis of partition function zeros in complex plane enhance the accuracy of observed scaling. While for the periodic boundary conditions only the zero magnetisation mode contributes to scaling, for the free boundary conditions all odd modes collectively contribute to the FSS, and all even modes vanish. We show that the magnetisation Fourier modes repeat the behaviour of magnetisation observed in Chapter 2, and confirm Q-scaling, but do not improve the scaling picture drastically. Analysis based on the FSS of partition function zeros in complex plane results in the following behaviour of the first Lee-Yang zero as function

of system size L : $h_1 \sim L^{-3.16 \pm 0.48}$ at T_c , that hints towards G-scaling ($h_1 \sim L^{-3}$), and $h_1 \sim L^{-3.75}$ at T_L , which hints towards Q-scaling. Moreover, when examining the isothermal susceptibility in terms of Lee-Yang zeros, a scaling behavior was observed at the pseudocritical point T_L with better accuracy. Notably, this scaling is found to be much closer to Q-scaling than to G-scaling. This indicates that the scaling behaviour at FBC exhibits in a manner that is more consistent with Q-scaling than with the conflicting conclusions in the literature, providing valuable insights into the dynamics of this property.

In the fourth chapter we have considered the scaling exponents of a complex copolymer network that occurs in the thermal denaturation of DNA within the Poland Scheraga model. We have derived new scaling relations for the loop closure exponent c that controls the order of the phase transition from ordered to disordered phase with the account of possible heterogeneity between the denaturated loop and bound chains. Our analysis achieves heightened accuracy in calculating scaling exponents for polymer networks, determining their values in three-dimensional and two-dimensional cases, and considering the impact of environment and heterogeneity. Influence of possible heterogeneity in entropic scaling exponents of bound and denaturated DNA strands on the loop closure exponent c is manifest by an interplay of two factors. On the one hand, the number of configurations of a denaturated loop is influenced by the loop self-avoidance interactions (the number is larger for the RW loop and smaller of the SAW one). On the other hand, the number of loop configurations is restricted by the side chains. Calculations presented in this chapter give a reliable way to judge about the values of exponents c for different heterogeneity conditions and hence to judge about the order of DNA thermal denaturation transition. Our analysis is grounded on the field theory of co-polymer networks. By scaling relations we connect loop closure exponents c to scaling exponents η_{f_1, f_2} that govern entropic properties of co-polymer stars made by mutually interacting sets of f_1 SAWs and f_2 RWs. Using powerful resummation technique, we resum asymptotic expansions for these exponents and evaluate them at space dimension $d = 3$. As one can see, the effects of heterogeneity significantly influence the strength of the first

order transition (the exponent c increases in comparison to the usual homogeneous SAW case). We support this observation providing exact results at $d = 2$. Moreover, we show that the effect of strengthening is further enhanced by the so-called crowded environment with the long-range correlated inhomogeneities.

In summary, this research advances our understanding of scaling phenomena, providing valuable insights applicable to diverse scientific challenges. The outcomes of this work have yielded three articles, two published, one accepted for publication, three preprints and eleven conference reports.

Keywords: scaling, universality, critical phenomena, phase transitions, Ising model, Poland-Scheraga model, critical exponents, Monte-Carlo simulations, Lee-Yang zeros, asymptotic series.

PhD publications

1. *Honchar Yu., von Ferber C., Holovatch Yu.* Variety of scaling laws for DNA thermal denaturation. // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. — 2021. — Vol. 573. — P. 125917. Scopus (Q1), DOI: [10.1016/j.physa.2021.125917](https://doi.org/10.1016/j.physa.2021.125917)
2. *Holovatch Yu., von Ferber C., Honchar Yu.* DNA thermal denaturation by polymer field theory approach: effects of the environment. // *Condensed Matter Physics*. — 2021. — Vol. 24. — P. 33603. Scopus (Q3), DOI: [10.5488/CMP.24.33603](https://doi.org/10.5488/CMP.24.33603)
3. *Honchar Yu., Berche B., Holovatch Yu., Kenna R.* When correlations exceed system size: finite-size scaling in free boundary conditions above the upper critical dimension. // preprint ArXiv:. — 2023. — arXiv:2311.11721. (*to appear in Condens.Matter Phys 2024, 1*) DOI:[10.48550/arXiv.2311.11721](https://doi.org/10.48550/arXiv.2311.11721)
4. *Honchar Yu., von Ferber C., Holovatch Yu.,* Variety of scaling laws for DNA thermal denaturation. // preprint ArXiv:. — 2021. — arXiv:2103.08725. DOI:[10.48550/arXiv.2103.08725](https://doi.org/10.48550/arXiv.2103.08725)
5. *Holovatch Yu., von Ferber C., Honchar Yu.* DNA thermal denaturation by polymer field theory approach: effects of the environment.// preprint ArXiv:. — 2021. — arXiv:2107.11812. DOI:[10.48550/arXiv.2107.11812](https://doi.org/10.48550/arXiv.2107.11812)
6. *Гончар Ю.* Закони скейлінгу в термічній денатурації ДНК. *19-та Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини*. Збірка тез. с. 22. Львів, 13-14 червня 2019.
7. *Honchar Yu., von Ferber C., Holovatch Yu.* Resummation of ε -expansion for co-polymer star exponents reveals the order of the phase transition in thermal denaturation of DNA. *5-th Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications*. Book of abstracts. p. 113. Lviv, 3-6 липня 2019.
8. *Honchar Yu., von Ferber C., Holovatch Yu.* On the Order of DNA Ther-

mal Denaturation Phase Transition. *"Різдвяні дискусії 2020"*. ЛНУ ім. І.Франка. J. Phys. Stud. 24(1), p. 1998:4-5, Львів, 11-12 січня 2020.

9. Гончар Ю., Головач Ю., фон Фербер К. Ефекти середовища у термічній Денатурації ДНК. *XXI Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини*. Збірка тез. с. 23. Львів, Україна, 11-12 жовтня, 2021.
10. Honchar Yu. DNA thermal denaturation by polymer field theory approach. *46th Middle European Cooperation in Statistical Physics MECO 41*. Book of Abstracts. p. 71. Riga, Latvia, May 11-13, 2021.
11. Honchar Yu., C. Von Ferber C., Holovatch Yu. DNA thermal denaturation viewed as a phase transition: scaling laws and beyond. *Різдвяні дискусії 2022*. ЛНУ ім. І.Франка. J. Phys. Stud. 26. p. 1998-1. Львів, 11-12 січня 2022.
12. Гончар Ю. Скейлінг для моделі Ізінга на п'ятивимірній ґратці з вільними граничними умовами. *XXII Всеукраїнська Школа-семінар зі статистичної фізики і теорії конденсованої речовини*. Збірка тез. с. 21. Львів, 24-25 листопада 2022.
13. Honchar Yu., Berche B., Holovatch Yu., Kenna R. Finite-size scaling for the Ising model above the upper critical dimension. *"Різдвяні дискусії 2022/2023"*. ЛНУ ім. І.Франка. J. Phys. Stud. 27. p. 1998-3. Львів, 22-23 грудня 2022
14. Honchar Yu., Berche B., Holovatch Yu., Kenna R. Finite-size scaling for 5D Ising model with free boundary conditions. *DPG-Verhandlungen, Condensed Matter Section 2023*, MA 23.47. Dresden. March 26-31, 2023.
15. Honchar Yu., Berche B., Holovatch Yu., Kenna R. Numerical exploration of finite-size scaling above the upper critical dimension. *48th Middle European Cooperation in Statistical Physics MECO 48*. Book of Abstracts. p. 58 Stará Lesná, Slovakia. May 22-26, 2023.

16. *Гончар Ю.* Модель Ізінга над верхньою критичною вимірністю. *XXIII Всеукраїнська Школа-семінар зі статистичної фізики і теорії конденсованої речовини.* Збірка тез. с. 20. Львів, 26-27 жовтня 2023.